

01;03;04;07

Моделирование газоразрядных источников ультрафиолетового излучения с тлеющим разрядом в смеси ксенона и хлора

© А.П. Головицкий

Санкт-Петербургский государственный политехнический университет,
195251 Санкт-Петербург, Россия
e-mail: alexandergolovitski@yahoo.com

(Поступило в Редакцию 8 июля 2010 г.)

На основе разработанной модели произведены расчеты концентрации эксимерных молекул — галогенидов инертных газов — в положительном столбе тлеющего разряда в смеси газов, содержащей хлор. Модель позволяет количественно воспроизвести наблюдавшиеся в эксперименте зависимости мощности эксимерного ультрафиолетового излучения от разрядного тока в широком диапазоне составов и давлений газовой смеси, обеспечить удовлетворительное количественное соответствие расчетных и измеренных в эксперименте радиальных распределений концентраций электронов и эксимерных молекул, а также дать физическое объяснение наблюдавшимся в эксперименте зависимостям. Для этого, в отличие от существующих моделей, необходимо учитывать и саму диссоциацию молекул хлора электронным ударом, и ее радиальную неоднородность, а также радиальную неоднородность температуры газа.

В работе [1] была развита модель положительного столба (ПС) тлеющего разряда низкого (5–30 Торг) давления (ТРНД) в смеси инертных газов с хлором, учитывающая радиальные неоднородности параметров плазмы, диссоциацию молекул хлора на атомы, нагрев ионов электрическим полем, а также ступенчатую ионизацию. В данной работе эта модель применена к расчету радиальных распределений эксимерных молекул — галогенидов инертных газов — и к расчету мощности ультрафиолетового (УФ) излучения подобных разрядов [2,3].

Определяющий вклад в образование эксимерных молекул в ТРНД в смеси инертного газа и галогена дает гарпунная реакция с метастабильными атомами инертного газа (далее — метастабилити) [4], но некоторый вклад может дать и гарпунная реакция с неметастабильными состояниями [5,6] (с константами $k_{h(M)}$ и $k_{h(T)}$ соответственно). Для разряда, например, в смеси Хе и Cl_2 можно написать уравнение баланса концентрации эксимерных молекул N_{XeCl^*} как

$$N_{Cl_2}(N_M k_{h(M)} + N_{6p} k_{h(T)}) = \frac{N_{XeCl^*}}{\tau_{XeCl^*}},$$

где ввиду низкого давления пренебрегается трехтельной рекомбинацией, а $\tau_{XeCl^*} \approx 1.1 \cdot 10^{-8}$ s — время спонтанного распада молекулы $XeCl^*$ [7].

Для концентрации метастабилити N_M имеем:

$$N_M \approx \frac{N_{Xe} n_e \langle \sigma_{0M} \nu_e \rangle}{n_e \langle \sigma_M \nu_e \rangle + N_{Cl_2} k_{h(M)}},$$

где $\langle \sigma_{0M} \nu_e \rangle$ — скорость прямого возбуждения метастабильных атомов инертного газа электронным ударом. Первый член знаменателя соответствует ионизации метастабилити (ее скорость — $\langle \sigma_M \nu_e \rangle$), а второй — гарпунной реакции с молекулами хлора. Прочие механизмы

гибели метастабильных атомов не учитываются: они намного слабее гибели из-за гарпунной реакции.

В этих же условиях для N_{6p} — концентрации неметастабильных атомов Хе в состоянии $6p$ (для Kr $5p$) — можно записать:

$$N_{6p} \approx \frac{N_{Xe} n_e \langle \sigma_{0,6p} \nu_e \rangle}{\gamma_{6p} + N_{Cl_2} k_{h(T)}},$$

где $\langle \sigma_{0,6p} \nu_e \rangle$ — скорость прямого возбуждения конфигурации $6p$ для Хе ($5p$ — для Kr), $\gamma_{6p} \approx 3.5 \cdot 10^7$ s⁻¹ [8,9] — полная усредненная по конфигурации скорость спонтанного распада ее уровней. Вклад более высоколежащих состояний атома инертного газа в образование эксимерных молекул мал ввиду незначительной заселенности этих состояний. Тогда

$$N_{XeCl^*} \cong \frac{N_{Xe} n_e \langle \sigma_{0M} \nu_e \rangle N_{Cl_2} k_{h(M)} \tau_{XeCl^*}}{n_e \langle \sigma_M \nu_e \rangle + N_{Cl_2} k_{h(M)}} + \frac{N_{Xe} n_e \langle \sigma_{06p} \nu_e \rangle N_{Cl_2} k_{h(T)} \tau_{XeCl^*}}{\gamma_{6p} + N_{Cl_2} k_{h(T)}}.$$

На рис. 1, а и 2, а, с приведены рассчитанные при помощи модели [1] и экспериментальные [2] зависимости мощности эксимерного УФ-излучения от разрядного тока. Наблюдается удовлетворительное соответствие модельного расчета и эксперимента.

Модельные расчеты показали, что вклад неметастабильных состояний в образование эксимерных молекул превышает 3% лишь при малых токах не свыше 6 mA. При этом мала концентрация электронов [1], газовая температура также не сильно отличается от комнатной. Концентрация молекул хлора, напротив, велика, поскольку и термовытеснение, и диссоциация электронным ударом слабы. Поэтому гарпунная реакция эффективна, а концентрация метастабилити мала ($2 \cdot 10^{10}$ cm⁻³ в центре разряда при токе 1 mA для смеси 6 Торг

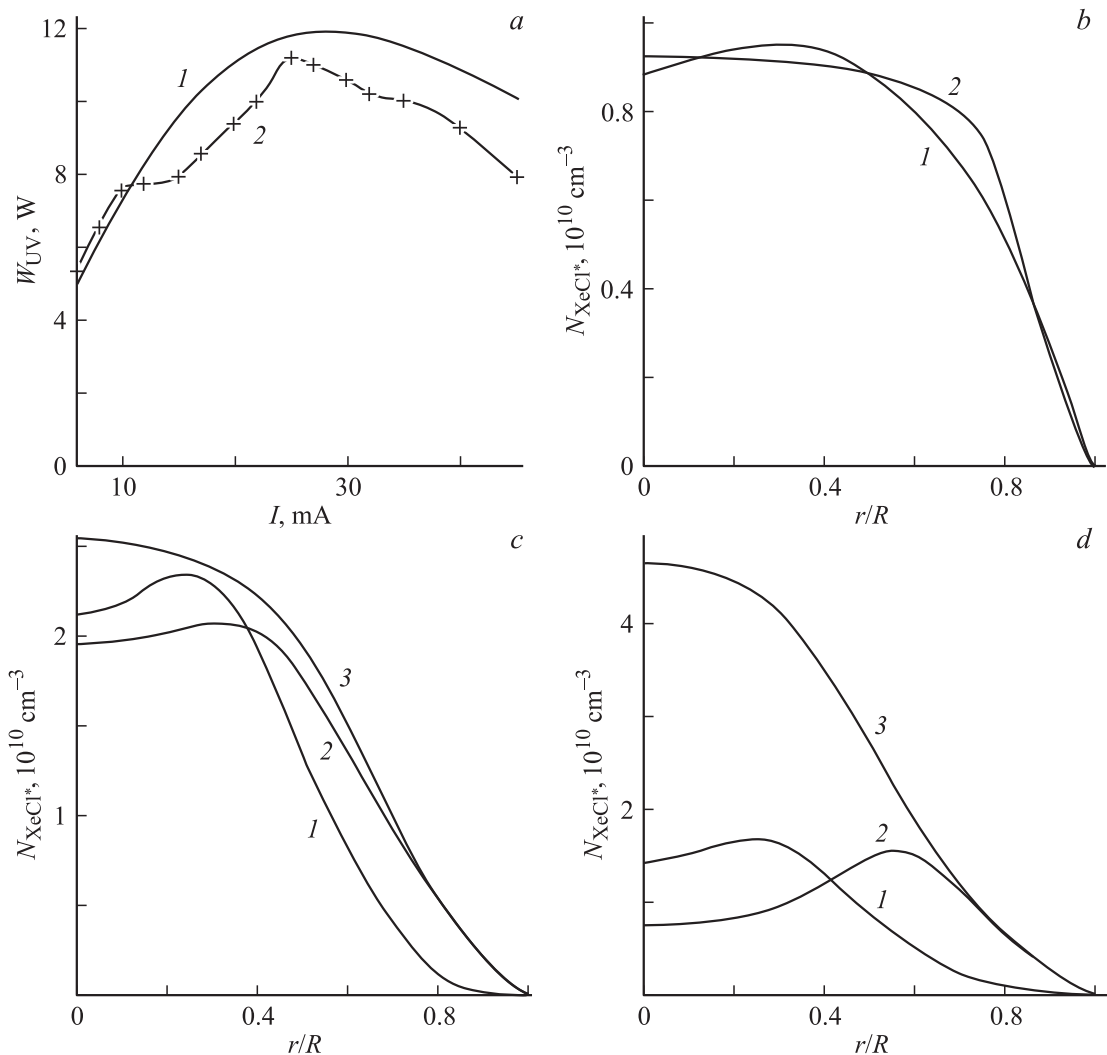


Рис. 1. Мощность ультрафиолетового (УФ) излучения и концентрации молекул XeCl^* в разряде в смеси 6 Торг Хе и 0.25 Торг Cl_2 , длина разряда 17 см, радиус трубки $R = 6$ мм: *a* — зависимости мощности эксимерного УФ-излучения от разрядного тока: 1 — расчет, 2 — эксперимент; *b* — радиальные профили концентрации эксимерных молекул XeCl^* , ток 10 мА, напряжение на разряде 2040 В; *c* — то же, ток 25 мА, напряжение на разряде 1740 В; *d* — то же, ток 45 мА, напряжение на разряде 1300 В: 1 — экспериментальные данные; 2 — расчет, формула (1), 3 — расчет, формула (2).

Хе и 0.25 Торг Cl_2). Концентрация неметастабильных атомов при этом также невелика ($8 \cdot 10^8 \text{ см}^{-3}$), но $k_{h(\uparrow)}$ примерно в 3 раза больше, чем $k_{h(\text{M})}$ [4–6], и вклад неметастабильных состояний в образование эксимерных молекул становится заметным. Отметим также, что даже при давлении напуска Cl_2 0.25 Торг величина $N_{\text{Cl}_2} k_{h(\uparrow)}$ (10^7 с^{-1} в центре при токе 1 мА) соизмерима с γ_{6p} , а при 2 Торг величина $N_{\text{Cl}_2} k_{h(\uparrow)}$ более чем вдвое превосходит γ_{6p} ! Таким образом, гарпунная реакция с неметастабильными атомами сильно снижает их концентрацию, что отражается в зарегистрированной на опыте [3,10] незначительности видимого свечения разряда при малых токах.

При токах разряда, больших 6 мА, вклад неметастабильных состояний в образование эксимерных молекул делается пренебрежимо малым, и N_{XeCl^*} можно вычис-

лять как

$$N_{\text{XeCl}^*} \approx \frac{N_{\text{Xe}} n_e \langle \sigma_{0\text{M}} \nu_e \rangle N_{\text{Cl}_2} k_{h(\text{M})} \tau_{\text{XeCl}^*}}{n_e \langle \sigma_{\text{M}_i} \nu_e \rangle + N_{\text{Cl}_2} k_{h(\text{M})}}. \quad (1)$$

Если токи разряда все еще невелики (не более 20 мА), то незначительна и диссоциация молекул хлора, тогда $n_e \langle \sigma_{\text{M}_i} \nu_e \rangle \ll N_{\text{Cl}_2} k_{h(\text{M})}$, поэтому

$$N_{\text{XeCl}^*} \approx N_{\text{Xe}} n_e \langle \sigma_{0\text{M}} \nu_e \rangle \tau_{\text{XeCl}^*}, \quad (2)$$

и не зависит от N_{Cl_2} непосредственно. Рост электронной концентрации с ростом тока вызывает здесь возрастание N_{XeCl^*} и мощности эксимерного УФ-излучения (см. рис. 1, *a*). Но дальнейший рост тока и n_e вызовет, во-первых, снижение N_{Cl_2} из-за диссоциации электронным ударом, что снизит значение второго слагаемого в знаменателе (1) и одновременно приведет к росту первого

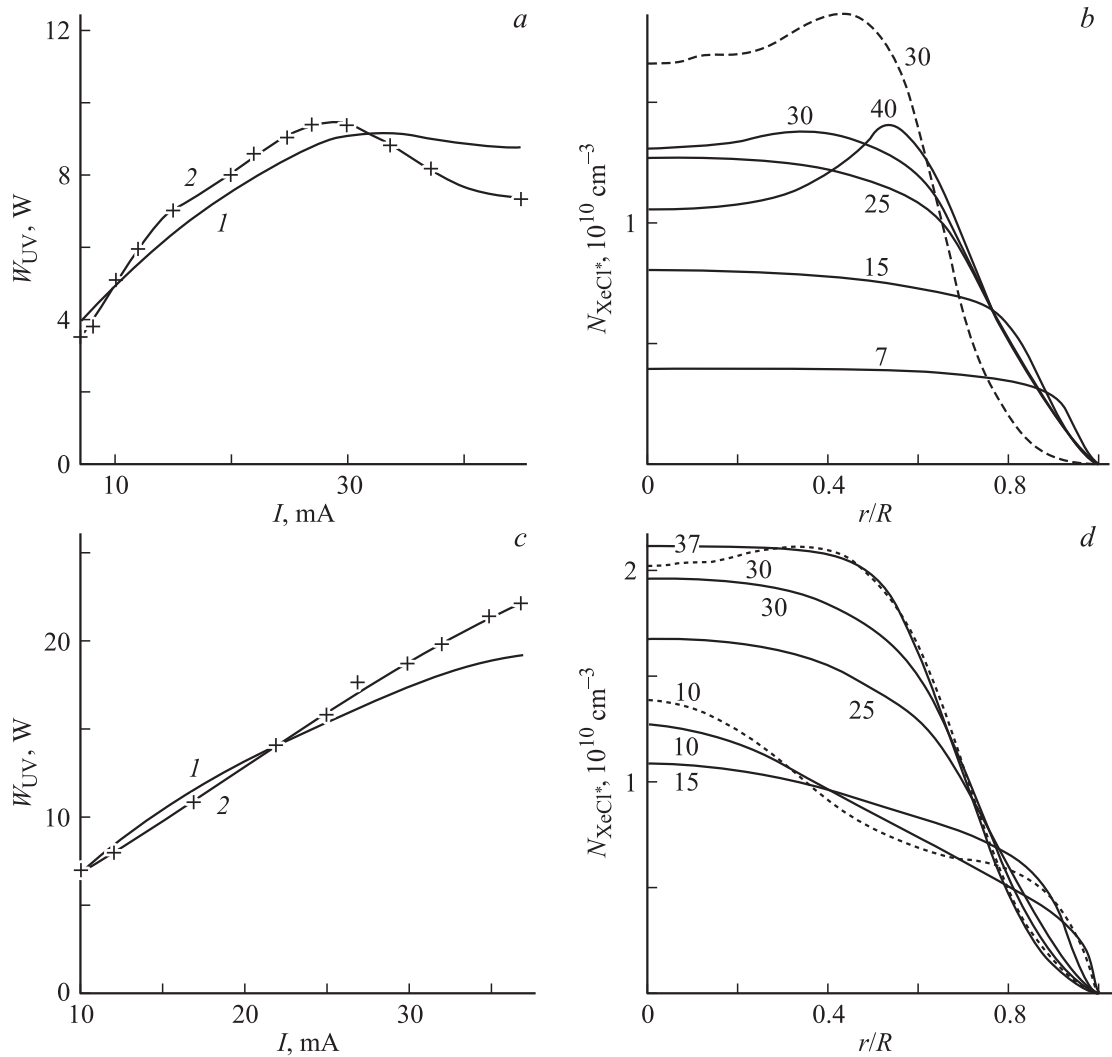


Рис. 2. Результаты расчетов для разных составов и давлений смеси Xe и Cl₂, длина разряда 17 см, радиус трубки $R = 6$ мм: *a* — зависимости мощности эксимерного УФ-излучения от разрядного тока; разряд в смеси 6 Torr Xe и 0.5 Torr Cl₂: 1 — теория; 2 — эксперимент; *b* — радиальные распределения концентрации эксимерных молекул при различных токах разряда (в мА, показаны у кривых), пунктиром показано экспериментальное распределение при токе 30 мА; *c* — зависимости мощности эксимерного УФ-излучения от разрядного тока; разряд в смеси 18 Torr Xe и 0.7 Torr Cl₂; 1 — расчет; 2 — эксперимент; *d* — радиальные распределения концентрации эксимерных молекул при различных токах разряда (в мА, показаны у кривых), пунктиром показаны экспериментальные распределения при токах 10 и 30 мА.

слагаемого. В случае соизмеримости величин $n_e \langle \sigma_{M_i} v_e \rangle$ и $N_{Cl_2} k_{h(M)}$ концентрация эксимерных молекул N_{XeCl^*} в соответствии с (1) станет зависеть от N_{Cl_2} , а поскольку N_{Cl_2} с ростом n_e из-за диссоциации убывает, то и N_{XeCl^*} станет убывать при дальнейшем росте тока разряда.

Таким образом, максимум мощности эксимерного УФ-излучения разряда в смеси инертного газа и галогена достигается при таких токах, когда скорости основных процессов гибели метастабилей инертного газа — ионизации и гарпунной реакции — становятся сопоставимы по величине — рис. 3. Из рис. 1, *a* видно, что для рассматриваемой смеси 6 Torr Xe и 0.25 Torr Cl₂ этот максимум достигается при токе около 25 мА.

Более точного критерия достижения максимальной мощности УФ-излучения сформулировать, к сожалению, нельзя, поскольку и n_e , и N_{Cl_2} , и скорость диссоциации хлора не постоянны по сечению трубки, а зависят от радиальной координаты: величина n_e от центра к краю убывает, а N_{Cl_2} — нарастает [1]. Поэтому величина

$$Y = \frac{N_{Cl_2} k_{h(M)}}{n_e \langle \sigma_{M_i} v_e \rangle}$$

при повышенных токах может стать меньше единицы в центральных областях плазмы (рис. 3), тогда как на краю эта величина еще сохранит большое значение. Такая неоднородность приводит к тому, что в соответствии

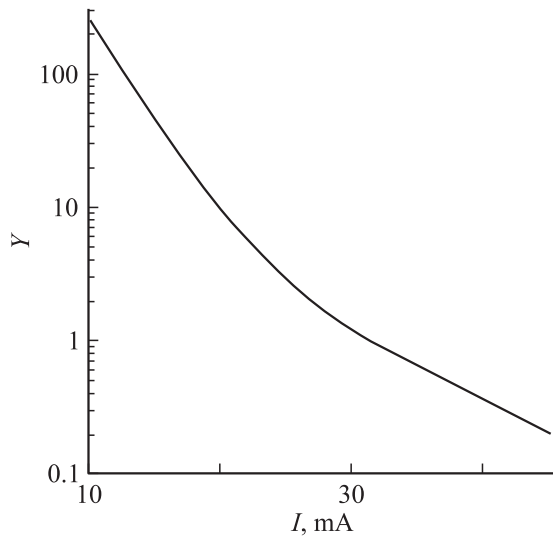


Рис. 3. Отношение слагаемых в знаменателе (1) $Y = \frac{N_{Cl_2} k_{h(M)}}{n_e \langle \sigma_{M_i} v_e \rangle}$; смесь 6 Torr Xe и 0.25 Torr Cl₂, радиус трубки 6 мм; центр разряда.

с (1) концентрация эксимерных молекул в центре разряда станет убывать с ростом тока, а с краю — убывать не будет, и таким образом на радиальной зависимости $N_{XeCl^*}(r)$ сформируется минимум в центре разряда. Наличие такого минимума отчетливо регистрируется на экспериментальных зависимостях $N_{XeCl^*}(r)$ (рис. 1, b, c).

На рис. 1, b–d проведено сопоставление экспериментально измеренных и рассчитанных радиальных профилей концентрации эксимерных молекул $N_{XeCl^*}(r)$ для смеси 6 Torr Xe и 0.25 Torr Cl₂. При токе 10 mA и при меньших токах величина Y велика даже в центре (см. рис. 3), т.е. ионизация метастабилей мала по сравнению с их распадом из-за гарпунной реакции во всей плазме. Тогда для вычисления $N_{XeCl^*}(r)$ можно пользоваться как выражением (1), так и более простым выражением (2), не учитывающем гибель метастабилей вследствие их ионизации; результаты совпадают. Небольшой спад $N_{XeCl^*}(r)$, который наблюдается в центре экспериментальной зависимости при токе 10 mA (см. рис. 1, b, кривая 1), но не воспроизводится ни одной из моделей, вызван, по-видимому, эффектом растекания тока от трубчатых электродов разрядной трубки [10].

При росте разрядного тока до 25 mA значения $n_e \langle \sigma_{M_i} v_e \rangle$ и $N_{Cl_2} k_{h(M)}$ становятся соизмеримыми в центре разряда. Но у его краев диссоциация хлора слабее [1], и там по-прежнему будет $n_e \langle \sigma_{M_i} v_e \rangle \ll N_{Cl_2} k_{h(M)}$. Поэтому рост $N_{XeCl^*}(r)$ в центре разряда прекращается, там формируется минимум $N_{XeCl^*}(r)$, а на периферии разряда все еще продолжается рост $N_{XeCl^*}(r)$ (см. рис. 1, c). При еще больших токах (45 mA) этот процесс прогрессирует: область спада $N_{XeCl^*}(r)$ захватывает все больший объем плазмы исходя от ее центра (см. рис. 1, d), поэтому и общая мощность УФ-излучения разряда снижается (см. рис. 1, a).

Таким образом, модель [1] позволяет не только физически объяснить ряд экспериментально наблюдаемых закономерностей (незначительность видимого свечения разряда при малых токах, наличие оптимального разрядного тока по отношению к мощности УФ-излучения, наличие минимума радиального распределения эксимерного УФ-излучения в центре разряда при повышенных токах), но и обеспечивает количественное соответствие расчетных и экспериментальных данных.

Удовлетворительное соответствие модели экспериментальным данным позволяет, проанализировав модельные уравнения, физически объяснить влияние различных факторов на вид наблюдаемых зависимостей.

Повышение доли Cl₂ в смеси (при равных токах разряда) ведет, в общем, к снижению электронной концентрации из-за возрастания частоты прилипания (рис. 4). Величина тока при этом сохраняется вследствие увеличения дрейфовой скорости электронов из-за повышения напряжения на разряде, но повышения — в более слабой пропорции, поскольку подвижность электронов с ростом доли хлора также возрастает [14]. В соответствии с (1) и (2) снижение n_e должно привести к снижению N_{XeCl^*} и к снижению мощности УФ-излучения разряда, что наблюдается на опыте и воспроизводится моделью (см. рис. 1, a и рис. 2, a). Некоторое возрастание величины $\langle \sigma_{O_{M_i}} v_e \rangle$ из-за прироста E/N не в состоянии полностью скомпенсировать падение n_e .

В эксперименте [1] была отчетливо зарегистрирована тенденция к сдвигу максимума зависимости мощности УФ-излучения от разрядного тока с ростом доли хлора в сторону больших токов. Данная тенденция воспроизводится и в модели (см. рис. 1, a и рис. 2, a). Анализ модельных уравнений свидетельствует, что увеличение доли хлора вызывает уменьшение n_e (из-за возросшего прилипания — рис. 4) и, следовательно, частоты диссоциации молекул хлора электронным ударом, что, наряду с большим исходным значением N_{Cl_2} , приводит к росту второго слагаемого в знаменателе (1). С другой стороны, значение первого слагаемого в знаменателе (1) становится меньше. Поэтому чем больше исходное содержание хлора в смеси, тем при больших значениях разрядного тока должен реализовываться максимум мощности эксимерного УФ-излучения. Напротив, если долю хлора при напуске снизить до малых величин (менее 2%), то максимум УФ-излучения придется на крайне малые токи: такие, что во всей области существования разряда зависимость УФ-мощности от разрядного тока станет спадающей. Такие режимы разряда, впрочем, малоперспективны для практического использования.

При повышении давления напуска газовой смеси с сохранением доли хлора, доля молекул хлора в разряде при том же токе будет выше, чем при меньшем давлении из-за роста частоты объемной атом-атомной рекомбинации. Поэтому если сравнить 2 смеси: 6 Torr Xe и 0.25 Torr Cl₂, а также 18 Torr Xe и 0.7 Torr Cl₂ (давление напуска последней в 3 раза больше при почти том же

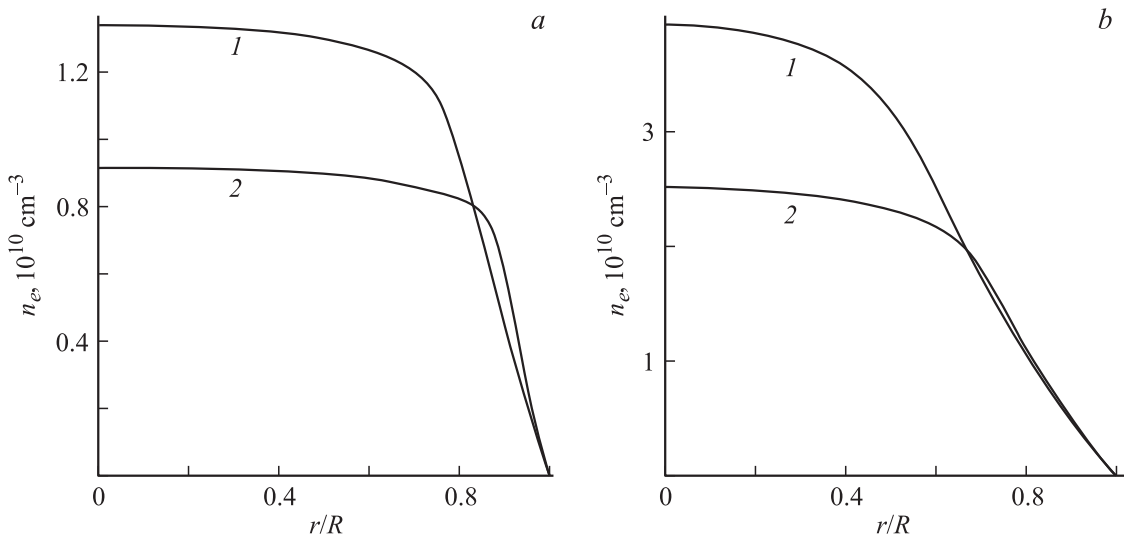


Рис. 4. Радиальные распределения электронной концентрации для различных составов газовой смеси, радиус трубки $R = 6$ мм: *a* — ток 10 мА, *b* — ток 25 мА; 1 — смесь 6 Torr Xe и 0.25 Torr Cl₂, 2 — смесь 6 Torr Xe и 0.5 Torr Cl₂.

составе), то максимум мощности УФ-излучения смещается в сторону больших разрядных токов (ср. рис. 2, *a* и *c*) — в общем, по той же причине, что и для уже обсуждавшегося случая повышенного содержания хлора.

Кроме того, при повышении давления равенство токов реализуется при большем напряжении на разряде, а значит, при повышенных вложенной мощности и газовой температуры. Поэтому имеет место рост поля E , а концентрация нейтралей N спадает относительно концентрации напуска сильнее, чем при более низких давлениях. В результате величина E/N , хотя и будет меньше, чем при меньших давлениях напуска, но ее снижение с давлением будет все же слабее, чем обратно пропорционально давлению. Поэтому и спад величины $\langle \sigma_{0M_i} \nu_e \rangle$ будет не очень значительным, а рост концентрации атомов инертного газа и концентрации электронов (из-за снижения их подвижности) приведет к тому, что концентрации и метастабильных атомов, и эксимерных молекул при токе, соответствующем максимуму УФ-излучения, будут выше, чем при меньшем давлении. Это выражается в большей интегральной мощности УФ-излучения в максимуме, чем при меньших давлениях (см. рис. 2, *a* и *c*, см. также [2]).

В то время как формы радиальных распределений эксимерных молекул при разрядных токах, соответствующих максимумам интенсивности УФ-излучения, оказываются близкими как при малых, так и при повышенных давлениях, они заметно различаются при малых разрядных токах (см. рис. 2, *b* и *d*). При малых давлениях распределение $N_{\text{XeCl}^*}(r)$ при снижении тока стремится к плоскому (см. рис. 2, *b*). А при повышенных давлениях распределение $N_{\text{XeCl}^*}(r)$ характеризуется наличием четко выступающего центрального максимума наряду с „плечеобразным“ спадом у стенок трубки; данная форма $N_{\text{XeCl}^*}(r)$ наблюдалась и в эксперименте

(см. рис. 2, *d* для тока 10 мА). Отметим, что сказанное касается и распределений $n_e(r)$ — рис. 5, *a, b*.

Объяснить такое отличие формы $N_{\text{XeCl}^*}(r)$ и $n_e(r)$ от плоской можно, лишь учтя неоднородность газовой температуры по радиусу, причем влияние этой неоднородности особенно сильно сказывается как раз при малых токах разряда. Если для контроля положить в модели T_g однородной по радиусу (взяв в качестве T_g среднее по сечению трубки значение), то оказывается, что для смеси 18 Torr Xe и 0.7 Torr Cl₂ при токе 10 мА решения системы модельных уравнений для концентраций и потоков заряженных частиц в работе [1] не существует! Физическая причина оказалась в том, что при усреднении T_g по радиусу величина E/N во всем объеме плазмы получается настолько малой, что ионизация не способна скомпенсировать прилипания.

Определяющая существование разряда величина параметра $P = \mu_p \nu_a / \mu_n \nu_i$ [1,11] всюду получается слишком большой (μ_p, μ_n — подвижности положительных и отрицательных ионов, ν_i, ν_a — частота ионизации и прилипания). В [11] при пренебрежении ионной температурой и равенстве подвижностей ионов, т.е. при $\tau = T_i/T_e = 0$ и $\mu_p = \mu_n$, получено следующее условие существования электроотрицательного разряда: $0 < P < 1$. При $\mu_p \neq \mu_n$ оно будет выглядеть иначе:

$$P < \frac{N_0 \mu_p / \mu_n}{N_0 (2 - \mu_p / \mu_n) + 1 + H - \mu_p / \mu_n}.$$

Здесь N_0 — отношение концентраций отрицательных ионов и электронов в центре разряда, а H — отношение коэффициентов электрон-ионной и ион-ионной рекомбинации. Для рассматриваемых разрядов, где отрицательными ионами являются Cl⁻, а среди положительных преобладают ионы Cl₂⁺, отношение $\mu_p / \mu_n \approx 0.7$ [12]. Поэтому для рассматриваемых разрядов вместо условия

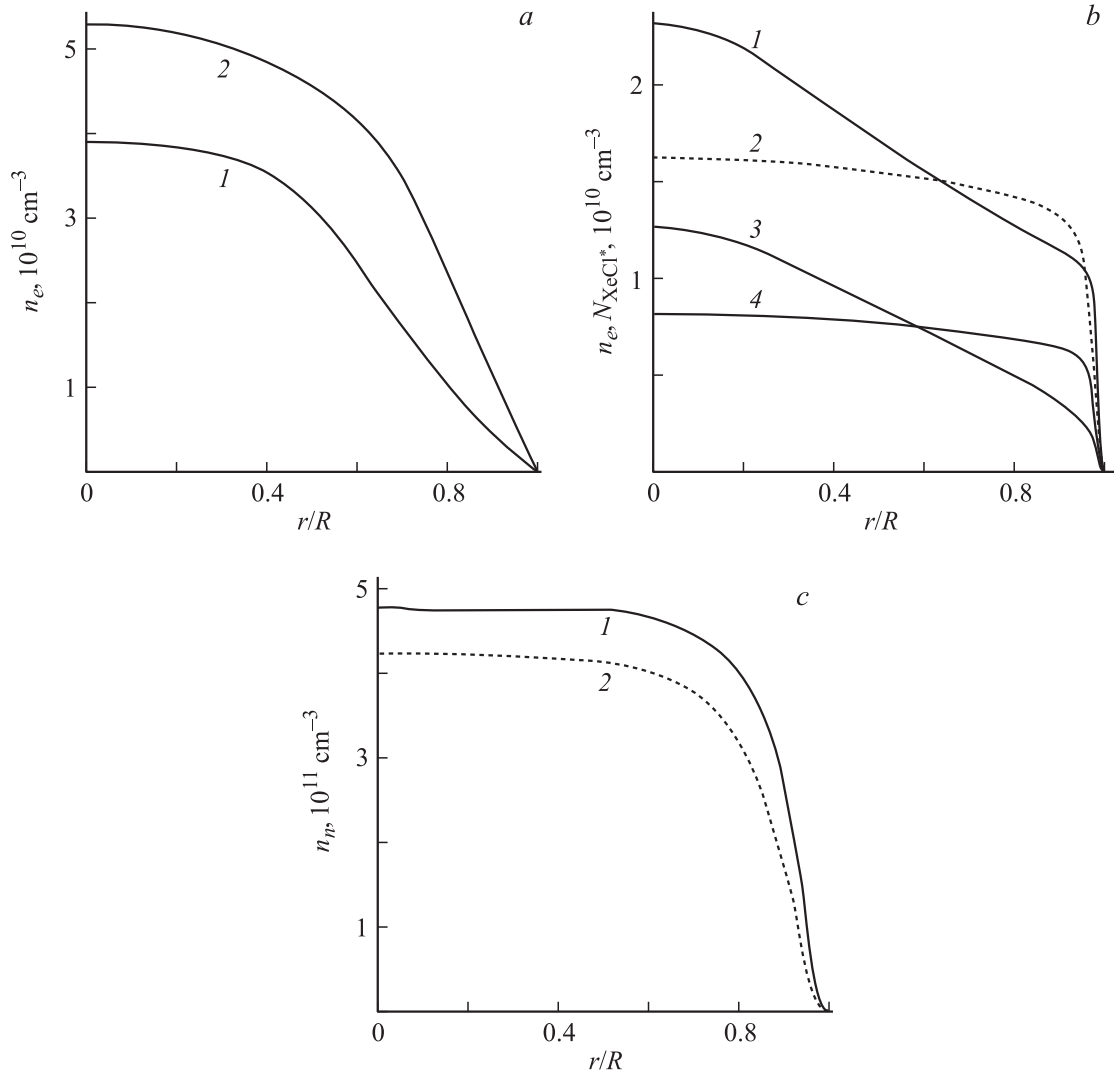


Рис. 5. Результаты расчетов радиальных распределений концентрации электронов, эксимерных молекул и отрицательных ионов для различных давлений газовой смеси, радиус трубки $R = 6$ мм: *a* — ток 25 мА, 1 — смесь 6 Torr Xe и 0.25 Torr Cl_2 , 2 — смесь 18 Torr Xe и 0.7 Torr Cl_2 ; *b* — ток 10 мА, смесь 18 Torr Xe и 0.7 Torr Cl_2 , 1 — $n_e(r)$, модельный расчет с реальной $T_g(r)$, 2 — то же, но в предположении однородного распределения газовой температуры по радиусу, $T_g = \text{const} = 1.05 \overline{T_g}(r)$, 3 — распределение $N_{\text{XeCl}^*}(r)$, расчет; 4 — то же в предположении однородного распределения газовой температуры по радиусу, $T_g = \text{const} = 1.05 \overline{T_g}(r)$; *c* — распределения концентрации отрицательных ионов, смесь 18 Torr Xe и 0.7 Torr Cl_2 , ток 10 мА, 1 — модельный расчет с реальной $T_g(r)$, 2 — те же смесь и ток, расчет в предположении однородного распределения газовой температуры по радиусу, $T_g = \text{const} = 1.05 \overline{T_g}(r)$.

$0 < P < 1$ необходимо выполнение более сильного условия:

$$0 < P < 0.55. \quad (3)$$

Введение $\tau = T_i/T_e > 0$ в модель [1], т.е. конечной ионной температуры, означает появление дополнительного механизма потерь положительных ионов — диффузии. Поэтому для существования разряда потребуются увеличение частоты ионизации, что должно привести к снижению пороговой величины P по сравнению со случаем $\tau = 0$. Модельные вычисления свидетельствуют, что при $\tau > 0$ область существования разряда по P будет еще более узкой, чем (3), так как система модельных

уравнений (4)–(8) в работе [1] не имеет решений для смеси 18 Torr Xe и 0.7 Torr Cl_2 при токе 10 мА и при усредненной по сечению T_g , а при этом $P \approx 0.26$. Параметр N_0 составляет в рассматриваемом случае ≈ 25 , а H в центре разряда ≈ 0.75 . Величина τ в центре разряда составляет $\approx 0.98 \cdot 10^{-3}$ при $T_g = \text{const} = \overline{T_g}(r)$ и $\tau \approx 0.012$ при реальном значении $T_g(0) \approx 800$ К.

Решение можно получить только при искусственном увеличении средней газовой температуры (и E/N) не менее чем на 5%, что соответствует величине $P \approx 0.18$ – 0.23 (рис. 6, кривая 2). Небольшое изменение величины параметра $P(r)$ в объеме плазмы для слу-

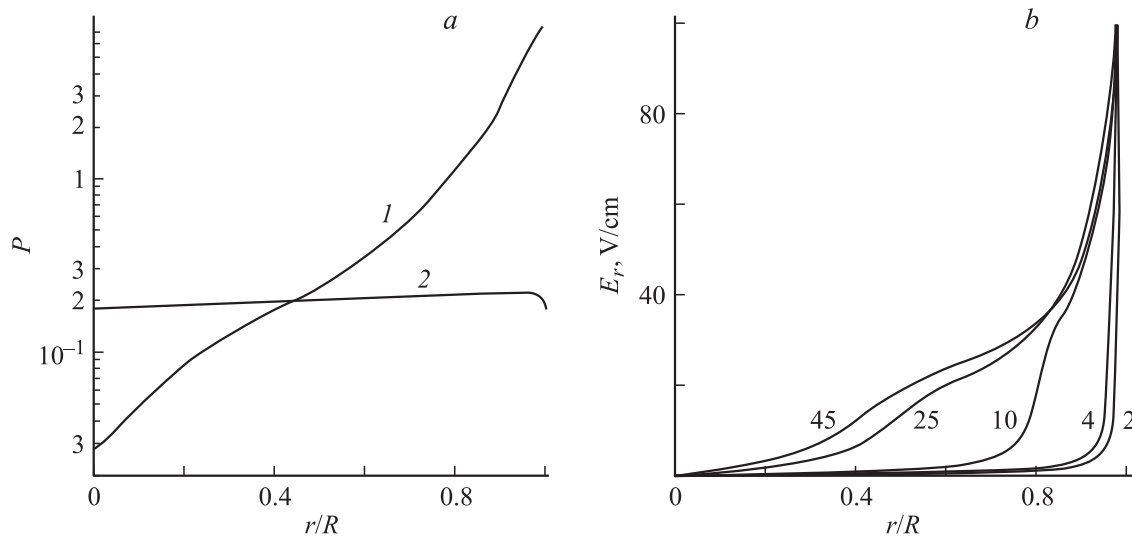


Рис. 6. Результаты расчетов радиальных распределений, радиус трубки $r = 6$ мм: *a* — параметра $p = \frac{\mu_p v_a}{\mu_n v_i}$ для смеси 18 Torr Xe и 0.7 Torr Cl₂ при токе 10 мА: 1 — с учетом реального распределения $T_g(r)$; 2 — в предположении однородного распределения газовой температуры по радиусу, $T_g = \text{const} = 1.05 \overline{T_g(r)}$ (для случая $T_g = \text{const} = \overline{T_g(r)}$ решения не существует); *b* — радиального электрического поля, смесь при напуске 6 Torr и 0.25 Torr Cl₂, значения тока (в мА) приведены у кривых.

чая $T_g = \text{const}$ объясняется изменением концентрации молекулярного хлора по радиусу вследствие диссоциации молекул электронным ударом. Форма модельных распределений $n_e(r)$ и $N_{\text{XeCl}^+}(r)$ в этом контрольном случае действительно оказалась близкой к плоской (см. рис. 5, *b*, кривые 2,4) — каковая форма предсказывается всеми моделями, рассмотренными в литературе, т.е. без учета неоднородности температур.

При учете реального распределения $T_g(r)$ и реального E/N , которое выше в центре, чем среднее по сечению значение, скорость рождения электронов в центре разряда превышает скорость прилипания, а величина параметра $P = \mu_p v_a / \mu_n v_i$ мала: меньше 0.2 даже при токе 10 мА (рис. 6, *a*, кривая 1). Но такого нельзя сказать о периферии разряда, где величина P даже может превосходить единицу.

Получается, что на периферию электроны лишь сносятся диффузией из центра и, прилипая в объеме, постепенно гибнут в ходе своего диффузионного движения к стенке, поскольку там скорость их рождения посредством ионизации недостаточна (в отличие от случая $T_g = \text{const} = 1.05 \overline{T_g(r)}$, когда ионизация всюду в плазме превышает прилипание). Это видно из сопоставления радиальных профилей скоростей рождения и гибели заряженных частиц — рис. 7, *a, b*. В итоге формируется не плоский, а заостренный в центре (там, где параметр P мал и где находится „исток“ электронов) радиальный профиль $n_e(r)$ со спадом от центра разряда, поначалу плавным, но затем — резким в пристеночной области, где концентрация отрицательных ионов сходит на нет (см. рис. 5, *b*, кривая 1). Кстати, аналогичный эффект проявляется и при больших диаметрах разрядной труб-

ки: на периферии не наблюдается разряда, поскольку там прилипание превышает ионизацию.

Между прочим, распределение самих отрицательных ионов не показывает заметных особенностей по сравнению со случаем усредненной по сечению газовой температуры $T_g = \text{const} = 1.05 \overline{T_g(r)}$ (см. рис. 5, *c*).

Такое распределение $n_e(r)$ отражается и в радиальном распределении концентрации эксимерных молекул, для которого также характерен подобный заостренный в центре профиль (см. рис. 2, *d*, ток 10 мА, рис. 5, *b*, кривая 3), что отмечено и в эксперименте. Наличие подобных радиальных профилей $n_e(r)$, $N_{\text{XeCl}_2^*}(r)$, да и самого существования разряда при таких условиях было бы невозможно объяснить в рамках имеющихся в литературе моделей без учета радиального распределения $T_g(r)$. Среднее по сечению плазмы значение параметра P в рассматриваемом примере равно 1.3, т.е. „в среднем“, без учета зависимости $T_g(r)$, скорость гибели электронов превышает скорость их рождения: существование разряда „в среднем“ невозможно.

Отсюда следует, что предлагаемые в литературе критерии существования разряда в электроотрицательных газах (например, в [11] или [3]) являются весьма приближенными и относительно справедливыми только в нереализуемом на практике случае однородного радиального распределения нейтральных частиц плазмы.

Вместе с тем имеет смысл обсудить и те моменты, когда модель дает не вполне адекватное соответствие эксперименту. Это относится к плазменным и излучательным характеристикам разряда при повышенных токах — больших, чем оптимальный ток, при котором реализуется максимум мощности УФ-излучения разряда. Так, из рис. 1, *a*; рис. 2, *a, c* видно, что зависимости

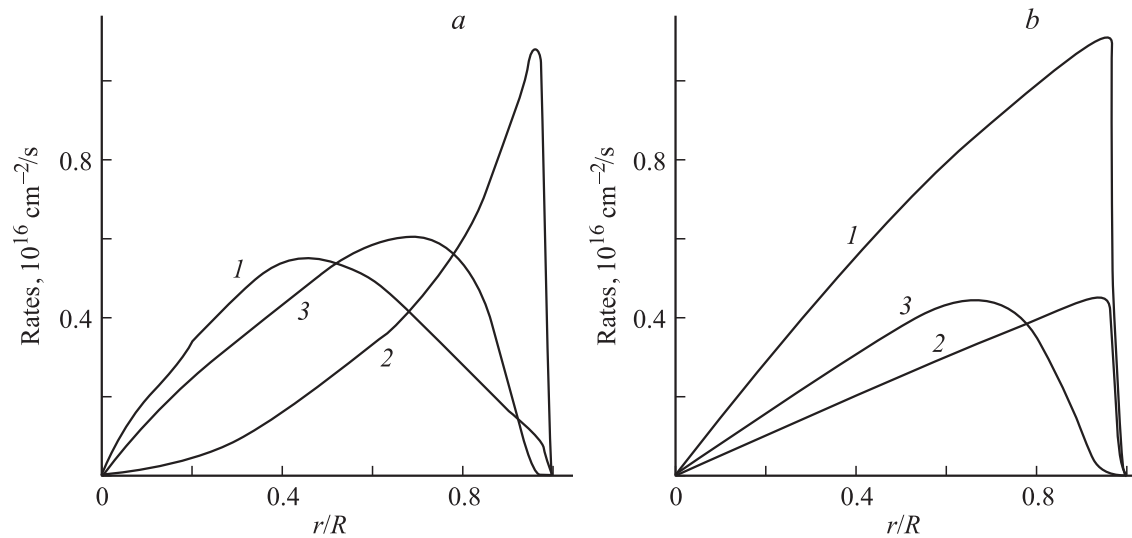


Рис. 7. Радиальные распределения объемных скоростей рождения и гибели заряженных частиц, смесь 18 Torr Xe и 0.7 Torr Cl₂ при токе 10 mA, радиус трубки $R = 6$ mm: *a* — с учетом реального распределения $T_g(r)$, *b* — в предположении однородного распределения газовой температуры по радиусу, $T_g = \text{const} = 1.05 T_g(r)$; 1 — $v_i n_e r$, 2 — $v_i n_e r$, 3 — $\beta_i n_p n_n$.

мощности УФ-излучения от разрядного тока при таких токах везде воспроизводятся моделью с большими погрешностями, чем при малых. То же относится к расчетным и экспериментальным радиальным распределениям концентрации эксимерных молекул. Хотя наблюдается как качественное, так и количественное их соответствие, но при токах, больших оптимального, это соответствие также хуже, чем при меньших токах (см. рис. 1, *d*; 3, *b,d*). Тому может быть несколько причин.

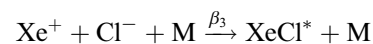
Во-первых, может нарушаться условие пренебрежения анизотропией функции распределения ионов по скоростям:

$$E_r \ll E_c \approx \frac{1}{\mu_n} \sqrt{\frac{8kT_i}{\pi\mu_{ia}}},$$

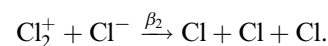
что соответствует, в частности, при $T_i \approx 2000$ K и давлении напуска 10 Torr условию $E_r \ll 450$ V/cm (при росте давления критическая величина E_c возрастает пропорционально ему). Из рис. 6, *b*, где приведены примеры расчета радиального поля E_r , видно, что оно достаточно мало в объеме плазмы, но возрастает к стенке, и в пристеночных областях толщиной 1–5% от радиуса трубки может превысить критическую величину E_c . В этих областях малость анизотропии распределения ионов по скоростям может не иметь места, следовательно, там возможны большие погрешности результатов моделирования. Впрочем, концентрация отрицательных ионов в пристеночных областях фактически сходится на нет, да и концентрации положительных ионов (критическое поле для которых больше) и электронов невелики по сравнению с их значениями в центре разряда. Поскольку чем меньше ток, тем меньше и толщина этих областей (см. рис. 6, *b*), то при малых токах пренебрежение анизотропией энергетического распределения ионов в этих областях не должно вносить

больших погрешностей, например, в расчетные значения концентраций эксимерных молекул и мощности УФ-излучения. Это, в общем, подтверждается сравнением с экспериментом. Но погрешности модели возрастают при больших токах, особенно в расчетах радиальных распределений заряженных частиц и $N_{\text{XeCl}_2^*}$ вблизи от стенок (см. рис. 1, *b, c*).

Во-вторых, критерий преобладания ионов Cl₂⁺ среди положительных ионов: $N_{\text{Cl}_2}/N_{\text{Cl}} \geq 1/150$ [12] может быть нарушен при больших токах в центре разряда вследствие снижения N_{Cl_2} из-за сильной диссоциации молекул хлора. При малых токах этот критерий выполняется всюду в плазме, а на периферии плазмы он выполняется и при больших токах. Впрочем, на дрейфовые и диффузионные свойства „ионной массы“ заметное количество ионов Xe⁺ не должно серьезно повлиять ввиду близкой подвижности ионов Cl₂⁺ и Xe⁺ в Хе (разница около 12% [13]). В работе [12] показано, что концентрация атомарных ионов Xe⁺ на порядок больше, чем молекулярных Xe₂⁺. Нарушение этого критерия может выразиться в уменьшении эффективного значения коэффициента ион-ионной рекомбинации β_i , особенно при малых давлениях, поскольку реакция рекомбинации



требует наличия третьего тела M (роль которого играет атом инертного газа), в отличие от реакции



Так, для давления напуска Хе 18 Torr и $T_g \approx 500$ K величина $N_{\text{Xe}}\beta_{i3}$ составит $\sim 4 \cdot 10^{-8}$ cm³/s [12], что еще вполне соизмеримо с $\beta_{i2} \approx 6.5 \cdot 10^{-8}$ cm³/s [12]. Но для давления Хе 6 Torr величина $N_{\text{Xe}}\beta_{i3}$ составит

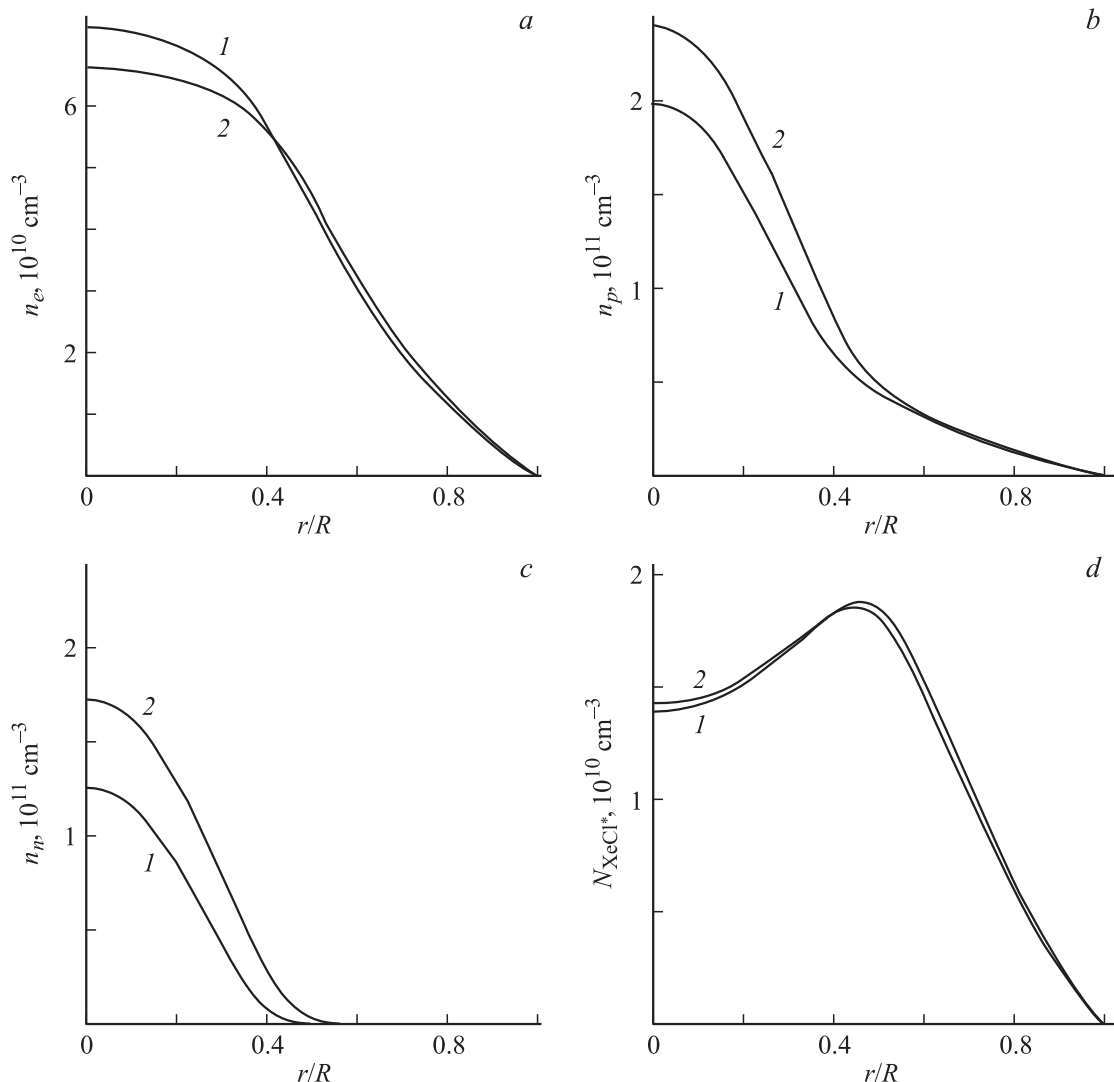


Рис. 8. Результаты модельных расчетов радиальных зависимостей концентраций частиц при различных значениях коэффициента ион-ионной рекомбинации β_i для смеси при напуске 6 Torr Xe и 0.25 Torr Cl₂, ток 35 mA, радиус трубки $R = 6$ mm: *a* — электронов, *b* — положительных ионов, *c* — отрицательных ионов, *d* — эксимерных молекул; 1 — стандартная модель, 2 — то же, с уменьшенным вдвое значением β_i .

$1.3 \cdot 10^{-8}$ cm³/s, что уже заметно меньше, чем β_{i2} (β_{i2} не зависит от давления инертного газа). Модельные расчеты, однако, показали, что снижение величины β_i даже в 2 раза влияет главным образом на величину концентрации отрицательных и положительных ионов, которые, естественно, вырастают, но все же гораздо меньше, чем в 2 раза, поскольку основным механизмом гибели положительных ионов и электронов остается диффузионное устранение [1] (рис. 8, *b*). На концентрацию и форму радиальных распределений электронов и эксимерных молекул двукратное снижение β_i влияет незначительно (рис. 8, *a, c*). Отсюда можно заключить, что нарушение указанного критерия, имеющее место при некоторых условиях разряда, хотя и внесет дополнительные погрешности в результаты модельных вычислений при повышенных токах, но наиболее важные для

практики результаты будут затронуты в незначительной степени.

В-третьих, при токах разряда, больших оптимального, заметную роль в рождении электронов начинает играть ступенчатая ионизация. Хотя при этом концентрация метастабильных атомов инертного газа (в сравнении с их концентрацией в основном состоянии) невелика, но с ростом тока она возрастает и может начать влиять на форму ФРЭЭ. Этот вопрос обсуждался в [1], было показано, что при реализованных в работе токах разряда влияние метастабилей на ФРЭЭ и на скоростные коэффициенты релевантных процессов мало, но ясно, что неучет этого влияния увеличивает погрешности расчета.

В-четвертых, большие токи приводят к существенному разогреву разрядной трубки (температура ее поверх-

ности могла достигать 250°С) и, возможно, к выделению посторонних газов из стенок и особенно из мест клеевых соединений кварцевой трубки с электродами [10], что может влиять на ФРЭЭ разряда в ходе эксперимента.

Большинство из указанных факторов учесть в модели или весьма затруднительно, или практически невозможно.

Но уместно сказать, что основные физические свойства разряда, в общем, удовлетворительно описываются существующей моделью, даже при повышенных токах. А главное, режимы работы разряда при повышенных токах не представляют большого интереса: они не очень выгодны для практического использования разряда как источника УФ-излучения. С ростом тока снижается КПД выхода УФ-излучения, а при пониженных давлениях и/или при небольшом содержании хлора спадает и абсолютная мощность УФ-излучения [2]. Разогрев стенок прибора и электродов при больших токах наряду с сильной диссоциацией молекул хлора на химически активные атомы вызывает усиленное взаимодействие хлора с материалом электродов, ускоряет диффузию его в стенки, что в итоге вызывает обеднение хлором рабочей смеси и снижение долговечности прибора.

Для практики было бы выгоднее работать при малых токах, где КПД выхода УФ-излучения достаточно высок [12], разогрев трубки и диссоциация хлора в разряде невелики [1], а долговечность прибора больше, чем при повышенных токах. Технология изготовления прибора для работы при малых токах была бы проще и дешевле. В частности, вместо оптического кварца можно взять более дешевое увиолевое стекло, у которого к тому же проницаемость для хлора ниже. А для достижения больших мощностей УФ-излучения можно взять несколько трубок, питаемых параллельно от общего источника.

Подводя итоги, можно констатировать, что разработанная модель позволяет количественно воспроизвести наблюдаемые в эксперименте зависимости мощности эксимерного УФ-излучения от разрядного тока в широком диапазоне составов и давлений газовой смеси, обеспечить удовлетворительное количественное соответствие расчетных и измеренных в эксперименте радиальных распределений концентраций электронов и эксимерных молекул, а также дать физическое объяснение наблюдаемым в эксперименте эффектам. Для этого необходимо учитывать в модели не только саму диссоциацию молекул галогена электронным ударом, но и ее радиальную неоднородность, а также радиальную неоднородность температуры газа.

Список литературы

- [1] Головицкий А.П. // ЖТФ. 2011. Т. 81. Вып. 3. С. 45–54.
- [2] Головицкий А.П., Лебедев С.В. // Опт. и спектр. 1997. Т. 82. № 2. С. 251–255.
- [3] Ломаев М.И., Панченко А.Н., Скакун В.С., Соснин Э.А., Тарасенко В.Ф. // Оптика атмосферы и океана. 1996. Т. 9. № 2. С. 199–206.

- [4] Ku J.K., Setser D.W. // Appl. Phys. Lett. 1986. Vol. 48. N 11. P. 689–691.
- [5] Bruce M.R., Layne W.B., Meyer E., Keto J.W. // J. Chem. Phys. 1990. Vol. 92. N 1. P. 420–427.
- [6] Bruce M.R., Layne W.B., Keto J.W. // Ibid. P. 428–436.
- [7] Смирнов Б.М. // УФН. 1983. Т. 139. Вып. 1. С. 53–81.
- [8] Aymar M., Coulombe M. // At. Data Tables. 1978. Vol. 21. N 6. P. 537.
- [9] Sabbagh J., Sadeghi N. // J. Quant. Spectr. Rad. Transfer. 1977. Vol. 17. P. 297–301.
- [10] Головицкий А.П., Кан С.Н. // Опт. и спектр. 1993. Т. 75. № 3. С. 604–609.
- [11] Franklin R.N., Daniels P.G., Snell J. // J. Phys. D: Appl. Phys. 1993. Vol. 26. P. 1638–1649.
- [12] Головицкий А.П. // Тр. СПбГПУ. 2008. № 507. С. 229–233.
- [13] Ellis H.W., McDaniel E.W., Albritton d.L., Viehland L.A., Linn S.L., Mason E.A. // Atomic Data. Nucl. Data Tables. 1978. Vol. 22. N 3. P. 179–217.
- [14] Головицкий А.П. // Тр. СПбГПУ. 2008. № 507. С. 233–241.