

Расчеты зависимости характеристик дрейфа иона в собственном газе от напряженности электрического поля для инертных газов

Р.И. Голятина, С.А. Майоров

Проанализированы особенности столкновений ионов с атомами собственного газа с учетом поляризационного взаимодействия, резонансной передачи заряда и газокинетического взаимодействия в модели твердых сфер. Приведены результаты расчетов методом Монте Карло характеристик дрейфа иона в постоянном и однородном электрическом поле при $1 < E/N < 1000$ Тд для всех инертных газов.

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 [1-3]. 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).

В настоящей работе, являющейся продолжением [4], приведены результаты расчетов методом Монте Карло характеристик дрейфа иона в постоянном и однородном электрическом поле при $1 < E/N < 1000$ Тд (таунсенд, $1 \text{ Тд} = 10^{-17} \text{ В} \cdot \text{см}^2 = 10^{-21} \text{ В} \cdot \text{м}^2$) для всех инертных газов.

Распределение ионов по скоростям

Распределение Максвелла и его модификации

По аналогии с гидродинамическим приближением часто полагается, что дрейф ионов в сильном поле описывается сдвинутой функцией распределения Максвелла:

Голятина Русудан Игоревна, научный сотрудник.
Майоров Сергей Алексеевич, вед. научн. сотрудн..
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

$$f_0(\vec{v}) = \left(\frac{m}{2\pi T_i} \right)^{3/2} \exp\left(-\frac{m[(u - u_d)^2 + v^2 + w^2]}{2T_i} \right). \quad (1)$$

Это распределение имеет два параметра, а именно, среднюю скорость ионов u_d (скорость дрейфа) и температуру ионов (в энергетических единицах) T_i , которая определяет тепловой разброс скоростей ионов $V_T = (T_i/m)^{1/2}$. Подразумевается, что здесь направление поля и дрейфа совпадает с осью x .

Если скорость дрейфа значительно превышает тепловую скорость атомов, т.е. $u_d \gg (T_a/m)^{1/2}$, а сечение резонансной перезарядки и средняя длина свободного пробега иона $\lambda_{st} = 1/\sigma_0 n_a$ не зависят от скорости, то решение уравнения Больцмана для проекции скорости вдоль поля имеет вид [6, 7]:

$$f(u) = \Theta(u) \left(\frac{2m}{\pi T_E} \right)^{1/2} \exp\left(-\frac{mu^2}{2T_E} \right), \quad (2)$$

где $\Theta(u)$ – функция Хэвисайда, $T_E \equiv eE\lambda_{st}$. Распределение (2) является половинкой распределения Максвелла с температурой, равной энергии, набираемой ионом на средней длине свободного пробега. Средняя кинетическая энергия ионов, обусловленная движением в направлении поля, для распределения (2) равна $\frac{1}{2}m\langle u^2 \rangle = \frac{1}{2}T_E = \frac{1}{2}eE\lambda_{st}$, средняя скорость ионов (скорость дрейфа) $u_d = (2eE\lambda_{st}/\pi m)^{1/2} = (2T_E/\pi m)^{1/2}$.

Функция распределения по проекции скорости на ось, ортогональную направлению поля, часто полагается равной распределению Максвелла с температурой атомов:

$$f(w) = \left(\frac{m}{4\pi T_a} \right)^{1/2} \exp\left(-\frac{mw^2}{2T_a} \right). \quad (3)$$

Характеристики дрейфа ионов

Важной характеристикой ионного потока является средняя кинетическая энергия ионов, которая связана с эффективной температурой ионов соотношением

$$\langle \varepsilon \rangle = \frac{1}{2} m \langle v^2 \rangle = \frac{3}{2} T_{eff}. \quad (4)$$

Именно эффективная температура ионов должна учитываться при определении макроскопических характеристик плазмы, например, радиуса Дебая.

Введение ионной температуры, отличающейся от температуры атомов, может оказаться недостаточно для описания функции распределения ионов. Ведь средняя энергия хаотического движения ионов вдоль поля и поперек него могут сильно отличаться. Поэтому имеет смысл введение двух различных температур ионов, а именно – вдоль поля T_{\parallel} и поперек поля T_{\perp} . В этом случае средняя энергия иона равна:

$$\langle \varepsilon \rangle = \frac{1}{2} m v_d^2 + \frac{1}{2} T_{\parallel} + T_{\perp}. \quad (5)$$

Часто полагается, что распределение ионов описывается сдвинутой максвелловской функцией (1) с температурой ионов, равной температуре атомов $T_i = T_a$. Соответственно, тепловой разброс скоростей ионов и атомов в этом случае характеризуется тепловой скоростью атомов $V_T = (T_a / m)^{1/2}$, а средняя энергия иона складывается из энергии направленного движения и тепловой энергии:

$$\langle \varepsilon \rangle = \frac{1}{2} m v_d^2 + \frac{3}{2} T_a. \quad (6)$$

При дрейфе иона в собственном газе и определяющей роли столкновений с резонансной перезарядкой средняя энергия иона определяется уравнением [3, 5]:

$$\langle \varepsilon \rangle = \frac{\pi}{4} m v_d^2 + \frac{3}{2} T_a. \quad (7)$$

Средняя энергия иона в сильном поле в приближении постоянного времени свободного пробега (поляризационное взаимодействие) определяется с помощью уравнения Ванье [3, 8, 9]:

$$\langle \varepsilon \rangle = \frac{1}{2} m v_d^2 + \frac{1}{2} M_a v_d^2 + \frac{3}{2} T_a, \quad (8)$$

которое учитывает столкновения частиц двух сортов – ионов и атомов (или молекул) с массами m и M_a соответственно. Первый член в правой части учитывает энергию направленного движения, второй – хаотизацию приобретенной в поле энергии, третий – хаотическое тепловое движение с температурой атомов T_a .

Результаты расчетов характеристик дрейфа иона в собственном газе

Сравнение с результатами других авторов

Вначале рассмотрим данные, полученные в настоящей работе с результатами моделирования методом Монте Карло [10]. В табл. 1 приведены характеристики расчетов, позволяющие сделать выводы о точности полученных аппроксимаций и некоторых сложностях, возникающих при моделировании дрейфа ионов в собственном газе.

В этой таблице на примере дрейфа однократно заряженных ионов аргона в собственном газе представлены результаты расчетов для трех случаев:

а) случая слабых полей, когда скорость дрейфа ионов мала по сравнению со скоростью атомов и величина разогрева ионов мала по сравнению с температурой атомов ($E/N = 20$ Тд);

б) для случая умеренно сильных полей (отношение $E/N = 100$ Тд), когда скорость дрейфа ионов сравнима со скоростью атомов и величина разогрева ионов по порядку величины сравнима с температурой атомов;

в) для случая умеренно сильных полей (отношение $E/N = 400$ Тд), когда скорость дрейфа ионов значительно раз больше скорости атомов,

Таблица 1

Характеристики потока ионов гелия при их дрейфе в постоянном и однородном электрическом поле в собственном газе при 300 К и плотности атомов $2.69 \cdot 10^{19} \text{ см}^{-3}$.

E/N , Тд	W , км/с	T_{eff} , К	T_{\parallel} , К	T_{\perp} , К	D_{\parallel} , см ² /с	D_{\perp} , см ² /с	$m.f.p.$, нм	
1	0.027	300.3	300.4	300.3	0.250	0.250	43.2	0.306
2	0.054	301.0	302.2	300.4	0.250	0.250	43.2	0.306
5	0.13	305.7	314.1	301.5	0.252	0.250	43.5	0.308
10	0.27	321.8	355.0	305.2	0.257	0.249	44.5	0.312
20	0.51	377.7	498.4	317.3	0.271	0.249	47.3	0.325
50	1.11	640.8	1187	368.0	0.317	0.246	56.6	0.369
100	1.84	1187	2639	461.4	0.384	0.247	67.7	0.420
200	2.91	2385	5838	658.0	0.497	0.261	80.4	0.469
500	5.12	6204	15917	1347	0.751	0.340	97.3	0.506
1000	7.95	14031	35650	3221	1.054	0.619	114	0.492

а величина разогрева ионов во много раз превышает температуру атомов.

Сравнение результатов показывает, что расхождение в скорости дрейфа составляет меньше процента, в коэффициенте диффузии вдоль поля и величине разогрева (средней энергии ионов) не превышает 15 %. Расхождение в коэффициенте поперечной диффузии весьма значительно. Авторы работы [10] считают, что при столь значительном разогреве ионов отсутствие увеличения поперечной диффузии имеет какую-то причину в алгоритме или используемых аппроксимациях сечений.

Но из совпадения их результатов для скорости дрейфа с нашими результатами можно сделать предположение, что причина подавления поперечной диффузии при больших полях заключается в следующем. Рекомендованные в работе [10] значения сечений для упругих столкновений и резонансной перезарядки получены на основе подгонки к хорошо измеренной во многих экспериментах зависимости скорости дрейфа от напряженности поля. Эти сечения для упругих столкновений быстро падают с увеличением энергии столкновения. Авторы работы [10], видимо, не учитывают то обстоятельство, что в случае даже очень близких столкновений резонансная передача заряда происходит с вероятностью 1/2. А если же передачи заряда не происходит, то имеет место упругое столкновение с изотропным рассеянием в системе центра масс сталкивающихся частиц.

Результаты расчетов

Отметим, что обычно приводятся экспериментальные и расчетные данные только для скорости дрейфа, но для правильного анализа свойств газового разряда необходимы и другие кинетические характеристики дрейфа ионов.

На рис. 1 приведены зависимости интегральных характеристик дрейфа ионов от напряженности поля, точнее, от отношения E/N . На рис. 1, а приведены зависимости эффективной, поперечной, продольной и средней температур. Хотя поперечная температура и является минимальной из всех, асимптотика ее увеличения такая же, как и у других. Очевидно, что пренебрежение разогревом ионов в поперечном направлении при больших полях может приводить к значительной погрешности. На рис. 1, б приведены зависимости разогрева ионов от напряженности поля. Здесь же приведена и кинетическая энергия направленного движения ионов. Видно, что в слабом поле соотношение Ванье (8) дает очень хорошее приближение для средней энергии ионов. В случае сильного поля приближение (7), основанное на

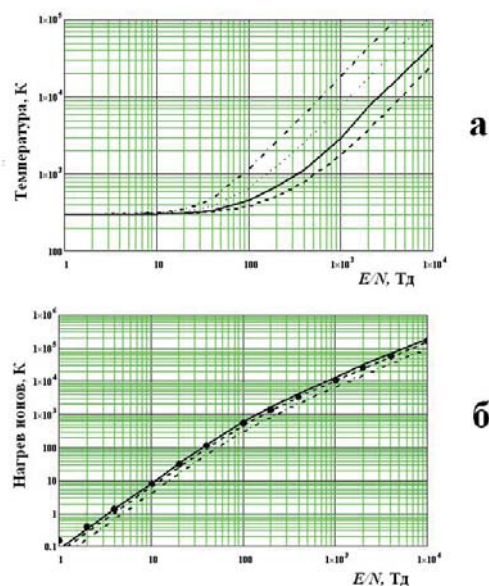


Рис. 1. Зависимости интегральных характеристик дрейфа ионов от параметра E/N : а) температура ионов (сплошная кривая), эффективная температура (пунктир), температуры для направлений вдоль (штрихпунктир) и поперек (штрихи) поля; б) величина разогрева ионов (превышение средней энергии ионов над энергией атомов): кривая из точек – расчет методом Монте Карло, сплошная кривая – приближение Ванье (6), штрихованная кривая – приближение резонансной перезарядки (5), штрих пунктир – кинетическая энергия направленного движения.

преобладании столкновений с резонансной перезарядкой, дает хорошую оценку для степени разогрева ионов в электрическом поле

Особенности распределения ионов по скоростям демонстрирует рис. 2, на котором для трех различных напряженностей поля построены функции распределения ионов по проекциям скоростей вдоль и поперек поля. Эти три значения напряженностей поля характеризуют режимы

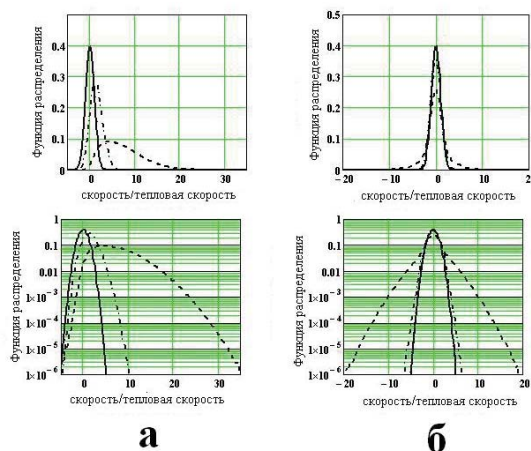


Рис. 2. Результаты расчета функции распределения ионов (в относительных единицах) по скорости: а) – вдоль и б) – поперек направления поля в аргоне при различных напряженностях электрического поля $E/N = 10$ Тд (сплошные линии), $E/N = 100$ Тд (штрих-пунктир) и $E/N = 1000$ Тд (штрих) при температуре 300 К. Нижние графики имеют логарифмическую шкалу по вертикали.

Таблица 2

Характеристики потока ионов неона при их дрейфе в постоянном и однородном электрическом поле в собственном газе при 300 К и плотности атомов $2,69 \cdot 10^{19} \text{ см}^{-3}$.

E/N , Тд	W , км/с	$T_{\text{эф}}$, К	T_{\parallel} , К	T_{\perp} , К	D_{\parallel} см ² /с	D_{\perp} см ² /с	$m.f.p.$ нм	
1	0.011	300.3	300.3	300.3	1.03	1.03	35.2	0.202
2	0.022	300.9	301.7	300.4	1.03	1.03	35.2	0.202
5	0.055	304.8	311.4	301.5	1.04	1.03	35.4	0.204
10	0.11	318.4	345.1	305.1	1.06	1.03	36.1	0.207
20	0.21	367.9	467.8	317.9	1.11	1.04	38.4	0.217
50	0.47	615.7	1094	376.3	1.32	1.07	46.4	0.256
100	0.79	1155	2483	491.5	1.65	1.47	56.6	0.306
200	1.26	2380	5658	743.0	2.18	1.31	68.6	0.354
500	2.23	6388	15932	1615	3.33	1.86	84.6	0.390
1000	3.36	13415	33509	3368	4.61	2.80	95.7	0.388

Таблица 3

Характеристики потока ионов аргона при их дрейфе в постоянном и однородном электрическом поле в собственном газе при 300 К и плотности атомов $2,69 \cdot 10^{19} \text{ см}^{-3}$.

E/N , Тд	W , км/с	$T_{\text{эф}}$, К	T_{\parallel} , К	T_{\perp} , К	D_{\parallel} см ² /с	D_{\perp} см ² /с	$m.f.p.$ нм	
1	0.004	300.0	300.0	300.0	0.0386	0.0385	18.1	0.178
2	0.008	300.3	300.4	300.3	0.0386	0.0385	18.1	0.178
5	0.020	301.4	303.0	300.6	0.0387	0.0385	18.1	0.178
10	0.041	305.4	312.6	301.7	0.0389	0.0385	18.2	0.179
20	0.081	320.5	349.8	305.9	0.0396	0.0386	18.6	0.182
50	0.19	411.5	474.8	329.9	0.0432	0.0394	20.7	0.200
100	0.35	645.3	1163	386.2	0.0500	0.0409	24.3	0.235
200	0.58	1225	2447	513.8	0.0626	0.0442	29.8	0.286
500	1.07	3204	7747	932.4	0.0910	0.0544	38.1	0.349
1000	1.63	6717	16705	1723	0.1242	0.0723	44.0	0.374

Таблица 4

Характеристики потока ионов криптона при их дрейфе в постоянном и однородном электрическом поле в собственном газе при 300 К и плотности атомов $2,69 \cdot 10^{19} \text{ см}^{-3}$.

E/N , Тд	W , км/с	$T_{\text{эф}}$, К	T_{\parallel} , К	T_{\perp} , К	D_{\parallel} см ² /с	D_{\perp} см ² /с	$m.f.p.$ нм	
1	0.0025	300.0	300.0	300.0	0.0239	0.0238	15.4	0.138
2	0.005	300.3	300.4	300.2	0.0239	0.0238	15.4	0.138
5	0.0126	301.2	302.4	300.6	0.0239	0.0238	15.4	0.138
10	0.0252	304.4	310.0	301.6	0.0240	0.0238	15.5	0.138
20	0.0501	316.6	339.6	305.1	0.0244	0.0239	15.8	0.141
50	0.120	392.8	524.9	326.7	0.0265	0.0245	17.3	0.154
100	0.220	597.7	1031	380.9	0.0304	0.0358	20.2	0.183
200	0.374	1122	2347	509.5	0.0377	0.0284	24.9	0.228
500	0.692	2943	6951	939.1	0.0546	0.0363	32.0	0.386
1000	1.06	6201	15116	1744	0.0743	0.0490	37.0	0.309

Таблица 5

Характеристики потока ионов ксенона при их дрейфе в постоянном и однородном электрическом поле в собственном газе при 300 К и плотности атомов $2,69 \cdot 10^{19} \text{ см}^{-3}$.

E/N , Тд	W , км/с	$T_{\text{эф}}$, К	T_{\parallel} , К	T_{\perp} , К	D_{\parallel} см ² /с	D_{\perp} см ² /с	$m.f.p.$ нм	
1	0.0015	300.2	300.3	300.1	0.0143	0.0143	11.8	0.155
2	0.0030	300.3	300.4	300.2	0.0143	0.0143	11.8	0.155
5	0.0076	300.8	301.3	300.5	0.0143	0.0143	11.8	0.155
10	0.0151	302.6	305.6	300.9	0.0143	0.0143	11.9	0.155
20	0.0302	309.6	322.7	303.0	0.0145	0.0143	12.0	0.156
50	0.0734	354.9	344.3	315.7	0.0152	0.0145	12.7	0.165
100	0.137	485.3	754.8	350.5	0.0169	0.0149	14.3	0.186
200	0.239	839.6	1642	438.3	0.0201	0.0160	17.2	0.224
500	0.453	2112	4866	735.3	0.0279	0.0190	22.1	0.282
1000	0.699	4418	10682	1286	0.0371	0.0244	25.7	0.310

слабого поля (отклонение от равновесного распределения невелико), умеренного – отклонение от равновесного распределения значительно, и сильного – отклонение от равновесного значительно и отличается от него качественно.

В табл. 1–5 представлены характеристики потока ионов гелия, неона, аргона, криптона, ксенона при их дрейфе в постоянном и однородном электрическом поле в собственном газе при 300 К и плотности атомов $2,69 \cdot 10^{19} \text{ см}^{-3}$. Приведенные числовые данные позволяют получить достаточно полную картину о характере дрейфа ионов. Точные значения различных характеристик в промежуточных точках могут быть получены с помощью интерполяции.

Заключение

В работе приведены данные расчетов методом Монте Карло характеристик дрейфа иона в собственном газе и проведен анализ распределений ионов по скоростям.

Отметим некоторые особенности распределений ионов по скорости:

1) анализ функций распределения показывает, что при дрейфе ионов, в типичных для газоразрядной плазмы условия, происходит существенный разогрев ионов не только в продольном направлении, а также и в поперечном направлении. Это происходит из-за близких столкновений, когда помимо перезарядки происходит также и рассеяние в произвольный телесный угол в системе центра масс;

2) даже при достаточно высокой приведенной напряженности электрического поля не происходит формирования ионного потока, в котором скорость теплового хаотического движения была бы меньше скорости направленного движения – скорости дрейфа. Как уже отмечалось, это связано с тем, что при увеличении напряженности поля одновременно с увеличением скорости дрейфа происходит увеличение дисперсии функции распределения (т.е. продольной и поперечной температур);

3) в распределении ионов по скоростям имеется большая анизотропия и, соответственно, большая разница между продольной и поперечной температурами T_{\parallel} и T_{\perp} (см. Табл. 1). Поэтому диффузионные потоки вдоль и поперек поля могут сильно различаться по величине;

4) из приведенных графиков функций распределения ионов по скоростям, а также из анализа других характеристик ионного потока следует, что одновременно и распределение по модулю скорости и по проекциям скоростей имеет существенные отличия от соответствующих максвелловских распределений. Причем имеет место отличие не только в хвостах функций распределения, но и в центральной части. Соответственно, функция распределения ионов по скоростям при их дрейфе в собственном газе не может быть описана гауссовой кривой (сдвинутой максвелловской функцией распределения).

Работа выполнена при поддержке федеральной целевой программы «Научные и научно-педагогические кадры инновационной России» на 2009-2013 г.г. «Поддержка научных исследований, проводимых коллективами научно-образовательных центров по научному направлению «Физика, астрономия» в области «Физика плазмы».

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. Мак-Даниэль И., Мэсон Э. Подвижность и диффузия ионов в газах. –М.: Мир, 1976.
4. Голятина Р.И., Майоров С.А. // Успехи прикладной физики. 2013, Т. 1. № 1. С. 10.
5. Майоров С.А. // Физика плазмы. 2009. Т. 35. № 9. С. 869.
6. Каган Ю.М., Перель В.И. // ДАН СССР. 1954. Т. 98. С. 575.
7. Каган Ю.М., Перель В.И. // ЖЭТФ. 1955. Т. 29. С. 884.
8. Wannier G.H. // Phys. Rev. 1951. V. 83. P. 281.
9. Wannier G.H. // Bell. Syst. Techn. Journ.. 1953. V. 32. P. 170.
10. Viehland L.A. and Mason E.A. // Ann. Phys. (N.Y.). 1975. V. 91. P. 499.

Calculations of ion drift dependence on electric field strength in the proper gas

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 Monte Carlo calculations for all inert gases drift are presented at $1 < E/N < 1000$ Td.

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

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

Bibliography — 10 references

Received November 20, 2012