



ИПМ им.М.В.Келдыша РАН • Электронная библиотека

Препринты ИПМ • Препринт № 57 за 2022 г.



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

**А.А. Новиков, Д.А. Ким,
И.Ю. Вичев, А.Д. Соломянная,
А.С. Грушин, Б.Л. Ярцев**

**Численное исследование
излучающей плазмы ксенона**

Статья доступна по лицензии
Creative Commons Attribution 4.0 International



Рекомендуемая форма библиографической ссылки: Численное исследование излучающей плазмы ксенона / А.А. Новиков [и др.] // Препринты ИПМ им. М.В.Келдыша. 2022. № 57. 15 с.
<https://doi.org/10.20948/prepr-2022-57>
<https://library.keldysh.ru/preprint.asp?id=2022-57>

О р д е н а Л е н и н а
ИНСТИТУТ ПРИКЛАДНОЙ МАТЕМАТИКИ
имени М.В.Келдыша
Российской академии наук

А.А. Новиков, Д.А. Ким, И.Ю. Вичев,
А.Д. Соломянная, А.С. Грушин, Б.Л. Ярцев

Численное исследование излучающей
плазмы ксенона

Москва — 2022

Новиков А.А., Ким Д.А., Вичев И.Ю., Соломянная А.Д., Грушин А.С., Ярцев Б.Л.

Численное исследование излучающей плазмы ксенона

В представленной работе проводится численное исследование спектральных свойств плазмы ксенона при различных параметрах (температура, плотность, давление) в рамках приближения Саха-Больцмана. Для расчётов использовались заранее подготовленные базы атомных данных с различной степенью детализации состояний ионов. Учитывался эффект снижения потенциалов ионизации. Были получены спектральные коэффициенты поглощения и излучательная способность, а также спектральный поток энергии излучения для однородной плазмы в сферически симметричной геометрии. Проведена идентификация сильных спектральных линий в интересующих диапазонах длин волн.

Ключевые слова: плазма ксенона, спектр излучения, приближение Саха-Больцмана, снижение потенциалов ионизации, численное моделирование

Andrey Alekseevich Novikov, Dmitrii Andreevich Kim, Ilia Yurievich Vichev, Anna Dmitrievna Solomyannaya, Alexander Sergeevich Grushin, Boris Leonidovich Iartsev

Numerical study of radiating xenon plasma

In this paper numerical simulation of the spectral properties of xenon plasma is carried out for various parameters (temperature, density, pressure) within the framework of the Saha-Boltzmann approximation. For calculations, pre-prepared atomic databases with varying degrees of detail of ion states were used. The effect of ionization potential depression was taken into account. The spectral absorption coefficients and emissivity, as well as the spectral radiation energy flux for a homogeneous plasma in a spherically symmetric geometry, were obtained. The identification of strong spectral lines in the wavelength ranges of interest has been carried out.

Key words: xenon plasma, radiation spectrum, Saha-Boltzmann approximation, ionization potential depression, numerical simulation

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 20-31-90085. Вычисления проведены с помощью гибридного суперкомпьютера К-60, установленного в Центре коллективного пользования ИПМ им. М.В. Келдыша РАН, и МВС-10П (МСЦ РАН).

Введение

Источники света на основе оптических разрядов активно изучаются с середины XX века [1, 2, 3]. В последнее время, с появлением эффективных, компактных и более доступных лазеров с диапазоном длин волн порядка $1 \div 10$ мкм, такие источники получили новый импульс развития. В частности большой интерес представляют лампы, основанные на лазерной плазме ксенона. За счёт малого размера, стабильного и непрерывного режима работы, яркого излучения в оптической и ультрафиолетовой частях спектра они получили широкое распространение. Ксеноновые лампы используются в спектральной эллипсометрии [4, 5, 6], для инспекции результатов фотолитографического процесса при производстве микросхем [7, 8], для задач спектроскопии и научных исследований в области излучающей плазмы [9, 10, 11, 12, 13], для медицинских приложений, где особенно востребован диапазон коротковолнового ультрафиолетового излучения [14, 15, 16], при обработке поверхностей деталей в машиностроении [17, 18, 19] и во многих других областях науки и техники. Нахождение оптимальных параметров работы таких источников – актуальная задача. Одним из наиболее эффективных инструментов при её решении является численное моделирование спектральных характеристик с высокой точностью.

Наиболее общим методом численного исследования свойств излучающей плазмы является столкновительно-излучательная модель, которая позволяет определить вероятности состояний ионов различной кратности с учётом скоростей переходов между ними [20, 21]. В частном случае локального термодинамического равновесия применима модель Саха-Больцмана, существенно упрощающая вычисления [22]. Для моделирования спектра излучения плазмы необходимо знать максимально точно набор состояний ионов, которые реализуются при конкретных температуре, плотности и поле излучения. В Институте прикладной математики им. М.В. Келдыша РАН создан комплекс программ THERMOS, позволяющий рассчитывать населённости и спектральные характеристики плазмы различных веществ в широком диапазоне параметров и в различных приближениях [22, 23, 24, 25].

В данной работе представлены результаты моделирования спектра излучения лазерной плазмы ксенона, полученные с помощью кодов, входящих в состав вычислительного комплекса программ THERMOS. Расчёты проводились с целью определения параметров плазмы, соответствующих экспериментальному спектру, измеренному в Институте спектроскопии РАН. Удалось подобрать значения температуры и плотности, при которых расчётный спектр и экспериментальный близки.

Постановка задачи

На базе Института спектроскопии РАН был разработан ксеноновый источник света. Он представляет собой кварцевую колбу диаметром 4 мм, в которую

закачан ксенон под давлением 15 атм. Зажигание плазмы инициируется внешним непрерывным лазером накачки мощностью 30 Вт. В рабочих условиях давление повышается до 30 – 40 атм. Диаметр образующейся плазмы $d \approx 1$ мм. В ходе эксперимента была измерена спектральная яркость источника в направлении, перпендикулярном оси лазера (см. рис. 1). Результат эксперимента приведён на рис. 2.

Была поставлена задача – численно воспроизвести экспериментальный спектр с максимально возможной точностью, подобрав диапазон температуры и плотности.

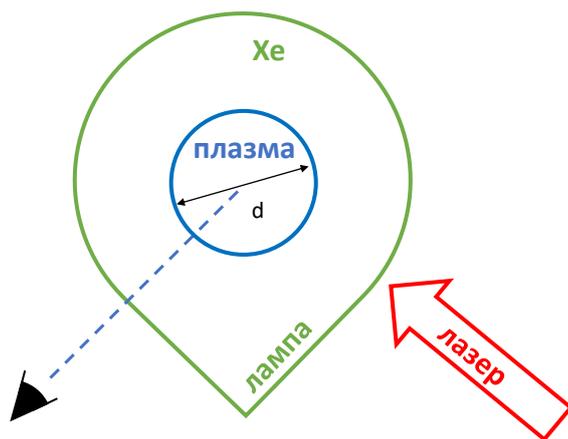


Рис. 1. Схема эксперимента

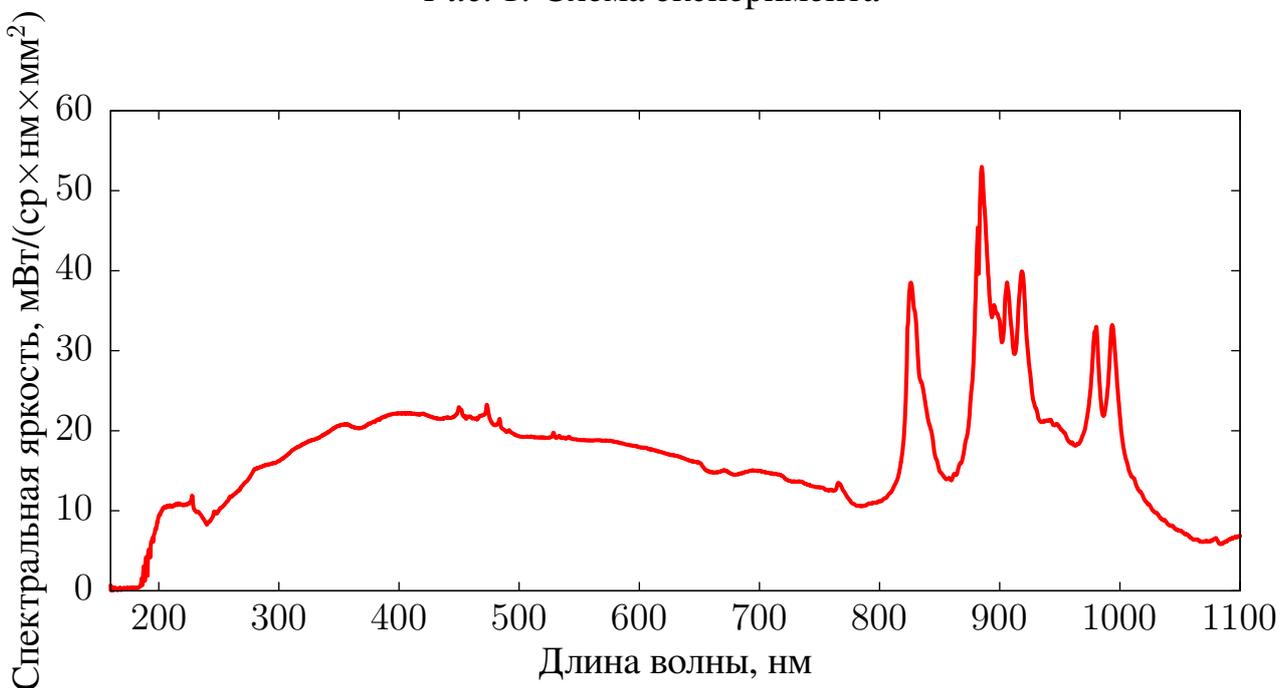


Рис. 2. Экспериментальная спектральная яркость ксенонового источника

Используемая модель

Для моделирования спектра излучающей плазмы в общем случае требуется использовать столкновительно-излучательную модель, где необходимо решать

громоздкую систему уравнений поуровневой кинетики [22, 20, 21]. В случае если плазма близка к равновесной, возможно использование приближения Саха-Больцмана, которое позволяет существенно сократить время счёта [25].

В равновесной плазме в приближении Саха-Больцмана для определения вероятностей x_{ks} используется следующее соотношение:

$$Z_0 \frac{x_{k+1,p}}{x_{ks}} = \frac{2}{3} \sqrt{\frac{2}{\pi}} r_0^3 \theta^{3/2} \frac{g_{k+1,p}}{g_{ks}} \exp\left(-\frac{E_{k+1,p} - E_{ks}}{\theta}\right), \quad (1)$$

где Z_0 – средний заряд плазмы, r_0 – радиус атомной ячейки, θ – температура плазмы, k – кратность ионизации, s – номер состояния, g_{ks} – статистический вес, E_{ks} – энергия состояния ks . Уравнение (1) дополняется соотношениями:

$$\sum_{ks} x_{ks} = 1, \quad \sum_{ks} kx_{ks} = Z_0.$$

Используя сечения процессов в плазме и найденные вероятности, можно найти спектральный коэффициент поглощения [21]:

$$\begin{aligned} \kappa_\omega = n_i \left\{ (1 - e^{-\omega/\theta}) \left[\sum_{ks} x_{ks} \sum_{ks'} \sigma_{ks,ks'}^{\text{bb}}(\omega) \Phi_{ks,ks'}^{\text{abs}}(\omega) + \right. \right. \\ \left. \left. + \sum_{ks} x_{ks} \sigma_{ks}^{\text{bf}}(\omega) + \sigma^{\text{ff}}(\omega) \right] \right\}, \quad (2) \end{aligned}$$

где n_i – плотность ионов, $\Phi(\omega)$ – профиль спектральной линии, $\sigma^{\text{bb}}(\omega)$, $\sigma^{\text{bf}}(\omega)$, $\sigma^{\text{ff}}(\omega)$ – сечения процессов поглощения в линиях, фотоионизации и тормозного поглощения соответственно. Слагаемое $e^{-\omega/\theta}$ в формуле (2) представляет собой поправку на вынужденное излучение.

Спектральная излучательная способность вычисляется исходя из закона Кирхгофа для равновесной плазмы

$$\begin{aligned} j_\omega &= \kappa_\omega B_\omega, \\ B_\omega(T_r) &= \frac{15\sigma}{\pi^5} \frac{\omega^3}{\exp(\omega/T_r) - 1}, \quad (3) \end{aligned}$$

где σ – постоянная Стефана-Больцмана, T_r – температура излучения.

В случае однородного плазменного шара спектральный поток излучения с

поверхности определяется по формуле:

$$F_{\omega}(r = R) = \pi \frac{j_{\omega}}{\kappa_{\omega}} \left(1 + \frac{e^{-2\kappa_{\omega}R}}{\kappa_{\omega}R} - \frac{(1 - e^{-2\kappa_{\omega}R})}{2(\kappa_{\omega}R)^2} \right), \quad (4)$$

где $R = d/2$ – радиус образующейся плазмы.

При расчётах использовалась детальная база атомных данных, рассчитанная с помощью кода RCG, основанного на модели Хартри-Фока-Слэтера [26]. Сечения фотоионизации и тормозного поглощения вычислялись с использованием приближения Крамерса на основе водородоподобных волновых функций. Для переходов $5p^6 \rightarrow 5p^5$, $5p^56s \rightarrow 5p^5$, $5p^55d \rightarrow 5p^5$, $5p^56p \rightarrow 5p^5$, наиболее влияющих на непрерывную часть спектра в интересующем диапазоне, использовались сечения фотоионизации, рассчитанные по более точной модели, заложенной в код FAC [27].

Важным аспектом данной задачи является наличие плотностных эффектов, таких как уширение спектральных линий, сдвиг границы непрерывного спектра и, соответственно, снижение потенциалов ионизации. В данной работе мы рассматриваем приближение Стюарта-Пьятта для определения величины снижения потенциалов ионизации ΔI^{IPD} (IPD – Ionization Potential Depression) [28].

Результаты моделирования

Прежде чем приступить к моделированию рассматриваемого экспериментального спектра, необходимо определить, к каким ионам ксенона относятся линии излучения. Эта информация позволяет оценить средний заряд плазмы и, соответственно, примерный диапазон температуры и плотности. Идентификация линий излучения выполнялась с использованием детальной атомной базы данных, рассчитанной с помощью кода RCG [26]. Данные были сверены с открытой базой данных NIST [29]. Результаты идентификации приведены на рис. 3. Полученные данные использовались для верификации расчётов положения спектральных линий в приближении промежуточной связи с учётом релятивистских эффектов [30]. Как видно из анализа, в основном на спектре присутствуют переходы между состояниями с главными квантовыми числами $n = 5$ и $n = 6$, соответствующими нейтральному (Xe I) и однократно ионизованному (Xe II) ионам ксенона. Таким образом, средний заряд Z_0 находится в диапазоне значений от 0 до 1. Примерный диапазон значений температуры T и плотности ρ : от 0,5 до 1,5 эВ и от 10^{-5} до 10^{-2} г/см³ соответственно.

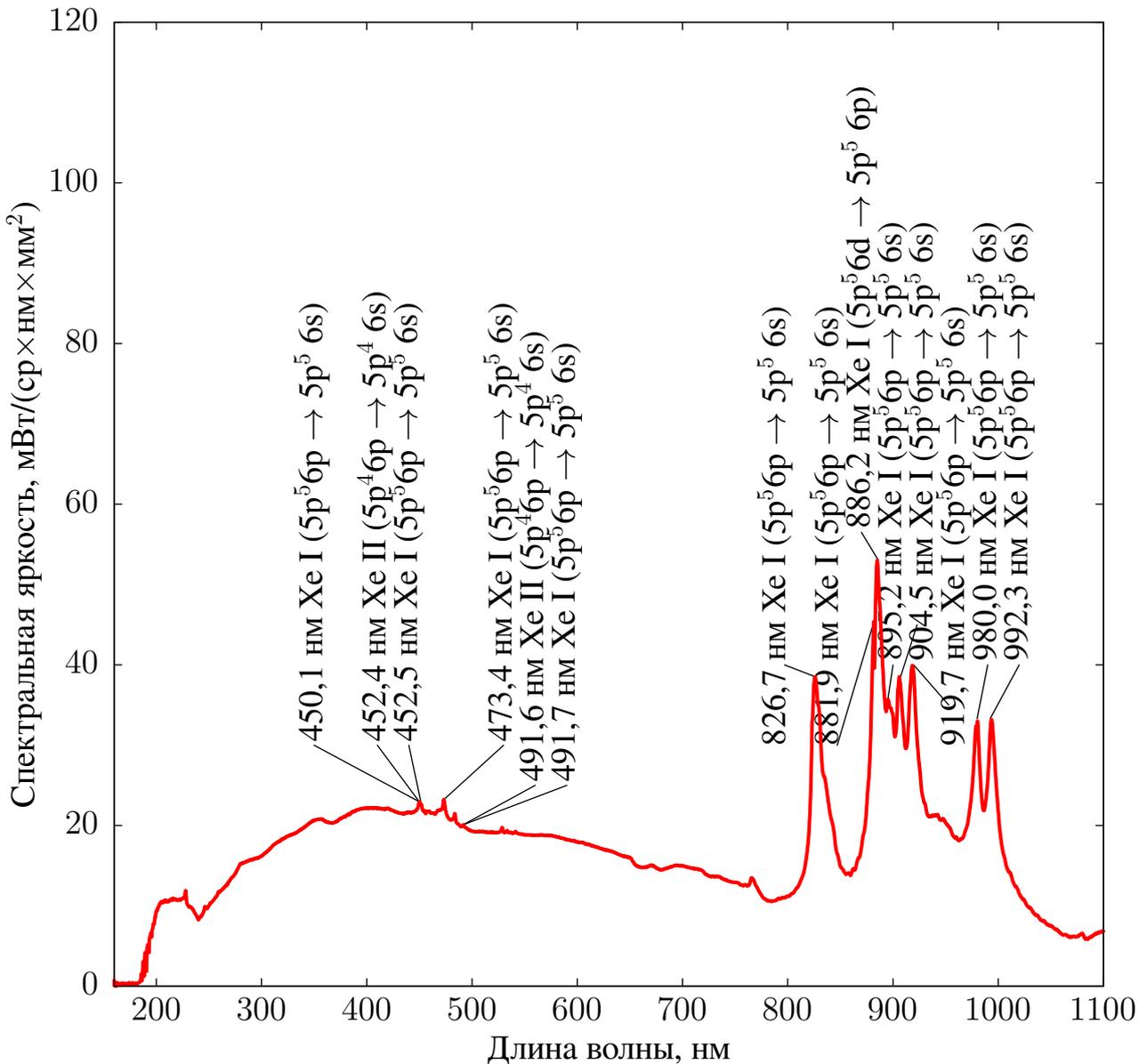


Рис. 3. Экспериментальная спектральная яркость ксенонового источника и идентификация линий

С помощью кода TH_NLTE (входит в комплекс THERMOS), основанного на столкновительно-излучательной модели, были рассчитаны изотермы среднего заряда плазмы ксенона в указанном диапазоне температуры и плотности. Расчёты проводились для случаев прозрачной ($T_r = 0$) и равновесной ($T_r = T$) плазмы (см. рис. 4). Из полученных данных видно, что при рассматриваемых значениях температуры от 0,5 до 1,5 эВ и плотности выше 10^{-4} г/см³ средний заряд, полученный для прозрачной плазмы, совпадает со средним зарядом для равновесной плазмы. Это означает, что при указанных параметрах применимо приближение Саха-Больцмана.

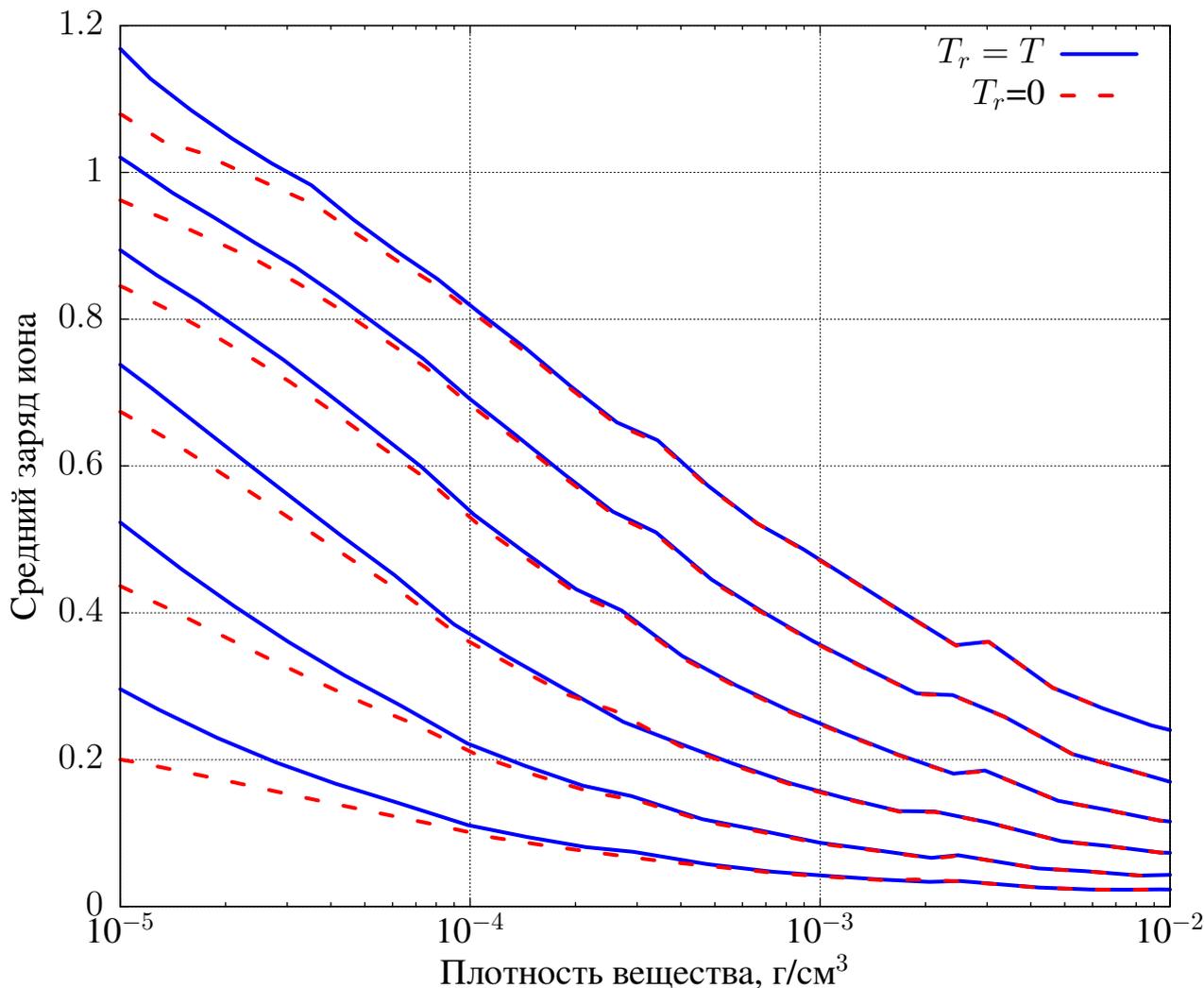


Рис. 4. Изотермы ионизации

Для определения более точных значений плотности с помощью кода THERMOS было получено уравнение состояния ксенона. Связь между температурой, плотностью, средним зарядом и давлением представлена в табл. 1. В таблице серым цветом выделены значения плотностей для трёх рассматриваемых температур, соответствующие рабочему давлению ксеноновой плазмы в лампе. Эти параметры было решено использовать для моделирования спектра излучения.

При выбранных плотностях имеет место эффект снижения потенциалов ионизации. С применением модели Стюарта-Пьятта были рассчитаны величины снижения потенциалов ионизации ΔI^{IPD} и проведена корректировка базы атомных данных. Результатом учёта данного эффекта является исчезновение состояний с большими значениями главного квантового числа n . В табл. 2 зелёным цветом обозначены электронные оболочки, сохранившиеся после процедуры обрезания. Данные представлены для трёх рассматриваемых температур и соответствующих плотностей для нейтрального, однократно и двукратно ионизованных ионов ксенона.

Таблица 1**Зависимость давления от температуры и плотности**

T , эВ	ρ , г/см ³	Z_0	P , атм
0,7	1.00E-03	1.31E-02	5
	1.29E-03	1.15E-02	7
	1.67E-03	1.01E-02	9
	2.15E-03	8.92E-03	11
	2.78E-03	7.85E-03	14
	3.59E-03	6.91E-03	18
	4.64E-03	6.08E-03	24
	5.99E-03	5.36E-03	31
	7.74E-03	4.71E-03	39
	1.00E-02	4.15E-03	51
1,1	1.00E-03	3.34E-01	11
	1.29E-03	3.01E-01	13
	1.67E-03	2.71E-01	17
	2.15E-03	2.43E-01	21
	2.78E-03	2.17E-01	27
	3.59E-03	1.94E-01	34
	4.64E-03	1.73E-01	43
	5.99E-03	1.54E-01	55
	7.74E-03	1.37E-01	70
	1.00E-02	1.21E-01	89
1,5	1.00E-03	8.22E-01	20
	1.29E-03	7.88E-01	25
	1.67E-03	7.51E-01	32
	2.15E-03	7.12E-01	40
	2.78E-03	6.70E-01	51
	3.59E-03	6.27E-01	64
	4.64E-03	5.83E-01	80
	5.99E-03	5.39E-01	100
	7.74E-03	4.96E-01	126
	1.00E-02	4.55E-01	158

На основе скорректированной базы атомных данных были проведены расчёты спектрального потока излучения по формуле (4) в приближении Саха-Больцмана для выбранных значений температуры и плотности. Сопоставление расчётного спектра с экспериментальным показало, что наилучшее согласие имеет место при комбинации двух спектров:

$$F_{\omega}^{(res)} = \alpha F_{\omega}^{(1)} + \beta F_{\omega}^{(2)}, \quad (5)$$

где $F_{\omega}^{(1)}$ соответствует температуре $T = 0,7$ эВ и плотности $\rho = 5,99 \times 10^{-3}$ г/см³, а $F_{\omega}^{(2)}$ соответствует $T = 1,5$ эВ, $\rho = 1,67 \times 10^{-3}$ г/см³. Такой выбор обусловлен сопоставлением линий излучения в диапазоне от 700 до 1100 нм. Подбор коэффициентов $\alpha = 1$ и $\beta = 0,05$ проводился так, чтобы относительные яркости линий совпали с экспериментальными. Такой подход может быть обоснован тем, что в эксперименте плазма неоднородная, имеет горячее ядро и оболочку с меньшей температурой. Расчёт представлен на рис. 5.

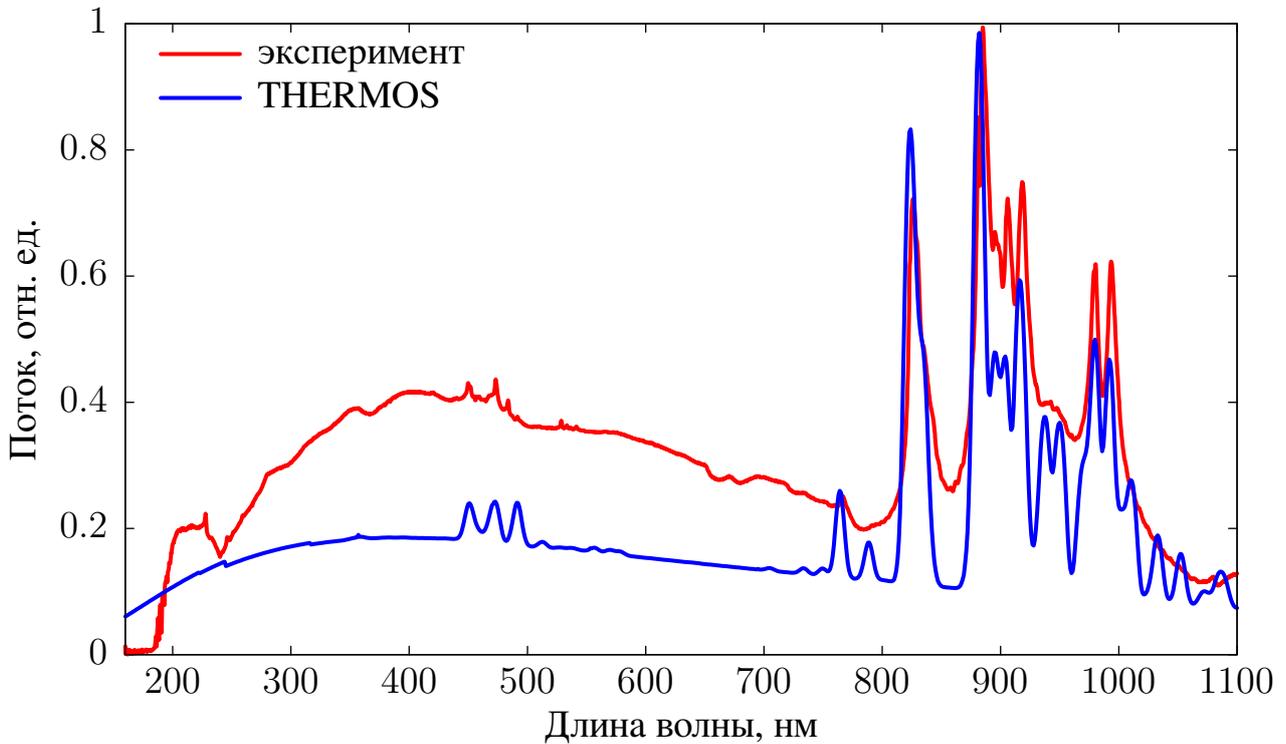


Рис. 5. Сравнение расчёта с экспериментальными данными

Заключение

При помощи программного комплекса THERMOS с использованием модели Саха-Больцмана было проведено моделирование излучающей плазмы ксенона. Расчёты проводились на основе детальной базы атомных данных, которая была скорректирована с учётом плотностных эффектов по модели Стюарта-Пьятта. Основной задачей было определение параметров плазмы в ксеноновой лампе, при которых воспроизводится экспериментально измеренный спектр излучения.

Показано, что хорошее согласие между расчётом и экспериментом достигается при комбинировании двух спектральных функций потока излучения, вычисленных при значениях температуры и плотности $T = 0,7$ эВ, $\rho = 5,99 \times 10^{-3}$ г/см³ и $T = 1,5$ эВ, $\rho = 1,67 \times 10^{-3}$ г/см³. Таким образом, функционал программного комплекса THERMOS может быть задействован в полноценном моделировании подобных источников света на основе лазерной плазмы, например в сочетании с программами радиационной газодинамики, для поиска их оптимальных режимов работы и увеличения эффективности.

Библиографический список

1. Райзер Ю.П. Основы современной физики газоразрядных процессов. М.: Наука, 1980. С. 415.
2. Райзер Ю.П. Физика газового разряда. М.: Наука, 1987. С. 591.
3. Keefer D.R. Laser sustained plasmas / Ed. by L. Radziemski, D. Cremers. In Laser-induced plasmas and applications. NY: Marcel Dekker, 1989. P. 169–206.
4. Рохлин Г.Н. Разрядные источники света. М.: Энергоатомиздат, 1991. С. 720.
5. Flesch P.G. Light and light sources: high intensity discharge lamps. Berlin, Heidelberg: Springer-Verlag, 2006. P. 344.
6. Steinberg M. Laser-Driven Light Sources for Ellipsometry // Hamamatsu News. Vol. 3. 2019. P. 8–9.
7. Трапашко Г. Контроль микро размеров в производстве ИС. Задачи и особенности // Электроника: наука, технология, бизнес. 2011. № 3. С. 96–103.
8. Bezel I., Derstine M., Gross K. et al. High Power Laser-Sustained Plasma Light Sources for KLA-Tencor Broadband Wafer Inspection Tools // 2017 EUVL Workshop. 2017. URL: <https://www.euvlitho.com/2017/S63.pdf>.
9. Rolt S., Clark P., Schmoll J., Shaw B. Xenon arc lamp spectral radiance modelling for satellite instrument calibration // Space Telescopes and Instrumentation 2016: Optical, Infrared, and Millimeter Wave / Ed. by H. MacEwen, G. Fazio, M. Lystrup et al.; International Society for Optics and Photonics. Vol. 9904. SPIE, 2016. P. 99044V.
10. Зимаков В.П., Кузнецов В.А., Соловьев Н.Г. и др. Взаимодействие лазерного излучения ближнего ИК-диапазона с плазмой непрерывного оптического разряда // Физика плазмы. 2016. Т. 42, № 1. С. 74–80. Plasma Physics Reports. 2016. Т. 42. № 1. С. 68–73.
11. Зимаков В.П., Кузнецов В.А., Лаврентьев С.Ю. и др. Новые возможности применения оптических разрядов в аэрофизическом эксперименте // Физико-химическая кинетика в газовой динамике. 2016. Т. 17, № 2. С. 7–7.
12. Boettner E.A., Miedler L.J. Simulating the solar spectrum with a filtered high-pressure xenon lamp // Applied Optics. 1963. Vol. 2, no. 1. P. 105–108.
13. Cremers D.A., Archuleta F.L., Martinez R.J. Evaluation of the continuous optical discharge for spectrochemical analysis // Spectrochimica Acta Part B: Atomic Spectroscopy. 1985. Vol. 40, no. 4. P. 665–679.

14. Котов М.А., Лаврентьев С.Ю., Соловьев Н.Г. и др. Бактерицидное действие коротковолнового УФ, генерируемого плазмой, поддерживаемой лазерным излучением // *Лазеры в науке, технике, медицине*. 2020. С. 159–163. URL: <https://istina.msu.ru/publications/article/344774433/>.
15. Архипов В.П., Камруков А.С., Козлов Н.П., Макаручук А.А. Дистанционное обеззараживание объектов направленным импульсным широкополосным УФ-излучением // *Прикладная физика*. 2016. № 6. С. 102–108.
16. Buonanno M., Randers-Pehrson G., Bigelow A.W. et al. 207-nm UV light-a promising tool for safe low-cost reduction of surgical site infections. I: in vitro studies // *PloS one*. 2013. Vol. 8, no. 10. P. e76968.
17. Багаев С.Н., Грачев Г.Н., Смирнов А.Л. и др. Применение метода лазерно-плазменной модификации поверхности металлов для улучшения триботехнических характеристик цилиндров двигателей внутреннего сгорания // *Обработка металлов (технология, оборудование, инструменты)*. 2014. Т. 62, № 1. С. 14–23.
18. Tokarev A., Bataeva Z., Grachev G. et al. *Laser-Plasma Treatment of Structural Steel // Actual Problems and Decisions in Machine Building*. Vol. 788 of Applied Mechanics and Materials. Trans Tech Publications Ltd, 2015. — 9. P. 58–62.
19. Хомяков М.Н., Пинаев П.А., Стаценко П.А. и др. Получение упрочняющих покрытий из аморфизируемых сплавов Fe-Cr-Si-B-C лазерно-плазменными методами // *Обработка металлов (технология, оборудование, инструменты)*. 2018. Т. 20, № 4. С. 21–34.
20. *Modern Methods in Collisional-Radiative Modeling of Plasmas* / Ed. by Y. Ralchenko. Cham: Springer International Publishing, 2016. Vol. 90 of Springer Series on Atomic, Optical, and Plasma Physics. ISBN: 978-3-319-27512-3.
21. Вичев И.Ю. Столкновительно-излучательная модель неравновесной плазмы с произвольным полем излучения // *Препринты ИПМ им. М.В.Келдыша*. 2022. № 18. С. 31.
22. Nikiforov A.F., Novikov V.G., Uvarov V.B. Quantum-statistical models of hot dense matter. Methods for computation opacity and equation of state. Switzerland: Birkhäuser., 2005. P. 428.
23. Vichev I.Yu., Solomyannaya A.D., Grushin A.S., Kim D.A. On certain aspects of the THERMOS toolkit for modeling experiments // *High Energy Density Physics*. 2019. P. 100713.

24. Ким Д.А., Вичев И.Ю., Соломянная А.Д., Грушин А.С. THERMOS: моделирование нестационарной плазмы неона // Препринты ИПМ им. М.В.Келдыша. 2020. № 58. С. 16.
25. Вичев И.Ю., Грушин А.С., Новиков В.Г., Соломянная А.Д. KIAM_DB: база атомных данных для расчётов спектральных свойств плазмы. ИПМ им. М.В. Келдыша, 2016. URL: <http://keldysh.ru/e-biblio/vichev>.
26. Cowan R.D. The theory of atomic structure and spectra / Ed. by R. Cowan. 1981.
27. Gu M. F. The flexible atomic code // *Can. J. Phys.* 2008. Vol. 86, no. 5. P. 675–689.
28. Stewart J.C., Pyatt K.D. Lowering of Ionization Potentials in Plasmas // *The Astrophysical Journal*. 1966. Vol. 144. P. 1203.
29. Ralchenko Yu., Kramida A.E., Reader J., Team NIST ASD. NIST Atomic Spectra Database (version 5.7.1). [Online]. 2019. URL: <http://physics.nist.gov/asd>.
30. Вичев И.Ю., Ким Д.А., Соломянная А.Д. и др. Расчёт положения спектральных линий в приближении промежуточной связи с учётом взаимодействия конфигураций // Препринты ИПМ им. М.В.Келдыша. 2021. № 66. С. 20.

Оглавление

Введение	3
Постановка задачи	3
Используемая модель	4
Результаты моделирования	6
Заключение	12
Библиографический список	13