УДК 533.9

Расчеты зависимости характеристик дрейфа иона в собственном газе от напряженности электрического поля: модели столкновений и аппрок-симация сечений

Р.И. Голятина, С.А. Майоров

Проанализированы особенности столкновений ионов с атомами собственного газа с учетом поляризационного взаимодействия, резонансной передачи заряда и газокинетического взаимо-действия в модели твердых сфер. Приведены результаты аппроксимации сечений для всех инертных газов, а также цезия, рубидия и ртути.

PACS: 51.50.+v, 51.10.+y, 52.80.Dy, 52.25.Fi
Ключевые слова: ион, газ, дрейф, столкновение, модель твердых сфер, сечение.

Введение

Распределение ионов по скоростям определяет многие характеристики газового разряда [1-4]. Создание эффективного алгоритма, позволяющего проводить расчет функций распределения ионов по скорости в однородном электрическом поле с высокой точностью, является важной частью исследования многих задач физики газового разряда. Но большой разброс (10 – 50 %) имеющихся в литературе данных о сечениях перезарядки ионов на атомах собственного газа при низкой энергии столкновений не позволяет и, более того, делает безрезультатным построение точных компьютерных моделей для расчета характеристик газового разряда (точных, в смысле – обладающих предсказательной силой).

Однако возможен подбор аппроксимаций сечений на основе экспериментальных данных о подвижности ионов в слабых полях и, соответственно, компьютерной модели по расчету ион– атомных столкновений. Этот подход был реализован для всех элементов, для которых имеются данные о коэффициентах подвижности ионов в собственных газах, а именно, для He, Ne, Ar, Kr, Xe, Rb, Cs, Hg. В результате решения такой обратной задачи в работах [5-7] вычислены сечения резонансной перезарядки ионов на атомах собственного газа с точностью, соответствующей точности измерения коэффициентов диффузии и подвижности ионов в слабых полях, т.е. ~1 %.

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

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

где коэффициент подвижности ионов $\mu(E, N, T)$, вообще говоря, зависит как от напряженности поля, так и от параметров газа (температуры T, давления $p = NT$, состава). Характер зависимости коэффициента подвижности позволяет сделать вывод о свойствах потенциала взаимодействия ионов с атомами. Определению коэффициентов диффузии и подвижности ионов в газах посвящено большое число экспериментальных работ и можно полагать, что, по крайней мере, в области слабых и умеренно сильных полей ($E / N < 1000$ Тд), подвижность ионов известна с весьма высокой точностью (ошибка < 1 %). Эти данные по измерению коэффициентов подвижности и диффузии дают возможность определения сечений столкновений и потенциала взаимодействия, особенно в случае, когда *a priori* известна функциональная зависимость потенциала взаимодействия, и необходимо определить лишь константы аппроксимирующей формулы (см. обзоры [4, 8]).

Например, независимость коэффициента подвижности при слабых полях от напряженности поля и температуры газа возможна в случае, когда частота столкновений не зави-

Голятина Русудан Игоревна, научный сотрудник.
Майоров Сергей Алексеевич, ведущий научный сотрудник.
Институт общей физики им. А.М. Прохорова РАН.
Россия, 119991, Москва, ул. Вавилова, 38.
Тел.: 8-(499)-135-02-47. E-mail: mayorov_sa@mail.ru

Статья поступила в редакцию 20 ноября 2012 г.

© Голятина Р.И., Майоров С.А., 2013

сит от энергии столкновения. Тогда сечение зависит от относительной скорости сталкивающихся частиц v_{12} по закону $\sigma_{st} \sim 1/v_{12}$, а сила взаимодействия частиц обратно пропорциональна пятой степени расстояния между ними, т.е. потенциал взаимодействия имеет вид $U(r_{12}) = \pm C/r_{12}^4$. Такой случай был впервые рассмотрен еще Максвеллом безотносительно к ион–атомному взаимодействию. Им было замечено, что интеграл столкновений Больцмана значительно упрощается только для таких сечений (случай т.н. максвелловских молекул).

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 [9], а теория рассеивания при $n = 4$ построена Ланжевеном [10]. Однако даже в случае слабого поля взаимодействие ионов с атомами имеет сложный характер, и поэтому потенциал взаимодействия не может быть хорошо аппроксимирован простой степенной зависимостью типа $U(r_{12}) = \pm C/r_{12}^4$ в широком диапазоне расстояний.

В приближении слабого поля коэффициент подвижности ионов не зависит от напряженности поля, так как распределение ионов по скоростям близко к распределению атомов, а 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, т.е. на уровне $0,01 - 0,1$ эВ.

Первые точные экспериментальные измерения скорости дрейфа ионов в сильных полях [11] показали, что она становится пропорциональной квадратному корню напряженности поля: $v_d \sim E^{1/2}$. Этот результат согласуется с приближением постоянного сечения, когда частота столкновений иона с атомами пропорциональна их относительной скорости. Однако когда из коэффициентов подвижности ионов в газе собственных атомов оценили поперечник ион–атомных столкновений, то он оказался значительно больше размера атома, который достаточно точно определялся из данных о вязкости газов. Причиной такого расхождения оказался эффект туннельной передачи заряда на больших расстояниях между ионом и атомом. Поскольку сечение этого процесса слабо уменьшается с ростом энергии столкновения, то в достаточно сильном поле столкновения с резонансной перезарядкой будут доминировать. Критерием сильного поля является то, что скорость дрейфа ионов сравнима или превышает тепловую скорость атомов. В этом случае подвижность ионов определяется масштабом сечений при энергиях столкновений, значительно выше тепловой, и зависит от напряженности поля.

Эффект перезарядки был обнаружен в экспериментах [12], кроме того, на аномально большое значение сечения перезарядки для гелия было указано также в работе [13]. Теория, описывающая влияние перезарядки на скорость дрейфа в сильном поле, была построена в работах Л.А. Сены [14, 15] (эстафетный эффект Л.А. Сена). В работах [16, 17] развита теория процесса перезарядки, получены численные оценки сечений и сравнение с экспериментальными данными. Перенос ионов в случае преобладания столкновений с перезарядкой рассмотрен на основе кинетического уравнения в работах [18, 19], где получены функции распределения ионов по скоростям. Потом теория переноса ионов развита также и в более известных работах [21 – 25].

В работе [24] 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 аргона и ксенона. Использовалась модель изотропного рассеяния для упругих столкновений в поляризационном потенциале и модель рассеяния назад для резонансной перезарядки. В результате использования такого приближения, полученная аппроксимация сечения резонансной перезарядки имеет неправильную асимптотику в области малой энергии столкновения (когда преобладают столкновения из-за поляризационного взаимодействия, в которых с вероятностью 50 % происходит передача заряда). Другими словами, подобранные таким образом сечения интегрируют погрешности аппроксимации закладываемых моделей столкновения.

Задача построения эффективного алгоритма розыгрыша ион–атомного столкновения

важна для правильного решения многих задач физики газового разряда, которые характеризуются одновременным влиянием различных видов взаимодействия частиц: поляризации электронных оболочек атома и притяжения на больших расстояниях, передача заряда при перекрытии электронных орбит, отталкивание при малых расстояниях, сравнимых с поперечником атома [25 – 28]. Хотя при низких энергиях ионов (< 0,1 эВ) сечение поляризационного взаимодействия ионов с атомами обычно больше сечения резонансной перезарядки, 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.

Целью данной работы является построение эффективного алгоритма расчета зависимости характеристик дрейфа иона в собственном газе от напряженности электрического поля.

Моделирование ион–атомного столкновения

Силы взаимодействия в системах заряженных и нейтральных частиц

Рассмотрим силы взаимодействия между тяжелыми частицами – нейтральной и заряженной, т.е. между ионом и атомом. Хорошо исследована экспериментально и теоретически задача взаимодействия электрона с атомом и ионом. Природа этого взаимодействия может быть очень сложна и на близких расстояниях часто необходимо использовать квантовомеханическую модель. Взаимодействие же тяжелых частиц часто можно свести к классической задаче, в которой их движение определяется потенциалом взаимодействия и соответствующей ему силой. И хотя взаимодействие электронных оболочек носит квантовый характер, задача взаимодействия тяжелых частиц может быть сведена к задаче рассеяния частицы при движении в потенциальном поле в классическом приближении.

Рассмотрим различные виды ион–атомного взаимодействия в процессе столкновения: поляризационное притяжение иона к атому, передачу заряда и короткодействующее отталкивание, определяющее газокинетические свойства газов.

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 $\sigma_d = \pi d^2$.

Поляризационное взаимодействие

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

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

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, $R_y = 13,6$ 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. Естественно, что на больших расстояниях важны эффекты экранировки, а на малых расстояниях не работает приближение линейное приближении для поляризации. Тем не менее, поляризационное приближение дает очень хорошую точность для коэффициентов подвижности ионов в несобственном газе.

В работе [29] с высокой точностью вычислена скорость дрейфа в пределе слабого поля в чисто поляризационном потенциале (2) с учетом поправок рассеивания на малые углы:

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

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. Формула (3) может быть использована для определения скорости дрейфа ионов в другом газе при замене в ней атомной массы на удвоенную приведенную массу.

Взаимодействие жестких сфер

Модель абсолютно жестких, упругих сфер является хорошим приближением для описа-

ния взаимодействия атомов на близких расстояниях при небольших энергия столкновения. Газокинетическое сечение в модели столкновений упругих сфер равно:

$$\sigma_{gas} = \pi d_{gas}^2, \qquad (4)$$

эффективный диаметр атомов d_{gas} может быть определен из данных о вязкости газов [30].

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 $\varepsilon_r < R_y$ можно аппроксимировать зависимостью

$$U(r_{12}) = U_0 \exp(-r_{12}/a_d), \qquad (5)$$

где U_0, a_d – положительные константы [4]. В этом случае диффузионное сечение равно:

$$\sigma_d = \pi d^2 = \pi a_d^2 \ln^2(U_0/\varepsilon_r). \qquad (6)$$

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}.

При больших энергиях $\varepsilon_r >> R_y$ 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 хорошей точностью описывается потенциалом Юкавы

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

В физике плазмы этот потенциал называют потенциалом Дебая-Хюккеля, поскольку он был получен ими для описания экранирования электрического поля в плазме, а Юкава применил его для описания взаимодействия между частицами в ядрах.

Для задач моделирования свойств газового разряда не так важны детали взаимодействия ионов и атомов на близких расстояниях, поэтому применение модели твердых сфер совместно с предположением о равенстве размеров иона и атома представляется оправданным при энергиях взаимодействия меньше R_y.

Передача заряда при столкновениях

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 перезаряжается на атоме собственного газа, изменения внутренней энергии сталкивающихся частиц не происходит. Такой процесс называется резонансной перезарядкой и обычно относится к неупругим столкновениям, так как он имеет квантовомеханическую природу [31, 32]. Сечение резонансной перезарядки довольно велико, при тепловых энергиях сталкивающихся частиц оно в несколько раз превышает газокинетическое сечение.

Если при передаче заряда импульсы частиц практически не изменились (такая ситуация реализуется при далеких пролетах, когда можно пренебречь вкладом поляризации атома и отталкиванием), то такое столкновение часто называется рассеиванием назад, так как в системе центра масс у атома и иона меняется только знак скорости после столкновения. Следует различать столкновения с передачей заряда и столкновения с рассеяние назад.

Аппроксимация сечений резонансной перезарядки

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 ½ останется у одной из сталкивающихся частиц. Сечение резонансной перезарядки в атомных единицах имеет функциональный вид [31, 32]:

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

где параметр γ характеризует скорость экспоненциального спада волновой функции электрона за пределами атома, а 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 $(\gamma^2 + v^2/4)^{1/2}$ [27, 28].

Можно определить эффективный радиус реакции передачи заряда $R_{ct}(v_{\min})$, который должен определяется функциональной зависимостью (8) для скорости в точке наибольшего сближения. Будем полагать, что вероятность передачи заряда пренебрежима мала после пролета с расстоянием наибольшего сближения $r_{\min} > R_{ct}$ и равна ½ при $r_{\min} < R_{ct}$. Сечение перезарядки в этом приближении определяется соотношением:

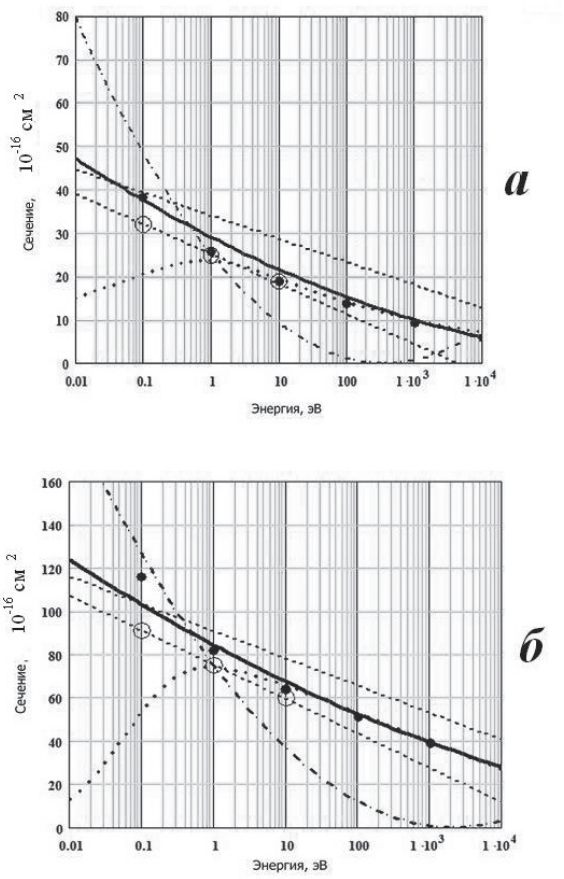

Рис. 1. Различные аппроксимации сечений резонансной перезарядки для ионов а) неона и б) ксенона. Сплошная кривая – результат настоящей работы, жирные точки – работа [34], кружки – работа [31], штрихованные прямые – аппроксимации из работ [6] и [33], штрих-пунктирная кривая – аппроксимация из книги [32], пунктирная кривая – результат работы [24]. Все сечения выражены в единицах 10^{-16} см^2, кинетическая энергия иона при неподвижном атоме.

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

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

При энергиях столкновения

$\varepsilon_{12} = mv_{12}^2/2 >> \varepsilon_d$, где $\varepsilon_d = \dfrac{\alpha R_y a_0^4}{d^4}$ – 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:

$$\sigma_{res} = \frac{1}{2}\pi R_{ct}^2, \qquad (10)$$

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

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

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

где $\varepsilon_1, a, B, \sigma_{res}(\varepsilon_1)$ – положительные аппроксимационные константы [4, 31 – 33].

В работе [34] сделана попытка получения простой аппроксимации для всех элементов на основе анализа экспериментальных данных:

$$\sigma_{res}(v_{12}) = (A - B\log_{10} v_{12})(I/R_y)^{-1.5}, \qquad (13)$$

где A = 1,81·10^{-14} см^2, B = 2,12·10^{-15} см^2, I – потенциал ионизации, скорость выражена в единицах см/с.

На рис. 1 представлены различные аппроксимации сечений резонансной перезарядки для ионов а) неона и б) ксенона. Все сечения выражены в единицах 10^{-16} см^2, ε – кинетическая энергия иона при неподвижном атоме в эВ. Отметим, что аппроксимации, приведенные в [33], при низких энергиях столкновений имеют большую погрешность из-за неверного выбора корня при решении квадратного уравнения (см. штрих пунктирные кривые на

рис. 1 а, б). Этот досадный факт приводит к большим ошибкам при попытке моделировании с этими сечениями и особенно неприятен тем, что эти данные приведены в учебнике с большим тиражом.

Учет искривления траекторий в приближении малых возмущений приводит к поправкам в сечениях, пропорциональных величине $1-U(r_{\min})/\varepsilon_r$ (если пренебречь зависимостью сечения перезарядки от изменения скорости частиц при их сближении [8, 32]). В случае захвата частицы на спиральную орбиту происходит ее падение на центр, при отражении ее от жесткой сферы с вероятностью 1/2 происходит ее перезарядка. Поэтому в области малых энергий, где сечение столкновения частиц определяется поляризационным взаимодействием, сечение перезарядки примерно равно половине ланжевеновского сечения захвата на спиральную орбиту. Пренебрежение этим обстоятельством привело к тому, что аппрксимации сечений столкновений, полученные в [19], имеют неправильную асимптотику в области малых энергий.

На рис. 2 приведены сечения для гелия: сплошная кривая – аппроксимация сечения реакции перезарядки, полученная в работах [1-3]; штрихованная кривая – сечение перезарядки с учетом искривления траекторий и возможного захвата на спиралевидную орбиту при движении в потенциале (2); точки и кружочки – газокинетическое и ланжевеновское сечения, соответственно. Это рисунок показывает соотношение между различными сечениями. Из его анализа следует, что модель, основанная на учете лишь какого-либо одного типа столкновений не может даже качественно правильно описать функцию ионов по скоростям. Более подробное рассмотрение свойств функций распределения ионов по скоростям и влияние на них различных типов столкновений будет приведено ниже.

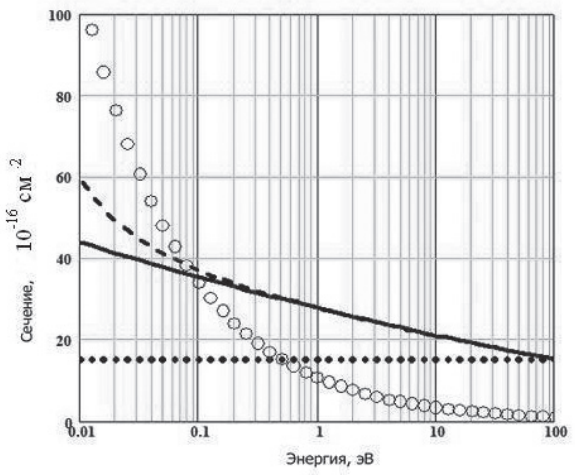

Рис. 2. Сечения резонансной перезарядки для гелия в приближении прямолинейных траекторий (сплошная кривая) и с учетом искривления траекторий (штрихованная кривая), жирные точки и кружки обозначают газокинетическое и поляризационное сечения.

Алгоритм для моделирования ион–атомных столкновений

Для интегрирования уравнений движения ионов в постоянном поле использовалась стандартная схема Рунге-Кутты второго порядка точности. На каждом шагу по времени разыгрывалось столкновение иона с атомом. Перечислим основные этапы разработанного алгоритма ион–атомного столкновения:

1) в системе цента 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 расстояние 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 расстоянием наибольшего сближения $r_{\min} < r_{ct} = (2\sigma_{res}(v_{12}(r_{\min}))/\pi)^{1/2}$, то с вероятностью ½ скорости иона и атома меняются;

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

Такой алгоритм воспроизводит известное решение кинетического уравнения

Больцмана для дрейфа заряженных твердых сфер [28], подвижность в пределе слабого поля (3) [29], а также известные теоретические результаты по кинетике столкновения упругих сфер [30].

Выбор аппроксимация сечений резонансной перезарядки и определение коэффициентов

Приведенный алгоритм позволяет получать скорость дрейфа ионов при известной зависимости сечения перезарядки от энергии столкновения. Поэтому возможен подбор аппроксимаций сечений. Для этой цели естественно использовать весьма точные экспериментальные данных о подвижности ионов в слабых полях и значения сечений резонансной перезарядки в экспериментах с пучками. Для подбора параметров аппроксимации использовалась описанная выше компьютерная модель по расчету ион–атомных столкновений.

Выберем в качестве базовой аппроксимации физически обоснованную функциональную зависимость сечения резонансной перезарядки от энергии (8). Для нее 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 можно использовать известные с хорошей точностью из экспериментов с пучками значения сечений перезарядки при высоких энергиях. Было выбрано значение $\sigma_{res}(\varepsilon_2)$ при ε_2 = 10000 эВ [31], поскольку, отметим, разброс значений из различных литературных источников незначителен. Очевидно, что в качестве второго значения для аппроксимации сечения перезарядки необходимо использовать значение сечений при малых энергиях. Но при малых энергиях столкновений измерений сечений перезарядки нет, а имеющие теоретические работы дают погрешность порядка 50 %.

Но, с другой стороны, столкновения с перезарядкой имеют место и в газовом разряде при комнатной температуре. И в этих экспериментах с высокой точностью, лучше одного процента, определяются коэффициенты подвижности и диффузии. Поэтому второе значение сечения резонансной перезарядки было подобрано методом стрельбы 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 для ионов благородных газов приведены в табл. 1. Здесь μ_0 – подвижность ионов в газе при нормальных условиях при слабых полях в единицах см^2/Вс [28], α – безразмерная поляризуемость атома, нормированная на куб радиуса Бора [32], σ_{gas} – газокинетическое сечение [26], $\sigma_{res}(\varepsilon_1)$, $\sigma_{res}(\varepsilon_2)$ – 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, ε_1 = 1 эВ, ε_2 = 10000 эВ.

В Табл. 2 приведены результаты подгонки аппроксимационных зависимостей сечений перезарядки для ионов Rb, Cs, Hg. Здесь D_0 – коэффициент диффузии ионов в собственном газе в единицах см^2/с [31] 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. 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, ε_1 = 1 эВ, ε_2 = 10000 эВ. Поляризуемость атомов Rb, Cs, Hg, приведенная в таблице, определялась по известным коэффициентам диффузии различных ионов в этих газах [35] с помощью соотношения (3), в котором атомная масса заменена удвоенной приведенной массой. К сожалению, коэффициенты подвижности ионов в собственном газе известны только для благородных газов, а также ртути, цезия и рубидия. Соответственно, только для них и была проделана работа по определению коэффициентов аппроксимации сечений резонансной перезарядки ионов. Заметим, что в справочнике [35] приведено неверное значение коэффициента диффузии ионов ртути в парах ртути (примерно на порядок выше).

В табл. 3 даны результаты расчетов характеристик потока ионов Ar^+ в Ar при различных значениях напряженности электрическо-

Таблица 1.

Свойства ионов и атомов благородных газов и газокинетические параметры:

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

Таблица 2.

Свойства ионов и атомов рубидия, цезия и ртути, а также газокинетические параметры:

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	0,0066	350	34,5	32,1	164	45	0,052

Таблица 3.

Результаты расчетов характеристик потока ионов Ar^+ в Ar при различных значениях E:

$E/N = 31.1\,Td$ Тд	u_d м/с	u_d [36]	D_l см²/с	D_l [36]	D_t см²/с	D_t [36]	$\langle\varepsilon\rangle$ мэВ	$\langle\varepsilon\rangle$ [36]
20	82,8	83,5	106	112	105	107	40,1	40,8
100	351	349	139	154	113	102	85,3	84,9
400	935	929	255	299	143	104	349	347

го поля E для плотности атомов $n_a = 10^{16}$ см$^{-3}$ и температуре 293 К. В соседних столбцах приведены результаты, полученные в настоящей работе и данные моделирования методом Монте Карло из работы [36]. Приведены скорости дрейфа u, коэффициенты диффузии вдоль и поперек поля, средние энергии ионов.

Заключение

Проведённые в работе анализ позволил выявить особенности столкновений ионов с атомами собственного газа с учетом поляризационного взаимодействия, резонансной передачи заряда и газокинетического взаимодействия в модели твердых сфер. В качестве практических результатов приведены результаты аппроксимации сечений для всех инертных газов, а также цезия, рубидия и ртути.

Литература

1. *Райзер Ю.П.* Физика газового разряда. – М.: Наука, 1987.
2. *Биберман Л.М., Воробьев В.С., Якубов И.Т.* Кинетика неравновесной плазмы. – М.: Наука, 1982.
3. *Смирнов Б.М.* Физика слабоионизованного газа в задачах с решениями. –М.: Наука, 1985.
4. *Мак-Даниэль И., Масон Э.* Подвижность и диффузия ионов в газах. –М.: Мир, 1976.
5. Майоров С.А.// Кр. сообщ. по физ. ФИАН. 2009. № 6. С. 37.
6. *Майоров С.А.* // Кр. сообщ. по физ. ФИАН. 2009. № 10. С. 37
7. *Майоров С.А.* // Физика плазмы. 2009. Т. 35. № 9. С. 869.
8. *Мак-Даниэль И.* Процессы столкновений в ионизованных газах. –М.: Мир, 1967.
9. *Rayleigh J. (Lord)* // Proc. Roy. Soc. (London). 1900. V. 66. P. 68.
10. *Langevin P.* // Ann. Chim. Phys. 1905. V. 5. P. 245.
11. *Hornbeck G.A. and Wannier G.H.*// Phys. Rev. 1951. V. 82. P. 458
12. *Dempster A.*// Phil. Mag. 1927. V. 3. P. 115
13. *Massey H.S.W. and Mohr C.B.O.* // Proc. Roy. Soc. (London). 1933. V. A144. P. 188.
14. *Сена Л.А.* // ЖЭТФ. 1939. Т. 9. С. 1320
15. *Сена Л.А.* // ЖЭТФ. 1946. Т. 16**.** С**.** 734 Столкновения электронов и ионов с атомами газа. – Гостехиздат, 1948.
16. *Палюх Б.М., Сена Л.А.*// ЖЭТФ. 1950. Т. 20. С. 481.
17. *Фирсов О.Б.* // ЖЭТФ. 1951. Т. 21. С. 1001.
18. *Каган Ю.М., Перель В.И.* // ДАН СССР. 1954. Т. 98. С. 575.
19. *Каган Ю.М., Перель В.И.* // ЖЭТФ. 1955. Т. 29. С. 884.

20. *Перель В.И.* // ЖЭТФ. 1957. Т. 32. С. 526
21. *Wannier G.H.* // Phys. Rev. 1951. V. 83. P. 281
22. *Wannier G.H.*// Bell. Syst. Techn. Journ. 1953. V. 32. P. 170
23. *Holstein T.* // Journ. Phys. Chem. 1952. V. 56. P. 832
24. *Piscitelli D., Phelps A.V., Urquijo J., Basurto E., and Pitchford L.C.* // Phys. Rev. E. 2003. V. 63. P. 046408
25. *Farouki R.T., Hamaguchi S., and Dalvie M.* // Phys. Rev. A. 1991. V. 44. P. 2664; 1992. V. 45. P. 5913
26. *Dai S.L. and Wang Y.N.* // Phys. Rev. E. 2004. V. 69. P. 036403
27. *Sternovsky Z., Downum K., and Robertson S.*// Phys. Rev. E. 2004. V. 70. P. 026408
28. *White R.D., Robson R.E., Ness K,F.* // Com. Phys. Comm. 2001. V. 142. P. 349.
29. *Heiche G., Mason E.A.*// Journ. Chem. Phys. 1970. V. 53. P. 4687.
30. *Бёрд Г.* Молекулярная газовая динамика. – М.: Мир, 1981.
31. *Галицкий В.М., Никитин Е.Е., Смирнов Б.М.* Теория столкновений атомных частиц. – М.: Наука, 1981
32. *Никитин Е.Е., Смирнов Б.М.* Атомно–молекулярные процессы в задачах с решениями. – М.: Наука, 1988.
33. *Смирнов Б.М.* Физика слабоионизованного газа в задачах с решениями. – М.: Наука, 1988.
34. S*akabe S. and Izawa Y.* // Phys. Rev. E. 1992. V. 45. P. 2086.
35. Физические величины: справочник. *Под ред. И.С. Григорьева, Е.З. Мейлихова.* – М.: Энергоатомиздат, 1990.
36. *Viehland L.A.and Mason E.A.* // Ann. Phys. (N.Y.). 1975. V. 91. P. 499

Calculations of dependence of ion drift on electric field strength: collision models and cross-section approximations

R.I. Golyatina and S.A. Mayorov

Prokhorov General Physics Institute of the Russian Academy of Sciences,
38 Vavilov str., Moscow, 119991, Russia
E-mail: mayorov_sa@mail.ru

Characteristic properties of ion-atom collisions subject to polarization interaction, resonant charge ex-change and gas-kinetic interaction at the hard-sphere model have been studied. Results of cross-section approximation are represented for all inert gases and for cesium, rubidium and mercury.

PACS: 51.50.+v, 51.10.+y, 52.80.Dy, 52.25.Fi

Keywords: ion, gas, drift, collision, hard-sphere model, cross-section.

Bibliography – 36 references *Received November 20, 2012*