

2. Черников В.А. Численный расчет концентрации возбуждённых атомов в гелии¹

Введение

Экспериментальные и теоретические исследования, посвящённые изучению механизмов возбуждения и девозбуждения энергетических уровней в атомах, определению концентрации атомов, возбуждённых до определенного уровня, и степени влияния метастабильных атомов на различные процессы, протекающие в плазме газового разряда, представляют значительный интерес. Это объясняется, прежде всего, тем, что заселённость энергетических уровней (или концентрация атомов, возбуждённых до данного уровня,) самым непосредственным образом определяют излучательные и спектральные характеристики плазмы, знание которых необходимо как с точки зрения диагностики плазмы, так и при создании определенных теоретических плазменных моделей.

Кроме того, исследование механизмов возбуждения энергетических уровней атомов плазмы газового разряда в инертных газах, в молекулярных газах и в смесях газов имеет важное значение для изучения физики лазерного эффекта при создании ОКГ на основе указанных разрядов.

При этом, как при построении теоретических моделей, так и при анализе экспериментальных результатов, исследовалось влияние различных факторов, определяющих характер заселения и расселения энергетических уровней: прямое и ступенчатое возбуждение данного уровня; роль ударов первого и второго рода и спонтанных переходов, определяющих концентрацию атомов, возбуждённых до определённого уровня; взаимодействие возбуждённых атомов между собой и с нейтральными атомами; девозбуждение метастабильных атомов в результате их диффузии из разрядного объёма к стенкам и при их соударениях с невозбуждёнными атомами в смеси газов и т.п.

Теоретическая часть

Как уже отмечалось, практически все спектральные методы диагностики плазмы основаны на измерении интенсивности излучения в линейчатом или смешанном спектрах. Интенсивность спектральной линии, из-

¹ © В.А.Черников, 2012

© Физический факультет МГУ, 2012

лучаемой при переходе с уровня m на уровень n (I_{mn}) связана с числом возбуждённых атомов (N_m) достаточно простым соотношением [1]:

$$I_{mn} = N_m h \nu_{mn} A_{mn}, \quad (1)$$

где ν_{mn} и A_{mn} частота и вероятность спонтанного перехода $m \rightarrow n$. Таким образом, интенсивность линии непосредственно определяется концентрацией атомов на конкретном возбуждённом уровне т.к. остальные величины, входящие в (1) являются константами для данного уровня.

В общем случае для нахождения концентрации возбуждённых атомов необходимо записать уравнение баланса для определённого энергетического уровня, которое должно учитывать все процессы заселения и опустошения данного уровня. К числу таких процессов относятся электронные соударения с атомами, находящимися на основном (прямое возбуждение) или возбуждённом (ступенчатое возбуждение либо девозбуждение) уровнях, явления фотоионизации (расселение) или фоторекомбинации (заселение) для данного уровня, различные индуцированные переходы между уровнями (заселение и расселение), диффузия возбуждённых атомов, взаимодействия возбуждённых атомов между собой, приводящие как к заселению, так и к расселению данного уровня и т. д. Полная запись уравнений баланса для всех энергетических уровней, учитывающая все виды взаимодействий, приводит к системе, состоящей из бесконечного числа уравнений с бесконечным числом неизвестных. Получить решение такой системы практически невозможно.

На практике для получения реальных результатов используют различные модели плазмы, позволяющие рассчитать либо измерять концентрацию атомов, возбуждённых до определённого энергетического уровня. К числу таких моделей, прежде всего, можно отнести корональную модель и модель локального термодинамического равновесия [2].

Основными положениями стационарной корональной модели плазмы являются следующие.

1. Предполагается, что электроны в плазме имеют максвелловское распределение по скоростям.

2. Заселённость возбуждённого уровня определяется равновесием между ударным возбуждением с основного уровня и спонтанными переходами на нижние уровни.

3. Рождение и гибель заряженных частиц в объёме плазмы происходят в результате ударной ионизации с основного уровня и излучательной рекомбинации.

В этих предположениях стационарное уравнение баланса для возбуждённых атомов принимает относительно простой вид:

$$0 = k_{0m} N_0 n_e - \sum_{j \leq m} N_m A_{mj}, \quad (2)$$

где k_{0m} – величина, определяющая скорость заселения m -ого уровня из основного состояния, A_{mj} – вероятность спонтанного перехода с уровня m на j -тый уровень, расположенный ниже рассматриваемого уровня. Из этого соотношения легко определяется число атомов на данном энергетическом уровне:

$$N_m = \frac{k_{0m} N_0 n_e}{\sum_{j \leq m} A_{mj}}, \quad (3)$$

где константа k_{0m} задаётся соотношением:

$$k_{0m} = Const \times \int_{U_{\min}}^{\infty} dE \sqrt{E} \sigma_{0m}(E) f(E), \quad (4)$$

N_0 и n_e – концентрации атомов в основном состоянии и электронов, соответственно, σ_{0m} – сечение возбуждения m -ого уровня из основного состояния, $f(E)$ – функция распределения электронов по энергиям (E), U_{\min} – энергия возбуждения m -ого уровня.

Для метастабильных уровней, учитывая, что спонтанные переходы с этих уровней запрещены, и уменьшение их концентрации происходит только в результате диффузии, получаем аналогичные соотношения:

$$0 = k_{0m} N_0 n_e - \frac{N_m}{\tau_d} \quad (5)$$

и

$$N_m = k_{0m} N_0 n_e \tau_d \quad (6)$$

Или, полагая, что $N_0 = 3.54 \cdot 10^{16} p \text{ см}^{-3}$ и что в качестве исследуемого газа используется гелий, для которого $\tau_d = 0.9 \cdot 10^{-3} p R^2 \text{ с}$ (где давление выражено в Торах, а R – радиус разрядной трубки в см) [3], получаем для обычных уровней:

$$N_p = \frac{k_{0p} \cdot 3.54 \cdot 10^{16} p n_e}{\sum_{j \leq p} A_{pj}} \quad (7)$$

а для метастабильных:

$$N_m = k_{0m} \cdot 3.19 \cdot 10^{13} n_e p^2 \quad (8)$$

Таким образом, в условиях корональной модели концентрация и тех и других уровней растёт прямо пропорционально плотности электронов.

Зависимости же концентрации возбуждённых уровней от давления

различны, так для обычных уровней их число растёт линейно с ростом давления, тогда как плотность метастабильных уровней должна быть, согласно корональной модели, пропорциональна квадрату давления.

На Рис. 1 приведены типичные зависимости (в относительных единицах) концентрации возбуждённых атомов, рассчитанные по формулам (7) и (8).

Используя формулы (7) и (8), полученные в рамках корональной модели, можно сравнительно просто определить соотношение между интенсивностью спектральной линии и параметрами плазмы, в частности, температурой электронов.

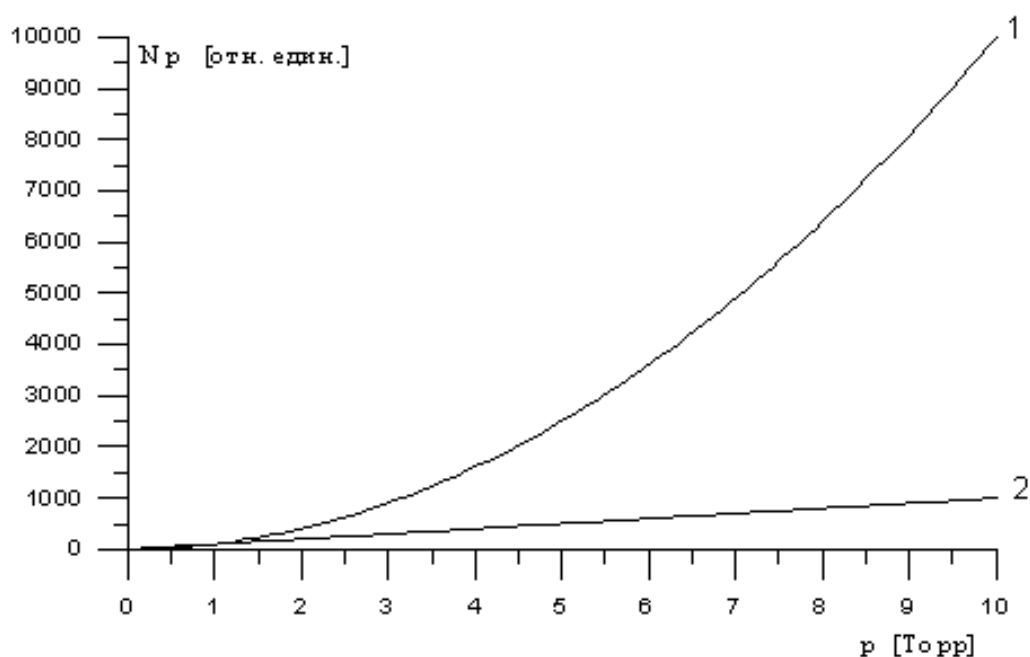


Рис. 1.

Зависимость концентрации возбуждённых атомов от давления:

1 – метастабильные уровни, 2 – обычные уровни.

Критерием применимости корональной модели, очевидно, является условие, при котором расселение данного уровня в результате спонтанных переходов преобладает над расселением за счёт ступенчатых процессов, т. е:

$$\sum_{p < m} N_m A_{mp} \gg \sum_{p \neq m} N_m n_e \langle v(E) \sigma_{mp}(E) \rangle, \quad (9)$$

где символ $\langle \text{---} \rangle$ означает усреднение по соответствующей функции распределения электронов по энергиям, v – скорость электрона.

В модели локального термодинамического равновесия (ЛТР) предполагается, что распределение электронов по энергетическим уровням целиком определяется столкновениями между частицами, а процессы столкновений происходят настолько часто, что при любом изменении условий в плазме соответствующее распределение устанавливается мгновенно. В этом случае каждому процессу можно поставить в соответствие обратный процесс, причём согласно принципу детального равновесия оба процесса протекают с одинаковой скоростью. Распределение электронов по уровням описывается законами статистической физики о равномерном распределении электронов по энергетическим уровням, и для его расчёта не требуется знание эффективных сечений атомных процессов. Поэтому, хотя температура и плотность плазмы могут меняться в пространстве и во времени, распределение электронов по энергетическим уровням в некоторый момент времени в данной точке пространства всецело зависит от температуры, плотности и химического состава плазмы в данном месте.

Согласно основным положениям модели ЛТР функция распределения электронов по энергиям будет максвелловской, а число атомов, возбуждённых до m -ого уровня определяется формулой Больцмана:

$$N_m = N_0 \frac{g_m}{g_0} \exp\left(-\frac{U_m}{kT}\right), \quad (10)$$

где g_0 и g_m – статистические веса основного и возбуждённого уровня, соответственно, U_m – энергия возбуждения m -ого уровня. Таким образом, вычисление концентрации возбуждённых уровней и в модели ЛТР не вызывает особых затруднений.

Критерием применимости модели ЛТР в плазме, очевидно, будет неравенство обратное (9):

$$\sum_{p \neq m} N_m n_e \langle v(E) \sigma_{mp}(E) \rangle \gg \sum_{p < m} N_m A_{mp}, \quad (11)$$

т.е. рассеяющие процессы в результате электронных соударений во много раз превосходят расселение за счёт спонтанных переходов.

Как показывают оценки, выполненные на основании формул (9) и (11) верхняя граница применимости корональной модели плазмы лежит в пределах электронной концентрации $n_e < 10^{11} - 10^{12} \text{ см}^{-3}$, в то время как нижняя граница, начиная с которой можно использовать соотношения модели ЛТР, находится в области $n_e > 10^{17} - 10^{18} \text{ см}^{-3}$.

Таким образом, в пределах изменения плотности электронов $10^{12} < n_e < 10^{17} \text{ см}^{-3}$ применимость обеих моделей для расчёта концентрации возбуждённых атомов практически невозможна.

Для оценки числа возбуждённых атомов в указанных пределах изменения плотности электронов используют другие приближения, в частности, так называемую столкновительно-излучательную модель [2]. Согласно основным положениям этой модели при записи уравнений баланса для энергетических уровней принимаются во внимание как заселяющие и рас-селяющие процессы в результате электронных соударений, так и спонтан-ные излучательные переходы. При этом основная проблема заключается в определении числа расчётных уровней и, следовательно, числа уравнений баланса, входящих в систему.

Физическая и математическая модели численного расчёта концентра-ции возбуждённых атомов

При построении физической модели расчётов рассматривался стаци-онарный газовый разряд в гелии, для которого имеется наиболее полный набор данных, характеризующих константы различных процессов, связан-ных с возбуждением и девозбуждением энергетических уровней.

Для проведения численного моделирования по определению концен-трации возбуждённых атомов использовались следующие приближения.

1. Рассматривались уровни с главным квантовым числом $n = 1, 2, 3, 4$ и 5 . При этом $n = 1$ соответствует основному уровню, а $n = 2, 3, 4$ и 5 – возбуждённым.

2. Для главных квантовых чисел $n = 4, 5$ учитывались лишь **S**, **P**, и **D** уровни. Уровень **F** не принимался во внимание, т. к. спектральные линии, соответствующие переходам с этого уровня на соседний **P** уровень лежат в далекой инфракрасной области.

3. По той же причине не учитывались оптические переходы между **S**, **P**, и **D** уровнями, принадлежащими одному главному квантовому числу $n = 3, 4$ и 5 , в тоже время учитывались оптические переходы между этими уровнями, принадлежащими к различным n (см. Рис. 2). Такой выбор уровней определён тем, что основные интенсивные спектральные линии, излучаемые при переходах между ними, лежат в видимом диапазоне спек-тра, и легко регистрируемы экспериментально.

В таблице 1 приведены наиболее интенсивные линии атома гелия, находящиеся в видимом диапазоне спектра; соответствующие им перехо-ды между уровнями, интенсивности линий в относительных единицах, си-лы осцилляторов (f_m) и вероятности спонтанных переходов (A_{mn}) [4,5].

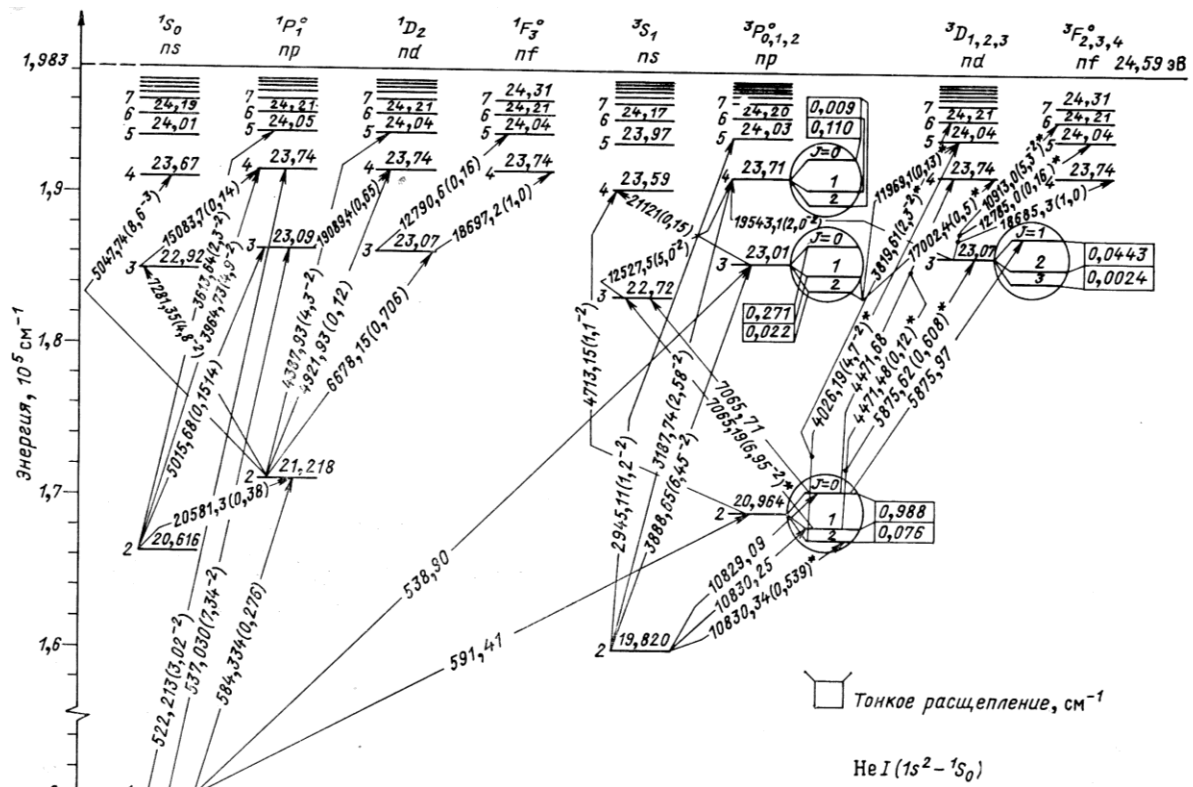


Рис. 2. Схема основных энергетических уровней, концентрация которых определялась при численном расчёте, и соответствующие им оптические переходы.

Таблица 1.

Линия, λ Å	Переход	Интенсивность, отн. единиц.	Сила осциллятора, $f_{mn} \times 10^3$	Вероятность, $A_{mn} \times 10^{-6}, \text{c}^{-1}$
3888,65	$3^3P_{012} - 2^3S_1$	1000	64	9,45
3964,73	$4^1P_1 - 2^1S_0$	20	140	19,89
4026,19	$5^3D_{123} - 2^3P_{012}$	50	47	11,6
4120,82	$5^3S_1 - 2^3P_{012}$	12	3,8	4,5
4387,93	$5^1D_2 - 2^1P_1$	10	43	8,97
4437,55	$5^1S_0 - 2^1P_1$	3	3,2	0,68
4471,48	$4^3D_{123} - 2^3P_{012}$	250	120	24,1
4713,16	$4^3S_1 - 2^3P_{012}$	30	11	9,95
4921,93	$4^1D_2 - 2^1P_1$	20	120	19,9
5015,68	$3^1P_1 - 2^1S_0$	100	150	13,3
5047,74	$4^1S_0 - 2^1P_1$	10	8,7	6,86
5875,62	$3^3D_{123} - 2^3P_{012}$	1700	610	71

6678,15	$3^1D_2 - 2^1P_1$	200	710	64
7065,19	$3^3S_1 - 2^3P_{012}$	500	70	28,2
7281,35	$3^1S_0 - 2^1P_1$	100	49	18,58

2. Основными механизмами заселения и расселения любого уровня считались удары 1–ого и 2–ого рода между электронами и атомами, находящимися как в основном, так и возбуждённом состояниях, и спонтанные переходы с данного уровня на все расположенные ниже. Таким образом, плазма считалась оптически прозрачной, и влияние индуцированных переходов не учитывалось. По той же причине не учитывалась фотоионизация возбуждённых уровней. Кроме того, полагалось, что в результате рекомбинации с излучением электроны попадают на основной уровень, а не на возбуждённые.

3. Не рассматривались процессы ступенчатого возбуждения и девозбуждения между уровнями, принадлежащими одному главному квантовому числу для $n = 3, 4$ и 5 . Такое предположение возможно, т. к. уровни с $n \geq 3$ расположены достаточно близко друг от друга таким образом, что $U_{jk} < E_{cp}$, где U_{jk} – разность энергий между уровнями j и k , а E_{cp} – средняя энергия электрона; в этом случае взаимные переходы между этими уровнями, связанные с ударами 1–ого и 2–ого рода, компенсируют друг друга и не оказывают существенного влияния на изменение концентрации рассматриваемых уровней.

Таблица 2.

Уровень	Обозначения	Энергия возбуждения, В	$\sum_{j < k} A_{jk} \times 10^6 \text{ с}^{-1}$ Расселение
2^3S_1	N_1	19,82	0
2^1S_0	N_2	20,61	0
2^3P_{012}	N_3	20,96	18,5
2^1P_1	N_4	21,22	1800
3^3S_1	N_5	22,78	28,2
3^1S_0	N_6	22,92	18,6
3^1P_1	N_7	23,09	580
3^1D_2	N_8	23,07	64
3^3P_{012}	N_9	23,01	32

3^3D_{123}	N_{10}	23,07	71
4^3S_1	N_{11}	23,59	10,1
4^1S_0	N_{12}	23,67	9,1
4^1P_1	N_{13}	23,74	2220
4^1D_2	N_{14}	23,74	27
4^3P_{012}	N_{15}	23,71	6,9
4^3D_{123}	N_{16}	23,74	2,6
4^1F_3	N_{17}	23,74	12
4^3F_{234}	N_{18}	23,74	12
5^3S_1	N_{19}	23,97	7
5^1S_0	N_{20}	24,01	0,68
5^1P_1	N_{21}	24,04	3,9
5^1D_2	N_{22}	24,04	9
5^3P_{012}	N_{23}	24,03	3,9
5^3D_{123}	N_{24}	24,04	15

4. При записи уравнений баланса для 3^1D_2 и 3^3D_{123} уровней учитывались спонтанные переходы на них с 4^3F_{234} и 4^1F_3 уровней, т. к. вероятности этих переходов относительно велики, и эти процессы могут вносить существенный вклад в заселение уровней 3^1D_2 и 3^3D_{123} . Поэтому дополнительно записывались уравнения баланса для уровней 4^3F_{234} и 4^1F_3 .

5. Для метастабильных атомов гелия учитывалась их диффузия к стенкам разрядной трубки с последующим девозбуждением, в то же время не учитывались столкновительные процессы метастабильных атомов между собой, приводящие к расселению этих уровней.

6. Не учитывалось пространственное распределение частиц как по радиусу, так и по оси разрядной трубки, т.е. численный расчёт проводился для некоторой точки на оси разряда.

В таблице 2. приведены уровни, выбранные для численного расчёта, их обозначения, энергии возбуждения в электроновольтах, а также суммарные константы спонтанных переходов, влияющих на расселение конкретного уровня [4].

В этих предположениях уравнения баланса для выбранных уровней запишутся в следующем виде:

$$\frac{dN_1}{dt} = (k_{01}N_0 - k_{10}N_1)n_e + \sum_{j=2}^{24} [N_j \langle v\sigma_{j1}(E) \rangle - N_1 \langle v\sigma_{1j}(E) \rangle] n_e + \sum_{j=2}^{24} N_j A_{j1} - \frac{N_1}{\tau_{D1}}, \quad (12)$$

$$\begin{aligned} \frac{dN_2}{dt} = & (k_{02}N_0 - k_{20}N_2)n_e + \sum_{j=3}^{24} [N_j \langle v\sigma_{j2}(E) \rangle - N_2 \langle v\sigma_{2j}(E) \rangle] n_e + \sum_{j=2}^{24} N_j A_{j1} + \\ & + [N_1 \langle v\sigma_{12}(E) \rangle - N_2 \langle v\sigma_{21}(E) \rangle] n_e - \frac{N_2}{\tau_{D2}} \end{aligned} \quad (13)$$

$$\begin{aligned} \frac{dN_3}{dt} = & (k_{03}N_0 - k_{30}N_3)n_e + \sum_{j=4}^{24} [N_j \langle v\sigma_{j3}(E) \rangle - N_3 \langle v\sigma_{3j}(E) \rangle] n_e + \sum_{j=4}^{24} N_j A_{j3} + \\ & + \sum_{j=1}^2 [N_j \langle v\sigma_{j3}(E) \rangle - N_3 \langle v\sigma_{3j}(E) \rangle] n_e - \sum_{j=1}^2 N_j A_{3j} \end{aligned} \quad (14)$$

$$\begin{aligned} \frac{dN_4}{dt} = & (k_{04}N_0 - k_{40}N_4)n_e + \sum_{j=5}^{24} [N_j \langle v\sigma_{j4}(E) \rangle - N_4 \langle v\sigma_{4j}(E) \rangle] n_e + \sum_{j=5}^{24} N_j A_{j4} + \\ & + \sum_{j=1}^3 [N_j \langle v\sigma_{j4}(E) \rangle - N_4 \langle v\sigma_{4j}(E) \rangle] n_e - \sum_{j=1}^3 N_j A_{4j} \end{aligned} \quad (15)$$

для $p = 5 - 10$:

$$\begin{aligned} \frac{dN_p}{dt} = & (k_{0p}N_0 - k_{p0}N_p)n_e + \sum_{j=11}^{24} [N_j \langle v\sigma_{jp}(E) \rangle - N_p \langle v\sigma_{pj}(E) \rangle] n_e + \sum_{j=11}^{24} N_j A_{jp} + \\ & + \sum_{j=1}^4 [N_j \langle v\sigma_{jp}(E) \rangle - N_p \langle v\sigma_{pj}(E) \rangle] n_e - \sum_{j=1}^4 N_j A_{pj} \end{aligned} \quad (16)$$

для $p = 11 - 18$:

$$\begin{aligned} \frac{dN_p}{dt} = & (k_{0p}N_0 - k_{p0}N_p)n_e + \sum_{j=19}^{24} [N_j \langle v\sigma_{jp}(E) \rangle - N_p \langle v\sigma_{pj}(E) \rangle] n_e + \sum_{j=19}^{24} N_j A_{jp} + \\ & + \sum_{j=1}^{10} [N_j \langle v\sigma_{jp}(E) \rangle - N_p \langle v\sigma_{pj}(E) \rangle] n_e - \sum_{j=1}^{10} N_j A_{pj} \end{aligned} \quad (17)$$

для $p = 19 - 24$:

$$\frac{dN_p}{dt} = (k_{0p}N_0 - k_{p0}N_p)n_e + \sum_{j=19}^{18} [N_j \langle v\sigma_{jp}(E) \rangle - N_p \langle v\sigma_{pj}(E) \rangle] n_e - \sum_{j=1}^{18} N_j A_{pj} \quad (18)$$

где N_0 – концентрация атомов в основном состоянии; k_{0p} и k_{p0} – соответствующие константы возбуждения любого уровня с основного и девозбуждения на основной уровень в результате электронных ударов 1–ого и 2–ого рода; σ_{jp} и σ_{pj} – сечения ступенчатых возбуждений и девозбуждений соответствующего уровня; символ $\langle \text{---} \rangle$ означает усреднение по некоторой функции распределения электронов по энергиям; n_e и v – концентрация и скорость электронов, соответственно.

Первые два уравнения в данной системе записаны для метастабильных уровней атома гелия (2^3S_1 и 2^1S_0), следующие два – для соседних уровней (2^3P_{012} и 2^1P_1); все 4 уровня принадлежат главному квантовому

числу $n = 2$. Следующие 6 уравнений описывают баланс атомов, возбуждённых на уровни с квантовым числом $n = 3$, как уже отмечалось, взаимные переходы между этими уровнями не рассматриваются. Восемь уравнений (17) определяют концентрацию атомов, возбуждённых на уровни с квантовым числом $n = 4$, в том числе, и на уровни (4^3F_{234} и 4^1F_3). Последние 6 уравнений записаны для уровней с квантовым числом $n = 5$.

Первое выражение в скобках в каждом уравнении описывает заселение и расселение данного уровня в результате ударов 1–ого и 2–ого рода между электронами и атомами, находящимися в основном состоянии. Суммы, в которые входят вероятности спонтанных переходов A_{jp} , определяют изменение числа атомов на уровне за счёт радиационных процессов. Следующие суммы записаны для ступенчатых переходов между уровнями, которые приводят как к заселению, так и к опустошению данного уровня. Последние члены в уравнениях (12) и (13) характеризуют диффузионные потери метастабильных атомов из рассматриваемого элемента объёма, τ_{D1} и τ_{D2} соответствующие времена диффузии.

Константы скоростей k_{0p} и k_{p0} возбуждения уровней из основного состояния рассчитывались из усреднения по соответствующей функции распределения электронов по энергиям $f(U)$ [6]:

$$k_{0p} = Const \times \int_{U_{MINP}}^{\infty} dE \sqrt{E} \sigma_{0p}(E) f(E), \quad (19)$$

аналогично для ступенчатых переходов:

$$k_{jp} = Const \times \int_{U_{MINP}}^{\infty} dE \sqrt{E} \sigma_{jp}(E) f(E), \quad (20)$$

где U_{minp} и U_{minjp} – энергии возбуждения уровня p с основного уровня и с j -ого, соответственно, а $v=5.93 \cdot 10^7 \sqrt{E}$ – скорость электронов (U и E – выражены в В).

Для вычисления зависимости от энергии сечения прямого возбуждения $\sigma_{0p}(E)$ использовалась аппроксимация, предложенная В.А. Фабрикантом [7]:

$$\sigma_{0p}(E) = 2.72 \sigma_{max} \frac{E - U_{min}}{U_{max} - U_{min}} \exp\left(\frac{E - U_{min}}{U_{max} - U_{min}}\right) \quad (21)$$

где U_{max} – энергия, соответствующая максимальному значению сечения возбуждения (σ_{max}) для данного уровня p . Аналогичным образом аппроксимировались и сечения ступенчатых возбуждений σ_{jp} при соответствующих значениях U_{minjp} , U_{maxjp} и σ_{maxjp} :

$$\sigma_{0p}(E) = 2.72\sigma_{\max jp} \frac{E - U_{\min jp}}{U_{\max} - U_{\min jp}} \exp\left(\frac{E - U_{\min jp}}{U_{\max jp} - U_{\min jp}}\right) \quad (22)$$

Сечения девозбуждающих соударений (ударов второго рода между возбуждёнными атомами и электронами) определялись из принципа детального равновесия [6]:

$$\sigma_{pj}(E)E = \sigma_{jp}(E + U_{jp})(E + U_{jp}), \quad (23)$$

откуда при условии, что $U_{0p} = U_{p0} = U_{\min}$ получаем:

$$\sigma_{p0}(E) = 2.72\sigma_{\max} \frac{E + U_{\min}}{U_{\max} - U_{\min}} \exp\left(-\frac{E}{U_{\max} - U_{\min}}\right), \quad (24)$$

аналогично при условии, что $U_{jp} = U_{pj} = U_{\min pj}$ для ступенчатых переходов имеем:

$$\sigma_{pj}(E) = 2.72\sigma_{\max jp} \frac{E + U_{\min jp}}{U_{\max jp} - U_{\min jp}} \exp\left(-\frac{E}{U_{\max jp} - U_{\min jp}}\right), \quad (25)$$

Необходимые значения величин σ_{\max} и U_{\max} , входящих в формулы (21 – 25), для некоторых уровней были взяты из работ [4,8], для остальных уровней эти величины рассчитывались согласно формулам, приведённым в монографии К.У. Аллена [5].

Время диффузии для метастабильных атомов определялось соотношением [6]:

$$1/\tau_{D1} = D_1/\Lambda^2, \quad (26)$$

и

$$1/\tau_{D2} = D_2/\Lambda^2, \quad (27)$$

где D_1 и D_2 – коэффициенты диффузии метастабильных атомов, а Λ – так называемая диффузионная длина, для цилиндрического случая:

$$1/\Lambda^2 = (2,4/R)^2, \quad (28)$$

R – радиус разрядной трубки. Коэффициенты диффузии D_1 и D_2 определялись по данным работ [3,9], согласно которым численные значения коэффициентов диффузии метастабильных атомов, определяющие времена их диффузионных потерь, практически одинаковы для обоих уровней, поэтому можно положить:

$$1/\tau_{D1} = 1/\tau_{D2} = 2,45 \times 10^3 \times 1/pR^2, \quad (29)$$

где давление гелия выражается в Торах, а радиус в см.

В качестве функции распределения электронов по энергиям использовалось максвелловское распределение, нормированное на единицу [6]:

$$f(E)dE = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \frac{\sqrt{E}}{(kT_e)^{1,5}} \exp\left(-\frac{E}{kT_e}\right) dE, \quad (30)$$

где T_e – температура электронов.

В стационарном случае левые части уравнений (12–18) равны нулю, и, после сокращения на n_e , окончательно получаем:

$$0 = (k_{01}N_0 - k_{10}N_1) + \sum_{j=2}^{24} [N_j \langle v\sigma_{j1}(E) \rangle - N_1 \langle v\sigma_{1j}(E) \rangle] + \sum_{j=2}^{24} \frac{N_j}{n_e} A_{j1} - \frac{N_1}{n_e \tau_{D1}}, \quad (31)$$

$$0 = (k_{02}N_0 - k_{20}N_2) + \sum_{j=3}^{24} [N_j \langle v\sigma_{j2}(E) \rangle - N_2 \langle v\sigma_{2j}(E) \rangle] + \sum_{j=2}^{24} \frac{N_j}{n_e} A_{j1} + \\ + [N_1 \langle v\sigma_{12}(E) \rangle - N_2 \langle v\sigma_{21}(E) \rangle] - \frac{N_2}{n_e \tau_{D2}} \quad (32)$$

$$0 = (k_{03}N_0 - k_{30}N_3) + \sum_{j=4}^{24} [N_j \langle v\sigma_{j3}(E) \rangle - N_3 \langle v\sigma_{3j}(E) \rangle] + \sum_{j=4}^{24} \frac{N_j}{n_e} A_{j3} + \\ + \sum_{j=1}^2 [N_j \langle v\sigma_{j3}(E) \rangle - N_3 \langle v\sigma_{3j}(E) \rangle] - \sum_{j=1}^2 \frac{N_j}{n_e} A_{3j} \quad (33)$$

$$0 = (k_{04}N_0 - k_{40}N_4) + \sum_{j=5}^{24} [N_j \langle v\sigma_{j4}(E) \rangle - N_4 \langle v\sigma_{4j}(E) \rangle] n_e + \sum_{j=5}^{24} \frac{N_j}{n_e} A_{j4} + \\ + \sum_{j=1}^3 [N_j \langle v\sigma_{j4}(E) \rangle - N_4 \langle v\sigma_{4j}(E) \rangle] n_e - \sum_{j=1}^3 \frac{N_j}{n_e} A_{4j} \quad (34)$$

для $p = 5 - 10$:

$$0 = (k_{0p}N_0 - k_{p0}N_p) + \sum_{j=11}^{24} [N_j \langle v\sigma_{jp}(E) \rangle - N_p \langle v\sigma_{pj}(E) \rangle] + \sum_{j=11}^{24} \frac{N_j}{n_e} A_{jp} + \\ + \sum_{j=1}^4 [N_j \langle v\sigma_{jp}(E) \rangle - N_p \langle v\sigma_{pj}(E) \rangle] - \sum_{j=1}^4 \frac{N_j}{n_e} A_{pj} \quad (35)$$

для $p = 11 - 18$:

$$0 = (k_{0p}N_0 - k_{p0}N_p) + \sum_{j=19}^{24} [N_j \langle v\sigma_{jp}(E) \rangle - N_p \langle v\sigma_{pj}(E) \rangle] + \sum_{j=19}^{24} \frac{N_j}{n_e} A_{jp} + \\ + \sum_{j=1}^{10} [N_j \langle v\sigma_{jp}(E) \rangle - N_p \langle v\sigma_{pj}(E) \rangle] - \sum_{j=1}^{10} \frac{N_j}{n_e} A_{pj} \quad (36)$$

для $p = 19 - 24$:

$$0 = (k_{0p}N_0 - k_{p0}N_p) + \sum_{j=19}^{18} [N_j \langle v\sigma_{jp}(E) \rangle - N_p \langle v\sigma_{pj}(E) \rangle] - \sum_{j=1}^{18} \frac{N_j}{n_e} A_{pj} \quad (37)$$

Методика численного расчёта

Легко показать, что система уравнений (31–37) сводится к системе алгебраических линейных уравнений следующего вида:

$$B_{1.1}X_1 + B_{1.2}X_2 + B_{1.3}X_3 + \dots + B_{1.24}X_{24} = B_{1.0}, \quad (38)$$

$$B_{2.1}X_1 + B_{2.2}X_2 + B_{2.3}X_3 + \dots + B_{2.24}X_{24} = B_{2.0}, \quad (39)$$

$$B_{3.1}X_1 + B_{3.2}X_2 + B_{3.3}X_3 + \dots + B_{3.24}X_{24} = B_{3.0}, \quad (40)$$

$$\dots$$

$$B_{24.1}X_1 + B_{24.2}X_2 + B_{24.3}X_3 + \dots + B_{24.24}X_{24} = B_{24.0}. \quad (41)$$

В этих выражениях: $B_{p0} = k_{0p}N_0$ – свободный член; коэффициент

$B_{jp} = k_{jp} + \frac{N_j}{n_e} \times A_{jp}$ определяет заселение данного уровня p (p -ое уравнение)

с некоторого уровня j в результате ударов первого ($j < p$) и второго ($j > p$) рода и разрешённых спонтанных переходов с уровня j на уровень p . Коэффициенты B_{jj} ($j=p$) являются отрицательными и учитывают потери с данного энергетического уровня p как в результате столкновительных процессов, так и возможных спонтанных переходов на нижележащие уровни, в общем случае:

$$B_{pj} = \sum_{j \neq p} k_{pj} + \sum_{j \leq p} \frac{N_j}{n_e} \times A_{pj}, \quad (42)$$

где k_{jp} и k_{pj} – константы скоростей соответствующих процессов определяются выражениями (19, 20).

Численное решение системы (38–41) осуществлялось по следующей программе. Прежде всего составлялся массив данных, определяющих коэффициенты B_{pj} , для чего рассчитывались интегралы типа (19, 20). Верхний бесконечный предел в этих интегралах заменялся некоторым конечным числом b , значение которого определялось из условия:

$$\int_{U_{\text{MIN}p}}^{b+1} E \times \sigma_{jp}(E) \times f(E) \times dE - \int_{U_{\text{MIN}p}}^b \sqrt{E} \times \sigma_{jp}(E) \times f(E) \times dE \leq 0.00001. \quad (43)$$

Для определения численных значений указанных интегралов верхний предел принимался равным – $b=200$, при этом условие (43) было заведомо выполнено для всех расчётов.

Сечения прямых и обратных столкновительных процессов, как уже указывалось выше, определялись по соответствующим аппроксимационным формулам. При этом интегралы типа (19, 20) рассчитываются для конкретного значения температуры электронов. При численных расчётах использовалась стандартная программа вычисления определённых интегралов, трансформированная на язык программирования Borland C⁺⁺.

После составления массива данных по коэффициентам B_{jp} матрица системы уравнений (38 – 41) оказывается определённой, и решения данной системы находятся по соответствующей стандартной программе.

Согласно приведённой выше системе уравнений, при численном моделировании процесса возбуждения энергетических уровней атома гелия

основными вводными параметрами являются концентрация и температура электронов, а также начальное давление гелия в разрядном объёме. Изменяя в достаточно широких пределах величины этих параметров, можно рассчитать значения концентрации атомов, возбуждённых до определённого уровня, в зависимости от любого вводного параметра, в частности, (что представляет наибольший интерес) от плотности электронов. Кроме того, в программе численного расчёта предусмотрена возможность изменять число уровней (и соответственно, число уравнений, входящих в систему 31–37), которые учитываются при проведении расчёта.

Отметим, что значения концентраций электронов и возбуждённых атомов в системе уравнений (31 – 37) задаются в единицах 10^{10} см^{-3} .

Более подробно о работе с программой изложено в "Руководстве по работе с программой численного расчёта концентрации возбуждённых атомов в гелии".

УПРАЖНЕНИЯ

1. Провести расчёт концентрации атомов, возбуждённых до конкретных энергетических уровней, в зависимости от плотности электронов при фиксированных значениях температуры электронов и давления гелия. Концентрация электронов при этом изменяется в достаточно широком диапазоне, например, от $n_e=10^8 \text{ см}^{-3}$ до $n_e=10^{19} \text{ см}^{-3}$. Построить графики соответствующих зависимостей для метастабильных и обычных уровней. Объяснить полученные результаты.
2. Повторить задание пункта 1 для плотности электронов, изменяющийся от $n_e=10^9 \text{ см}^{-3}$ до $n_e=10^{12} \text{ см}^{-3}$. Сравнить результаты расчёта со значениями, полученными согласно формулам (7), (8), для метастабильных и обычных атомов.
3. Провести расчёты согласно пунктам 1 и 2 для различных начальных давлений гелия при фиксированных значениях температуры и плотности электронов. Построить графики соответствующих зависимостей для метастабильных и обычных уровней. Определить для выбранных условий границы применимости корональной модели плазмы и перехода к модели ЛТР.
4. Провести расчёты концентрации атомов, возбуждённых до определённого уровня для различного числа уравнений, входящих в систему (36–41), для нескольких значений плотности электронов при фиксированных

остальных начальных параметрах. Построить графики зависимости концентрации возбуждённых атомов от числа уровней, для которых проводился расчёт. Объяснить полученные результаты.

5. Провести расчёт концентрации атомов, возбуждённых до конкретных энергетических уровней, в зависимости от плотности электронов, изменяющейся в пределах от $n_e=10^{14} \text{ см}^{-3}$ до $n_e=10^{18} \text{ см}^{-3}$ при фиксированных значениях температуры электронов и давления гелия (не забудьте, что степень ионизации газа не может быть выше 100%). Построить графики изменения концентрации на возбуждённых уровнях в зависимости от энергии уровня. Сравнить расчётные распределения числа атомов по энергетическим уровням со значениями, полученными на основании формулы Больцмана (10). Объяснить полученные результаты.

Примечание. Пределы изменений вводных параметров: концентрации и температуры электронов и давления гелия, а также количество уровней, для которых строятся необходимые зависимости, определяются преподавателем практикума.

Литература

1. С.Э. Фриш. Оптические спектры атомов. Москва. 1963 г.
2. Р. Макуиртер. Спектральные интенсивности. в сб. Диагностика плазмы под ред. Р. Хаддлстоуна и С. Леонарда. М. Мир. 1967г.
3. Н.П. Пенкин, Г.П. Редько. “Диффузия возбужденных атомов в собственном газе и в примесях”. В сб. Спектроскопия газоразрядной плазмы. Вып. 1. стр. 51. Ленинград. 1976 г.
4. Г.А. Касабов, В.В. Елисеев. Спектроскопические таблицы для низкотемпературной плазмы. Справочник. М. Атомиздат. 1973 г.
5. К.У. Аллен. Астрофизические величины. И.Л. Москва. 1960 г.
6. Ю.П. Райзер. Физика газового разряда. М. Наука. 1992 г.
7. В.Л. Грановский. Электрический ток в газе. М. Наука 1952 г.
8. R. Mewe. Positive column in helium. Physics. volume 47. N 3. Стр. 370. 1970 г.
9. Л.М. Волкова, А.М. Девятов, В.М. Шибков, Л.В. Шибкова. Определение констант элементарных процессов с участием метастабильных атомов в распадающейся плазме гелия и в смеси He–Xe. В сб. Метастабильные состояния атомов и молекул и методы их исследования. стр. 3. Чебоксары 1982 г.

Руководство по работе с программой "Численный расчёт концентрации возбуждённых атомов в гелии"

Для запуска программы численного расчёта концентрации возбуждённых атомов необходимо на рабочей панели компьютера дважды щёлкнуть мышкой на ярлыке "HeI". После этого на экране монитора компьютера отображается главное окно программы Рис. 1.

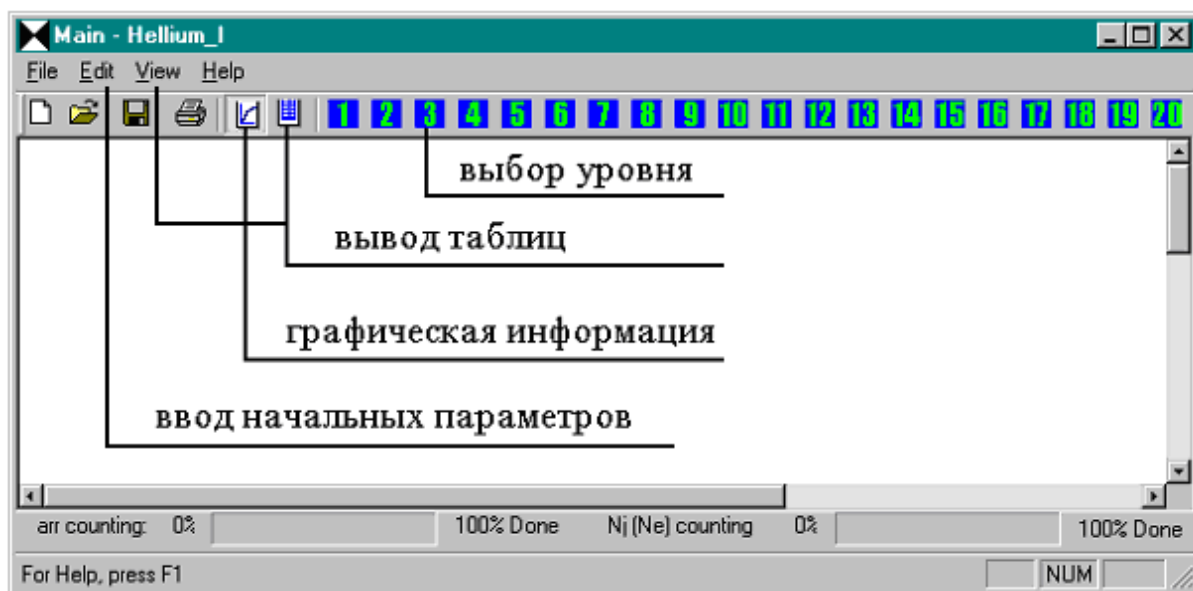


Рис.1.

1. Ввод начальных параметров и условий расчёта происходит при выборе в элементе меню "Edit" опции "Parameters".

2. Кнопка "графическая информация" определяет режим графического представления полученных результатов. При ее нажатии на экране дисплея приводятся графики выбранной зависимости концентрации возбуждённых атомов на конкретном уровне

3. Кнопка "вывод таблиц" соответствует табличному представлению полученных результатов. При его нажатии на экран дисплея выводятся таблицы значений изменения расчётных величин, данные о вводных параметрах и номер уровня, которому соответствует данная таблица.

4. Кнопки с номерами от 1 до 24 позволяют выбрать конкретный уровень, для которого выводится необходимая информация либо в виде графика, либо в виде табличных данных. Кнопки пунктов 2 – 4 дублированы в опции "View", при помощи которой можно также осуществлять выбор как условий вывода информации, так и конкретного уровня.

5. Остальные функции рабочей панели носят вспомогательный ха-

ракти: сохранение и копирование данного файла, вывод файла для печати и т.п. Выход из программы осуществляется в меню "File", функцией "Exit".

Ввод начальных данных и условий расчёта.

Как уже отмечалось, ввод начальных параметров осуществляется при выборе в элементе меню "Edit" опции "Parameters". При этом на экране монитора компьютера появляется диалоговое окно ввода начальных данных Рис. 2.

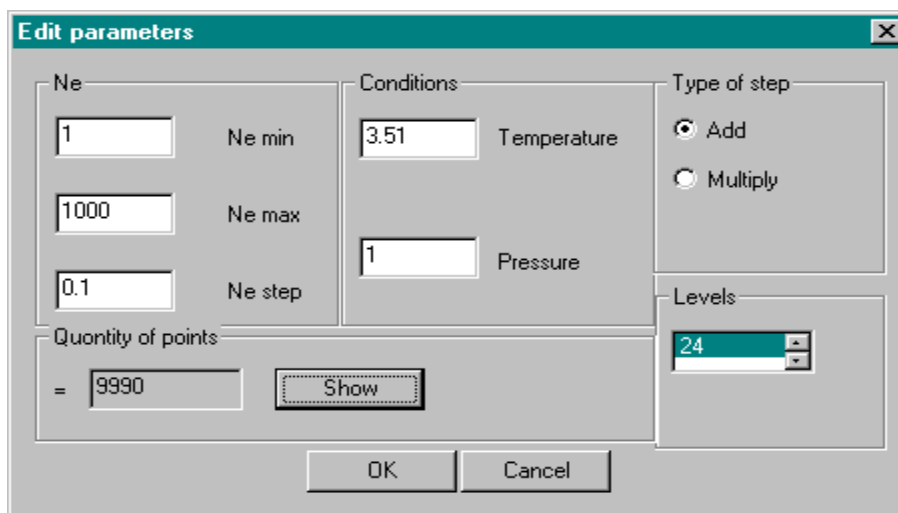


Рис. 2.

Для удобства пользования в диалоговом окне выделено 5 основных рабочих групп.

6. Первая группа этого окна (N_e) предназначена для ввода начальных значений концентрации электронов и диапазона её изменений. Вводятся минимальное значение $N_{e\min}$, максимальное $N_{e\max}$ и шаг изменения плотности электронов при расчёте $N_{e\text{Step}}$, например, $N_{e\min}=0.0$, $N_{e\max}=100$ и шаг $N_{e\text{Step}}=0.1$. Нижняя группа "Quantity of points" при нажатии кнопки (Show) показывает число расчётных точек. В указанном примере это число равно 9990 точек.

Предупреждение. Число точек расчёта не должно превышать значения 10000 точек. Концентрация электронов задаётся в единицах 10^{10} см^{-3} . Допускается значение $N_{e\min}$ равное нулю.

7. Средняя группа (Condition) предназначены для ввода начальных значений температуры (Temperature) и давления (Pressure) гелия.

8. При помощи крайней правой группы (Type of step) определяются условия проведения расчётов. Переключатели (Add) и (Multiply) позволя-

ют регулировать выбор шага расчёта. При включении кнопки (Add.) шаг счёта определяется и изменяется самим пользователем согласно пункту 6. Этим режимом рекомендуется пользоваться при небольших различиях между минимальными и максимальными значениями плотности электронов, например, на 2–3 порядка. При включении кнопки (Multiply) шаг расчёта задаётся программой автоматически и изменяется от точки к точке на порядок. Число расчётных точек фиксируется при нажатии кнопки (Show). Режимом (Multiply) необходимо пользоваться при различии между минимальными и максимальными значениями плотности электронов в несколько порядков, например, $N_{\text{emin}}=10^{-4}$, а $N_{\text{emax}}=10^{10}$. Напомним, что приведённые величины соответствуют реальным значениям концентрации электронов $N_{\text{emin}}=10^6 \text{ см}^{-3}$ и $N_{\text{emax}}=10^{20} \text{ см}^{-3}$.

Предупреждение. В режиме (Multiply) запрещается задавать N_{emin} равное нулю, хотя можно вводить как угодно малые величины, например, $N_{\text{emin}}=10^{-4}$ и т.п.

9. При помощи нижней группы, расположенной справа (Levels) определяют число расчётных уровней, и следовательно, число уравнений, входящих в систему (31–37). Функциями этого окна необходимо пользоваться при выполнении 4-ого упражнения задачи.

Предупреждение. При выполнении упражнений 1, 2, 3 и 5 задачи число расчётных уровней должно быть равным 24.

10. После ввода начальных параметров и выбора условий проведения расчётов кнопкой (ОК) производится запуск программы счёта. По окончании расчёта, становятся активными кнопки главной панели, позволяющие вывести на экран компьютера расчётные данные (графические либо табличные) для конкретного энергетического уровня от 1 до 24 (Рис. 1).

11. При выводе рассчитанных значений концентрации атомов, возбуждённых на конкретный энергетический уровень, необходимо, прежде всего, определить характер вывода информации (табличный либо графический) согласно пунктам 2,3 настоящего руководства, затем, пользуясь кнопками 1– 24 рабочей панели (см. пункт 4 настоящего руководства), выбрать необходимый уровень и записать нужные результаты.

Напомним, что численные значения концентраций электронов и возбуждённых атомов при любых режимах вывода расчётной информации приводятся в единицах 10^{10} см^{-3} .