Краткие сообщения по физике № 8 1982

ВЛИЯНИЕ ДЕБАЕВСКОГО ЭКРАНИРОВАНИЯ НА СКОРОСТЬ ИОН-ИОННОЙ РЕКОМБИНАЦИИ

И. С. Лакоба, Ю. И. Сыцько, Е. Д. Якубцева

УДК 535.37

Известный метод вычисления коэффициента рекомбинации ионов противоположного знака в присутствии нейтральной частицы обобщен на случай, когда существенно плазменное экранирование их электростатического взаимодействия. Приведены результаты расчетов.

В нашей работе /I/ реализован (в виде действующей программы для ЭВМ) алгоритм расчета коэффициентов α трехчастичной ион-ионной рекомбинации по Натансону – Бейтсу – Фланнери – Янгу. Как отмечено в /I/, условием его применимости является

$$\max\{\lambda_i\} \ll r_D, \quad i = 1, 2, \tag{I}$$

где λ_i – длины свободных пробегов катиона ($i = 1$) и аниона ($i = 2$) относительно столкновений с нейтральными частицами, r_D – дебаевский радиус. Предлагаемая ниже модификация метода вычисления α, основанная на учете плазменного экранирования зарядов, позволяет освободиться от ограничения (I). Область применимости усовершенствованного алгоритма определяется значениями плотности заряженных частиц, при которых потенциал иона описывается в рамках первого приближения теории Дебая – Хюккеля.

Как и в /I/,

$$\alpha^{-1} = \alpha_T^{-1} + \alpha_L^{-1}, \tag{2}$$

где томсоновский α_T и ланжевеновский α_L термы аппроксимируют коэффициент рекомбинации при низкой и высокой газовой плотности соответственно. В выражении для α_T

$$\alpha_T \approx \pi\left[r_1^2 w(x_1)C_1E_1 + r_2^2 w(x_2)C_2E_2 - r_S^2 w(y_1)w(y_2)S\right]\left(\frac{8T}{\pi\mu_{12}}\right)^{1/2} \quad (3)$$

меняется, по сравнению с /I/, аналитический вид параметров r_i, x_i, y_i, E_i. Вместо характеристических расстояний λ_i, на которых считалась утраченной корреляция во взаимном движении реагирующих ионов, в новом варианте вводятся

$$\rho_i = (\lambda_i^{-1} + r_D^{-1})^{-1}. \quad (4)$$

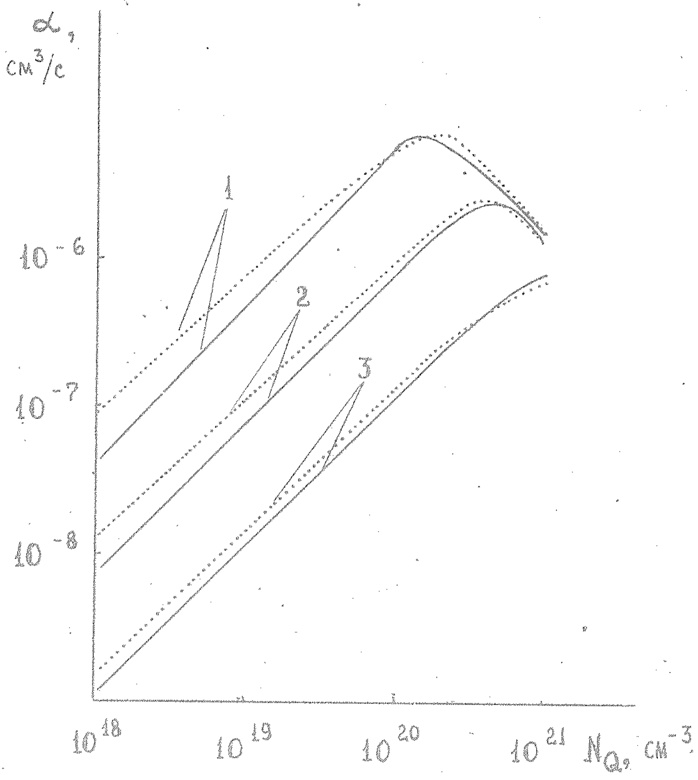
При этом радиусы r_i захвата противоионном иона сорта i определяются из решения трансцендентных уравнений

$$\frac{3}{2}\,\frac{T}{e^2\delta_i} = \left.\frac{\exp(-r/r_D)}{r}\right|_{r_i}^{r_i+\rho_i}. \quad (5)$$

Здесь e – элементарный заряд, множитель $\delta_i = F_i/(1 - F_i)$ характеризует изменение относительной кинетической энергии ионов после столкновения с третьей частицей, $F_i = \left[2M_1M_2M_3(M_1 + M_2 + M_3)/(M_1 + M_2)^2(M_3 + M_i)^2\right]$, M_i – массы ионов и нейтральной ($i = 3$) частицы, $\mu_{12} = M_1M_2/(M_1 + M_2)$, T – температура в энергетических единицах, единая для всех тяжелых частиц. Аргументами томсоновской функции вероятности $w(z)$ являются $x_i = r_i/\lambda_i$ и $y_i = r_S/\lambda_i$, $r_S = \min\{r_1, r_2\}$. Поправки E_i приобретают вид $E_i = \exp(3r_i/2\rho_i\delta_i)$, $S = \min\{C_1E_1, C_2E_2\}$, коэффициенты C_i сохраняют прежние (см. /I/) значения: $C_i = 1 + (3/2)\delta_i$. В пределе высокой плотности замена кулоновского потенциала дебаевским приводит к соотношению:

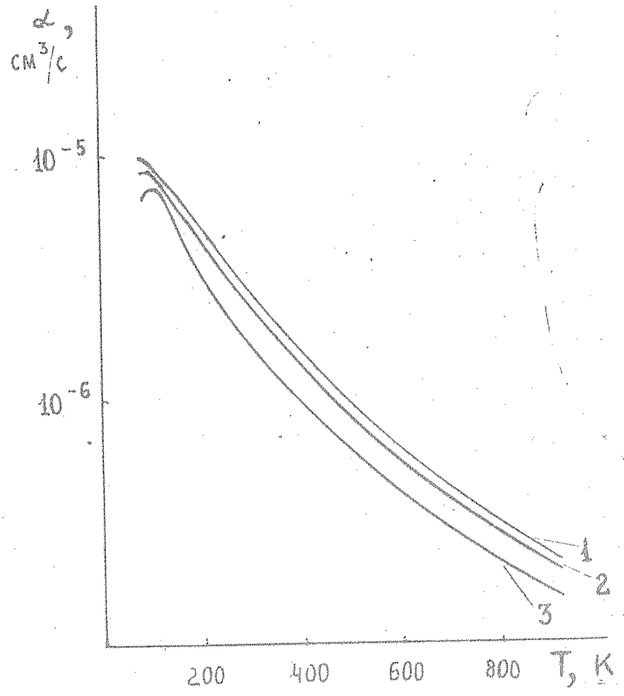
$$\alpha_L \approx 4\pi e^2\left[\frac{K_1}{1 - E_1^{-1}}\left(1 + \frac{r_1}{r_D}\right)\exp\left(-\frac{r_1}{r_D}\right) + \frac{K_2}{1 - E_2^{-1}}\left(1 + \frac{r_2}{r_D}\right)\exp\left(-\frac{r_2}{r_D}\right)\right], \quad (6)$$

где K_1 и K_2 – подвижности ионов.



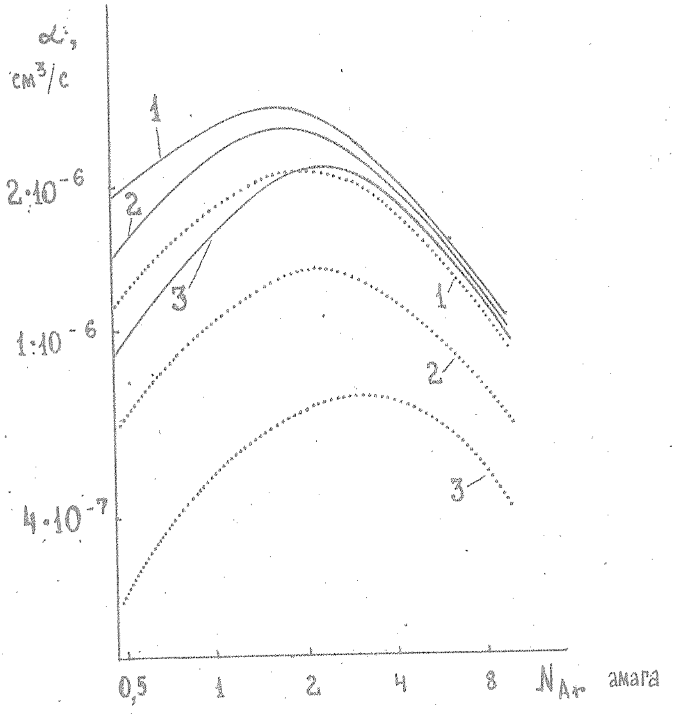
Р и с. I. Коэффициент рекомбинации в системе $Kr^+ + F^- + Q$, где Q – эффективный буферный газ со свойствами смеси 95% гелия и 5% криптона, как функция плотности N_Q без экранирования (....) и с экранированием (——) при T = I50 K (I), 300 K (2), 600 K (3). Плотности ионов $N_{Kr^+} = N_{F^-} = 3\cdot10^{14}$ см$^{-3}$

Рис. I и 2 на примере систем $Kr^+ + F^- + (95\%\ He + 5\%\ Kr)$ и $Xe^+ + F^- + Ne$ иллюстрируют различие результатов расчета коэффициентов рекомбинации с учетом и без учета коллективного взаимодействия зарядов. Как и ожидалось, наибольшее расхождение значений α, найденных указанными способами, достигается в области плотностей среды.



Р и с. 2. Температурная зависимость α при разной плотности ионов Xe^+ и F^-: 1 – N_{Xe^+}, $N_{F^-} \to 0$, 2 – $N_{Xe^+} = N_{F^-} = 10^{14}$ см$^{-3}$, 3 – $N_{Xe^+} = N_{F^-} = 10^{15}$ см$^{-3}$. Плотность неона N_{Ne} = 2 амага = $= 2 \cdot 2{,}68 \cdot 10^{19}$ см$^{-3}$

Прецедент учета дебаевского экранирования при вычислении α имеется в работе /2/. Расчетные формулы и процедуры, используемые в /2/ и в данной работе (следуя /I/), не идентичны. В алгоритме /2/ вероятность w образования связанной пары после столкновения одного из ионов с нейтральной частицей находится методом Монте-Карло, что, с одной стороны, могло бы дать более



Р и с. 3. Сравнение с результатами Моргана и др. для системы $Kr^+ + F^- + Ar$ при $T = 300$ K: .... – данные работы /2/, ——— – полученные нами значения; 1 – $N_{Kr^+}, N_{F^-} \to 0$, 2 – $N_{Kr^+} = N_{F^-} = 10^{14}$ см$^{-3}$, 3 – $N_{Kr^+} = N_{F^-} = 10^{15}$ см$^{-3}$

точные по сравнению с модельной функцией Томсона значения этой величины, но, с другой, требует больших затрат счетного времени. Кроме того, в расчетах /2/ присутствуют два фактически свободных параметра – эффективный радиус захвата и критическая энергия связывания ионной пары, конкретные значения которым присваиваются без обоснованья. На рис. 3 сопоставлены зависимости от плотности буферного газа, рассчитанные с помощью алгоритма /2/ и изложенного здесь алгоритма. Выяснение вопроса о степени адекватности конкурирующих алгоритмов упирается в отсутствие достоверных экспериментальных данных по обсуждаемому процессу. В такой ситуации неэкономный способ /2/ представляется менее пригодным для практического применения, например, в задачах математического моделирования плазмохимической кинетики.

Поступила в редакцию
26 апреля 1982 г.

Литература

1. И. С. Лакоба, Е. Д. Сучкова, Ю. И. Сыцько, Препринт ФИАН № 8, М., 1981 г.
2. W. L. Morgan, B. L. Whitten, J. N. Bardsley, Phys. Rev. Lett., 45, 2021 (1980).