

放电激励 KrF, ArF 激光器中电子能量 分布函数和输运系数的计算

陈建文 傅淑芬

(中国科学院上海光学精密机械研究所)

1980年10月8日收到

提 要

采用玻耳兹曼稳态方程计算了 He-Kr, Ne-Kr, He-Ar 和 Ne-Ar 混合物中电子能量分布函数和有关输运系数,并对计算结果作了讨论.

一、前 言

目前,准分子激光器的研究正致力于提高器件效率和改进器件性能,为获得最佳工作参数,必须对激光动力学和放电物理进行研究. 这包括: 放电过程中各种粒子的激发、电离机构,准分子的形成、猝灭和工作介质的本征吸收等基本过程. 电子能量分布函数和各种输运系数(例如: 平均电子能量、电子漂移速度、迁移率、各激光上能级的电离、激发速率等)是研究这些过程时必须知道的最基本物理参数. 本文给出了针对放电激励 ArF, KrF 准分子激光器的实验条件,采用玻耳兹曼输运方程对上述诸参数的数值计算结果.

文献[1]表明: 当卤素含量低于1%时,它对电子能量分布和输运系数的影响可略去不计. 因此,在计算中可以略去含量在0.2%以下的 F_2 的影响,而对四个体系: He-Kr, Ne-Kr, He-Ar 和 Ne-Ar 进行计算.

二、计 算 公 式

一气体分子数密度为 N 的系统,在空间均匀分布电场 E 作用下,当略去超弹性碰撞及电子-电子间相互作用时,稳态电子能量分布服从以下方程^[2]:

$$a_{k-1}n_{k-1} + b_{k+1}n_{k+1} - (a_k + b_k)n_k + \sum_s \sum_j N_s [R_{js,k+m_{js}} n_{k+m_{js}} + R_{js,k+m_{si}}^i n_{k+m_{si}} + R_{sj,k} n_k - R_{sj,k}^i n_k] = 0, \quad (1)$$

式中

$$a_k = \frac{2Ne^2}{3m} (E/N)^2 \frac{1}{v_k^+/N} \left(\frac{1}{\Delta\epsilon} \right)^2 \left(\epsilon_k^+ + \frac{\Delta\epsilon}{4} \right) + \frac{\bar{v}_k^+}{2\Delta\epsilon} \left(\frac{kT}{2} - \epsilon_k^+ + \frac{2kT}{\Delta\epsilon} \epsilon_k^+ \right), \quad (2)$$

$$\begin{aligned}
b_{k+1} &= \frac{2Ne^2}{3m} (E/N)^2 \frac{1}{v_k^+/N} \left(\frac{1}{\Delta\epsilon} \right)^2 \left(\epsilon_k^+ - \frac{\Delta\epsilon}{4} \right) \\
&\quad + \frac{\bar{v}_k^+}{2\Delta\epsilon} \left(\epsilon_k^+ - \frac{kT}{2} + \frac{2kT}{\Delta\epsilon} \epsilon_k^+ \right), \\
\frac{v_k^+}{N} &= \left(\frac{2\epsilon_k^+}{m} \right)^{1/2} \sum_s \delta_s Q'_m(\epsilon_k^+), \\
\bar{v}_k^+ &= 2mN \left(\frac{2\epsilon_k^+}{m} \right)^{1/2} \sum_s \delta_s Q'_m(\epsilon_k^+) / M_s, \\
R_{j,s} &= Q_j^s(\epsilon_k^+) v(\epsilon_k^+), \\
R_{i,s}^i &= Q_i^s(\epsilon_k^+) v(\epsilon_k^+), \\
v(\epsilon) &= \left(\frac{2\epsilon}{m} \right)^{1/2}. \tag{3}
\end{aligned}$$

k 为玻耳兹曼常数, T 为气体温度, e , m , $v(\epsilon)$ 分别为电子电荷、质量和速度. $n(\epsilon)$ 为能量是 ϵ 的电子数密度. $R_{j,s}$ 和 $R_{i,s}^i$ 分别为 s 种粒子激发到 j 能级速率和电离速率. Q_j^s, Q_i^s, Q'_m 为相应激发、电离和弹性碰撞截面. M_s 为 s 种粒子的分子质量. δ_s 为 s 种粒子数密度与总气体密度 N 的比. $\epsilon_{ji}^*, \epsilon_{ii}^*$ 分别为 s 种粒子电离阈值能量和激发到 j 能级的阈值能量. m_{ji}, m_{ii} 分别等于最靠近 $\epsilon_{ji}^*/\Delta\epsilon$ 和 $\epsilon_{ii}^*/\Delta\epsilon$ 的整数.

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

(1) 式所表示的方程可写为矩阵形式

$$\sum_l C_{kl} n_l = 0. \tag{4}$$

矩阵 C 的元素可由比较 (1) 与 (4) 式得到. (4) 式是 K 元的线性齐次方程组, 在其系数行列式等于零的条件下 (这在物理上总是满足的) 有无穷多解, 而我们需要的一组归一化的解, 也就是说满足归一化条件的电子能量分布的相对值. 因此, 我们可以任意给定 n_k 某一个值, 然后用迭代法求出一组 n_k , 并令其满足归一化条件:

$$\sum_k n_k \Delta\epsilon = 1.$$

一旦求得了电子能量分布函数, 便可求出各有关输运系数.

1. 平均电子能量

$$\bar{\epsilon} = \sum_k \epsilon_k n_k / \sum_k n_k.$$

2. 激发和电离速率

$$\begin{aligned}
\chi_{j,s} &= \sum_k Q_j^s(\epsilon_k^+) v(\epsilon_k^+) n_k / \sum_k n_k, \\
\chi_{i,s} &= \sum_k Q_i^s(\epsilon_k^+) v(\epsilon_k^+) n_k / \sum_k n_k.
\end{aligned}$$

3. 电子漂移速度

$$v_d = \sum_k \frac{(\bar{a}_k - \bar{b}_k) n_k \Delta \varepsilon}{E \sum_k n_k}.$$

4. 放电功率输运到各种非弹性碰撞过程及弹性碰撞过程的功率比

$$\eta_{js} = R_{sj,k+m_{sj}} n_{k+m_{sj}} N_{sj} \Delta \varepsilon / \dot{E}_g,$$

$$\eta_{is} = R_{is,k+m_{is}} n_{k+m_{is}} N_{is} \Delta \varepsilon / \dot{E}_g,$$

式中

$$\bar{a}_k = \frac{2Ne^2}{3m} (E/N)^2 \left(\frac{1}{v_k^+ / N} \right) \left(\frac{1}{\Delta \varepsilon} \right)^2 \left(\varepsilon_k^+ + \frac{\Delta \varepsilon}{4} \right),$$

$$\bar{b}_{k+1} = \frac{2Ne^2}{3m} (E/N)^2 \left(\frac{1}{v_{k+1}^+ / N} \right) \left(\frac{1}{\Delta \varepsilon} \right)^2 \left(\varepsilon_k^+ - \frac{\Delta \varepsilon}{4} \right),$$

$$\dot{E}_g = \sum_k (\bar{a}_k - \bar{b}_k) n_k \Delta \varepsilon.$$

$\dot{E}_g$ 为电子从外电场得到能量的速率。根据能量平衡条件, 电子从电场得到能量的速率, 应等于弹性碰撞损失能量的速率 $\dot{E}_{el}$ 和非弹性碰撞损失能量速率 $\dot{E}_{inel}$ 之和。

计算精度可用下式检验:

$$\dot{E}_g = \dot{E}_{el} + \dot{E}_{inel}.$$

计算精度在 10^{-5} — 10^{-6} 之间。

三、电子碰撞截面数据

He, Ne, Ar, Kr 均是单原子分子, 它们不存在振动能级, 因此没有振动激发问题。我们所研究的电子能量范围在 0—20 eV 之间, 因此以下计算只考虑 He, Ne 亚稳能级激发和弹性碰撞, Ar, Kr 亚稳能级激发, 电离和弹性碰撞。

所有弹性碰撞截面数据和 He, Ne 激发截面均取自文献[3]。

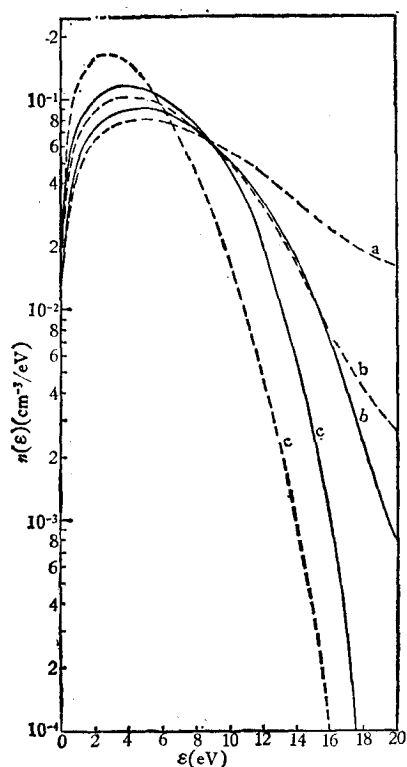
Kr, Ar 激发和电离截面由以下近似公式给出^[4]:

$$Q = a_1(\varepsilon - \varepsilon_0). \quad (5)$$

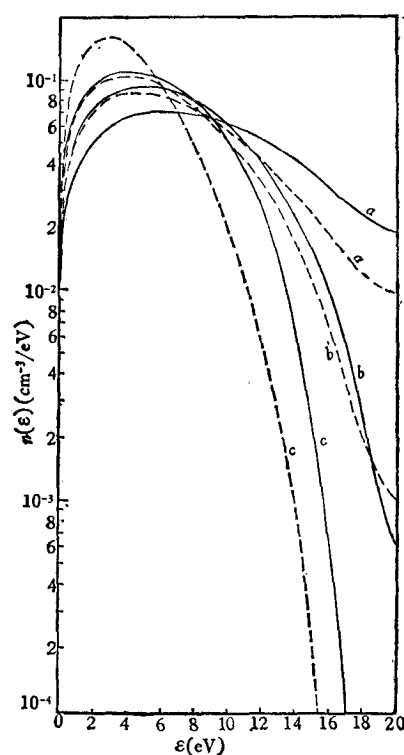
(5)式中, 对于 Kr 而言, 激发和电离阈值电子能量分别为 $\varepsilon_0 = 9.91$ eV, 14 eV。相应 $a_1 = 1.4 \times 10^{-17}$ cm²/eV 和 2.5×10^{-17} cm²/eV。对于 Ar 而言, 激发和电离阈值的电子能量分别为 $\varepsilon_0 = 11.5$ eV, 14 eV。相应 $a_1 = 0.78 \times 10^{-17}$ cm²/eV, 1.5×10^{-17} cm²/eV。

四、结果和讨论

图 1 和图 2 分别给出了 Ne-Kr, He-Kr, Ne-Ar, He-Ar 混合物中电子能量分布, 随 E/N 值的变化。当 E/N 值增大时, 电子从外场获得更多能量, 因此高能电子增多, 电子能量分布向高能方向移动。

图1 电子能量分布与 E/N 值的关系 (5% 的 Kr)

a — $E/N = 6 \times 10^{-16} \text{ V} \cdot \text{cm}^2$;
 b — $E/N = 3 \times 10^{-16} \text{ V} \cdot \text{cm}^2$;
 c — $E/N = 1 \times 10^{-16} \text{ V} \cdot \text{cm}^2$;
 ——— He-Kr;
 - - - - - Ne-Kr

图2 不同 E/N 值的电子能量分布 (15% 的 Ar, 总气压为 3 个大气压)

a — $E/N = 6 \times 10^{-16} \text{ V} \cdot \text{cm}^2$;
 b — $E/N = 3 \times 10^{-16} \text{ V} \cdot \text{cm}^2$;
 c — $E/N = 1 \times 10^{-16} \text{ V} \cdot \text{cm}^2$;
 ——— He-Ar; - - - - - Ne-Ar

图3给出了对于固定的 E/N , 在 He-Kr, Ne-Kr 系统中, 当 Kr 含量变化时, 电子能量分布函数的变化. 随着 Kr 分压的增加, 10 eV 以上的高能电子明显减少. 这是因为 Kr 的阈值激发电位为 9.91 eV. 当电子达到这一能量时, 就可能与 Kr 发生非弹性碰撞, 将能量交给 Kr 原子, 而降入低能区. 这样 Kr 分压越高, 碰撞几率就越大, 高能电子返回到低能区几率也就越高. 从这里可以看出, 尽管 Kr 分压较低, 但对电子能量分布带来明显的影响, 因此不能用纯 He 或纯 Ne 的电子能量分布来代替 He-Kr, Ne-Kr 混合系统的电子能量分布.

图4给出了 He-Ar, Ne-Ar 混合物中, 电子能量分布与 Ar 分压的关系, 所得结果与上述完全类似.

图5, 图6绘出了 Ne 的激发速率, Kr 和 Ar 的激发和电离速率与 E/N 值关系. 从图中可以看出, 随 E/N 值的增大, 激发和电离速率都相应增加. 但在高 E/N 值情况下, 激发速率和电离速率趋于饱和. 需要指出的是, 尽管 Ne 的激发速率比 Ar 和 Kr 要低一个量级, 但 Ne 的气压比 Kr 或 Ar 也高一个量级, 因此, 它是不能忽略的.

从图5和6中还可以看出, Kr, Ar 激发和电离速率基本和缓冲气体无关, 即在 He 和

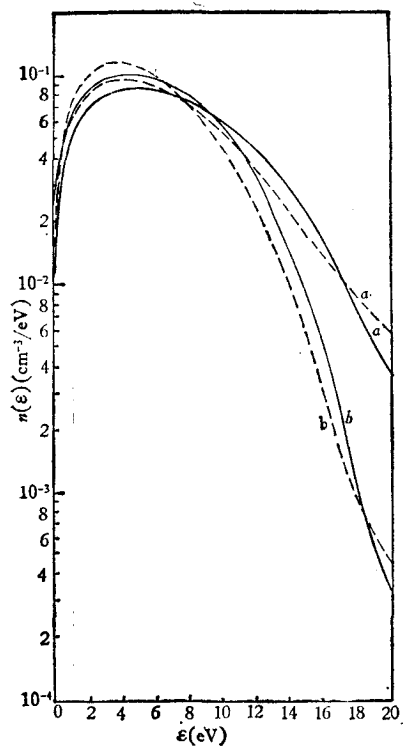


图3 电子能量分布与 Kr 分压的关系
 $E/N = 3 \times 10^{-16} \text{ V} \cdot \text{cm}^2$;
 a ——Kr 占 3%; b ——Kr 占 10%;
 曲线说明同图 1

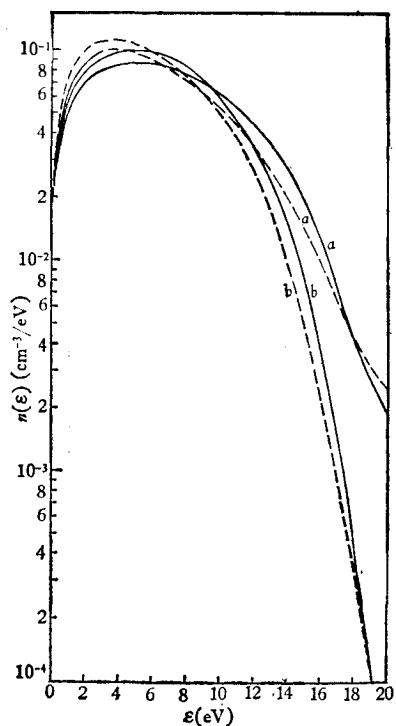


图4 电子能量分布与 Ar 分压的关系
 (总气压为 3 个大气压)
 $E/N = 3 \times 10^{-16} \text{ V} \cdot \text{cm}^2$; a ——Ar 占 10%;
 b ——Ar 占 30%; 曲线说明同图 2

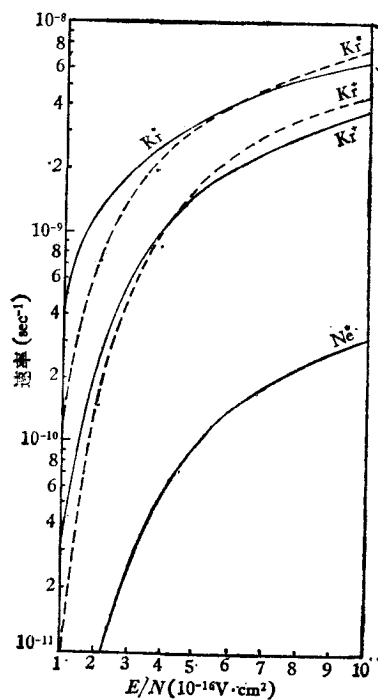


图5 激发和电离速率与 E/N 关系(5%的 Kr)
 曲线说明同图 1

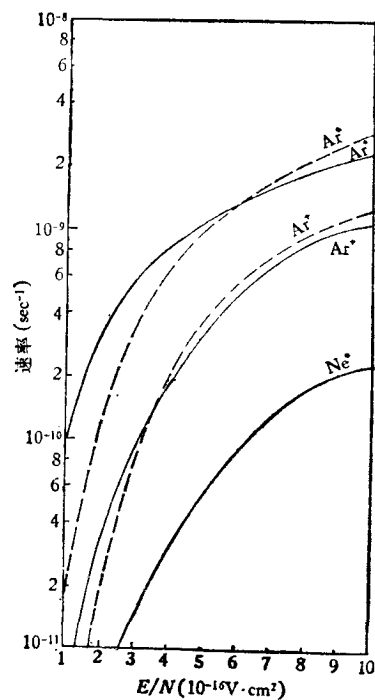


图6 激发和电离速率与 E/N 关系(15%的 Ar)
 曲线说明同图 2

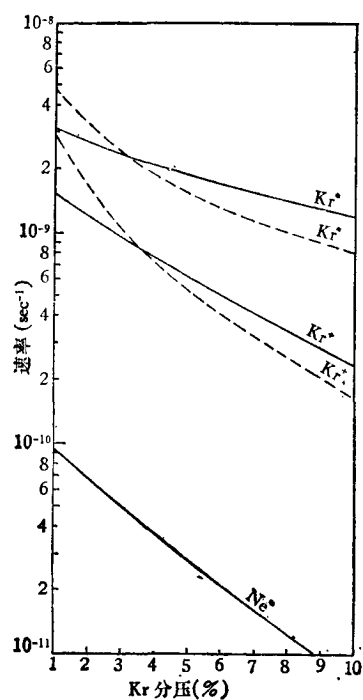


图7 激发和电离速率与 Kr 分压的关系
 $E/N = 3 \times 10^{-16} \text{V} \cdot \text{cm}^2$; 曲线说明同图1

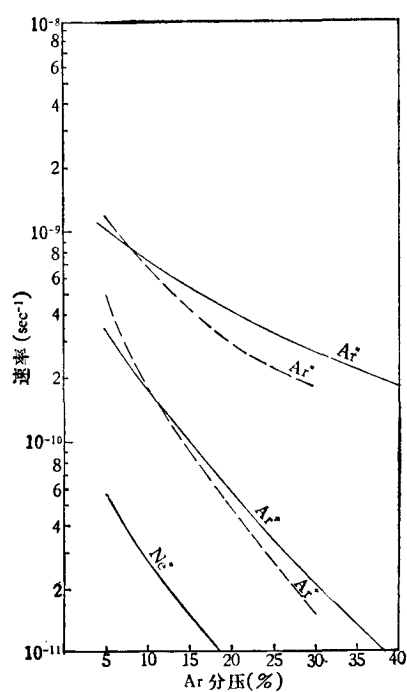


图8 激发和电离速率与 Ar 分压的关系
 $E/N = 3 \times 10^{-16} \text{V} \cdot \text{cm}^2$; 曲线说明同图2

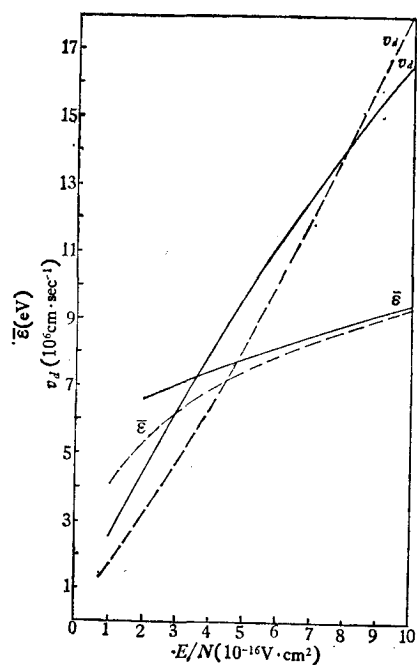


图9 电子漂移速度和平均电子能量与 E/N 关系
 (5% 的 Kr, 总气压为 3 个大气压)
 曲线说明同图1

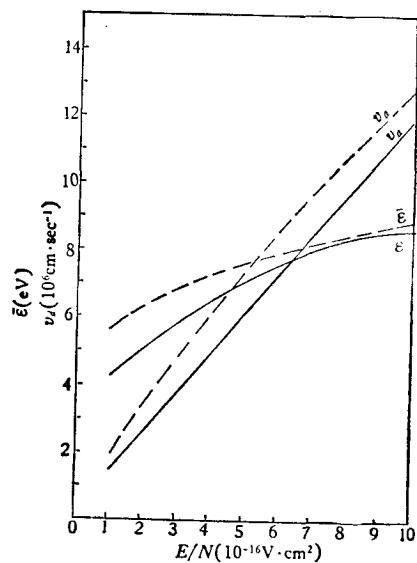


图10 电子漂移速度和平均电子能量与 E/N 关系
 (15% 的 Ar, 总气压为 3 个大气压)
 ———— Ne-Ar; ———— He-Ar

Ne 系统中, 它们的数值近似相等. 并且激发速率总是大于电离速率.

由于 He 的激发速率低于 $10^{-12}/\text{sec}$, 故在图中未绘出.

图 7 和图 8 分别绘出了 Kr, Ar 激发和电离速率随 Kr, Ar 分压的变化. 随着 Kr, Ar 分压的提高, 两者都相应降低, 这与电子能量分布在较高分压情况下, 高能电子的减少是一致的.

从图 9 可以看出, 当气体成份给定时, 随着 E/N 的增大, 电子所受外电场方向的加速作用增强, 故电子漂移速度 v_d 增大. 与电子漂移速度相类似, 平均电子能量 $\bar{\epsilon}$ 亦随 E/N 值的增大而增大(图 10). 但 $\bar{\epsilon}$ 的斜率相当低. 无论是 v_d 还是 $\bar{\epsilon}$ 均随 Ar 或 Kr 分压的增大而减小. (图 11 和 12).

从图中可以看出: 以 Ne 作缓冲气体时, 可以获得比 He 高的平均电子能量与漂移速度.

在一般横向放电的准分子激光器中, E/N 值为 $(2-3) \times 10^{-16} \text{ cm}^2 \cdot \text{V}$. 以 He 作缓冲气体, Kr 分压为 5% 的 KrF 激光器, 平均电子能量为 7eV 左右. 在含 Ar 15% 的 ArF 激光器中, 平均电子能量为 6 eV 左右.

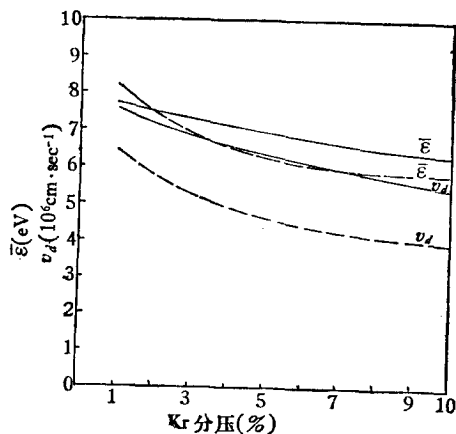


图 11 电子漂移速度和平均电子能量与 Kr 分压关系
 $E/N = 3 \times 10^{-16} \text{ V} \cdot \text{cm}^2$; 曲线说明同图 1

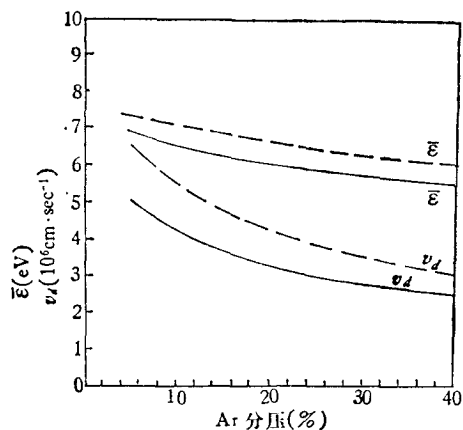


图 12 电子漂移速度和平均电子能量与 Ar 分压关系
 $E/N = 3 \times 10^{-16} \text{ V} \cdot \text{cm}^2$; 曲线说明同图 10

图 13, 和 14 给出了放电功率耦合到各种粒子激发态和电离态的功率输运比以及弹性碰撞损耗.

在 He-Kr 和 He-Ar 混合物中, 低 E/N 值运转时, 放电功率主要消耗在无益的弹性碰撞损耗中, 显然在以 He 作缓冲气体的激光器中, 为了消除弹性损耗应尽量在高 E/N 值上工作. 以 Ne 作缓冲气体的激光器, 在低 E/N 值运转时, 放电功率主要由 Kr 和 Ar 的激发态所汲取, 当 E/N 值增高时, 放电功率输运到 Kr 和 Ar 的电离态. 由此可以推知: 高气压高 E/N 值运转时, 准分子的形成主要经由离子通道.

从图 13 和 14 中可以看到输运到 He 激发态的功率可以忽略不计, 因此视 He 为电子的透明体.

在图 15 和 16 中分别给出了 He-Kr, Ne-Kr, He-Ar 和 Ne-Ar 混合物中功率输运比随 Kr 或 Ar 含量的变化. 当在这两种混合物中, 分别增加 Kr 或 Ar 含量时, 放电功率主

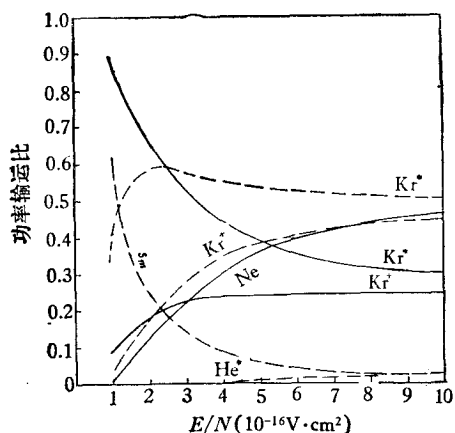


图 13 放电能量的功率输运比与 E/N 的关系
(Kr 分压 5%) 曲线说明同图 1;
 s_m 表示弹性过程

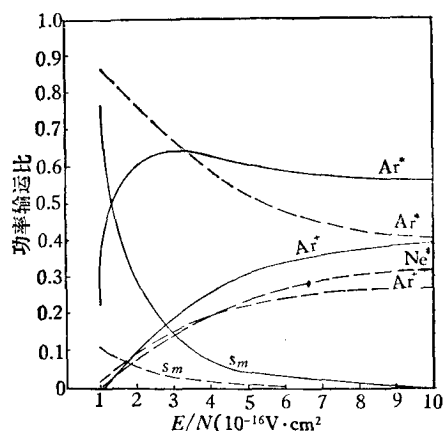


图 14 放电能量到各种非弹性及弹性过程中的
功率输运比(15% 的 Ar) s_m 表示弹性过程;
曲线说明同图 10

要输运到 Ar 和 Kr 的激发态. 例如当 Ar 分压为 40% 时, 放电功率的 70% 耦合到 Ar^* .

在较低的 Ar 分压或 Kr 分压情况下, 在 Ne-Kr, Ne-Ar 混合物中, 放电功率主要耦合到 Ne^* , 例如当 Kr 分压为 1% 时, Ne 的激发态集总了 80% 的放电功率.

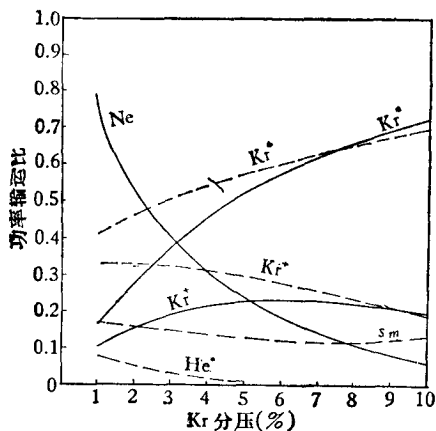


图 15 放电功率输运比与
Kr 分压的关系
 $E/N = 3 \times 10^{-16} \text{ V} \cdot \text{cm}^2$;
曲线说明同图 1

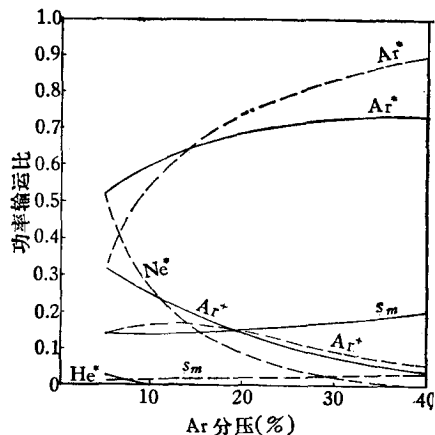


图 16 放电能量到各种过程的功率输运比与 Ar
分压的关系
 $E/N = 3 \times 10^{-16} \text{ V} \cdot \text{cm}^2$; s_m 表示弹性过程;
曲线说明同图 10

参 考 文 献

- [1] 傅淑芬, 陈建文, 物理学报, 待发表.
- [2] S. D. Rockwood, *Phys. Rev. A*, **8** (1973), 2348.
- [3] S. C. Brown, "Basic Data of Plasma Physics", New York, (1959).
- [4] M. G. Voitik, A. G. Molchanov and Yu. M. Popov, *Sov. J. Quantum Electron.*, **7** (1977), 976.

ELECTRON ENERGY DISTRIBUTION AND TRANSPORT COEFFICIENTS IN ELECTRICALLY EXCITED KrF AND ArF

CHEN JIAN-WEN FU SHU-FEN

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

ABSTRACT

Electron energy distributions and transport coefficients have been calculated for He-Kr, Ne-Kr, He-Ar and Ne-Ar mixtures by using Boltzmann stability equation. The calculated results are discussed.