

УДК 533.9

О СЕЧЕНИЯХ РЕЗОНАНСНОЙ ПЕРЕЗАРЯДКИ ИОНОВ Rb, Cs, Hg

С. А. Майоров

На основе экспериментальных данных о подвижности ионов и результатов моделирования столкновений ионов с атомами собственного газа в однородном электрическом поле рассчитаны сечения резонансной перезарядки ионов рубидия, цезия и ртути.

Целью настоящей работы являлось вычисление сечений резонансной перезарядки ионов *Rb, Cs, Hg* на атомах собственного газа с точностью, соответствующей точности измерения коэффициентов диффузии и подвижности ионов в слабых полях, т.е. $\sim 1\%$ (см. также [1]).

Ион поляризует атомы своим электрическим полем и взаимодействует с индуцированными диполями. Потенциальная энергия этого взаимодействия для расстояний, больших диаметра атома и меньших характерного межатомного расстояния $N^{-1/3}$, равна $U(r_{12}) = -\frac{\alpha Ry a_0^4}{r_{12}^4}$, где r_{12} – расстояние между атомом и ионом, $\alpha = \alpha_0/a_0^3$, α_0 – поляризуемость атома, $a_0 = 0.529 \cdot 10^{-8}$ см – радиус Бора, $Ry = 13.6$ эВ – постоянная Ридберга, N – числовая плотность атомов.

Скорость дрейфа в пределе слабого поля в чисто поляризационном потенциале, вычисленная с учетом поправок рассеивания на малые углы, равна [2, 3]:

$$v_d = \frac{51 N_0}{(\alpha m)^{1/2}} \frac{E}{N} \text{ см/с}, \quad (1)$$

где N_0 , m , E – числовая плотность атомов газа при нормальных условиях, масса атомов в а.е.м. и напряженность электрического поля в единицах В/см. Формула (1) может быть использована для определения скорости дрейфа ионов в другом газе при замене в ней атомной массы на удвоенную приведенную массу.

Модель абсолютно жестких, упругих сфер является хорошим приближением для описания взаимодействия ионов и атомов на близких расстояниях при небольших энергиях

столкновения. Газокинетическое сечение в модели столкновений упругих сфер равно: $\sigma_{gas} = \pi d_{gas}^2$, эффективный диаметр атомов d_{gas} может быть определен из данных о вязкости газов.

При столкновении иона с нейтральной частицей (атомом или молекулой) существует вероятность перехода электрона от нейтральной частицы к иону. Вероятность этого процесса довольно мала в случае различающихся частиц, тогда говорят о сечении передачи заряда. В случае, если ион перезарядается на атоме собственного газа, изменения внутренней энергии сталкивающихся частиц не происходит. Такой процесс называется резонансной перезарядкой. Сечение резонансной перезарядки довольно велико, при тепловых энергиях сталкивающихся частиц оно в несколько раз превышает газокинетическое сечение.

Вероятность перехода электрона от атома к иону экспоненциально резко падает с увеличением расстояния между частицами. Если ион с атомом сближается так близко, что электронные орбиты атома и иона сильно перекрываются, то в этом случае электрон за время столкновения совершит много переходов от атома к иону. После столкновения электрон с равной вероятностью $1/2$ останется у одной из сталкивающихся частиц. Сечение резонансной перезарядки в атомных единицах имеет функциональный вид [4, 5]:

$$\sigma_{res}(v) = \frac{\pi}{2\gamma^2} \ln^2 \frac{v_0}{v}, \quad (2)$$

где параметр γ характеризует скорость экспоненциального спада волновой функции электрона за пределами атома, параметр v_0 слабо зависит от скорости.

Можно определить эффективный радиус реакции передачи заряда $R_{ct}(v_{min})$, который должен определяться функциональной зависимостью (2) для скорости в точке наибольшего сближения. Будем полагать, что вероятность передачи заряда пренебрежимо мала после пролета с расстоянием наибольшего сближения $r_{min} > R_{ct}$ и равна $1/2$ при $r_{min} < R_{ct}$. Сечение перезарядки в этом приближении определяется соотношением:

$$\sigma_{res} = \frac{1}{2} \pi \rho^2(R_{ct}), \quad (3)$$

где прицельный параметр $\rho(R_{ct})$ соответствует сближению на расстояние R_{ct} .

При энергиях столкновения $\epsilon_{12} = mv_{12}^2/2 \gg \epsilon_d$, где $\epsilon_d = \frac{\alpha R_y a_0^4}{d^4}$ – энергия поляризационного взаимодействия на расстоянии атомного диаметра, можно пренебречь отличием траекторий от прямолинейных. Для прямолинейных траекторий расстояние наибольшего сближения равно прицельному параметру. Пренебрегая также изменением скорости, имеем в этом приближении соотношение: $\sigma_{res} = \frac{1}{2} \pi R_{ct}^2$. Сечение перезарядки

в приближении прямолинейных траекторий слабо зависит от скорости и может быть приближено параболической функцией в логарифмическом масштабе:

$$\sigma_{res}(\varepsilon_{12}) = \sigma_{res}(\varepsilon_1)[1 + a \ln(\varepsilon_1/\varepsilon_{12})]^2, \quad (4)$$

где ε_1 , a , $\sigma_{res}(\varepsilon_1)$ – положительные аппроксимационные константы.

Приведенный в работе [1] алгоритм позволяет получать скорость дрейфа ионов при учете поляризационного взаимодействия, отталкивания частиц на близких расстояниях в модели жестких сфер и заданном сечении перезарядки, которое определяет радиус реакции передачи заряда.

Т а б л и ц а

Свойства ионов и атомов рубидия, цезия и ртути, газокинетические параметры и коэффициенты аппроксимации сечений резонансной перезарядки.

D_0 – коэффициент диффузии ионов в собственном газе в единицах $\text{см}^2/\text{с}$ [6] при температуре T_0 , α – безразмерная поляризуемость атома, нормированная на куб радиуса Бора, σ_{gas} – газокинетическое сечение, $\sigma_{res}(\varepsilon_1)$, $\sigma_{res}(\varepsilon_2)$ – сечения резонансной перезарядки ионов на собственном атоме, сечения выражены в единицах 10^{-16} см^2 , ε – кинетическая энергия иона при неподвижном атоме, $\varepsilon_1, \varepsilon_2 = 1, 10000 \text{ эВ}$

Система	$D_0(T_0)$	T_0, K	α	σ_{gas}	$\sigma_{res}(\varepsilon_1)$	$\sigma_{res}(\varepsilon_2)$	a
$Rb^+ - Rb$	0.0097	621	315	77.3	247	150	0.024
$Cs^+ - Cs$	0.0065	628	390	90.2	295	174	0.025
$Hg^+ - Hg$	0.066	350	34.5	32.1	164	45	0.052

Полученная в настоящей работе аппроксимация $\sigma_{res}(\varepsilon_{12})$ основывается на выборе физически обоснованной функциональной зависимости сечения резонансной перезарядки от энергии (2), для которой необходимы две подгоночные константы – $\sigma_{res}(\varepsilon_1)$, a . Для их определения можно использовать два каких-либо известных значения сечения резонансной перезарядки. В качестве одного из них использовалось значение $\sigma_{res}(\varepsilon_2)$ при $\varepsilon_2 = 10000 \text{ эВ}$ [6], так как точность данных по сечениям при больших энергиях высока. Второе значение сечения резонансной перезарядки подобрано из условия, чтобы алгоритм воспроизводил известные с высокой точностью в случае низких полей коэффициенты подвижности и диффузии.

Параметры, входящие в модель столкновения, а также результаты подгонки аппроксимационных зависимостей сечений перезарядки для ионов Rb , Cs , Hg приведены

в таблице. Поляризуемость атомов *Rb*, *Cs*, *Hg*, также приведенная в таблице, определялась по коэффициентам диффузии различных ионов в этих газах [6] с помощью соотношения (1), в котором атомная масса заменена удвоенной приведенной массой.

Итак, исходя из наиболее надежных данных (сечения резонансной перезарядки при больших энергиях и коэффициенты диффузии и подвижности ионов в собственных газах при слабых полях), получены зависимости сечений резонансной перезарядки ионов *Rb*, *Cs*, *Hg*. Их точность в области низких энергий составляет $\sim 1\%$, что значительно лучше обычной для тепловых энергий точности $\sim (10 - 50)\%$.

Автор благодарит Российский фонд фундаментальных исследований (проекты 05-02-16796-а, 06-02-17520-а, 06-08-01554-а) и Нидерландское научное общество NWO за финансовую поддержку работы.

ЛИТЕРАТУРА

- [1] Майоров С. А. Краткие сообщения по физике ФИАН, (2006); Физика плазмы, **33**, (2007) (в печати).
- [2] Мак-Даниэль И. Процессы столкновений в ионизованных газах. М., Мир, 1967.
- [3] Мак-Даниэль И., Мэсон Э. Подвижность и диффузия ионов в газах. М., Мир, 1976.
- [4] Галицкий В. М., Никитин Е. Е., Смирнов Б. М. Теория столкновений атомных частиц. М., Наука, 1981.
- [5] Никитин Е. Е., Смирнов Б. М. Атомно-молекулярные процессы в задачах с решениями. М., Наука, 1988; Медленные атомные столкновения. М., Энергоатомиздат, 1990.
- [6] Физические величины: справочник. Под ред. И.С. Григорьева, Е.З. Мейлихова. М., Энергоатомиздат, 1990.

Институт общей физики
им. А.М. Прохорова РАН

Поступила в редакцию 9 ноября 2006 г.