电激励 Ne-Xe-HCl 混合物的电子 能量分布函数和输运系数

傳滅芬 陈建文

(中国科学院上海光学精密机械研究所)

提 要

用解波尔兹曼输运方程的方法计算了电激励 Ne-Xe-HCl 混合物的电子能量分布函数和有关的输运系数, 并对计算结果作了讨论。

一、引 言

电子能量分布函数的计算是研究电激励气体激光器动力学过程及放电物理的基础工作,因为许多物理量,例如电子碰撞激发、电离速率、电子漂移速度等,都与电子能量有关,必须对特定放电条件下的电子能量分布求平均。对通常的气体激光器,电子能量分布都是非 麦克斯威型的,而且强烈的依赖于放电条件、混合气体的成分和总气压等参量。在稀有气体 卤化物准分子激光器中,尽管气体的主要成分是作为稀释剂的气体,但少量其它气体的加 入,对电子能量分布函数有明显的影响。

本文针对放电激励 XeCl 激光器的实验条件,计算了不同 *E*/*N* 值、不同气分比时的电 子能量分布函数、电子漂移速度、激发和电离速率及放电功率对各种过程的功率输运比,并 对所得结果作了讨论。最后,比较了 Ne 与 He 作稀释气体时放电功率的功率输运比。

二、电子能量分布函数的波尔兹曼方程

$$\begin{split} & \bigcup n(\varepsilon) d\varepsilon \ \bar{\varepsilon}_{s} \pi \hat{\varepsilon}_{s} \bar{\varepsilon}_{s} \bar{\varepsilon}_{s} \bar{\varepsilon}_{s} \bar{\varepsilon}_{s} \bar{\varepsilon}_{s} \pi (\varepsilon + d\varepsilon) \bar{\varepsilon}_{s} \bar{\varepsilon}_{s$$

其中

收稿日期: 1980年10月4日

其中 e、m、v(s)分别为电子的电荷、质量和速度, E 是放电电场强度, k 是波尔兹曼常数, T 是气体温度, Q'_i(s), Q'_i(s), Q'_i(s)分别为能量为 s 的电子对第 s 种粒子的激发、电离和弹性 碰撞截面, M_s 为第 s 种粒子的质量, δ_s 表示第 s 种粒子的数密度 N_s 与总粒子数密度 N 之 比, ϵ_{js}^* , ϵ_{ss}^* 分别为第 s 种粒子的激发(到激发态 j)和电离能量。 $\delta(s)$ 的出现, 表明所有的二 次电子能量均为零。

采用有限差分法,将电子的能量轴分成 k 个等分,每一段长度为 As,以 n_k表示能量 处于(k-1) As = s_k 和 kAs = s^t_k 间的单位能量间隔电子数密度,以差分代替对电子能量的微 分,(1)式化为 k 个耦合的常微分方程

$$n_{k} = a_{k-1}n_{k-1} + b_{k+1}n_{k+1} - (a_{k} + b_{k})n_{k} + \sum_{s} \sum_{j} N_{s} [R_{js, k+m_{js}}n_{k+m_{js}} + R_{js, k+m_{si}}n_{k+m_{si}} - R_{js, k}n_{k} - R_{s, k}^{i}n_{k} + \delta_{0k} \sum_{m} R_{sm}^{i}n_{m}], \qquad (2)$$

其中

$$a_{k} = \frac{2Ne^{2}}{3m} \left(\frac{E}{N}\right)^{s} \frac{1}{\nu_{k/N}^{+}} \left(\frac{1}{\Delta\varepsilon}\right)^{s} \left(s_{k}^{+} + \frac{\Delta\varepsilon}{4}\right) + \frac{\nu_{k}^{-}}{2\Delta\varepsilon} \left(\frac{kT}{2} - s_{k}^{+} + \frac{2kT}{\Delta\varepsilon} s_{k}^{+}\right),$$

$$b_{k+1} = \frac{2Ne^{2}}{3m} \left(\frac{E}{N}\right)^{s} \frac{1}{\nu_{k/N}^{+}} \left(\frac{1}{\Delta\varepsilon}\right)^{s} \left(s_{k}^{+} - \frac{\Delta\varepsilon}{4}\right) + \frac{\bar{\nu}_{k}^{+}}{2\Delta\varepsilon} \left(s_{k}^{+} - \frac{kT}{2} + \frac{2kT}{\Delta\varepsilon} s_{k}^{+}\right),$$

$$\frac{\nu_{k}^{+}}{N} = \left(\frac{2\varepsilon_{k}^{+}}{m}\right)^{1/2} \sum_{s} \delta_{s} Q_{m}^{s} \left(\varepsilon_{k}^{+}\right), \quad \bar{\nu}_{k}^{+} = 2mN \left(\frac{2\varepsilon_{k}^{+}}{m}\right)^{1/2} \sum_{s} \delta_{s} Q_{m}^{s} \left(\varepsilon_{k}^{+}\right) / M_{s},$$

$$R_{js,k} = R_{js} \left(\varepsilon_{k}^{+}\right), \quad R_{s,k}^{t} = R_{s}^{t} \left(\varepsilon_{k}^{+}\right),$$

 m_{js}, m_{st} 分别等于最靠近 $s_{js}^*/\Delta s$ 和 $s_{st}^*/\Delta s$ 的整数。

方程(2)没有计入超弹性过程、电子-电子相互作用,也没有考虑电负性气体对电子的吸附作用。在我们的实验条件下,气体是弱电离的,处于激发态的粒子数相对值是小的,因而可以忽略超弹性过程和电子-电子相互作用。为了讨论 HCl 的吸附对电子分布函数的影响,我们在方程(2)中加入一项

 $N_{\text{HCl}}R_{\text{HCl},k}n_{k} = R_{\text{HCl}}(s_{k}^{+})n(s_{k}^{+})N_{\text{HCl}} = Q_{\text{HCl}}(s_{k}^{+})v(s_{k}^{+})n(s_{k}^{+})N_{\text{HCl}},$ 其中 $Q_{\text{HCl}}(s)$ 是能量 s 的电子与 HCl 分子碰撞的捕获截面^[2]。对 $k \neq 0$ 的情况, 方程化为 $n_{k} = a_{k-1}n_{k-1} + b_{k+1}n_{k+1} - (a_{k} + b_{k})n_{k} + \sum \sum N_{\bullet}(R_{js,k+m_{j},s}n_{k+m_{j},s} - R_{js,k}n_{k})$

$$+R_{s,k+m_{s}}^{i}n_{k+m_{s}}-R_{s,k}^{i}n_{k})-N_{\rm HCl}R_{\rm HCl,k}n_{k},$$
(3)

我们需要的是稳态分布*,因此 nk=0。

考虑到处于能量 $k\Delta \epsilon$ 内的电子数守恒,得到边界条件 $a_k = b_1 = 0_o$

数值计算公式和截面数据:

方程(3)的稳态形式可用下面矩阵表示

$$\sum_{l} C_{kl} \cdot n_l = 0_{\circ} \tag{4}$$

矩阵 c 是一 K 乘 K 阶的方阵, 比较(4)与(3)很容易得出矩阵 c 的各元素, 这些元素的大部分为零,非零元素全部集中在主对角线和几条与主对角线平行的对角线上。因此,在数值计算中,可以只输入非零元素,大大减少对计算机内储的要求。

[•] 一般在电子碰撞过程中小于 10-11 sec 是瞬态过程, 而在 10-8 sec 时是稳态过程。

将(4)对不同的 k 值写出,得到 K 个未知数的 K 个耦合的线性齐次方程

$$c_{k, k-1}n_{k-1} + c_{k, k}n_{k} = 0,$$

$$c_{k-1, k-2}n_{k-2} + c_{k-1, k-1}n_{k-1} + c_{k-1, k}n_{k} = 0,$$

$$c_{k-2, k-3}n_{k-3} + c_{k-2, k-2}n_{k-1} + c_{k-2, k-1}n_{k-1} + c_{k-2, k}n_{k} = 0,$$

$$c_{k-3, k-4}n_{k-4} + c_{k-3, k-3}n_{k-3} + c_{k-3, k-2}n_{k-2} + c_{k-3, k-1}n_{k-1} + c_{k-3, k}n_{k} = 0,$$

$$c_{k, k-1}n_{k-1} + c_{k, k}n_{k} + c_{k, k+1}n_{k+1} + \dots + c_{k, k}n_{k} = 0_{o}$$
(5)

由(5)可知,如果给定一个 n_k,便可由第一式求出 n_{k-1},而由第二式求出 n_{k-2},……,依此类 推直到求出 n₁。这样,对任意给定的 n_k,都可用逐次代入法求得一组电子能量分布,在这 里,主要关心的是分布的相对值,因此只要使这组分布满足归一化条件即可,归一化条件为

$$\sum_{k} n_k \Delta \varepsilon = 1_{o} \tag{6}$$

求得 n_k后,便可由它求出各有关的输运系数:

(1) 电子的漂移速度

$$n_{d} = \sum_{k} \frac{(\bar{a}_{k} - \bar{b}_{k}) n_{k} \Delta s}{E \sum_{k} n_{k}}$$
(7)

(2) 平均电子能量

(3) 激发和电离速率

$$\overline{\varepsilon} = \sum_{k} \varepsilon_{k} n_{k} / \sum_{k} n_{ko}$$
(8)

$$X_{js} = \sum_{k} Q_{j}^{s}(\varepsilon_{k}^{+}) v(\varepsilon_{k}^{+}) n_{k} / \sum_{k} n_{kj}$$
⁽⁹⁾

$$X_{is} = \sum_{k} Q_s^i \left(\varepsilon_k^+\right) v\left(\varepsilon_k^+\right) n_k / \sum_{k} n_{ko}$$
⁽¹⁰⁾

$$\eta_{js} = R_{sj, k+m_s} n_{k+m_s} N_s m_{sj} \Delta \varepsilon / \dot{E}_g, \qquad (11)$$

$$\eta_{is} = R_{s, k+m_{is}}^{i} n_{k+m_{is}} N_{s} m_{is} \Delta \varepsilon / \dot{E}_{g}, \qquad (12)$$

其中

$$\begin{split} \tilde{a}_{k} &= \frac{2Ne^{2}}{3m} \left(\frac{E}{N}\right)^{2} \left(\frac{1}{\nu_{k/N}^{+}}\right) \left(\frac{1}{\varDelta\varepsilon}\right)^{2} \left(\varepsilon_{k}^{+} + \frac{\varDelta\varepsilon}{4}\right), \\ \tilde{b}_{k+1} &= \frac{2Ne^{2}}{3m} \left(\frac{E}{N}\right)^{2} \left(\frac{1}{\nu_{k/N}^{+}}\right) \left(\frac{1}{\varDelta\varepsilon}\right)^{2} \left(\varepsilon_{k}^{+} - \frac{\varDelta\varepsilon}{4}\right), \\ \dot{E}_{g} &= \sum_{k} (\bar{a}_{k} - \bar{b}_{k}) n_{k} \, \varDelta\varepsilon, \end{split}$$

其中 É, 是电子从外电场得到能量的速率。根据能量平衡条件, 电子从外电场得到能量的速 率应等于弹性碰撞损失能量的速率 É, 与非弹性碰撞损失能量速率 É, et 之和,

$$\dot{E}_{el} = -\sum_{k} \left[\left(a_{k} - \bar{a}_{k} \right) - \left(b_{k} - \bar{b}_{k} \right) \right] n_{k} \Delta \varepsilon, \qquad (13)$$

$$\dot{E}_{inel} = \sum_{k,s,j} \left(R_{sj,k+m_{sj}} N_s m_{sj} n_{k+m_{sj}} \Delta s + R_{s,k+m_{is}}^i N_s m_{is} n_{k+m_{is}} \Delta s \right)$$
(14)

$$\dot{E}_g = \dot{E}_{el} + \dot{E}_{inelo} \tag{15}$$

(15)式可用来检验计算的精度。在我们的计算中, \dot{E}_{g} -(\dot{E}_{el} + \dot{E}_{inel})在10⁻⁵到10⁻⁶之间。 E/N值越大,其差值越小。 我们计入的弹性过程是 Ne, Xe 的弹性碰撞,非弹性过程包括 HCl 的振动激发(v=0→v=1),离解吸附, Xe, Ne 的激发和 Xe 的电离,这些截面取自文献[$2\sim5$]。

三、结果与讨论

图 1 示出不同 *E*/*N* 值的电子能量分布 函数。混合气体成分为0.2% HCl, 2% Xe, 97.8% Ne, 总气压为3 大气压。随着 *E*/*N* 值的增加, 高能部分的电子数增加, 相应的低能部分电子数减少, 这是电子从外场获得了更多能量的结果。



图 1 电子能量分布函数与 *E/N* 值的关系 (0.2% HCl, 2% Xe, 97.8% Ne, 3 大气压) *E/N* 值是(10⁻¹⁶·V·cm²):

a. 1, b. 2, c. 3, d. 4.5

Fig. 1 Dependence of electron energy distributions on E/N value. Gas mixture (HCl:Xe:Ne=0.2%:2%:97.8%), Total pressure; 3 atm

(a) $E/N = 10^{-16} \nabla \cdot \text{cm}^2$, (b) $E/N = 2 \times 10^{-16} \nabla \cdot \text{cm}^2$, (c) $E/N = 3 \times 10^{-16} \nabla \cdot \text{cm}^2$, (d) $E/N = 4.5 \times 10^{-16} \nabla \cdot \text{cm}^2$



- 图 2 电子能量分布函数与 Xe 分压的关系 (0.2%HCl, 加 Ne 到 3 大气压, *E/N=* 3×10⁻¹⁶ V·cm²)。
- a. 10%Xe, b. 5%Xe, c. 0.5%Xe, d. 纯 Ne Fig. 2 Dependence of electron energy distributions on partial pressure of Xe
 0.2%HCl, Total pressure 3 atm; E/N=3×10⁻¹⁶ V·cm²
 - (a) 10%Xe, (b) 5%Xe,
 - (c) 0.5%Xe, (d) pure Ne

图 2 是不同 Xe 分压时的电子能量分布函数,并将纯 Ne 时的电子能量分布函数进行比较。 *E*/*N*=3×10⁻¹⁶ 伏·厘米², HCl 比分为 0.2%,对各种 Xe 分压加 Ne 到 3 大气压。我们看到,随着 Xe 比分的增加, 8eV 以下的电子增多, 8eV 以上的电子减少。显然,这是 Xe 对 8eV 以上电子的"阻止"作用所致, Xe 的激发电位是 8.3eV,大于 8.3eV 的电子因与 Xe

碰撞激发而失去能量降入低能区。可以设想,当 Xe 分压大于某一值后,可以使电子能量完 全不超过 8.3eV,形成 8.3eV 处的一个"垒"。由图可见, Xe 的加入对电子能量分布有明显 的影响,只有 0.5% 的 Xe,便可使分布函数有明显的差别。这一差别在高能部分更加明显。 这是具有较低激发电位的 Xe 减少了高能电子。

图 3 是不同 Xe 分压时的电子漂移速度与 *E*/*N* 值的关系。对任一 Xe 分压,电子漂移 速度均随 *E*/*N* 值的增加而增大,对同一 *E*/*N* 值,较小的 Xe 分压对应较大的漂移速度,这 与电子能量分布中高能电子的变化一致。



Fig. 3 Dependence of drift velocity of electrons on E/N value. 0.2%HCl, total pressure 3 atm.
(a) 5%Xe, (b) 10%Xe



图 4 平均电子能量与 E/N 值的关系, 0.2%HCl, 3 大气压, a. 10%Xe, b. 5%Xe, c. 2%Xe。 Fig. 4 Dependence of average electron energy on E/N value. 0.2% HCl, total pressure 3 atm. (a) 10%Xe, (b) 5%Xe, (c) 2%Xe

图 4 给出不同 Xe 分压时的平均电子能量随 E/N 值的变化。与电子 漂移 速度相似, 它亦随 E/N 值 的增加而增大,随 Xe 分压 的增加而减小。在很高的 E/N 值 (接近 10^{-15} V·cm²,如果电极距为 2 cm,对应充电电压为 150 kV)时,平均电子能量可达 10 eV。我 们的实验一般是在 $E/N = 3 \times 10^{-16}$ V·cm²条件下进行的,电极 距为 2 cm,充电电压为 40 kV~50 kV,此时的平均电子能量~6 eV。

图 5 给出 Xe 的激发速率 R_e 、电离速率 R_i 、Ne 的激发速率 R_n 、HOI 的振动激发速率 R_H 和 HOI 的离解吸附速率 R_{Hi} 与 E/N 值的关系。我们看到, R_e 、 R_i 、 R_n 随 E/N 值增加而增加, 而 R_H 、 R_Hi 则随 E/N 值增加而减小, 这是因为对 Xe, Ne 的激发和对 Xe 的电离靠高能 电子, 而 HOI 的振动激发和离解吸附靠低能电子。当 $E/N \sim 3.5 \times 10^{-16}$ V·cm² 时, $R_e = R_i$, 此时 Xe* 和 Xe⁺ 的数目接近相同。

图 6 是 R_e、R_i、R_n、R_H、R_H, 与 Xe 分压的关系。随 Xe 分压的增加, R_e、R_i、R_n减少, 这与高能电子的减少一致。Xe 分压增加, R_H、R_H增大, 这与低能电子的增加一致。

图 7 和图 8 给出放电功率到 Ne 激发、Xe 激发和 Xe 电离的功率输运比。图 7 对应 Xe 分压 2%,图 8 对应 Xe 分压 5%。由图可见,对小的 Xe 分压 当 *E*/N 超过 4×10⁻¹⁶ V·om² 时, Ne 的激发可以占总能量的很大一部分, 而在 Xe 分压较高时, Ne 的激发损耗能量较小,

报



图 5 激发、电离、离解吸附速率与 E/N 值的关系 0.2%HCl, 2%Xe, 97.8%Ne, 3 大气压 Fig. 5 Dependences of excitation rate, ionization rate and dissociation attachment

rate on E/N value

Gas mixture: 0.2%HCl, 2%Xe, 97.8% Ne, total pressure 3 atm



- 图 7 放电功率到各种非弹性过程和弹性过程的功率 输运比。0.2%HCl, 2%Xe, 97.8%Ne, 3 大气压 a. Ne激发, b. Xe电离, c. Xe激发, d. 弹性过程 Fig. 7 Fractional electron energy transfered to
 - various elastic and inelastic processes Gas mixture: HCl:Xe:Ne=0.2%:2%:97.8%, total pressure 3 atm
 - (a) Ne excitation, (b) Xe ionization, (c) Xe
 excitation, (d) elastic process



 图 6 激发、电离、离解吸附速率与 Xe 分压的关系 E/N=3×10⁻¹⁶ V·cm², 0.2%, HCl 加 Ne 到 3 大气压
 Fig. 6 Dependences of excitation rate, ionization rate and dissociation attachment rate on E/N partial pressure of Xe.

0.2%HCl, total pressure 3 atm



- 图 8 放电功率到各种非弹性过程和弹性过程 的功率输运比与 *E/N* 的关系 0.2%HCl, 5%Xe, 94.8%Ne
- Fig. 8 Fractional electron energy transferred to various elastic and inelastic processes
- Gas mixture: HCl:Xe:Ne=0.2%:5%:94.8%, total pressure 3 atm not available for elastic<0.1
 (a) Ne excitation, (b) Xe ionization,
 (c) Xe excitation

在放电激励 XeCl 激光器中, XeCl* 的形成可通过激发态通道

 $Xe^* + HCl \longrightarrow XeCl^* + H$,

也可通过离子通道

$$Xe^++Cl^-+M \longrightarrow XeCl^*+M_{2}$$

Xe⁺ 可以经电子碰撞激发形成,在 Ne 作稀释气体时还可经 Penning 过程形成,

 $Xe + Ne^* \longrightarrow Xe^+ + Ne + e_o$

由于 Ne* 的数密度有相当比例,这一过程将起重要作用。

为了比较,我们在与图 5 同样条件下,将 Ne 换成 He, 计算了 Re、Ri、RHe、RH、RH, 如 图 9 所示。RHe 为 He 的激发速率。我们发现,对同样的 *E*/N 值, RHe 比 Rn 小两个量级。 Re、Ri、RH、RH 的变化趋势与 Ne 时一致,但有较大斜率。图 10 是在与图 7 同样条件下,将 Ne 换成 He 得到的结果。我们发现 He 激发态的功率输运比小于 10⁻¹⁹(机器零)。由图 10 可见,在 *E*/N~2×10⁻¹⁶V·cm² 时, Xe⁺ 与 Xe^{*} 的速率接近相等,比 Ne 时为低,因此用



图 9 以 He 作稀释剂时,激发、电离、离解吸附 速率与 E/N 的关系

0.2%HCl, 2%Xe, 97.8%He,3 大气压

Fig. 9 Dependence of excitation rate, ionization rate and dissociation attachment on E/N value (He as buffer gas)

Gas mixture:HCl: Xe:He=0.2%:2%:97.8%, total pressure 3 atm



图 10 以 He 作稀释剂时的功率输运比与 E/N 关系, 0.2% HCl, 2% Xe, 97.8% He. 3 大气压

(a) Xe 电离, (b) Xe 激发, (c) 弹性过程

- Fig. 10 Dependence of fractional electron energy transferred on E/N value (He as buffer gas)
- Gas mixture: HCl:Xe:He=0.2%:2%:97.8%, Total pressure 3 atm
 - (a) Xe ionization, (b) Xe excitation,
 (c) Elastic process

He 代替 Ne 时,离子通道将成为重要的。另一点是弹性过程的损耗在 He 为主的放电中比 Ne 为主时高达一个量级。这是用 He 作稀释不如用 Ne 的重要原因之一¹⁶¹。

最后, 计算表明, 在上述 *B*/*N* 值范围内, 当 HOI 的分压 <0.5% 时, HOI 的振动激发 和电子吸附对电子能量分布的影响在小数点后第三位有效数字上, 因此在计算中可以忽略。

参考文献

- [1] S. D. Rockwood; Phys. Rev. (A), 1973, A8, No. 5 (No v), 2348.
- K. Smith, R. M. Thomson; «Computer Modeling of Gas Lasers», (New York and London, 1978).
- [2] L. G. Christophorou et al.; J. Chem. Phys., 1968, 48, No. 5 (1 Mar), 1949.
- [3] A. Von Engel ;«Ionized Gases» (Oxford at the Clarendon Press, 1965).
- [4] K. Rohr, F. Liboer; J. Phys. (B), 1976, 9, No. 4 (1 Oct), 2521.
- [5] L. T. Specht et al.; J. A. P., 1980, 51, No. 1 (Jan), 166.
- [6] Chen Jianwen, Fu Shufen, Liu Miaohong; A. P. L., 1980, 37, No. 10 (15 Nov), 883.

Electron energy distributions and transport coefficients in electrically excited Ne-Xe-HCl

FU SHUFEN AND CHEN JIANWEN

(Shanghai Institute of Optics and Fine Mechanics, Academia Sinica)

(Received 4 October 1980)

Abstract

This paper reports the calculated results of electron energy distributions and transport coefficients in a discharge-excited mixture of HCl, Xe and Ne. The effects of the mixture gas compositions and E/N values on the electron energy distributions have been discussed. Excitation rates, ionization rates and dissociation attachment rates have been calculated by numerically solving the Boltzmann equation, and dependences of these rates on E/N value and Xe partial pressure has been discussed.

The calculated results show that the higher energy electrons increase with the increasing of E/N value. Average electron energy was up to 6 eV when E/N was about 3 10^{-16} V·cm². Fractional electron energy transferred to various inelastic and elastic processes and dependence on E/N value are evaluated. The fractional electron energy transferred to elastic process is very little in the conditions of typical discharge-excited excimer lasers, so that it can be neglected.

In conclusion, fractional electron energy transferred to various processes is obtained when Ne was replaced by He as the buffer gas.