

## РАСЧЕТ ПАРАМЕТРОВ ЛАВИНЫ ЭЛЕКТРОНОВ В НЕОНЕ В СИЛЬНЫХ ЭЛЕКТРИЧЕСКИХ ПОЛЯХ

© 2023 г. Е. И. Бочков\*

Российский федеральный ядерный центр – Всероссийский научно-исследовательский институт  
экспериментальной физики, Саров, Нижегородская область, Россия

\*e-mail: e\_i\_bochkov@mail.ru

Поступила в редакцию 30.11.2022 г.

После доработки 10.01.2023 г.

Принята к публикации 15.01.2023 г.

Методом Монте-Карло рассчитаны зависимости кинетических и транспортных коэффициентов электронов в неоне в диапазоне значений приведенной напряженности поля  $E/N$  от 15 до 1500 Тд. Рассчитанные зависимости сравниваются с результатами, полученными решением кинетического уравнения в приближении Лоренца. Показано, что данное приближение нарушается в сильных электрических полях, что приводит к заметным отличиям в значениях транспортных коэффициентов, рассчитанных с использованием обоих методов. С целью верификации расчетов выполнено сравнение с имеющимися в литературе данными измерений. Также показано, что диффузионно-дрейфовое приближение плохо описывает пространственно-временную эволюцию концентрации электронов в неоне в полях больших  $\approx 500$  Тд.

**Ключевые слова:** метод Монте-Карло, лавина электронов, электрическое поле, неон, транспортные и кинетические коэффициенты

DOI: 10.31857/S0367292123600048, EDN: FKWEQV

### 1. ВВЕДЕНИЕ

В задачах по численному моделированию газового разряда необходимо рассчитывать кинетику электронов в самосогласованном электрическом поле. Наиболее полное решение возможно в терминах уравнения Больцмана, которое в общем случае представляет собой интегро-дифференциальное уравнение для функции распределения электронов (ФРЭ) в шестимерном фазовом пространстве  $(\mathbf{r}, \mathbf{p})$ . Для решения уравнения Больцмана в общем случае требуются вычислительные ресурсы, намного превышающие возможности современных персональных компьютеров. По этой причине описание развития газовых разрядов ведется в терминах уравнений для моментов ФРЭ [1]. Так, эволюция концентрации электронов  $n_e$  в пространстве и во времени описывается уравнением непрерывности

$$\frac{\partial n_e}{\partial t} + \nabla \cdot \Gamma_e = R_e, \quad (1)$$

где  $\Gamma_e$  – поток электронов,  $R_e$  – источник или сток электронов. Обычно поток электронов аппроксимируется диффузионно-дрейфовым уравнением

$$\Gamma_e = -\mu_e \mathbf{E} n_e - D_e \nabla n_e, \quad (2)$$

где  $\mathbf{E}$  – вектор напряженности электрического поля,  $n_e$  – концентрация электронов,  $\mu_e$  и  $D_e$  – коэффициенты подвижности и диффузии электронов. В общем случае коэффициент диффузии электронов является тензором, и в отсутствии магнитного поля имеет два компонента: продольный  $D_L$  и поперечный  $D_T$  относительно вектора  $\mathbf{E}$ .

Источник или сток электронов  $R_e$  в уравнении (1) определяется реакциями, протекающими в плазме. В случае неона это реакции ударной ионизации атомов электронами и рекомбинации положительных ионов с электронами:

$$R_e = k_{ion} N n_e - k_{pe} n_p n_e, \quad (3)$$

здесь  $N$  – концентрация атомов,  $k_{ion}$  – коэффициент ионизации,  $k_{pe}$  – коэффициент рекомбинации,  $n_p$  – концентрация положительных атомарных или молекулярных ионов (в неоне молекулярные ионы могут образовываться в процессе  $\text{Ne}^+ + \text{Ne} + \text{Ne} \rightarrow \text{Ne}_2^+ + \text{Ne}$ ). Здесь мы не будем конкретизировать тип процесса рекомбинации (диссоциативная рекомбинация, тройная рекомбинация, фоторекомбинация) поскольку далее этот процесс рассматриваться не будет. Отметим лишь, что константы различных процессов рекомбинации зависят от температуры электронов.

В отсутствии рекомбинации для решения системы уравнений (1)–(2) необходимо знание транспортных коэффициентов  $\mu_e$  и  $D_e$  и скорости ионизации  $k_{ion}$ , которые являются интегралами ФРЭ. Чаще всего при моделировании газовых разрядов используется приближение локального поля, в рамках которого полагается, что коэффициенты  $\mu_e$ ,  $D_e$  и  $k_{ion}$  являются функциями локальной приведенной напряженности поля  $E/N$ :

$$\begin{aligned} \mu_e &= \mu_e(E/N), & D_e &= D_e(E/N), \\ k_{ion} &= k_{ion}(E/N). \end{aligned} \quad (4)$$

Данные зависимости могут быть рассчитаны теоретически методом Монте-Карло (МК), либо с помощью уравнения Больцмана, или измерены экспериментально. Однако применение в уравнениях (1)–(2) экспериментальных зависимостей сталкивается с трудностями. Так, в экспериментах невозможно прямо получить некоторые величины. Вместо частоты ионизации ( $k_{ion}N$ ) измеряется первый коэффициент Таунсенда  $\alpha_{ion}$  т.е. количество электронов рождаемых на единице длины, а вместо коэффициентов продольной  $D_L$  и поперечной диффузии  $D_T$  измеряются отношения  $D_L/\mu_e$  и  $D_T/\mu_e$ . Также значения дрейфовой скорости электронов, полученные в разных типах экспериментов: time-of-flight (TOF), steady-state Townsend (SST), pulsed Townsend (PT), могут существенно отличаться друг от друга [2]. Естественно возникает вопрос о том, какие экспериментальные данные можно использовать в уравнениях (1)–(2). Кроме того, в работе [3] показано, что для гелия имеющиеся экспериментальные данные в области больших значений  $E/N$  содержат значительную ошибку, обусловленную тем, что в экспериментах в сильных полях не достигается равновесия ансамбля электронов с полем. Поскольку неон часто используется в различных газоразрядных устройствах, а в области больших значений  $E/N$ , экспериментальные данные могут содержать заметную ошибку, то возникает необходимость верификации экспериментальных значений транспортных и кинетических коэффициентов электронов в неоне.

Поскольку в [3] было установлено, что в гелии диффузионно-дрейфовое приближение для концентрации электронов становится неприменимым в полях больших  $\approx 150$ – $200$  Тд, то целесообразно определить область применимости данного приближения и для неона. Также с целью верификации нашей МК-модели рассчитаны значения дрейфовой скорости, первого коэффициента Таунсенда и отношений  $D_L/\mu_e$  и  $D_T/\mu_e$  для экспериментальных условий и выполнено сравнение с имеющимися в литературе данными измерений.

Расчеты транспортных и кинетических коэффициентов электронов в неоне выполнялись и ранее. Например, в работе [4] были выполнены

расчеты по программе BOLSIG+ с различными наборами сечений. Эта программа часто используется для расчетов транспортных и кинетических коэффициентов электронов в различных газах, в ней решается кинетическое уравнение Больцмана в рамках двучленного приближения для ФРЭ (приближение Лоренца) [5]. Как известно в сильных электрических полях двучленное приближение нарушается [6], поэтому целесообразно сравнить результаты наших расчетов с расчетами BOLSIG+.

Целью данной работы является расчет методом МК-значений дрейфовой скорости, частоты ионизации, коэффициентов продольной и поперечной диффузии лавины электронов в неоне, которые непосредственно можно использовать в уравнениях (1)–(2).

## 2. ПАРАМЕТРЫ ЛАВИНЫ ЭЛЕКТРОНОВ

Подробный алгоритм программы расчета транспорта электронов в электрическом поле на основе метода Монте-Карло (МК) изложен в [7]. Здесь мы приведем лишь данные для сечений взаимодействия электронов с атомами неона. Всего учитываются 11 процессов взаимодействия электронов с атомами, которые перечислены в таблице 1. Интегральное и дифференциальное сечения упругого рассеяния в области энергий электрона меньших 50 эВ взяты из [8]; для области 50 эВ–20 кэВ сечения рассчитаны по программе ELSEPA [9]. Полное сечение ионизации в области энергий электрона меньших 40 эВ взято из [10], в диапазоне 40–1000 эВ из [11], в области 1–20 кэВ использованы данные [12]. Интегральные сечения возбуждения взяты из базы данных Biagi v7.1 [13]. Интегральные сечения различных процессов, использованные в нашей модели, приведены на рис. 1. Внизу на этом рисунке показано сравнение полного сечения рассеяния, полученного путем суммирования всех сечений, использованных в нашей модели, с рекомендуемыми значениями из книги [14].

Дифференциальное сечение ионизации было рассчитано по нерелятивистской VED-модели Кима и Рада [15]. В области энергий электрона меньших 50 эВ дважды дифференциальные сечения ионизации по углу вылета и энергии электрона взяты из [16]. В области больших энергий сечения рассчитаны по формулам первого Борновского приближения, так же как это было сделано для гелия [7], путем масштабирования сечений, рассчитанных для атома водорода (по формуле (13) из [17]), при этом использовались следующие параметры: число электронов на оболочке  $2p$   $n = 6$ , средняя кинетическая энергия электронов на оболочке  $2p$   $U = 116.02$  эВ [15]. Кроме того, в нашей модели полагалось, что в процессе возбуждения электронных уровней атомов, электроны

**Таблица 1.** Элементарные процессы с участием электронов в неоне

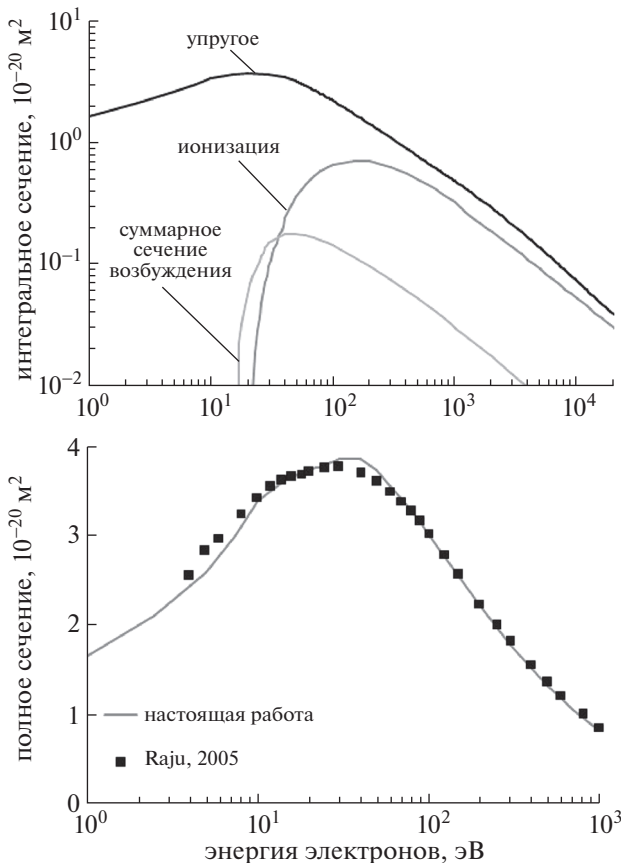
Тип столкновения	Реакция	Пороговая энергия, эВ
Упругое рассеяние	$e + \text{Ne} \rightarrow e + \text{Ne}$	0
Возбуждение электронных уровней	$e + \text{Ne} \rightarrow e + \text{Ne}^*(1s_5)$	16.618
	$e + \text{Ne} \rightarrow e + \text{Ne}^*(1s_4)$	16.67
	$e + \text{Ne} \rightarrow e + \text{Ne}^*(1s_3)$	16.715
	$e + \text{Ne} \rightarrow e + \text{Ne}^*(1s_2)$	16.857
	$e + \text{Ne} \rightarrow e + \text{Ne}^*(2p_{10})$	18.381
	$e + \text{Ne} \rightarrow e + \text{Ne}^*(2p_1)$	18.965
	$e + \text{Ne} \rightarrow e + \text{Ne}^*(2s)$	19.663
	$e + \text{Ne} \rightarrow e + \text{Ne}^*(3d + 3s)$	20.033
	$e + \text{Ne} \rightarrow e + \text{Ne}^*(3p)$	20.2
Ионизация	$e + \text{Ne} \rightarrow e + e + \text{Ne}^+$	21.56

рассеиваются точно также как в процессе упругого рассеяния. Поскольку, полное сечение возбуждения гораздо меньше сечений упругого рас-

сеяния и ионизации (как можно видеть на рис. 1), то данное упрощение не будет влиять на результаты расчетов.

Расчеты параметров лавины электронов в неоне по методу МК были выполнены в той же постановке, что и для гелия [3]. В начальный момент времени  $t = 0$  в точке  $\mathbf{r} = (0, 0, 0)$  в однородном электрическом поле  $\mathbf{E}(\mathbf{r}) = -Ee_z$  задавался изотропный моноэнергетический источник, содержащий 1000 электронов с энергией  $\epsilon_0 = 1$  эВ. Концентрация атомов неона полагалась равной числу Лошмидта  $N_L$ , и атомы считались неподвижными (температура газа равна нулю). Численное моделирование велось до момента времени  $t_{run}$ , когда число электронов достигало значения  $\approx 3 \times 10^6$ , данное число достаточно, чтобы за время моделирования достиглось равновесие ансамбля электронов с полем, т.е. функция распределения электронов по энергиям становилась стационарной. В табл. 2 приведены рассчитанные зависимости средней энергии электронов  $\bar{\epsilon}$ , дрейфовой скорости  $v_d$ , коэффициентов диффузии  $D_T N_L$  и  $D_L N_L$  и ионизации  $k_{ion}$  от приведенной напряженности поля в диапазоне от 15 до 1500 Тд. Формулы для расчета данных величин приведены в [3].

На рис. 2 показана функция распределения электронов по энергиям (ФРЭЭ) в широком диапазоне значений  $E/N$ . Для сравнения на данном рисунке также приведено распределение Максвелла со значением средней энергии электронов из МК-расчетов. Отметим интересную особенность, что если в случае гелия рассчитанное энергетическое распределение электронов в области  $E/N \leq 150$  Тд очень близко к распределению Максвелла [3], то в случае неона в области  $E/N \leq$



**Рис. 1.** Интегральные сечения упругого рассеяния, возбуждения и ионизации (сверху), полное сечение рассеяния (снизу).

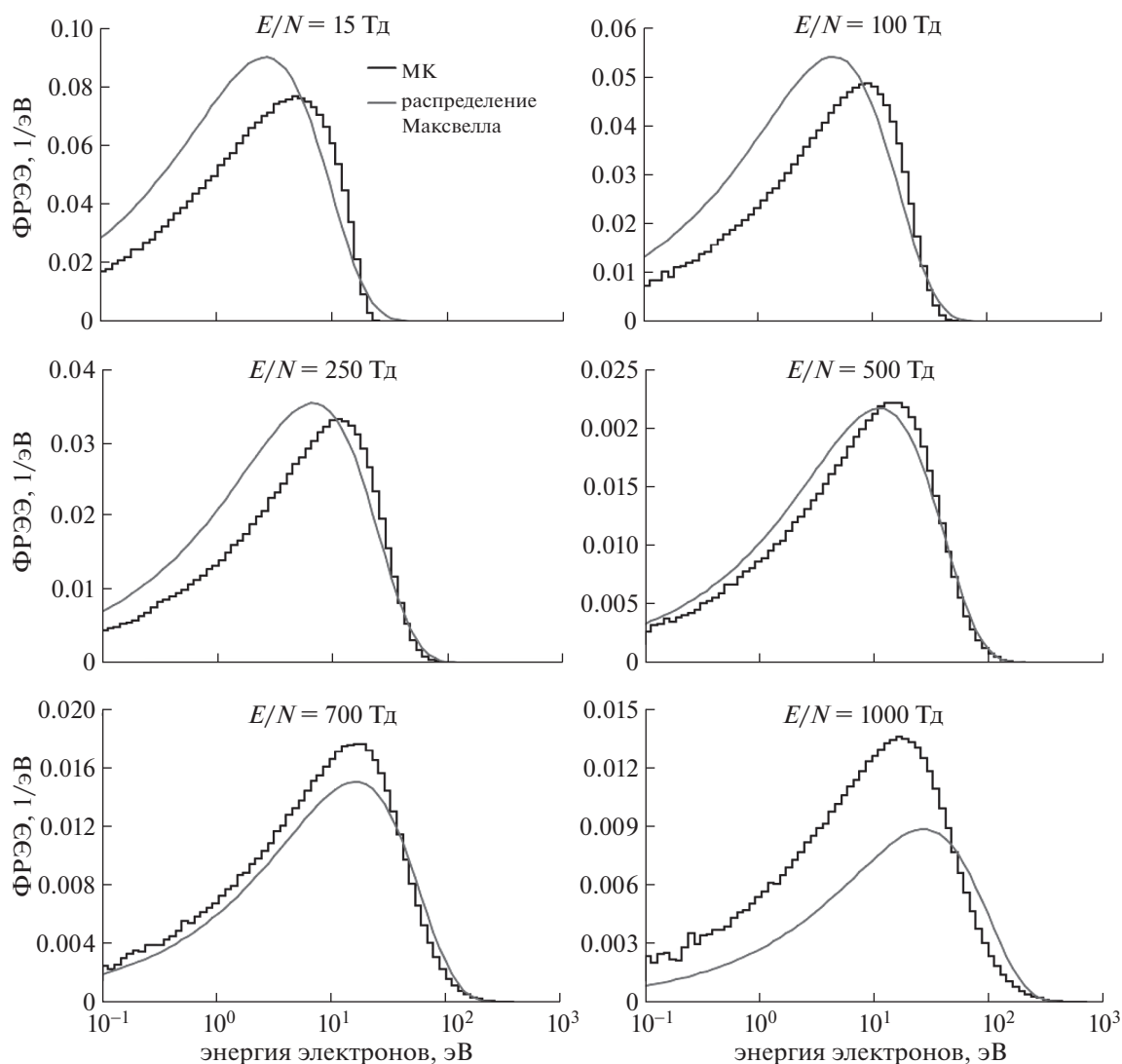


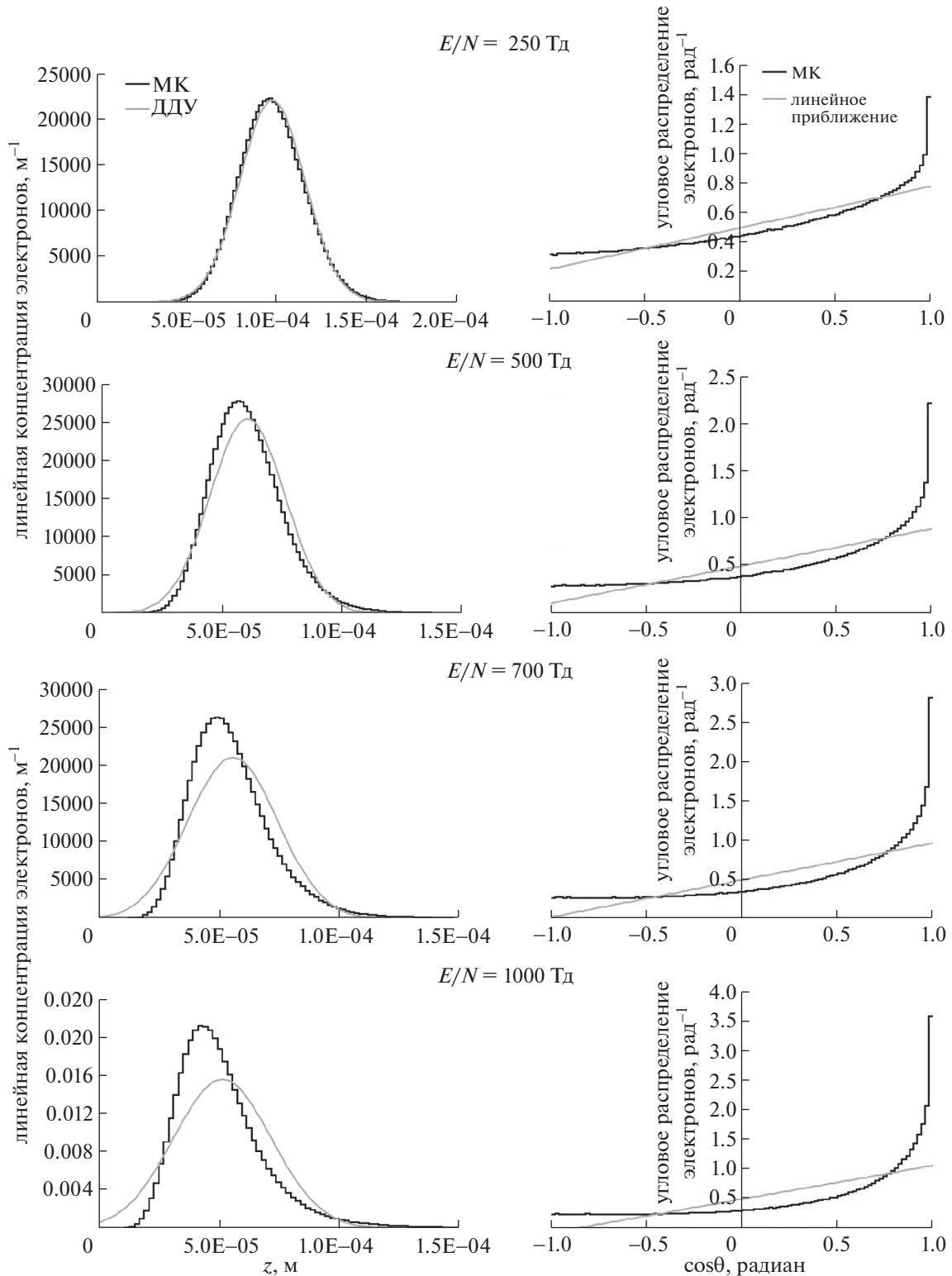
Рис. 2. Энергетическое распределение электронов.

$\leq 250$  Тд распределение Максвелла не достаточно точно описывает расчетные данные в этой области. При  $E/N = 500$  Тд, наблюдается хорошее согласие, но в области больших значений  $E/N$  распределение Максвелла снова не согласуется с расчетными данными.

Как говорилось во Введении, в случае гелия диффузионно-дрейфовое приближение для расчета концентрации электронов становилось неприменимым в полях больших  $\approx 150\text{--}200$  Тд. Это было связано с появлением большого числа быстрых электронов, энергия которых заметно выше среднего значения. При этом эти быстрые электроны опережали основную массу электронов в лавине. В результате угловое распределение электронов становилось существенно анизотропным, и таким образом нарушалось приближение Лоренца, — двучленное разложение функции распределения электронов (ФРЭ) по углам. На рис. 3

для момента времени  $t_{run}$  приведено угловое распределение электронов, а также распределение линейной концентрации электронов вдоль оси симметрии лавины, которое для удобства представления поделено на число электронов в момент времени  $t_{run}$ . Пространственное распределение электронов сравнивается с распределением, полученным из решения диффузионно-дрейфовых уравнений (ДДУ) (1)–(2) [3], с коэффициентами, полученными в МК-расчетах.

Как можно видеть на рис. 3 в неоне диффузионно-дрейфовое приближение применимо вплоть до  $E/N = 500$  Тд, хотя при этом значении угловое распределение электронов уже заметно анизотропно. В области больших полей уже наблюдаются заметные отличия между решением ДДУ- и МК-расчетами: здесь мы видим, что появляется большое число быстрых электронов, которые опережают основную массу электронов, и



**Рис. 3.** Пространственное распределение электронов вдоль оси симметрии лавины (слева), угловое распределение (справа) в момент времени  $t_{run}$ .

пространственное распределение становится несимметричным и вытянутым вдоль направления действия электрической силы.

Выполним теперь сравнение полученных нами данных с результатами расчетов по программе BOLSIG+ [5]. Расчеты по этой программе были

Таблица 2. Рассчитанные параметры лавины электронов в неоне

$E/N$ , Тд	$\bar{\epsilon}$ , эВ	$v_d$ , км/с	$D_L N_L$ , $10^{25}$ 1/(м с)	$D_T N_L$ , $10^{25}$ 1/(м с)	$k_{ion}$ , м <sup>3</sup> /с
15	8.07	60.2	2.0	2.6	$1.64 \times 10^{-18}$
20	8.49	78.1	2.0	2.6	$4.89 \times 10^{-18}$
25	8.89	95.5	2.0	2.6	$1.05 \times 10^{-17}$
30	9.26	113	2.0	2.6	$1.85 \times 10^{-17}$
40	9.96	145	2.1	2.7	$4.17 \times 10^{-17}$
50	10.6	176	2.0	2.6	$7.39 \times 10^{-17}$
60	11.2	207	2.1	2.7	$1.16 \times 10^{-16}$
70	11.8	236	2.1	2.7	$1.65 \times 10^{-16}$
80	12.4	264	2.2	2.7	$2.24 \times 10^{-16}$
90	12.9	292	2.2	2.7	$2.89 \times 10^{-16}$
100	13.4	318	2.3	2.7	$3.61 \times 10^{-16}$
125	14.7	386	2.3	2.7	$5.78 \times 10^{-16}$
150	15.9	448	2.4	2.8	$8.26 \times 10^{-16}$
200	18.2	573	2.7	2.8	$1.42 \times 10^{-15}$
250	20.5	704	3.2	2.9	$2.15 \times 10^{-15}$
300	22.9	833	3.7	3.1	$2.95 \times 10^{-15}$
350	25.3	968	4.5	3.2	$3.84 \times 10^{-15}$
400	27.8	1102	5.2	3.6	$4.77 \times 10^{-15}$
500	33.5	1387	7.4	4.0	$6.80 \times 10^{-15}$
600	40.2	1729	12.5	5.2	$8.91 \times 10^{-15}$
700	48.2	2062	17.6	6.3	$1.11 \times 10^{-14}$
800	57.9	2356	23.3	7.7	$1.31 \times 10^{-14}$
900	69.0	2639	27.9	8.9	$1.50 \times 10^{-14}$
1000	81.9	2910	31.4	9.7	$1.68 \times 10^{-14}$
1100	95.9	3192	36.0	11.0	$1.86 \times 10^{-14}$
1200	111.3	3404	39.1	11.5	$2.02 \times 10^{-14}$
1300	128.1	3632	42.1	12.4	$2.17 \times 10^{-14}$
1400	146.2	3896	46.3	13.3	$2.31 \times 10^{-14}$
1500	165.7	4087	51.0	13.7	$2.43 \times 10^{-14}$

выполнены с тем же набором сечений, который использовался в нашей МК-модели с той лишь поправкой, что в программе BOLSIG+ вместо полного сечения упругого рассеяния использовалось транспортное сечение. Также отметим, что расчеты по BOLSIG+ выполнены с использованием опции “gradient expansion with PT”, которая позволяет вычислять два типа дрейфовой скорости (подвижности) электронов “flux” и “bulk”. Разница между ними заключается в том, что тип дрейфовой скорости электронов “flux” это равновесная средняя скорость ансамбля электронов, а “bulk” это равновесная скорость центра масс ла-

вины электронов [18]. В отсутствии ионизации значения данных величин будут совпадать. Отметим, что в табл. 2 приведены значения скорости центра масс лавины электронов [3]. На рис. 4 в диапазоне  $E/N = 15-1000$  Тд приведены зависимости средней энергии, подвижности и дрейфовой скорости электронов, а также коэффициента ионизации, рассчитанные методом МК и по программе BOLSIG+. Как можно видеть, в области  $E/N < 150$  Тд значения подвижности “bulk” электронов, полученные по обоим методикам, близки между собой, относительная разница здесь не превышает 10%, но с ростом  $E/N$  разница увели-

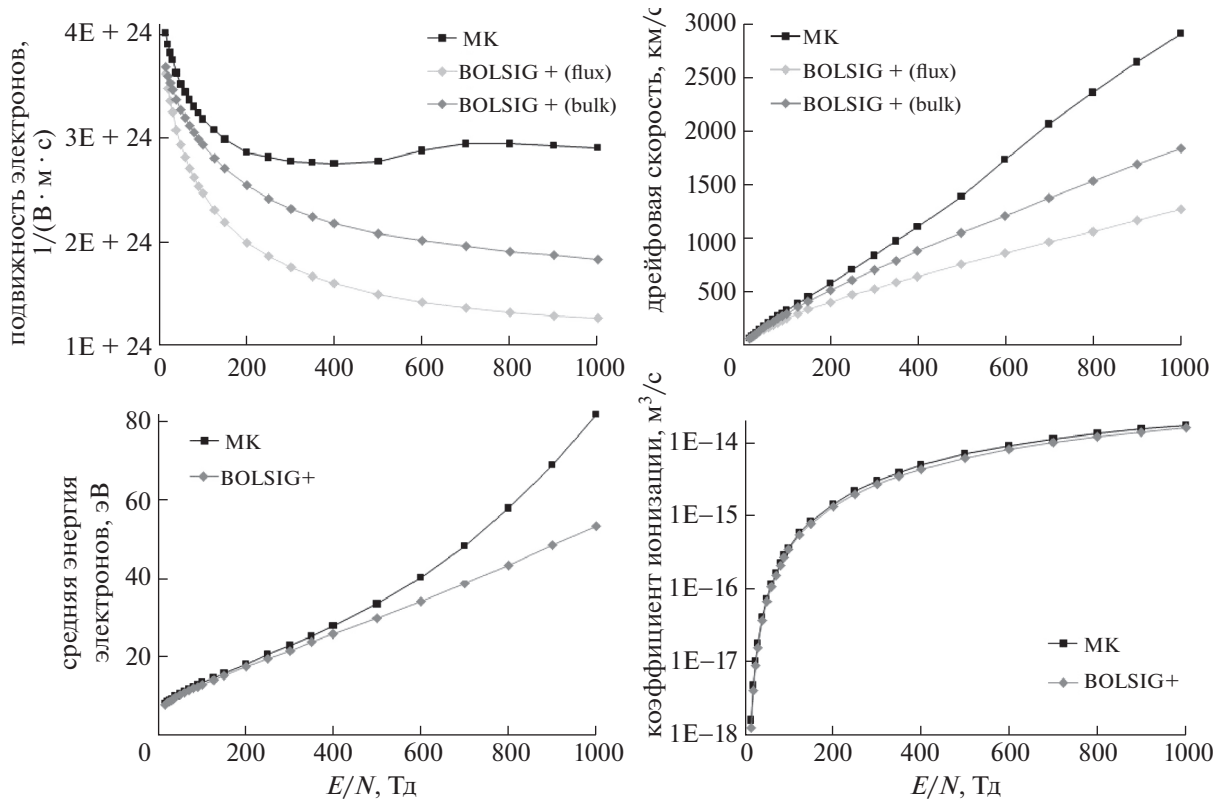


Рис. 4. Сравнение расчетов по МК-модели и по программе BOLSIG+.

чивается, достигая почти 60% при  $E/N = 1000$  Тд. Значения средней энергии электронов, рассчитанные методом МК, заметно превышают значения, полученные с помощью BOLSIG+, начиная с  $E/N \approx 500$  Тд, и эта разница также увеличивается с ростом  $E/N$ , достигая примерно 50% при  $E/N = 1000$  Тд. Эта связано с тем, что как говорилось выше, при больших значениях  $E/N$  нарушается приближение Лоренца. Отметим также, что относительная разница в значениях коэффициента ионизации, вычисленных по обоим методикам, не превышает 25%.

### 3. СРАВНЕНИЕ С ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫМИ ДАННЫМИ

К сожалению, в отличие от гелия, для неона экспериментальные данные по транспортным коэффициентам электронов в области средних и больших значений  $E/N$  крайне скудны. Имеются измерения [19] дрейфовой скорости электронов и отношения  $D_L/\mu_e$  в диапазоне значений приведенной напряженности  $E/N$  от 1.4 до 339 Тд, выполненные методом TOF, а также измерение [20] отношения  $D_T/\mu_e$  в области  $1.41 < E/N < 5650$  также в рамках эксперимента TOF. Что касается измерений первого коэффициента Таунсенда  $\alpha_{ion}$  в неоне, то здесь имеется достаточное количество

экспериментальных данных [21–24], в том числе и в области больших значений  $E/N$ .

Для сравнения с экспериментальными данными были рассчитаны величина первого коэффициента Таунсенда  $\alpha_{ion}$  и дрейфовой скорости  $v_{SST}$  для условий эксперимента “steady-state Townsend” (SST), а также дрейфовая скорость  $v_{TOF}$  и отношения  $D_L/\mu_e$  и  $D_T/\mu_e$  для условий эксперимента “time-of-flight” (TOF). Расчеты проводились в той же постановке, что и для гелия [3], формулы для расчета величин  $\alpha_{ion}$ ,  $v_{SST}$ ,  $v_{TOF}$ ,  $D_L/\mu_e$  и  $D_T/\mu_e$  приведены в той же работе. Значения рассчитанных коэффициентов приведены в табл.3.

На рис. 5 рассчитанная зависимость коэффициента Таунсенда сравнивается с экспериментальными данными [21–24]. Рассчитанные значения  $\alpha_{ion}$  очень хорошо согласуются с данными всех измерений в области относительно небольших значений  $E/N$ , в отличие от гелия, для которого в области малых полей экспериментальные значения  $\alpha_{ion}$  заметно превосходили теоретические [3], что, скорее всего, связано с влиянием реакций Пеннинга, — если энергия возбуждения атома гелия превышает энергию ионизации атомарной или молекулярной примеси  $A$ , то могут протекать реакции  $He^* + A \rightarrow He + A^+ + e^-$  с

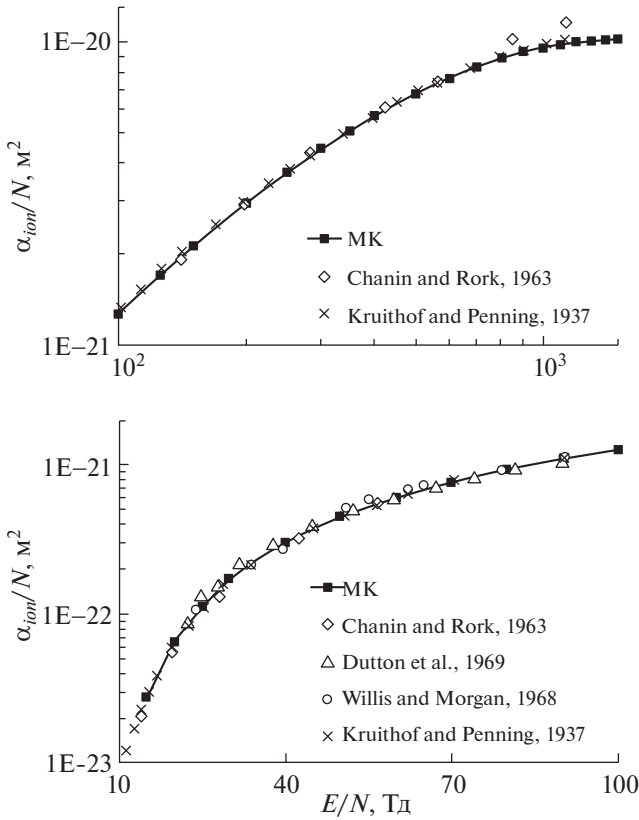


Рис. 5. Первый коэффициент Таунсенда  $\alpha_{ion}/N$  в области больших полей (сверху) и в области малых полей (снизу).

ионизацией примеси. В области средних и больших  $E/N$  рассчитанные значения коэффициента Таунсенда хорошо согласуются с данными [22] во всем исследованном диапазоне значений  $E/N$ , и с данными [21] в области  $E/N < 600$  Тд, но при больших  $E/N$  экспериментальные значения из [21] заметно превосходят рассчитанные значения. Подобный результат был получен и для гелия [3]. Это расхождение можно объяснить тем, что в эксперименте [21] в области полей  $E/P > > 100$  В/(см · торр) (288 Тд) не достигалось равновесие электронов с полем.

На рис. 6 сравниваются рассчитанные и измеренные зависимости дрейфовой скорости и коэффициентов  $D_L/\mu_e$  и  $D_T/\mu_e$ . Теоретические значения  $v_{d,TOF}$  очень хорошо согласуются с измеренными в работе [19] в диапазоне  $15 \leq E/N < 200$  Тд, но в области больших полей экспериментальные значения заметно превышают теоретические, и относительная разница составляет примерно 10%, что превышает заявленную в [19] точность измерений 5%. Подобное поведение наблюдается и для отношения  $D_L/\mu_e$ . В области  $E/N \geq 200$  Тд экспериментальные значения превышают теоретические, и относительная разница также больше

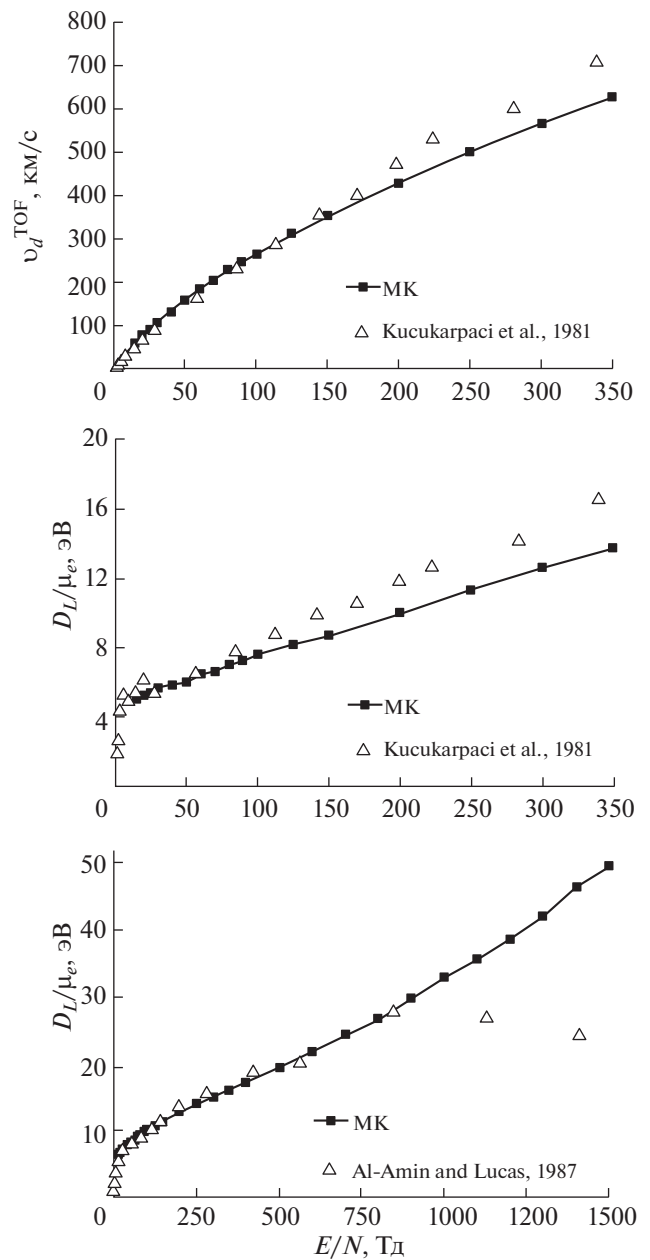


Рис. 6. Дрейфовая скорость и отношения  $D_L/\mu_e$  и  $D_T/\mu_e$ .

заявленной точности измерений 15%. Отметим, что для гелия наблюдалось хорошее согласие расчетных и экспериментальных данных во всем исследованном в эксперименте [19] диапазоне значений  $E/N$ . Поскольку для неона (кроме единственной работы [19]) отсутствуют экспериментальные данные для величин  $v_{d,TOF}$  и  $D_L/\mu_e$ , то мы не можем ответить на вопрос о причинах наблюдаемого расхождения расчетных и экспериментальных значений в области  $E/N \geq 200$  Тд; вопрос о том, связано ли это с погрешностью экспе-



**Таблица 3.** Параметры лавины электронов для экспериментов SST и TOF

$E/N$ , Тд	$v_{\text{TOF}}$ , км/с	$v_{\text{SST}}$ , км/с	$D_T/\mu_e$ , эВ	$D_L/\mu_e$ , эВ	$\alpha_{\text{ion}}/N$ , м <sup>2</sup>
15	59.1	57.6	6.53	5.03	$2.73 \times 10^{-23}$
20	75.6	72.9	6.88	5.19	$6.42 \times 10^{-23}$
25	91.1	87	7.41	5.40	$1.13 \times 10^{-22}$
30	106	100	7.35	5.66	$1.70 \times 10^{-22}$
40	133	124	7.96	5.91	$3.01 \times 10^{-22}$
50	158	146	8.36	6.03	$4.47 \times 10^{-22}$
60	182	166	8.81	6.49	$6.06 \times 10^{-22}$
70	205	185	9.21	6.65	$7.64 \times 10^{-22}$
80	226	202	9.51	7.03	$9.34 \times 10^{-22}$
90	246	219	9.88	7.32	$1.10 \times 10^{-21}$
100	264	235	10.3	7.61	$1.27 \times 10^{-21}$
125	311	271	10.8	8.15	$1.70 \times 10^{-21}$
150	352	305	11.6	8.72	$2.12 \times 10^{-21}$
200	429	362	12.8	10.0	$2.94 \times 10^{-21}$
250	500	420	14.1	11.3	$3.71 \times 10^{-21}$
300	565	472	15.0	12.6	$4.42 \times 10^{-21}$
350	628	523	16.1	13.7	$5.09 \times 10^{-21}$
400	686	571	17.2	15.0	$5.69 \times 10^{-21}$
500	794	665	19.5	17.5	$6.73 \times 10^{-21}$
600	897	758	21.7	20.1	$7.57 \times 10^{-21}$
700	1000	853	24.3	22.4	$8.27 \times 10^{-21}$
800	1085	943	26.7	24.9	$8.83 \times 10^{-21}$
900	1180	1040	29.8	27.1	$9.26 \times 10^{-21}$
1000	1260	1130	32.8	29.1	$9.57 \times 10^{-21}$
1100	1340	1230	35.6	32.0	$9.80 \times 10^{-21}$
1200	1440	1340	38.7	34.4	$1.00 \times 10^{-20}$
1300	1520	1450	42.1	37.6	$1.01 \times 10^{-20}$
1400	1600	1560	46.4	41.2	$1.02 \times 10^{-20}$
1500	1680	1690	49.6	42.6	$1.02 \times 10^{-20}$

римента, которая выше заявленной в [19], или обусловлено недостатками представленной здесь теоретической модели, остается открытым.

На рис. 6 также видно, что расчетные значения  $D_T/\mu_e$  хорошо согласуются с данными [20] в области  $E/N < 850$  Тд, но в более сильных полях теоретические значения заметно превосходят экспериментальные и качественное поведение кривых отличается. Это связано с тем, что в эксперименте не достигалось равновесия электронов с полем в области больших значений  $E/N$ , о чем авторы

[20] упоминают в своей статье. Отметим, что экспериментальные данные [20] приведены в книге [14] в качестве рекомендованных значений  $D_T/\mu_e$  в диапазоне  $1.41 < E/N < 5650$  без каких-либо замечаний о том, что в области сильных полей эти экспериментальные данные могут быть недостоверны.

## ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Методом Монте-Карло вычислены зависимости от приведенной напряженности поля  $E/N$  в диапазоне от 15 до 1500 Тд средней энергии электронов, дрейфовой скорости электронов, частоты ионизации, а также коэффициентов продольной и поперечной диффузии, которые рекомендуются для использования в расчетах эволюции концентрации электронов путем решения диффузионно-дрейфового уравнения. Выполнено сравнение коэффициентов, рассчитанных методом Монте-Карло (МК), и из решения кинетического уравнения Больцмана по программе BOLSIG+. Показано, что основное отличие в поведении зависимостей, рассчитанных по обоим методикам, связано с неприменимостью в области больших значений  $E/N$  используемого в BOLSIG+ двухчленного приближения для угловой части ФРЭ. Отмечена также ограниченность применимости диффузионно-дрейфового приближения к расчету пространственно временной эволюции электронов в сильных электрических полях, где при очень высоких значениях  $E/N$  необходимо учитывать появление большого числа быстрых электронов.

С целью верификации модели МК вычислены значения дрейфовой скорости  $v_{\text{TOF}}$ , отношений  $D_T/\mu_e$  и  $D_L/\mu_e$ , а также коэффициента ионизации Таунсенда  $\alpha_{\text{ion}}/N$ , которые сравнивались с данными измерений. Рассчитанные значения коэффициента Таунсенда согласуются с экспериментальными данными во всем исследованном диапазоне значений  $E/N$ . Рассчитанные значения дрейфовой скорости и отношения  $D_L/\mu_e$  в области  $E/N < 200$  Тд хорошо согласуются с данными измерений [19], но в области больших значений  $E/N$  относительная разница между расчетными и измеренными значениями немного превышает заявленную в [19] экспериментальную погрешность. Расчетные значения величины  $D_T/\mu_e$  в области  $E/N < 850$  Тд хорошо согласуются с экспериментальными данными [20], но заметно превышают их в более сильных полях, скорее всего, в связи с нарушением равновесия ансамбля электронов с полем.

## СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Голант В.Е., Жилинский А.П., Сахаров И.Е. Основы физики плазмы. М.: Атомиздат, 1977.

2. Sakai Y., Tagashira H., Sakamoto S. // J. Phys. D.: Appl. Phys. 1997. V. 10. P. 1035.
3. Бочков Е.И., Бабич Л.П. // Физика плазмы. 2022. Т. 48. № 3. С. 276.
4. Alves L.L., Bartschat K., Biagi S.F., Bordage M.C., Pitchford L.C., Ferreira C.M., Hagelaar G.J.M., Morgan W.L., Pancheshnyi S., Phelps A.V., Puech V., Zatsarinnny O. // J. Phys. D.: Appl. Phys. 2013. V. 46. 334002 (22 pp).
5. Hagelaar G.J.M., Pitchford L.C. // Plasma Sources Sci. Technol. 2005. V. 14. P. 722.
6. Allis W.P. // Physical Review A. 1982. V. 26 (3). P. 1704.
7. Бочков Е.И., Бабич Л.П., Куцык И.М. // Физика плазмы. 2021. Т. 47. № 10. С. 935.
8. Adibzadeh M., Theodosiou C.E. // Atomic Data and Nuclear Data Tables. 2005. V. 91. P. 8.
9. Salvat F., Jablonski A., Powell C.J. // Computer Phys. Communications. 2005. V. 165. P. 157.
10. Wetzel R.C., Baiocchi F.A., Hayes T.R., Freund R.S. // Phys. Rev. A. 1987. V. 35(2). P. 559.
11. De Heer F.J., Jansen R.H., van der Kaay W. // J. Phys. B: Molec. Phys. 1979. V. 12(6). P. 979.
12. Schram B.L., de Heer F.J., van der Wiel M.J., Kistemaker J. // Physica. 1965. V. 31. P. 94.
13. www.lxcat.net/Biagi-v7.1
14. Raju G.G. Gaseous Electronics. Tables, Atoms, and Molecules. N.Y.: CRC Press, 2012.
15. Kim Y.-K., Rudd M.E. // Phys. Rev. A. 1994. V. 505. P. 3954.
16. Yates B.R., Keane K., Khakoo M.A. // J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 2009. V. 42. 095206.
17. Tahira S., Oda N. // J. Phys. Soc. Japan. 1973. V. 35(2). P. 582.
18. Petrovic Z.L., Dujko S., Maric D., Malovic G., Nikitovic Z., Sasic O., Jovanovic J., Stojanovic V., Radmilovic-Radenovic M. // J. Phys. D.: Appl. Phys. 2009. V. 42. 194002.
19. Kucukarpaci H.N., Saelee H.T., Lucas J. // J. Phys. D.: Appl. Phys. 1981. V. 14. P. 9.
20. Al-Amin S.A.J., Lucas J. // J. Phys. D: Appl. Phys. 1987. V. 20. P. 1590.
21. Chanin M.L., Rork G.D. // Phys. Rev. 1963. V. 132(6). P. 2547.
22. Kruithof A.A., Penning F.M. // Physica. 1937. V. 32. P. 430.
23. Willis B.A., Morgan C.G. // Brit. J. Appl. Phys. 1968. V. 1. P. 1219.
24. Dutton J., Hughes M.H., Tan B. // J. Phys. B. 1969. V. 2. P. 890.