



ISSN 2071-2898 (Print)
ISSN 2071-2901 (Online)

Захаров В. С.

Излучательные свойства
неравновесной плазмы
азота в спектральном
диапазоне мягкого
рентгеновского излучения

Рекомендуемая форма библиографической ссылки: Захаров В. С. Излучательные свойства неравновесной плазмы азота в спектральном диапазоне мягкого рентгеновского излучения // Препринты ИПМ им. М.В.Келдыша. 2018. № 148. 18 с. doi:[10.20948/prepr-2018-148](https://doi.org/10.20948/prepr-2018-148)
URL: <http://library.keldysh.ru/preprint.asp?id=2018-148>

**Ордена Ленина
ИНСТИТУТ ПРИКЛАДНОЙ МАТЕМАТИКИ
имени М.В.Келдыша
Российской академии наук**

В.С. Захаров

**Излучательные свойства неравновесной
плазмы азота в спектральном диапазоне
мягкого рентгеновского излучения**

Москва — 2018

Захаров Василий Сергеевич

Излучательные свойства неравновесной плазмы азота в спектральном диапазоне мягкого рентгеновского излучения

Мягкое рентгеновское излучение в диапазоне 2.3-3.0 нм в плазме азота генерируется в основном при 2p-1s и 3p-1s резонансных радиационных переходах. Ионы азота в плазме, излучающей в необходимом диапазоне, находятся в возбужденном состоянии, соответствующем более высоким энергиям по отношению к температуре плазмы, достигаемой в большинстве экспериментов. Разрядная и лазерная плазма в источниках излучения, как правило, имеет неравновесную функцию распределения электронов по энергии с присутствием доли ускоренных электронов с высокой энергией. В настоящей работе проведено кинетическое моделирование такой плазмы по модели столкновительно-излучательного равновесия. Учет ускоренных электронов производится посредством расчета скоростей столкновительных процессов с нетепловой функцией распределения, получаемых с применением модели Хартри–Фока–Слэтера и приближения искаженных волн. Показано, что присутствие ускоренных электронов даже при малых долях (0.1-1%) способно существенно повлиять на степень ионизации плазмы и населенности уровней. Получено, что эффективность генерации излучения в заданном диапазоне может быть существенно увеличена при определенных условиях.

Ключевые слова: неравновесная плазма, ускоренные электроны, мягкое рентгеновское излучение

Vasily Sergeevich Zakharov

Radiative properties of non-equilibrium nitrogen plasma in soft x-ray range

Soft X-ray emission at 2.3-3.0 nm region in nitrogen plasma can be observed mostly in 2p-1s and 3p-1s resonant transitions. Ions of nitrogen in plasma emitting in necessary band have a high energy excited state in comparison with plasma temperature in most experiments. Discharge and laser produced plasmas that are used in radiation sources often have non-equilibrium electron distributions with accelerated (high energy) electrons. In present work a kinetic modeling of such plasmas by collisional-radiative model is performed. Non-thermal electron distribution by the energy is used for calculations of impact processes rates on the basis of Hartree–Fock–Slater (HFS) quantum-statistical model and distorted wave approximation. It is shown that the presence of accelerated electrons in plasma at relatively small portions (0.1-1%) even may have a significant influence on the ion and level populations and the line emission intensities. It is found that the emission generation efficiency at specified range may be significantly increased.

Key words: non-equilibrium plasma, accelerated electrons, soft x-ray emission

Введение

Излучение плазмы многозарядных ионов представляет значительный интерес и интенсивно исследуется в последние годы в связи с разработкой эффективных источников излучения в жестком ультрафиолетовом и мягком рентгеновском диапазонах. Интерес вызван большим набором возможных приложений в научной и прикладных областях, таких как изучение поглощения излучения, дифракционных процессов, рассеяния в веществе, микроскопии в биологии и медицине, литографии и метрологии, и пр.

Лазерное воздействие или разряд могут быть использованы для нагрева и поддержания плазмы в необходимом состоянии и температуре. С сокращением длины волны для генерации необходимого излучения требуется достигнуть большей температуры плазмы, а значит, необходимо увеличение интенсивности лазерного излучения, энергии и мощности разрядного импульса. Лазерная плазма возникает при воздействии одного или нескольких сфокусированных лазерных импульсов одинаковой или различной длины волны излучения на твердую или жидкую мишень [1,2], газовую струю [3] в вакуумной камере. Разрядная плазма производится при инициации разряда электрического тока в капилляре, заполненном смесью газов [4-6], или электрической дуги [7]. Также применяется комбинированный или гибридный подход с использованием твердой или жидкой мишени: первоначальное воздействие лазерного импульса приводит к испарению и предионизации вещества мишени, последующий нагрев плазмы производится при электрическом разряде [7-9].

Как правило, разрядная и лазерная плазма в источниках излучения является неравновесной, в частности из-за неравновесного излучения, и зачастую в ней могут присутствовать пучки ускоренных электронов (так называемые убегающие электроны). Это может происходить в лазерной плазме из-за особенностей взаимодействия лазерного излучения с веществом [10] либо в плазме пинчей и капиллярных разрядов с полым катодом (hollow cathode effect) [11], в плазме эксимерных лазеров [12], а также в астрофизической плазме [13]. Эффекты от влияния таких электронов может быть существенны, а значит, их исследование представляет большое значение.

Мягкое рентгеновское излучение, в частности излучение в диапазоне 2.3-4.4 нм («водяное окно» - спектральный диапазон, в котором вода значительно более прозрачна для излучения, чем органическое вещество, и границы которого определяются энергиями электронов на К-оболочке кислорода и К-оболочке углерода соответственно) генерируется источниками на основе лазерной и разрядной плазмы различных элементов. Для широкополосного излучения используются мишени на основе висмута и циркония с применением дифракционной оптики [14]. Однако присутствуют серьезные сложности с загрязнением вакуумной камеры и оптической системы из-за характерных

особенностей данных материалов, поэтому их применение сильно снижает срок службы всей системы [15], а для разрядной плазмы крайне ограничено [16].

Также возможно применение криптоновой плазмы [17] в комбинации с эллиптическими дифракционными зеркалами [18] или зеркальных систем типа Киркпатрика–Баеза [19]. Ввиду того что криптон является инертным газом, отсутствует проблема с загрязнением элементов системы, и возможно его использование как в источниках на базе лазерного воздействия на струю газа, так на основе разрядной плазмы. Для достижения состояния, необходимого для эффективной генерации излучения в диапазоне 2.3-4.4 нм, требуется более высокая степень ионизации криптоновой плазмы, а значит, необходимы более высокие температуры, чем для плазмы циркония и висмута. Однако возможна оптимизация параметров разрядных источников излучения на основе криптона с целью повышения их эффективности [20].

Вероятно, наиболее часто используемым элементом в источниках излучения в диапазоне 2.3-4.4 нм является азот. Источники на его основе не имеют проблемы с загрязнением элементов системы. Азотная плазма может возникать при воздействии Nd:YAG или CO₂ лазера на мишень в виде газовой струи [21-23] или при разряде, инициируемом в разреженном газе или смеси газов [24]. Основная доля излучения в диапазоне водяного окна генерируется в районе длины волны 2.88 нм (1s2-1s2p переход в ионе N VI). Таким образом, источник излучения является в большой степени монохроматическим, что крайне удобно в плане настройки и оптимизации оптической системы, позволяет использовать оптику Френеля, а также хорошо развитые методы шумоподавления и постпроцессинга при диагностике и анализе получаемых результатов, схожие методикам, применяемым в лазерных установках. Но такое преимущество приносит и основной недостаток – высокое поглощение генерируемого излучения. Таким образом, исследование спектральных свойств неравновесной азотной плазмы представляет научный фундаментальный и прикладной интерес в целях оптимизации генерации и выхода излучения.

В настоящей работе рассматриваются методика и результаты расчетов излучательных свойств азотной плазмы применительно к источникам излучения в спектральной диапазоне «водяного окна» с использованием столкновительно-излучательной модели кинетики плазмы. Рассматривается общий случай оптически прозрачной плазмы с неравновесной функцией распределения электронов по энергии. Таким образом, рассматриваемая плазма является неравновесной. Для более корректного учета влияния ускоренных электронов применяется приближение искаженных волн в модели Хартри–Фока–Слэтера (ХФС) для вычисления скоростей и сечений столкновительных процессов в плазме многозарядных ионов, необходимых для решения уравнений поуровневой кинетики [25]. Численные и квазиклассические волновые функции электронов, используемые при расчете сечений, вычисляются в самосогласованном потенциале ХФС [26].

1. Модель кинетики плазмы многозарядных ионов

Для расчета спектральных свойств плазмы многозарядных ионов, таких как спектр излучения и поглощения, степень ионизации и т.д., необходимо проводить кинетическое моделирование при заданных параметрах плазмы. Для моделирования кинетики в плазме многозарядных ионов необходимо учитывать неравновесную заселенность уровней и решать систему уравнений поуровневой кинетики, включающую в себя скорости радиационных и столкновительных процессов.

В общем, нестационарном случае, система включает в себя уравнения кинетического баланса для каждого электронного уровня:

$$\frac{dn_{\mu}}{dt} = \sum_{v \neq \mu}^v n_v \alpha_{v \rightarrow \mu} - n_{\mu} \sum_{v \neq \mu}^v \alpha_{\mu \rightarrow v},$$

$$\sum_{\mu} n_{\mu} = 1,$$

где $\alpha_{v \rightarrow \mu}$ и $\alpha_{\mu \rightarrow v}$ – полные скорости процессов, ведущих к увеличению или к уменьшению относительной населенности n_{μ} уровня μ соответственно. Полные скорости процессов включают в себя скорости радиационных и столкновительных процессов и зависят от температуры и плотности плазмы, электронной плотности, распределения электронов по энергиям и спектрального распределения поля излучения. В рассматриваемой в данной работе модели стационарной плазмы ($dn_{\mu}/dt = 0$), прозрачной для излучения, учитываются следующие прямые и обратные атомные процессы: столкновительная ионизация и рекомбинация, столкновительное возбуждение и девозбуждение, фоторекомбинация и излучение в спектральных линиях. Для наиболее строгого описания необходимо также учитывать процесс диэлектронного захвата и обратный ему процесс – автоионизацию, однако в данном случае сильнозаряженной (4+ и выше) азотной плазмы эти процессы представляются маловероятными и исключены из модели. Это объясняется тем, что для ионов N V и выше, концентрации которых составляют подавляющую долю всех ионов в плазме источника излучения в диапазоне 2.3-4.4 нм, населенность дважды возбужденных автоионизационных состояний с «дыркой» в уровне 1s представляется крайне низкой, однако значительно влияет на скорость расчетов, ухудшая сходимость при решении системы кинетических уравнений.

Спектр излучения в линиях описывается спектральным коэффициентом излучения j_{ω} в связанно-связанных переходах и вычисляется с использованием населенностей уровней и сил осцилляторов $f_{v\mu}$:

$$j_{\omega} = \frac{e^2}{2\varepsilon_0 m_e c^3} \sum_{\nu} \sum_{\mu} \frac{\varepsilon^3}{h^2} n_{\nu} n_{\mu} \frac{g_{\nu}}{g_{\mu}} f_{\mu\nu} \phi_{\omega},$$

где ε_0 – электрическая постоянная, ε – энергия излучательного перехода, h – планковская константа, n_i – плотность ионов, g_{ν} и g_{μ} – статистические веса уровней ν и μ соответственно, ϕ_{ω} – профиль спектральной линии.

2. Скорости атомных процессов

Будем предполагать, что распределение электронов по энергиям в плазме с потоком ускоренных электронов может быть представлено в виде суммы двух распределений:

$$F(\varepsilon) = (1 - \xi) F_0(T, \varepsilon) + \xi F_1(E, \varepsilon), \quad (1)$$

где F_0 – распределение Максвелла, F_1 – распределение ускоренных электронов со средней энергией E , ξ – относительная концентрация ускоренных электронов, T – температура, ε – энергия свободных электронов. Обычно предполагают, что $F_1(T, \varepsilon) = F_0(T_a, \varepsilon)$, где T_a – соответствующая температура ускоренных электронов. Наряду с этим приближением можно использовать дельта-функцию $\delta(\varepsilon - E)$. Как показали расчеты, такая замена не оказывает принципиального влияния на распределение ионов и их средний заряд, поэтому в дальнейшем будем предполагать, что $F_1(E, \varepsilon) = F_0(T_a, \varepsilon)$. Слагаемые в выражении (1) удобно обозначить как нормальную и ускоренную компоненты распределения:

$$F(\varepsilon) = F^{(norm)}(\varepsilon) + F^{(acc)}(\varepsilon).$$

Данное распределение используется для расчета скоростей столкновительных процессов методом искаженных волн [27], который в первом порядке теории возмущений учитывает влияние поля иона на движение свободных электронов.

Скорости столкновительных процессов (возбуждения $\alpha_{\mu\nu}^{ex}$ и девозбуждения $\alpha_{\nu\mu}^{dex}$, ионизации $\alpha_{\mu\nu}^{ii}$ и трехчастичной рекомбинации $\alpha_{\nu\mu}^{ir}$) выражаются через соответствующие сечения

$$\alpha_{\mu\nu}^{ex} = n_e a_0^3 v_0 \int_{\Delta\varepsilon}^{\infty} \sqrt{2\varepsilon} \sigma_{\mu\nu}^{ex}(\varepsilon) F(\varepsilon) d\varepsilon, \quad (2)$$

$$\alpha_{\nu\mu}^{dex} = n_e a_0^3 v_0 \int_0^{\infty} \sqrt{2\varepsilon} \sigma_{\nu\mu}^{dex}(\varepsilon) F(\varepsilon) d\varepsilon, \quad (3)$$

$$\alpha_{\mu\nu}^{ii} = n_e a_0^3 v_0 \int_{\varepsilon^i}^{\infty} \sigma_{\mu\nu}^{ii} \sqrt{2\varepsilon} F(\varepsilon) d\varepsilon, \quad (4)$$

$$\alpha_{\nu\mu}^{ir} = n_e^2 a_0^6 v_0^2 \int_0^{\infty} \int_0^{\infty} \sigma_{\nu\mu}^{ir} \sqrt{2\varepsilon^*} F(\varepsilon^*) \sqrt{2\varepsilon'} F(\varepsilon') d\varepsilon^* d\varepsilon', \quad (5)$$

где n_e – электронная плотность, a_0 – боровский радиус, ε^i – энергия ионизации электрона в ионе с уровня μ .

В отличие от прямых столкновительных процессов, т.е. возбуждения и ионизации, присутствие ускоренных электронов в плазме не оказывает существенного влияния на скорости обратного процесса девозбуждения. Это связано с тем, что сечения этого процесса достигают своих максимальных значений при околопороговых энергиях, т.е. вблизи границы между дискретным и непрерывным спектрами энергий, и эти области в полной мере определяют значения скорости процесса. Поэтому для электронов с высокой энергией сечения этого процесса не вносят каких-либо заметных изменений в значения скоростей, и учет в них влияния ускоренных электронов не является обязательным. Таким образом, вычисление скоростей девозбуждения можно выполнить на основе принципа детального баланса из скоростей, используя только нормальную компоненту распределения электронов по энергиям в (1):

$$\alpha_{\nu\mu}^{dex} = \frac{g_\mu}{g_\nu} e^{(\varepsilon_\mu - \varepsilon_\nu)/T} \alpha_{\mu\nu}^{ex(norm)}.$$

Столкновительные процессы возбуждения и ионизации (и обратные им процессы) атомов и ионов электронами не имеют точного аналитического решения, т.к. относятся к разряду задач теории многих тел. Для расчета сечений этих процессов используется соответствующая теория возмущений. В качестве малого возмущения можно рассматривать взаимодействие налетающего электрона с электронами, связанными в ионе. Это взаимодействие мало по сравнению с взаимодействием налетающего или связанных электронов с кулоновским полем иона.

3. Сечения столкновительных процессов

Для расчета сечений столкновительных процессов предлагается использовать приближение искаженных волн на основе применения одноэлектронных волновых функций, которые вычисляются в самосогласованном потенциале ХФС [26].

В приближении искаженных волн волновая функция сталкивающегося электрона является не плоской волной, а учитывается, что на движение свободного электрона оказывает влияние поле иона. Как правило, используется одноэлектронное приближение в центрально-симметричном поле.

Эффективное сечение одночастичного возбуждения иона для перехода с уровня μ на уровень ν (с возбуждением электрона из состояния с квантовыми числами $n\ell$ в состояние с квантовыми числами $n'\ell'$) представляется в виде

$$\sigma_{\mu\nu}^{ex} = \sum_{\kappa} [\sigma'_{\kappa}(n\ell, n'\ell') + \sigma''_{\kappa}(n\ell, n'\ell')], \quad (6)$$

где $\sigma'_{\kappa}(n\ell, n'\ell')$ включает себя так называемые прямую и интерференционную части сечения, а $\sigma''_{\kappa}(n\ell, n'\ell')$ – обменную часть:

$$\sigma'_{\kappa}(n\ell, n'\ell') = 4\pi^3(2\ell+1)k^2 \sum_{\lambda, \lambda'} P_{\kappa}^d (P_{\kappa}^d - \sum_{\kappa'} P_{\kappa'\kappa}^e), \quad (7)$$

$$\sigma''_{\kappa}(n\ell, n'\ell') = 4\pi^3(2\ell+1)k^2 \sum_{\lambda, \lambda'} (\sum_{\kappa'} P_{\kappa\kappa}^e)^2. \quad (8)$$

Здесь $k = (2\varepsilon)^{1/2}$ – импульс налетающего электрона; $\varepsilon, \varepsilon'$ и λ, λ' – энергии и орбитальные моменты этого электрона до и после столкновения, P_{κ}^d и $P_{\kappa'\kappa}^e$ – прямые и обменные радиальные интегралы, которые выражаются через интегралы Слэтера $R_{\alpha, \beta; \gamma, \delta}^{(\kappa)}$ с использованием квантово-механических $3j$ - и $6j$ -символов Вигнера:

$$P_{\kappa}^d = \sqrt{(2\ell_0+1)(2\ell+1)(2\lambda_0+1)(2\lambda+1)2\kappa+1} \times \\ \times \begin{pmatrix} \kappa & \ell & \ell' \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \kappa & \lambda & \lambda' \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} R_{n\ell, n'\ell'; \varepsilon\lambda, \varepsilon'\lambda'}^{(\kappa)}, \quad (9)$$

$$P_{\kappa'\kappa}^e = (-1)^{\kappa+\kappa'} \sqrt{(2\kappa+1)(2\ell+1)(2\ell'+1)(2\lambda+1)(2\lambda'+1)} \times \\ \times \begin{pmatrix} \kappa' & \ell & \lambda' \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \kappa' & \lambda & \ell' \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{Bmatrix} \kappa' & \ell & \lambda' \\ \kappa & \lambda & \ell' \end{Bmatrix} R_{\varepsilon\lambda, n'\ell'; n\ell, \varepsilon'\lambda'}^{(\kappa')}, \quad (10)$$

$$R_{\alpha, \beta; \gamma, \delta}^{(\kappa)} = \iint R_{\alpha}(r') R_{\beta}(r') r_{<}^{\kappa} r_{>}^{\kappa+1} R_{\gamma}(r'') R_{\delta}(r'') dr' dr'', \quad (11)$$

где $R_{\alpha}(r), R_{\beta}(r), R_{\gamma}(r), R_{\delta}(r)$ – радиальные части одноэлектронных волновых функций дискретного и непрерывного спектра, которые являются решениями уравнения Шрёдингера в поле иона с учетом взаимодействия по модели ХФС. Для нахождения сечений девозбуждения (гашения) по формулам (6)-(11) необходимо поменять местами начальное и конечное состояния частиц.

Аналогичным образом можно вычислить сечения столкновительной ионизации и трехчастичной рекомбинации. От возбуждения эти процессы

отличаются тем, что одно из состояний связанного электрона – начальное или конечное – является состоянием непрерывного спектра. Выражения для сечения ионизации электрона с квантовыми числами $n\ell$ (он переходит в состояние непрерывного спектра $\varepsilon^* \lambda^*$) получаются, если электрон из состояния дискретного спектра энергии отнести к состоянию непрерывного спектра:

$$\sigma_{\mu\nu}^{ii} = \sum_{\lambda^*} \int_0^{(\varepsilon - \varepsilon^i)/2} \frac{d\sigma_{\mu\nu}^{ii}}{d\varepsilon^*} d\varepsilon^*. \quad (12)$$

При вычислении сечения ионизации необходимо дифференциальное сечение ионизации $d\sigma_{\mu\nu}^{ii}$ просуммировать по моментам λ^* и проинтегрировать по энергиям ε^* ионизованного электрона. Формулы (6)-(8) соответственно примут следующий вид:

$$d\sigma_{\mu\nu}^{ii} = \sum_{\kappa} [d\sigma'_{\kappa}(n\ell, \varepsilon^* \lambda^*) + d\sigma''_{\kappa}(n\ell, \varepsilon^* \lambda^*)], \quad (13)$$

$$d\sigma'_{\kappa}(n\ell, \varepsilon^* \lambda^*) = 4\pi^3 (2\ell + 1) k^2 \sum_{\lambda, \lambda'} P_{\kappa}^d (P_{\kappa}^d - \sum_{\kappa'} P_{\kappa\kappa}^e) d\varepsilon^*, \quad (14)$$

$$d\sigma''_{\kappa}(n\ell, \varepsilon^* \lambda^*) = 4\pi^3 (2\ell + 1) k^2 \sum_{\lambda, \lambda'} (\sum_{\kappa'} P_{\kappa\kappa}^e)^2 d\varepsilon^*. \quad (15)$$

Выражения для расчета прямого и обменного радиальных интегралов в (14) и (15) можно получить из соответствующих им выражений (9) и (10), проведя замену $l' \rightarrow \lambda^*$ и заменив волновую функцию электрона дискретного спектра на волновую функцию электрона непрерывного спектра в интеграле Слэтера (11).

Обратный процесс трехчастичной рекомбинации отличается от предыдущих описанных столкновительных процессов наличием двух налетающих частиц в начальном состоянии с импульсами k' и k^* , поэтому для вычисления величины сечения методом искаженных волн, характеризующим процесс рекомбинации, необходимо использовать следующие формулы:

$$\sigma_{\nu\mu}^{ir} = \sum_{\kappa} [\sigma'_{\kappa}(\varepsilon^* \lambda^*, n\ell) + d\sigma''_{\kappa}(\varepsilon^* \lambda^*, n\ell)] \quad (16)$$

$$\sigma'_{\kappa}(\varepsilon^* \lambda^*, n\ell) = \pi^2 k'^2 k^{*2} \sum_{\lambda', \lambda} P_{\kappa}^d (P_{\kappa}^d - \sum_{\kappa'} P_{\kappa\kappa}^e), \quad (17)$$

$$d\sigma''_{\kappa}(\varepsilon^* \lambda^*, n\ell) = \pi^2 k'^2 k^{*2} \sum_{\lambda', \lambda} (\sum_{\kappa'} P_{\kappa\kappa}^e)^2. \quad (18)$$

Аналогично выражения для расчета прямого и обменного радиальных интегралов в (17) и (18) можно получить из соответствующих им выражений (9)

и (10), проведя замену $l \rightarrow \lambda^*$ и заменив волновую функцию электрона дискретного спектра на волновую функцию электрона непрерывного спектра в интеграле Слэтера (11).

4. Результаты расчетов и обсуждение

Описанная в предыдущих параграфах модель кинетики неравновесной плазмы, метод и приближение для расчета скоростей и сечений столкновительных процессов на основе модели Хартри–Фока–Слэтера были применены для моделирования и анализа влияния ускоренных электронов на излучательные характеристики плазмы и эффективность генерации излучения в диапазоне 2.3-4.4 нм. Ввиду значительной вычислительной сложности сечения электрон-ионных процессов взаимодействия были предварительно рассчитаны с использованием вычислительных ресурсов комплекса К-100 в ИПМ им. М.В. Келдыша РАН и систем МВС в МСЦ РАН. Скорости излучательных процессов (фоторекомбинация и излучение в линиях), а также структура уровней энергии в ионах вычислялись в атомных кодах FAC [28] и THERMOS [25-26]. Электронная плотность во всех вычислениях была выбрана на уровне $n_e = 10^{19}$ 1/см³. Это соответствует стандартному значению критической плотности CO₂-лазера (длина волны излучения - 10.6 мкм), разлетающейся плазме Nd:YAG-лазера (1.06 мкм), а также экспериментальным данным в источниках излучения на основе разрядной плазмы.

Присутствие ускоренных электронов способно существенно повлиять на ионный баланс в плазме средних и тяжелых элементов и существенно увеличить её средний заряд [29]. В азотной плазме рост степени ионизации очевидно ограничен небольшим набором зарядов ионов, а также значительным разрывом в энергиях ионизации ионов N V и N VI – ~98 эВ и ~552 эВ соответственно. Это связано с различием в энергиях уровней на оболочках 1s (K) и 2s (L1). Максимум в сечениях ионизации наблюдается в районе 250 эВ для N V и 2 кэВ для N VI (рис. 1). Таким образом, можно сделать вывод, что для наиболее оптимальной ионизации N V желательна температура около 70-80 эВ, а для N VI энергия электронов должна быть > 1 кэВ. Температура плазмы порядка 80 эВ может быть достигнута в азотной лазерной плазме, но в сильно ограниченной области [31]. Наиболее реально достижима величина порядка 50-60 эВ. В разрядной плазме достигаемые температуры ниже – в капиллярном источнике излучения температура, согласно результатам моделирования, составляет 45-55 эВ [24]. Однако в связи с особенностями развития и динамики плазмы в капиллярном разряде доля энергии ускоренных электронов может составлять до 30% относительно полной энергии электронов в плазме [32, 33], в отличие от лазерной плазмы, где она может достигать 10-15% [34]. При средней энергии ускоренных электронов в несколько кэВ рост среднего заряда плазмы объясняется повышением концентрации сильно заряженных ионов (рис. 2). В области низких температур (< 40 эВ), рост доли водородоподобного иона N VII

ограничен из-за малой доли ионов N VI, для массового образования которых недостаточно энергии тепловых электронов. С ростом температуры концентрация этих ионов растет, что приводит к дальнейшему росту ионизации за счет ускоренных электронов.

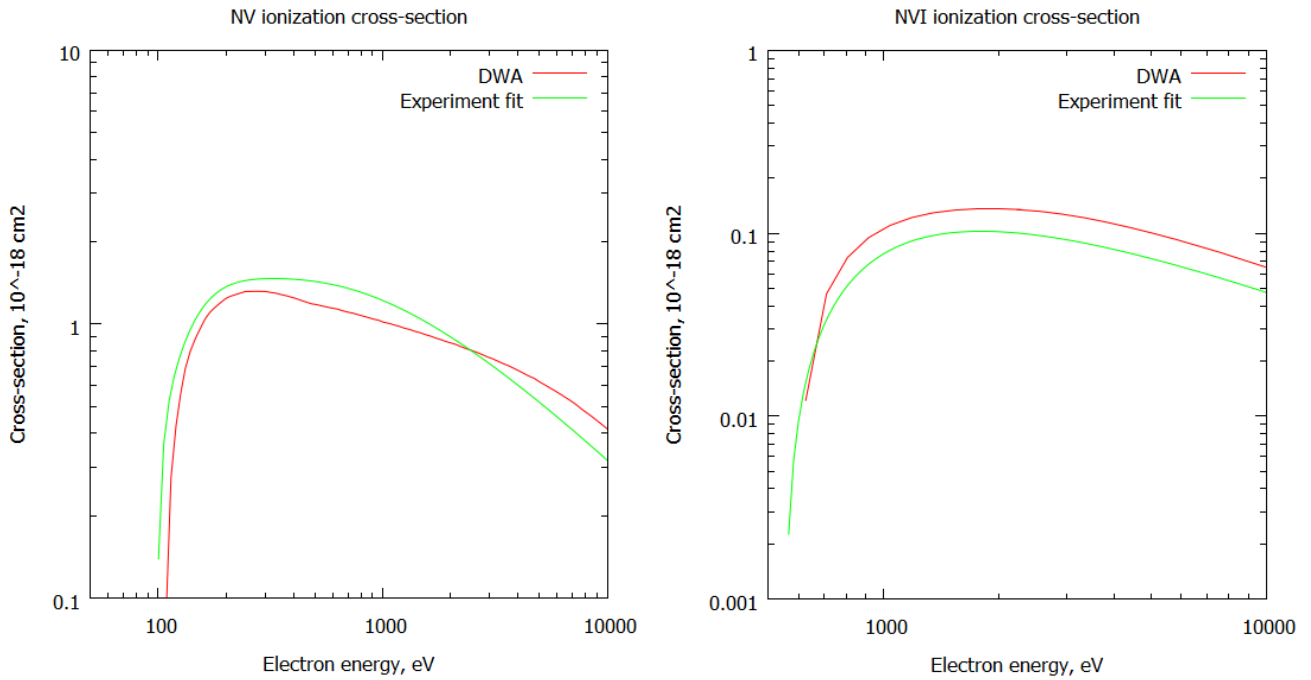


Рис. 1. Сечения ионизации для ионов N V (слева) и N VI (справа), рассчитанные в приближении искаженных волн с потенциалом ХФС (DWA) в сравнении с аппроксимацией экспериментальных данных (Experiment fit) [30]

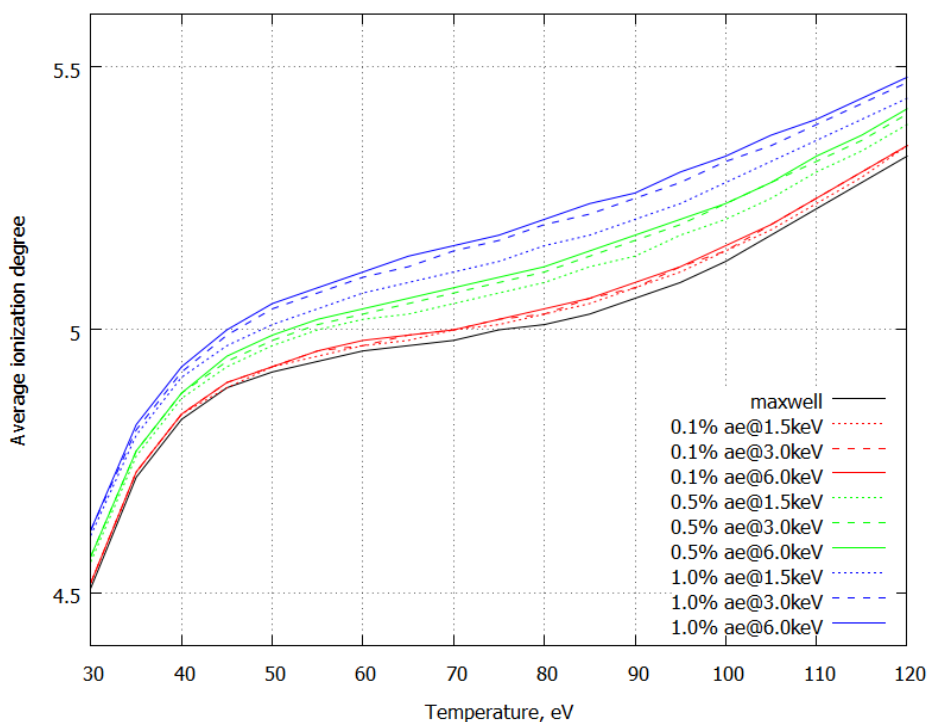


Рис. 2. Средняя степень ионизации плазмы азота как функция температуры при максвелловском распределении электронов (maxwell – черная линия) и с учетом ускоренных электронов с различными относительными долями (от 0.1% до 1% - красная, зеленая и синяя линии) и средними энергиями (от 1.5 до 6 кэВ – пунктирная, штриховая и сплошная линии)

Этим объясняется разница в степенях ионизации максвелловской плазмы и плазмы с учетом влияния ускоренных электронов при температурах свыше 40 эВ с достижением максимального различия в области 70-80 эВ.

Помимо увеличения концентрации сильно заряженных ионов в многозарядной плазме, присутствие надтепловых электронов оказывает влияние на населенности возбужденных уровней состояний ионов в плазме. Основная часть излучения с длиной волны менее 5 нм образуется в резонансных излучательных переходах типа $Xp-1s$ ($X > 1$ – номер оболочки) (рис. 3). В ионах N VI и N VII – это излучательные переходы в основное состояние иона: N VI $2p-1s$ (2.88 нм), $3p-1s$ (2.49 нм), $4p-1s$ (2.37 нм) и т.д., NVII $2p-1s$ (2.48 нм), $3p-1s$ (2.09 нм) и т.д. Таким образом, для диапазона 2.3-4.4 нм максимальный интерес представляют переходы в диапазоне 2.3-3.0 нм и соответствующие им уровни энергии. Также в этот диапазон попадают переходы между возбужденными состояниями ионов N IV – N VI, например $1s2s2p3p-1s^22s3p$ в N IV. Населенности таких состояний крайне малы, однако переходы подобного типа все же могут быть реализованы и давать небольшой вклад в общий спектр излучения. Важно отметить, что переходы $3p-1s$ и выше в ионе NVII выпадают из необходимого спектрального диапазона. Отсюда можно сделать вывод, что повышенная концентрация ионов N VII при снижении доли ионов N VI снижает эффективность генерации излучения плазмы в диапазоне 2.3-3.0 нм.

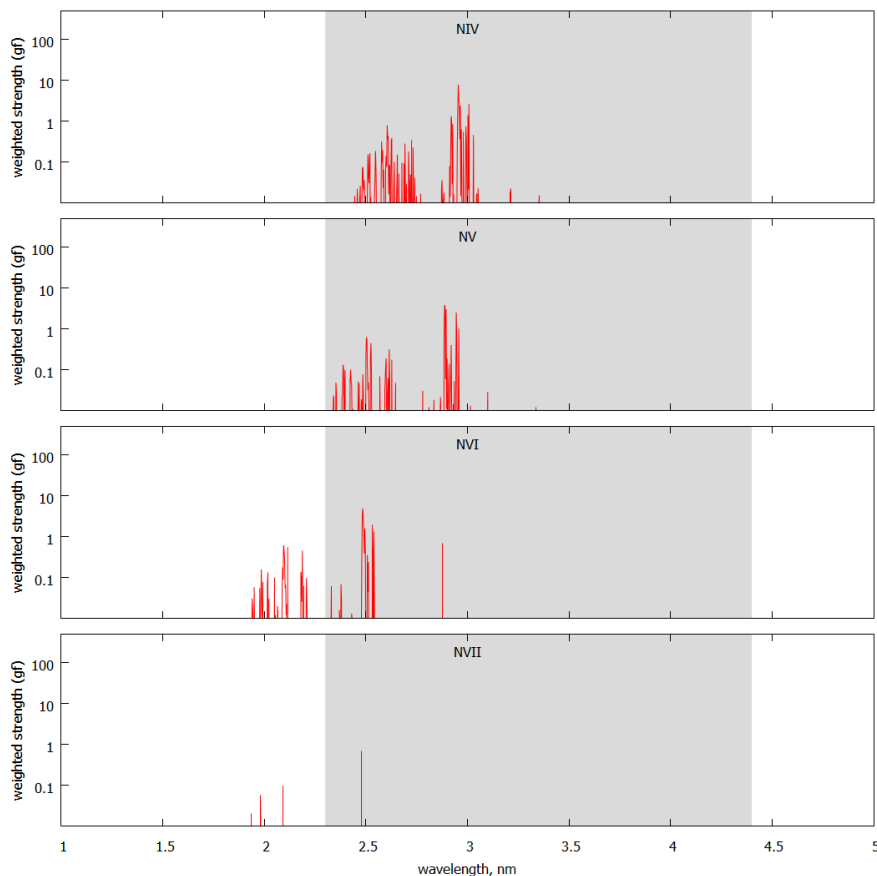


Рис. 3. Силы осцилляторов для излучательных переходов в ионах N IV - N VII (серым фоном отмечен диапазон 2.3-4.4 нм)

Результаты расчетов спектральной излучательной способности в связно-связанных переходах показывают, что присутствие высокоэнергетичных электронов способно значительно увеличить выход излучения в диапазоне 2.3-3.0 нм при температурах плазмы ниже 80 эВ (рис. 4-5). Например, при температуре 40 эВ спектральная эффективность (отношение мощности в заданном спектральном диапазоне к полной мощности излучения) в максвелловской плазме составляет 0.04%, при наличии 0.5% доли ускоренных электронов со средней энергией 2 кэВ и 4 кэВ эта величина составляет 0.6%, и 1.2% при 1% доле ускоренных электронов с энергией 1.5 кэВ. Вклад вносят как резонансные переходы в ионе N VI, так и сателлиты между возбужденными состояниями. Для плазмы с температурой 60 эВ прибавка в мощности излучения в рассматриваемом диапазоне хотя и менее выражена, но существенна: величина спектральной эффективности составляет 5.5% для 1% доли ускоренных электронов с энергией 1.5 кэВ в сравнении с эффективностью 2.8% в плазме без ускоренных электронов.

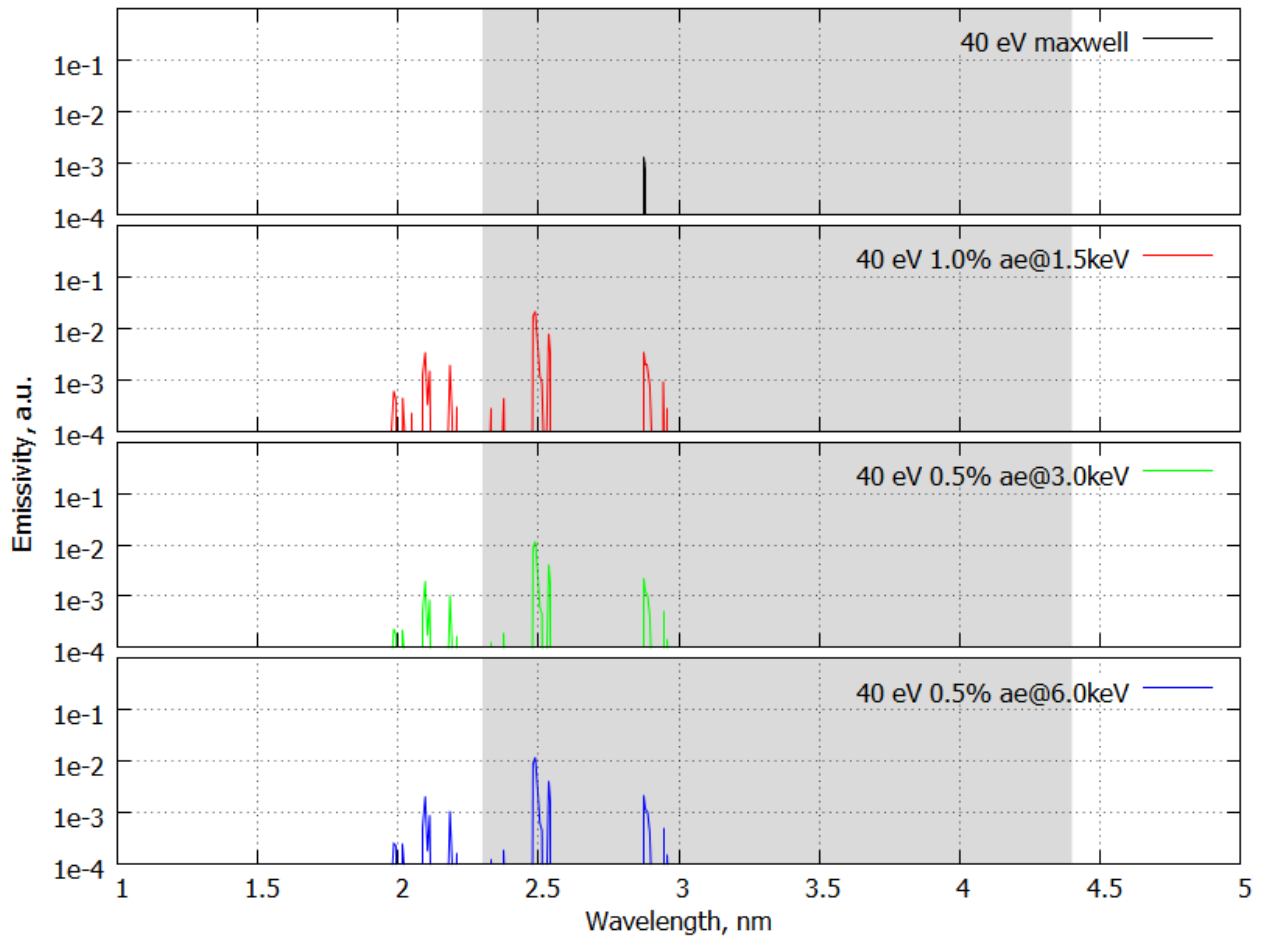


Рис. 4. Излучательная способность плазмы в связно-связанных переходах при температуре 40 эВ для теплового распределения электронов (maxwell – черная линия) и с учетом ускоренных электронов с долями 1% и 0.5% и средними энергиями 1.5, 3 и 6 кэВ (красная, зеленая и синяя линии)

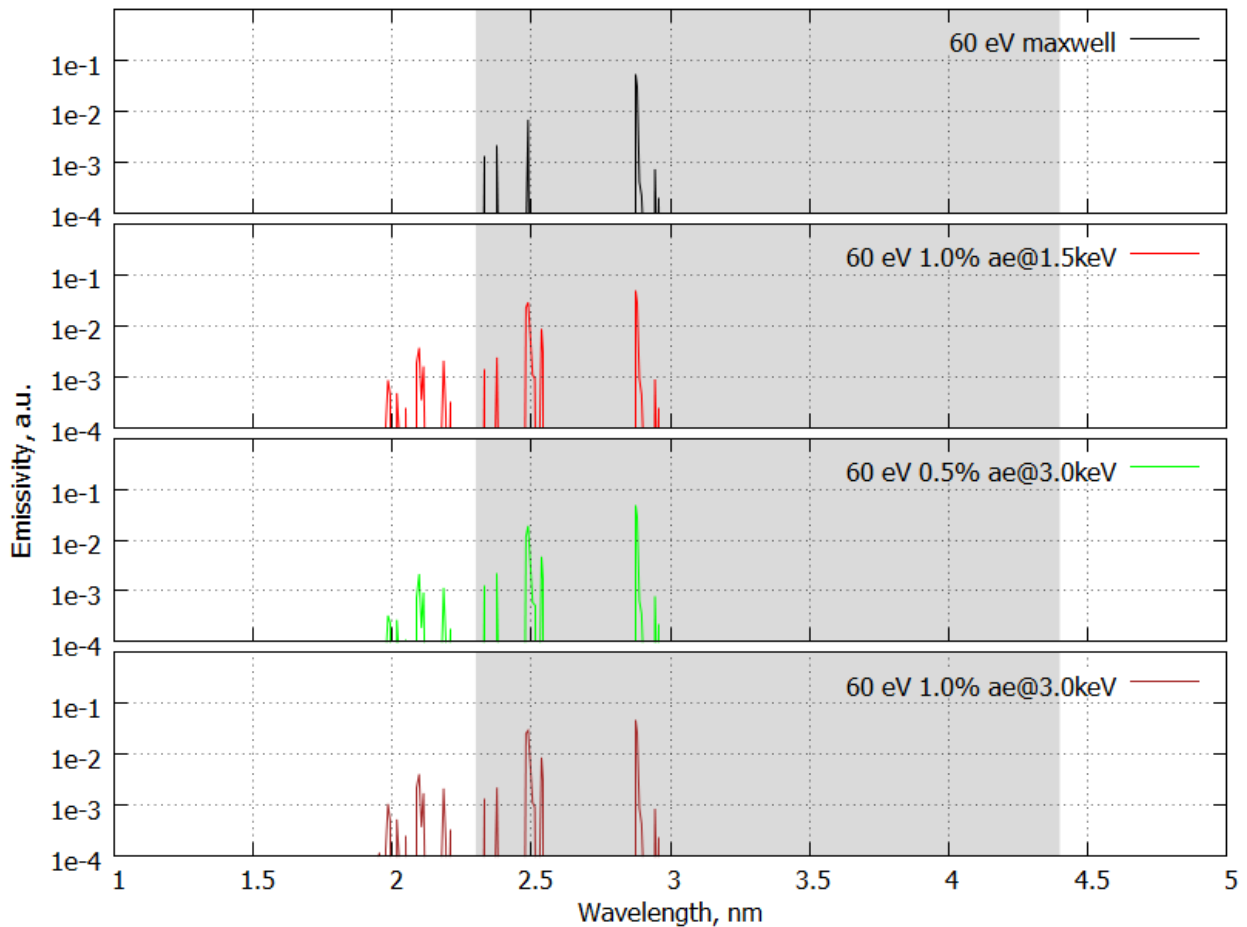


Рис. 5. Излучательная способность плазмы в связно-связанных переходах при температуре 60 эВ для теплового распределения электронов (maxwell – черная линия) и с учетом ускоренных электронов с долями 1% и 0.5% и средними энергиями 1.5 и 3 кэВ (красная, зеленая и коричневая линии)

С дальнейшим ростом температуры, соответствующим ростом доли N VII ионов и снижением концентрации ионов N VI значительная доля выходящего излучения находится в левой части спектра и выпадает из необходимого спектрального диапазона (рис. 6). Это приводит к уменьшению разницы между значениями спектральной эффективности в плазме с ускоренными электронами (6.1% – для 0.5% доли ускоренных электронов с энергией 3 кэВ и 6.7% – для 1% доли ускоренных электронов со средней энергией 1.5 кэВ) и максвелловской плазмы (5.5%).

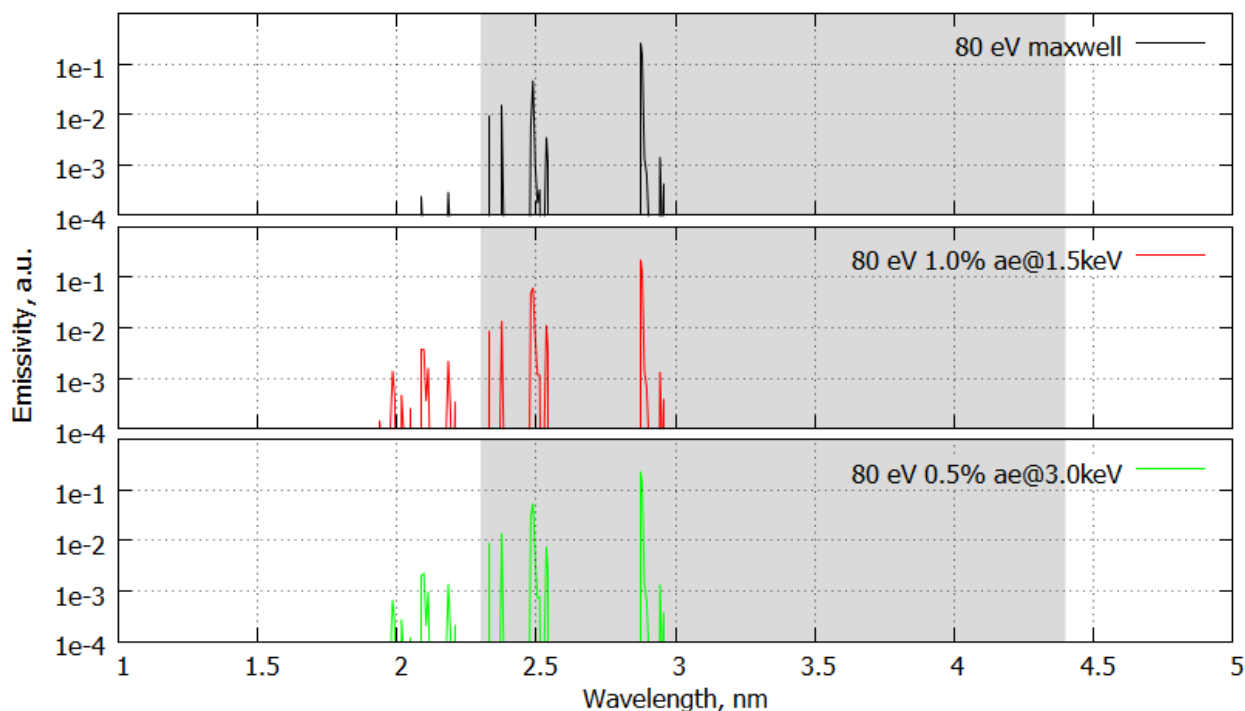


Рис. 6. Излучательная способность плазмы в связно-связанных переходах при температуре 80 эВ для теплового распределения электронов (maxwell – черная линия) и с учетом ускоренных электронов с долями 1% и 0.5% и средними энергиями 1.5 и 3 кэВ (красная и зеленая линии)

5. Заключение

Ранее было показано, что присутствие ускоренных электронов способно существенно повлиять на ионизационный состав плазмы средних и тяжелых элементов, населенности излучательных уровней и значительно повысить эффективность генерации излучения в нанометровом диапазоне [16, 20]. По результатам проведенного моделирования азотной плазмы источников излучения в диапазоне 2.3-4.4 нм наличие ускоренных электронов в плазме позволяет достичь многократного увеличения спектральной эффективности излучения в диапазоне 2.3-3.0 нм для температуры плазмы около 40-50 эВ. Почти двукратный рост спектральной эффективности наблюдается при температуре 60 эВ и 1% доле ускоренных электронов со средней энергией 1.5 кэВ, что составляет менее 15% от полной энергии электронов в плазме. И только при температуре азотной плазмы свыше 80 эВ малая добавка ускоренных электронов не сильно сказывается на увеличении мощности излучения в рассматриваемом спектральном диапазоне. Это указывает на возможность значительно снизить мощность накачки плазменного источника излучения лазером или разрядом при создании условий для генерации надтепловых электронов, т.к. увеличение температуры плазмы требует несоизмеримо большего увеличения необходимого энергозатрата из-за роста ионизационных и радиационных потерь ($\sim T^4$).

Библиография

- [1] Böwering N.R. et al. Performance results of laser-produced plasma test and prototype light sources for EUV lithography // Journal of Micro/Nanolith. MEMS MOEMS. 2009, 8(4), 041504.
- [2] Izawa Y. et al. EUV light source by high power laser // Journal of Physics: Conference Series. 2008, 112, 042047.
- [3] Bartnik A., Fiedorowicz H. and Wachulak P. Spectral investigations of photoionized plasmas induced in atomic and molecular gases using nanosecond extreme ultraviolet (EUV) pulses // Phys. of plasmas. 2014, 21, 073303.
- [4] Juschkin L. et al. EUV emission from Kr and Xe capillary discharge plasmas // J. Phys. D: Appl. Phys. 2002, 35, 219-27.
- [5] Choi P. et al. High-radiance extreme-ultraviolet light source for actinic inspection and metrology // Journal of Micro/Nanolithography, MEMS, and MOEMS. 2012, 11(2), 021107-1-15.
- [6] Wyndham E.S. et al. Fast plasma discharge capillary design as a high power throughput soft x-ray emission source // Rev Sci Instrum. 2010, 81, 093502.
- [7] Борисов В.М. и др. Мощный источник света в экстремальном УФ диапазоне (13.5 нм) // Квантовая электроника. 2010, 40, 720.
- [8] Tobin I. et al. Laser triggered Z-pinch broadband extreme ultraviolet source for metrology // Applied Physics Letters. 2013, 102, 203504.
- [9] Zakharov V.S. et al. Laser-initiated discharge between ablated liquid metal rotating disk electrodes // Proc. of 19th Int. Conf. on High-Power Particle Beams and 4th Euro-Asian Pulsed Power Conf. (Karlsruhe). 2012, 292-5.
- [10] Duderstadt J.J. and Moses G.A. Inertial Confinement Fusion. New York: Wiley, 1982.
- [11] Mond M. et al. Ionization waves in electron-beam-assisted, shielded capillary discharge // Phys. Rev. E. 2000, 62, 5603-17.
- [12] Бойченко А.М. и др. Кинетическая модель ArF-лазера // Квант. электрон. 1992, 19(5), 486-91.
- [13] Ralchenko Y., Feldman U. and Doschek G.A. Is There a High-Energy Particle Population in the Quiet Solar Corona? // The Astrophysical Journal. 2007, 659, 1682.
- [14] Li B. et al. XUV spectra of laser-produced zirconium plasmas // J. Phys. B: Atomic, Molecular and Optical Physics. 2012, 45, 245004.
- [15] Zakharov V. and Zakharov S. Emission Properties of Non-equilibrium Zirconium Plasma in Soft X-ray Region // Proc. of 2012 International Workshop on EUV Sources (Dublin). 2012, S33.
- [16] Zakharov S.V. et al. Plasma dynamics in a hollow cathode triggered discharge with the influence of fast electrons on ionization phenomena and EUV emission // Plasma Sources Sci. Technol. 2008, 17, 024017.

- [17] Peth C., Barkusky F. and Mann K. Near-edge x-ray absorption fine structure measurements using a laboratory-scale XUV source // *J. Phys. D: Appl. Phys.* 2008, 41, 105202.
- [18] Fahad Nawaz M. et al. Focusing and photon flux measurements of the 2.88-nm radiation at the sample plane of the soft x-ray microscope, based on capillary discharge source (EUV and X-ray Optics: Synergy between Laboratory and Space IV) // *Proc. SPIE.* 2015, 9510, 951014.
- [19] Bayer A. et al. Applications of Compact Laser-Driven EUV/XUV Plasma Sources // *X-Ray Optics and Instrumentation.* 2010, 687496.
- [20] Zakharov V. Emission properties of non-equilibrium krypton plasma in the water-window region // *J. Phys. D: Appl. Phys.* 2017, 50, 035202.
- [21] Vrba P. et al. XUV radiation from gaseous nitrogen and argon target laser plasmas // *Journal of Physics: Conf. Series.* 2011, 370, conference 1, 012049.
- [22] Wachulak P.W. et al. "Water window" compact, table-top laser plasma soft X-ray sources based on a gas puff target // *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B.* 2010, 268, 1692-1700.
- [23] Müller M. et al. Emission properties of ns and ps laser-induced soft x-ray sources using pulsed gas jets // *Optics Express.* 2013, 21, 12831-42.
- [24] Vrba P. et al. Nitrogen capillary plasma as a source of intense monochromatic radiation at 2.88 nm // *Journal of Electron Spectroscopy and Related Phenomena.* 2014, 196, 24-30.
- [25] Новиков В.Г., Соломянная А.Д., Захаров В.С. Квантово-статистические методы расчета оптических и термодинамических свойств плотной плазмы // *Энциклопедия низкотемпературной плазмы Том VII-1 Ч. 2. Математическое моделирование в низкотемпературной плазме; Серия Б / Под ред. Фортова В.Е. Москва: Янус-К, 2008. 378-435.*
- [26] Никифоров А.Ф., Новиков В.Г., Уваров В.Б. Квантово-статистические модели высокотемпературной плазмы и методы расчета росселандовых пробегов и уравнений состояния. Москва: Физматлит, 2000.
- [27] Вайнштейн В.А., Собельман И.И., Юков Е.А. Возбуждение атомов и уширение спектральных линий. Москва: Наука, 1979.
- [28] Gu M.F. The flexible atomic code // *Canadian Journal of Physics.* 2008, 86, 675-689.
- [29] Захаров В.С., Новиков В.Г. Моделирование ионизационного состава плазмы аргона с учетом быстрых электронов // *Мат. моделирование.* 2008, 20(10), 3-13.
- [30] Bell K.L. et al. Recommended data on the electron impact ionization of light atoms and ions // *J. Phys. Chem. Ref. Data.* 1983, 12(4), 891-916.
- [31] Vrba P. et al. Modeling of ns and ps laser-induced soft X-ray sources using nitrogen gas puff target // *Physics of Plasmas.* 2014, 21, 073301.
- [32] Valenzuela J.C., Wyndham E.S. and Favre M. Time-resolved study of the extreme-ultraviolet emission and plasma dynamics of a sub-Joule, fast capillary discharge // *Physics of Plasmas.* 2015, 22, 083501.

- [33] Valdivia M.P., Wyndham E. and Favre M. Hollow Cathode Electron Beam Formation and Effects on X-Ray Emission in Capillary Discharges // IEEE Transactions on Plasma Science. 2015, 43, 2553-7.
- [34] Nilson P.M. et al. High-intensity laser-plasma interactions in the refluxing limit // Phys. Plasmas. 2008, 15, 055308.

Оглавление

Введение	3
1. Модель кинетики плазмы многозарядных ионов	5
2. Скорости атомных процессов	6
3. Сечения столкновительных процессов.....	7
4. Результаты расчетов и обсуждение.....	10
5. Заключение	16
Библиография.....	17