

КОНСТАНТА СКОРОСТИ ИОНИЗАЦИИ ПРИ ВЫСОКИХ
ТЕМПЕРАТУРАХ. МАЛЫЕ КОНЦЕНТРАЦИИ ЭЛЕКТРОНОВ

Ю. П. Денисов, Н. М. Кузнецов

(Москва)

Вычисляется константа скорости термической ионизации одноатомного газа электронами с учетом неравновесности функции распределения электронов по энергиям. Постановка задачи такая же, как в работе [1]. Отличие состоит лишь в том, что рассматривается случай малых концентраций электронов. Имеются в виду такие концентрации электронов, при которых скорость установления распределения Максвелла электронного газа в области энергий электронов порядка потенциала ионизации I определяется электрон-атомными, а не электрон-электронными столкновениями. Для этого концентрация электронов $c = n_e/n_a$, где n_e и n_a — числа электронов и атомов в единице объема, должна удовлетворять условию

$$c \ll \frac{m}{M} \frac{\sigma_{ea}(I)}{\sigma_{ee}(I)} \quad \left(\frac{\sigma_{ee}(I)}{\sigma_{ea}(I)} \approx Q \right) \quad (1)$$

Здесь m и M — массы электрона и атома, $\sigma_{ea}(I)$ и $\sigma_{ee}(I)$ — сечения упругого рассеяния электронов на атомах и электронах при энергии, равной I , Q — кулоновский логарифм.

Константа скорости ионизации вычисляется как функция температуры атомов. Вследствие потерь энергии электронов на ионизацию константа скорости в широком интервале температуры значительно отличается от равновесной.

1. Постановка задачи. Рассмотрим газ с постоянной температурой T тяжелых частиц (атомов и ионов) вдали от ионизационного равновесия, так что процессами рекомбинации можно пренебречь. Предполагается, что температура настолько велика ($T > I/20$), что скорость ионизации определяется скоростью перехода в первое возбужденное состояние атома. Подробнее этот вопрос рассмотрен в [1].

Функцию распределения электронов $f(t, \epsilon)$ найдем, решая кинетическое уравнение

$$\dot{f} = I_{ee} + I_{ea} + I_{ei} + I_i \quad (1.1)$$

где символами I_{ee} , I_{ea} и I_{ei} обозначены интегралы столкновений электронов соответственно с электронами, атомами и ионами. Последнее слагаемое в правой части (1.1) учитывает ионизацию.

Первые три интеграла столкновений в уравнении (1.1) по порядку величины есть $\Delta f / \tau$, где Δf — отклонение функции распределения от равновесной, а τ — время релаксации энергии для соответствующего процесса столкновений. Для оценки этого времени имеем

$$\tau \sim T^2 / \langle \partial(\Delta E)^2 / \partial t \rangle$$

где $\langle \partial(\Delta E)^2 / \partial t \rangle$ — средний квадрат потерь энергии в единицу времени для данного процесса обмена энергией. Для электрон-электронных столкновений эта величина пропорциональна $\epsilon^{-1/2}$, а для электрон-атомных упругих ударов — $\epsilon^{3/2}$, следовательно

$$\tau_{ee} \sim \epsilon^{1/2}, \quad \tau_{ea} \sim \epsilon^{-3/2} \quad (1.2)$$

т. е. с ростом энергии эффективность электрон-электронных столкновений убывает, а электрон-атомных, наоборот, быстро растет.

Учитывая неравенство (1), электрон-электронными столкновениями при больших энергиях электронов $\varepsilon > E_1$ (где E_1 — энергия первого возбужденного состояния атома, отсчитываемая от основного уровня) можно вообще пренебречь по сравнению с упругими электрон-атомными столкновениями. Конечно, при энергиях $\varepsilon \ll E_1$ оба вида столкновений эффективны и должны учитываться совместно. Условие (1) эквивалентно неравенству

$$\tau_{ee} \gg \tau_{ea}, \quad \varepsilon > E_1 \quad (1.3)$$

В пределе малых энергий в силу (1.2) выполняется неравенство

$$\tau_{ee} \ll \tau_{ea}, \quad \varepsilon \rightarrow 0 \quad (1.4)$$

Для электрон-ионного времени релаксации τ_{ei} имеем неравенства

$$\tau_{ei} \gg \tau_{ea}, \quad \tau_{ei} \gg \tau_{ee} \quad (1.5)$$

справедливые для всей области энергий, так как $n_i = n_e \ll n_a$ в силу (1) (n_i — число ионов в единице объема) и масса иона в M/m раз больше массы электрона.

Неравенства (1.3), (1.5) позволяют сильно упростить исходное кинетическое уравнение. В области больших энергий $\varepsilon > E_1$ можно пренебречь интегралами столкновений I_{ee} и I_{ei} . Оставшийся интеграл столкновений I_{ea} можно представить в виде дифференциального соотношения фоккер-планковского типа, разлагая под интегралом функцию распределения электронов по малому параметру — энергии, передаваемой при столкновении, — и учитывая, что атомы распределены по Максвеллу с температурой T . В результате уравнение (1.1) для области энергий $\varepsilon > E_1$ примет вид

$$f' = \frac{1}{\varphi(\varepsilon)} \frac{\partial}{\partial \varepsilon} \left[\frac{\varphi(\varepsilon)}{2} \left\langle \frac{\partial}{\partial t} (\Delta E_{ea})^2 \right\rangle \left(\frac{\partial f}{\partial \varepsilon} + \frac{f}{T} \right) \right] - \sigma_i(\varepsilon) n_a \left(\frac{2\varepsilon}{m} \right)^{1/2} f \quad (1.6)$$

$$\varphi(\varepsilon) = 4\pi m^{-3/2} (2\varepsilon)^{1/2}$$

Здесь $\varphi(\varepsilon)$ — плотность уровней, $\sigma_i(\varepsilon)$ — сечение перехода атома из основного состояния в первое. Это сечение приближенно представляется в виде линейной функции энергии

$$\sigma_i(\varepsilon) = \sigma \theta(\varepsilon - E_1) (\varepsilon - E_1) / E_1$$

Здесь $\theta(x)$ — функция Хэвисайда. Постоянная σ зависит от конкретного вида атомов. Для большинства элементов $\sigma \sim 10^{-16}$ см². Полагая сечение упругого рассеяния электронов атомами σ_{ea} независимым от энергии, найдем, что средний квадрат потерь энергии в единицу времени

$$\langle \partial (\Delta E_{ea})^2 / \partial t \rangle = 2^{3/2} M^{-1} m^{1/2} \sigma_{ea} n_a T \varepsilon^{3/2}$$

Введем функцию распределения, нормированную на один электрон $f = n_e f_1$. Левую часть уравнения (1.1) можно представить в виде

$$f_1 n_e + K n_e n_a f_1 \quad (1.7)$$

Здесь K — константа скорости ионизации, определяемая интегралом

$$\int_{E_1}^{\infty} \sigma_i(\varepsilon) \left(\frac{2\varepsilon}{m} \right)^{1/2} f_1 \varphi d\varepsilon \quad (1.8)$$

Для вычисления функции распределения f_1 при температурах, значительно меньших потенциала ионизации, достаточно найти стационарное решение кинетического уравнения $f_1 \dot{=} 0$ (так называемое квазистационарное приближение [1]).

В силу малости константы скорости ионизации, экспоненциально зависящей от температуры, второе слагаемое в (1.7) может быть опущено. Только в очень узком интервале энергии вблизи порога возбуждения первого уровня оно превышает последнее слагаемое в (1.6), учитывающее ионизацию. Однако этот очень узкий интервал энергий δE не оказывает влияния на ход решения¹. В итоге кинетическое уравнение для энергий $\epsilon > E_1$ записывается в виде

$$\frac{1}{\Phi(\epsilon)} \frac{d}{d\epsilon} \left[\frac{16\pi\sigma_{ea} n_a T \epsilon^2}{mM} \left(\frac{df_1}{d\epsilon} + \frac{f_1}{T} \right) \right] - n_a \sigma \sqrt{\frac{2}{m}} \frac{V_{\bar{\epsilon}}(\epsilon - E_1)}{E_1} f_1 = 0 \quad (1.9)$$

В области энергий $\epsilon < E_1$ исходное уравнение (1.4) также можно сильно упростить. В этой области отсутствуют неупругие процессы столкновений и $I_i = 0$. (При рассматриваемых высоких температурах и малых концентрациях электронов (1) переходы из первого возбужденного состояния на более высокие уровни и в область непрерывного спектра в основном происходят путем столкновений тяжелых частиц.)

Неравенство (1.5) позволяет пренебречь столкновениями электронов с ионами. В силу (1.3) и (1.4) ни одним из оставшихся интегралов столкновений I_{ee} и I_{ea} в области энергий $\epsilon < E_1$ пренебречь нельзя. Выражение для интеграла столкновений I_{ea} , приведенное в уравнении (1.9), годится и для низких энергий. Интеграл столкновений I_{ee} можно так же свести к дифференциальному выражению фоккер-планковского типа, если воспользоваться выражением для потока электронов, полученным в работе [2]

$$j_i = \frac{\pi e^4 Q}{m^4} \int \left(f(v) \frac{\partial f(v')}{\partial v_k} - f(v') \frac{\partial f(v)}{\partial v_k} \right) \frac{u^2 \delta_{ik} - u_i u_k}{u^3} d^3 v' \quad (1.10)$$

Здесь $u_i = v_i - v_i'$ — вектор относительной скорости, δ_{ik} — единичный тензор.

Учитывая, что вследствие интенсивного обмена энергией электронов с атомами (неравенство (1)) и в силу неравенства (1.4) функция распределения электронов $f(\epsilon)$ при низких энергиях $\epsilon \lesssim T$ мало отличается от равновесной функции распределения, которая является максвелловской с температурой T , можно представить (1.10) в виде

$$j_i(\epsilon) = -8\pi^2 e^4 Q n_e m^{-2} T (df/d\epsilon + f/T) S(\epsilon/T) \quad (1.11)$$

где

$$S(\epsilon/T) = 2\pi^{-1/2} \int_0^{\epsilon/T} \sqrt{x} e^{-x} dx$$

Здесь $j_i(\epsilon)$ — поток электронов в пространстве энергий. Величина S при энергиях $\epsilon > T$ мало отличается от единицы, при низких же энергиях она стремится к нулю. Однако при таких энергиях основную роль играют столкновения, приводящие к рассеянию на большие углы. Такими столкновениями при выводе (1.11) пренебрегается. Точный учет их представляет собой сложную задачу, однако для намеченных целей, как это будет видно из дальнейшего, область малых энергий не будет существенной. Поэтому

¹ Можно показать, что $\delta E/T \approx \sqrt{E_1/T} \exp(-E_1/T)$.

му в выражении (1.11) можно с хорошей точностью заменить функцию $S(\varepsilon / T)$ на единицу, в результате чего интеграл столкновений I_{ee} окончательно будет иметь вид

$$\frac{1}{\varphi(\varepsilon)} \frac{\partial}{\partial \varepsilon} \left[\frac{8\pi^2 e^4 Q n_e T}{m^2} \left(\frac{\partial f}{\partial \varepsilon} + \frac{f}{T} \right) \right]$$

В квазистационарном случае для области энергий $\varepsilon < E_1$ с учетом всего сказанного кинетическое уравнение (1.1) примет вид

$$\frac{1}{\varphi(\varepsilon)} \frac{d}{d\varepsilon} \left[\left(\frac{8\pi^2 e^4 Q n_e T}{m^2} + \frac{16\pi\sigma_{ea} n_a T \varepsilon^2}{mM} \right) \left(\frac{df_1}{d\varepsilon} + \frac{f_1}{T} \right) \right] = 0 \quad (1.12)$$

2. Решение кинетического уравнения. Будем искать решения уравнений (1.9) и (1.12) и при энергии $\varepsilon = E_1$ сошьем их и их первые производные. Введем безразмерные величины $x = \varepsilon / T$, $\beta = E_1 / T$. Уравнение (1.9) в этих обозначениях запишется так:

$$f_1''(x) + \left(1 + \frac{2}{x} \right) f_1'(x) + \frac{2 - \alpha(x - \beta)}{x} f_1(x) = 0 \quad (2.1)$$

$$\alpha = M\sigma / 2m\sigma_{ea}\beta, \quad \alpha \gg 1$$

Уравнение (2.1) сводится к уравнению Уиттекера. Решение, затухающее на бесконечности, имеет вид

$$Bx^{-1} \exp(-x/2) W_{p, 1/2}(x\sqrt{1+4\alpha}) \quad (p = (1 + \alpha\beta) / \sqrt{1+4\alpha}) \quad (2.2)$$

Здесь $W_{p, 1/2}$ — функция Уиттекера второго рода, B — нормировочная постоянная. При пренебрежении влиянием ионизации функция (2.2) превращается в максвелловскую. Для этого надо положить параметр α равным нулю.

Перейдем теперь к нахождению функции распределения в области энергий $\varepsilon < E_1$. Будем искать решение в виде

$$f_1(\varepsilon) = (m / 2\pi T)^{3/2} (1 + g(\varepsilon)) \exp(-\varepsilon/T) \quad (2.3)$$

с граничными условиями

$$g(0) = 0, \quad g(E_1) = \text{const} \neq 0$$

Подставляя (2.3) в уравнение (1.12), получаем

$$\frac{d}{d\varepsilon} \left[(\varepsilon_0^2 + \varepsilon^2) \exp\left(-\frac{\varepsilon}{T}\right) \frac{dg}{d\varepsilon} \right] = 0 \quad \left(\varepsilon_0 = \left(\frac{\pi Q e^4 c m}{2M\sigma_{ea}} \right)^{1/2} \right)$$

Интеграл этого уравнения с учетом граничных условий имеет вид

$$g(\varepsilon) = -C_1 \int_0^\varepsilon (\varepsilon_0^2 + \varepsilon^2)^{-1} \exp\left(-\frac{\varepsilon}{T}\right) d\varepsilon$$

Из условия непрерывности функции распределения и ее первой производной в точке $\varepsilon = E_1$ для постоянных B и C_1 находим выражения

$$B = (m / 2\pi T)^{3/2} e^{-\beta} F' [\Phi(F' - F/T) - F\Phi']^{-1} \quad (2.4)$$

$$C_1 = -(\Phi' + \Phi/T) [\Phi(F' - F/T) - F\Phi']^{-1}$$

Здесь введены обозначения

$$F(\varepsilon) = \int_0^{\varepsilon} (\varepsilon_0^2 + x^2)^{-1} \exp \frac{x}{T} dx \quad (2.5)$$

$$\Phi(\varepsilon) = T\varepsilon^{-1} \exp(-\varepsilon/2T) W_{p, 1/2}(\varepsilon T^{-1} \sqrt{1+4\alpha}) \quad (2.6)$$

Производные и функции (2.5) и (2.6) берутся в (2.4) в точке $\varepsilon = E_1$. Из вида (2.5) следует, что значение функции $F(\varepsilon)$ в области больших энергий $\varepsilon > T$, в частности при $\varepsilon = E_1$, в основном определяется величиной подынтегрального выражения в окрестности верхнего предела интегрирования. В этой окрестности функция $S(\varepsilon/T)$, определенная в (1.11), практически равна единице.

Функцию $F(\varepsilon)$ можно вычислить с желаемой степенью точности, интегрируя (2.5) по частям. Таким способом можно получить

$$F(E_1) = (\varepsilon_0^2 + E_1^2)^{-1} T e^{\beta} [1 + 2E_1 T (\varepsilon_0^2 + E_1^2)^{-1} + O(\beta^{-2})] \quad (2.7)$$

Для вычисления производной $\Phi'(E_1)$ воспользуемся асимптотикой функции Уиттекера [3]

$$W_{p, 1/2}(y) = \frac{\Gamma(1/3)}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{y}{6}\right)^{1/3} \exp[p(\ln p - 1)] \left[1 - \frac{\Gamma(5/6)}{2\sqrt{\pi}} \frac{y - 4p}{(y/3)^{1/3}} + O\left(\frac{6(y - 4p)}{y}\right)\right] \quad (2.8)$$

справедливой при условиях

$$y \sim 4p, \quad y - 4p = o[(y/6)^{1/3}]$$

Первое условие выполняется в рассматриваемом случае всегда, второе приводит к неравенству

$$\left(\left(\frac{3}{2}\right)^{1/2} \frac{m}{M} \frac{\sigma_{ea}}{\sigma} \beta^2\right)^{2/3} \ll 1$$

которое накладывает несущественное ограничение на область рассматриваемых температур снизу.

При помощи (2.7) и (2.8) находим постоянные B и C_1

$$B = \left(\frac{m}{2\pi T}\right)^{3/2} \beta e^{-\beta/2} \left\{ W_{p, 1/2}(\beta \sqrt{1+4\alpha}) \left[\frac{1}{2} + \frac{\Gamma(5/6)}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{3\alpha}{2\beta}\right)^{1/3} + O(\beta^{-1}) \right] \right\}^{-1}$$

$$C_1 = F(E_1)^{-1} \left\{ 1 - \left[\frac{1}{2} + \frac{\Gamma(5/6)}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{3\alpha}{2\beta}\right)^{1/3} + O(\beta^{-1}) \right]^{-1} \right\} \quad (2.9)$$

Из последнего выражения видно, что в случае малых концентраций влияние ионизации на функцию распределения становится весьма существенным, причем это влияние заметно сказывается в области энергии $\varepsilon < E_1$. Этот факт обуславливает уменьшение нормировочной константы B на множитель, стоящий в квадратных скобках в (2.9), которым в случае больших концентраций можно было пренебречь [1].

3. Вычисление константы скорости ионизации. Константу скорости ионизации (1.8) проще всего вычислить при помощи уравнения (1.9), которое нужно умножить на $\varphi(\varepsilon)$ и проинтегрировать в пределах от E_1 до ∞ . Это дает

$$\bar{K} = - \frac{16\pi\sigma_{ea} T E_1^2}{mM} \left(\frac{df_1}{d\varepsilon} + \frac{f_1}{T} \right) \Big|_{\varepsilon=E_1}$$

Подставляя сюда выражение для функции распределения (2.2) и (2.4) получаем

$$K = - \frac{8\sigma_{ea}E_1^2 \sqrt{m} e^{-\beta}}{\sqrt{2\pi} M \sqrt{T}} \frac{F'(\Phi' + \Phi/T)}{-F\Phi' + \Phi(F' - F/T)}$$

Воспользовавшись (2.9) и (2.10), находим окончательное выражение для константы скорости ионизации

$$K = \frac{8\sigma_{ea}E_1^2 \sqrt{m} e^{-\beta}}{\sqrt{2\pi} M T^{3/2}} \left(1 - \left[\frac{1}{2} + \frac{\Gamma(5/6) (3\alpha)^{1/3}}{\sqrt{\pi} (2\beta)}\right]^{-1}\right) \left(1 + \frac{2E_1T}{\epsilon_0^2 + E_1^2}\right)^{-1}$$

Интересно сравнить этот результат с тем, который получается при пренебрежении влиянием ионизации на функцию распределения. Обозначая соответствующую константу скорости ионизации K_0 , для их отношения K / K_0 получаем

$$\frac{\beta}{\alpha} \left(\frac{\beta}{\beta+2}\right) \left[1 - \left(\frac{1}{2} + \frac{\Gamma(5/6) (3\alpha)^{1/3}}{\sqrt{\pi} (2\beta)}\right)^{-1}\right] \left(1 + \frac{2E_1T}{\epsilon_0^2 + E_1^2}\right)^{-1} \quad (3.1)$$

Выражение (3.1) по существу представляет собой разложение K / K_0 по малым параметрам $\beta\alpha^{-1}$ и β^{-1} . В рассматриваемой области температур три последних члена являются лишь малыми поправками к единице. Поэтому главный член разложения величины K / K_0 по этим параметрам есть

$$\frac{\beta}{\alpha} = 1.1 \cdot 10^{-3} \frac{\sigma_{ea}}{\epsilon} A^{-1} \beta^2 \quad (3.2)$$

где A — атомный вес рассматриваемого газа. Величина (3.2) в рассматриваемом интервале температур ($\beta < 20 E_1 / T$) существенно меньше единицы для всех газов.

Поступила 18 VI 1970

ЛИТЕРАТУРА

1. Денисов Ю. П., Кузнецов Н. М. Константа скорости ионизации при высоких температурах. Большие концентрации электронов. ПМТФ, 1971, № 2.
2. Ландау Л. Д. Кинетическое уравнение в случае кулоновского взаимодействия. ЖЭТФ, 1937, т. 7, вып. 2.
3. Слейтер Л. Дж. Вырожденные гипергеометрические функции. Библиотека математических таблиц, вып. 39. М., ВЦ АН СССР, 1966.