

УДК 533.9

О ПОДВИЖНОСТИ ИОНОВ БЛАГОРОДНЫХ ГАЗОВ В ГАЗЕ СОБСТВЕННЫХ АТОМОВ

С. А. Майоров

Построена модель столкновений ионов с атомами газа, учитывающая резонансную перезарядку ионов, поляризационное взаимодействие и упругое (газокинетическое) взаимодействие. На основе экспериментальных данных о подвижности ионов и результатов моделирования столкновений ионов с атомами собственного газа в однородном электрическом поле, подобраны аппроксимации сечений резонансной перезарядки ионов для благородных газов, которые применимы для описания дрейфа ионов при любых полях. Построена модель подвижности молекулярных ионов в газе, позволяющая получать характеристики разряда при умеренных полях и низких температурах.

При расчетах характеристик ионного потока в нейтральном газе часто полагается, что атомы газа неподвижны. Это предположение разумно при высоких полях и низких температурах газа. Но при низких полях и высокой плотности газа скорость дрейфа ионов может быть сравнима с тепловой скоростью атомов. В этом случае необходим более точный учет кинетики ион-атомных столкновений.

Настоящая работа вызвана удручающим разнообразием $\sim (10 - 50)\%$ имеющихся в литературе данных о сечениях перезарядки ионов на атомах собственного газа при низкой энергии столкновений. Целью работы является аппроксимация сечений перезарядки с точностью, соответствующей точности измерения коэффициентов диффузии и подвижности ионов в слабых полях, т.е. $\sim 1\%$. Ограничимся рассмотрением данных для благородных газов, поскольку общей задачей работы является создание эффективного

алгоритма моделирования ион-атомных столкновений, которые определяют характеристики пылевых образований в плазме газового разряда [1 – 3].

Однородное внешнее электрическое поле E вызывает дрейф ионов в газе со скоростью, пропорциональной напряженности поля:

$$v_d = \mu E, \quad (1)$$

где коэффициент подвижности ионов $\mu(E, N, T)$ зависит как от напряженности поля, так и от параметров газа (температуры T , давления $p = NT$, состава). Определению коэффициентов диффузии и подвижности ионов в газах посвящено большое число экспериментальных и теоретических работ (обзоры [4 – 6]) и можно полагать, что, по крайней мере в области слабых и умеренно сильных полей ($E/N < 1000 Td$), подвижность ионов известна с весьма высокой точностью $< 1\%$.

В приближении слабого поля коэффициент подвижности ионов не зависит от напряженности поля, так как распределение ионов по скоростям близко к равновесному и частота столкновений ионов не зависит от напряженности поля. В этом случае скорость дрейфа пропорциональна величине поля $v_d \sim E$ и определяется масштабом сечений ион-атомных столкновений при энергиях порядка тепловой: 0.01 – 0.1 эВ. Скорость дрейфа ионов в сильном поле $v_d \sim E^{1/2}$, она превышает тепловую скорость атомов и определяется масштабом сечений при энергиях столкновений значительно выше тепловой.

Экспериментальные данные по измерению коэффициентов подвижности и диффузии дают возможность определения сечений столкновений и потенциала взаимодействия. Например, независимость коэффициента подвижности при слабых полях от напряженности поля и температуры газа возможна в случае, когда частота столкновений не зависит от энергии столкновения, соответственно, сечение зависит от относительной скорости сталкивающихся частиц v_{12} по закону $\sigma_{st} \propto 1/v_{12}$, а сила взаимодействия частиц обратно пропорциональна пятой степени расстояния между ними. Такой случай был впервые рассмотрен еще Максвеллом безотносительно к ион-атомному взаимодействию, поскольку интеграл столкновений Больцмана значительно упрощается только для таких сечений (случай максвелловских молекул).

Модели ион-атомного взаимодействия и сечения столкновений. Определим энергию столкновения $\varepsilon_r = mv_{12}^2/4 = \varepsilon_{12}/2$, равную полной кинетической энергии сталкивающихся частиц в системе центра масс, и эффективный диаметр столкновения d , связанный с диффузионным сечением соотношением $\sigma_d = \pi d^2$.

Ион поляризует атомы своим электрическим полем и взаимодействует с индуцированными диполями. Потенциальная энергия этого поляризационного взаимодействия для расстояний, больших диаметра атома и меньших среднего межатомного расстояния $N^{-1/3}$, равна:

$$U(r_{12}) = -\frac{\alpha Ry a_0^4}{r_{12}^4}, \quad (2)$$

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. Сечение поляризационных столкновений $\sigma_{pol} \sim 1/v_{12}$ и для определения подвижности иона в случае преобладания поляризационных столкновений пригодна модель постоянной (не зависящей от скорости) частоты столкновений иона.

Впервые зависимость сечения столкновения в виде $\sigma(v_{12}) \sim (C/\varepsilon_{12})^{2/n}$ для рассеивания в потенциале вида $U(r_{12}) = \pm C/r_{12}^n$ получил лорд Рэлей из соображений размерности [7], а теория рассеивания при $n = 4$ построена Ланжевенем [8]. В работе [9] с высокой точностью вычислена скорость дрейфа в пределе слабого поля в чисто поляризационном потенциале (2) с учетом рассеивания на малые углы:

$$v_d = \frac{51N_0}{(\alpha m)^{1/2}} \frac{E}{N} \text{ см/с}, \quad (3)$$

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.

Задача столкновения двух жестких сфер с разными диаметрами d_1 и d_2 , массами m_1 и m_2 может быть сведена к задаче рассеивания одной частицы на неподвижном центре.

На близких расстояниях, сравнимых с диаметром атома, ион отталкивается от атома. Короткодействующую отталкивательную часть потенциала взаимодействия при энергиях столкновения $\varepsilon_r < Ry$ можно аппроксимировать зависимостью

$$U(r_{12}) = U_0 \exp(-r_{12}/a_d), \quad (4)$$

где U_0 , a_d – положительные константы [5]. В этом случае диффузионное сечение равно:

$$\sigma_d = \pi d^2 = \pi a_d^2 \ln^2(U_0/\varepsilon_r). \quad (5)$$

Это сечение слабо зависит от энергии столкновения, поэтому при сближении иона с атомом до расстояния порядка атомного размера, можно использовать модель твердых

сфер с диаметром d_{gas} . Газокинетическое сечение в модели столкновений упругих сфер равно:

$$\sigma_{gas} = \pi d_{gas}^2, \quad (6)$$

эффективный диаметр атомов d_{gas} может быть определен из данных о вязкости газов [10].

При больших энергиях $\varepsilon_r \gg Ry$ и малых прицельных параметрах ион с атомом могут сближаться до расстояний, меньших диаметра атома. В этом случае ион с атомом взаимодействуют как экранированные кулоновские частицы с зарядом ядер Ze . Это взаимодействие с хорошим приближением описывается потенциалом Юкавы:

$$U(r_{12}) = \frac{Z^2 e^2}{r_{12}} \exp(-r_{12}/a_d). \quad (7)$$

Передача заряда при ион-атомном столкновении. При столкновении иона с атомом собственного газа существует вероятность перехода электрона от атома к иону без изменения внутренней энергии сталкивающихся частиц. Такой процесс называется резонансной перезарядкой и обычно относится к неупругим столкновениям, так как он имеет квантово-механическую природу [11, 12]. Рассмотрим более подробно модель этого процесса.

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 [11, 12]:

$$\sigma_{res}(v) = \frac{\pi}{2\gamma^2} \ln^2 \frac{v_0}{v}, \quad (8)$$

где параметр γ характеризует скорость экспоненциального спада волновой функции электрона за пределами атома, параметр v_0 слабо зависит от скорости. При скоростях, больших или сравнимых со скоростью электрона на орбите, учет этого фактора приводит к замене в равенстве (8) параметра γ на величину $(\gamma^2 + v^2/4)^{1/2}$.

Можно определить эффективный радиус реакции передачи заряда $r_{ct}(v_{min})$, который определяется функциональной зависимостью (8) для скорости в точке наибольшего сближения. Будем полагать, что вероятность передачи заряда пренебрежимо мала, если расстояние наибольшего сближения $r_{min} > r_{ct}$, и равна 1/2 при $r_{min} < r_{ct}$. Сечение перезарядки в этом приближении определяется соотношением:

$$\sigma_{res} = \frac{1}{2}\pi\rho^2(r_{ct}), \quad (9)$$

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

При энергиях столкновения $\varepsilon_{12} = mv_{12}^2/2 \gg \varepsilon_d$, где $\varepsilon_d = \frac{\alpha Rya_0^4}{d^4}$ – энергия поляризационного взаимодействия на расстоянии атомного диаметра, можно пренебречь отличием траекторий от прямолинейных. Тогда сечение резонансной перезарядки может быть аппроксимировано следующей зависимостью:

$$\sigma_{res}(\varepsilon_{12}) = \sigma_{res}(\varepsilon_1)[1 + a\ln(\varepsilon_1/\varepsilon_{12})]^2 \quad (10)$$

или

$$\sigma_{res}(\varepsilon_{12}) = \sigma_{res}(\varepsilon_1) + B\ln(\varepsilon_1/\varepsilon), \quad (11)$$

где ε_1 , a , B , $\sigma_{res}(\varepsilon_1)$ – положительные аппроксимационные константы [5, 11, 12].

Учет искривления траекторий приводит к поправкам в сечениях, пропорциональным величине $U(r_{min})/\varepsilon_r$ [4, 12].

Уже первые точные экспериментальные измерения скорости дрейфа ионов в сильных полях [13 – 15] показали, что она становится пропорциональной квадратному корню напряженности поля: $v_d \sim E^{1/2}$. Этот результат согласуется с приближением постоянного сечения, и полученные в этих работах экспериментальные данные о сечениях связывались с влиянием конечного размера частиц, т.е. газокINETическим сечением. Но на влияние передачи заряда на скорость дрейфа в сильном поле (эстафетный эффект Л.А. Сена [16]) было указано еще до появления этих работ. В последующих работах [17 – 19] наблюдаемые экспериментальные данные были объяснены уже влиянием передачи заряда при столкновениях.

Алгоритм моделирования ион-атомных столкновений. Задача построения эффективного алгоритма розыгрыша ион-атомного столкновения важна для правильного решения многих задач физики газового разряда, которые характеризуются одновременным влиянием всех перечисленных видов взаимодействия частиц [20 – 25]. Хотя

при низких энергиях ионов ($< 0.1 \text{ эВ}$) сечение поляризационного взаимодействия ионов с атомами обычно больше сечения резонансной перезарядки, но вклад столкновений с перезарядкой в диффузионное сечение в два раза выше из-за того, что при каждом столкновении с перезарядкой ион полностью теряет свою скорость.

Перечислим основные этапы разработанного алгоритма:

1) в системе центра масс сталкивающихся частиц в соответствии с вероятностью столкновения случайным образом выбираются скорости и прицельный параметр столкновения;

2) при движении частиц в системе центра масс с поляризационным потенциалом взаимодействия (2) определяются: расстояние наибольшего сближения r_{min} , относительная скорость частиц в точке наибольшего сближения $v_{12}(r_{min})$, угол рассеивания χ ;

3) если $r_{min} > d_{gas}$, то скорости иона и атома отклоняются на угол χ ;

4) если $r_{min} < d_{gas}$, то скорости иона и атома пересчитываются в соответствии с законом столкновения упругих сфер, расстояние минимального сближения полагается $r_{min} = d_{gas}$, определяется относительная скорость частиц в точке наибольшего сближения $v_{12}(r_{min})$;

5) вычисляется сечение резонансной перезарядки $\sigma_{res}(v_{12}(r_{min}))$ для относительной скорости частиц в момент наибольшего сближения $v_{12}(r_{min})$;

6) если расстояние наибольшего сближения $r_{min} < r_{ct} = (2\sigma_{res}(v_{12}(r_{min}))/\pi)^{1/2}$, то с вероятностью $1/2$ скорости иона и атома меняются;

7) пересчитываются скорости в лабораторной системе, накапливается статистика по различным характеристикам столкновений.

Для дрейфа заряженных твердых сфер разработанный алгоритм воспроизводит известное решение кинетического уравнения Больцмана [24], подвижность в пределе слабого поля (3) [9], а также известные теоретические результаты по кинетике столкновения упругих сфер [10].

Аппроксимация сечений резонансной перезарядки. Приведенный алгоритм позволяет получать скорость дрейфа ионов при заданном сечении перезарядки. Полученная в настоящей работе аппроксимация $\sigma_{res}(\varepsilon_{12})$ основывается на выборе физически обоснованной зависимости (10), для которой необходимы две подгоночные константы – $\sigma_{res}(\varepsilon_1)$, а. 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

данный 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 приведены в таблице.

Т а б л и ц а

Свойства ионов и атомов благородных газов и газокинетические параметры: μ_0 – подвижность ионов в газе при нормальных условиях при слабых полях в единицах $\text{см}^2/\text{Вс}$ [12], α – безразмерная поляризуемость атома, нормированная на куб радиуса Бора [25], σ_{gas} – газокинетическое сечение [10], $\sigma_{res}(\varepsilon_1)$, $\sigma_{res}(\varepsilon_2)$ – сечения резонансной перезарядки ионов на собственном атоме. Аппроксимация $\sigma_{res}(\varepsilon) = \sigma_{res}(\varepsilon_1)[1 + a \ln(\varepsilon_1/\varepsilon)]^2$ получена в настоящей работе. Все сечения выражены в единицах 10^{-16} см^2 , ε – кинетическая энергия иона при неподвижном атоме, $\varepsilon_1, \varepsilon_2 = 1, 10000 \text{ эВ}$

Система	μ_0	α	σ_{gas}	$\sigma_{res}(\varepsilon_1)$	$\sigma_{res}(\varepsilon_2)$	a
$He^+ - He$	10.4	1.39	15.1	27.9	6.6	0.0557
$Ne^+ - Ne$	4.1	2.76	21.2	29.0	5.9	0.060
$Ar^+ - Ar$	1.52	11.1	42.1	55.3	13.8	0.0543
$Kr^+ - Kr$	0.94	16.8	55.4	61.2	18	0.0497
$Xe^+ - Xe$	0.52	27.2	76.7	84.2	28	0.046

Получены аппроксимации сечений резонансной перезарядки ионов благородных газов и создан алгоритм учета ион-атомных столкновений, позволяющий получать важные характеристики ионного потока в экспериментах по исследованию свойств пылевой плазмы.

Автор благодарит Российский фонд фундаментальных исследований (проекты 05-02-16796а, 06-02-17520а, 06-08-01554а и 04-02-89004 NWO_a) и Нидерландское научное общество NWO (проект 047.016.020) за финансовую поддержку работы.

Л И Т Е Р А Т У Р А

- [1] Майоров С. А. Физика плазмы, **31**, N 8, 749 (2005).
 [2] Майоров С. А. Краткие сообщения по физике ФИАН, N 10, 3 (2005); Физика плазмы, **32**, N 9, 802 (2006).

- [3] Ф о р т о в В. Е., Х р а п а к А. Г., Х р а п а к С. А. и др. УФН, **174**, 495 (2004).
- [4] М а к - Д а н и э л ь И. Процессы столкновений в ионизованных газах. М., Мир, 1967.
- [5] М а к - Д а н и э л ь И., М а с о н Э. Подвижность и диффузия ионов в газах. М., Мир, 1976.
- [6] Физические величины: справочник. Под ред. И.С. Григорьева, Е.З. Мейлихова. М., Энергоатомиздат, 1990.
- [7] R a y l e i g h (Lord) J. Proc. Roy. Soc. (London), **66**, 68 (1900).
- [8] L a n g e v i n P. Ann. Chim. Phys., **5**, 245 (1905).
- [9] H e i c h e G., M a s o n E. A. Journ. Chem. Phys., **53**, 4687 (1970).
- [10] Б ё р д Г. Молекулярная газовая динамика. М., Мир, 1981.
- [11] Г а л и ц к и й В. М., Н и к и т и н Е. Е., С м и р н о в Б. М. Теория столкновений атомных частиц. М., Наука, 1981.
- [12] Н и к и т и н Е. Е., С м и р н о в Б. М. Медленные атомные столкновения. М., Энергоатомиздат, 1990; Атомно-молекулярные процессы в задачах с решениями. М., Наука, 1988.
- [13] H o r n b e c k G. A. and W a n n i e r G. H. Phys. Rev., **82**, 458 (1951).
- [14] W a n n i e r G. H. Phys. Rev. E, **83**, 281 (1951).
- [15] W a n n i e r G. H. Bell. Syst. Techn. Journ., **32**, 170 (1953).
- [16] С е н а Л. А. ЖЭТФ, **16**, 734 (1946).
- [17] H o l s t e i n T. Journ. Phys. Chem., **56**, 832 (1952).
- [18] К а г а н Ю. М., П е р е л ь В. И. ДАН СССР, **98**, 575 (1954); ЖЭТФ, **29**, 884 (1955).
- [19] П е р е л ь В. И. ЖЭТФ, **32**, 526 (1957).
- [20] F a r o u k i R. T., H a m a g u c h i S., and D a l v i e M. Phys. Rev. A, **44**, 2664 (1991); **45**, 5913 (1992).
- [21] D a i S. L. and W a n g Y. N. Phys. Rev. E, **69**, 036403 (2004).
- [22] S t e r n o v s k y Z., D o w n u m K., and R o b e r t s o n S. Phys. Rev. E, **70**, 026408 (2004).
- [23] R o b s o n R. E., W h i t e R. D., and P e t r o v i c Z. L. Rev. Mod. Phys., **77**, 1303 (2005).
- [24] W h i t e R. D., R o b s o n R. E., N e s s K. F. Com. Phys. Comm., **142**, 349 (2001).

- [25] Райзер Ю. П. Физика газового разряда. М., Наука, 1987.
- [26] Смирнов Б. М. Физика слабоионизованного газа в задачах с решениями. М., Наука, 1988.

Институт общей физики
им. А.М. Прохорова РАН

Поступила в редакцию 5 апреля 2006 г.