

МОДЕЛИРОВАНИЕ ДИНАМИКИ И ИЗЛУЧЕНИЯ ЭРОЗИОННОЙ ПЛАЗМЫ, ВОЗБУЖДАЕМОЙ ПРИ ЛАЗЕРНОМ ВОЗДЕЙСТВИИ НА МИШЕНЬ

Ю. А. Станкевич¹, К. Л. Степанов¹, Л. К. Станчиц¹,
Е. А. Ершов-Павлов², К. Ю. Кацалап²

¹ Институт тепло- и массообмена им. А. В. Лыкова НАН Беларуси, Минск, usa@hmti.ac.by

² Институт физики им. Б.И. Степанова НАН Беларуси, ershov@imaph.bas-net.by

При действии лазерного излучения с плотностью потока $\sim 10^8$ Вт/см² у поверхности облучаемой мишени возникает эрозионная плазма. Эмиссионный спектр ее содержит информацию о компонентном составе плазмы и самой мишени, что является физической основой лазерно-индуцированной эмиссионной спектроскопии (ЛИЭС). В работе исследуются гидродинамические процессы в лазерной плазме, сопровождающие воздействие одиночных и сдвоенных лазерных импульсов наносекундной длительности, а также эмиссионные спектры, генерируемые плазменным факелом. Представлены две модели, созданные для исследования гидродинамики лазерного факела и его теплового излучения. Первая из них путем решения самосогласованной задачи нагрева и испарения мишени и двумерного осесимметричного течения продуктов эрозии в окружающее пространство описывает формирование и эволюцию лазерного факела. Вторая модель позволяет по найденным таким образом пространственно-временным параметрам течения определить спектральные характеристики выходящего излучения. С этой целью в приближении “line-by-line” решается уравнение переноса излучения вдоль направления наблюдения, позволяющее определить мгновенные и интегральные спектры входящего излучения. Весь анализ выполнен для мишени из алюминия.

Ключевые слова

Лазерная плазма, эмиссионный спектр, гидродинамика факела, перенос излучения

Условные обозначения

T – температура, К, эВ; ρ – плотность, г/см³; c_v – теплоемкость, Дж/(г К); W – плотность теплового потока, Вт/см²; χ – коэффициент теплопроводности Вт/(см К); R – коэффициент отражения поверхностью мишени; u и v – осевая и радиальная компонента вектора скорости, см/с; P – давление, атм; ϵ – удельная внутренняя энергия, эрг/г, Дж/г; E – полная удельная энергия.

Введение.

Лазерное возбуждение эмиссионных спектров зависит от совокупности процессов, сопровождающих действие лазерного излучения на мишень [1–2]. Это – нагрев поверхности мишени, ее испарение, движение продуктов абляции в окружающей атмосфере, образование эрозионного факела, его разлет и взаимодействие с внешней средой, генерация ударных волн, взаимодействие разлетающейся плазмы с лазерным излучением и т. д. Все эти процессы влияют на динамику испарения вещества, параметры плазменного факела и, в конечном счете, на качество эмиссионных спектров.

В последние годы число публикаций по проблемам ЛИЭС резко выросло [3]. При этом основные усилия были направлены на разработку новых методов для достоверного количественного ЛИЭС-анализа с целью усиления потенциала этого метода и

минимизации его недостатков. Одним из них является сравнительно невысокое качество получаемых эмиссионных спектров. Как следствие, для лазерного спектрального анализа характерна относительно более низкая чувствительность и точность в сравнении с наиболее развитыми и широко используемыми в настоящее время методами, основанными на других способах возбуждения, например, электроискровом или индукционном нагреве материала образцов [4]. Важно также иметь в виду, что интенсивности спектральных линий, которые дают качественную и количественную информацию о составе образца, определяются не только концентрацией различных компонент в образце, но и свойствами самой плазмы. Они же в свою очередь зависят от параметров лазерного импульса (энергия, удельная мощность, длина волны), свойств мишени и окружающей атмосферы.

Один из способов улучшения контрастности селективных спектров плазмы является воздействие на мишень сдвоенных лазерных импульсов, причем сдвиг во времени между ними должен быть сравним со временем существования индуцируемой плазмы. Экспериментально установлено, что двухимпульсное воздействие существенно повышает интенсивность спектральных линий по сравнению с эквивалентным по энергии одноимпульсным воздействием. Впервые использование сдвоенных лазерных импульсов для возбуждения эмиссионных спектров лазерной плазмы было предложено в [5]. Идея состояла в том, что поглощение излучения второго импульса приводит к дополнительному возбуждению частиц в эрозионном факеле.

Несмотря на активные исследования двухимпульсного режима [6], до сих пор отсутствует ясное понимание процессов и механизмов, обеспечивающих наблюдаемое усиление излучения в линиях. Ясно лишь, что при действии сдвоенных импульсов в эрозионной плазме возникают условия, благоприятные для излучения спектральных линий [7]. По-видимому, обоснованные выводы могут быть сделаны путем анализа результатов расчетов по комплексной самосогласованной модели, учитывающей главные особенности протекающих процессов.

1. Моделирование динамики лазерного факела

В типичных для ЛИЭС условиях умеренной плотности мощности излучения ($q \sim 10^7 \div 10^9$ Вт/см²), реализуется так называемый тепловой механизм разрушения мишени. ЛИ частично отражается от поверхности образца, а остальная его часть поглощается в узкой поверхностной зоне. В результате температура поверхности повышается. Поглощенная поверхностью энергия передается вглубь материала мишени механизмом теплопроводности. Когда в процессе воздействия температура поверхности достигает температуры плавления, вглубь мишени начинает распространяться волна плавления, при этом часть энергии затрачивается на плавление материала мишени. Если тепловой поток, обусловленный теплопроводностью мишени, ниже потока ЛИ, температура поверхности продолжает возрастать. Когда давление насыщенных паров вещества превысит давление окружающей атмосферы, начинается интенсивное испарение материала мишени. Вглубь ее распространяется волна испарения, а поступающие с поверхности пары формируют эрозионный факел. Поглощение ЛИ в испаренном веществе мишени вызывает его дальнейший разогрев и ионизацию. Под действием градиента давления эрозионный факел расширяется, его гидродинамическое взаимодействие с окружающей средой приводит к сложной нестационарной картине течения [8].

Динамика нагрева мишени описывается уравнением теплопроводности

$$\frac{\partial(\rho_c c_v T)}{\partial t} + \text{div}W = 0, \quad W = -\chi \cdot \text{grad}T \quad (1.1)$$

Граничное условие на поверхности (границе раздела конденсированной и газовой фазы) для z – компоненты теплового потока имеет вид:

$$W_z(r, z = 0, t) = \begin{cases} -\chi \partial T / \partial z|_{z=0} = (1-R) \cdot q(r, t) & r < r_L \\ 0 & r > r_L \end{cases} \quad (1.2)$$

где R – коэффициент отражения поверхностью мишени. Исходная температура всей области постоянна и равна T_0 . С началом испарения поглощенная поверхностью плотность потока лазерного излучения уменьшается за счет затрат на испарение. При этом граничное условие на поверхности мишени принимает вид:

$$W_z(r, z = 0, t) = (1-R) \cdot q(r, t) - \rho_c V_{sub} \Delta H \quad (1.3)$$

где V_{sub} – скорость распространения фронта испарения вглубь мишени; $\Delta H = \Delta H_{sub} + \Delta H_t$ удельная тепловая энергия, которую необходимо затратить на перевод единицы массы из конденсированного состояния в газообразное; ΔH_{sub} – удельная энтальпия испарения; $\Delta H_t = H(T_s) - H(T_0)$ – затраты на нагрев материала мишени от начальной температуры T_0 до температуры поверхности $T_s(z=0)$. Скорость волны испарения можно определить из условия сохранения потока массы на фронте испарения:

$$\rho_c V_{sub} = \rho_{vap} V_{vap} \quad (1.4)$$

где ρ_{vap} – плотность насыщенных паров материала мишени при температуре поверхности T_s , а V_{vap} – скорость разлета продуктов эрозии. Эту скорость можно оценить, полагая ее равной скорости звука в парах: $V_{vap} = \sqrt{\gamma k T_s / A}$. Здесь γ – показатель адиабаты, A – средняя масса атомов или молекул продуктов эрозии.

Разлетающиеся от мишени продукты ее разрушения образуют в окружающей среде эрозионный лазерный факел. Динамика его разлета в цилиндрической системе координат описывается системой уравнений сохранения массы, энергии и импульса:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho}{\partial t} + \text{div}(\rho \mathbf{V}) &= 0; & \frac{\partial \rho E}{\partial t} + \text{div}(\rho E \mathbf{V}) + \text{div}(\mathbf{P} \mathbf{V}) + \frac{\partial q_+}{\partial z} - \frac{\partial q_-}{\partial z} &= 0; \\ \frac{\partial \rho u}{\partial t} + \text{div}(\rho u \mathbf{V}) + \frac{\partial P}{\partial z} &= 0; & \frac{\partial \rho v}{\partial t} + \text{div}(\rho v \mathbf{V}) + \frac{\partial P}{\partial r} &= 0 \end{aligned} \quad (1.5)$$

Здесь \mathbf{V} – вектор скорости, $E = \epsilon + V^2 / 2$. Поток лазерного излучения, направленного к поверхности мишени q_- и отраженного q_+ от нее, определяется выражениями:

$$q_-(r, z, t) = q(r, \infty, t) \cdot \exp\left[-\int_z^\infty k_L dz'\right], \quad q_+(r, z, t) = R(T_s) \cdot q_-(r, 0, t) \cdot \exp\left[-\int_0^z k_L dz'\right], \quad (1.6)$$

где k_L – коэффициент поглощения плазмы на частоте излучения лазера, $R(T_s)$ – коэффициент отражения в общем случае зависит от температуры.

Система (1.5) – (1.6) замыкается термическим и калорическим уравнениями состояния, а также зависимостью коэффициента поглощения лазерного излучения от T, ρ, λ . Все они задаются в табличном виде [9–10]

$$T = T(\rho, \epsilon), \quad P = P(\rho, \epsilon), \quad k_L = k_L(T, \rho, \lambda) \quad (1.7)$$

При совместном решении тепловой и газодинамической задачи скорость разлета продуктов разрушения от поверхности V_{vap} определяется в результате решения газодинамической задачи и условий сохранения потоков массы, импульса и энергии в кнудсеновском слое [1]. Связь параметров на границе кнудсеновского слоя с температурой

поверхности T_s и плотностью насыщенных паров $\rho_{\text{vap}}(T_s)$ в зависимости от скорости движения паров в гидродинамической области определяется выражениями [11]:

$$\frac{T_g}{T_s} = \left[\sqrt{1 + \pi \left(\frac{\gamma - 1}{\gamma + 1} \frac{m}{2} \right)^2} - \sqrt{\pi} \frac{\gamma - 1}{\gamma + 1} \frac{m}{2} \right]^2, \quad m = \frac{V_g}{\sqrt{2kT_g/A}}, \quad (1.8)$$

$$\frac{\rho_g}{\rho_s} = \sqrt{\frac{T_s}{T_g}} \left[\left(m^2 + \frac{1}{2} \right) \exp(m^2) \operatorname{erfc}(m) - \frac{m}{\sqrt{\pi}} \right] + \frac{1}{2} \frac{T_s}{T_g} \left[1 - \sqrt{\pi} m \exp(m^2) \operatorname{erfc}(m) \right].$$

Индекс g отвечает значениям на газодинамической границе кнудсеновского слоя, s – на границе раздела фаз. Таким образом, решение внутренней тепловой задачи с помощью граничных условий связывается с граничными условиями и режимами течения во внешней газодинамической области.

Для численного решения системы сформулированных уравнений используется метод расщепления по физическим процессам. Для решения уравнения теплопроводности в конечно-разностном виде применяется схема продольно-поперечной потоковой прогонки [12]. Для интегрирования системы газодинамических уравнений используется метод крупных частиц [13]. Сведения о теплофизических свойствах алюминия (теплоемкость, теплопроводность, зависимость от T давления насыщенных паров и т.д.) были взяты из литературных источников [14–18].

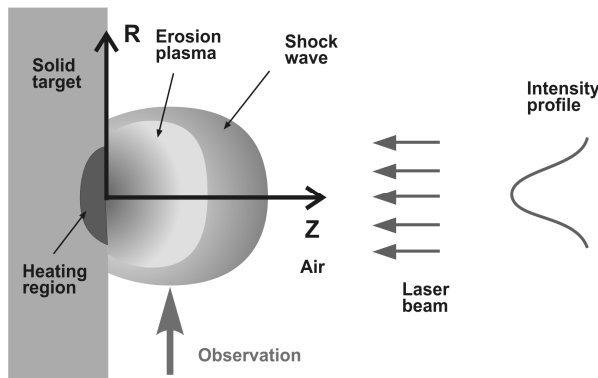


Рис. 1. Геометрическая схема задачи

На рис. 1 показана схема рассматриваемой ниже задачи.

Моделирование динамики лазерной плазмы проведено для условий эксперимента [19]. В них использовался Nd-лазер с длиной волны 1.06 мкм, длительность излучения на полуширине ~15 нс, энергия – 50 мДж, радиус пятна 0.4 мм, максимальная плотность мощности ~0.8·10⁹ Вт/см². Распределение лазерного излучения по пятну принято гауссовым. Также к гауссовой

близка временная форма импульса излучения. При действии сдвоенных импульсов пауза между ними составляла 5 мкс.

Кратко опишем результаты численного моделирования. При $t \approx 8$ нс давление насыщенных паров алюминия становится выше атмосферного, начинается испарение мишени. К 15 нс в центре пятна на облучения в результате поглощения лазерного излучения продуктами эрозии наблюдается появление плазмы. К 30 нс эрозионный факел экранирует мишень, и поступление массы с поверхности мишени прекращается. В дальнейшем лазерное излучение полностью поглощается продуктами эрозии, и навстречу лазерному лучу распространяется волна поглощения. К моменту окончания лазерного импульса удаление волны поглощения от поверхности мишени составляет 0.5 мм – на этой стадии разлет эрозионного факела еще имеет «одномерный характер». Эффекты неоднородности распределения параметров в лазерном факеле по радиусу определяются радиальным профилем плотности мощности лазерного излучения по пятну облучения. Распределения газодинамических параметров на оси симметрии вдоль координаты z показаны на рис. 2 а. На рис. 2 б представлены те же зависимости в

двухимпульсном режиме воздействия. Цифры у кривых здесь отвечают моментам времени после начала второго импульса. Основное отличие действия повторного импульса от одиночного состоит в присутствии в этом случае у поверхности мишени плазмы.

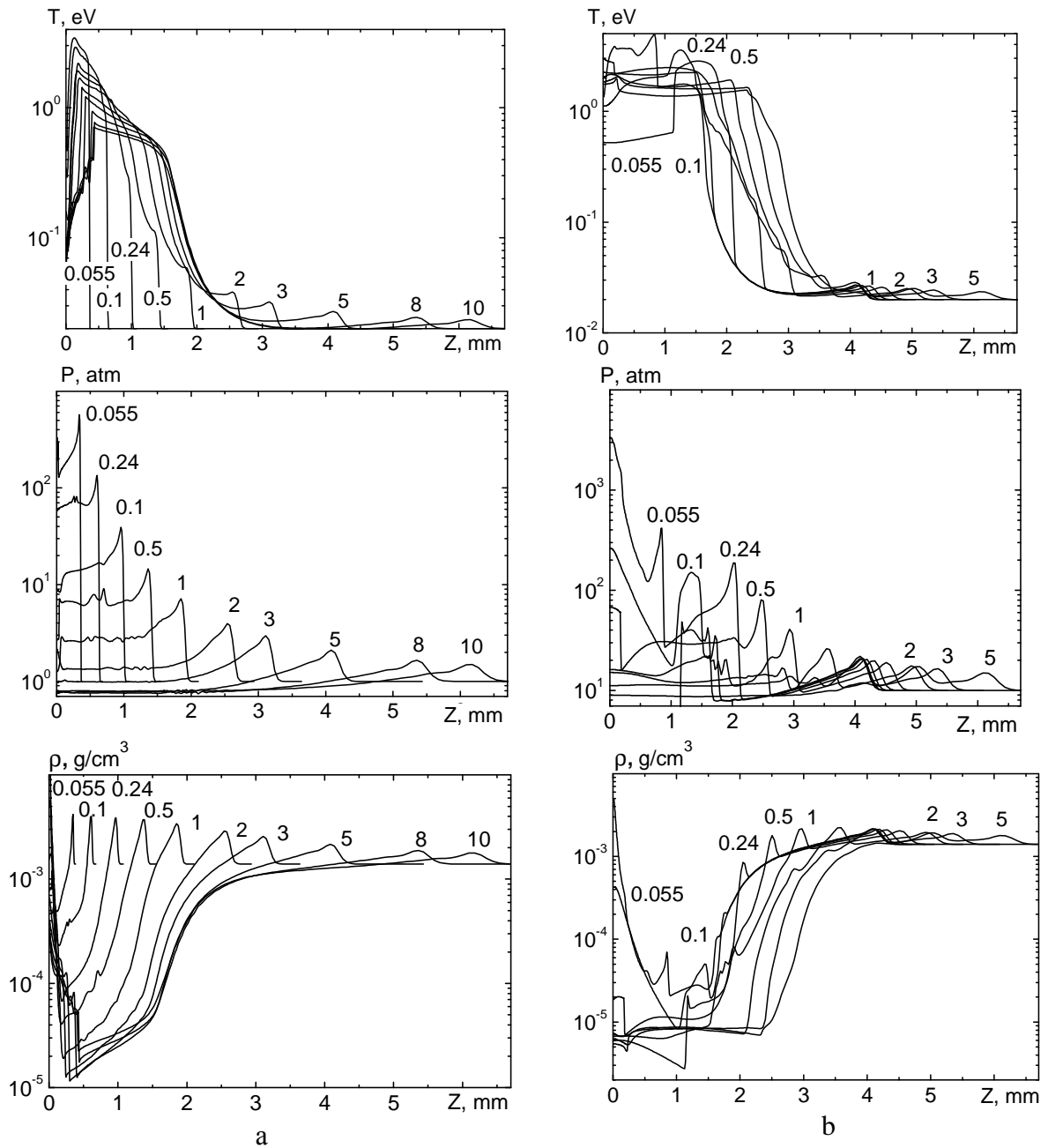


Рис. 2. Аксиальные профили температуры, давления и плотности в одноимпульсном (а) и двухимпульсном (b) режимах в последовательные моменты времени (мкс)

К моменту начала второго импульса оптическая толщина плазмы для лазерного излучения $\approx 5 \cdot 10^{-3}$, но уже к $t \approx 20$ нс она становится близкой к 1. В результате объемного поглощения факелом лазерного излучения поверхность мишени в максимуме импульса практически полностью экранируется, большая доля лазерного излучения выделяется в плазме. Результатом этого является заметно более высокая температура факела и более низкая его плотность. Отсюда и наблюдаемый рост скорости разлета после дей-

ствия второго импульса. Со временем расширение плазмы сказывается на ее прозрачности, начиная с $t \approx 60$ нс, оптическая плотность факела уменьшается.

На рис. 3 даны поля температуры и электронной концентрации в факеле для нескольких моментов времени. Верхняя половина графиков соответствует одноимпульсному воздействию, нижняя – действию сдвоенного лазерного импульса, причем в этом случае время отсчитывается от момента окончания второго импульса.

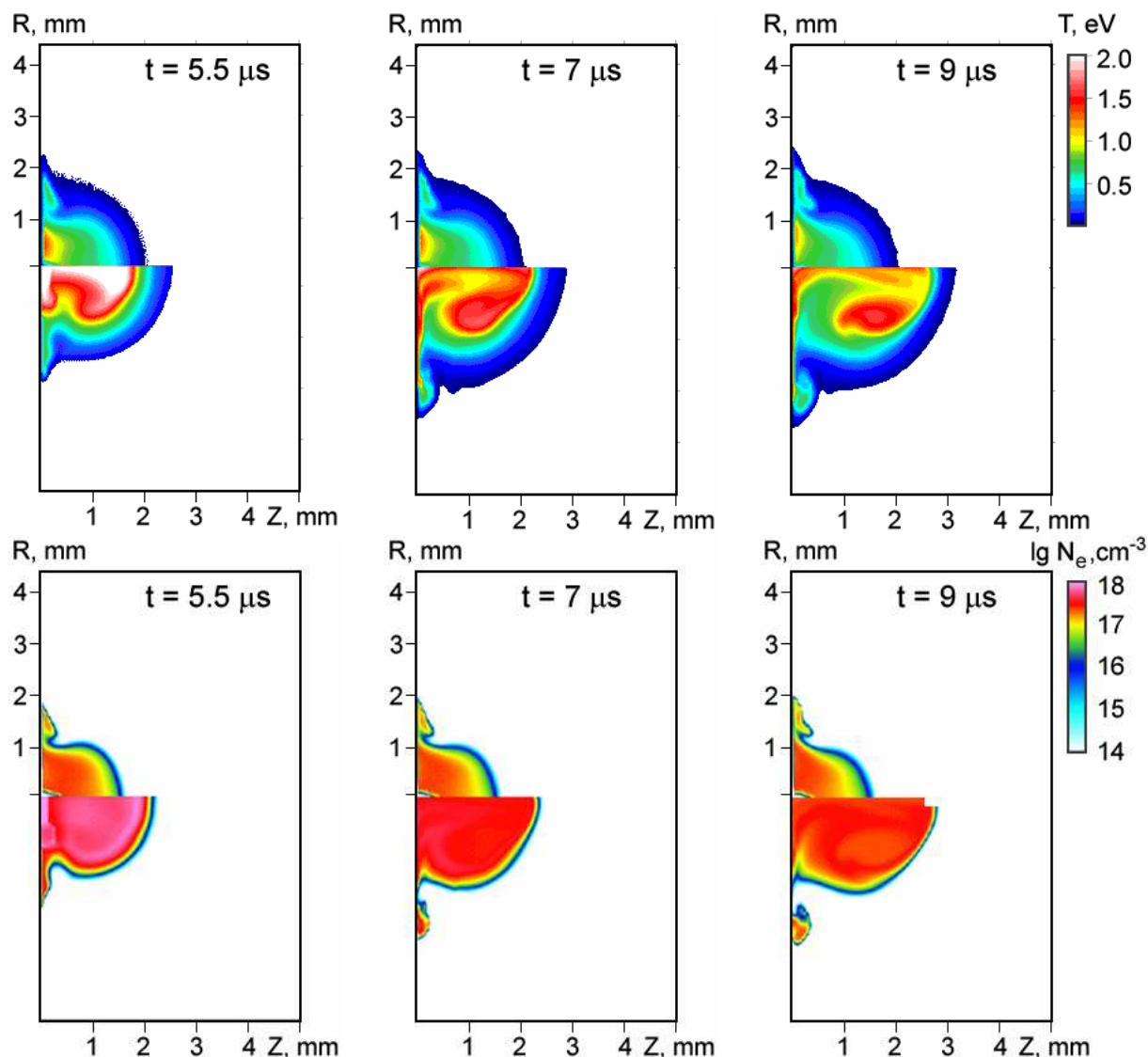


Рис. 3. Пространственные распределения температуры и плотности электронов в факеле в различные моменты времени для случая одно- и двухимпульсного воздействия

Временная эволюция радиальных профилей температуры и плотности на высоте 1 мм над поверхностью мишени показана на рис. 4. Левые графики относятся к одиночному лазерному импульсу, правые – к сдвоенному лазерному импульсу. Видно, что в последнем случае характерные температуры факела имеют более высокие значения (20-30 кК, вместо 5-10 кК) а плотность центральной части факела ниже, чем при одиночном импульсе. Кроме этого, в случае двойного импульса имеет место сложный немономонотонный профиль температуры. В случае одиночного импульса температурный профиль близок к параболическому с максимумом в центральной области.

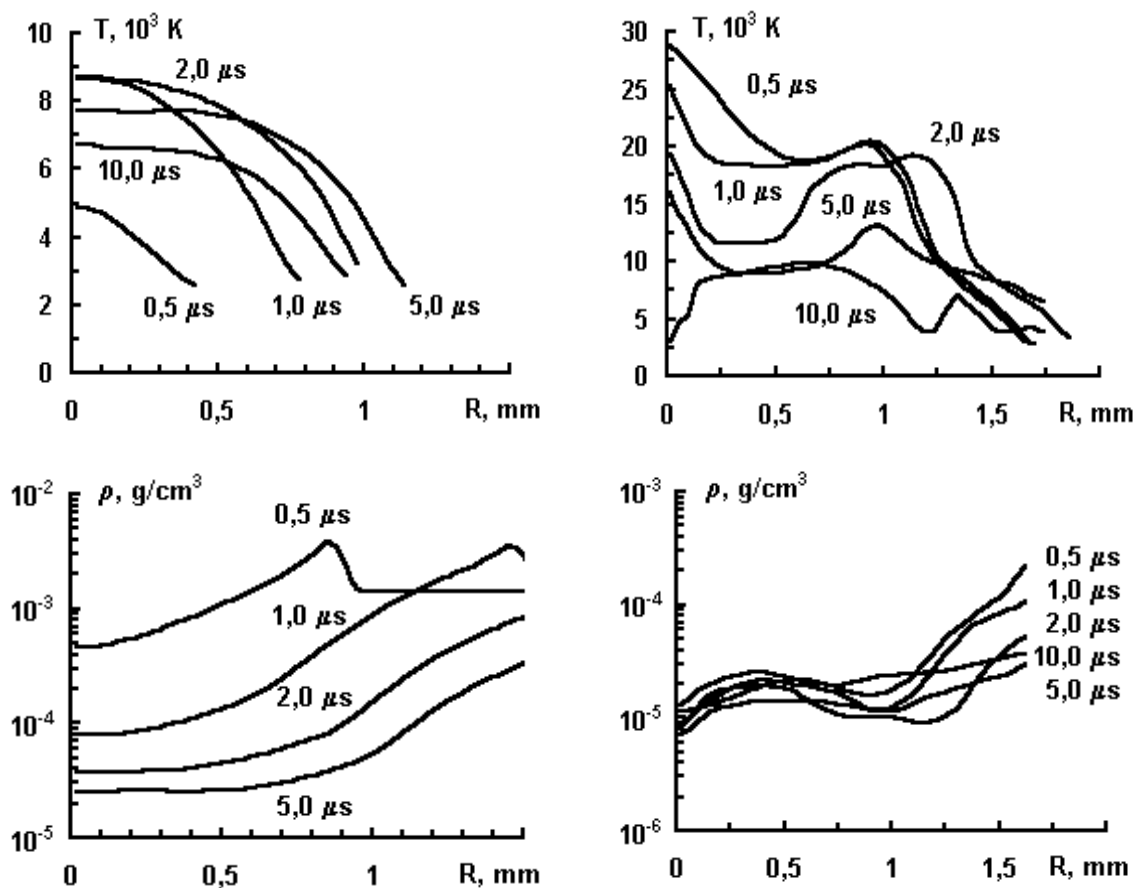


Рис. 4. Радиальные распределения температуры и плотности в лазерном факеле на расстоянии 1 мм от поверхности мишени в различные моменты времени. Слева – действие одиночного импульса, справа – сдвоенного импульса

2. Моделирование спектров излучения лазерной плазмы

Излучение лазерной плазмы обусловлено многочисленными радиационными переходами входящих в нее частиц и представляет собой комбинацию непрерывного и линейчатого спектров. Первый связан с фоторекомбинационными и тормозными континуумами атомов и ионов, второй – с переходами между их дискретными состояниями. Линейчатые спектры наиболее информативны в отношении элементного состава, поэтому, чем они контрастней, тем больше несут сведений о составе плазмы. Соотношение между непрерывным и селективным спектрами лазерной плазмы существенно зависят от ее параметров. В первую очередь это температура и плотность плазмы, а также степень ее пространственной неоднородности и линейный размер, определяющий при прочих равных условиях оптическую толщину. Состояние ионизации в области $kT < I_a$ (I_a – потенциал ионизации) экспоненциальным образом зависит от температуры, поэтому с ее ростом в спектрах наряду с атомными линиями появляются линии ионов, что повышает информативность селективного излучения. В условиях повышенной плотности селективные спектры плазмы выражены слабо, что связано со значительным штарковским уширением линий. Кроме того, при большой концентрации частиц важными могут стать эффекты самопоглощения и реабсорбции линейчатого излучения. Контрастность спектра обычно возрастает с уменьшением плотности.

Интенсивность и спектральные параметры излучения плазмы лазерного факела весьма чувствительны к его пространственно-временным характеристикам. Эрозион-

ный факел, как было показано выше, неоднороден и нестационарен, распределения температуры и плотности определяются сложной гидродинамической картиной разлета плазмы, ее взаимодействием с окружающим газом, поглощением лазерного излучения в процессе его действия, переносом собственного теплового излучения в факеле и т.д. В то же время излучение продуктов лазерной абляции регистрируется, как правило, за все время существования плазменного факела. Ясно, что должна иметь место значительная динамика спектра в различных фазах развития факела.

Опишем кратко физическую модель, лежащую в основе компьютерного моделирования спектров лазерно-индуцированной плазмы. Основные ее предположения состоят в следующем. Считается, что плазма находится в состоянии локального термодинамического равновесия. Тем самым пренебрегается всеми кинетическими процессами, т.е. полагается, что время их релаксации намного меньше характерных времен существования и эволюции плазмы, а все локальные ее свойства определяются двумя характеристиками – температурой T и давлением P (плотностью ρ). Предполагается, что распределение плазменных параметров вдоль луча наблюдения известно. Если этот луч лежит в плоскости, нормальной к оси факела, то профиль параметров вдоль него, очевидно, будет симметричным. Если же луч наблюдения идет параллельно лазерному излучению, то такая симметрия отсутствует. Концентрации атомов, ионов, электронов и населенности возбужденных уровней рассчитываются по системе уравнений ионизационного равновесия Саха–Больцмана в кольцевом дебаевском приближении в большом каноническом ансамбле. Локальные значения этих величин, ширины и сдвиги линий, а также спектральные коэффициенты поглощения рассчитываются во всех точках вдоль луча наблюдения. Уравнение переноса излучения решаются в приближении “line-by-line”, т.е. на каждую спектральную линию выбирается такое число спектральных точек, какое необходимо для подробного описания ее контура [20]. Контур линии в коэффициенте поглощения и испускания считается фойгтовским, при этом ширина линии определяются основными механизмами ее уширения.

Ионизационный состав плазмы в состоянии ЛТР определяется из решения системы уравнений Саха, которая в общем случае имеет вид

$$\frac{N_{i+1}N_e}{N_i} = 2 \frac{S_{i+1}}{S_i} \left(\frac{2\pi mkT}{h^2} \right)^{3/2} \exp\left(-\frac{I_i - \Delta I_i}{kT} \right). \quad (2.1)$$

Статистические суммы рассчитываются в приближении Планка – Ларкина:

$$S_j = \sum_n g_{jn} \exp(-E_{jn}/kT) W_{jn}, \quad W_{jn} = 1 - [1 + (I_j - E_{jn})/kT] \exp[-(I_j - E_{jn})/kT]. \quad (2.2)$$

Снижение потенциала ионизации, из-за кулоновского взаимодействия частиц [9]:

$$\frac{\Delta I_j}{kT} = \ln \frac{(1 + \gamma/2)[1 + (z_j + 1)\gamma/2]}{(1 + z_j^2\gamma/2)}, \quad \gamma^2 = \left(\frac{e^2}{kT} \right)^3 4\pi \sum_j \frac{N_j z_j^2}{1 + z_j^2\gamma/2} \quad (2.3)$$

где z_j – спектроскопический символ частиц сорта j , γ – параметр неидеальности, который для слабонеидеальной плазмы совпадает с обычным параметром $\Gamma = e^2 (r_D kT)^{-1}$.

В низкотемпературных лазерных факелах основными компонентами являются атомы, однозарядные ионы и электроны. В этих условиях из уравнений Саха и условия нейтральности плазмы [21] легко получить степень ионизации α_e

$$\alpha_e = \left(\frac{F}{1+F} \right)^{1/2}, \quad F = 2 \left(\frac{2\pi mkT}{h^2} \right)^{3/2} \frac{kT}{P} \frac{S_i}{S_a} \exp\left(-\frac{I_a - \Delta I_a}{kT} \right) \quad (2.4)$$

и концентрации компонент

$$N_a = \frac{P}{kT} \frac{1 - \alpha_e}{1 + \alpha_e}, \quad N_i = N_e = \frac{P}{kT} \frac{\alpha_e}{1 + \alpha_e}, \quad (2.5)$$

Населенности возбужденных уровней частиц определяются согласно выражению

$$N_{jn} = \frac{N_j}{S_j} g_{jn} \exp(-E_{jn} / kT) W_{jn}. \quad (2.6)$$

Эмиссионные линейчатые спектры плазмы находятся путем решения вдоль направления наблюдения уравнения переноса излучения

$$\frac{dI_\lambda}{ds} = k_\lambda (B_\lambda - I_\lambda), \quad (2.7)$$

где B_λ – интенсивность равновесного излучения. Его решение при известном распределении параметров плазмы вдоль луча наблюдения имеет вид

$$I_\lambda(\tau_i) = I_\lambda(\tau_{i-1}) \exp(-\Delta\tau_i) + B_\lambda(\tau_i) [1 - \exp(-\Delta\tau_i)] - (dB_\lambda / d\tau)_i [1 - \exp(-\Delta\tau_i)(1 + \Delta\tau_i)], \quad (2.8)$$

где $\tau = \int_0^s k_\lambda(s') ds'$ – оптическая толщина на длине волны λ отрезка луча от внешней границы плазмы до точки s .

Нахождение спектрального коэффициента поглощения обычно связано с учетом вклада различных компонент и многочисленных переходов, каждый из которых в определенном диапазоне температур и длин волн может играть доминирующую роль. Обычно в видимой области эрозионная плазма прозрачна для излучения континуума, поэтому он лишь создает некоторый фон, на котором видны линейчатые спектры частиц плазмы. В данном анализе непрерывное поглощение рассматривается в приближении Крамерса–Унзоляда, которое, по-видимому, применимо для оценки излучения континуума [21]. Как известно [22], данное приближение хорошо описывает непрерывное поглощение излучения с малой энергией квантов ($hc/\lambda \ll I_a$), но не учитывает ступенчатую фотоионизацию. Полный спектральный коэффициент поглощения равен

$$k(\lambda) = \frac{8\pi e^6}{3m(6\pi mk)^{1/2} hc^4} \frac{N_i N_e \lambda^3}{T^{1/2}} \exp\left(\frac{hc}{\lambda kT}\right) + \sum_j \frac{\pi e^2 \lambda_{0j}^2}{mc^2} (f_{nm} N_n)_j \left[1 - \exp\left(-\frac{hc}{\lambda_{0j} kT}\right)\right] \phi_j(\lambda) \quad (2.9)$$

Суммирование в (2.12) идет по различным линиям, вносящим вклад в поглощение на длине волны λ , $\phi(\lambda)$ – нормированный контур линии. Отметим, что приближение изолированной линии оказывается недостаточным при рассмотрении системы близких линий, обусловленных переходами между компонентами мультиплета. Поэтому необходимо сначала определить спектральный коэффициент поглощения, обусловленный вкладом всех линий мультиплета, а затем решать с ним уравнение переноса излучения.

Основными механизмами, определяющими уширение линий атомов и ионов при температурах $T \sim 5 \cdot 10^3 - 2 \cdot 10^4$ К и давлениях порядка атмосферного, являются электронное ударное уширение (квадратичный эффект Штарка), резонансное и ван-дер-ваальсовское, а также тепловое доплеровское уширение. Результирующий контур линии $\phi(\lambda)$ описывается функцией Фойгта, являющейся сверткой дисперсионного и доплеровского контуров:

$$\phi(\lambda) = \frac{\sqrt{\ln 2}}{\sqrt{\pi} \gamma_D} H(a, u), \quad H(a, u) = \frac{a}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\exp(-t^2) dt}{a^2 + (u - t)^2}, \quad a = \frac{\gamma_L \sqrt{\ln 2}}{\gamma_D}, \quad u = \frac{\lambda - \lambda_0 - \delta}{\gamma_D / \sqrt{\ln 2}}, \quad (2.10)$$

где γ_L – результирующая полуширина лоренцевского контура, включающая электронное, резонансное и ван-дер-ваальсовское уширение, γ_D – доплеровская полуширина, δ –

сдвиг линии. Поскольку главный вклад в ширину и сдвиг линии вносят столкновения с электронами, для его описания использовались таблицы штарковских ширин и сдвигов линий [23–24]. При отсутствии соответствующих данных расчеты полуширины γ_e и сдвига δ были сделаны в тех же приближениях согласно [24–25]. Контур линии (2.13) удобно использовать в виде [26].

Расчет спектра излучения плазмы проводился в диапазоне длин волн $\lambda = 200 \div 410$ нм, причем спектральная шкала определялась структурой самого выходящего излучения, т.к. каждая линия рассчитывалась на числе точек, положение и число которых определялось ее полушириной, сдвигом и интенсивностью. Кроме того, необходимость интегрирования излучения по времени для получения полного излучения факела за время его свечения потребовала проведения осреднения выходящего излучения по спектральному интервалу. Этот интервал может быть различным, но для сравнения расчета с экспериментом должен соответствовать разрешающей способности спектрального анализатора.

В табл. 1 приведены используемые в расчетах излучения характеристики нескольких наиболее интенсивных линий атома алюминия. Здесь даны длины волн линий, энергии верхнего и нижнего уровней, их статистические веса, сила осциллятора перехода и константы штарковского электронного уширения и сдвига при значениях температуры $T = 5 \cdot 10^3$ и 10^4 К [24].

Параметры некоторых линий атома алюминия

Таблица 1

λ_0 , нм	E_U , см ⁻¹	E_L , см ⁻¹	g_U	g_L	f	w_1 , Å	w_2 , Å	d_1 , Å	d_2 , Å
308.215	32435	0	4	2	0.175	0.0264	0.0261	0.0228	0.0203
394.401	25348	0	2	2	0.115	0.0134	0.0154	0.0164	0.0187
256.798	38929	0	4	2	0.0437	0.0362	0.0421	0.0433	0.0458
265.248	37689	0	2	2	0.014	0.0310	0.0369	0.0371	0.0405
236.705	32234	0	4	2	0.12	0.0586	0.077	0.0396	0.0411
226.346	44166	0	4	2	0.098	0.182	0.230	-0.104	-0.0821

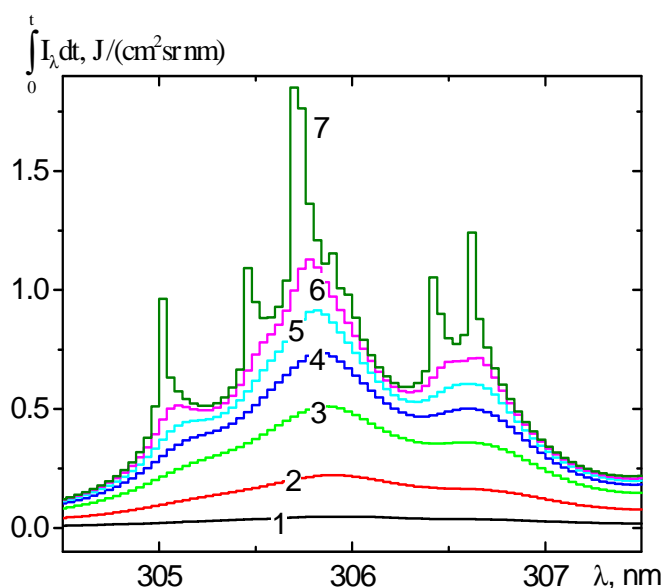


Рис. 5. Зависимость от времени высвечиваемой энергии при адиабатическом расширении паров мишени

Для сопоставления с экспериментальными данными спектральные интенсивности выходящего из плазмы излучения осреднялись по спектральному интервалу, который соответствовал разрешающей способности лазерного спектрального анализатора. Получаемые в экспериментах спектры, как правило, дают интегральное по времени излучение лазерных факелов. Для сопоставления с такими данными расчетные интенсивности, отвечающие различным моментам времени, интегрируются на фиксированной спектральной шкале. Рис. 5 дает представление об эволюции спектра излучения с течением времени в процессе разлета плазмы. Отметим, что при определении спек-

тра излучения использовались расчетные данные по динамике лазерного факела, а также модельные пространственно-временные зависимости параметров факела вдоль луча наблюдения [21]. Важно подчеркнуть, что в условиях, когда температура на периферии факела существенно уменьшается и, соответственно, возрастает концентрация частиц, (давление в факеле выравнивается достаточно быстро), расчеты дают сильную реабсорбцию излучения в резонансных линиях Al I. В экспериментах [19] она практически отсутствует. Это различие, по-видимому, связано с тем, что понижение температуры имеет место не в эрозионной плазме, а в прилегающих к ней слоях воздуха.

На рис. 6 показан характерный спектр излучения лазерной плазмы в диапазоне длин волн $\lambda = 250 - 410$ нм. Видна хорошая корреляция расчета и эксперимента, которая свидетельствует о качественном соответствии результатов численного моделирования экспериментальным данным.

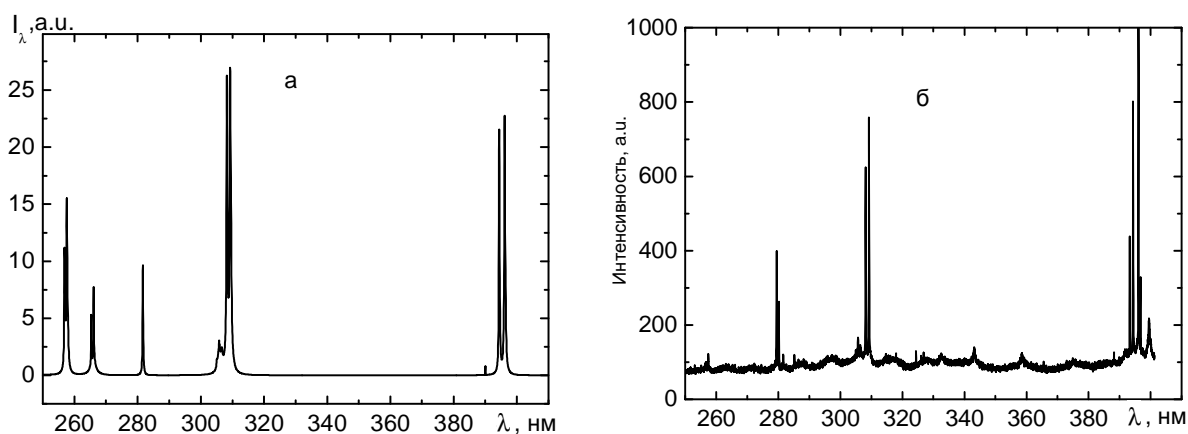


Рис. 6. Типичный спектр излучения плазмы алюминия (а) – расчет, (б) – эксперимент

На рис. 7 приведен расчет и измерения спектра в наиболее интересном для элементного анализа диапазоне длин волн. Видно, что имеет место весьма хорошее соответствие между этими результатами.

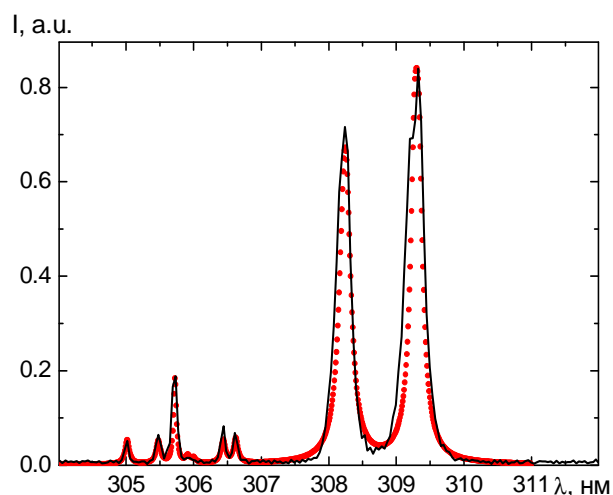


Рис. 7. Сравнение измеренного (сплошная линия) и расчетного (точки) спектра излучения факела

ними ~ 5 мкс, сопоставимым со временем существования плазмы, обеспечивает более низкую плотность излучающей области. Это повышает аналитические качества спектров излучения мишени.

Заключение

Созданные физико-математические модели для описания гидродинамики лазерного факела и его собственного теплового излучения позволяют достаточно уверенно моделировать пространственно-временную картину движения плазмы от поверхности мишени и ее гидродинамические параметры, выявлять условия, обеспечивающие повышение контрастности ее эмиссионных спектров. Проведенный анализ показывает, что использование для возбуждения эмиссионных спектров сдвоенных лазерных импульсов с длительностью ~ 30 нс и интервалом между

Литература

1. Анисимов С.И., Имас Я.А., Романов Г.С. и др. Действие излучения большой мощности на металлы. М.: Наука, 1970. 272 с.
2. Арутюнян Р.В., Баранов В.Ю., Большов Л.А. и др. Воздействие лазерного излучения на материалы. М.: Наука, 1989. 366 с.
3. Cremers D.A., Radziemski L.J. Handbook of Laser-Induced Breakdown Spectroscopy. eBookMall, Inc., 2007.
4. Winefordner J.D., Gornushkin I.B., Correll T. et al. Comparing several atomic spectroscopic methods to the super stars: special emphasis on laser induced breakdown spectrometry, LIBS, a future super star // J. Anal. At. Spectrometry. 2004. V.19. P. 1061–1083.
5. Scott R.H., Strasheim A. Laser induced plasmas for analytical spectroscopy // Spectrochim. Acta Part. – 1970. V.25, P. 311–332.
6. Babushok V. I., Delucia F. C., Gottfried J. L. et al. Double pulse laser ablation and plasma: Laser induced breakdown spectroscopy signal enhancement // Spectrochim. Acta Part B. 2006. Vol. 61. Pp. 999–1014.
7. Benedetti P. A., Cristoforetti G., Legnaioli S. et al. Effect of laser pulse energies in laser induced breakdown spectroscopy in double-pulse configuration // Spectrochim. Acta Part B. 2005. Vol. 60. Pp. 1392–1401.
8. Станкевич Ю. А., Станчиц Л. К., Степанов К. Л. Численное моделирование физических процессов, протекающих при лазерно-плазменном напылении алмазоподобных пленок // Тепло- и массоперенос–2005. Минск: ИТМО НАН Беларуси, 2005. С. 240–243.
9. Romanov G.S., Stankevich Yu.A., Stanchits L.K., Stepanov K.L. Thermodynamic and optical properties of gases in a wide range of parameters // Int. J. Heat Mass Transfer. 1995. V.38, No3. P. 545–556.
10. Степанов К.Л., Станчиц Л.К., Станкевич Ю.А. Банк оптико-физических свойств вещества для решения задач радиационной плазмодинамики // Журн. прикл. спектр. 2000. Т.67, №2. С. 238–243.
11. Knight C.J. Theoretical modeling of rapid surface vaporization with back-pressure // AIAA Journal. 1979. V.17. P. 82–86.
12. Самарский А.А., Попов Ю.П. Разностные методы решения задач газовой динамики. М.: Наука, 1980. 325 с.
13. Белоцерковский О.М., Давыдов Ю.М. Метод крупных частиц в газовой динамике. М.: Наука, 1982. 392 с.
14. Зиновьев В.Е. Теплофизические свойства металлов при высоких температурах. / Справочник. М.: Металлургия, 1989. 383 с.
15. Hurtgren R., Dessai P.G., Hankis D.T. Selected Values of Thermodynamic Properties of the Elements, American Society of Metals Metals Park, Ohio 1973.
16. Barin I. Thermochemical data of pure substances. Weinheim, Germany: VCH, 1993.
17. Touloukian Y.S., Powell R.W., Ho C.Y., Nicolaou M.C. Thermophysical Properties of Matter. Plenum, NY–W, 1973.
18. Физические величины. / Справочник. Под. ред. И.С. Григорьева и Е.З. Мейлихова. М.: Энергоатомиздат, 1991. 1232 с.
19. Ershov-Pavlov E., Catsalap K., Rozantsev V., Stankevich Yu., Stepanov K. Numerical modeling of the laser-induced plasma radiation at a solid sample excitation using single and double pulse modes // 5 Int. Conf. Plasma physics and plasma technology. 2006, Minsk, Vol.1. P. 299–302.

20. Суржиков С.Т. тепловое излучение газов и плазмы. М.: Изд. МГТУ им. Н.Э Баумана, 2004. 543 с.
21. Gornushkin I.B., Stevenson C.L. Smith B.W. et al. Modeling an inhomogeneous optically thick laser induced plasma: a simplified theoretical approach // Spectrochim. Acta. Part B 2001. V.56. P. 1769–1785.
22. Зельдович Я.Б., Райзер Ю.П. Физика ударных волн и высокотемпературных гидродинамических явлений. М.: Наука, 1966. 686 с.
23. Грим Г. Спектроскопия плазмы. М.: Атомиздат, 1969. 452 с.
24. Грим Г. Уширение спектральных линий в плазме. М.: Мир, 1978. 489 с.
25. Dimitrijević M. S., Konjević N. Simple estimates for Stark broadening of ion lines in stellar plasmas // Astronomy and Astrophysics. 1987. V.172. P. 345–349.
26. Матвеев В.С. Приближенные представления коэффициентов поглощения и эквивалентных ширин линий с фойгтовским контуром // Журн. прикл. спектр. 1972. Т.16, №2. С. 228–233; Журн. прикл. спектр. 1981. Т.35, №3. С. 528–532.