

激光维持等离子体多物理场耦合模型与仿真*

张东荷雨 刘金宝 付洋洋†

(清华大学电机工程与应用电子技术系, 北京 100084)

(2023年6月28日收到; 2023年11月7日收到修改稿)

激光维持等离子体作为一种光照强度高、光谱范围宽、发光稳定的新型辐射光源, 在光学检测(半导体晶圆检测)等领域具有重要的应用价值. 本文回顾了激光维持等离子体研究的发展历程, 介绍了其基本物理过程及数学描述方程, 建立了基于多物理场耦合的二维流体模型. 利用该模型研究了激光在等离子体中的传播过程, 探讨了激光维持等离子体的初始演化过程、能量注入机制、稳态特性及不稳定性等关键问题. 通过与高压氙气等离子体实验结果对比, 确定了仿真模型的有效性. 相关仿真结果有助于深入理解激光维持等离子体的底层物理机制, 为实现光源系统设计、多参数优化提供理论依据.

关键词: 激光维持等离子体, 流体模型, 多物理场耦合, 辐射与输运

PACS: 52.38.Dx, 52.50.Jm, 52.65.-y, 51.20.+d

DOI: 10.7498/aps.73.20231056

1 引言

激光维持等离子体 (laser-sustained plasma, LSP) 是一种利用激光与电离气体相互作用产生的等离子体. LSP 可以从激光辐射场中吸收能量并维持在接近热力学平衡状态, 通常也被称为连续光放电 (continuous optical discharge, COD)^[1,2]. LSP 具有高温、高密度、高辐射强度等特点^[3], 在激光推进^[4]、光学检测^[5]、等离子体化学和材料加工^[6]等领域展现了重要的应用价值.

在集成电路制造领域, LSP 已经发展成为半导体晶圆光学检测中的主流光源技术^[7]. 晶圆缺陷检测贯穿半导体工艺的各个环节, 以保证芯片产品的质量和良率. 其按技术原理可分为电子束检测和光学检测两大类, 前者主要用于缺陷的精细检测, 而后者基于光学成像原理对表面缺陷进行快速定位. 鉴于晶圆表面缺陷尺寸小、介质种类多, 检测光源须同时具备高亮度、宽光谱范围等特点. 与传

统的电弧光源相比, LSP 光源体积小、能量沉积效率高, 同等功率下 LSP 光源发光强度较弧氙灯可提高几个数量级^[3], 因此更易满足半导体晶圆检测应用的需求. 此外, LSP 稳定工作时无需高压电极长时间参与放电, 电极受到的损伤相对较轻、寿命更长, 等离子体状态及发光质量受到电极材料溅射和蒸发的影响较小, 可长时间稳定工作.

图 1 所示为一种用于产生 LSP 光源的实验装置. 预填充了高压稀有气体的密闭腔体内置电极, 通过在上下两极之间外施高压脉冲产生初始等离子体. 腔体外的激光束经过扩束、聚焦等处理后, 被照射于两电极之间的等离子体区域, 此处为能量集中交换区域. 如图 2 所示, 对于中心波长为 10.6 μm 的 CO_2 激光, 其能量主要通过逆韧致辐射方式注入等离子体, 同时等离子体内也不断进行着自由-自由 (free-free, ff)、自由-束缚 (free-bound, fb) 和束缚-束缚 (bound-bound, bb) 多种辐射过程, 向外辐射能量并在电子跃迁过程中发出特定波长的光, 另有部分能量通过热扩散等过程被损失.

* 国家自然科学基金 (批准号: 52277154) 资助的课题.

† 通信作者. E-mail: fuyangyang@tsinghua.edu.cn

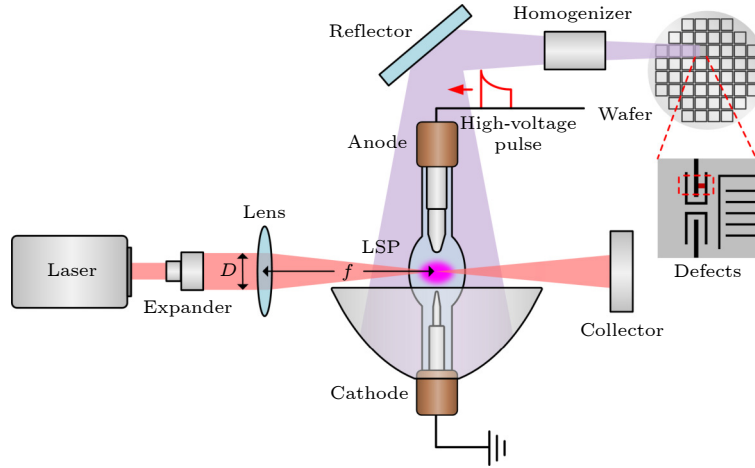


图 1 LSP 实验装置结构示意图

Fig. 1. Schematic diagram of the LSP experimental setup.

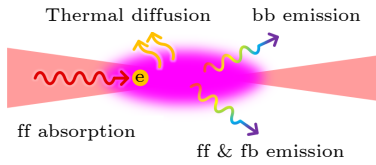


图 2 CO₂ 激光条件下 LSP 中主要能量传递机制, 包括: 逆韧致辐射 (ff) 吸收; 自由-自由 (ff)/自由-束缚 (fb) 辐射; 束缚-束缚 (bb) 辐射; 热扩散

Fig. 2. Main energy transfer processes of plasma sustained by CO₂ laser including bremsstrahlung absorption, free-free (ff)/free-bound (fb) emission, bound-bound (bb) emission, and thermal diffusion.

在实际应用场景下, LSP 辐射出的光会被收集并进行均质化处理, 随后被照射到待检测物体表面. 图 1 右侧简要展示了 LSP 光源在半导体晶圆缺陷检测中的应用, 极高亮度的 LSP 辐射光在待检测晶圆表面不断移动, 通过收集并分析不同位置反射或折射的光信号, 可实现对晶圆表面结构缺陷的检测和定位.

基于 LSP 原理, 日本 Energetiq 公司^[8] 研发了低功率光源 LDLS (laser-driven light source), 可以提供辐射波长从深紫外 (170 nm) 到红外波段 (2.1 μm) 的高强度光照. LDLS 光源采用近红外连续半导体激光器作为激励源, 可产生温度高于 10000 K、微米尺寸的 Xe LSP, 在各波段的辐照强度均明显高于传统气体放电光源. 经测试, 50 W-LDLS 光源在紫外至可见光波段的光照亮度是 75 W 短弧氙灯的 5—10 倍^[9]. 美国科磊公司 (KLA-Tencor) 基于 LSP 光源技术开发了商用的宽光谱等离子图案晶圆缺陷检测系统, 如 KLA-39xx、KLA-29xx 系列等. 此外, 针对如何提高 LSP 光源

亮度与稳定性, 科磊公司尝试在腔体方案中引入反向涡流气体腔^[10]、漩涡轴^[11] 等设计, 以改善高功率条件下封闭腔体内可能出现的局部过热现象. 虽然国外已经出现了较为成熟的商用 LSP 光源设备, 但由于 LSP 涉及流场、温度场和激光能量场等多物理场的耦合, 且相关实验诊断难度大、机理复杂度高, 因此仍存在大量物理现象和底层物理机制尚未充分阐明.

本文首先简要回顾了 LSP 在实验与模拟方面的研究进展, 对相关研究结果进行梳理与总结. 在此基础上, 详细介绍 LSP 二维多物理场耦合流体模型, 给出各种气体物性参数与输运参数的计算方法. 所建模型可用于研究气体种类、腔体结构、激光参数 (功率、模式) 等因素对 LSP 时空特性及性能的影响机制, 满足不同应用场景下 LSP 优化设计的需求. 基于仿真模型, 观察到了 LSP 的稳态结构、演化过程及振荡现象, 研究结果将为 LSP 参数调控、系统性能优化以及相关技术难题的解决提供理论指导.

2 激光维持等离子体的实验与模拟

自连续高功率 CO₂ 激光器出现以后, 苏联科学院力学问题研究所 Generalov 等^[12] 首次在聚焦激光束焦点附近产生并维持了高温等离子体, 成功验证了 Raizer^[1] 关于 LSP 的理论设想. 1972 年, 阿夫科-埃弗里特实验室 (AERL) Kantrowitz^[4] 首次提出了激光推进的概念 (其中 LSP 是激光推进中实现能量转化的重要方式), 即推进剂通过吸收远

程高功率激光的辐射在喷管中被加热膨胀并产生推力. 相较于常见的化学推进方法, 激光推进可以突破燃料最高燃烧温度的限制, 能量吸收效率(50%—86%)与热能转化效率更高^[13-15]. 实验中发现, 激光光束聚焦射入高压气体后, 稳态的LSP会出现在焦点上游, 其核心位置和尺寸相对稳定, 此时LSP吸收的入射激光强度恰好与热辐射、传导和对流损失相平衡. 平衡位置与尺寸大小受到激光入射功率、激光模式^[16,17]、聚焦能力^[6,18-20]、气体压强及对流流速^[6,21,22]等参数的影响. 现有的实验与模拟研究结果显示, 特定条件下可以观察到呈现双峰形态的LSP温度分布^[20,23,24]. 改变实验条件可以调控出现高温核心的个数: Jeng和Keefe^[25]的模拟结果表明低流速、高激光功率、高气压、高 F 数的情况下, LSP更倾向于出现双核心结构.

已有研究表明, LSP的各项参数会显著影响其发光亮度与辐射特性. 2016年, 俄罗斯科学院力学问题研究所Zimakov等^[19]与北京航空航天大学Shi等^[16]的实验结果均表明, 更高的功率会增加LSP的长度与核心温度, 进而获得辐射强度更高的光源. 同时降低激光 F 数会显著提高激光阈值功率, 产生的LSP长度与长宽比减小, 同时LSP辐射光谱中波长小于400 nm的部分占总光谱强度的比例提升. 华中科技大学Hu等^[20]通过在实验中改变LSP的腔内气压, 确定了在相同激光功率下, 高气压条件更容易获得小体积、高温、高亮度的LSP光源.

早在1970年, Raizer^[1]提出了亚音速条件下激光火花(放电)传播的一维计算模型, 用来确定连续CO₂激光维持等离子体的可行性及功率阈值. 1974年, 美国佛罗里达大学Battah与Keefe^[26]将模型扩展至准二维, 增加了对径向热传导损失和激光聚焦特性的描述. 在此基础上, 美国伊利诺伊大学Glumb与Krier^[27]引入收敛的激光束及更准确的气体特性对模型进一步拓展, 但缺少对流体速度变化的考量. 1985年, 美国宾夕法尼亚州立大学Merkle等^[28,29]首次提出了较完备的LSP二维稳态模型, 包含了激光光束的聚焦作用和截面径向能量分布, 并考虑了气体物理参数随温度的变化, 但该模型将吸收系数假设为常数, 存在较大不足. 美国田纳西大学Jeng等^[30]在此基础上对二维模型进行修正与改进, 通过与实验结果^[22]进行对比验证了稳态模型的准确性. 1996年, Conrad等^[31]提

出了含时的LSP二维流体模型, 但该模型对激光吸收系数以及LSP输运系数、物性参数的计算较为简化, 尽管背景气体为空气, 但未考虑原子谱线引起的热辐射损耗. 2009年, 土耳其中东技术大学Rafatov等^[32]引入了能够更精确描述激光辐射传播过程的准光学近似, 假设光束在等离子体中沿抛物线传播, 模拟结果能够与早期实验研究结果相符合^[33,34], 并总结了激光功率、 F 数^[35]、气流流速对LSP位置、温度的影响. 同年, 美国宾夕法尼亚州立大学Akarapu等^[17]引入了激光功率场, 以代替光线追迹法对LSP中的功率沉积进行模拟, 给出了不同激光模式下LSP能量吸收效率和形态区别, 验证了环形激光模式下LSP吸收效率低但体积更小的实验结论. 该模型虽然可以在二维上较好地模拟LSP的稳态温度分布, 但所解流体方程中未考虑含时项, 不能对LSP的暂态发展过程进行研究.

随着对LSP特性研究的深入, 实验中观察到的LSP较长时间尺度不稳定现象引起了越来越多的关注. Zimakov等在实验中利用纹影法^[36]、发射光谱频谱分析^[37]等手段观察到了LSP的周期波动规律, 总结了气体压强对波动频率的影响. 在此基础上, Lavrentyev等^[38]通过类比火焰的波动规律提出了定量估计LSP振荡周期频率的计算公式, Kotov等^[39]则对该研究提出的半经验公式进行了补充, 通过自然对流模型与实验现象的对比分析, 验证了LSP波动产生只与流场有关的猜想.

目前, 理论计算模型能够较为合理地描述稳态下LSP温度分布、核心位置和长度等状态参数, 能够更加准确地预测实验结果, 为掌握LSP中的复杂过程、关键影响因素、调控手段等提供了有力研究工具. 然而, 现有研究尚存在一些不足: 目前LSP的模拟研究多为稳态模型, 仅能得到LSP的最终稳定状态, 缺少对激光辐射发展过程进行描述的含时模型; 实验中观察到的LSP不稳定波动现象尚未在模拟研究中体现; 已有研究多聚焦于单一气体种类下的LSP模型, 可推广性不强. 为弥补以上不足, 本文建立了LSP二维含时流体模型, 较为精确地考虑了激光吸收与辐射损失功率密度项, 给出了计算Xe等离子气体的物性参数及输运系数的方法.

3 计算模型

根据Raizer^[3]的研究, LSP的中心温度可以达到10000—20000 K, 甚至更高, 通常满足局部热力

学平衡 (local thermodynamic equilibrium, LTE). 基于 LTE 假设, 本文在模型中认为所有粒子 (电子、离子和中性粒子) 分布在统计上满足玻尔兹曼关系, 且各能量自由度上具有相同的温度 T , 即 $T = T_e = T_i = T_g$. LSP 气压在几 bar 到十几 bar 范围 ($1 \text{ bar} = 10^5 \text{ Pa}$), 因此可以采用流体模拟的方法. 在流速小于音速, 以及较高的温度梯度条件下, 可采用层流可压 (laminar, compressible) 方法. 层流可压流体可由质量守恒 (连续) 方程、动量守恒方程和能量守恒方程描述. 质量守恒 (连续) 方程为

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) = 0, \quad (1)$$

其中, ρ 是质量密度, \mathbf{u} 是流体速度. Navier-Stokes 方程 (动量方程) 为

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho \mathbf{u}) + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} \mathbf{u}) = -\nabla p + \nabla \cdot \bar{\boldsymbol{\tau}} + \mathbf{f}_b, \quad (2)$$

等式左侧是流体动量变化速率, 右侧是流体受到的力. 其中, p 是气体压强, \mathbf{f}_b 是体积力, 一般可以忽略, $\bar{\boldsymbol{\tau}}$ 是黏滞力张量, 采用牛顿流体计算公式表示为 $\bar{\boldsymbol{\tau}} = \mu_v (\nabla \mathbf{u} + (\nabla \mathbf{u})^T) - \frac{2}{3} \mu_v (\nabla \cdot \mathbf{u}) \bar{\mathbf{I}}$, 其中, μ_v 是黏性系数, $\bar{\mathbf{I}}$ 是单位张量. 能量方程 (忽略气体动能) 为

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial t} (\rho C_p T) + \nabla \cdot (\rho C_p T \mathbf{u}) \\ & = \nabla \cdot (k_T \nabla T) + P_{\text{abs}} - P_{\text{rad}}, \end{aligned} \quad (3)$$

其中, 左侧是流体焓变速率, T 是温度, C_p 是定压比热容. 右侧是流体的加热或损失功率密度, 单位均为 W/m^3 , 包括扩散功率密度 $\nabla \cdot (k_T \nabla T)$ 、激光加热功率密度 P_{abs} , 以及辐射功率密度 $-P_{\text{rad}}$, k_T 是热导率.

(1) 式—(3) 式与理想气体状态方程, 即

$$p = \frac{\rho}{M_{\text{mol}}} RT, \quad (4)$$

构成关于 ρ , \mathbf{u} , p 和 T 的完备方程组. (4) 式中 M_{mol} 是摩尔质量, R 是摩尔气体常数. 为求解式 (1) 式—(4) 式, 还需确定参数 C_p , k_T , μ_v , P_{abs} , P_{rad} , 下面给出这些参数的具体计算方法.

3.1 参数计算

LTE 等离子体的 μ_v , C_p 和 k_T 与气体的组分有关, 而气体的平衡组分随着 T 和 p 的不同而变化, 因此首先需要确定等离子体体系的组成^[40,41]. LTE 等离子体中各物种处于热力学平衡状态, 此

时系统的吉布斯自由能最小^[42]. 系统吉布斯自由能 G 可表示为

$$G = \sum N_i \mu_i = -k_B T \sum_{i=1}^{N_{\text{spe}}} N_i \ln \frac{q_i}{N_i}, \quad (5)$$

其中, μ_i 是物种 i 的化学势, N_i 是物种 i 的粒子数, k_B 是玻尔兹曼常数, q_i 是物种 i 的配分函数, N_{spe} 为物种数. 本文计算中考虑的组分包括: 电子, Xe , Xe^+ , Xe^{2+} , Xe^{3+} 与 Xe^{4+} 六种粒子, 即物种数 $N_{\text{spe}} = 6$. 粒子的配分函数 q_i 可拆分为关于平动能的 $q_{i,\text{tr}}$ 与关于内能的 $q_{i,\text{int}}$ 两部分, 即

$$q_i = q_{i,\text{tr}} q_{i,\text{int}}, \quad (6)$$

其中,

$$q_{i,\text{tr}} = V \left(\frac{2\pi m k_B T}{h^2} \right)^{3/2}, \quad (7)$$

$$q_{i,\text{int}} = \sum_{j=1}^{N_{\text{eng}}} g_j \exp \left(-\frac{E_j}{k_B T} \right), \quad (8)$$

其中, h 是普朗克常量, V 是体积, m 是质量, g_j 和 E_j 是能级 j 对应的简并度和能量. 除以上约束条件外, N_i 还要满足元素守恒, 此时求得使 G 达到最小的 N_i 值, 即可得到 LTE 等离子体各组分的数密度, 求解这一约束优化问题可采用拉格朗日乘子法. 图 3 给出了不同气压条件下稳定状态的 Xe 等离子体中各粒子数密度随温度的变化.

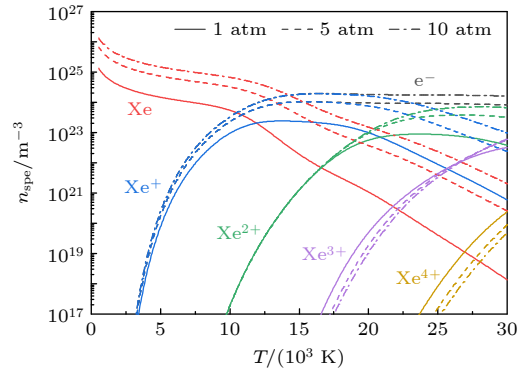


图 3 不同压强的平衡状态下 Xe 气体组分

Fig. 3. Composition of Xe plasma at different pressures.

3.2 激光与等离子体相互作用

当激光频率大于等离子体频率时, 激光可以进入等离子体并在等离子体中传播. 不考虑激光在等离子体中传播产生的电磁场影响, 基于几何光学假设, 根据 Beer-Lambert 定律, 沿激光传播路径 s 上

激光强度 I 的变化可表示为

$$\frac{dI}{ds} = -\alpha I, \quad (9)$$

其中, \mathbf{s} 表示激光传播路径上的单位矢量; α 表示吸收系数, 即激光经过单位长度被等离子体吸收的强度百分比. 当采用的激光束中心波长不同时, 激光对等离子体的能量注入 (加热) 机制存在一定差异. 如用中心波长为 $10.6 \mu\text{m}$ 的 CO_2 激光器照射 H_2 , Ar , Xe 等种类气体实现 LSP, 等离子体主要通过逆韧致辐射 (inverse bremsstrahlung) 过程吸收激光能量, 即电子从光子中吸收能量, 再经过碰撞过程将能量传递给重粒子 (电离和激发), 进而提高等离子体温度. 若采用高功率近红外 (near-infrared, NIR) 激光器 (常见中心波长包括 $1064, 1070, 1080 \text{ nm}$ 等) 作为光源, 则还需要考虑束缚-束缚 (bb) 吸收形式.

3.2.1 ff 吸收

对于逆韧致辐射 (ff) 吸收, 吸收系数 α_{ff} 的计算式为 [17,43]

$$\alpha_{\text{ff}}(T) = \frac{16\pi Z^2 n_e n_i e^6 \ln \Lambda}{3c\nu^2 (2\pi m_e k_B T_e)^{3/2} (1 - \nu_p^2/\nu^2)^{1/2}}, \quad (10)$$

其中, Z , n_i 为离子电荷数和数密度; e, m_e, n_e, T_e 分别为电子的电荷量 (绝对值)、质量、数密度和温度; c 为光速; ν 和 $\nu_p = \sqrt{e^2 n_e / (\pi m_e)}$ 分别为激光频率和等离子体频率. $\ln \Lambda$ 为库仑对数, Λ 等于 $v_T / (2\pi\nu_p p_{\text{min}})$ 与 $v_T / (2\pi\nu p_{\text{min}})$ 中的较小值, v_T 为电子的热速度, p_{min} 为电子-离子碰撞过程中的最小瞄准距离.

3.2.2 bf 吸收

光电离吸收系数 α_{ν}^{bf} 可通过光电离反应截面计算:

$$\alpha_{\nu}^{\text{bf}} = \left(\sum_i^{N_{\text{spc}}} n_i \sigma_i^{\text{bf}} \right) \left[1 - \exp\left(-\frac{h\nu}{k_B T}\right) \right], \quad (11)$$

其中, σ_i^{bf} 是 i 物种的总光电离反应截面, 计算式为 [44]

$$\sigma_{ij}^{\text{bf}} = \begin{cases} \frac{8\alpha\pi a_0^2}{3\sqrt{3}} \left(\frac{2R_y}{h\nu} \right)^3 \frac{Z_n^4}{n^5} P_n, & h\nu \geq U_{ij}, \\ 0, & h\nu < U_{ij}, \end{cases} \quad (12)$$

其中, n 是 i 粒子 j 能级的主量子数, Z_n 是非氢原子的有效电荷数, P_n 是原子或离子在 n 层轨道的电子占据数 (occupation number), U_{ij} 是 i 粒子 j

能级的电离能. 当光子能量 $h\nu$ 大于 j 能级原子 (或离子) 进一步电离所需要的能量 U_{ij} 时, 光电离反应截面 $\sigma_{ij}^{\text{bf}} > 0$, 否则 $\sigma_{ij}^{\text{bf}} = 0$.

3.2.3 bb 吸收

对于束缚-束缚 (bb) 吸收, 吸收系数与激光频率有关, 首先给出特定频率下的吸收系数计算公式:

$$\alpha_{\text{bb}}(T, \nu) = \frac{c^2}{8\pi\nu^2} A_{21} n_2 \left[e\left(\frac{h\nu}{k_B T}\right) - 1 \right] \phi(\nu), \quad (13)$$

其中, A_{21} 为电子从能级 2 跃迁到能级 1 的自发辐射跃迁概率, 下标 2 代表高能级、下标 1 代表低能级, n_2 为处于高能级的电子数密度, $\phi(\nu)$ 为等离子体吸收光谱的线型函数.

若计算某一温度下等离子体的 bb 吸收系数, 还需要考虑入射激光的光谱形状, 并在相关频率波段范围内进行积分:

$$\alpha_{\text{bb}}(T) = \int_{\nu_1}^{\nu_2} \alpha_{\text{bb}}(T, \nu) f(\nu) d\nu, \quad (14)$$

其中 $f(\nu)$ 为入射激光光谱的线型函数, ν_1 和 ν_2 分别为等离子体能够吸收激光的最小频率与最大频率.

3.2.4 总吸收系数

LSP 的总激光吸收系数等于以上三种吸收系数之和:

$$\alpha_{\text{tot}} = \alpha_{\text{ff}} + \alpha_{\text{bf}} + \alpha_{\text{bb}}. \quad (15)$$

在入射 CO_2 激光中心波长为 $10.6 \mu\text{m}$ 的条件下, 不同压强下 Xe 的吸收系数随温度的变化曲线如图 4 所示.

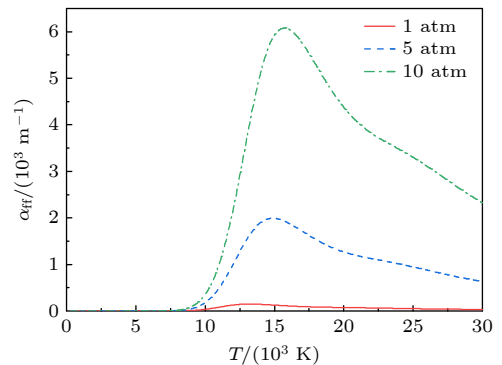


图 4 $10.6 \mu\text{m}$ CO_2 激光条件下不同压强 Xe 等离子体的吸收系数随温度变化

Fig. 4. Absorption coefficient of Xe plasmas with temperature at different pressures under the condition of $10.6 \mu\text{m}$ CO_2 laser.

3.3 等压比热容

等压比热容 C_p 描述了焓 H 与温度 T 之间的关系. 首先定义计算系统的质量密度 ρ , 即

$$\rho = \sum_{i=1}^{N_{\text{spe}}} n_i m_i, \quad (16)$$

其中, n_i 和 m_i 分别为物种 i 的数密度和粒子质量.

焓 H 与配分函数等参数的关系为

$$H = \frac{1}{\rho} \sum_{i=1}^{N_{\text{spe}}} n_i \left(\frac{5}{2} k_B T + k_B T^2 \frac{\partial \ln q_i}{\partial T} + H_{f,i} \right), \quad (17)$$

其中, $H_{f,i}$ 为物种 i 的合成焓.

定压比热容 C_p 与焓 H 、温度 T 的关系为

$$C_p = \left. \frac{\partial H}{\partial T} \right|_{p=\text{const.}}. \quad (18)$$

不同压强下 Xe 等离子体定压比热容随温度变化曲线如图 5(a) 所示.

3.4 碰撞积分

根据 Chapman 和 Cowling^[45] 的理论, 黏滞系数 μ_v 与热导率 k_T 等输运参数可通过构建碰撞积分 $\Omega_{ij}^{(l,s)}$ 计算得到. 计算以上两项输运系数需用到的

碰撞积分种类在表 1 中列出.

表 1 输运系数与用于计算的碰撞积分

Table 1. Transport coefficients and the collision integrals used for calculation.

输运系数	用于计算的碰撞积分
μ_v	$\Omega^{(1,1)}; \Omega^{(2,2)}$
k_T	$\Omega^{(1,s)}, s = 1, \dots, 5; \Omega^{(2,s)}, s = 2, 3, 4$

物种 i 与物种 j 相互作用的碰撞积分可表示为

$$\Omega_{ij}^{(l,s)} = \sqrt{\frac{k_B T}{2\pi m_{ij}}} \int_0^\infty \gamma^{2s+3} Q_{ij}^{(l)}(\gamma^2 k_B T) \times \exp(-\gamma^2) d\gamma, \quad (19)$$

其中, 输运截面 $Q_{ij}^{(l)}$ 描述了物种 i 与物种 j 之间的相互作用, γ^2 为约化能量, m_{ij} 为约化质量, 3 个变量的表达式分别为

$$Q_{ij}^{(l)}(\varepsilon_{ij}) = 2\pi \int_0^\infty [1 - \cos^l \chi_{ij}(\varepsilon_{ij}, b)] b db, \quad (20)$$

$$\gamma^2 = \frac{m_{ij} g^2}{2k_B T}, \quad m_{ij} = \frac{m_i m_j}{m_i + m_j},$$

其中, b, χ_{ij} 分别为瞄准距离和碰撞偏角; $\varepsilon_{ij} = \frac{1}{2} m_{ij} g^2$ 是由组分碰撞时相对速度 g 定义的初始动能; 上标 l 代表碰撞积分的类型, s 代表碰撞积分的

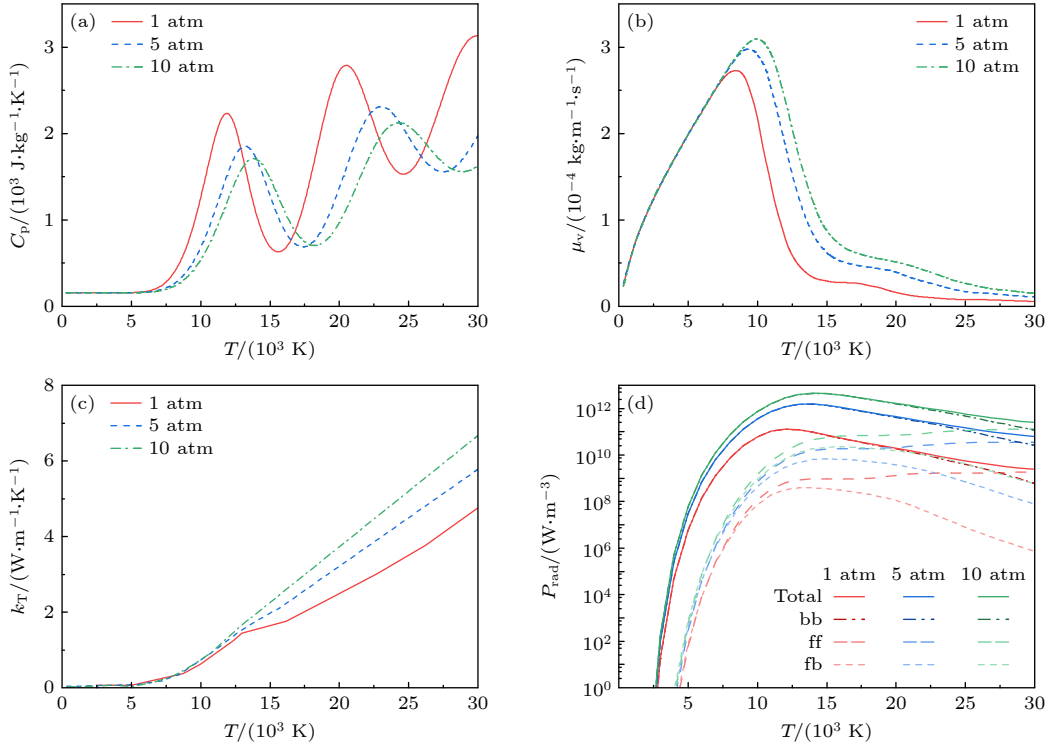


图 5 不同压强下 Xe 等离子体各参数随温度的变化 (a) 恒压比热容; (b) 黏滞系数; (c) 热导率; (d) 各项辐射损失功率密度
Fig. 5. Parameters of Xe plasmas scaling with temperature at different pressures: (a) Specific heat capacity; (b) viscosity; (c) thermal conductivity; (d) radiative loss power density.

表 2 Xe 等离子体中粒子对相互作用对应的碰撞积分计算方法
 Table 2. Calculation of collisional integrals corresponding to particle pair interactions in Xe plasmas.

相互作用	计算方法	参考文献
e-Xe	动量转移截面积分	[46]
Xe-Xe	指数势能: $A = 311, \rho = 0.208$	[47]
Xe- Xe ⁺	电荷交换截面: $A = 9.716, B = 0.4204$	[48]
e- Xe ^{Z_i+} , Xe ^{Z_i+} - Xe ^{Z_j+}	屏蔽库仑势	[49]

阶数; χ_{ij} 是碰撞参数 b 、动能 ε 和粒子间相互作用势 $V(r)$ 的函数; r 为相互作用粒子间的距离.

不同粒子对的相互作用需采用合适的势能函数进行描述, 对应的碰撞积分计算方法也不同. 本文中用到的 Xe 等离子体中包含 e-Xe, Xe-Xe, e-Xe^{Z_i+}, Xe-Xe⁺ 与 Xe^{Z_i+}-Xe^{Z_j+} 共 5 种类型的粒子对, 描述这些粒子对之间相互作用的碰撞积分计算方法见表 2. 下面介绍几种描述粒子间相互作用的碰撞积分计算方法.

3.4.1 指数排斥势

指数排斥势 (exponential repulsive potential) 常被用于描述中性原子之间或中性原子与离子之间的相互作用势^[50,51], 它的表达式为

$$V(r) = A \exp(-r/\rho), \quad (21)$$

其中, A 和 ρ 两个参数描述了指数排斥势的形状. 其对应的碰撞积分 $\Omega_{\text{exp}}^{(l,s)}$ 计算公式为

$$\Omega_{\text{exp}}^{(l,s)} = 4\sqrt{\frac{\pi k_B T}{2\mu}} \beta^2 \rho I_{(l,s)}, \quad (22)$$

其中 $\beta = \ln[A/(k_B T)]$, $I_{(l,s)}$ 为对应不同 l 和 s 组合的特定值, 一般可通过查表得到 $I_{(l,s)}$ 与 β 的关系^[52].

3.4.2 兰纳-琼斯势

另一种用于描述中性原子之间或中性原子与带电粒子之间相互作用势的势能函数类型为兰纳-琼斯势 (Lennard-Jones potential), 其使用较广泛的表达形式为

$$V(r) = 4\varepsilon_0 [(\sigma/r)^{12} - (\sigma/r)^6], \quad (23)$$

其中, ε_0 和 σ 两个参数描述了该势能函数形状. 其对应的折合碰撞积分 $\Omega_{\text{LJ}}^{(l,s)*}$ 通过查表可得^[53], 并由折合碰撞积分 (reduced collision integrals) 可以计算兰纳-琼斯势对应的碰撞积分.

按照 Chapman 的处理方式, 折合碰撞积分定义为其他势能的碰撞积分与硬球碰撞积分的比

值, 即

$$\Omega_{\text{LJ}}^{(l,s)*} = \Omega_{\text{LJ}}^{(l,s)} / \Omega_{\text{RS}}^{(l,s)}, \quad (24)$$

其中, $\Omega_{\text{RS}}^{(l,s)}$ 为硬球势 (rigid sphere potential) 对应的碰撞积分, 计算式为

$$\Omega_{\text{RS}}^{(l,s)} = \pi \sigma^2 \sqrt{\frac{k_B T}{2\pi\mu}} \left[1 - \frac{1 - (-1)^{l+1}}{2(l+1)} \right] \frac{(s+1)!}{2}. \quad (25)$$

3.4.3 电荷交换相互作用

电荷交换相互作用的实验测定截面 $Q_{\text{ex},ij}$ 可以参数化表示为

$$Q_{\text{ex},ij} = \frac{1}{2} (A - B \ln g)^2, \quad (26)$$

其中, g 为相对速度, A 、 B 为拟合参数 (见表 2 第三行). 将 (26) 式代入 (19) 式, 可以得到对应的碰撞积分计算式为^[54]

$$\begin{aligned} \Omega_{ij}^{(l,s)} = & \sqrt{\frac{k_B T}{2\pi m_{ij}}} \frac{(s+1)! [2l+1 - (-1)^l]}{4(l+1)} \\ & \times \frac{B^2}{4} \left[\left(\ln \left(\frac{2k_B T}{m_{ij}} \right) - \frac{2A}{B} + \sum_{n=1}^{s+1} \left(\frac{1}{n} - \bar{\gamma} \right) \right)^2 \right. \\ & \left. + \frac{\pi^2}{6} - \sum_{n=1}^{s+1} \frac{1}{n^2} \right], \quad (27) \end{aligned}$$

其中, $\bar{\gamma}$ 为欧拉常数.

3.4.4 库仑势与屏蔽库仑势

用于描述带电粒子间相互作用的库仑势能可以表示为

$$V(r) = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{4\pi \varepsilon_0 r} \propto \frac{1}{r}, \quad (28)$$

其中, Z_i 为带电粒子 i 的净电荷数.

由于等离子体的聚集效应, 须对库仑势做修正, 即采用屏蔽库仑势计算带电粒子之间的相互作用. 修正后的屏蔽库仑势公式可表示为

$$V(r) = V_0 \frac{\lambda_D}{r} \exp\left(-\frac{r}{\lambda_D}\right), \quad (29)$$

其中, $V_0 = (Z_1 Z_2 e^2)/(4\pi\epsilon_0 \lambda_D)$, λ_D 为德拜长度. 可通过查表得到对应碰撞积分与温度的关系 [49].

3.5 黏滞系数

根据 Chapman 和 Cowling [45] 的理论, 多组分系统的黏滞系数可表示为

$$\mu_{\nu} = \mathbf{x}^T (\mathbf{H})^{-1} \mathbf{I}, \quad (30)$$

其中, 列向量 $\mathbf{x} = \{x_1, x_2, \dots\}^T$ 中 x_i 为各物种的体积分数; \mathbf{I} 为单位列向量; \mathbf{H} 为二维矩阵, 其对角元素 H_{ii} 和非对角元素 H_{ij} 分别为

$$H_{ii} = \frac{x_i}{\mu_{ii}} + \sum_{j=1, j \neq i}^{N_{\text{spc}}} \frac{2x_j}{\mu_{ij}} \frac{m_i m_j}{(m_i + m_j)^2} \times \left(\frac{10\Omega_{ij}^{(1,1)}}{3\Omega_{ij}^{(2,2)}} + \frac{m_j}{m_i} \right),$$

$$H_{ij} = -\frac{2x_j}{\mu_{ij}} \frac{m_i m_j}{(m_i + m_j)^2} \left(\frac{10\Omega_{ij}^{(1,1)}}{3\Omega_{ij}^{(2,2)}} - 1 \right), \quad (31)$$

式中, μ_{ij} 为二元黏性系数, 其计算式为

$$\mu_{ij} = \frac{5k_B T}{8\Omega_{ij}^{(2,2)}}. \quad (32)$$

不同压强下 Xe 等离子体黏滞系数随温度变化曲线如图 5(b) 所示.

3.6 热导率

热导率由几部分共同组成, 即

$$k_T \approx k_{T,\text{hp}} + k_{T,\text{e}}, \quad (33)$$

其中, $k_{T,\text{hp}}$ 为重粒子贡献的热导率, $k_{T,\text{e}}$ 为电子贡献的热导率. 重粒子贡献 $k_{T,\text{hp}}$ 表达式为

$$k_{T,\text{hp}} = -4\mathbf{x}^T \mathbf{L}^{-1} \mathbf{I}, \quad (34)$$

其中, \mathbf{x}^T 与 (30) 式中定义相同, \mathbf{I} 为单位列向量. 矩阵 \mathbf{L} 的对角元素 L_{ii} 和非对角元素 L_{ij} 分别为

$$L_{ii} = -\frac{4x_i^2}{k_{ii}} - \sum_{k=1, k \neq i}^{N_{\text{hea}}} \frac{x_i x_k}{2k_{ik}} \times \frac{30m_i^2 + 25m_k^2 - 12m_k^2 B_{ik} + 16m_i m_k A_{ik}}{A_{ik} (m_i + m_k)^2},$$

$$L_{ij} = \frac{2x_i x_j}{k_{ij}} \frac{m_i m_j}{(m_i + m_j)^2} \frac{55}{4} - \frac{3B_{ij} - 4A_{ij}}{A_{ij}}, \quad (35)$$

$i \neq j,$

其中, N_{hea} 为重粒子的种类数, 二元热导率 k_{ij} 可表示为

$$k_{ij} = \frac{75}{64} \frac{k_B^2 T}{m_{ij} \Omega_{ij}^{(2,2)}}, \quad (36)$$

不同类型碰撞积分的比例 A_{ij} 和 B_{ij} 定义为

$$A_{ij} = \frac{\Omega_{ij}^{(2,2)}}{2\Omega_{ij}^{(1,1)}}, \quad B_{ij} = \frac{5\Omega_{ij}^{(1,2)} - \Omega_{ij}^{(1,3)}}{3\Omega_{ij}^{(1,1)}}. \quad (37)$$

Devoto [55] 给出了电子贡献 $k_{T,\text{e}}$ 的三阶计算公式:

$$k_{T,\text{e}} = \frac{75n_e^2 k_B}{8} \sqrt{\frac{2\pi k_B T}{m_e}} \frac{1}{q^{11} - (q^{12})^2 / q^{22}}, \quad (38)$$

其中, q^{xy} 与平均截面 $\bar{Q}_{ij}^{(l,s)} = \pi \sigma_{ij}^2 \Omega_{ij}^{(l,s)*}$ 有关, 计算方法如下 [55]:

$$q^{00} = 8 \sum_{i \neq e} n_e n_i \bar{Q}_{ei}^{(1,1)},$$

$$q^{01} = 8 \sum_{i \neq e} n_e n_i \left[\frac{5}{2} \bar{Q}_{ei}^{(1,1)} - 3 \bar{Q}_{ei}^{(1,2)} \right],$$

$$q^{11} = 8\sqrt{2} n_e^2 \bar{Q}_{ee}^{(2,2)} + 8 \sum_{i \neq e} n_e n_i \left[\frac{25}{4} \bar{Q}_{ei}^{(1,1)} - 15 \bar{Q}_{ei}^{(1,2)} + 12 \bar{Q}_{ei}^{(1,3)} \right],$$

$$q^{12} = 8\sqrt{2} n_e^2 \left[\frac{7}{4} \bar{Q}_{ee}^{(2,2)} - 2 \bar{Q}_{ei}^{(2,3)} \right] + 8 \sum_i n_e n_i \left[\frac{175}{16} \bar{Q}_{ei}^{(1,1)} - \frac{315}{8} \bar{Q}_{ei}^{(1,2)} + 57 \bar{Q}_{ei}^{(1,3)} - 30 \bar{Q}_{ei}^{(1,4)} \right],$$

$$q^{22} = 8\sqrt{2} n_e^2 \left[\frac{77}{16} \bar{Q}_{ee}^{(2,2)} - 7 \bar{Q}_{ei}^{(2,3)} + 5 \bar{Q}_{ei}^{(2,4)} \right] + 8 \sum_i n_e n_i \left[\frac{1225}{64} \bar{Q}_{ei}^{(1,1)} - \frac{735}{8} \bar{Q}_{ei}^{(1,2)} + \frac{399}{2} \bar{Q}_{ei}^{(1,3)} - 210 \bar{Q}_{ei}^{(1,4)} + 90 \bar{Q}_{ei}^{(1,5)} \right]. \quad (39)$$

不同压强下 Xe 等离子体热导率随温度变化曲线如图 5(c) 所示.

3.7 辐射功率

如图 2 所示, 辐射损失包含了 ff, fb 和 bb 过程. 其中 ff 和 fb 过程产生连续谱, bb 过程产生线

状谱. 不同辐射机制引起的辐射损失功率密度 $P_{\text{rad}}^{\text{ff}}$, $P_{\text{rad}}^{\text{fb}}$ 和 $P_{\text{rad}}^{\text{bb}}$ 求和, 得到辐射损失功率密度 P_{rad} .

3.7.1 ff 辐射

单位体积单位频率的 ff 辐射损失系数 j_{ν}^{ff} 为^[56]

$$j_{\nu}^{\text{ff}} = \frac{32\sqrt{\pi}}{3\sqrt{3}} (\alpha a_0)^3 R_y^{3/2} (k_B T)^{-1/2} \times n_e^2 Z_{\text{eff}}^2 \exp\left(-\frac{h\nu}{k_B T}\right), \quad (40)$$

式中 α 为精细结构常数, a_0 为 Bohr 半径, R_y 为 Rydberg 常量, Z_{eff} 为有效净电荷数. α , a_0 和 R_y 计算式 (均为国际单位制) 为

$$\alpha = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 \hbar c}, \quad (41)$$

$$a_0 = \frac{4\pi\epsilon_0 \hbar^2}{e^2 m_e}, \quad (42)$$

$$R_y = \frac{m_e e^4}{8\epsilon_0^2 \hbar^3 c}. \quad (43)$$

有效净电荷数 Z_{eff} 定义式为^[57]

$$Z_{\text{eff}} = \frac{\sum_{i=1}^{N_{\text{hp}}} n_i Z_i^2}{\sum_{i=1}^{N_{\text{hp}}} n_i Z_i} = \frac{\sum_{i=1}^{N_{\text{hp}}} n_i Z_i^2}{n_e}, \quad (44)$$

其中, Z_i 为第 i 种离子的净电荷数, N_{hp} 为重粒子种类数.

对 ff 辐射损失系数 j_{ν}^{ff} 在频域上和立体角积分, 则得到 ff 辐射损失功率密度:

$$P_{\text{rad}}^{\text{ff}} = 4\pi \int j_{\nu}^{\text{ff}} d\nu. \quad (45)$$

由空间上的各向同性, 立体角积分即为系数 4π .

3.7.2 fb 辐射

由 Kirchhoff 定律, LTE 状态下等离子体的辐射与吸收相同, 且辐射系数 j_{ν} 与吸收系数 α_{ν} 之间存在如下关系:

$$j_{\nu} = \alpha_{\nu} B_{\nu}, \quad (46)$$

式中 B_{ν} 为黑体辐射系数,

$$B_{\nu} = \frac{2h\nu^3}{c^2} \frac{1}{\exp(h\nu/k_B T) - 1}. \quad (47)$$

对于 fb 辐射系数 j_{ν}^{fb} , 则有

$$j_{\nu}^{\text{fb}} = \alpha_{\nu}^{\text{bf}} B_{\nu}, \quad (48)$$

式中 α_{ν}^{bf} 为光电离吸收系数, 计算方法与 3.2.2 节中相同.

与 ff 辐射类似, fb 辐射系数 j_{ν}^{fb} 在频域上和立体角积分, 则得到 fb 辐射损失功率密度:

$$P_{\text{rad}}^{\text{fb}} = 4\pi \int j_{\nu}^{\text{fb}} d\nu. \quad (49)$$

3.7.3 bb 辐射

bb 辐射损失功率密度为

$$P_{\text{rad}}^{\text{bb}} = h \sum_{i=1}^{N_{\text{hp}}} \left(\sum_{\text{lines}} \nu_{i,21} A_{i,21} n_{i,2} \right), \quad (50)$$

式中 h 为普朗克常量, N_{hp} 为全部重粒子 (原子和离子) 种类数, lines 为粒子 i 的全部能级跃迁谱线, $\nu_{i,21}$ 为重粒子 i 从高能级 (2) 跃迁到低能级 (1) 过程中辐射出的光子频率, $A_{i,21}$ 为重粒子 i 从高能级到低能级的自发辐射的 Einstein 系数 (自发辐射几率), $n_{i,2}$ 为处于高能级的重粒子 i 数密度.

3.7.4 总辐射损失功率

综上, 总辐射损失功率为

$$P_{\text{rad}} = P_{\text{rad}}^{\text{ff}} + P_{\text{rad}}^{\text{fb}} + P_{\text{rad}}^{\text{bb}}. \quad (51)$$

不同压强下 Xe 等离子体辐射功率随温度变化曲线如图 5(d) 所示.

4 结果与分析

4.1 计算域与边界条件设置

本文研究基于连续 CO₂ 激光器 (中心波长 $\lambda_0 = 10.6 \mu\text{m}$) 与 Xe 等离子体的相互作用, 在柱坐标系下建立模型, 以激光入射等离子体方向为 z 轴, 与其垂直方向为 r 轴. 根据 LSP 的形态特性, θ 方向各物理量近似均匀分布, 因此可建立二维圆柱轴对称模型, 并采用 COMSOL Multiphysics[®] 软件^[58] 进行建模计算. 如图 6 所示, 设定圆柱形区域长度为 200 mm (z 轴坐标范围为 -100 — 100 mm), 直径为 70 mm (r 轴坐标范围为 0 — 35 mm), 激光从左侧入射, 在中心处聚焦. 根据几何光学假设对光束半径的定义, 确定了流体区域与激光区域的分界. 计算区域划分为矩形网格, 与激光传播方向平行, 并在激光焦点处适当加密, 网格的最小尺寸约为 $5 \mu\text{m}$, 总网格数约为 10^4 个. 采用变时间步长算法, 相对误差 (relative tolerance) 设置为 0.5%, 对应的时间步长约为 $0.1 \mu\text{s}$.

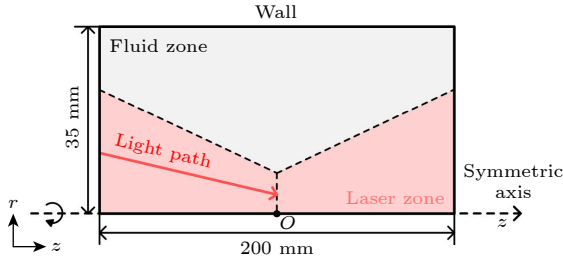


图 6 LSP 模拟计算域设置

Fig. 6. Setup of the LSP computational domain.

模型采用的控制方程及对应边界条件见表 3, 具体设置为: 计算区域的上边界设定为无滑移壁面, 即控制 $\mathbf{u} = 0$, 下边界为对称边界; 考虑流场的作用, 左侧入口设置为速度边界, 且仅在轴向上存在一固定速度, 径向速度为 0, 使得气流方向与激光传播方向一致; 右侧出口处为压强边界, 设置此处压强大小为常数; 传热场计算中, 在对称轴外的所有边界上设置恒定温度条件, 边界温度为 500 K. 为模拟起始时刻等离子体的产生, 设置演化的初始温度分布为中心位于激光焦点的二维高斯分布.

4.2 稳态状态下温度与速度分布

本文采用瞬态计算模型模拟 LSP 的时空发展过程. 当观察到核心位置及温度分布在几个 ms 内均不再发生明显变化时, 判定 LSP 的发展达到稳态, 一般从激光注入至稳态所需时间为 10—15 ms. 图 7 为稳态状态下 LSP 的等温线 (图 7(a)) 与速度流线 (图 7(b)). 图 7—图 10 结果的计算区域与 4.1 节中描述相同, 并根据高温核心的位置和尺寸进行了局部放大. 图 7 给出达到稳态后演化时间为 10 ms 时的结果, 计算条件为: 压强为 5 atm ($1 \text{ atm} = 1.013 \times 10^5 \text{ Pa}$), 激光入射方向平行的气体流速为 10 m/s, 入射高斯激光总功率为 500 W, F 数为 $f/7$. 从图 7(a) 中显示的温度分布可以看到, 等离子体核心处最高温度超过 15000 K, 稳定核心位于靠近光束焦点偏上游位置. LSP 高温区域形状整体呈现“水滴形”, 即靠近激光入口的头部

温度梯度更高, 而尾部温度梯度较低, 存在明显的拖尾现象.

图 7(b) 则对称展示了对应位置的速度流线图. 与初始的轴向流速相比, LSP 核心的头部前沿面处速度出现了径向分量. 这是由于等离子体头部快速吸收激光能量导致该区域产生热阻力, 形成热阻塞效应, 迫使部分原本流向等离子体的轴向气流改变方向, 从周围的冷区通过, 路径发生弯曲 [59].

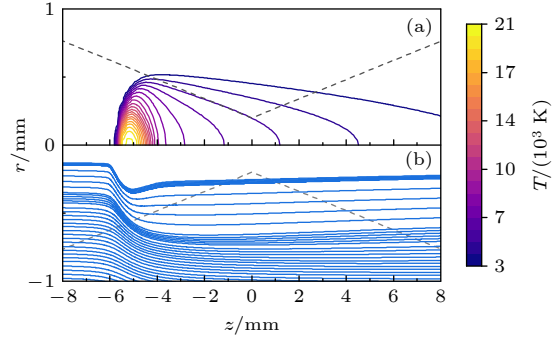


图 7 仿真得到典型的稳态 Xe-LSP 参数二维分布 (a) 等温线分布; (b) 速度流场分布

Fig. 7. Two-dimensional (2D) profiles of the steady-state Xe-LSP from the simulation results: (a) Temperature isotherm profile; (b) velocity streamline.

4.3 不同激光模式的影响

为探究不同激光模式对 LSP 特性的影响, 在模型中通过改变左侧边界处的激光功率分布函数设置了不同的入射激光模式, 如高斯激光模式 (TEM_{00}) 与环形激光模式 (TEM_{01*}). 高斯模式激光光强 I 的径向分布可表示为

$$I(r) = \frac{2P}{\pi w^2} \exp\left(-\frac{2r^2}{w^2}\right), \quad (52)$$

其中, P 是入射激光功率, w 是高斯光束的特征半径, $I(w)$ 是中心光强的 $1/e^2$ ($\approx 13.5\%$). 对于高斯光束, r 越大, $I(r)$ 越小. 本文用到的环形模式激光光强径向分布可表示为

$$I(r) = \frac{4Pr^2}{\pi w^4} \exp\left(-\frac{2r^2}{w^2}\right). \quad (53)$$

表 3 模型控制方程及对应边界条件

Table 3. Control equations and boundary conditions of the model.

控制方程	左边界(入口)	右边界(出口)	上边界
质量守恒方程: (1)式	$u_z = u_{in}, u_r = 0$	—	$\mathbf{u} = 0$
动量守恒方程: (2)式	$u_z = u_{in}, u_r = 0$	$p = p_0$	$\mathbf{u} = 0$
能量守恒方程: (3)式	$T = 500 \text{ K}$	$T = 500 \text{ K}$	$T = 500 \text{ K}$
激光输运方程: (9)式	由激光模式确定	—	—

对于环形模式, 随着 r 增大, I 先增大后减小, 在 $r = 0$ 处光强为 0, 在 $r = w/\sqrt{2}$ 处最强. 将 $r = 2w$ 处定义为激光半径 R_L . 在 $r \in (0, R_L)$ 范围内高斯和环形激光的功率分别为总功率的 99.98% 和 99.70%, 定义 $r \in (0, R_L)$ 范围为激光区.

对比图 8(a), (b) 中同等 500 W 功率下两种激光模式的 LSP 温度分布, 可以看到由环形激光产生的 LSP 高温核心径向尺寸更大、长宽比更小, 整体温度更高, 且高温核心区域更靠近光束焦点处, 这一差异在 Shi 等 [16] 的实验中也已经得到证实. 以上现象可以从能量分布与吸收的过程给出解释. 如图 8(a) 所示, 与环形模式相比, 高斯光束的激光强度分布更集中在中心对称轴上, 且相同功率下其强度幅值高于环形激光. 因此在注入等离子体过程中, z 轴附近的光线经过相同距离后剩余功率更高, 可以加热更多的下游气体, 进而形成的高温核心具

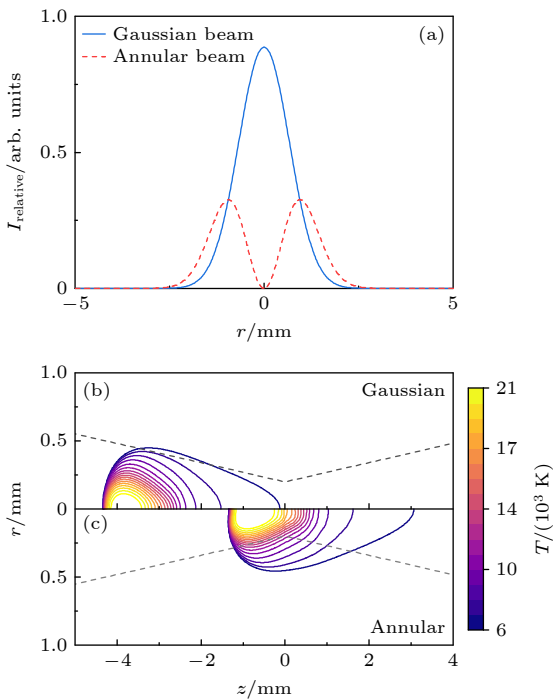


图 8 (a) 相同功率下高斯模式与环形模式激光相对强度径向分布; (b), (c) 激光模式对稳态 LSP 温度分布的影响, 分别为 $f/7$ 条件下高斯光束与环形光束结果. 模拟条件为 5 atm 的 Xe 环境下, 入射激光功率为 500 W, F 数为 $f/7$, 气体流速 10 m/s

Fig. 8. (a) Radial distribution of relative laser intensity of Gaussian beam and annular beam at a same laser power; (b), (c) effects of laser mode on steady LSP temperature distribution, where (b) and (c) are the results of Gaussian beam and annular beam at $f/7$, respectively. Background gas: Xe, pressure: 5 atm, laser power: 500 W, F -number: $f/7$, velocity: 10 m/s.

有更大的长宽比. 与此同时, 激光强度分布的形状与稳定状态下的核心形状具有相关性, 如环形激光强度极值出现在 $r = w/\sqrt{2}$ 的圆环上, 导致在此模式下产生的 LSP 高温核心位置发生了径向偏移, 不在对称轴上.

4.4 不同时刻的演化过程

为探究初始阶段在激光作用下等离子体的演化过程, 图 9 展示了达到稳态前不同时刻激光束焦点附近的温度分布变化. 激光注入起始时, 由于焦点 ($z = 0 \text{ mm}$) 处激光强度最大, 此处的初始等离子体具有最高温度, 因此会率先吸收较多的激光能量并在 $t = 0.03 \text{ ms}$ 时形成高温核心. $t = 0.03 - 1.0 \text{ ms}$ 时, 焦点处形成的高温核心逐渐沿着激光入射方向 (z 轴) 向上游移动. 约 $t = 1 \text{ ms}$ 后, 核心的位置和形态均达到相对稳定的状态, 头部位于焦点上游约 6 mm 处, 最高温度可达到约 23000 K, 说明激光能量得到了等离子体的有效吸收.

在之后的发展过程中 ($t = 1.0 - 10.0 \text{ ms}$), 由于轴向气体流速的存在 (本例中流速设置为 10 m/s), LSP 的尾部逐渐向后发展并不断延长, 使得 LSP 的整体长度和体积增加, 但靠近焦点前侧的头部高温核心体积及位置均已达到稳定, 说明此时已经形成了小体积、稳定的高温 LSP 核心.

4.5 不稳定性探究

在采用高功率环形激光、且流场速度较大的条件下, 容易观察到 LSP 尾部的不稳定性波动现象. 图 10 给出了不同条件下形成稳态 LSP 在不同时刻的温度分布, 其中图 10(a)–(c) 为环形光束下产生的 LSP 在 3, 4 和 5 ms 的形态. 可以观察到环形激光条件下的 LSP 形状不规则, 且随时间存在着形态上的变化. Kotov 等 [39] 将 LSP 实验中观察到的类似现象类比为层流振荡火焰在燃烧过程中会出现的 Kelvin-Helmholtz 不稳定性现象. 此类不稳定性通常发生在密度和速度不同的流体分界面上. 由于 LSP 内部温度远高于环境气体, 导致其密度远低于外部, 因此 LSP 与外部气体组成了一个具有密度差的“双流”系统. 当入射激光功率较高且外部流场速度较大时, 两流体在切向 (z 轴方向) 上存在明显速度差, 产生对流. 此时, 界面附近法向方向的微小扰动可引起温度在时间和空间分布上的 Kelvin-Helmholtz 波动.

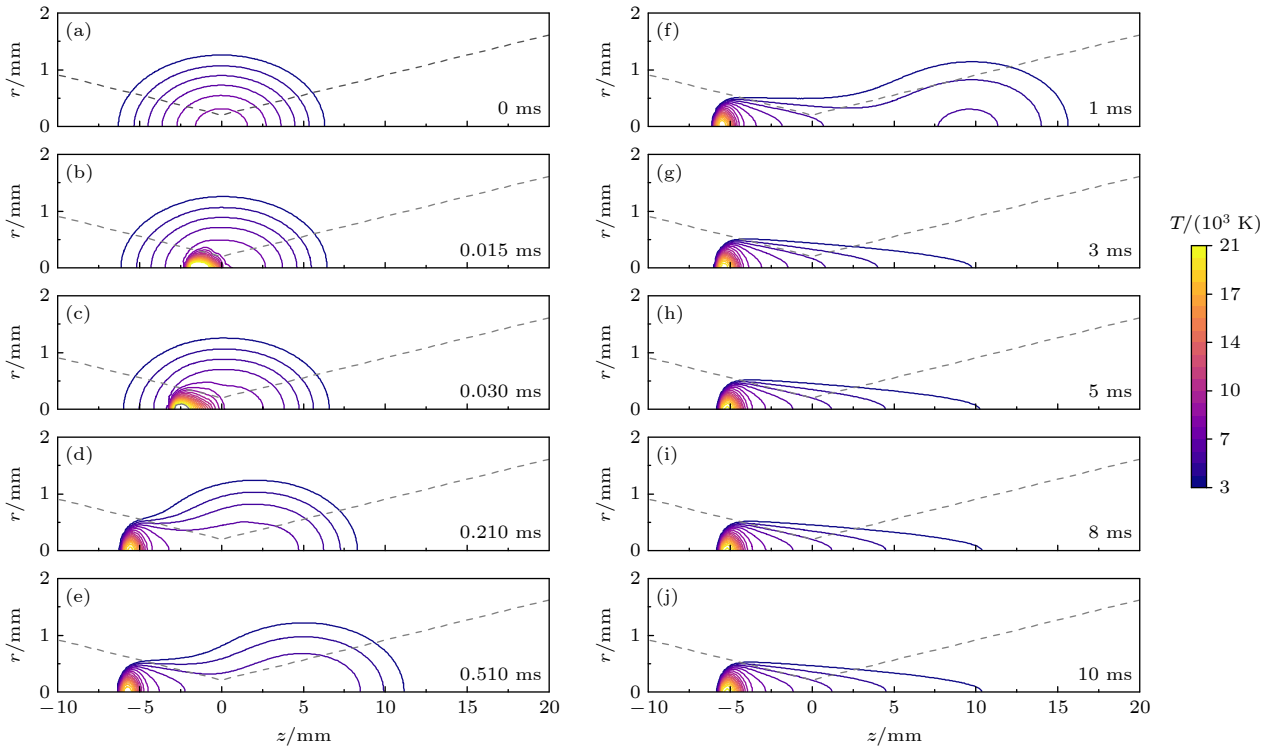


图 9 不同时刻 LSP 的温度分布图. 模拟条件为 5 atm 的 Xe 环境下, 入射激光功率为 500 W, F 数为 $f/7$, 气体流速为 10 m/s
 Fig. 9. Temperature distributions of LSP at different times during laser propagation. Background gas: Xe, pressure: 5 atm, laser power: 500 W, F -number: $f/7$, velocity: 10 m/s.

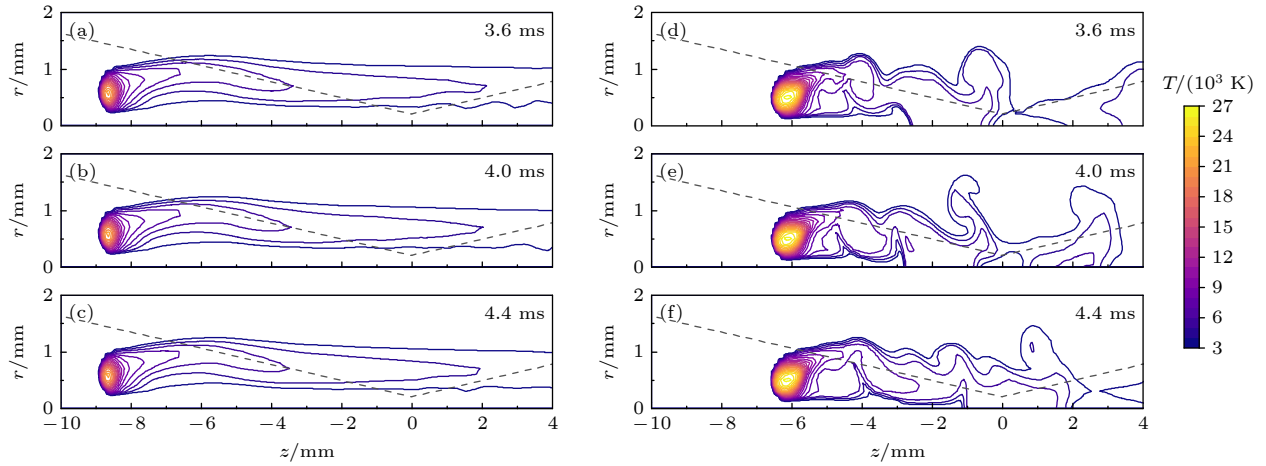


图 10 高功率、高气体流速下产生的不稳定 LSP. 图中结果的气体压强均为 10 atm, 采用环形激光, 功率为 5000 W, F 数为 $f/3.5$. 图 (a)—(c) 展示了入口流速设置为 10 m/s 产生的 LSP 在 3.6, 4.0 和 4.4 ms 的二维温度分布; 图 (d)—(f) 展示了入口流速设置为 20 m/s 产生的 LSP 在 3.6, 4.0 和 4.4 ms 的二维温度分布

Fig. 10. Unstable LSP generated under the condition of high laser power and high gas velocity. The gas pressure for all the results is set to 10 atm. The laser power is 5000 W and F -number equals to $f/3.5$. Panels (a)–(c) show the two-dimensional temperature distribution of the LSP when inlet velocity is set to 10 m/s at 3.6, 4.0, and 4.4 ms. Panels (d)–(f) show the two-dimensional temperature distribution of the LSP when inlet velocity is set to 20 m/s at 3.6, 4.0, and 4.4 ms.

5 结 论

本文基于流体计算方法建立了激光维持等离子体多物理场耦合的含时模型, 应用该模型研究了

激光维持等离子体的稳态特性、能量注入机制、初始演化过程及流体不稳定性. 模拟结果表明, 入射激光的模式、功率、 F 数, 以及气体种类、压强、流速等参数条件会对 LSP 的稳态性质产生影响. 在相同功率和 F 数条件下, 高斯模式与环形模式激

光产生的 LSP 具有不同的形状和位置. 本文对 LSP 的形成过程进行了探究, 给出了激光注入至到达稳态过程中不同时刻的 LSP 温度分布. 由于激光功率密度在焦点处最高, 在激光注入起始时很容易在焦点处率先产生 LSP 高温核心, 在接下来的演化过程中, LSP 核心会沿着激光入射方向向上游移动, 最终稳定在能量吸收与耗散达到平衡的位置. 此外, 在高功率环形激光入射、且流速较大的条件下, 可以在模拟结果中观察到 LSP 的不稳定现象. 这一现象在实验中也已经被报道, 但具体的物理机制仍待进一步研究. 本文提出的 LSP 瞬态模型可与实验探究互为补充, 弥补实验因诊断难度大、参数调控范围小对 LSP 微观机制探究的不足. 后续工作将考虑等离子体对光线的折射作用以及等离子体对自身辐射能量的自吸收过程. 同时将基于改进模型继续深入研究 LSP 中产生的不稳定波动现象及临界条件, 给出相关物理机制的合理解释.

参考文献

- [1] Raizer Y P 1970 *J. Exp. Theor. Phys.* **31** 1148
- [2] Raizer Y P 1991 *Gas Discharge Physics* (Heidelberg: Springer) p415
- [3] Raizer Y P 1980 *Sov. Phys. Usp.* **23** 789
- [4] Kantrowitz A 1972 *Astronaut. Aeronaut.* **10** 74
- [5] Cremers D A, Archuleta F L, Martinez R J 1985 *Spectrochim. Acta, Part B* **40** 665
- [6] Chen X, Mazumder J 1989 *J. Appl. Phys.* **66** 5756
- [7] Bezel I, Delgado G, Derstine M, Gross K, Solarz R, Shchemelinin A, Shortt D 2015 *Conference on Lasers and Electro-Optics (CLEO)* San Jose, USA, May 10–15, 2015 pp1–2
- [8] Islam M, Ciaffoni L, Hancock G, Ritchie G A 2013 *Analyst* **138** 4741
- [9] Horne S, Smith D, Besen M, Partlow M, Stolyarov D, Zhu H, Holber W 2010 *Next-Generation Spectroscopic Technologies III* (SPIE) Orlando, USA, April 5–6, 2010 pp105–111
- [10] Bezel I, Zvedenuk L B, Stepanov A E, KRerikh V, Potapkin B V *US Patent* US11776804 B2[2023-10-03]
- [11] Bezel I, Zvedenuk L B, Stepanov A E, Torkaman A 2023 *US Patent* 2023/0053035 A1 [2023-02-16]
- [12] Generalov N A, Zimakov V P, Kozlov G I, Masyukov V A, Raizer Y P 1970 *Sov. J. Exp. Theor. Phys.* **11** 302
- [13] Wang H X, Chen X 2004 *J. Eng. Thermophys.* **25** S1 (in Chinese) [王海兴, 陈熙 2004 工程热物理学报 **25** S1]
- [14] Zheng Z Y, Lu X, Zhang J, Hao Z Q, Yuan X H, Wang Z H 2005 *Acta. Phys. Sin.* **54** 192 (in Chinese) [郑志远, 鲁欣, 张杰, 郝作强, 远晓辉, 王兆华 2005 物理学报 **54** 192]
- [15] Krier H, Mazumder J, Rockstroh T, Bender T, Glumb R 1986 *AIAA J.* **24** 1656
- [16] Shi Z, Yang S, Yu F, Yu X 2023 *Opt. Express* **31** 6132
- [17] Akarapu R, Nassar A R, Copley S M, Todd J A 2009 *J. Laser Appl.* **21** 169
- [18] Fowler M C, Smith D C 1975 *J. Appl. Phys.* **46** 138
- [19] Zimakov V P, Kuznetsov V A, Solovyov N G, Shemyakin A N, Shilov A O, Yakimov M Y 2016 *Plasma Phys. Rep.* **42** 68
- [20] Hu Y, Wang X, Zuo D 2022 *Vacuum* **203** 111229
- [21] Gerasimenko M V, Kozlov G I, Kuznetsov V A 1983 *Sov. J. Quantum Electron.* **13** 438
- [22] Welle R, Keefer D, Peters C 1987 *AIAA J.* **25** 1093
- [23] Jeng S M, Keefer D 1989 *J. Propul. Power* **5** 577
- [24] Liu J B, Zhang D H Y, Fu Y Y 2023 *New J. Phys.* **25** 122001
- [25] Jeng S M, Keefer D R 1987 *J. Propul. Power* **3** 255
- [26] Battah J H, Keefer D R 1974 *IEEE Trans. Plasma Sci.* **2** 122
- [27] Glumb R J, Krier H 1984 *J. Spacecr. Rockets* **21** 70
- [28] Molvik G A, Choi D, Merkle C L 1985 *AIAA J.* **23** 1053
- [29] Merkle C L, Molvik G A, Shaw E J H 1986 *J. Propul. Power* **2** 465
- [30] Jeng S M, Keefer D R, Welle R, Peters C E 1987 *AIAA J.* **25** 1224
- [31] Conrad R, Raizer Y P, Sarzhikov S T 1996 *AIAA J.* **34** 1584
- [32] Rafatov I R, Yedierler B, Kulumbaev E B 2009 *J. Phys. D: Appl. Phys.* **42** 055212
- [33] Keefer D R, Henriksen B B, Braerman W F 1975 *J. Appl. Phys.* **46** 1080
- [34] Generalov N A, Zakharov A M, Kosynkin V D, Yakimov M Y 1986 *Combust., Explos. Shock Waves* **22** 214
- [35] Rafatov I 2009 *Phys. Lett. A* **373** 3336
- [36] Zimakov V P, Kuznetsov V A, Solovyov N G, Shemyakin A N, Shilov A O, Yakimov M Y 2017 *J. Phys. Conf. Ser.* **815** 012003
- [37] Zimakov V P, Lavrentyev S, Solovyov N, Shemyakin A, Yakimov M A 2019 *Physical-Chemical Kinetics in Gas Dynamics* **19** 1
- [38] Lavrentyev S Y, Solovyov N G, Shemyakin A N, Yu Yakimov M 2019 *J. Phys. Conf. Ser.* **1394** 012012
- [39] Kotov M A, Lavrentyev S Y, Shemyakin A N, Solovyov N G, Yakimov M Y 2022 *Plasma Sources Sci. Technol.* **31** 124002
- [40] Wang H X, Sun S R, Chen S Q 2012 *Acta. Phys. Sin.* **61** 195203 (in Chinese) [王海兴, 孙素蓉, 陈士强 2012 物理学报 **61** 195203]
- [41] Chen Y Q 2014 *Acta. Phys. Sin.* **63** 205201 (in Chinese) [陈艳秋 2014 物理学报 **63** 205201]
- [42] Gordon S, McBride B J 1994 *Computer Program for Calculation of Complex Chemical Equilibrium Compositions and Applications. part 1: Analysis. Tech. Rep. 95 N20180*, NASA
- [43] Johnston T W, Dawson J M 1973 *Phys. Fluids* **16** 722
- [44] Gilleron F, Piron R 2015 *High Energy Density Phys.* **17** 219
- [45] Chapman S, Cowling T G 1995 *The Mathematical Theory of Non-Uniform Gases: An Account of the Kinetic Theory of Viscosity, Thermal Conduction, and Diffusion in Gases* (3rd Ed.) (Cambridge: Cambridge University Press) p167
- [46] Adibzadeh M, Theodosiou C E 2005 *At. Data Nucl. Data Tables* **91** 8
- [47] Amdur I, Mason E 1958 *Phys. Fluids* **1** 370
- [48] Miller J S, Pullins S H, Levandier D J, Chiu Y h, Dressler R A 2002 *J. Appl. Phys.* **91** 984
- [49] Mason E, Munn R, Smith F J 1967 *Phys. Fluids* **10** 1827
- [50] Tang K, Toennies J P 1984 *J. Chem. Phys.* **80** 3726
- [51] Tang K, Toennies J P 1986 *Z. Phys. D: At. Mol. Clusters* **1** 91
- [52] Monchick L 1959 *Phys. Fluids* **2** 695
- [53] Hirschfelder J, Curtiss C, Bird R, Mayer M 1954 *Molecular Theory of Gases and Liquids* (New York: Wiley) pp1126–1127
- [54] Devoto R S 1967 *Phys. Fluids* **10** 354
- [55] Devoto R S 1967 *Phys. Fluids* **10** 2105
- [56] Horn K P 1966 *Radiative Behavior of Shock Heated Argon Plasma Flows* (Stanford: Stanford University) p35

- [57] Du S G 1998 *Plasma Physics* (Beijing: Atomic Press) p162 (in Chinese) [杜世刚 1998 等离子体物理 (北京: 原子能出版社) 第 162 页]
- [58] COMSOL Multiphysics® v. 6.0. cn.comsol.com. COMSOL AB, Stockholm, Sweden.
- [59] Guo Z Y, Zhao W H 1986 *Arc and Thermal Plasma* (Beijing: Science Press) pp141–157 (in Chinese) [过增元, 赵文华 1986 电弧和热等离子体 (北京: 科学出版社) 第 141–157 页]

Multiphysics modeling and simulations of laser-sustained plasmas^{*}

Zhang Dong-He-Yu Liu Jin-Bao Fu Yang-Yang[†]

(*Department of Electrical Engineering, Tsinghua University, Beijing 100084, China*)

(Received 28 June 2023; revised manuscript received 7 November 2023)

Abstract

Laser-sustained plasma (LSP), which can be utilized for a novel radiation light source, has advantages such as high irradiance, broad spectral range, and stable emission, demonstrating significant applications in wafer inspection in the field of the semiconductor industry. This paper revisits the historical development of LSP research and introduces fundamental physical processes in LSP. The mathematical description equations for LSP and methods of calculating plasma parameters are provided, thereby a time-dependent two-dimensional fluid model is established by taking into consideration a laser-thermal-hydrodynamic coupling effect. The propagation of the laser in plasma is investigated based on the established model, and the fundamental processes in LSP, including the initial evolution process, laser energy deposition, steady-state characteristics, and instability, are explored. The effectiveness of the simulation model is confirmed through comparing with the experimental results of high-pressure Xe LSP. The findings indicate that the mode, power, F -number of incident lasers, as well as parameters including components, pressure, and flow velocity of gas, can all affect the steady-state properties of LSPs. Under the identical power and F -number conditions, Gaussian mode laser and annular mode laser both produce LSPs with different shapes and positions. Notably, under the conditions of high-power annular laser incidence, large laser F -number, and high flow velocity, the simulation results reveal temporal and spatial instability in LSP. These simulation results contribute significantly to a more in-depth understanding of the underlying physical mechanisms of the LSP. Furthermore, they provide a theoretical basis for designing the light source system and optimizing the multiple parameters. The influence of laser parameters on LSP properties elucidated in this study not only advances the fundamental understanding of LSP but also offers crucial insights for designing and optimizing the light source systems in various applications, particularly in the field of optical detection for semiconductor wafer inspection.

Keywords: laser-sustained plasma, fluid modeling, multiphysics modeling, radiation and transport

PACS: 52.38.Dx, 52.50.Jm, 52.65.-y, 51.20.+d

DOI: 10.7498/aps.73.20231056

^{*} Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 52277154).

[†] Corresponding author. E-mail: fuyangyang@tsinghua.edu.cn

激光维持等离子体多物理场耦合模型与仿真

张东荷雨 刘金宝 付洋洋

Multiphysics modeling and simulations of laser-sustained plasmas

Zhang Dong-He-Yu Liu Jin-Bao Fu Yang-Yang

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 73, 025201 (2024) DOI: 10.7498/aps.73.20231056

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7498/aps.73.20231056>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn>

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

磁液变形镜的镜面动力学建模和实验验证

Modeling and experimental verification of surface dynamics of magnetic fluid deformable mirror

物理学报. 2018, 67(3): 034702 <https://doi.org/10.7498/aps.67.20171281>

基于流体模型的碳纳米管电离式传感器的结构优化方法

Structure optimization of carbon nanotube ionization sensor based on fluid model

物理学报. 2021, 70(9): 090701 <https://doi.org/10.7498/aps.70.20201828>

一个快速模拟热稠密非平衡等离子体的碰撞辐射模型

A general model for rapid simulation of hot dense plasmas under non-local thermal equilibrium conditions

物理学报. 2021, 70(11): 115202 <https://doi.org/10.7498/aps.70.20201946>

非平衡感应耦合等离子体流场与电磁场作用机理的数值模拟

Numerical investigation on interaction mechanisms between flow field and electromagnetic field for nonequilibrium inductively coupled plasma

物理学报. 2019, 68(18): 185202 <https://doi.org/10.7498/aps.68.20190865>

高密度等离子体喷流高速对撞的二维辐射流体模拟研究

Two-dimensional radiation hydrodynamic simulations of high-speed head-on collisions between high-density plasma jets

物理学报. 2022, 71(22): 225202 <https://doi.org/10.7498/aps.71.20220948>

锐真空-等离子体边界倾角对激光尾波场加速中电子注入的影响

Effects of slant angle of sharp plasma-vacuum boundary on electron injection in laser wakefield acceleration

物理学报. 2020, 69(3): 035201 <https://doi.org/10.7498/aps.69.20191332>