

## МОДЕЛИРОВАНИЕ СЕЛЕКТИВНОГО ТЕПЛОВОГО ИЗЛУЧЕНИЯ ПЛАЗМЫ СЛОЖНОГО ХИМИЧЕСКОГО СОСТАВА

Л. К. Станчиц<sup>1</sup>, К. Л. Степанов<sup>1</sup>, Е. А. Ершов-Павлов<sup>2</sup>, К. Ю. Кацалап<sup>2</sup>

<sup>1</sup>*Институт тепло- и массообмена им. А. В. Лыкова НАН Беларуси, Минск, Беларусь,  
lks@hmti.ac.by*

<sup>2</sup>*Институт физики им. Б. И. Степанова НАН Беларуси, Минск, Беларусь, erшов@imaph.bas-  
net.by*

Селективные спектры собственного теплового излучения плазмы содержат информацию о ее химическом и компонентном составе. Это является физической основой лазерно-индуцированной эмиссионной спектроскопии (ЛИЭС) [1–8]. Излучение лазерной плазмы обусловлено многочисленными радиационными переходами входящих в нее частиц и представляет собой комбинацию непрерывного и линейчатого спектров [9]. Первый связан с фоторекомбинационными и тормозными континуумами атомов и ионов, второй – с переходами между их дискретными состояниями. Ясно, что именно линейчатые спектры наиболее информативны в отношении элементного состава: чем они контрастней, тем больше несут сведений о составе плазмы.

На соотношение между непрерывным и селективным спектрами лазерной плазмы существенное влияние оказывают ее параметры – в первую очередь температура и плотность плазмы, степень ее пространственной неоднородности и линейный размер, определяющий при прочих равных условиях оптическую плотность излучающего объема. Состояние ионизации экспоненциальным образом зависит от температуры, поэтому с ее ростом в спектрах наряду с линиями атомов появляются линии ионов, при этом возрастает информативность селективного излучения. В условиях повышенной плотности линейчатые 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, особенно существенные в резонансных линиях. Обычно контрастность спектра возрастает с уменьшением плотности плазмы.

Излучающий факел, образующийся при лазерном воздействии на поверхность материала, как правило, неоднороден по пространству. Его температура и плотность 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. [2]. При изменении пространственно-временных параметров излучающего объема в процессе образования плазмы, ее разлета и распада имеет место значительная динамика спектра. В то же время спектр излучения продуктов лазерной абляции обычно регистрируется за все время существования плазменного факела.

Для расчета излучения лазерной плазмы был создан программный комплекс, моделирующий спектральный состав излучения, выходящего из факела в процессе его эволюции. Он позволяет рассчитывать в широком интервале длин волн мгновенную и интегральную по времени спектральную интенсивность излучения вдоль луча, на котором заданы пространственно-временные распределения температуры, давления и плотности плазмы. Эти параметры можно задавать на основе различных моделей гидродинамики лазерной плазмы или использовать какие-либо иные пространственно-временные распределения параметров, отражающие динамику поведения лазерного факела.

Опишем кратко физическую модель, лежащую в основе компьютерного

моделирования. Основное допущение состоит в использовании приближения локального термодинамического равновесия. Тем самым предполагается, что можно пренебречь всеми кинетическими процессами и считать время их релаксации намного меньшим характерных времен существования и эволюции плазмы. В этом случае локальные ее свойства определяются двумя характеристиками – температурой и давлением (или плотностью). Распределение плазменных параметров вдоль луча наблюдения считается известным. Поскольку предполагается, что плазменный факел имеет осесимметричную структуру, профиль параметров вдоль него, очевидно, будет симметричным, если этот луч лежит в плоскости, нормальной к оси факела. Если луч наблюдения идет параллельно оси факела, то такая симметрия отсутствует.

Концентрации атомов, ионов, электронов и населенности возбужденных уровней вычисляются по системе уравнений ионизационного равновесия Саха – Больцмана в кольцевом дебаевском приближении в большом каноническом ансамбле [10, 11]. Статистические суммы рассчитываются в приближении Планка – Ларкина.

Ионизационный состав плазмы в состоянии локального термодинамического равновесия определяется из решения системы уравнений Саха, которая в общем случае имеет вид ( $j$  – элемент,  $i$  – ион)

$$\frac{N_{j,i+1}N_e}{N_{ji}} = 2 \frac{S_{j,i+1}}{S_{ji}} \left( \frac{2\pi mkT}{h^2} \right)^{3/2} \exp\left( -\frac{I_{ji} - \Delta I_{ji}}{kT} \right). \quad (1)$$

Статистические суммы рассчитываются в приближении Планка – Ларкина:

$$S_{ji} = \sum_n g_{jin} \exp(-E_{jin} / kT) W_{jin}, \quad W_{jin} = 1 - [1 + (I_{ji} - E_{jin}) / kT] \exp[-(I_{ji} - E_{jin}) / kT].$$

Снижение потенциала ионизации, из-за кулоновского взаимодействия частиц, имеет вид

$$\frac{\Delta I_{ji}}{kT} = \ln \frac{(1 + \gamma / 2)[1 + (z_j + 1)\gamma / 2]}{(1 + z_{ji}^2 \gamma / 2)},$$

где  $z_{ji}$  – спектроскопический символ частиц сорта  $ji$ , для нейтралов он равен единице. Параметр неидеальности  $\gamma$  есть положительный корень уравнения

$$\gamma^2 = \left( \frac{e^2}{kT} \right)^3 4\pi \sum_{j,i} \frac{N_{ji} z_{ji}^2}{1 + z_{ji}^2 \gamma / 2},$$

который для слабонеидеальной плазмы совпадает с обычным параметром неидеальности  $\Gamma = e^2 (r_D kT)^{-1}$ .

Населенности возбужденных уровней частиц плазмы определяются согласно выражению

$$N_{jin} = \frac{N_{ji}}{S_{ji}} g_{jin} \exp(-E_{jin} / kT) W_{jin}.$$

Приведенные соотношения при известных спектроскопических константах (атомный номер, атомный вес, ионизационный потенциал, энергии уровней и их статвеса) элементов (магния, алюминия, кремния, марганца, железа, меди и цинка) полностью решают задачу

определения населенностей уровней, ионизационного состава и термодинамических функций плазмы.

Локальные значения этих величин, ширина и сдвиг линий, а также спектральные коэффициенты поглощения определяются во всех точках вдоль луча наблюдения. Уравнение переноса излучения решается в приближении *line-by-line*, т. е. на каждую спектральную линию выбирается такое число спектральных точек, какое необходимо для подробного описания ее контура [12]. Формальное решение уравнения переноса для спектральной интенсивности вдоль заданного направления сводится к решению рекуррентного уравнения.

Нахождение спектрального коэффициента поглощения обычно связано с учетом вклада различных компонентов и многочисленных переходов, каждый из которых в определенном диапазоне температур и длин волн может играть доминирующую роль [10]. Обычно в оптическом диапазоне спектра эрозионная плазма прозрачна для излучения континуума, поэтому он создает фон, на котором видны спектральные линии. В данном анализе непрерывное поглощение рассматривается в приближении Крамерса – Унзольда [13]. Как известно [14], данное приближение хорошо описывает непрерывное поглощение излучения с малой по сравнению с потенциалом ионизации энергией квантов ( $hc/\lambda \ll I_a$ ), но не учитывает ступенчатой фотоионизации. Полный спектральный коэффициент на данной длине волны учитывает непрерывное и линейчатое поглощение частиц всех химических элементов в различных состояниях ионизации (атомы, ионы) и разных уровнях электронного возбуждения.

$$k(\lambda) = \frac{8\pi e^6}{3m(6\pi mk)^{1/2} hc^4} \sum_{ji} \frac{N_{ji} N_e \lambda^3}{T^{1/2}} \exp\left(\frac{hc}{\lambda kT}\right) + \sum_{ji} \sum_{(nm)} \frac{\pi e^2 (\lambda_{0ji}^{nm})^2}{mc^2} (f_{ji}^{nm} N_{ji}^n) \left[1 - \exp\left(-\frac{hc}{\lambda_{0ji}^{nm} kT}\right)\right] \phi_{ji}^{nm}(\lambda) \quad (2)$$

Первое слагаемое описывает излучение континуума, второе – вклад линейчатого спектра. Суммирование здесь идет по всем присутствующим в плазме частицам (атомам, ионам), вносящим вклад в поглощение на длине волны  $\lambda$ ,  $\phi(\lambda)$  – нормированный контур линии.

$\lambda_{0ji}^{nm}$ ,  $f_{ji}^{nm}$  - длина волны центра линии и ее сила осциллятора

Следует отметить, что приближение изолированной линии оказывается недостаточным при описании системы близких линий, обусловленных переходами между компонентами мультиплетов. Поэтому линейчатый коэффициент поглощения определяется суммой вкладов различных линий, лежащих в данной области спектра.

Контур линии в коэффициентах поглощения и испускания определяется сверткой дисперсионного профиля, связанного с электронным, резонансным и ван-дер-ваальсовым уширением [9], и доплеровского профиля, обусловленного тепловым движением.

Результирующий контур линии  $\phi(\lambda)$  описывается сверткой дисперсионного и доплеровского контуров. Нормированный контур Доплера имеет вид

$$\phi(\lambda) = \frac{1}{\sqrt{\pi} \Gamma_D} \exp\left[-\left(\frac{\lambda - \lambda_0}{\Gamma_D}\right)^2\right], \quad \int_{-\infty}^{+\infty} \phi(\lambda) d\lambda = 1 \quad (3)$$

При отклонении длины волны  $\lambda - \lambda_0 = \Gamma_D$  интенсивность излучения падает в  $e$  раз по сравнению с интенсивностью в центре спектральной линии. Обозначим расстройку длины волны, при которой интенсивность излучения доплеровской линии падает в 2 раза, через  $\gamma_D$ .

Тогда

$$\varphi_D(\lambda_0) = \frac{1}{\sqrt{\pi} \Gamma_D}, \quad \varphi_D(\lambda = \lambda_0 \pm \gamma_D) = \frac{1}{\sqrt{\pi} \Gamma_D} \exp[-(\gamma_D / \Gamma_D)^2] = \frac{1}{2\sqrt{\pi} \Gamma_D}. \quad (4)$$

Отсюда получаем, что

$$\exp[-(\gamma_D / \Gamma_D)^2] = \frac{1}{2}, \quad \gamma_D = \Gamma_D \sqrt{\ln 2}, \quad \text{или} \quad \Gamma_D = \frac{\gamma_D}{\sqrt{\ln 2}}. \quad (5)$$

Таким образом, нормированный доплеровский контур, выраженный через доплеровскую полуширину линии, имеет вид

$$\varphi_D(\lambda) = \frac{\sqrt{\ln 2}}{\sqrt{\pi} \gamma_D} \exp\left[\left(-\frac{\lambda - \lambda_0}{\gamma_D} \sqrt{\ln 2}\right)^2\right]. \quad (6)$$

Поскольку  $\Gamma_D = \lambda_0 \frac{v}{c}$  и  $\frac{Mv^2}{2} = kT$ , для доплеровской полуширины получаем выражение

$$\gamma_D = \left(\frac{2kT \ln 2}{Mc^2}\right)^{1/2} \lambda_0 = \left(\frac{2k \ln 2}{m_H c^2}\right)^{1/2} \sqrt{\frac{T}{A}} \lambda_0 = 3.568 \cdot 10^{-7} \sqrt{\frac{T}{A}} \lambda_0 \quad (7)$$

Здесь температура задается в градусах Кельвинах,  $A$  – атомный вес,  $\lambda_0$  – длина волны линии.

Нормированный контур Лоренца имеет вид ( $\gamma_L$  – полуширина контура Лоренца)

$$\varphi_L = \frac{1}{\pi} \frac{\gamma_L}{\gamma_L^2 + (\lambda - \lambda_0)^2} \quad (8)$$

Результирующий контур при действии обоих механизмов уширения есть свертка этих контуров

$$f_C(u) = \int_{-\infty}^{+\infty} f_1(t) f_2(u-t) dt \quad (9)$$

Тогда

$$f_1 = \varphi_D \quad \text{и} \quad f_2 = \varphi_L. \quad f_C(\lambda) = \int_0^{\infty} \varphi_D(\lambda') \varphi_L(\lambda - \lambda') d\lambda' \quad (10)$$

$$\varphi_D(\lambda') = \frac{\sqrt{\ln 2}}{\sqrt{\pi} \gamma_D} \exp\left[\left(-\frac{\lambda' - \lambda_0}{\gamma_D} \sqrt{\ln 2}\right)^2\right]. \quad (11)$$

Введем обозначения

$$t = \frac{\lambda' - \lambda_0}{\gamma_D} \sqrt{\ln 2}, \quad \lambda' - \lambda_0 = \frac{\gamma_D}{\sqrt{\ln 2}} t, \quad d\lambda' = \frac{\gamma_D}{\sqrt{\ln 2}} dt, \quad u = \frac{\lambda - \lambda_0}{\gamma_D} \sqrt{\ln 2}, \quad \lambda - \lambda_0 = \frac{\gamma_D}{\sqrt{\ln 2}} u.$$

Тогда, очевидно,

$$\varphi_D(\lambda') = \frac{\sqrt{\ln 2}}{\sqrt{\pi} \gamma_D} \exp(-t^2), \quad \varphi_L(\lambda') = \frac{1}{\pi} \frac{\gamma_L}{\gamma_L^2 + (\lambda' - \lambda_0)^2} = \frac{1}{\pi} \frac{\gamma_L}{\gamma_L^2 + \gamma_D t^2 / \ln 2}. \quad (12)$$

Отношение лоренцевой полуширины к величине  $\gamma_D / \sqrt{\ln 2}$  обозначим через  $a$ :

$$a = \frac{\gamma_L}{\gamma_D} \sqrt{\ln 2} \quad (13)$$

Следовательно, дисперсионный контур примет вид

$$\varphi_L(\lambda') = \frac{1}{\pi} \frac{\gamma_L}{\gamma_L^2 + \gamma_D t^2 / \ln 2} = \frac{1}{\pi} \frac{\gamma_L \ln 2 / \gamma_D^2}{(\gamma_L \sqrt{\ln 2} / \gamma_D)^2 + t^2} = \frac{\sqrt{\ln 2}}{\pi \gamma_D} \frac{a}{a^2 + t^2}, \quad \varphi_L(\lambda - \lambda') = \frac{\sqrt{\ln 2}}{\pi \gamma_D} \frac{a}{a^2 + (u - t)^2}$$

С помощью последнего выражения получаем результирующий контур линии

$$\varphi(\lambda) = \frac{\sqrt{\ln 2}}{\sqrt{\pi} \gamma_D} \int_0^{\infty} \exp(-t^2) \frac{\sqrt{\ln 2}}{\pi \gamma_D} \frac{a}{a^2 + (u - t)^2} d\lambda' = \frac{\sqrt{\ln 2}}{\sqrt{\pi} \gamma_D} \frac{a}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\exp(-t^2) dt}{a^2 + (u - t)^2} = \frac{\sqrt{\ln 2}}{\sqrt{\pi} \gamma_D} H(a, u), \quad (14)$$

$$H(a, u) = \frac{a}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\exp(-t^2) dt}{a^2 + (u - t)^2}. \quad (15)$$

Результирующая полуширина лоренцевского контура  $\gamma_L = \gamma_e + \gamma_R + \gamma_W$ ,  $\gamma_e$  – электронная,  $\gamma_R$  – резонансная,  $\gamma_W$  – ван-дер-ваальсовская полуширины. Если полуширину линии, отвечающую различным механизмам уширения, отнести с концентрации уширяющих частиц  $\Lambda_k = \gamma_k / N_k$  (для  $\gamma_e$  – электронов, для  $\gamma_R$  – атомов того же газа, для  $\gamma_W$  – частиц, отличных от излучающих), то для ван-дер-ваальсовского взаимодействия величина  $\Lambda_W \sim 10^{-21}$  нм·см<sup>3</sup>, для резонансного  $\Lambda_R \sim 10^{-20}$  и для штарковского уширения  $\Lambda_e \sim 10^{-19} - 10^{-17}$  нм·см<sup>3</sup>.

Если учитывается сдвиг линий  $\delta$ , то

$$u = \frac{\lambda - \lambda_0 - \delta}{\gamma_D}. \quad (16)$$

Поскольку главный вклад в ширину и сдвиг линии вносят столкновения с электронами, для его описания использовались таблицы штарковских полуширин линий [20,21].

Данные по ширинам и сдвигам линий, к сожалению, весьма скудны. Это объясняется большими вычислительными трудностями их последовательного квантовомеханического расчета, а различные приближенные методики дают ненадежные результаты. Максимально точные (желательно экспериментальные) значения ширин и сдвигов, однако, критически важны, если речь идет о диагностике плазмы по ее спектру.

Рассмотрим два предельных случая, которые содержатся в свертке. Сначала предположим, что  $a \rightarrow \infty$ , т.е.  $\gamma_L \gg \gamma_D$ . Тогда в подынтегральном выражении для  $H(a, u)$  в знаменателе можно пренебречь  $t$  по сравнению с  $u$ , поскольку основной вклад в интеграл вносит область  $t \rightarrow 0$  и

$$\varphi(\lambda) = \frac{\sqrt{\ln 2}}{\sqrt{\pi} \gamma_D} H(a, u) = \frac{1}{\pi} \frac{\gamma_L}{\gamma_L^2 + (\lambda - \lambda_0 - \delta)^2}. \quad (17)$$

Таким образом, при  $a \rightarrow \infty$  контур везде является дисперсионным.

В противоположном случае, когда  $a \rightarrow 0$ , т.е.  $\gamma_L \ll \gamma_D$ , основной вклад в интеграл вносят две области. При малых значениях  $u$  основной вклад в интеграл вносит область  $t \rightarrow u$  и

$$\varphi(\lambda) = \frac{\sqrt{\ln 2}}{\sqrt{\pi} \gamma_D} \exp \left[ - \left( \frac{\lambda - \lambda_0 - \delta}{\gamma_D / \sqrt{\ln 2}} \right)^2 \right], \quad (18)$$

т.е., центральной части контур оказывается доплеровским.

При больших значениях  $u$ , когда  $u \gg 1$ , т.е.  $\Delta\lambda \gg \gamma_D$ , основной вклад в интеграл вносит область  $t \rightarrow 0$ . Здесь контур оказывается дисперсионным:

$$\varphi(\lambda) = \frac{\sqrt{\ln 2}}{\sqrt{\pi} \gamma_D} H(a, u) = \frac{1}{\pi} \frac{\gamma_L}{\gamma_L^2 + (\lambda - \lambda_0 - \delta)^2}. \quad (19)$$

Расчет контура по точному соотношению требует значительных вычислительных затрат, так как считать его приходится на множестве спектральных точек. Поэтому, как правило, используются различные приближенные соотношения. Мы будем считать контуры по формулам, приведенным в [18, 19]:

$$H(a, u) = H(x, \eta) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \frac{x}{a} \left\{ \sqrt{\pi \ln 2} (1-x) e^{(-\eta^2 \ln 2)} + x \frac{1}{1+\eta^2} - x(1-x) \left( \frac{1.5}{\ln 2} + 1 + x \right) \times \right. \\ \left. \times \left[ 0.066 e^{(-0.4\eta^2)} - \frac{1}{40 - 5.5\eta^2 + \eta^4} \right] \right\}, \quad x = \frac{\gamma_L}{\gamma_V}, \quad \eta = \frac{(\lambda - \lambda_0 - \delta)}{\gamma_V} \quad (20)$$

где  $x$  – отношение ударной полуширины  $\gamma_L$  к полуширине контура Фойгта  $\gamma_V$ , а  $\eta$  – относительная длина волны. Результирующая полуширина фойгтовского контура равна

$$\gamma_V = \frac{\gamma_L + \sqrt{\gamma_L^2 + 4\gamma_D^2}}{2} + 0.033\gamma_L \left[ 1 - 4\gamma_L^2 / \left( \gamma_L + \sqrt{\gamma_L^2 + 4\gamma_D^2} \right)^2 \right] \quad (21)$$

Соотношение между  $u$  и  $\eta$  есть  $u = \eta a / x$ , а  $x$  однозначно связана с  $a$ :

$$x = a \left\{ \left( a + \sqrt{a^2 + 4 \ln 2} \right) / 2 + 0.033a \left[ 1 - 4a^2 / \left( a + \sqrt{a^2 + 4 \ln 2} \right)^2 \right] \right\}^{-1}. \quad (22)$$

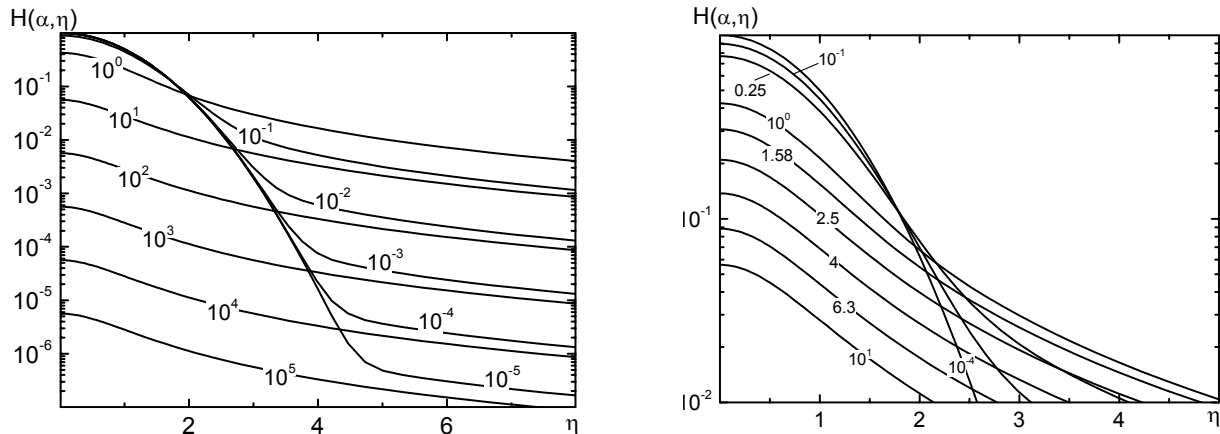


Рис. 1 Зависимость функции  $H(a, \eta)$  от  $\eta$  для набора значений  $a$

Рис. 1 демонстрирует фойгтовский контур линии, рассчитанный согласно (20-22) для различных значений параметра  $a$ . На рис. 2 дается сравнение данного расчета с табличными значениями функции  $H(a, u)$ , которые показаны кружками.

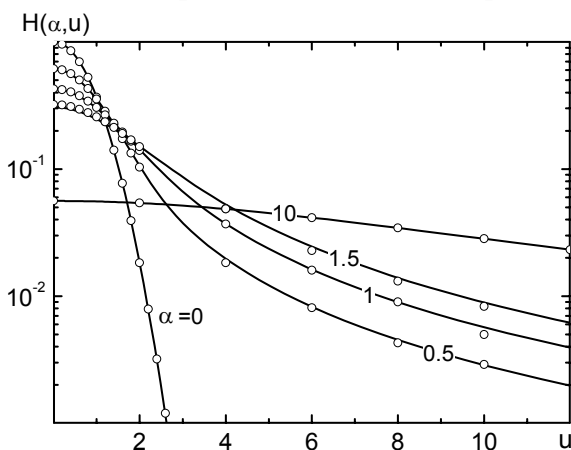


Рис. 2

Из него видно хорошее соответствие табличных данных результатам вычислений контура по приближенной формуле.

Поскольку, как отмечалось выше, главный вклад в ширину и сдвиг линии вносят столкновения с электронами, для его описания использовались данные Г. Грима [15,16] штарковских ширин и сдвигов линий для магния, алюминия и кремния. Ширины и сдвиги линий марганца, железа, меди и цинка брались из базы [20] и всех доступных нам литературных источников.

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

$$\frac{dI_\lambda}{ds} = k_\lambda (B_\lambda - I_\lambda) \quad (23)$$

Интенсивность равновесного излучения определяется формулой Планка:

$$B_\lambda = \frac{2hc^2}{\lambda^5} \left[ \exp\left(\frac{hc}{\lambda kT}\right) - 1 \right]^{-1} \quad (24)$$

Формальное решение уравнения переноса имеет вид

$$I_{\lambda}(\tau) = I_{\lambda}(0) \exp(-\tau) + \int_0^{\tau} B_{\lambda}(\tau') \exp(\tau' - \tau) d\tau', \quad (25)$$

где  $\tau = \int_0^s k_{\lambda}(s') ds'$  – оптическая толщина на длине волны  $\lambda$  отрезка луча от внешней границы плазмы до точки  $s$ . Отсюда видно, что определение интенсивности выходящего излучения сводится к решению рекуррентных уравнений, поскольку излучение в соседних точках связано соотношением

$$I_{\lambda}(\tau_i) = I_{\lambda}(\tau_{i-1}) \exp(-\Delta\tau_i) + \int_{\tau_{i-1}}^{\tau_i} B_{\lambda}(\tau') \exp(\tau' - \tau_i) d\tau'. \quad (26)$$

Если предположить, что зависимость равновесного излучения  $B_{\lambda}$  от  $\tau'$  между точками  $\tau_{i-1}$  и  $\tau_i$  является линейной, т.е.  $B(\tau') = B_i + (dB/d\tau')_i(\tau' - \tau_i)$ , то решение уравнения (26) есть:

$$I_{\lambda}(\tau_i) = I_{\lambda}(\tau_{i-1}) \exp(-\Delta\tau_i) + B_{\lambda}(\tau_i) [1 - \exp(-\Delta\tau_i)] - (dB_{\lambda}/d\tau)_i [1 - \exp(-\Delta\tau_i)(1 + \Delta\tau_i)] \quad (27)$$

Это соотношение оказывается справедливым вне зависимости от оптической плотности ячейки  $\Delta\tau_i = \tau_i - \tau_{i-1}$  и правильно как для оптически прозрачных, так и оптически плотных слоев.

Созданный в соответствии с изложенным выше программный комплекс позволяет рассчитывать спектральную интенсивность выходящего из плазменного объема излучения при известном пространственном распределении температуры и давления вдоль луча наблюдения. Расчет спектра излучения проводится в заданном интервале длин волн, который, как правило, соответствует видимому диапазону спектра. Спектральная шкала, на которой проводится расчет, определяется структурой самого выходящего излучения. Она содержит как регулярные по длине волны точки, так и точки, характеризующие положение спектральных линий. Для описания каждой спектральной линии, интенсивность излучения которой превышала излучение континуума на заданную величину, используется множество точек по спектру. Их число и положение определяются полушириной, сдвигом и интенсивностью линии в условиях, отвечающих заданному распределению параметров плазмы вдоль луча наблюдения.

Для расчета полного излучения факела за время его свечения требуется интегрирование выходящего спектра по времени. Для этого проводится осреднение мгновенного излучения по спектральным интервалам, которые должны быть неизменными и соответствовать разрешающей способности спектрального анализатора. Полученные таким образом спектры можно уже сравнивать с экспериментальными данными.

В заключение отметим, что для моделирования излучения плазмы сложного химического состава необходимы подробные базы данных по атомным характеристикам вещества. Они должны содержать потенциалы ионизации энергии и статистические веса термов, силы осцилляторов дипольных переходов, константы уширения спектральных линий и т. д.

В качестве примера на рис. 3 показано изменение с течением времени интегральной по времени спектральной интенсивности излучения плазмы алюминия в процессе ее гидродинамического разлета.



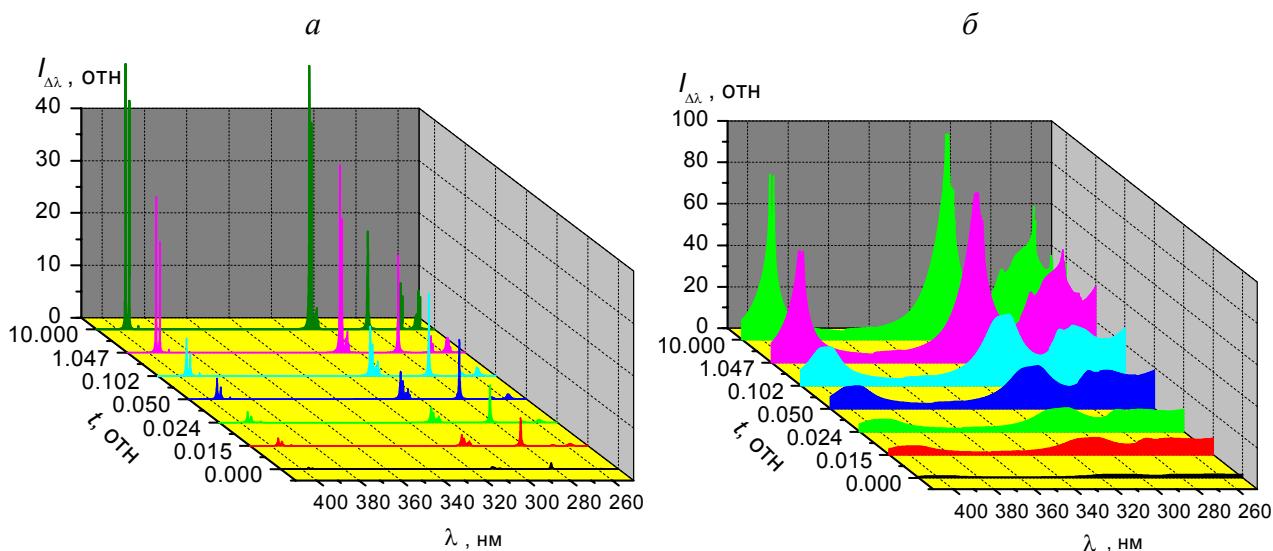


Рис. 3. Эволюция спектра разреженной (а) и более плотной (б) лазерной плазмы алюминия

$$I_{\Delta\lambda} = \int_0^t I_{\Delta\lambda}(t) dt$$

На рисунке 4 изображен участок (линия цинка 330.2 нм) экспериментальных лазерно-индуцированных спектров эталонных образцов с различным составом (см. таблицу ниже).

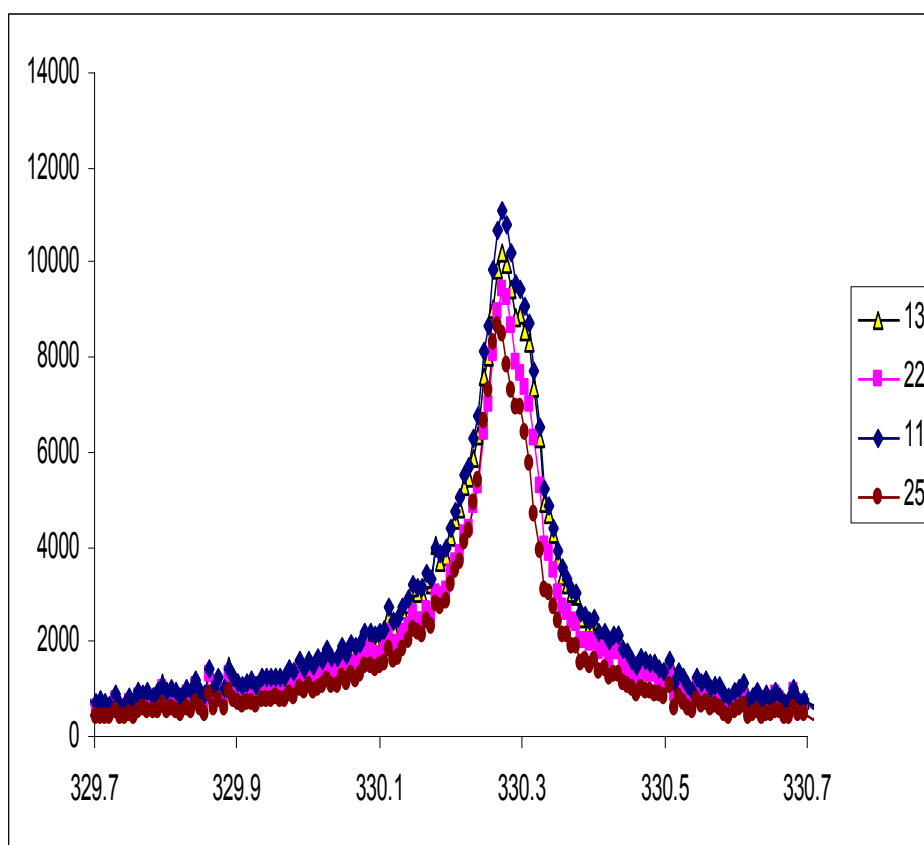


Рис. 4 Экспериментальный спектр

На рисунке 5 приведены результаты расчета лазерно-индуцированного спектра образца номер 13 в сравнении с экспериментальными данными.

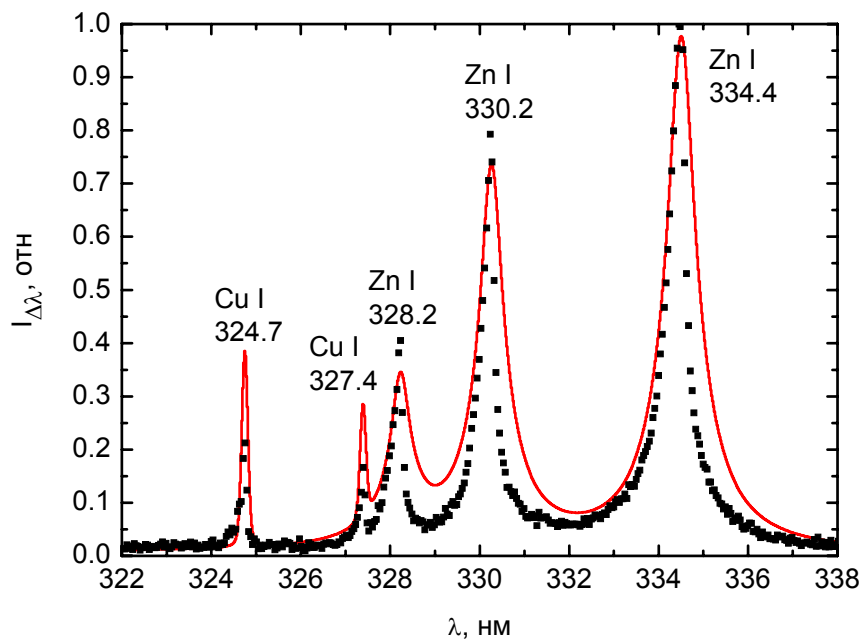


Рис. 5 Сравнение экспериментального и расчетного спектра

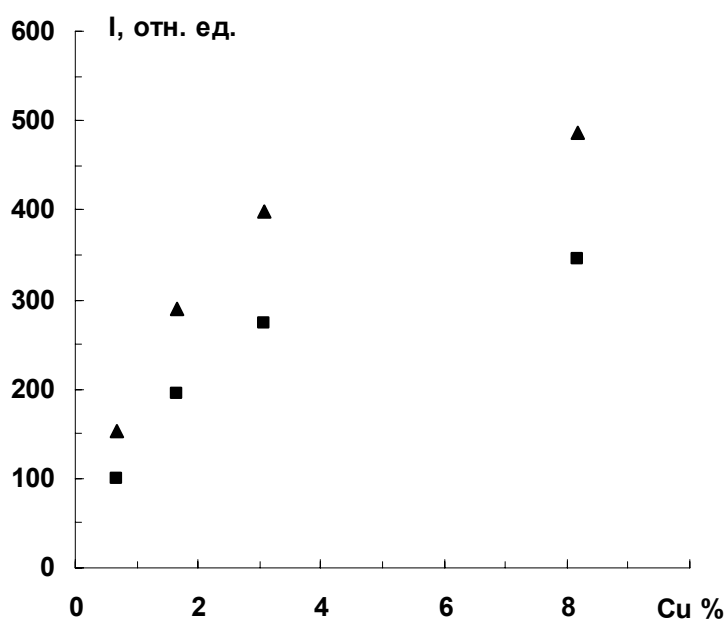


Рис. 6 Зависимость относительной интенсивности линий Cu I 324.7 (треугольники) и Cu I 327.1 нм (квадраты) от концентрации меди в эталонных образцах

№ эталона	Fe	Zn	Mg	Al	Cu
11	0.11	93.5	1.93	2.7	1.65
13	0.3	88.62	1.59	8.81	0.68
22	0.42	84.32	0.14	12.03	3.09
25	0.14	83.4	0.76	7.58	8.19

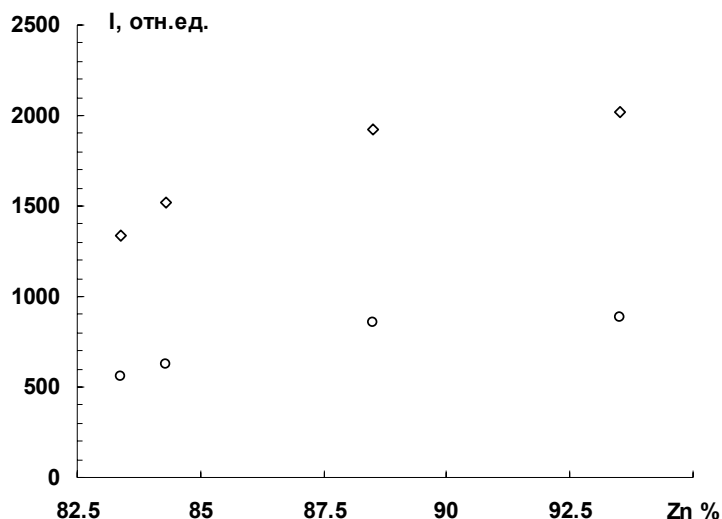


Рис. 6 То же для линий Zn I 328.2 (кружки) и Zn I 330.2 нм (ромбы)

**Эксперимент:** в качестве источника возбуждающего излучения применялся импульсный Nd:YAG-лазер. Время экспозиции 1.3 сек, энергия накачки 12 Дж. Луч лазера перпендикулярен поверхности образца, направление наблюдения эрозионного факела параллельно поверхности образца и проходит через ось факела. Излучение факела подается на входную щель спектрографа при помощи световода. Расстояние между факелом и торцом световода составляет 5 см. Апертура световода такова, что в световод попадает излучение от всех зон факела. Регистрируемая спектральная область - 220-380 нм, шаг по длине волны составляет 0.04 нм, ширина аппаратной функции – 0.14 нм. Время экспозиции ПЗС-линейки, регистрирующей излучение, равно 1.5 сек. Так как время накопления ПЗС-линейки превышает время жизни плазмы и в световод поступает излучение со всех зон факела, то регистрируемый сигнал пропорционален интенсивности  $I^*_{\lambda}$ , интегральной по всему телесному углу, под которым видна плазма из точки расположения торца световода, за все время существования плазмы.

**Расчет:** проинтегрированная по времени интенсивность излучения адиабатически остывающего однородного плоского слоя толщиной 1.5 мм с температурой в центре 20 000 К и давлением 7 атм., к моменту, когда температура стала равной 12 000 К.

## Литература

1. Laser-Induced Breakdown Spectroscopy / Edited by: Jagdish P. Singh and Surya N. Thakur, 2007.
2. Степанов К. Л., Станкевич Ю. А., Станчиц Л. К. и др. Моделирование спектров теплового излучения лазерно-индуцированной эрозионной плазмы // Тепло- и массоперенос–2011: Сб. науч. Тр. ИТМО им. А. В. Лыкова НАНБ, 2011. С. 189–196.
3. Omenetto N. Role of lasers in analytical atomic spectroscopy: where, when and why // J. Anal. At. Spectrom. 1998. Vol. 13. Pp. 385–399.
4. Radziemski L. J. From laser to LIBS, the path of technology development // Spectrochim. Acta. Part B. 2002. Vol. 57. Pp. 1109–1113.

5. Розанцев В. А., Широканов А. Д., Янковский А. А. Исследование влияния интервала времени между одиночными импульсами на характер спектра лазерной плазмы // Журн. прикл. спектроскопии. 1993. Т. 59, № 4. С. 431–434.
6. Петух М. Л., Розанцев В. А., Широканов А. Д. и др. Интенсивность спектров плазмы единичных и сдвоенных лазерных импульсов // Журн. прикл. спектроскопии. 2000. Т. 67, № 6. С. 798–801.
7. Winefordner J. D., Gornushkin I. B., Correll T., et al. Comparing several atomic spectrometric methods to the super stars: special emphasis on laser induced breakdown spectrometry, LIBS, a future super star // J. Anal. At. Spectrometry. 2004. Vol. 19. Pp. 1061–1083.
8. Ershov-Pavlov E. A., Catsalap K. Y., Stepanov K. L., Stankevich Y. A. Time-space distribution of laser-induced plasma parameters and its influence on emission spectra of the laser plums // Spectrochimica. Acta. Part B. 2008. Vol. 63. Pp. 1024–1037.
9. Очкин В. Н. Спектроскопия низкотемпературной плазмы. М.: Физматлит, 2006. – 471 с.
10. 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. Vol. 38, No. 3. Pp. 545–556.
11. Энциклопедия низкотемпературной плазмы / Под ред. В. Е. Фортова. М.: Наука, 2000. Т. I.
12. Суржииков С. Т. Вычислительный эксперимент в построении радиационных моделей механики излучающего газа. М.: Наука, 1992. – 156 с.
13. Gornushkin I. B., Stevenson C. L. Smith B. W., et al. Modeling an inhomogeneous optically thick laser induced plasma: a simplified theoretical approach // Spectrochimica Acta. Part B. 2001. Vol. 56. Pp. 1769–1785.
14. Зельдович Я. Б., Райзер Ю. П. Физика ударных волн и высокотемпературных гидродинамических явлений. М.: Наука, 1966. – 686 с.
15. Грим Г. Спектроскопия плазмы. М.: Атомиздат, 1969. – 452 с.
16. Грим Г. Уширение спектральных линий в плазме. М.: Мир, 1978. – 489 с.
17. Dimitrijević M. S., Konjević N. Simple estimates for Stark broadening of ion lines in stellar plasmas // Astronomy and Astrophysics. 1987. Vol. 172. Pp. 345–349.
18. Матвеев В. С. Приближенные представления коэффициентов поглощения и эквивалентных ширин линий с фойгтовским контуром // Журн. прикл. спектроскопии. 1972. Т. 16, № 2. С. 228–233.
19. Матвеев В. С. Приближенные представления показателя преломления среды в области линии поглощения с фойгтовским контуром // Журн. прикл. спектроскопии. 1981. Т. 35, № 3. С. 528–532.
20. Sahal-Bréchet, S Dimitrijević M. S., Moreau N. 2012. Stark-B database, [online]. Available <http://stark-b.obspm.fr/index.php/home>. Observatory of Paris, LERMA and Astronomical Observatory of Belgrade