

В. М. Градов, И. В. Ломовской

**К ТЕОРИИ СЕЛЕКТИВНО ИЗЛУЧАЮЩИХ
РАЗЯДОВ С СИЛЬНОЙ НЕРАВНОВЕСНОСТЬЮ**

В рамках приближения многожидкостной гидродинамики предложена вычислительная модель неравновесной пространственно неоднородной плазмы разрядов в парах металлов в смеси с инертным газом с заметным различием температур легких и тяжелых частиц. Все функции распределения частиц по энергиям и состояниям считаются неравновесными и рассчитываются в ходе решения задачи. Помимо столкновительных процессов в кинетике заселения уровней энергии плазмообразующих компонентов учтено радиационное возбуждение резонансными линиями, уширенными различными механизмами. Получено хорошее согласие (в пределах 5–15 %) теории с данными экспериментов по основным излучательным и электрофизическим характеристикам разрядов в парах ртути с аргоновым буфером.

Неравновесная селективно излучающая разрядная плазма является объектом многочисленных фундаментальных и прикладных исследований из-за исключительного разнообразия протекающих в ней физических явлений, возможности их исследования с помощью бесконтактной оптической диагностики по спектру излучения, а также в силу важности различных видов новейшей техники, в которых данная плазма находит применение. Например, неравновесная плазма применяется в облучательных установках общего и специального назначения, использующих тепловое, фотобиологическое, фотоэлектрическое действия света; в фотохимических реакторах; в различном осветительном и сигнальном оборудовании; в термоэмиссионных преобразователях энергии; в установках, применяемых в разнообразных технологиях радиационного воздействия на материалы.

Вследствие сложности физических процессов в излучающей неравновесной плазме, нелинейного характера их взаимосвязи, разнообразия элементарных взаимодействий в плазменном объеме и связанных с этим трудностей при интерпретации экспериментальных данных, а также при разработке различных технических систем весьма актуальной является задача создания математических моделей плазмы, которые, с одной стороны, адекватно отражали бы физическую картину процессов, а с другой стороны, допускали бы реализацию с помощью современных вычислительных методов и средств.

В настоящей работе модель неравновесной излучающей плазмы строится в гидродинамическом приближении, т.е. плазма представляется в виде совокупности газов, которая в типичном для исследуемых

устройств варианте включает следующие компоненты: электроны, ионы, атомы (в основном состоянии и возбужденные на различные уровни энергетического спектра) и нейтральный газ-буфер. Применение данной модели оправдано, если частота столкновений частиц достаточно велика. Компоненты находятся во взаимодействии друг с другом, испытывая упругие и неупругие столкновения. Через плазму идет мощный поток энергии с трансформацией в различные ее виды.

Для анализа состояния плазмы с целью построения модели, пригодной для практического использования, выделим три энергетические подсистемы, обмен энергией между которыми формирует развитие процессов в плазме: поступательные степени свободы электронного газа, поступательные степени свободы тяжелых частиц (атомов, ионов) и уровни энергии связанных электронов в излучающих атомах. Заметим, что обмен энергией внутри первых двух подсистем происходит намного быстрее, чем обмен энергией между ними, а распределение частиц по уровням энергии определяется их взаимодействием с данными подсистемами и радиационными переходами связанных электронов. В итоге модель плазмы строится на основе описания состояния каждой из энергетических подсистем, их взаимодействия друг с другом и внешней средой. Наряду с этой структурой методологически оправданно рассматривать также иную структуру плазменной системы в связи с описанием процессов материального переноса в среде, выделяя подсистему заряженных частиц (электронов и ионов), участвующих в совместной амбиполярной диффузии, и подсистемы диффундирующих нейтральных частиц, находящихся на различных уровнях энергии, рассматриваемых в конкретной задаче.

Теоретической основой моделирования процессов в разрядной плазме в рамках многожидкостной гидродинамики служат работы [1–5]. Различные приложения теории рассмотрены в большом числе публикаций, среди которых следует отметить работы [6–10] (см. также цитированную в них литературу).

Система гидродинамических уравнений, в которых фигурируют макроскопические параметры плазмы (температуры компонентов, скорости их движения, концентрации частиц), может быть получена путем умножения системы кинетических уравнений Больцмана на величины, содержащие различные степени хаотической скорости частиц, и интегрированием затем по всему пространству скоростей. Если в качестве таких величин взять массу, импульс и кинетическую энергию частиц, то получим уравнения сохранения частиц или непрерывности, переноса импульса или движения и сохранения энергии для каждого компонента.

В настоящей работе уравнения записываются с использованием среднемассовой скорости движения плазмы, определяемой следующим образом:

$$\vec{u} = \frac{1}{\rho} \sum_a \rho_a \vec{u}_a,$$

где $\rho = \sum_a \rho_a$; ρ_a и \vec{u}_a — плотность и средняя скорость частиц a -го сорта. Диффузионные скорости частиц определяются соотношением $\vec{U}_a = \vec{u}_a - \vec{u}$, причем

$$\sum_a \rho_a \vec{U}_a = 0. \quad (1)$$

Поток частиц a -го сорта определяется выражением $\vec{J}_a = n_a \vec{U}_a$, его радиальную компоненту J_{ar} будем в дальнейшем обозначать просто J_a . Заметим, что частицы, возбужденные до какого-то определенного уровня энергии, рассматриваются в качестве отдельного a -го компонента (отдельного сорта частиц).

Уравнения непрерывности для частиц заданного сорта имеют вид

$$\frac{\partial n_a}{\partial t} + \text{div} (n_a (\vec{u} + \vec{U}_a)) = \dot{n}_a, \quad (2)$$

где \dot{n}_a — скорость образования (или распада) частиц a -го сорта в единице объема в результате неупругих столкновений с другими сортами частиц.

Уравнения переноса импульса без учета вязкости и термодиффузии имеют следующий вид:

$$m_e n_e \frac{d\vec{u}_e}{dt} = -en_e \vec{E} - \nabla p_e - m_e n_e \sum_{k \neq e} \bar{v}_{ek} (\vec{U}_e - \vec{U}_k), \quad (3)$$

$$m_i n_i \frac{d\vec{u}_i}{dt} = en_i \vec{E} - \nabla p_i - n_i \sum_{k \neq i} m_{ik} \bar{v}_{ik} (\vec{U}_i - \vec{U}_k), \quad (4)$$

$$m_n n_n \frac{d\vec{u}_n}{dt} = -\nabla p_n - n_n \sum_{k \neq n} m_{nk} \bar{v}_{nk} (\vec{U}_n - \vec{U}_k); \quad (5)$$

здесь m_j — масса частицы j -го сорта; m_{jk} — приведенная масса частиц j -го и k -го сортов; n_j — объемная концентрация частиц j -го сорта; e — заряд электрона; \vec{E} — напряженность электрического поля; p_j — парциальное давление j -го компонента; \bar{v}_{ik} — средняя частота упругих столкновений частиц j -го и k -го сортов с передачей импульса; индексы e, i, n обозначают электроны, ионы и нейтральные частицы, возбужденные до n -го уровня энергии.

Субстанциональная (лагранжева) производная имеет вид

$$\frac{d}{dt} \equiv \frac{\partial}{\partial t} + \vec{u} \nabla.$$

Сложив уравнения (3), (4) и опуская инерционные члены, получим выражение для радиального потока амбиполярной диффузии заряженных частиц к непроводящим стенкам оболочки, стабилизирующей разряд. При этом необходимо учесть, что плазма электронейтральна и значения потоков электронов и ионов к стенке равны. Пренебрежение инерционными членами в левой части уравнений (3), (4) оправданно для электронов с их малой массой и возможно для тяжелых частиц, если характерное время существования плазмы намного больше величины, обратной частоте столкновений рассматриваемого сорта частиц с другими частицами.

Частоты упругих столкновений частиц с передачей импульса, входящие в вышеприведенные и другие соотношения, определяются по формулам, соответствующим первому приближению Чепмена–Энскога [3]:

$$\bar{v}_{jk} = n_k \bar{w}_{jk} \bar{Q}_{jk}, \quad \bar{w}_{jk} = \sqrt{\frac{8kT_j}{\pi m_{jk}}},$$

$$\bar{Q}_{jk} = \frac{2}{3} \int_0^{\infty} x^2 \exp(-x) Q_{jk}^{(1)} \left(\sqrt{\frac{2kT_j}{m_{jk}}} x \right) dx,$$

где k — постоянная Больцмана; T_j — температура j -го компонента; под знаком интеграла стоит транспортное сечение рассеяния в функции относительной скорости сталкивающихся частиц.

При записи уравнений энергии для легких и тяжелых частиц под температурой понимается величина, после умножения которой на константу Больцмана получаем две трети кинетической энергии хаотического движения частиц. Для электронного газа уравнение энергии с учетом потерь, связанных с возбуждением тяжелых частиц и излучением, можно представить согласно работе [3] в виде

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \left(n_e \frac{3}{2} k T_e \right) + n_e \frac{5}{2} k T_e \operatorname{div} \vec{u} = & -\operatorname{div} \vec{q}_e + \sigma E^2 - \\ & - n_e \sum_k \frac{3}{2} k (T_e - T_h) \cdot 2 \frac{m_e}{m_k} \nu_{ek} - \dot{W} - \operatorname{div} \vec{F}_i, \end{aligned} \quad (6)$$

где

$$\vec{q}_e = \vec{F}_e + \frac{5}{2} k T_e n_e \vec{U}_e, \quad \vec{F}_e = -\lambda_e \nabla T_e, \quad (7)$$

T_e и T_h — температуры электронов и тяжелых компонент; \dot{W} — скорость накопления внутренней энергии тяжелыми частицами, возбуждаемыми в ходе неупругих столкновений с электронами; \vec{F}_n — плотность интегрального по спектру потока излучения; σ и λ_e — коэффициенты электропроводности и электронной теплопроводности.

Величина \dot{W} выражается через скорости заселения уровней, фигурирующие в правой части уравнения (2). С учетом затрат энергии на ионизацию для случая, когда в плазме присутствует один вид излучающих атомов и один вид соответствующих ионов, имеем

$$\dot{W} = \sum_m E_m \dot{n}_m + I \dot{n}_i, \quad (8)$$

где E_m — энергия m -го уровня частицы; I — потенциал ионизации частиц.

С помощью уравнения (2) для электронной компоненты можно представить уравнение (6) в виде

$$\begin{aligned} & \frac{d}{dt} \left(n_e \left(\frac{3}{2} k T_e + I \right) \right) + n_e \left(\frac{5}{2} k T_e + I \right) \operatorname{div} \vec{u} = \\ & = -\operatorname{div} \left(\vec{F}_e + \left(\frac{5}{2} k T_e + I \right) n_e \vec{U}_e \right) + \\ & + \sigma E^2 - n_e \sum_j \frac{3}{2} k (T_e - T_h) \cdot 2 \frac{m_e}{m_j} \nu_{ej} - \sum_m E_m \dot{n}_m - \operatorname{div} \vec{F}_n. \quad (9) \end{aligned}$$

Уравнение энергии для тяжелых частиц имеет вид

$$\frac{d}{dt} \left(n_h \frac{3}{2} k T_h \right) + n_h \frac{5}{2} k T_h \operatorname{div} \vec{u} = -\operatorname{div} \vec{F}_h + n_e \sum_j \frac{3}{2} k (T_e - T_h) \cdot 2 \frac{m_e}{m_j} \nu_{ej}; \quad (10)$$

здесь $n_h = \sum_l n_l$ — суммарная концентрация всех тяжелых частиц. Выражение для потока тепла \vec{F}_h аналогично выражению (7) с заменой индекса e на h .

Для вычисления скоростей образования или гибели частиц, фигурирующих в правой части уравнения (2), необходимо располагать моделью кинетики заселения возбужденных уровней энергии излучающего компонента. Вопрос создания такой модели применительно к разным задачам исследовался многими авторами (см. работы [5, 7, 11] и цитированную в них литературу). При этом наиболее разработана модель ударно-излучательной ионизации и рекомбинации. В одних работах проводится непосредственное численное решение системы уравнений кинетики, в других движение электронов по связанным состо-

аниям рассматривается как диффузия в пространстве энергии. В задачах моделирования селективно излучающей плазмы, когда необходимо рассматривать лучистый перенос в отдельных спектральных линиях, необходимо располагать подробной информацией о заселенностях участвующих в излучении уровней и других уровней, влияющих на этот процесс. Поэтому в настоящей работе строится модель кинетики населенностей на основе индивидуального учета отдельных низко расположенных уровней, для которых проводится детальное рассмотрение процессов заселения и опустошения с реальными сечениями неупругих процессов и с учетом воздействия излучения. В то же время, большое число уровней, примыкающих к континууму, рассматриваются как квазинепрерывный спектр и объединяются в блок со свободными электронами [5, 7]. Согласно работе [7] положение границы ε_{KB} квазинепрерывного спектра, отсчитываемой от континуума, удовлетворяет условию

$$\varepsilon_{\text{KB}} \ll Ry^{1/3}(kT_e)^{2/3}. \quad (11)$$

Например, при $T_e \approx 1$ эВ имеем $\varepsilon_{\text{KB}} \ll 2,5$ эВ.

При расчете скоростей процессов возбуждения и ионизации из-за столкновений частиц со свободными электронами необходимо вычислять интеграл свертки сечений неупругих процессов и функции распределения электронов по скоростям. Эта функция в области высоких энергий может заметно отличаться от максвелловских функций, и для замыкания модели требуется использовать в той или иной форме уравнение Больцмана.

В состав системы уравнений модели необходимо включить уравнения, описывающие радиационные процессы, которые определяют дивергенцию лучистого потока в уравнении энергии для электронов и заселение уровней в уравнениях кинетики.

Лучистый перенос в плазме описывается на основе уравнения переноса, которое формируется для спектральной интенсивности излучения $I_\nu(\vec{r}, \vec{s})$, где \vec{r} — радиус-вектор точки пространства, \vec{s} — выбранное направление в пространстве. В лучеиспускании селективно излучающей плазмы значительная роль принадлежит спектральным линиям, которые уширены различными механизмами (штарковским — электронами и ионами, резонансным, вандерваальсовским, доплеровским), причем в различных точках неоднородного плазменного объема вклад различных механизмов в уширение линий изменяется. Перенос линейчатой составляющей излучения часто происходит на непрерывном фоне, обусловленном эффектами фоторекомбинации электронов и ионов и тормозными процессами в полях нейтральных частиц и ионов. В случае цилиндрической конфигурации плазменного объема излучение не-

изотропно. Согласно работам [11, 12] уравнение переноса излучения в неравновесных условиях можно представить в виде

$$\frac{dI_\nu(\vec{r}, \vec{s})}{ds} = j_\nu(\vec{r}) - k'_\nu(\vec{r})I_\nu(\vec{r}, \vec{s}), \quad (12)$$

где $k'_\nu(\vec{r})$ — суммарный коэффициент поглощения плазмы на частоте ν , исправленный с учетом вынужденного излучения; $j_\nu(\vec{r})$ — коэффициент собственного излучения среды.

Из уравнения (12) в результате интегрирования по всем направлениям (телесному углу) следует уравнение сохранения энергии излучения

$$\operatorname{div} \vec{F}_\nu = 4\pi j_\nu(\vec{r}) - ck'_\nu(\vec{r})U_\nu, \quad (13)$$

где

$$U_\nu = \frac{1}{c} \int_{4\pi} I_\nu d\Omega$$

— спектральная объемная плотность энергии излучения; \vec{F}_ν — спектральная плотность потока излучения; $d\Omega$ — элементарный телесный угол; c — скорость света.

Коэффициент излучения плазмы может быть представлен в виде $j_\nu(\vec{r}) = j_{\nu L}(\vec{r}) + j_{\nu C}(\vec{r})$, где $j_{\nu L}(\vec{r})$ — коэффициент излучения в линиях, $j_{\nu C}(\vec{r})$ — коэффициент излучения в фоторекомбинационном континууме.

Выражения для коэффициентов излучения в линиях и фоторекомбинационном континууме имеют вид

$$j_{\nu L}(\vec{r}) = \sum_k \sum_i j_{\nu Lki}(\vec{r}), \quad j_{\nu C}(\vec{r}) = \sum_k \sum_n j_{\nu Ckn}(\vec{r}),$$

где

$$j_{\nu Lki}(\vec{r}) = \frac{1}{4\pi} n_{1ki}(\vec{r}) A_{10} h\nu_{0i} p_i(\nu, \vec{r}),$$

$n_{1ki}(\vec{r})$ — заселенность верхнего уровня i -й линии k -го компонента; A_{10} — вероятность спонтанного перехода с верхнего 1-го на нижний 0-й уровень i -й линии; h — постоянная Планка; ν_{0i} — частота центра линии; $p_i(\nu, \vec{r})$ — функция, описывающая контур уширенной i -й линии; индекс n соответствует уровням энергии.

Суммарный коэффициент поглощения плазмы на частоте ν определяется аналогичным суммированием по линиям и непрерывному спектру, уровням энергии и компонентам плазмы $k'_\nu(\vec{r}) = k'_{\nu L}(\vec{r}) + k'_{\nu C}(\vec{r})$.

Для коэффициента поглощения в линии справедливо выражение

$$k'_{\nu Lki}(\vec{r}) = \frac{h\nu_{0i}}{c} n_{1ki} \frac{g_2}{g_1} A_{21} \frac{c^3}{8\pi h\nu_{0i}^3} \left(1 - \frac{n_{2ki} g_1}{n_{1ki} g_2} \right) p_i(\nu, \vec{r}),$$

где g_2 и g_1 — статистические веса верхнего и нижнего уровней; n_{1ki} и n_{2ki} — заселенности нижнего и верхнего уровней i -й линии k -го компонента.

Учет переноса излучения в случае реальных спектров приводит к ряду вычислительных трудностей, возрастающих при расчетах неплоских конфигураций плазменного объема (например, цилиндрических). Эти трудности связаны с тем, что при моделировании процессов в плазме требуется проводить интегрирование уравнения переноса и по пространству (углам) [12, 13], и по частоте [13–15].

В настоящей работе проблема интегрирования по углам уравнения переноса излучения решается двумя методами: на основе прямого интегрирования точного уравнения (12) для случая цилиндрической геометрии, что сопровождается необходимостью рассматривать задачу переноса излучения в трехмерном варианте, и в диффузионном приближении (приближение P_1 метода сферических гармоник).

В методе прямого интегрирования интенсивность излучения в каждой радиальной точке разрядного объема зависит от сферических угловых координат ψ и φ и определяется по формуле

$$I_\nu(r, \psi, \varphi) = I_\nu^-(R, \psi, \varphi) \exp\left(-\int_0^{l(r, \psi, \varphi)} k'_\nu(s) ds\right) + \int_0^{l(r, \psi, \varphi)} j_\nu(s) \exp\left(-\int_s^{l(R, \psi, \varphi)} k'_\nu(s') ds'\right) ds, \quad (14)$$

где $I_\nu^-(R, \psi, \varphi)$ — интенсивность внешнего излучения на границе плазменного объема, которое поступает внутрь в направлении, определяемом углами ψ, φ ; $l(r, \psi, \varphi)$ — длина луча от поверхности цилиндра до точки с радиальной координатой r в направлении, определяемом углами ψ, φ ; s, s' — координаты точек вдоль луча.

С помощью формулы (14) рассчитываются спектральные радиальный поток и объемная плотность излучения в каждой точке радиуса. С учетом азимутальной и аксиальной однородности разряда имеем

$$F_\nu(r) = 4 \int_0^{\pi/2} \int_0^{\pi/2} I_\nu(r, \psi, \varphi) \sin^2(\psi) \cos(\varphi) d\psi d\varphi, \quad (15)$$

$$U_\nu(r) = \frac{4}{c} \int_0^\pi \int_0^{\pi/2} I_\nu(r, \psi, \varphi) \sin(\psi) d\psi d\varphi. \quad (16)$$

Система уравнений лучистого переноса в диффузионном приближении включает в себя уравнение (13) и уравнение для плотности потока, которое в общем случае записывается в виде [11]

$$F_\nu = -\frac{c_\nu}{3k'_\nu} \frac{dU_\nu}{dr}. \quad (17)$$

Граничные условия для модели (13), (17) имеют вид

$$r = 0, \quad \frac{dU_\nu}{dr} = 0, \quad r = R, \quad U_\nu = -\frac{A}{k'_\nu} \frac{1 + \rho_\nu}{1 - \rho_\nu} \frac{dU_\nu}{dr}, \quad (18)$$

где ρ_ν — спектральный коэффициент диффузного отражения на границе плазма–оболочка; A — константа, оптимизация которой позволяет повысить точность диффузионного приближения.

Диффузионное приближение позволяет получить точное решение в предельных случаях малых и больших значений коэффициентов поглощения. В промежуточной области оптических плотностей необходимо оптимизировать граничное условие (18) [16]. Прямое сопоставление результатов, полученных в диффузионном приближении, с результатами расчетов, полученных в рамках точного метода, показывает, что погрешность вычисления лучистых потоков при заданных параметрах плазмы в диффузионном приближении составляет около 15–20 %. Если же параметры плазмы рассчитывать, используя данное приближение или точный метод, то погрешность определения электрических, излучательных и теплофизических характеристик плазмы не превышает 7–12 %.

Для получения интегральных по спектру характеристик излучения в настоящей работе применяется прямое интегрирование по частоте, причем коэффициент поглощения плазмы представляется кусочно постоянной функцией частоты, и интегрирование по спектру заменяется простым суммированием по спектральным интервалам.

Еще одна проблема, возникающая в практике моделирования радиационных процессов в плазме, связана с информационной поддержкой вычислительных экспериментов. Для их проведения необходимы данные о спектральных коэффициентах поглощения плазмы в представляющем интерес диапазоне спектра, однако информация об этих характеристиках крайне ограничена. В неравновесной плазме эта проблема усложняется тем, что заранее табулировать коэффициент поглощения не удастся, так как он зависит от многих параметров (концентрации электронов и излучающих частиц на отдельных уровнях энергии, температур легкого и тяжелого компонентов), которые определяются в ходе вычислений, и заранее их комбинация неизвестна. Для решения указанной проблемы в настоящей работе используются соответствующие методы расчета и программное обеспечение [17, 18].

При моделировании кинетики заселения уровней энергии возникает задача расчета пленения излучения в линиях с большим коэффициентом поглощения — задача излучательного или радиационного переноса возбуждения. Эти линии имеют, как правило, в качестве нижнего уровня перехода основной уровень (в большинстве случаев это резонансные линии). Роль эффекта пленения в заселении верхних уровней таких линий чрезвычайно велика. Обычно в сколь-нибудь сложных моделях разрядов используется весьма приближенное описание данного эффекта, основанное на том, что реальное пространственное распределение вероятности вылета фотона за пределы плазменного объема заменяется вероятностью вылета последнего с оси цилиндра $\theta(0)$, причем указанная величина рассчитывается на основе уравнения Бибермана–Холстейна для модели однородной плазмы [5, 19, 20]. Такой подход для решения рассматриваемых задач оказывается излишне упрощенным.

Строгое описание процессов возбуждения частиц при воздействии радиационных полей возможно на основе квантовой механики [21] и оказывается достаточно сложным для задач численного моделирования. В строгой квантово-механической постановке решены только отдельные задачи, например, в работе [22]. Вместе с тем, имеющиеся теоретические и экспериментальные данные [5, 23] показывают, что решение задачи об излучательном переносе возбуждения возможно в рамках более простого феноменологического описания процесса, предложенного в работах [5, 20]. В этих работах для определения концентрации возбужденных атомов в рамках двухуровневой модели частиц и при заданных источниках возбуждения получено кинетическое уравнение интегрального типа. Это уравнение неоднократно использовалось в исследованиях большого числа физических проблем [5, 23], при этом применялись различные численные и аналитические методы его решения в разнообразных постановках. Однако самым популярным методом решения остается метод эффективного времени жизни, предложенный в работе [20] и развитый в последующих публикациях разных авторов [5, 23]. Хотя метод не имеет строгого обоснования, он демонстрирует неплохое совпадение с более строгими подходами [5]. Согласно данному методу влияние радиационного поля на заселение уровня в данной радиальной точке r сводится к уменьшению вероятности его спонтанного распада A_{10} (цифры в индексе обозначают верхний и нижний уровни линии), которая в условиях плазмы имеет вид $A_{10}^*(r) = A_{10}\theta(r)$, где $\theta(r)$ — вероятность вылета фотона из данной точки за пределы плазменного объема.

Наиболее просто величина θ определяется в центре цилиндрического плазменного объема при постоянном по объему коэффициенте

поглощения плазмы в рассматриваемой линии [5]. В работе [23] в приближении однородного распределения коэффициента поглощения получены радиальные зависимости параметра $\theta(r)$, выраженные через гипергеометрические функции.

При моделировании реальных плазменных систем задача переноса радиационного возбуждения частиц формулируется следующим образом. В общем случае стационарное уравнение неразрывности для частиц, находящихся на верхнем 1-м уровне линии, образованной переходом на основной 0-й уровень атома, представляется в виде

$$\frac{1}{r} \frac{d}{dr} \left(r D_1 \frac{dn_1(r)}{dr} \right) + \sum_{i \neq 1} n_i(r) (w_{i1}(r) + A_{i1}) - n_1(r) \left(\sum_j w_{1j}(r) + A_{10} \right) + \frac{c}{h\nu_{10}} \int_{\Delta\nu} k'_\nu(r) U_\nu(r) d\nu = 0, \quad (19)$$

где $n_i(r)$ — концентрация частиц на i -м уровне в точке с радиальной координатой r ; D_1 — коэффициент диффузии атомов; $w_{ik}(r)$ — вероятность перехода между i -м и k -м уровнями за счет столкновений с частицами; $k'_\nu(r)$ — коэффициент поглощения на частоте ν в пределах рассматриваемой линии в точке r ; $\Delta\nu$ — спектральная область линии.

Входящая в уравнение (19) объемная плотность энергии излучения вычисляется согласно формулам (14), (16):

$$U_\nu(r) = \frac{h\nu_{10} A_{10}}{\pi c} \times \int_0^\pi \int_0^{\pi/2} \sin \theta \int_0^{l(r,\psi,\varphi)} n_1(s) p_{10}(\nu, s) \exp\left(-\int_s^{l(r,\psi,\varphi)} k'_\nu(s') ds'\right) ds d\psi d\varphi, \quad (20)$$

где $p_{10}(\nu, s)$ — функция, описывающая контур уширенной линии, образованной переходами между 1-м и 0-м уровнями.

Уравнение (19) является интегро-дифференциальным уравнением, которое решается численными методами. Заметим, что во многих случаях можно пренебречь вынужденным излучением, тогда коэффициент поглощения не будет зависеть от населенности верхнего уровня линии n_1 и уравнение (19) будет линейным. Дальнейшее упрощение связано с допущением об однородном распределении коэффициента поглощения по объему. Однако даже в такой постановке задача расчета пленения излучения оказывается достаточно сложной, и при оптимизации устройств требуются значительные ресурсы вычислительной техники.

Наиболее подходящим методом решения этой задачи является рассмотренное приближение эффективного времени жизни, согласно которому полагается, что функция $n_1(s)$ в формуле (20) — медленно изменяющаяся в пространстве функция и ее можно вынести из-под знака интегрирования. В этом случае величина A_{10} заменяется величиной $A_{10}^* = A_{10}\theta$, где параметр θ определяется выражением

$$\theta(r) = 1 - \frac{1}{\pi} \int_{\Delta\nu} k'_\nu(r) d\nu \times \int_0^\pi \int_0^{\pi/2} \sin \psi \int_0^{l(r,\psi,\varphi)} p_{10}(\nu, s) \exp\left(-\int_s^{l(r,\psi,\varphi)} k'_\nu(s') ds'\right) ds d\psi d\varphi. \quad (21)$$

В такой постановке задача упрощается, но ее решение остается все еще громоздким.

Дальнейшие упрощения возможны, если при расчете эффектов пленения излучения учитывать диффузионное приближение (13), (17). При этом будем исходить из следующего. Слагаемое в уравнении (19), описывающее заселение 1-го уровня вследствие поглощения излучения в линии на переходе с 0-го уровня на 1-й, обозначим

$$S_{01} = \frac{c}{h\nu_{10}} \int_{\Delta\nu} k'_\nu(r) U_\nu(r) d\nu. \quad (22)$$

Обозначим также

$$n_1(r)A_{10} = \frac{4\pi}{h\nu_{10}} \int_{\Delta\nu} j_\nu(r) d\nu.$$

Получим

$$n_1(r)A_{10} - S_{01} = \frac{1}{h\nu_{10}} \int_{\Delta\nu} (4\pi j_\nu(r) - ck'_\nu(r)U_\nu(r)) d\nu.$$

Согласно уравнению (13) подынтегральной функцией является $\text{div}F_\nu$, для расчета которой будем использовать диффузионное приближение. Оставаясь в рамках метода эффективного времени жизни, учтем, что величина $A_{10}\theta$ представляет собой дивергенцию потока излучения, рассчитанную на один атом, находящийся на 1-м уровне. В итоге уравнения для радиального распределения $\theta(r)$ имеют следующий вид:

$$\frac{c}{3r} \frac{d}{dr} \left(r \frac{1}{k'_\nu(r)} \frac{dU_\nu}{dr} \right) + 4\pi j_\nu - ck'_\nu(r)U_\nu(r) = 0, \quad (23)$$

$$\theta(r) = \int_{\Delta\nu} (4\pi j_\nu - ck'_\nu(r)U_\nu(r))d\nu, \quad (24)$$

где

$$j_\nu = \frac{1}{4\pi}p_{10}(\nu, r).$$

В наиболее простом варианте однородного распределения коэффициента поглощения по радиусу (постоянства по пространству концентрации частиц на нижнем уровне линии и неизменности контура линии) уравнение (23) допускает аналитическое решение

$$U_\nu(r) = \frac{4\pi j_\nu}{ck'_\nu} \left(1 - \frac{m}{\frac{1}{\sqrt{3}}I_1(x_{1\nu}) + mI_0(x_{1\nu})} I_0(x_\nu) \right);$$

здесь

$$x_\nu = \sqrt{3}k'_\nu r, \quad x_{1\nu} = \sqrt{3}k'_\nu R; \quad m = \frac{1 - \rho_\nu}{3A(1 + \rho_\nu)};$$

A — введенная выше константа; I_0 и I_1 — функции Бесселя нулевого и первого порядков соответственно.

Тогда расчет параметра θ проводится интегрированием по частоте в пределах линии:

$$\theta = \int_{\Delta\nu} p_{10}(\nu) \left(\frac{m}{\frac{1}{\sqrt{3}}I_1(x_{1\nu}) + mI_0(x_{1\nu})} I_0(x_\nu) \right) d\nu. \quad (25)$$

В случае перекрывающихся линий, а также наложения линии на непрерывный фон величина $p_{10}(\nu, r)$ в выражениях (19)–(23) по-прежнему является функцией, описывающей профиль линии, верхним уровнем которой является рассматриваемый 1-й уровень. Коэффициент же поглощения должен определяться суммированием по всем перекрывающимся линиям и всем процессам, формирующим непрерывный спектр, т.е. коэффициент k'_ν необходимо заменить коэффициентом

$$k'_{\nu\Sigma} = \sum_i k'_{\nu Li} + k'_{\nu C},$$

где $k'_{\nu Li}$ — коэффициент поглощения в i -й линии, $k'_{\nu C}$ — суммарный коэффициент поглощения в континууме. Соответственно изменяется уравнение (23):

$$\frac{c}{3r} \frac{d}{dr} \left(r \frac{1}{k'_{\nu\Sigma}(r)} \frac{dU_\nu}{dr} \right) + 4\pi j_\nu - ck'_\nu(r)U_\nu(r) = 0,$$

а выражение (25) принимает вид

$$\theta = \int_{\Delta\nu} p_{10}(\nu) \left(\frac{m}{I_1(x_{1\nu}) \sqrt{\frac{k'_\nu}{3k'_{\nu\Sigma}} + m} I_0(x_\nu)} \right) d\nu,$$

где

$$x_\nu = \sqrt{3 \frac{k'_\nu}{k'_{\nu\Sigma}} k'_{\nu\Sigma} r}, \quad x_{1\nu} = \sqrt{3 \frac{k'_\nu}{k'_{\nu\Sigma}} k'_{\nu\Sigma} R}.$$

Некоторые результаты расчета параметра θ на оси цилиндра в зависимости от безразмерной радиальной координаты $z = r/R$, полученные прямым интегрированием согласно выражению (21) и в диффузионном приближении (23), (24), в сравнении с данными работ [5, 23–25] представлены на рис. 1, 2. Данные получены при постоянном по радиусу коэффициенте поглощения, чтобы можно было провести сопоставление с данными указанных работ. Прежде всего, отметим, что значения параметра θ , найденные прямым интегрированием и в диффузионном приближении, хорошо согласуются между собой и с результатами указанных работ. Видно, что параметр θ сильно уменьшается с возрастанием коэффициента поглощения. Расхождение полученных данных с данными работ [5, 23, 24] при малой оптической плотности (см. рис. 1)

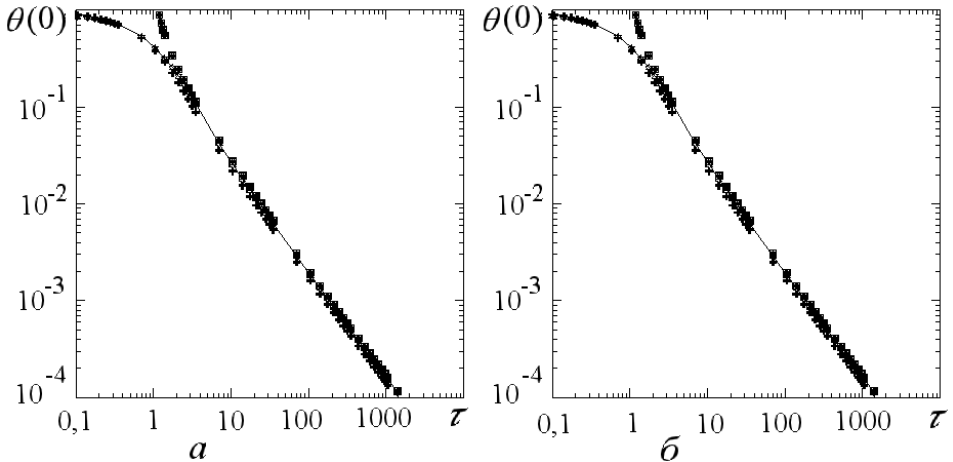


Рис. 1. Зависимость вероятности вылета фотона на оси цилиндра от оптической плотности плазмы при радиусе цилиндра $R = 0,35$ см:

a — доплеровский контур линии, b — лоренцевский контур линии; — — расчет прямым интегрированием по формуле (21); + — расчет в рамках диффузионного приближения (23), (24); \diamond — данные работы [5]; \square — данные работы [23]; \bullet — данные работы [24]; \star — данные работы [25]

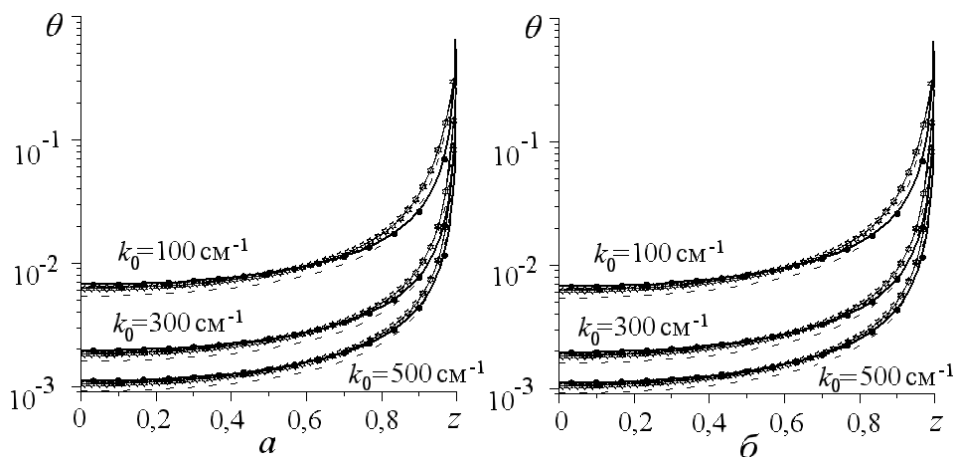


Рис. 2. Зависимость вероятности вылета фотона от радиальной координаты цилиндрического объема при радиусе цилиндра $R = 0,35$ см:

a — доплеровский контур линии, b — лоренцевский контур линии; — — — — расчет прямым интегрированием по формуле (21); — — — — данные работы [23]; - - - - расчет в рамках диффузионного приближения (23), (24); ● — данные работы [24]; ★ — данные работы [25] (k_0 — коэффициент поглощения в центре линии)

связано с тем, что результаты этих работ справедливы только для больших оптических плотностей плазмы. Отличие полученных данных от результатов работы [23] (см. рис. 2) увеличивается по направлению к стенке при $z > 0,6 \dots 0,7$, а затем при $z \rightarrow 1$ значения параметра θ согласно работе [23] пересекают полученную кривую, устремляясь к бесконечности. Такой вид кривых сохраняется как при малых, так и при больших коэффициентах поглощения в центре линии.

Приведенная математическая модель неравновесных разрядов используется далее для расчетов ртутных стационарных разрядов низкого давления с аргоновым буфером (давление излучающего компонента составляет 0,1–10 Па, давление аргона — до 1,5 кПа), плазма которых находится в сильно неравновесном состоянии. Разряды низкого давления в парах ртути исследуются во многих работах, начиная с 30-х годов XX века. Такой интерес объясняется многообразием физических явлений, протекающих в плазме данных разрядов, а также очень высоким КПД излучения в ультрафиолетовой области спектра, делающим такие разряды незаменимыми для ряда важнейших применений, среди которых достаточно назвать ртутные люминесцентные лампы для освещения. Эти лампы являются на сегодняшний день самым массовым разрядным источником света. Кроме того, в промышленности, медицине, сельском хозяйстве, биологии и многих других отраслях целый ряд технологий построен на использовании бактерицидного, фотохимического и других действий ультрафиолетового излучения, которое эффективно генерирует ртутная плазма низкого давления [26].

Библиография по физике данных разрядов весьма обширна. Достаточно подробный список публикаций приведен в работах [26–29]. Подавляющее большинство работ содержит экспериментальные результаты, хотя существует целый ряд моделей, обеспечивающих количественное совпадение с практикой. Теоретическое описание разрядов проводится при принятии ряда допущений, основные из которых связаны с упрощенным рассмотрением радиационных процессов (приближением эффективного времени жизни с однородным распределением коэффициента поглощения по радиусу и значением вероятности θ вылета фотона, взятой для оси разряда), заданием формы радиального распределения концентрации электронов или вообще усреднением параметров разряда по радиусу (концентраций частиц, температур электронов и тяжелых частиц), упрощением схемы переходов между уровнями атомов, пренебрежением рекомбинацией заряженных частиц в объеме, введением различных упрощающих аппроксимаций для сечений упругих и неупругих столкновений частиц, весьма схематичным рассмотрением деталей процессов, связанных с изотопным составом ртути, пренебрежением упругими столкновениями электронов с атомами ртути.

В настоящей работе приводится вычислительная модель, свободная от большинства указанных упрощений. При ее формировании учитывается, что в разряде преобладает буферный газ (аргон) и давление этого газа постоянно по радиусу, тогда при постоянстве общего давления в разряде сумма давлений заряженных и нейтральных частиц паров ртути является не зависящей от радиуса. Модель формируется для случая одномерной цилиндрической геометрии с азимутальной симметрией и аксиальной однородностью. При этом в уравнениях движения (3)–(5) пренебрегаем слагаемыми, содержащими сомножители m_e , m_{ne} . Плазма квазинейтральна, т.е. $n_e = n_i$. Учтем также, что справедливы соотношения

$$m_{kn} = m_{nk} = \frac{m_h}{2}, \quad \bar{w}_{kn} = \bar{w}_{nk} = \bar{w}_h, \quad k \neq b, \quad k \neq e,$$

где индекс b обозначает буферный газ, m_h — масса атома активной компоненты, \bar{w}_h — средняя скорость излучающих частиц и ионов относительно друг друга.

В соответствии с уравнением (2) непрерывности для буферного газа, в котором $\dot{n}_b = 0$, имеем $J_{br} = J_b = 0$, а из условия отсутствия радиального электрического тока к непроводящей стенке, стабилизирующей разряд, получаем, что равны радиальные проекции потоков электронов и ионов, т.е. $J_e = J_i$. Примем необходимое в практиче-

ских расчетах допущение о равенстве всех сечений упругого столкновения ионов с атомами активного компонента, находящихся на разных уровнях энергии $\bar{Q}_{in} = \bar{Q}_{ih}$ для всех n . В модели учитывается отдельно каждый уровень энергии для атомов ртути: $6s^2^1S_0$, $6p^3P_{0,1,2}$, $6p^1P_1$, а также блок возбужденных состояний, в который включаются все уровни, расположенные выше названных.

Перенос излучения рассматривается в двух оптически плотных резонансных линиях из синглетной и триплетной систем термов $\lambda_1 = 253,652$ нм (переход с уровня $6p^3P_1$ на уровень $6s^2^1S_0$) и $\lambda_2 = 184,957$ нм (переход с уровня $6p^1P_1$ на уровень $6s^2^1S_0$). Все остальные линии считаются оптически тонкими и учитываются в приближении объемного высвечивания. Существенная особенность ртутной плазмы состоит в том, что ее спектр сильно усложнен наличием в составе природной ртути семи изотопов (пяти с четными атомными массами 196, 198, 200, 202, 204 и двух с нечетными — 199, 201). Изотопы с четными атомными массами имеют квантовое число ядра $I = 0$, поэтому у них нет сверхтонкого расщепления уровней (результатирующее квантовое число F атома совпадает с квантовым числом J полного момента электронной оболочки), но линии разных изотопов сдвинуты по частоте относительно друг друга. Ядра изотопов с нечетными атомными массами характеризуются квантовыми числами $I = 1/2$ для Hg^{199} и $I = 3/2$ для Hg^{201} . В итоге уровни этих изотопов испытывают сверхтонкое расщепление, а линии, соответственно, состоят из отдельных сверхтонких компонент. Наиболее важная для люминесцентных и бактерицидных ламп линия $\lambda_1 = 253,652$ нм состоит из двух компонент для изотопа Hg^{199} и трех — для Hg^{201} . Таким образом, к пяти нерасщепленным линиям изотопов с четными атомными массами на средней длине волны λ_1 около 253,652 нм добавляется пять компонент сверхтонкой структуры изотопов с нечетными атомными массами.

При рассмотрении радиационных процессов изотопы с позиций решаемой задачи моделирования мало отличаются друг от друга по характеристикам столкновительных взаимодействий, но, в то же время, в той или иной степени оказываются связанными единым радиационным полем, создаваемым отдельными линиями. В итоге в ходе построения модели разряда в первом приближении все атомы ртути удобно рассматривать не по принадлежности их к конкретному виду изотопов, а исходя из сверхтонкой структуры их уровней энергии, определяющих положение в спектре генерируемых линий. Тогда моделирование спектральных характеристик плазмы можно несколько упростить, если учесть эффект перекрытия линий, для чего необходимо проанализировать положение всех линий относительно друг друга в сравнении с ха-

раактерными значениями их ширин в плазме разрядов [27]. В результате выясняется, что линия изотопа Hg^{201} с верхним уровнем, имеющим квантовое число результирующего момента $F = 5/2$, и линия изотопа Hg^{199} с верхним уровнем, имеющим квантовое число результирующего момента $F = 1/2$, могут быть объединены в одну линию с линией изотопа Hg^{204} ; линия изотопа Hg^{201} с верхним уровнем, имеющим квантовое число результирующего момента $F = 3/2$, может быть объединена с линией Hg^{198} ; также объединяются линии изотопов Hg^{201} и Hg^{199} с верхними уровнями, имеющими квантовые числа результирующего момента $F = 1/2$ и $F = 3/2$ соответственно. Принимая концентрации изотопов на уровнях сверхтонкой структуры пропорциональными их статистическим весам, можно получить пятикомпонентную смесь изотопов с разнесенными неперекрывающимися линиями.

Уравнения модели, включающие уравнения энергии для электронов и тяжелых частиц, непрерывности для заряженных частиц и для возбужденных атомов ртути, а также ряд замыкающих соотношений в варианте, удобном для дальнейшей обработки в соответствии с процедурой интегро-интерполяционного метода при получении разностных схем, имеют следующий вид:

$$-\frac{1}{Rz} \frac{d}{dz} (zF_e) - \frac{1}{Rz} \frac{d}{dz} z \left(\left(\frac{5}{2} kT_e + I \right) J_e \right) + \sigma E^2 - n_e \sum_j \frac{3}{2} k(T_e - T) 2 \frac{m_e}{m_j} \nu_{ej} - \sum_m E_m \dot{n}_m - \text{div} \vec{F}_n = 0, \quad (26)$$

$$\vec{F}_e = -\frac{\lambda_e}{R} \frac{dT_e}{dz}, \quad (27)$$

$$-\frac{1}{Rz} \frac{d}{dz} (zF_h) + n_e \sum_j \frac{3}{2} k(T_e - T) \cdot 2 \frac{m_e}{m_j} \nu_{ej} = 0, \quad (28)$$

$$F_h = -\frac{\lambda_h}{R} \frac{dT}{dz}, \quad (29)$$

$$\frac{1}{Rz} \frac{d}{dz} zJ_e = n_e \left(\sum_n n_n \alpha_n + \sum_n n_n \sum_{j>n_g} \alpha_{n-j} \right) - n_e^3 \sum_n \beta_n - \sum_n \sum_{j>n_g} n_j (n_e \beta_{j-n} + A_{jn}), \quad (30)$$

$$J_e = -D \frac{d}{dr} \left(n_e T_e \left(1 + \frac{T}{T_e} \right) \right), \quad (31)$$

$$\frac{1}{Rz} \frac{d}{dz} z J_n = \sum_{j>n} n_j (n_e \beta_{j-n} + A_{jn}) + n_e^3 \beta_n - n_n (\alpha_n n_e + \sum_{j>n} n_e \alpha_{n-j} + \sum_{j<n} n_e \beta_{n-j} + \sum_{j<n} A_{nj} \theta), \quad (32)$$

$$\frac{p_b^0}{kT_b^0} \pi R^2 = \frac{2\pi p_b}{k} \int_0^R \frac{1}{T(r)} r dr, \quad (33)$$

$$\sum_n n_n = \frac{p_h^0}{kT(r)} - n_e \left(1 + \frac{T_e(r)}{T(r)} \right) - n_v, \quad (34)$$

$$E = \frac{I}{2\pi R^2 \int_0^1 \sigma(z) z dz}, \quad (35)$$

где p_h^0 — давление насыщенного пара ртути при температуре холодной точки (самого холодного места в разрядной трубке); n_v — концентрация частиц в блоке уровней (связана однозначно с концентрацией электронов n_e формулой Саха); n_n — концентрация атомов на n -м уровне; α_n, β_n — скорости прямой ионизации с учитываемого отдельно n -го уровня энергии и прямой рекомбинации на данный уровень; $\alpha_{n-j}, \beta_{j-n}$ — скорости возбуждения j -го уровня с каждого учитываемого отдельно n -го уровня энергии и обратного процесса дезактивации; A_{jn} — вероятность спонтанного перехода между j -м и n -м уровнями (если с уровня возможен переход в основное состояние, то вместо A_{jn} должна использоваться эффективная вероятность перехода с учетом поглощения излучения в объеме, как это описано выше); n_g — номер уровня, начиная с которого энергетический спектр рассматривается как квазинепрерывный. В уравнении (32) суммирование при $j > n$ проводится как по учитываемым отдельно уровням энергии, так и по состояниям квазинепрерывного спектра. Система дополняется уравнениями переноса излучения и уравнениями для вычисления радиального распределения вероятности $\theta(z)$ вылета фотона за пределы объема.

Соотношения (33), (34) учитывают, что разряд протекает в замкнутом разрядном объеме и рабочее давление буферного газа p_b постоянно по радиусу.

Наконец, получим систему граничных условий математической модели:

$$z = 0, \quad J_e = 0, \quad J_n = 0, \quad \frac{dT_e}{dz} = 0, \quad \frac{dT}{dz} = 0, \quad \frac{dU_\nu}{dz} = 0, \quad (36)$$

$$z = 1, \quad J_e = \frac{n_e w_i}{2}, \quad n_n = 0, \quad T = T_w, \\ -\frac{\lambda_e}{R} \frac{dT_e}{dz} = -n_e w_i k T_e \left(\frac{1}{2} + \ln \left(2 \sqrt{\frac{m_e T}{m_h T_e}} \right) \right), \quad w_i = \sqrt{\frac{8kT}{\pi m_h}}, \quad (37)$$

где w_i — скорость ионов; T_w — температура тяжелых частиц на стенке.

Скорости неупругих процессов возбуждения уровней и ионизации, обратных процессов дезактивации и рекомбинации рассчитываются путем свертки функций распределения с соответствующими сечениями. При этом изотропная часть f^0 функции распределения электронов рассчитывается из уравнения Больцмана, которое в данном случае имеет вид [3]

$$\varepsilon \frac{d}{d\varepsilon} \left(\varepsilon a(\varepsilon) \frac{df^0}{d\varepsilon}(\varepsilon) + b(\varepsilon) f^0(\varepsilon) \right) = -(\varepsilon) \left(f^0(\varepsilon) - \frac{g_0 n_1}{g_1 n_0} f^0(\varepsilon - \varepsilon_{01}) \right), \quad (38)$$

где

$$a(\varepsilon) = \frac{2}{3} \left(\frac{1}{\varepsilon} \int_0^\varepsilon \varepsilon f^0(\varepsilon) \frac{4\pi}{m_e} \sqrt{\frac{2\varepsilon}{m_e}} d\varepsilon + \sqrt{\varepsilon} \int_\varepsilon^\infty \frac{1}{\sqrt{\varepsilon}} f^0(\varepsilon) \frac{4\pi}{m_e} \sqrt{\frac{2\varepsilon}{m_e}} d\varepsilon \right),$$

$$b(\varepsilon) = \int_0^\varepsilon f^0(\varepsilon) \frac{4\pi}{m_e} \sqrt{\frac{2\varepsilon}{m_e}} d\varepsilon, \quad -(\varepsilon) = \varepsilon^2 \frac{n_0 Q_{01}(\varepsilon)}{n_e m_e^2 \Gamma_{ee}},$$

$$\Gamma_{ee} = 4\pi \left(\frac{e^2}{4\pi \varepsilon_0 m_e} \right)^2 \ln \Lambda,$$

ε — энергия электронов; ε_{01} — энергия резонансного уровня; $\ln \Lambda$ — кулоновский логарифм [3]; n_0 и n_1 — концентрации частиц излучающего компонента на основном и резонансном уровнях соответственно; g_0 и g_1 — статистические веса основного и резонансного уровней соответственно; $Q_{01}(\varepsilon)$ — сечение возбуждения резонансного уровня. Видно, что коэффициенты $a(\varepsilon)$, $b(\varepsilon)$ являются функционалами функции распределения. В качестве параметров в уравнении (38) присутствуют величины n_0 , n_1 , n_e .

В работе [3] предполагается, что средняя энергия электронов намного меньше энергии резонансного уровня ε_{01} , тогда основной вклад в интеграл неупругих столкновений вносят переходы между основным и резонансным уровнями, причем учитывается влияние неупругих столкновений только для электронов, энергия которых больше энергии ε_{01} .

В уравнение (38) в качестве параметров входят температура и концентрация электронов, а также заселенности основного и резонансного

уровней атомов ртути. Расчеты скоростей процессов с помощью функции f^0 необходимо проводить во всех радиальных точках, что является чрезвычайно громоздкой процедурой. Некоторое упрощение достигается, если группу близко расположенных уровней $6p\ ^3P_{0,1,2}$ заменить одним уровнем, находящимся в их центре тяжести, и полученному уровню приписать суммарный статистический вес 9 и сечение возбуждения, являющееся суммой всех сечений возбуждения из основного состояния $6s^2\ ^1S_0$ в отдельные состояния $6p\ ^3P_{0,1,2}$.

Согласно работе [27] в области энергий электронов до порога возбуждения атома ртути на уровни $6p\ ^3P_{0,1,2}$ (около 4,7 эВ) функция распределения электронов по энергиям мало отличается от максвелловской в силу того, что определяющее значение при ее формировании имеют межэлектронные столкновения. При энергиях же в запороговом диапазоне значение электрон-электронных взаимодействий сравнимо со значением неупругих столкновений с атомами ртути, в итоге в этой области энергий отличие функции распределения от максвелловской становится заметным (рис. 3).

Для зависимостей, представленных на рис. 3, а, в качестве параметра используется концентрация электронов, при этом зафиксированы заселенность основного состояния n_0 и отношение заселенностей резонансного и основного уровней в долях от соответствующего отношения при больцмановском распределении

$$\gamma = \frac{\left(\frac{n_p}{n_0}\right)}{\left(\frac{n_p}{n_0}\right)_B},$$

где n_p — заселенность резонансного уровня. Для заселенности основного уровня n_0 выбрано значение, типичное для ламп обсуждаемого класса. Видно, что при сильном отклонении заселенностей от больцмановского распределения ($\gamma = 0,2$) при концентрации электронов для нижней границы значений, характерных для ртутных ламп (около 10^{11} см^{-3}), функция распределения в запороговой области резко отклоняется от равновесной; например, при энергии электронов порядка 10 эВ значение функции составляет только 15 % от максвелловской, а при энергии 30 эВ — 2 %. С возрастанием концентрации электронов увеличивается частота упругих столкновений, максвеллизирующих электроны, и при $n_e \approx 10^{13}\text{ см}^{-3}$ функция распределения мало отличается от равновесной — в пределах 10 %. При изменении концентрации электронов на два порядка (от 10^{11} до 10^{13} см^{-3}) распределение электронов от существенно неравновесного приближается к почти максвелловскому.

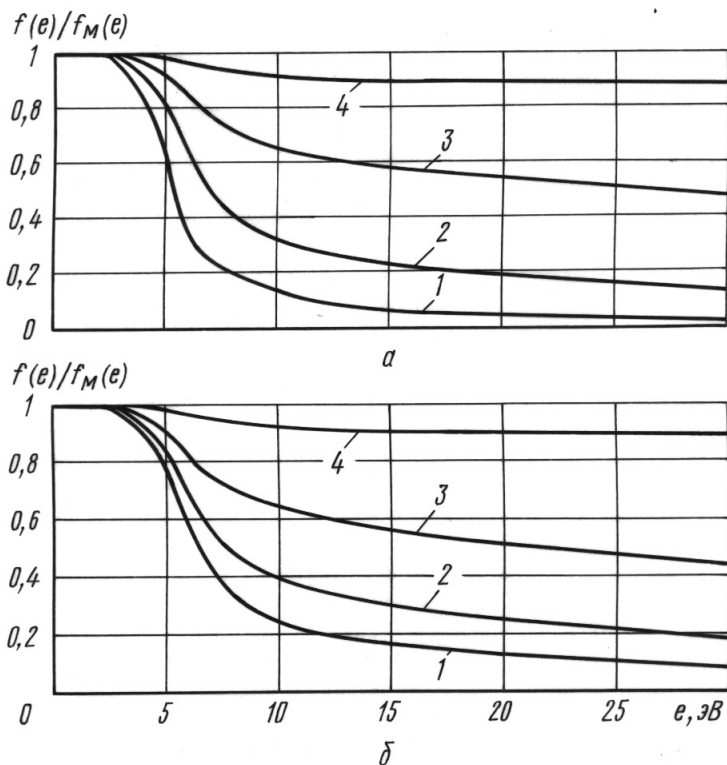


Рис. 3. Отношение истинной функции f распределения электронов по энергиям к максвелловской f_M ($T_e = 12 \cdot 10^3$ К, $n_0 = 2 \cdot 10^{14}$ см $^{-3}$):

a — при разных концентрациях электронов и фиксированном отклонении заселенности резонансного уровня от равновесного значения для $\gamma = 0,2$; $n_e = 10^{11}$ (1), $5 \cdot 10^{11}$ (2), $2 \cdot 10^{12}$ (3), 10^{13} (4) см $^{-3}$; b — при различном отклонении заселенности резонансного уровня от равновесного значения и фиксированной концентрации электронов для $n_e = 5 \cdot 10^{11}$ см $^{-3}$; $\gamma = 0,1$ (1); $0,3$ (2); $0,6$ (3); $0,9$ (4)

Для зависимостей, представленных на рис. 3, б, параметром является отношение заселенностей уровней γ , при этом зафиксированы заселенность основного состояния и концентрация электронов. При изменении γ от 0,1 до 0,9 вследствие возрастания роли неупругих столкновений второго рода происходит восполнение количества частиц в области высоких энергий функции распределения, и при $\gamma = 0,9$ эта функция отличается от максвелловской не более, чем на 10%. В области $0,1 < \gamma < 0,9$ неравновесность функции распределения может быть значительной (см. кривые 2, 3).

В соответствии с описанным видом функции распределения истинные скорости процессов электронного возбуждения и ионизации будут отличаться от равновесных тем больше, чем сильнее указанная функция отличается от максвелловской и чем больше пороги процессов, т.е. чем значительнее число электронов с неравновесным распределением

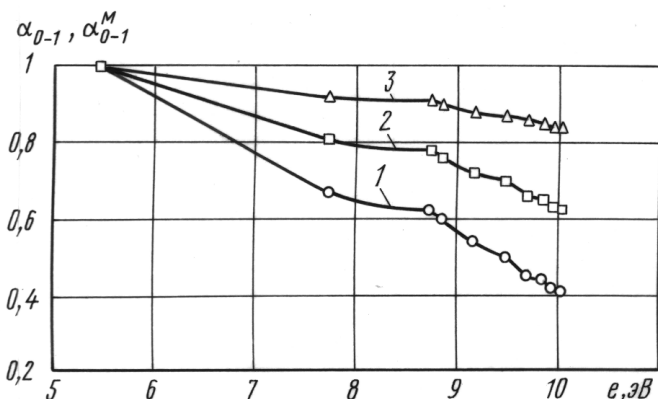


Рис. 4. Зависимость отношения скоростей возбуждения электронным ударом различных уровней атомов ртути из состояния $6p\ ^3P_1$, рассчитанных при истинной (α_{0-1}) и максвелловской (α_{0-1}^M) функциях распределения электронов, от энергии уровней:

$T_e = 12 \cdot 10^3$ К, $n_0 = 2 \cdot 10^{14}$ см $^{-3}$, $n_p/n_0 = 0,3(n_p/n_0)_B$; $n_e = 10^{11}$ (1), $5 \cdot 10^{11}$ (2), $2 \cdot 10^{12}$ (3) см $^{-3}$; здесь $\square, \circ, \triangle$ — положение возбуждаемых уровней в порядке увеличения их энергии: $6p\ ^3P_2, 7s\ ^3S_1, 7p\ ^3P_{0,1,2}, 6d\ ^3D_{1,2,3}, 8s\ ^3S_1, 8p\ ^3P_{0,1,2}, 9s\ ^3S_1, 9p\ ^3P_{0,1,2}, 10s\ ^3S_1, 10p\ ^3P_{0,1,2}$

по скоростям, участвующих в возбуждении или ионизации атомов. На рис. 4 показано, как изменяется скорость возбуждения атома Hg из одного фиксированного уровня $6p\ ^3P_1$ на ряд уровней, находящихся на разных расстояниях от указанного уровня. Видно, что возбуждение на уровень $6p\ ^3P_2$, ближайший к уровню $6p\ ^3P_1$, при пороговой энергии, равной 0,57 эВ, независимо от концентрации электронов и заселенности резонансного уровня происходит в подавляющем числе случаев за счет столкновений с электронами, имеющими максвелловское распределение по энергиям. Для уровня $7s\ ^3S_1$ с пороговой энергией 2,84 эВ скорость возбуждения составляет от 0,7 до 0,92 от равновесной в зависимости от концентрации электронов, а для уровня $10p\ ^3P_{0,1,2}$ с пороговой энергией 5,14 эВ — от 0,4 до 0,8. Таким образом, прямое вычисление показывает, что при моделировании процессов в разряде низкого давления рассматриваемого типа скорости возбуждения и ионизации ряда уровней можно определять с использованием максвелловской функции распределения, критерием выбора функции в этом случае является отношение пороговой энергии процесса к энергии резонансного уровня. Обратные процессы рекомбинации электронов и девозбуждения уровней являются беспороговыми, и для них расчеты скоростей можно производить с использованием максвелловской функции распределения.

Коэффициенты электропроводности и теплопроводности электронов рассчитываются по формулам Фроста [3], коэффициент теплопро-

водности тяжелых частиц рассчитывается по методике [18] или оценивается в приближении средней длины свободного пробега [3].

Комплексные расчеты в рамках описанной модели требуют обширной базы данных по элементарным процессам в плазме, так как модель замкнутая и в ней не предусмотрено использование подгоночных параметров или внешнее задание отдельных характеристик разряда (например, температуры электронов, напряженности электрического поля или распределения концентрации электронов и т.д.).

Сечения ионизации рассчитывались по формуле Х.У. Дравина [3], причем для группы учитываемых отдельно уровней проводилась коррекция значений в соответствии с имеющимися экспериментальными данными для отдельных уровней [28]. Сечение перезарядки ионов и атомов ртути рассчитывалось в соответствии с данными работы [30]. Сечения возбуждения атомов ртути электронами частично заимствовались из набора экспериментальных данных, приведенных в работе [28], с аппроксимацией зависимости сечений от энергии согласно В.А. Фабриканту [28], а большей частью рассчитывались по методу из работы [31]. Сечение упругого столкновения электронов с атомами ртути рассчитывалось по результатам измерений И.А. Мак-Катчена и заимствовалось из работы [28], с атомами аргона — из работы [32]. Сечение столкновения иона ртути с атомами аргона вычислялось по соотношениям из работы [33] с корректировкой результатов с учетом данных о подвижности ионов ртути в аргоновом буфере из работы [29]. Сечения упругого столкновения нейтральных частиц излучающего компонента между собой и с буферным газом получены пересчетом данных из работы [30].

Вероятности спонтанных радиационных переходов для уровней, учитываемых в модели отдельно, и ряда уровней блока получены из экспериментальных данных работы [34], для подавляющего же большинства уровней блока они рассчитывались в кулоновском приближении по методу Бейтса–Дамгаард [35]. При определении параметров уширения резонансных линий учитывались доплеровский эффект, штарковское уширение электронами, резонансное уширение собственным газом, вандерваальсовское уширение буферным газом. Штарковское уширение электронами рассматривалось согласно нестационарной теории Собельмана–Вайнштейна [36], уширение аргоном — в соответствии с работой [31].

Исходными данными в рассмотренной модели являются: давление пара ртути (температура холодной точки), давление наполнения буферного газа, диаметр разрядной трубки, температура стенки, электрический ток. В результате моделирования получаем радиальные рас-

пределения температур электронов и тяжелых частиц, концентраций электронов, частиц излучающего компонента на разных уровнях энергии, буферного газа, энергетических потоков и потоков частиц, спектральное распределение излучения разряда и значения интегральных по спектру потоков излучения в отдельных линиях, напряженность электрического поля, эффективность излучения и другие характеристики разрядов.

Некоторые результаты моделирования разрядов низкого давления в парах ртути в сопоставлении с данными экспериментов разных авторов по основным эксплуатационным и внутренним параметрам плазмы представлены на рис. 5–7 (давление пара ртути соответствует температуре холодной точки 40°C). Заметим, что распределение по радиусу концентрации электронов отличается от бесселевского в силу радиальной неоднородности электронной температуры, особенно заметной при приближении к стенке. В результате вероятности неупругих процессов также заметно изменяются при изменении радиальной координаты. Нарастание температуры электронов при приближении к стенке связано с поглощением излучения, выходящего из центральных зон разряда с повышенной концентрацией излучающих частиц. Такое изменение электронной температуры отмечается также в работе [28]. Отметим, что если отказаться от приближения эффективного времени жизни и рассчитывать концентрацию частиц на резонансном уровне исходя из интегрального уравнения (или в диффузионном приближении), то

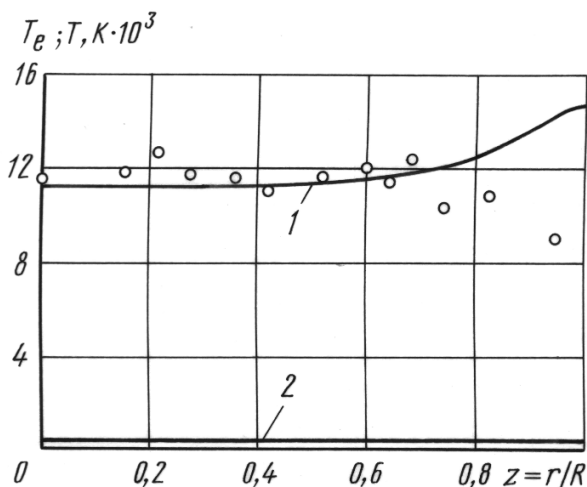


Рис. 5. Распределение температур электронов (1) и тяжелых частиц (2) в разряде согласно результатам моделирования ($R = 19$ мм, $I = 0,42$ А, давления Hg и Ar равны соответственно 0,85 и 465 Па); \circ — данные эксперимента из работы [29] ($R = 18$ мм, $I = 0,4$ А, давления Hg и Ar равны соответственно 0,85 и 390 Па)

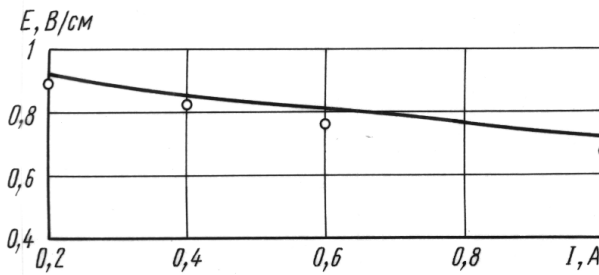


Рис. 6. Вольт-амперные характеристики разряда низкого давления согласно результатам моделирования (давление Hg равно 0,85 Па, $R = 19$ мм, давление Ar равно 465 Па); \circ — данные эксперимента из работы [28] (давление Ar равно 530 Па)

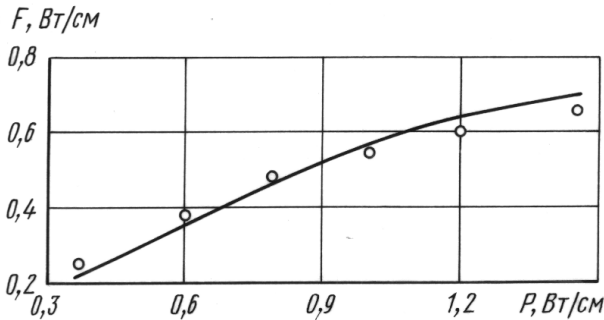


Рис. 7. Зависимость потока излучения в линии 253,7 нм от электрической мощности согласно результатам моделирования (давление Hg равно 0,85 Па, $R = 19$ мм, давление Ar равно 465 Па); \circ — данные эксперимента из работы [29] ($R = 18$ мм, давление Ar равно 390 Па)

в распределении дивергенции лучистого потока по радиусу область ее отрицательных значений сильно сужается и повышения температуры электронов при приближении к стенке в расчетах не происходит. Перепад температуры тяжелых частиц между стенкой и центром не превышает 70 К, температура тяжелых частиц во много раз отличается от температуры электронов (см. рис. 5). Вольт-амперные характеристики разряда падающие (см. рис. 6). Важнейшей эксплуатационной характеристикой ламп на основе рассмотренных разрядов является выход излучения в резонансных линиях, в частности в линии 253,7 нм (см. рис. 7). В рассмотренных условиях в данной линии излучается от 50 до 70 % подводимой к разряду электрической мощности. С возрастанием вкладываемой электрической мощности (возрастанием силы тока) мощность излучения нарастает вначале в соответствии с линейной зависимостью, а затем обнаруживается тенденция к насыщению. Такой вид кривой можно объяснить возрастанием концентрации электронов по мере возрастания силы тока и, соответственно, роли процессов де-

возбуждения уровней. Удовлетворительное согласие с данными эксперимента имеется также для излучения линии 184,9 нм.

Отметим, что электроны сбрасывают энергию за счет излучения возбуждаемых ими частиц (с долей η_1 этой энергии в общем балансе), передачи тяжелым частицам (с долей η_2) и затем сбросом энергии за счет теплопроводности этих частиц, выноса ее диффузионным потоком (с долей η_3) и электронной теплопроводности (с долей η_4). Структура баланса энергии следующая: основными являются первые два канала сброса энергии, при силе тока 0,42 А имеем $\eta_1 = 72\%$ и $\eta_2 = 26\%$ от сбрасываемой энергии, при том что $\eta_3 = 1,1\%$, $\eta_4 = 0,9\%$. С возрастанием силы тока ситуация изменяется незначительно: при $I = 0,8$ А имеем $\eta_1 = 67\%$, $\eta_2 = 31\%$, $\eta_3 = 1,2\%$, $\eta_4 = 0,7\%$.

Радиальные распределения возбужденных атомов, в том числе на резонансном и метастабильном уровнях, убывают при приближении к стенке, а концентрация частиц на основном уровне атома ртути, как и концентрация атомов аргона, возрастает к периферии разряда.

Модель позволяет рассчитывать спектральные распределения излучения в двух резонансных линиях всех изотопов. Оказывается, что все линии изотопов самообращены.

Видно, что результаты моделирования и измерений согласуются вполне удовлетворительно. Наибольшее расхождение как по представленным параметрам, так и по другим характеристикам, перечисленным выше, составляет не более 15%. Заметим, что использование в расчетах большого количества исходной информации приводит к некоторой взаимной статистической компенсации погрешностей данных, что в известной степени ослабляет требования к их точности.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Брагинский С. И. Явления переноса в плазме // Вопросы теории плазмы. – 1963. – Вып. 1. – С. 183–272.
2. Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Электродинамика сплошных сред. – М.: Наука, 1982. – 620 с.
3. Митчнер М., Кругер Ч. Частично ионизованные газы / Под ред. А.А. Иванова. – М.: Мир, 1976. – 496 с.
4. Чепмен С., Каулинг Т. Математическая теория неоднородных газов. – М.: Ин. лит., 1960. – 238 с.
5. Биберман Л. М., Воробьев В. С., Якубов И. Т. Кинетика неравновесной низкотемпературной плазмы. – М.: Наука, 1982. – 375 с.
6. Александров А. Ф., Рухадзе А. А. Физика сильноточных электроразрядных источников света. – М.: Атомиздат, 1976. – 185 с.
7. Гудзенко Л. И., Яковленко С. И. Плазменные лазеры. – М.: Атомиздат, 1978. – 256 с.

8. Л е л е в к и н В. М., О т о р б а е в Д. К. Экспериментальные методы и теоретические модели в физике неравновесной плазмы. – Фрунзе: Илим, 1988. – 250 с.
9. М а т е м а т и ч е с к о е моделирование катодных процессов / А.М. Зимин, И.П. Назаренко, И.Г. Паневин, В.И. Хвесюк. – Новосибирск: ВО “Наука”, 1993. – 194 с.
10. Т е о р и я столба электрической дуги / В.С. Энгельшт, В.Ц. Гурович, Г.А. Десятков и др. – Новосибирск: Наука, 1990. – 376 с. – (Низкотемпературная плазма; Т. 1).
11. З е л ь д о в и ч Я. Б., Р а й з е р Ю. П. Физика ударных волн и высокотемпературных гидродинамических явлений. – М.: Наука, 1966. – 686 с.
12. О ц и с и к М. Н. Сложный теплообмен. – М.: Мир, 1976. – 616 с.
13. Р а д и а ц и о н н ы й теплоперенос в высокотемпературных газах: Справочник / И.Ф. Головнев, В.П. Замураев, С.С. Кацнельсон и др. Под ред. Р.И. Солоухина. – М.: Энергоатомиздат, 1984. – 256 с.
14. С у р ж и к о в С. Т. Вычислительный эксперимент в построении радиационных моделей механики излучающего газа. – М.: Наука, 1992. – 159 с.
15. Ч е т в е р у ш к и н Б. Н. Математическое моделирование задач динамики излучающего газа. – М.: Наука, 1985. – 304 с.
16. L o w k e J. J., C a p r i o t t i E. R. Calculation of temperature profiles of high pressure electric arcs using the diffusion approximation for radiation transfer // JQSRT. – 1969. – V. 9. – № 1. – P. 207–236.
17. S i n y a r e v G. B., G r a d o v V. M. Complex Calculations of High-Pressure Discharge Irradiation Characteristics // Beitrage aus der Plasmaphysik. – 1984. – Bd. 24. – № 5. – S. 499–528.
18. Г р а д о в В. М. Разработка методов расчета и исследование радиационных процессов в системах с разрядными источниками селективного излучения: Дис... д-ра техн. наук / МГТУ им. Н.Э. Баумана. – М., 2002. – 323 с.
19. Б и б е р м а н Л. М. К теории диффузии резонансного излучения // ЖЭТФ. – 1947. – Т. 17. – № 5. – С. 416–426.
20. Б и б е р м а н Л. М. Приближенный способ учета диффузии резонансного излучения // Докл. АН СССР. – 1948. – Т. 59. – № 4. – С. 659–662.
21. Д ь я к о н о в М. И., П е р е л ь В. И. Релаксация когерентности при диффузии резонансного излучения // ЖЭТФ. – 1964. – Т. 47. – № 4. – С. 1482–1495.
22. П р е о б р а ж е н с к и й Н. Г., С у в о р о в А. Е. Машинный метод Грэда в задачах, связанных с переносом линейчатого излучения // Оптика и спектроскопия. – 1978. – Т. 45. – № 6. – С. 1062–1068.
23. К л ю ч а р е в А. Н., Б е з у г л о в Н. Н. Процессы возбуждения и ионизации атомов при поглощении света (оптически возбужденные среды). – Л.: Изд-во ЛГУ, 1983. – 272 с.
24. Г о л у б о в с к и й Ю. Б., Л я г у щ е н к о Р. И. О заселении резонансных уровней в цилиндрическом объеме // Оптика и спектроскопия. – 1976. – Т. 40. – № 2. – С. 215–222.
25. M o l i s c h A. F., O e h r y B. P., S c h u p i t a W., M a g e r l G. Radiation trapping in a saturated vapour in cylindrical geometries // Opt. Comm. – 1995. – V. 118. – № 4. – P. 520–524.
26. С п р а в о ч н а я книга по светотехнике / Под ред. Ю.Б. Айзенберга. – М.: Энергоатомиздат, 1995. – 526 с.
27. М и л е н и н В. М., Т и м о ф е е в Н. А. Плазма газоразрядных источников света низкого давления. – Л.: Изд-во ЛГУ, 1991. – 239 с.

28. Р о х л и н Г. Н. Разрядные источники света. – М.: Энергоатомиздат, 1991. – 720 с.
29. У э й м а у с Д. Газоразрядные лампы / Под ред. Г.Н. Рохлина, М.И. Фугенфинова. – М.: Энергия, 1977. – 367 с.
30. Ф и з и ч е с к и е величины: Справочник / А.П. Бабичев, Н.А. Бабушкина, А.М. Братковский и др. Под ред. И.С. Григорьева, Е.З. Мейлихова. – М.: Энергоатомиздат, 1991. – 1232 с.
31. В а й н ш т е й н Л. А., С о б е л ь м а н И. И., Ю к о в Е. А. Возбуждение атомов и уширение спектральных линий. – М.: Наука, 1979. – 319 с.
32. F r o s t L. S., P h e l p s A. V. Momentum-transfer gross sections for slow electrons in He, Ar, Kr and Xe from transport coefficients // Phys. Rev. – 1964. – V. 136. – № 6A. – P. 1538–1545.
33. Р а й з е р Ю. П. Физика газового разряда. – М.: Наука, 1992. – 536 с.
34. Ф р и ш С. Э. Оптические спектры атомов. – М.: Физматгиз, 1963. – 640 с.
35. Г р и м Г. Спектроскопия плазмы. – М.: Атомиздат, 1969. – 245 с.
36. С о б е л ь м а н И. И. Введение в теорию атомных спектров. – М.: Физматгиз, 1963. – 640 с.

Статья поступила в редакцию 24.05.2004

Владимир Михайлович Градов родился в 1948 г., окончил в 1973 г. МВТУ им. Н.Э. Баумана. Д-р техн. наук, профессор кафедры “Программное обеспечение ЭВМ и информационные технологии” МГТУ им. Н.Э. Баумана. Автор около 100 научных работ в области математического моделирования в квантовой электронике, теплофизики и физики низкотемпературной плазмы.

V.M. Gradov (b. 1948) graduated from the Bauman Moscow Higher Technical School in 1973. D. Sc. (Eng.), professor of “Software and Computing technologies” department of the Bauman Moscow State Technical University. Author of about 100 publications in the field of mathematical simulation in quantum electronics, thermal physics and physics of low-temperature plasma.



Игорь Владимирович Ломовской родился в 1977 г., окончил в 2000 г. МГТУ им. Н.Э. Баумана. Аспирант кафедры “Программное обеспечение ЭВМ и информационные технологии” МГТУ им. Н.Э. Баумана. Автор 7 научных работ в области математического моделирования и разработки программного обеспечения для задач физики, в том числе физики низкотемпературной плазмы.

I.V. Lomovskoy (b. 1977) graduated from the Bauman Moscow State Technical University in 2000. Post-graduate of “Software and Computing technologies” department of the Bauman Moscow State Technical University. Author of 7 publications in the field of mathematical simulation and software development for problems in physics including those of physics of low-temperature plasma.

