

02;04

## Колебательная теплопроводность молекул $H_2$ в низковольтных разрядах с молекулярным водородом

© Ф.Г. Бакшт, В.Г. Иванов

Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе РАН, Санкт-Петербург  
E-mail: baksh@mail.ioffe.ru

Поступило в Редакцию 18 апреля 2008 г.

Рассчитан энергетический баланс слабоионизованной плазмы низковольтного разряда, горящего в покоящемся молекулярном водороде за счет ионизации малой добавки цезия. Определены основные компоненты в потоке энергии, переносимые в плазме электронами, теплопроводностью молекул  $H_2$  на трансляционных и вращательных степенях свободы, а также (в первом приближении) дополнительный поток энергии, переносимый путем колебательной теплопроводности. Приведен критерий малости вклада колебательной теплопроводности в энергетический баланс плазмы разряда.

PACS: 52.80.-s

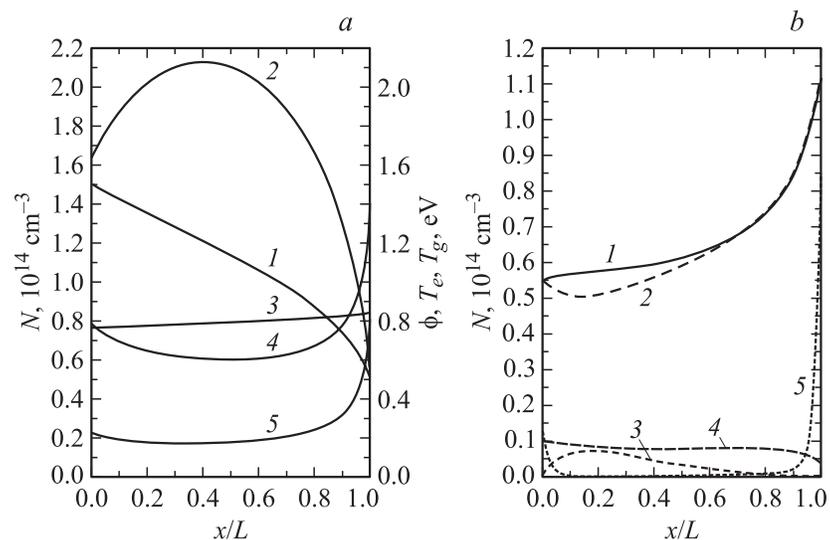
Настоящее сообщение посвящено той роли, которую играет колебательная теплопроводность молекул  $H_2$  в низковольтных (НВ) разрядах с молекулярным водородом. Рассматриваются разряды, горящие в плоской геометрии в плотной слабоионизованной плазме, основным нейтральным компонентом которой является молекулярный водород. Такие разряды интересны в связи с рядом практических применений, в частности в связи с возможным их использованием в качестве объемно-плазменных источников ионов  $H^-$ . Ионы  $H^-$  генерируются в плазме разряда вследствие диссоциативного прилипания (ДП) тепловых электронов к колебательно-возбужденным молекулам  $H_2$ . Причина такого интереса связана с тем, что в НВ-разрядах легко достигается электронная температура  $T_e \approx 1-2$  eV, которая соответствует максимуму констант ДП [1,2] и ступенчатого возбуждения [3] молекулы  $H_2$  электронным ударом.

Концентрация  $N_v$  колебательно-возбужденных молекул  $H_2$ , скорость ДП электронов к этим молекулам, а в ряде случаев и скорость

разрушения ионов  $H^-$ , например вследствие их обдирки горячими электронами [3], существенно зависят от  $T_e$ . В некоторых случаях, особенно в достаточно слабоионизованной плазме, имеет место также существенная зависимость скорости заселения или опустошения колебательных уровней  $v$  молекул от температуры газа  $T_g$ , например, при  $v-t$  обмене или при нерезонансном  $v-v$  обмене. Все это требует достаточно корректного определения электронной  $T_e(x)$  и газовой  $T_g(x)$  температур в газоразрядном промежутке.

Обычно в НВ-разрядах, содержащих  $H_2$ , присутствует легко ионизирующаяся примесь, например цезий. Ионы плазмы создаются в основном вследствие ионизации примеси, а ионы водорода не вносят заметного вклада в концентрацию плазмы. Основы теории такого НВ-разряда были заложены в [4] на примере НВ цезий-водородного ( $Cs-H_2$ ) разряда и развиты затем в [5–7], где также было показано достаточно хорошее совпадение теории с экспериментом. Впоследствии теория была дополнена уравнениями, описывающими ионизацию водорода, конверсию, рекомбинацию и отвод образующих водородных ионов [8]. В результате была создана самосогласованная теория НВ-разряда с примесью легко ионизирующейся добавки — в основном цезия. Если сравнить эту теорию с уже устоявшейся теорией НВ-разряда в чистом  $Cs$  (см. [9], с. 132–147), то видно, что главное отличие НВ  $Cs-H_2$  разряда от разряда в чистом  $Cs$  состоит в появлении в плазме  $Cs-H_2$  разряда достаточно большой концентрации  $N_v$  колебательно-возбужденных молекул  $H_2$ , обеспечивающих процессы ДП. Это приводит к дополнительному (по сравнению с разрядом в чистом  $Cs$ ) механизму переноса энергии путем колебательной теплопроводности молекул. Рассмотрим роль этого механизма переноса энергии на примере уже хорошо изученного  $Cs-H_2$  разряда, горящего в плотной слабоионизованной ( $n_e \ll N_{H_2}$ ) плазме, когда длины  $l$  свободного пробега частиц плазмы малы по сравнению с протяженностью  $L$  газоразрядного промежутка и когда движение компонент плазмы описывается гидродинамическими уравнениями.

Рассмотрение проведем в два этапа. На первом этапе, в „нулевом приближении“, определим параметры плазмы, пренебрегая движением колебательно-возбужденных молекул, а следовательно и самой колебательной теплопроводностью (соответствующая система уравнений и ее решение обсуждались ранее в [4–7]). В этом приближении молекулы  $H_2$  считаются неподвижными при расчете их колебательной функции рас-



**Рис. 1.** *a* — распределение параметров плазмы по зазору: 1 —  $T_e$ , 2 —  $10T_g$ , 3 —  $0.1\phi$ , 4 —  $0.1N_H$ , 5 —  $0.01N_{H_2}$ . *b* — компонентный состав плазмы: 1 —  $n_e$ , 2 —  $N_{Cs^+}$ , 3 —  $N_{H^+}$ , 4 —  $10N_{H^-}$ , 5 —  $N_{Cs}$ .

пределения (КФР). Результаты соответствующих расчетов для одного из режимов горения НВ Cs– $H_2$  разряда приведены на рис. 1, 2. Расчеты выполнены для межэлектродного расстояния  $L = 2$  см, полного давления плазмы  $p_0 = 0.7$  Торр, тока эмиссии катода  $j_{es} = 10$  А/см<sup>2</sup> (катод из LaB<sub>6</sub>), тока разряда  $j = 9.47$  А/см<sup>2</sup>, температур катода  $T_1 = 1900$  К и анода  $T_2 = 600$  К, полных средних концентраций в зазоре водорода  $\langle N_{H_2}^0 \rangle = 2.5 \cdot 10^{15}$  см<sup>-3</sup> и цезия  $\langle N_{Cs}^0 \rangle = 6.6 \cdot 10^{13}$  см<sup>-3</sup>. Полное расчетное падение напряжения на зазоре  $U = 6.77$  В. Доли потоков атомарного водорода, которые, падая на поверхности электродов, рекомбинируют и возвращаются в плазму в виде молекул  $H_2$ , принимались равными: на катоде  $\gamma_H(0) = 0.05$ , на аноде  $\gamma_H(L) = 0.2$  [10].

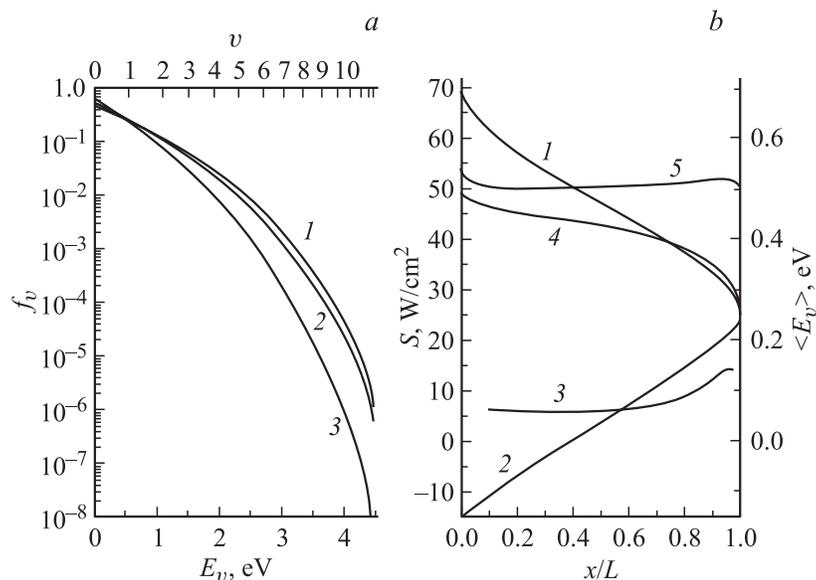
На рис. 1, *a* приведены распределения по газоразрядному промежутку величин  $T_e(x)$ ,  $T_g(x)$ , потенциала  $\phi(x)$  (за нуль отсчета потенциала принят потенциал поверхности катода), концентраций атомарного  $N_H$  и молекулярного  $N_{H_2}$  водорода. Распределения параметров плазмы здесь

и ниже приведены лишь для той части газоразрядного промежутка, которая заполнена квазинейтральной плазмой. Ввиду узости ленгмюровских слоев, перепады потенциала  $\phi_1 = 7.66 \text{ V}$  и  $\phi_2 = 1.6 \text{ V}$  в них, задерживающие электронные потоки из плазмы соответственно на катод и на анод, на рисунке не показаны.

На рис. 1, *b* приведены распределения концентраций заряженных компонент плазмы: электронов  $n_e$ , положительных ионов цезия  $N_{\text{Cs}^+}$  и атомарного  $N_{\text{H}^+}$  водорода, отрицательных ионов водорода  $N_{\text{H}^-}$ , а также концентрации  $N_{\text{Cs}}$  нейтрального цезия. В рассмотренном примере Cs–H<sub>2</sub> разряда, как и в [4–7], квазинейтральность плазмы обеспечивается электронами и в основном ионами Cs<sup>+</sup> (при относительно малой доле положительных ионов водорода). Тем не менее система уравнений [4], использованная в настоящей работе, была дополнена уравнениями, описывающими ионизацию водорода [8]. Необходимость учета возможности ионизации водорода связана с рассмотрением сравнительно большого межэлектродного расстояния  $L$ , заметно превосходящего длину максвеллизации  $L_\varepsilon = \sqrt{D_0 \tau_\varepsilon} \approx 0.5 \text{ cm}$  электронов с энергией  $\varepsilon \approx 10 \text{ eV}$ . Здесь  $D_0$  — коэффициент диффузии быстрых электронов в H<sub>2</sub>;  $\tau_\varepsilon = \varepsilon^2 / (2\pi e^4 v_0 n_e \Lambda)$  — время релаксации энергии быстрых электронов вследствие межэлектронных столкновений,  $v_0 = \sqrt{2\varepsilon/m_e}$ ,  $\Lambda$  — кулоновский логарифм. Электроны с  $\varepsilon \approx 10 \text{ eV}$ , рождающиеся в объеме плазмы вследствие межэлектронных столкновений, максвеллизуют функцию распределения при  $\varepsilon \approx 10 \text{ eV}$  и поэтому могут инициировать ступенчатую ионизацию водорода в объеме. Однако в рассматриваемом примере такая ионизация еще сравнительно небольшая. Отметим своеобразный характер распределения концентрации ионов  $N_{\text{Cs}^+}$ , а вместе с ней и концентрации электронов по зазору: максимумы  $N_{\text{Cs}^+}$  и  $n_e$  локализованы в прианодной области. Это связано с тем, что в рассматриваемом примере концентрация  $N_{\text{H}^-}$  минимальна у анода. Именно там минимальна и скорость гибели ионов Cs<sup>+</sup> вследствие взаимной нейтрализации с ионами H<sup>-</sup> (см. выражение (7) в [4]).

На рис. 2, *a* показаны нормированные на единицу колебательные функции распределения (КФР)  $f_v(x)$  молекул H<sub>2</sub> в плазме на различном расстоянии от катода. Как и в предыдущих работах, например в [6–8],  $f_v$  весьма слабо зависят от  $x$ .

Рассмотрим перенос энергии колебательно-возбужденными молекулами, т. е. колебательную теплопроводность. Положим  $p_{\text{H}_2} \approx p_0 = \text{const}$ .



**Рис. 2.** *a* — колебательная функция распределения молекул на различном расстоянии  $x$  от катода: 1 —  $x/L = 0.1$ , 2 —  $x/L = 0.5$ , 3 —  $x/L = 0.9$ . *b* — потоки энергии, переносимые в плазме электронами  $S_e$ , молекулами на трансляционных и вращательных степенях свободы  $S_m$  и колебательно-возбужденными молекулами  $S_v$ : 1 —  $S_e$ , 2 —  $S_m$ , 3 —  $S_v$ , 4 — средняя колебательная энергия молекулы  $\langle E_v \rangle$ , 5 —  $S_0 = S_e + S_m$ .

Введем, как и в [6–8], КФР молекул:  $f_v(x) = N_v(x)/N_{H_2}(x)$ , где  $N_{H_2} = \sum_v N_v$  — полная концентрация молекулярного водорода (здесь и ниже в сумме по  $v$  учитывается также основное состояние  $v = 0$ ). При определении  $f_v(x)$ , как и в [6–8], будем считать, что движение молекул на различных уровнях  $v$  колебательного возбуждения мало сказывается на  $f_v(x)$  (см. ниже) и что  $f_v(x)$  можно определить локально в каждой точке газоразрядного промежутка. Методика определения такой „локальной“ КФР изложена в [11]. Отметим, что вследствие предполагаемого постоянства давления молекулярного водорода полная гидродинамическая скорость молекул  $V_{H_2} = 0$ . Однако диффузионная скорость каждой группы  $N_v$  колебательно-возбужденных молекул от-

лична от нуля и равна [12]

$$V_v = -\frac{D_S(T_g)}{f_v(x)} \frac{\partial f_v(x)}{\partial x}, \quad (1)$$

где  $D_S$  — коэффициент самодиффузии молекул водорода [13]. Выражение (1) справедливо в объеме плазмы на расстоянии от электрода, превышающем длину  $l^{(1)} = 1/N_{\text{H}_2} Q^{(1)}$  свободного пробега по импульсам. Здесь  $Q^{(1)}(g)$  [14] и  $g$  — транспортное сечение рассеяния и относительная скорость сталкивающихся молекул  $\text{H}_2$ .

На рис. 2, *b* показаны основные потоки энергии, переносимые в плазме. Это поток энергии электронов  $S_e$ ; поток энергии  $S_m$ , переносимый молекулами путем теплопроводности на трансляционных и вращательных степенях свободы, а также дополнительный поток энергии

$$S_v(x) = N_{\text{H}_2}(x) \sum_v E_v f_v(x) V_v(x), \quad (2)$$

переносимый путем колебательной теплопроводности.  $E_v$  — энергия колебательных уровней ( $v = 0, 1, 2, \dots$ ) молекул. Кривая  $S_v(x)$  обрвана на расстоянии  $l^{(1)}$  от каждого электрода — там, где перестает быть применимо выражение (1). На рис. 2, *b* также показаны средняя колебательная энергия молекул  $\langle E_v \rangle$  и суммарный поток энергии  $S_0 = S_e + S_m$ , переносимый электронами и молекулами. Как и должно быть,  $S_0 \approx \text{const}$ . Последнее равенство выполнялось бы точно, если бы в расчете были учтены относительно малые члены, например перенос энергии атомами и ионами водорода, и т.п. Существенно, что все параметры газоразрядной плазмы, включая потоки энергии  $S_e$  и  $S_m$ , рассчитаны в пренебрежении потоком колебательной теплопроводности  $S_v$ , а сама величина  $S_v$  рассчитывается в следующем приближении. Это возможно только в том случае, если поток  $S_v$  мал. Критерием этой малости является выполнение неравенства  $S_v \ll S_0$ . Как видно из рис. 2, *b*, в рассматриваемом случае малость  $S_v$  действительно имеет место. Она объясняется сравнительно малыми пространственными градиентами КФР  $f_v(x)$ . По этому поводу см. также рис. 5 в [6] и рис. 1, 2 в [7], где малость  $\nabla f_v(x)$  проиллюстрирована для других модификаций НВ Cs– $\text{H}_2$  разряда.

Показанная выше на ряде конкретных примеров малость колебательной теплопроводности  $S_v$  не является каким-либо общим свойством

всех НВ-разрядов. В каждом конкретном случае роль потока  $S_v$  в энергетическом балансе требует специального исследования. При малых пространственных градиентах КФР такое исследование может быть проведено методом последовательных приближений, т. е., как это было сделано выше, без решения системы дифференциальных уравнений переноса для колебательно-возбужденных молекул. При этом отпадает необходимость в задании обычно плохо известной системы граничных условий, описывающих взаимодействие колебательно-возбужденных молекул с поверхностями, ограничивающими разряд.

Отметим еще раз, что при таком подходе вначале все параметры разряда, кроме потока колебательной энергии  $S_v$ , определяются в нулевом приближении, т. е. в пренебрежении движением молекул на различных уровнях  $v$ . В нулевом приближении определяется и сама КФР  $f_v(x)$ . В связи с этим отметим, что длина установления КФР молекул  $f_v(x)$  в слабоионизованной плазме равна  $L_v \approx V_v \tau_v$ , где  $\tau_v$  — время колебательной релаксации молекул  $H_2$  в плазме [15]. Используя для оценки  $V_v$  выражение (1), данные [13] для  $D_s$  и значения  $\frac{\partial \ln f_v(x)}{\partial x}$  при  $v = 1$ , из рис. 2, *b*, получаем, что  $L_1 \leq 10^{-2}$  см. Близкие оценки получаются и для других  $L_v$  на нижних колебательных уровнях  $v$ , которые вносят заметный вклад в  $S_v$ . На расстоянии  $\sim L_v$  параметры плазмы мало меняются, так что в рассматриваемом случае формирование КФР действительно можно рассматривать локально в каждой точке плазмы.

## Список литературы

- [1] Skinner D.A., Brunetau A.M., Berlemont P., Courteille C., Leroj R., Bacal M. // Phys. Rev. E. 1993. V. 48. N. 3. P. 2122–2132.
- [2] Вадэра Дж. // Неравновесная колебательная кинетика / Под ред. М. Капители. М.: Мир, 1989. С. 224–269.
- [3] Janev R.K., Evans K., Langer W.D., Post D.E. Elementary Processes in Hydrogen-Helium Plasmas. Berlin: Springer-Verlag, 1987.
- [4] Бакиит Ф.Г., Елизаров Л.И., Иванов В.Г. // Физика плазмы. 1990. Т. 16. № 7. С. 854–861.
- [5] Бакиит Ф.Г., Елизаров Л.И., Иванов В.Г., Коньков С.И., Митрофанов Н.К. // Физика плазмы. 2003. Т. 29. № 3. С. 256–260.
- [6] Baksh F.G., Ivanov V.G., Kon'kov S.I., Shkolnik S.M., Bacal M. // J. Phys. D: Appl. Phys. 2003. V. 36. P. 122–128.
- [7] Бакиит Ф.Г., Иванов В.Г. // Физика плазмы. 2005. Т. 31. № 6. С. 572–576.

- [8] Бакшт Ф.Г., Иванов В.Г. // Письма в ЖТФ. 2007. Т. 33. В. 3. С. 39–45.
- [9] Энциклопедия низкотемпературной плазмы. Вводный том II / Под ред. В.Е. Фортова. М.: Наука, 2000.
- [10] Лавренко В.А. Рекомбинация атомов водорода на поверхностях твердых тел. Киев: Наук. думка, 1973.
- [11] Бакшт Ф.Г., Елизаров Л.И., Иванов В.Г., Юрьев В.Г. // Физика плазмы. 1998. Т. 14. № 1. С. 91–97.
- [12] Ферцигер Дж., Канер Г. // Математическая теория процессов переноса в газах. М.: Мир, 1976.
- [13] Vanderslice J.T., Weissman S., Mason E.A., Fallon R.J. // Phys. Fluids. 1962. V. 5. N. 2. P. 155–164.
- [14] Mason E.A. // J. Chem. Phys. 1954. V. 22. N. 2. P. 169–186.
- [15] Бакшт Ф.Г., Иванов В.Г. // ЖТФ. 1996. Т. 66. В. 9. С. 58–63.