

ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ФРОНТА ВОЛНЫ ИОНИЗАЦИИ В Хе В ПРИБЛИЖЕНИИ ЛОКАЛЬНОЙ ЭНЕРГИИ МОДЕЛИ СПЛОШНОЙ СРЕДЫ

© 2022 г. К. К. Трусов^а, *

^а Физический институт им. П.Н. Лебедева РАН, Москва, Россия

*e-mail: trusovkk@lebedev.ru

Поступила в редакцию 15.03.2022 г.

После доработки 05.04.2022 г.

Принята к публикации 15.04.2022 г.

Проведено одномерное численное моделирование параметров фронта волны ионизации отрицательной полярности в Хе под действием электростатического поля, в контексте развития и распространения стримера в газе. Оценки выполнены в рамках модели сплошной среды в приближении локальной энергии электронов. Для решения задачи построены аналитические аппроксимации ионизационно-транспортных коэффициентов электронов в Хе в диапазоне приведенной напряженности поля 10^{-3} –15000 Td на базе известных экспериментальных и теоретических данных. Получены численные решения для скорости движения и толщины фронта волны, плотности электронов позади него. На основе полученных решений оценена зависимость двух безразмерных параметров от напряженности поля, показывающих отношение скорости релаксации средней энергии электронов к скорости возмущений в газе, наведенных распространяющимся фронтом. Для физически обоснованного использования модели сплошной среды в оценках необходимо, чтобы оба параметра значительно превышали единицу. В частности, их величины близки к 10 при напряженности поля 3450 Td/средней энергии электронов около 170 эВ, делая применение модели проблематичным при более высокой напряженности.

Ключевые слова: фронт волны ионизации газа, Хе, численное моделирование, локальное равновесие

DOI: 10.31857/S0367292122100109

1. ВВЕДЕНИЕ

Наибольшее число работ, посвященных экспериментальному изучению и численному моделированию развития и распространения стримеров в газах под действием электрического поля, концентрирует внимание на азоте и воздухе. С одной стороны, это объясняется практическим интересом к изучению электрических разрядов именно в этих, наиболее распространенных и доступных атмосферных газах. С другой стороны, разряд и ионизационно-транспортные характеристики электронов в различных газах исследуются давно и широко, но, пожалуй, именно для азота и воздуха в настоящее время накоплена наиболее полная и детальная информация.

Наряду с азотом и воздухом, практический интерес представляет также разряд в инертных газах, которые широко применяются в газоразрядных устройствах различного типа и назначения. В частности, развитие и распространение стримеров является тем фундаментальным процессом, который во многих случаях предшествует элек-

трическому пробое газа и значительно влияет на пространственную структуру плазмы разряда.

Исследования, как правило, выполняются в различающихся лабораторных условиях с применением различных методов и алгоритмов численного моделирования, что осложняет прямое сопоставление результатов разных работ друг с другом. Поэтому сравнительные эксперименты и моделирование динамики стримеров в разных газах в одинаковых лабораторных условиях и по единой методике представляются целесообразными. Результаты таких исследований могут полнее проявить значимость индивидуальных электрических характеристик газов в развитии стримеров в них.

Физическая модель и система дифференциальных уравнений, применяемые к описанию динамики фронта волны ионизации (ФВИ) развивающегося стримера в газе, зависят от того, сколько и какие моменты функции распределения электронов по энергиям учитываются при анализе кинетического уравнения Больцмана. Один из подходов, модель сплошной среды в

приближении локальной энергии электронов (ЛЭЭ), опирается на предположение о равновесной функции распределения частиц по энергиям и ее можно считать моделью второго порядка, которая рассматривает баланс плотности заряженных частиц и средней локальной энергии электронов. Ее система уравнений в частных производных была построена, обсуждалась многими авторами и сформулирована, например, в [1–5] (и ссылки в них) и включает ионизационно-диффузионно-дрейфовые уравнения баланса плотности электронов и ионов, средней локальной энергии электронов и электростатическое уравнение Пуассона для поля, при феноменологическом представлении транспортных и ионизационных характеристик частиц газа. Уравнения представляют собой уравнения сплошной среды, в которых все переменные величины и коэффициенты являются макроскопическими, т.е. усредненными по массиву частиц, функциями локальной средней энергии электронов.

Одним из неотъемлемых условий правомерности рассматриваемой модели является требование локального равновесия среды, которое подразумевает равновесное распределение частиц по энергиям, а наведенные внешним полем изменения в среде в виде ФВИ протекают медленнее релаксации функции распределения частиц. Соблюдение такого требования накладывает ограничение на диапазон напряженности приложенного электрического поля/энергии электронов, в котором допустимо использование модели. Далее, применяя для краткости словосочетание “релаксация частиц”, будем подразумевать релаксацию функции распределения частиц по энергиям.

Выбранная для оценок модель ЛЭЭ занимает промежуточное положение между более простой, так называемой “классической моделью сплошной среды” (classic fluid model) [2, 3], учитывающей баланс только плотности заряженных частиц в приближении локального поля, и более сложными современными вычислительными моделями, основанными на применении методов динамики частиц, Монте-Карло и прямом решении уравнения Больцмана. Будучи промежуточной по качеству и трудоемкости вычислений, модель ЛЭЭ показала приемлемую точность оценки основных параметров ФВИ [2–7], и это обусловило ее выбор в [8] и настоящей работе для сравнительного моделирования ФВИ в Ne, Ar и Xe. Более подробно аргументы в обоснование нашего выбора модели ЛЭЭ для сравнительных оценок сформулированы в [8].

В [5] представлены результаты 1D моделирования ФВИ отрицательной полярности в Ne в рамках модели сплошной среды в приближении ЛЭЭ в диапазоне величин приведенной напряженности

приложенного электростатического поля $125 < |\mathbf{E}|/n_0 < 460$ Td, где \mathbf{E} – вектор напряженности поля, n_0 – плотность частиц газа, $1 \text{ Td} = 10^{-21} \text{ В} \cdot \text{м}^2$. Позднее в [8] приведены результаты аналогичного сравнительного моделирования ФВИ в Ne и Ar в расширенном диапазоне $50 < |\mathbf{E}|/n_0 < 4000$ Td. Но оценка двух введенных там же безразмерных параметров, выражающих отношение скорости релаксации электронов к скорости наведенных внешним полем возмущений, показала, что применение выбранной вычислительной модели проблематично в диапазонах $|\mathbf{E}|/n_0 < 100$ Td и $|\mathbf{E}|/n_0 > 1180$ Td ввиду нарушения в них условия локального равновесия электронов по этим двум параметрам. В диапазоне $125 < |\mathbf{E}|/n_0 < 460$ Td результаты оценки доступных для сравнения характеристик ФВИ в Ne обеих работ хорошо совпали.

Целью настоящей работы является одномерное (1D) численное моделирование параметров распространения ФВИ отрицательной полярности в Xe под действием внешнего электростатического поля, в приложении к формированию и распространению отрицательного стримера. Численные оценки выполнены следуя методике и алгоритму вычислений, примененным к Ne и Ar в [8], в безразмерной форме уравнений модели сплошной среды в приближении ЛЭЭ. Предварительно построены необходимые для решения задачи аппроксимации подвижности электронов μ_e , коэффициентов диффузии электронов D_e и ударной ионизации α атомов Xe аналитическими функциями на основе известных экспериментальных и теоретических данных в широком диапазоне приведенной напряженности электрического поля $10^{-3} < |\mathbf{E}|/n_0 < 15000$ Td. Оценены также зависимости частот упругих и неупругих столкновений электронов с атомом Xe и скорости потери энергии электроном в таких столкновениях от его средней энергии. В результате численного моделирования получены зависимости скорости ФВИ, его толщины и плотности свободных электронов позади фронта от величины приведенной напряженности приложенного поля. На основе полученных решений оценены величины двух безразмерных параметров, показывающих отношение скорости релаксации электронов к скорости изменения возмущений, наведенных в газе распространяющимся ФВИ. Исходя из результатов оценки этих параметров, сделан вывод о том, что применение модели ЛЭЭ к Xe проблематично при $|\mathbf{E}|/n_0 > 3450$ Td из-за нарушения условия локального равновесия электронов по этим двум параметрам. Результаты настоящей работы с Xe дополняют аналогичные решения для Ne и Ar [8] в рамках той же модели.

2. СИСТЕМА УРАВНЕНИЙ ЧИСЛЕННОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ

Система уравнений, описывающих динамику ФВИ в рамках модели сплошной среды в приближении ЛЭЭ, рассматривалась и сформулирована в ряде работ [1–5] (и ссылки в них). Для случая одномерного рассмотрения задачи система уравнений преобразована в [8] в безразмерное представление к виду

$$\begin{aligned} \partial_\tau \sigma &= \partial_x (M \sigma Y + MD_{II} \partial_x \sigma) + M \sigma f_{gp}(|Y|), \\ \partial_\tau Y &= -M(\sigma Y + MD_{II} \partial_x \sigma), \\ \partial_\tau (\sigma \epsilon^*) &= \frac{5}{3} \partial_x (M \sigma Y \epsilon^* + MD_{II} \epsilon^* \partial_x \sigma) + \\ &+ YM(\sigma Y + D_{II} \partial_x \sigma) - \sigma \sum_c k_c^* \epsilon_c^*, \\ \epsilon^* &= \Phi(|Y|). \end{aligned} \quad (1)$$

Здесь x, τ обозначают безразмерные координату и время; σ, Y и ϵ^* , безразмерные плотность электронов, компоненту вектора напряженности поля вдоль оси x и среднюю локальную энергию электронов, соответственно; D_{II} , продольная компонента безразмерного тензора диффузии электронов; f_{gp} , безразмерная функция ионизации газа, определяемая коэффициентом ударной ионизации α как $f_{gp}(|Y|) = |Y| \alpha / \alpha_0$; M , безразмерная подвижность электронов, определяемая соотношением

$$M = \frac{\mu_e(|Y|)}{\mu_e(|Y|=1)} = \frac{\mu_e(|\mathbf{E}|/n_0)}{\mu_e(E_0/n_0)}, \quad (2)$$

как подвижность, нормированная к своей величине при $|\mathbf{E}| = E_0$; α_0 и E_0 , параметры зависимости коэффициента ионизации α от $|\mathbf{E}|/n_0$ (см. разд. 3.1).

В отношении системы уравнений (1) целесообразно отметить ее полностью безразмерный характер, как по координатам и учтенным коэффициентам, так и по искомым функциям. Как отмечалось [8], в условиях локального равновесия электронов все коэффициенты в (1) можно представить функциями безразмерной напряженности поля $Y = |\mathbf{E}|/E_0$ или безразмерной средней энергии электронов. В таком случае, решения (1) также полностью безразмерны, а после преобразования в обычное размерное представление являются функциями только $|\mathbf{E}|/n_0$ (или средней энергии электронов). Отмеченная особенность уравнений и решений (1) присуща именно рассматриваемой модели. Так, например, при учете в них электрон-ионных и многочастичных взаимодействий безразмерный характер задачи нарушается.

Трансформация в безразмерную форму уже применялась к уравнениям более простой модели

в приближении локального поля при фиксированных коэффициентах подвижности и диффузии электронов [9]. В [8] для преобразования уравнений модели ЛЭЭ к (1) были использованы известные соотношения связи безразмерных и размерных величин [9]

$$\begin{aligned} x &= |\mathbf{r}| \alpha_0, \quad \tau = t/t_0, \quad Y = |\mathbf{E}|/E_0, \\ D_{II} &= D_e \alpha_0 / \mu_e E_0, \quad \sigma = n_e e / \epsilon_0 \alpha_0 E_0, \end{aligned} \quad (3)$$

добавлены новые (2) и $\epsilon^* = \epsilon \times \alpha_0 / e E_0$ и получил новое определение параметр t_0 как $t_0 = 1 / [\alpha_0 E_0 \mu_e (E_0/n_0)]$. Здесь ϵ_0 и e – диэлектрическая постоянная и абсолютная величина заряда электрона; ϵ , средняя энергия электрона, а параметр $e E_0 / \alpha_0$ имеет размерность энергии и является характеристикой конкретного газа.

Слагаемое $-\sigma \sum_c k_c^* \epsilon_c^*$ в третьем уравнении (1) выражает скорость потерь энергии свободными электронами при столкновениях в виде произведения плотности электронов σ на скорость потери энергии одним электроном $\sum_c k_c^* \epsilon_c^*$, просуммированную по всем типам “с” столкновений электрона с атомами, упругим и неупругим. Здесь k_c^* и ϵ_c^* – безразмерные частота столкновений типа “с” электрона с атомом и энергия, теряемая электроном при одном столкновении данного типа.

Все функции и коэффициенты в (1) выражены в зависимости от ϵ^* , а не Y , и последнее уравнение в (1) задает взаимосвязь между этими величинами.

С целью инициирования развития ФВИ в произвольной точке x_0 , часто задается небольшое количество локально расположенных стартовых электронов в виде распределения

$$\sigma(x, \tau = 0) = \beta \times \exp[-(x - x_0)^2]. \quad (4)$$

Коэффициент β перед экспонентой может варьироваться в широком диапазоне 0.0001–0.1 при поиске решений (1) в случае значительной вариации внешнего электрического поля.

Для решения (1) необходимы характеристики конкретного газа – его безразмерные коэффициенты $\alpha/\alpha_0, M, \Phi, D_{II}, f_{gp}, k_c^*, \epsilon_c^*$ и их зависимость от напряженности поля/средней энергии электронов. Для Хе коэффициенты $\alpha/\alpha_0, M, D_{II}$ определены ниже в разделах 3.1–3.3 путем численных оценок и аппроксимаций аналитическими функциями в широком диапазоне напряженности поля/энергии электронов, которые наиболее удобны для интеграции в расчетную схему. К сожалению, необходимые для аппроксимаций экспериментальные данные доступны в относительно узком диапазоне низкой и умеренной напря-

женности электрического поля. Их недостаток в диапазоне высокой напряженности мы восполнили результатами теоретических расчетов, выполненных методом динамики частиц, и объединение данных позволило построить аппроксимации в широком диапазоне вплоть до 10^{-3} – 15000 Td. Коэффициенты k_c^* , ϵ_c^* рассчитаны в разделе 3.4 методами [4, 5] на основе имеющихся данных о сечениях столкновений электронов с атомами Хе и соответствующих этим столкновениям величин потери энергии электроном [10–14]. Функция Φ у каждого газа индивидуальна и для Хе нами принята расчетная методами Монте-Карло, динамики частиц и решением уравнения Больцмана [12, 13, 15, 16].

3. АППРОКСИМАЦИИ ИОНИЗАЦИОННОГО И ТРАНСПОРТНЫХ КОЭФФИЦИЕНТОВ ЭЛЕКТРОНА

Как отмечалось во Введении, модель сплошной среды предполагает, что все коэффициенты в (1) являются макроскопическими, зависящими от локальных электрического поля/средней энергии электронов. Физическая обоснованность их определения и применения, особенно при больших напряженностях поля, в частности для Хе, анализировалась в [10–13, 15–21]. Так, расчеты методом Монте-Карло в [12, 17] показали, что в Хе при $|E|/n_0 < 14400$ Td условие локального равновесия электронов выполняется, а при $|E|/n_0 > 28800$ Td уже нет. Расчеты методом динамики частиц [13, 18–21] показали, что при соответствующей табуляции искомые макроскопические ионизационно-транспортные коэффициенты сохраняют свой физический смысл в еще более широком диапазоне напряженности поля вплоть до 60000 Td. Поэтому в диапазоне моделирования динамики ФВИ $|E|/n_0 < 4550$ Td в настоящей работе их применение в (1) оправдано. Оценки всех коэффициентов в настоящей работе приведены для комнатной температуры 20°C .

3.1. Коэффициент ударной ионизации

Для зависимости коэффициента ударной ионизации от напряженности электрического поля далее принята аппроксимация

$$\frac{\alpha}{n_0} = A \times \exp \left[-\sqrt{B \frac{n_0}{|E|}} - C \frac{|E|}{n_0} \right], \quad (5)$$

которая моделирует как восходящую ветвь зависимости при малых и умеренных величинах $|E|/n_0$, так и нисходящую при высокой напряженности. Восходящая ветвь зависимости такого типа при $C = 0$ применительно к инертным газам была предложена в [22, 23]. Позднее, применительно к ксенону, она была дополнена нисходящей ветвью

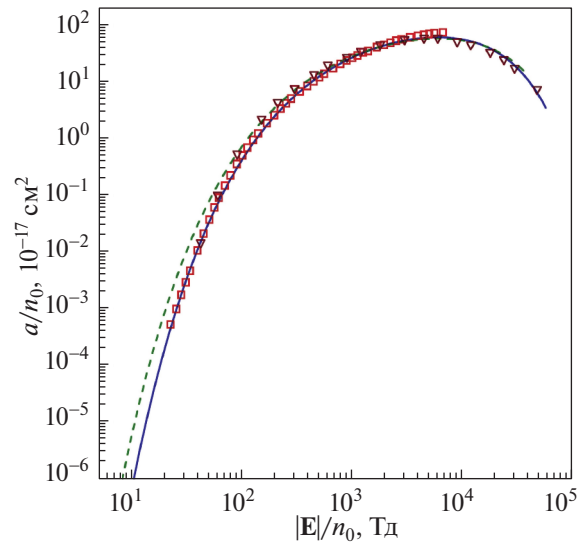


Рис. 1. $|E|/n_0$ – зависимость приведенного коэффициента ударной ионизации α/n_0 атомов Хе. Сплошная кривая – аппроксимация (5); штриховая – расчет на основе аппроксимации [19]; треугольники – численный расчет [19]; квадраты – экспериментальные данные [24].

($C \neq 0$) [18, 19] в области высокой напряженности поля и, как результат, аппроксимация (5) близко соответствует расчетным [18, 19] и экспериментальным [24] данным при $A = 2.1 \times 10^{-15}$ см^2 , $B = 3802$ Td и $C = 6.5 \times 10^{-5}$ 1/Td в широком диапазоне $|E|/n_0 = 22$ – 60000 Td. Константы A и B связаны с введенными выше параметрами α_0 и E_0 соотношениями $A = \alpha_0/n_0$ и $B = E_0/n_0$. Зависимость (5) иллюстрируется на рис. 1 в сравнении с отмеченными экспериментальными и теоретическими результатами. Уменьшение коэффициента α/n_0 в области $|E|/n_0 > 6500$ Td объясняется уменьшением сечения ионизации атома Хе электроном при увеличении энергии последнего.

3.2. Безразмерная подвижность электрона

Подвижность электронов оценивалась исходя из данных о скорости их дрейфа $|V_{др}|$ и известного соотношения связи $V_{др} = \mu_e \times E$. Результаты экспериментальных измерений $|V_{др}|$ в ксеноне приведены в [16, 24–27], а теоретических расчетов в широком диапазоне $|E|/n_0$ методом динамики частиц – в [13, 21]. К сожалению, отмечают значительный недостаток и разброс экспериментальных данных при $|E|/n_0 > 12$ Td, что естественно снижает качество аппроксимации M . По совокупности данных, зависимость $M(|E|/n_0)$ для ксенона смоделирована в диапазоне $10^{-3} < |E|/n_0 < 15000$ Td функцией

$$M\left(\frac{E}{n_0}\right) = 425\left(\frac{E}{n_0}\right)^{0.04} \frac{\left[1 + 0.08\frac{E}{n_0} - 1.5 \times 10^{-6}\left(\frac{E}{n_0}\right)^2 + 2.3 \times 10^{-12}\left(\frac{E}{n_0}\right)^3\right]^{1.15}}{\left[1 + 43 \times \exp\left(-72\left(\frac{E}{n_0}\right)^{0.95}\right)\right]^{0.96} \left[1 + 200\left(\frac{E}{n_0}\right)^{0.98}\right]} + 0.4, \quad (6)$$

соответствие которой по данным литературы иллюстрируется на рис. 2. Вытекающий из теоретических расчетов рост подвижности в области $|E|/n_0 > 30$ Td (пунктирная кривая на рис. 2) находит объяснение в уменьшении сечений столкновительного взаимодействия электронов с атомами при увеличении энергии электрона/напряженности поля.

3.3. Безразмерный коэффициент диффузии электронов

При одномерном решении задачи в уравнениях (1) следует опираться на продольную компоненту тензора диффузии. Экспериментальные данные о коэффициенте продольной диффузии электронов в ксеноне доступны автору лишь в ограниченном диапазоне $|E|/n_0 < 100$ Td [28]. Для моделирования $D_{||}(|E|/n_0)$ при более высоких $|E|/n_0$ мы вынужденно воспользовались расчетными данными [12, 13, 21] о зависимостях средней энергии электронов $\epsilon(|E|/n_0)$ и характеристической энергии $D_e/\mu_e(|E|/n_0)$, а также известными соотношениями $D_e/\mu_e = kT_e/e$ [24, 29] и $\epsilon = 3kT_e/2$, где k – постоянная Больцмана, T_e – температура

электронов. Оба соотношения применяются к системам, близким к равновесию, и связывают энергию электронов с поперечной, а не продольной компонентой тензора диффузии электронов. Компоненты тензора диффузии, в общем, не равны друг другу и наиболее различаются в области низкой напряженности поля, однако имеют схожую зависимость от напряженности поля. Несмотря на их различие в Xe, сочетание экспериментальных и расчетных данных показало, с одной стороны, удовлетворительное согласие результатов расчета поперечного коэффициента диффузии разными авторами в диапазоне $100 < |E|/n_0 < 10^4$ Td и, с другой стороны, их близкое соответствие экспериментальным данным о продольном коэффициенте диффузии в диапазоне перекрытия $7 < |E|/n_0 < 100$ Td. На рис. 3 приведены результаты оценки $D_{||}(|E|/n_0)$ в ксеноне на основании данных указанных работ. Как видно, зависимости в разных диапазонах $|E|/n_0$ удовлетворительно дополняют друг друга. Это позволило смоделировать кривую $D_{||}(|E|/n_0)$ в диапазоне $|E|/n_0 = 0.001 - 15000$ Td функцией

$$D_{||}\left(\frac{E}{n_0}\right) = 4.8 \times \frac{1 + 2.2 \times 10^{-3}\frac{E}{n_0} + 1.96 \times 10^{-8}\left(\frac{E}{n_0}\right)^2 + 4.7 \times 10^{-12}\left(\frac{E}{n_0}\right)^3}{1 + 12 \exp\left(-0.52\left(\frac{E}{n_0}\right)^{1.3}\right)} \times \left[\frac{E}{n_0} \times \exp\left(-3300\left(\frac{E}{n_0} - 0.04\right)^2\right) + 3.7 \times 10^{-3} \times \frac{10^5\left(\frac{E}{n_0}\right)^{2.5} + 1}{1.4 \times 10^4\left(\frac{E}{n_0}\right)^{2.5} + 1} \right], \quad (7)$$

вид которой и точность моделирования референсных величин показаны на рис. 3.

3.4. Частота столкновений электрона с атомами

$$\sum_c k_c^* \text{ и скорость потери энергии } \sum_c k_c^* \epsilon_c^*$$

Оценка зависимости $\sum_c k_c^*$ и $\sum_c k_c^* \epsilon_c^*$ от средней энергии электронов выполнена с учетом

упругих и неупругих столкновений электронов с атомами ксенона, следуя ранее примененной к Ne и Ag методике [5, 8]. Из всех типов неупругих процессов учитывались лишь ионизация атомов электронным ударом и прямое возбуждение электронных состояний атома Xe. По своему вкладу в искомые характеристики, столкновения указанных типов значительно различаются.

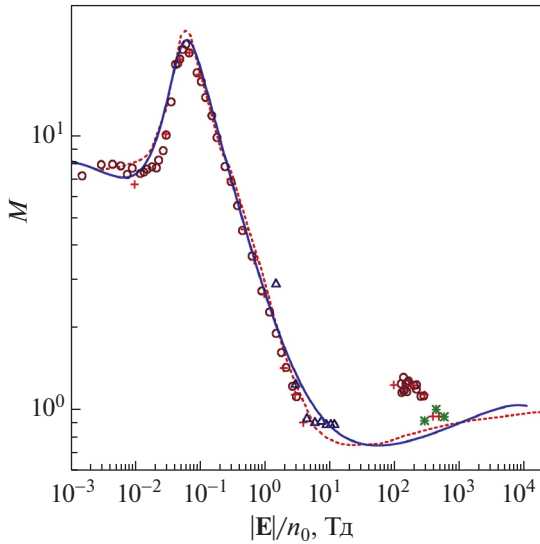


Рис. 2. $|E|/n_0$ – зависимость безразмерной подвижности M электронов. Сплошная кривая – аппроксимация (6); пунктирная кривая – результат расчета по теоретическим величинам $|V_{dr}|$ [13, 21]; звездочки, кружки, треугольники и крестики – расчет из экспериментальных данных о $|V_{dr}|$ работ [16, 24, 25, 27], соответственно.

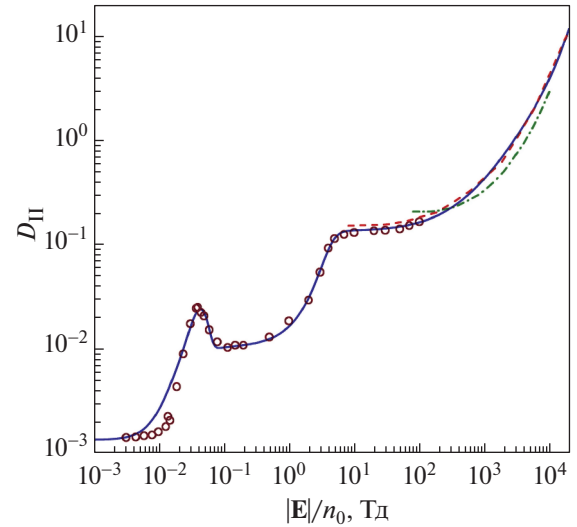


Рис. 3. $|E|/n_0$ – зависимость безразмерного коэффициента диффузии $D_{||}$ электронов. Сплошная кривая – аппроксимация (7), штриховая кривая – результат расчета по теоретической зависимости ϵ [13, 21], штрихпунктирная кривая – расчет по теоретической зависимости D_e/μ_e [12], кружки – расчет по экспериментальным данным [28] о продольном коэффициенте диффузии.

Так, для оценки частоты неупругих столкновений каждого типа “с” применялась формула [30]

$$k_c = n_0 \left(\frac{2}{m_e} \right)^{1/2} \int_0^\infty \Psi(\epsilon) \sigma_c(\epsilon) \epsilon \times d\epsilon, \quad (8)$$

где m_e – масса электрона; $\sigma_c(\epsilon)$ – сечение столкновения типа “с”; $\Psi(\epsilon)$ – функция распределения электронов по энергии. Полные сечения возбуждения двух наиболее значимых групп электронных состояний атома Хе, $2p^56s[3/2]_1$ и $2p^56s'[3/2]_1$, заимствованы из [12–14].

Величина энергии, теряемой возбуждающим электроном при неупругом столкновении с атомом, принята равной энергии возбуждения этих уровней, 8.44 эВ и 9.57 эВ, соответственно.

Потеря энергии ионизирующего электрона при столкновении с атомом Хе оценивалась исходя из экспериментальных измерений энергетического спектра электронов, рожденных при ионизации атома [31], следуя методике [32], согласно которой энергия рожденного вторичного электрона ϵ_2 оценивается как

$$\epsilon_2 = B \tan \left[p \arctan \frac{\epsilon_1 - I}{2B} \right], \quad (9)$$

где ϵ_1 – энергия налетающего первичного электрона; p – случайное число, равномерно распределенное в интервале 0–1; $I = 12.1$ эВ – потенциал ионизации атома Хе; $B \approx 8.7$ эВ (по заклю-

чению авторов [31], этот параметр Хе оценен с большой погрешностью). Тогда величина потери энергии ионизирующего первичного электрона равна $\epsilon_{\text{ион}} = \epsilon_2 + I$ с последующим усреднением по параметру p .

Частота упругих столкновений электрона с атомом и скорость потери энергии им в таких столкновениях оценивались другим методом, опирающимся на частоты передачи импульса $\nu_m = e/(m_e \mu_e)$ и энергии $\nu_e = 2\nu_m m_e/m_{\text{Хе}}$ электроном при столкновении, в приближении $m_e \ll m_{\text{Хе}}$, где $m_{\text{Хе}}$ – масса атома Хе [1, 4, 5, 33, 34] (смотри также ссылки в этих работах). Частота ν_m представляет собой “эффективную” частоту столкновений электронов с атомом и, вообще говоря, не совпадает с рассчитанной исходя из полного сечения упругих столкновений. Так, например, анизотропия упругих столкновений в азоте приводит к различию между сечениями столкновений и передачи импульса электрона [35]. В Хе сечения, соответственно и частоты, упругих столкновений и передачи импульса также не равны, последняя примерно в 1.25–1.3 раза ниже [10–12]. Тем не менее, сечения обоих типов у Хе в широком диапазоне энергий электрона в десятки раз превышают сечения неупругих столкновений [13], поэтому вклад упругих столкновений в суммарную частоту оказывается значительным. В то же время, скорость потери энергии электроном

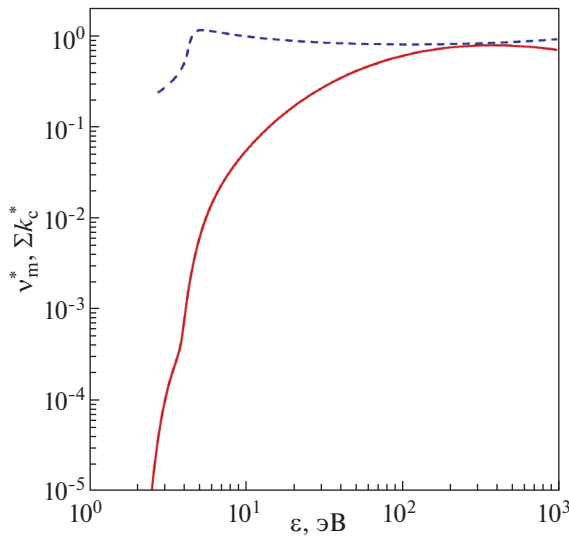


Рис. 4. Зависимость безразмерных частоты передачи импульса v_m^* (штриховая линия) и суммарной частоты неупругих столкновений $\sum_c k_c^*$ (сплошная линия) электрона с атомом Хе от его средней энергии ϵ .

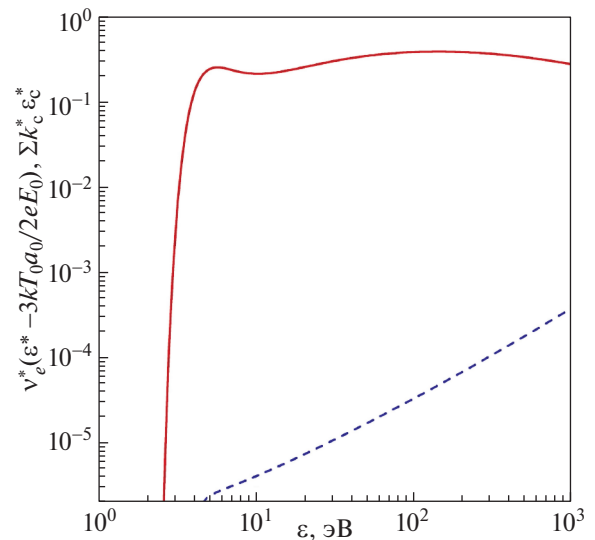


Рис. 5. Зависимость безразмерной скорости потери энергии электроном $v_e^*(\epsilon^* - 3kT_0\alpha_0/2eE_0)$ при его упругих и $\sum_c k_c^*\epsilon_c^*$ при неупругих столкновениях с атомом Хе от средней энергии электрона ϵ . Сплошная линия – неупругие столкновения, штриховая – упругие.

при его упругом столкновении, оцениваемая как $v_e(\epsilon - 3kT_0/2) \approx v_m \times 2m_e/m_{Xe} \times (\epsilon - 3kT_0/2)$ [4, 5, 33, 34], где T_0 – температура газа, очень незначительна по сравнению с неупругим столкновением ввиду малости сомножителя $2m_e/m_{Xe} \approx 8.3 \times 10^{-6}$. Результаты оценки безразмерных v_m^* и суммарной частоты неупругих столкновений $\sum_c k_c^*$, включая ионизацию, а также скорости потери энергии электроном при упругих и неупругих столкновениях с атомом Хе показаны на рис. 4, 5.

4. РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

4.1. Результаты моделирования ФВИ

Численное решение уравнений (1) для Хе в настоящей работе выполнено следуя методике, примененной в [8] при аналогичных расчетах ФВИ в Не и Аг.

Каждое решение (1) выполнялось при фиксированной величине приложенного постоянного поля с безразмерной напряженностью $Y^+ = |E^+|/E_0$, величина которой варьировалась в диапазоне 0.015–1.2 (соответствует $|E^+|/n_0 = 57–4550$ Td). Нижняя граница диапазона обусловлена тем, что при меньшей напряженности поля не удалось получить решений (1) в виде ФВИ. Верхняя граница установлена условно и решения вблизи нее носят формальный характер, так как физическая обоснованность решений (1) становится проблематичной уже при напряженности

$|E^+|/n_0 > 3450$ Td вследствие того, что нарушается необходимое условие использования модели сплошной среды – условие локального равновесия. Применительно к Хе это показано ниже исходя из оценки величин двух безразмерных параметров Q и S на основе полученных решений (1). Определение Q и S дано в [8]. По сути, это два показателя отношения скорости релаксации электронов к скорости изменения возмущений в газе в виде ФВИ, наведенных внешним полем. Первый из них, Q , выражает отношение “эффективной” частоты столкновений электронов с атомами к характерной частоте изменений во фронте. Второй, S , представляет собой отношение энергии, которую электрон способен отдать в столкновениях с атомами в течение длительности фронта, к фактической разнице его энергий впереди и позади фронта. При этом нужно подчеркнуть, что входящие в (1) ионизационно-транспортные коэффициенты электронов сохраняют свой физический смысл в гораздо более широком диапазоне величин $|E^+|/n_0$ по сравнению с диапазоном моделирования (смотри рисунки 1–3).

При поиске решений (1) начальная точка x_0 развития ФВИ задавалась вблизи центра вычислительного домена, вдали от его границ, и стартовое количество электронов в этой точке варьировалось в (4) изменением величины коэффициента β . Размер пространственного домена вычислений обычно составлял $x = 6 \times 10^3$ при шаге сетки до $\Delta x = 0.01–0.02$. Размер временного до-

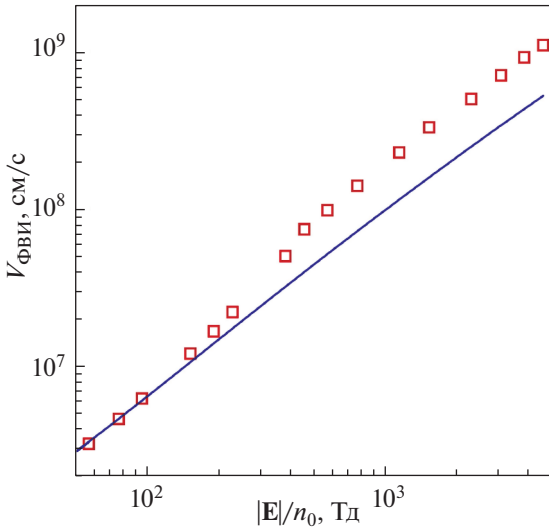


Рис. 6. Зависимость скорости $V_{\text{ФВИ}}$ ФВИ от $|E^+|/n_0$. Квадраты – численные решения (1), сплошная линия – оценка на основе (10).

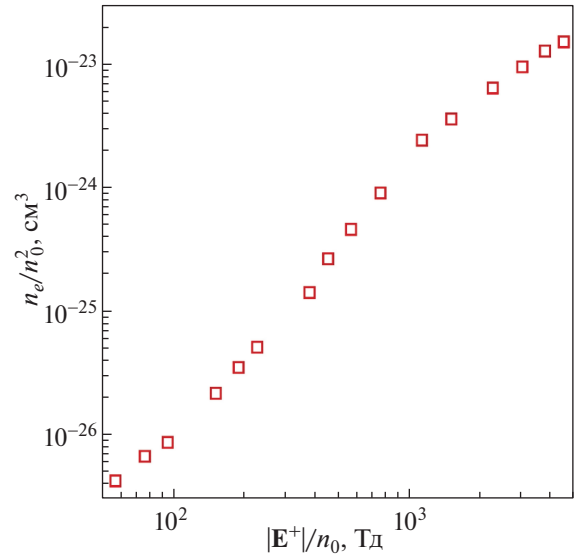


Рис. 7. Зависимость плотности электронов n_e/n_0^2 позади ФВИ от $|E^+|/n_0$.

мена достигал $\tau = 10^5$ при шаге сетки до $\Delta\tau = 0.05$. Наибольший временной домен применялся при величинах Y^+ , близких к порогу возбуждения ФВИ, когда время развития ФВИ максимально. Наименьший шаг пространственной сетки использовался вблизи максимальных величин Y^+ , когда толщина ФВИ близка к минимальной. Во всех случаях толщина и длительность ФВИ многократно превышали шаг пространственной и временной сетки вычислений.

Полученные решения для скорости движения установившегося ФВИ и плотности свободных электронов позади него приведены на рис. 6 и 7 в привычном, размерном представлении, как $V_{\text{ФВИ}}$ и n_e/n_0^2 , соответственно. На рис. 6 сплошная линия показывает для сравнения аналитическую оценку скорости отрицательного фронта исходя из безразмерного соотношения

$$v_{\text{ФВИ}} = |Y^+| + 2\sqrt{D_{\text{II}}f_{\text{бp}}(|Y^+|)}, \quad (10)$$

которое было получено в [9] в приближении локального поля модели сплошной среды при фиксированных величинах коэффициента диффузии и подвижности электронов. Здесь $v_{\text{ФВИ}}$ – безразмерная скорость ФВИ. При оценке мы применили в (10) величины $D_{\text{II}}(Y^+)$ в соответствии с рисунком 3. Результат такой оценки преобразован и приведен на рис. 6 в размерном представлении. Отметим, что сплошная кривая на рис. 6 показывает лишь качественный характер зависимости, но для количественных оценок в рамках модели ЛЭЭ зависимость (10) неточна.

Наряду со скоростью движения ФВИ и плотностью электронов позади него, в решениях (1) фиксировались также: а) пространственная толщина фронта $\Delta x_{\text{ФВИ}}$, определяемая по уровню 0.1–0.9 от максимальной напряженности поля перед фронтом, зависимость которой от напряженности поля показана на рис. 8 в размерном представлении, как $\Delta l_{\text{ФВИ}} \times n_0$, и б) разница между максимальной энергией электронов $\epsilon_{\text{макс}}^*$ в передней части фронта и энергией $\epsilon_{\text{мин}}^*$ позади него, до

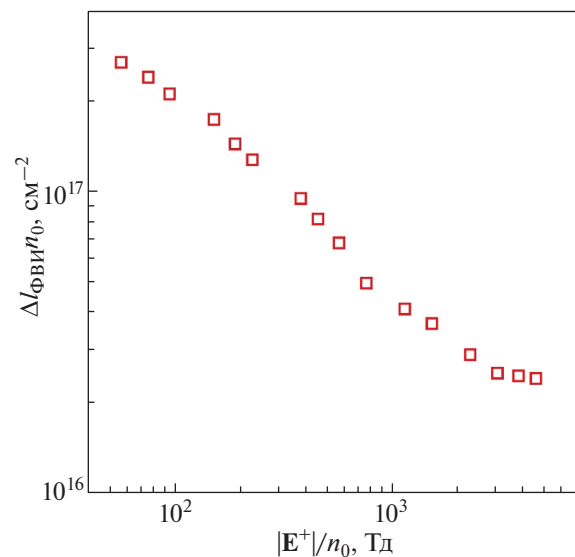


Рис. 8. Зависимость толщины ФВИ $\Delta l_{\text{ФВИ}} \times n_0$ от $|E^+|/n_0$.

которой энергия электронов релаксирует в результате прохождения фронта. Эти характеристики ФВИ использовались для оценки величин двух безразмерных параметров Q и S , определенных в [8] как

$$Q = v_m^* \times \Delta x_{\text{ФВИ}} / v_{\text{ФВИ}} \text{ и} \quad (11)$$

$$S = 2 \times \frac{\Delta x_{\text{ФВИ}}}{v_{\text{ФВИ}}} \times \frac{\sum_c k_c^* \epsilon_c^*}{\epsilon_{\text{макс}}^* - \epsilon_{\text{мин}}^*}. \quad (12)$$

Для соблюдения условия локального равновесия величины Q и S должны значительно превышать единицу, т.е. скорость релаксации электронов по частоте столкновений и потере ими энергии в столкновениях с атомами должна превышать скорость изменения наведенных внешним полем возмущений. Важно подчеркнуть, что Q и S поддаются оценке только при наличии данных о $\Delta x_{\text{ФВИ}}/v_{\text{ФВИ}}$ и $(\epsilon_{\text{макс}}^* - \epsilon_{\text{мин}}^*)$ фронта, получаемых в результате решения (1). На рис. 9 показан результат оценки величин Q и S для Хе в зависимости от $|E^+|/n_0$. Пограничная величина $|E^+|/n_0$, выше которой рассматриваемая модель становится физически малообоснованной по данным параметрам, определяется тем, какие величины Q и S принимаются за критерий. Чем больше величины Q и S , тем точнее выполняется условие локального равновесия. Например, при $Q = S = 10$ применение модели к Хе затруднительно в области $|E^+|/n_0 \geq 3450 \text{ Td}$.

4.2. Обсуждение результатов моделирования

В целом, выполненное численное моделирование характеристик ФВИ в Хе продолжает и дополняет аналогичное исследование Ne и Ag [5, 8]. Эти три газа объединены своей принадлежностью к одной группе одноатомных газов, свободных от эффекта прилипания электронов. В то же время, различия между ними значительны по размеру атома, структуре и энергии его возбужденных состояний, энергии ионизации атома. Все эти различия отражаются в сечениях столкновительного взаимодействия свободных электронов с атомом и их ионизационно-транспортных свойствах, и в частности, неизбежно проявляются в развитии ФВИ под действием электрического поля. В численных оценках ФВИ настоящей работы намеренно применена та же методика расчетов, что и в [8], с целью наиболее адекватного сопоставления полученных результатов с аналогичными для Ne и Ag.

Предложенные аппроксимации ионизационно-транспортных коэффициентов свободных электронов в Хе на основе совокупности известных экспериментальных и теоретических данных

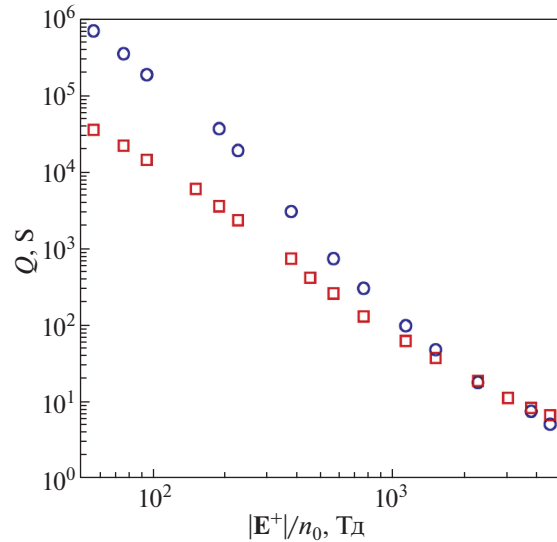


Рис. 9. Зависимость параметров Q (квадраты) и S (кружки) от $|E^+|/n_0$.

качественно согласуются с аналогичными в Ne и Ag: немонотонный характер зависимости коэффициента ионизации α/n_0 и подвижности электронов M от приведенной напряженности электрического поля $|E|/n_0$ (рисунки 1, 2); в целом растущая зависимость коэффициента диффузии D_{II} от $|E|/n_0$ в широком диапазоне, за исключением относительно узкого пика в области $10^{-2} < |E|/n_0 < 10^{-1} \text{ Td}$ (рис. 3). При этом количественные различия коэффициентов в газах значительны. Так, максимальный коэффициент ионизации атома Хе в 5.5 и 1.6 раза выше, чем Ne и Ag, соответственно; крутизна нисходящего участка зависимости подвижности M от $|E|/n_0$ в Хе в среднем в 4.8 и 3 раза больше, чем в Ne и Ag; крутизна восходящей зависимости D_{II} в Хе в среднем в 7 раз меньше и в 2.9 раза больше, чем в Ne и Ag, соответственно.

Конкретный выбор аппроксимаций ионизационно-транспортных коэффициентов продиктован стремлением выразить каждый коэффициент единственной функцией в наиболее широком диапазоне $|E|/n_0$, в котором эти коэффициенты имеют физический смысл и удовлетворяют условию локального равновесия. Принятые функции (5)–(7), несмотря на относительно громоздкий вид, лишь незначительно замедляют скорость вычислений, но более предпочтительны с точки зрения алгоритма вычислений, чем, например, представление каждого коэффициента несколькими функциями в разных поддиапазонах $|E|/n_0$. К недостаткам аппроксимаций можно отнести их заметное отклонение от эксперимен-

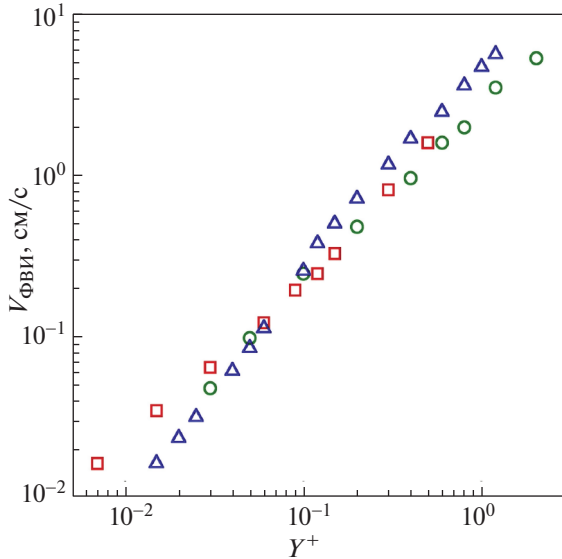


Рис. 10. Зависимость безразмерной скорости $v_{\text{ФВИ}}$ в трех газах от безразмерной напряженности приложенного электрического поля γ^+ . Квадраты – Ne, кружки – Ar, треугольники – Xe.

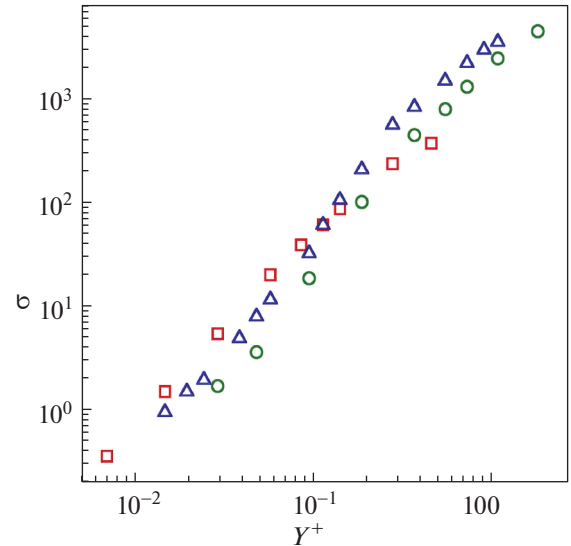


Рис. 11. Зависимость безразмерной плотности электронов σ позади ФВИ в трех газах от безразмерной напряженности приложенного электрического поля γ^+ . Квадраты – Ne, кружки – Ar, треугольники – Xe.

тальных и теоретических данных, огромный дефицит экспериментальных данных о подвижности электронов в области $|\mathbf{E}|/n_0 > 15$ Td и продольной компоненте тензора диффузии в области $|\mathbf{E}|/n_0 > 100$ Td для Xe, а также большой разброс в результатах измерений и вычислений транспортных коэффициентов. Отмеченные недостатки неизбежно снижают точность моделирования ФВИ, но устранимы по мере накопления и уточнения референсных баз данных и усовершенствования аппроксимаций.

В приведенных на рис. 4, 5 оценках безразмерных частот столкновений электрона с атомом Xe и скорости потери им энергии в столкновениях такого типа заметно отражается отличие атомов Xe от Ne и Ar по размеру, энергии возбуждения электронных уровней и ионизации атома, ионизационно-транспортных свойствах электронов. Так, вытекающая из рис. 4 суммарная частота упругих и неупругих столкновений достигает $6.9 \times 10^{-7} n_0 \text{ с}^{-1}$ в отличие от $5.2 \times 10^{-7} n_0 \text{ с}^{-1}$ и $1.7 \times 10^{-7} n_0 \text{ с}^{-1}$ в Ar и Ne, соответственно. При этом доля неупругих столкновений в Xe достигает $3.3 \times 10^{-7} n_0 \text{ с}^{-1}$ при $2 \times 10^{-7} n_0 \text{ с}^{-1}$ и $5.5 \times 10^{-8} n_0 \text{ с}^{-1}$ в Ar и Ne, соответственно, и составляет значительную часть суммарной частоты столкновений. Скорость потери энергии электроном при столкновениях, как вытекает из рисунка 5 и аналогичных данных [8] для Ar и Ne, определяется главным образом неупругими столкновениями и

оценивается как $7.1 \times 10^{-6} n_0 \text{ эВ/с}$ в Xe при $8 \times 10^{-7} n_0 \text{ эВ/с}$ и $3 \times 10^{-6} n_0 \text{ эВ/с}$ в Ar и Ne. Следует отметить более низкую точность оценки потерь энергии в Ar и Xe, чем в Ne, и связано это напрямую с параметром B в (9), который, по заключению авторов [31], удалось оценить в экспериментах с большой погрешностью.

Результаты моделирования скорости движения ФВИ и плотности свободных электронов позади него на рис. 6, 7 показывают их количественные величины в Xe. Для сравнения качественной зависимости этих характеристик от напряженности поля в трех газах удобнее воспользоваться безразмерным представлением скорости фронта и плотности электронов, показанным на рис. 10, 11. Видно, что в пределах всего диапазона моделирования шириной более 2 порядков величин по горизонтали и вертикали различие скоростей ФВИ между газами не превышает 2 раз и плотности электронов – 3 раз. В пределах такого разброса результатов можно говорить о некоторой общей “трубке решений” для трех газов, и возникает вопрос о том, в какой мере решения для газов другого типа соотносятся с такой “трубкой”.

На рис. 6–11 показаны формальные решения уравнений (1) в рамках модели ЛЭЭ во всем диапазоне моделирования. Однако диапазон обоснованного применения такой модели ограничен условием локального равновесия электронов. Результат оценки величин Q (11) и S (12) на рис. 9 показывает их уменьшение с ростом $|\mathbf{E}^+|/n_0$, а для соблюдения условия локального равновесия, со-

гласно их определению в [8], оба параметра должны многократно превышать единицу. Качество выполнения условия локального равновесия, а соответственно и обоснованность решений (1), зависят от того, какую величину этих параметров считать в качестве критерия. В [8] за основу принято условие $Q, S > 10$, и в таком случае применение модели в Ar и Ne проблематично при $|E^+|/n_0 \geq 1180$ Td. Аналогичное требование в применении к Xe приводит к ограничению $|E^+|/n_0 \geq 3450$ Td (рис. 9). Более высокую величину границы в Xe можно объяснить более высокой частотой упругих и неупругих столкновений, сопоставимой с Ar и Ne скоростью потери энергии электроном в столкновениях с атомом и меньшей величиной ($\epsilon_{\text{макс}}^* - \epsilon_{\text{мин}}^*$).

Оценка величин S для Ar и Ne в [8], наряду с верхней границей, обозначила и нижнюю границу $|E^+|/n_0 \approx 100$ Td, ниже которой применение модели также неправомерно ввиду резкого уменьшения в этой области скорости потери энергии электроном в неупругих столкновениях. В случае Xe такая граница в пределах диапазона моделирования не проявилась, хотя ее существование не вызывает сомнений. Объяснением может служить тот факт, что энергия возбужденных состояний атома Xe меньше, чем Ar и Ne, и поэтому искомая граница расположена ниже области моделирования ФВИ.

5. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В контексте динамики развития стримера в газах, выполнена численная 1D-оценка параметров ФВИ отрицательной полярности в Xe под действием приложенного однородного электростатического поля на основе диффузионно-дрейфовых уравнений сплошной среды в приближении ЛЭЭ. Предварительно построены аппроксимации ионизационно-транспортных коэффициентов свободного электрона в Xe аналитическими функциями в широком диапазоне приведенной напряженности поля $|E|/n_0 = 10^{-3} - 1.5 \times 10^4$ Td, в основу которых положены известные экспериментальные и теоретические данные. Получены численные решения для скорости движения ФВИ и его толщины, плотности свободных электронов позади него в диапазоне моделирования $|E|/n_0 \leq 4550$ Td. Исходя из решений о толщине ФВИ и потере энергии электроном в результате прохождения фронта, оценены величины двух ранее введенных безразмерных параметров, характеризующих отношение скорости релаксации электронов к скорости наведенных внешним

полем возмущений в газе и накладывающих ограничение на диапазон применения модели. Оба параметра должны значительно превосходить единицу и, в частности, при их равенстве 10 использование модели сплошной среды становится физически проблематичным при $|E|/n_0 \geq 3450$ Td по этим параметрам.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Hagelaar G.J.M., Pitchford I.C. // Plasma. Sources. Sci. Technol. 2005. V. 14. P. 722.
2. Li C., Ebert U., Hundsdorfer W. // J. Comput. Phys. 2010. V. 229. P. 200.
3. Li C., Teunissen J., Nool M., Hundsdorfer W., Ebert U. // Plasma. Sources. Sci. Technol. 2012. V. 21. 055019.
4. Dujko S., Markosyan A.H., White R.D., Ebert U. // J. Phys. D: Appl. Phys. 2013. V. 46. 475202.
5. Markosyan A.H., Teunissen J., Dujko S., Ebert U. // Plasma. Sources. Sci. Technol. 2015. V. 24. 065002.
6. Li C., Ebert U., Brok W.J.M., Hundsdorfer W. // J. Phys. D: Appl. Phys. 2008. V. 41. 032005.
7. Markosyan A.H., Dujko S., Ebert U. // J. Phys. D: Appl. Phys. 2013. V. 46. 475203.
8. Трысов К.К. // Физика плазмы. 2022. Т. 48. № 1. С. 54.
9. Ebert U., van Saarloos W., Caroli C. // Phys. Rev. E 1997. V. 55. P. 1530.
10. Hayashi M. // J. Phys D: Appl. Phys. 1983. V. 16. P. 581.
11. McEachran R.P., Stauffer A.D. // J. Phys B: At. Mol. Phys. 1984. V. 17. P. 2507.
12. Hayashi M. // J. Phys D: Appl. Phys. 1983. V. 16. P. 591.
13. Tkachev A.N., Yakovlenko S.I. // Central Europ. J. Phys. 2004. V. 2. № 4. P. 579.
14. Krishnakumar E., Srivastava S.K. // J. Phys. B. 1988. V. 21. № 6. P. 1055.
15. Lehrke H., Muller K.G. // Z. Naturforsch. 1976. V. 31A. P. 915.
16. Makabe T., Mori T. // J. Phys B: At. Mol. Phys. 1978. V. 11. P. 3785.
17. Hayashi M. // Bull. Amer. Phys. Soc. 1980. V. 26. P. 724.
18. Ткачев А.Н., Яковленко С.И. // Письма в ЖЭТФ. 2003. Т. 77. № 5. С. 264.
19. Ткачев А.Н., Яковленко С.И. // Письма в ЖТФ. 2003. Т. 29. № 16. С. 54.
20. Tkachev A.N., Yakovlenko S.I. // Central Europ. J. Phys. 2004. V. 2. № 1. P. 132.
21. Ткачев А.Н., Яковленко С.И. // Труды ИОФ РАН. 2007. Т. 63. С. 64.
22. Ward A.L. // J. Appl. Phys. 1962. V. 33. P. 2789.
23. Райзер Ю.П. Физика газового разряда. М.: Наука, 1992.
24. Dutton J. // J. Phys. Chem. Ref. Data. 1975. V. 4. P. 577.

25. *Bowe J.C.* // Phys. Rev. 1960. V. 117. P. 1411.
26. *Bowe J.C.* // Phys. Rev. 1960. V. 117. P. 1416.
27. *Бычков В.Л., Елецкий А.В., Смирнов Б.М.* // Химия плазмы. 1983. № 10. С. 146.
28. *Pack J.L., Voshall R.E., Phelps A.V., Kline L.E.* // J. Appl. Phys. 1992. V. 71. P. 5363.
29. *Meek J.M., Craggs J.D.* Electrical breakdown of gases. Oxford: Clarendon Press, 1953.
30. *Aleksandrov N.L., Kochetov I.V.* // J. Phys. D: Appl. Phys. 1996. V. 29. P. 1476.
31. *Opal C.B., Peterson W.K., Beatty E.C.* // J. Chem. Phys. 1971. V. 55. P. 4100.
32. *Li C., Brok W.J.M., Ebert U., Mullen J.J.A.M.* // J. Appl. Phys. 2007. V. 101. 123305.
33. *Robson R.E., White R.D., Petrovic Z.Lj.* // Rev. Mod. Phys. 2005. V. 77. P. 1303.
34. *White R.D., Robson R.E., Dujko S., Nicolotopoulos P., Li B.* // J. Phys. D: Appl. Phys. 2009. V. 42. 194001.
35. *Phelps A.V., Pitchford I.C.* // Phys. Rev. A. 1985. V. 31. P. 2932.