

Ф.Б. БАЙМБЕТОВ, Ж.А. КУДЫШЕВ

РАСЧЕТ СЕЧЕНИЯ ИОНИЗАЦИИ МЕТОДОМ ФАЗОВЫХ ФУНКЦИЙ

В данной работе рассматривается частично ионизованная водородная плазма, взаимодействия частиц которой описываются с помощью потенциала, учитывающего корреляционные эффекты. Данный подход основан на классическом методе расчета Томсона. Рассчитаны сдвиги фаз для данного потенциала на основе уравнения Колоджеро. С помощью рассчитанных фаз, получено сечение ионизации. Был проведен анализ зависимостей полученных данных от параметров плазмы. Полученные данные были сравнены с экспериментальными данными и аналогичными результатами других авторов.

1. Введение

В данной работе рассматривается частично ионизованная водородная плазма, состоящая из свободных электронов (масса m_e , заряд $-e$, концентрация n_e), свободных протонов (масса m_p , заряд e , концентрация n_p) и атомов (масса m_n , концентрация n_n).

Для определения состояния плазменной среды введем среднее расстояние между частицами

$$a = \left(\frac{3}{4\pi n} \right)^{1/3} \quad (1)$$

и соответствующий ему параметр плотности

$$r_s = \left(\frac{3}{4\pi n} \right)^{1/3} \frac{m_e e^2}{\hbar^2} = \frac{a}{a_B}, \quad (2)$$

где $n = n_p + n_n$ - полное число протонов в системе, $a_B = \hbar^2 / m_e e^2$ - первый Боровский радиус, \hbar - постоянная Планка.

Интенсивность взаимодействия частиц плазмы между собой описывается параметром связи

$$\Gamma = \frac{e^2}{a k_B T}, \quad (3)$$

где k_B - постоянная Больцмана, T - температура плазменной среды.

Следует отметить, что знание значений без-

размерных параметров плотности и связи вполне достаточно для определения всех свойств частично ионизованной плазмы.

Элементарные процессы в плазме, в частности процесс ионизации зависит от модели взаимодействия частиц, участвующих в этом процессе. В большинстве случаев в качестве потенциала взаимодействия ионизирующей частицы (электрона) с атомом берут потенциал Кулона.

Известно, что учет корреляционных эффектов и квантово - механических свойств взаимодействующих частиц приводит к изменению потенциалов межчастичных взаимодействий, которое обуславливает снижение потенциала ионизации [1], [2]. В работе [3] показано, что в частично ионизованной плазме с низкой степенью ионизации потенциалы взаимодействия частиц плазмы имеют вид:

$$V_{en}(r) = -\frac{e^2}{\beta_n} \left(\frac{1}{a_B} + \frac{1}{r} \right) \exp[-2r'] + \\ + \frac{2(1-\beta_n)e^2}{\beta_n^2 r} \exp[-\sqrt{2(2-\beta_n)}r'] \quad (4a)$$

$$V_{\alpha\beta}(r) = \frac{(1-\beta_n)^2(2+\beta_n)e^2}{\beta_n^4 r} \exp[-\sqrt{2(2-\beta_n)}r'] - \\ - \frac{(1-\beta_n)e^2}{48\beta_n^4 r} \exp[-2r'] \times \\ \times \left[(1-\beta_n)(2+\beta_n)^2 + 3\beta_n(32+4\beta_n + \right. \\ \left. + 23\beta_n^2)r' + 6(4+\beta_n)\beta_n^2 r'^2 + 4\beta_n^3 r'^3 \right] \quad (4b)$$

где $\beta_n = \frac{1}{\sqrt{1 - \frac{a_B^2}{r_{Dn}^2}}}$, r_{Dn} - радиус Дебая, определяемый концентрацией неионизованных атомов.

$$a_B - \text{Боровский радиус}, \alpha, \beta = e, i; r' = \frac{r}{a_B}$$

Существуют различные подходы к рассмотрению процесса ионизации. Одним из них является классический метод, предложенный Томпсоном [4]. В соответствии с моделью Томпсона ионизационный процесс рассматривается как столкновение ионизирующего (налетающего) электрона с электроном атома, которые взаимодействуют посредством потенциала Кулона. В этой модели взаимодействие электрона с атомом описывается классическими уравнениями движения в предположении, что передаваемая при столкновении электрону атома минимальная энергия равна энергии ионизации. В отличие от модели Томпсона, модель Гризинского [5] учитывает скорость связанного электрона, с помощью функции распределения по скоростям. Модель Гризинского качественно хорошо описывает ионизационный процесс. Во втором подходе ионизационный процесс рассматривается квантово-механическим методом на основе уравнения Шредингера. В этом случае часто используются приближение Борна.

В работе [6] нами исследовался процесс ионизации как классическим, так и квантово-механическим методом в борновском приближении. Показано, что при учете корреляционных эффектов с помощью потенциала (4) максимум сече-

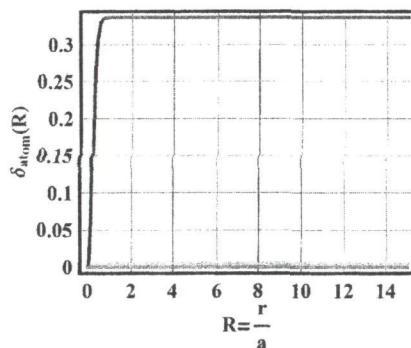


Рисунок 1. Электрон-атомный фазовый сдвиг в зависимости от расстояния между частицами при $r_s = 5$ и $\Gamma = 0.1$. Зеленая линия: $l = 0$; синяя линия: $l = 1$; красная линия: $l = 2$.

ния ионизации возникает при $E \approx 3E_i$ (E_i -энергия ионизации) и полученные результаты удовлетворительно согласуются с экспериментальными данными и результатами авторов, использующих другие модели.

2. Численное решение уравнения Калоджеро для сдвига фаз.

В общем случае рассеянная волна не является плоской, необходимо учитывать сдвиг фаз. Для определения сдвига фаз необходимо решить уравнение Калоджеро [7]:

$$\frac{d}{dr} \delta_l^{ab}(r) = -\frac{2\mu_{ab}}{\hbar^2 k} \Phi_{ab}(r) [\cos \delta_l^{ab}(r) j_l(kr) - \sin \delta_l^{ab}(r) n_l(kr)]^2 \quad (5)$$

с начальными условиями $\delta_l^{ab}(0) = 0$. Здесь $\delta_l^{ab}(r)$ - фазовый сдвиг при рассеянии частиц сортов a и b , $j_l(kr)$ и $n_l(kr)$ - функции Рикатти-Бесселя первого и второго родов соответственно, $E = \hbar^2 k^2 / 2\mu_{ab}$ относительная кинетическая энергия взаимодействующих частиц с приведенной массой $\mu_{ab} = m_a m_b / (m_a + m_b)$,

Φ_{ab} - определяется формулой (4).

Уравнение Калоджеро (5) было решено численно с макропотенциалами взаимодействия (4a) и (4b) и численные результаты представлены на рисунках 1-4.

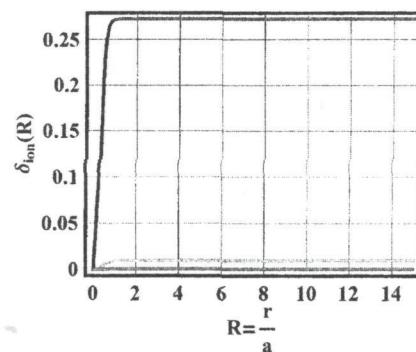


Рисунок 2. Электрон-ионный фазовый сдвиг в зависимости от расстояния между частицами при $r_s = 5$ и $\Gamma = 0.1$. Зеленая линия: $l = 0$; синяя линия: $l = 1$; красная линия: $l = 2$.

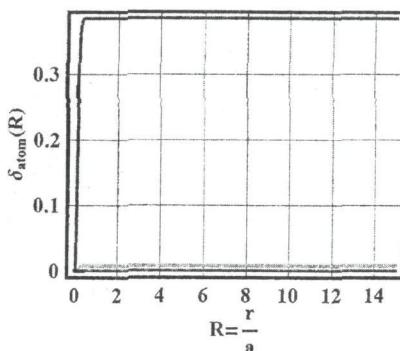


Рисунок 3. Электрон-атомный фазовый сдвиг в зависимости от расстояния между частицами при $r_s = 10$ и $\Gamma = 0.1$. Зеленая линия: $l = 0$; синяя линия: $l = 1$; красная линия: $l = 2$.

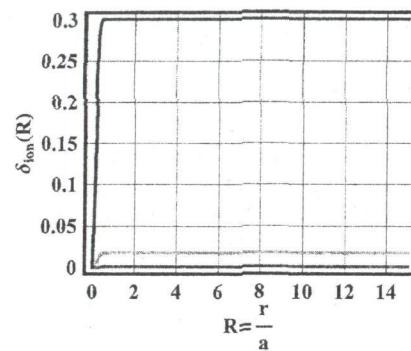


Рисунок 4. Электрон-ионный фазовый сдвиг в зависимости от расстояния между частицами при $r_s = 10$ и $\Gamma = 0.1$. Зеленая линия: $l = 0$; синяя линия: $l = 1$; красная линия: $l = 2$.

Из рисунков можно сделать следующие выводы. Сдвиги фаз слабо зависят от параметра связи. При фиксированном параметре связи Γ и уменьшении плотности (увеличении параметра плотности r_s) фазы рассеяния незначительно возрастают, что свидетельствует об ослаблении влияния корреляционных эффектов на процесс рассеяния. Во всех случаях фазы рассеяния уменьшаются с ростом квантового числа l , так как при фиксированной энергии частиц увеличение l соответствует нарастанию прицельного параметра, а значит некоторому снижению интенсивности рассеяния.

3. Расчет дифференциального сечения рассеяния частиц частично ионизованной плазмы.

Дифференциальное сечение рассеяния определяется формулой:

$$d\sigma = |f(\theta)|^2 d\Omega \quad (6)$$

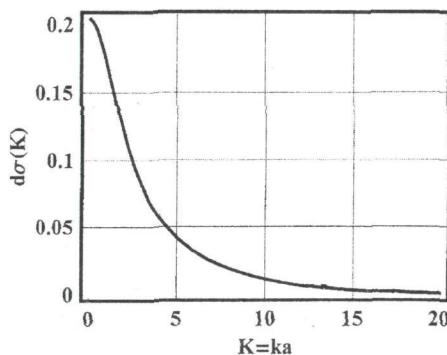


Рисунок 5. Зависимость дифференциального сечения рассеяния от безразмерного волнового вектора налетающего электрона при $r_s = 5$ и $\Gamma = 0.1$.

В выражении (6) амплитуда рассеяния $f(\theta)$ через сдвиги фаз на бесконечном удалении частиц друг от друга определяется как:

$$f(\theta) = \frac{1}{2iK} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) [e^{2i\delta_l(\infty)} - 1] P_l(\cos[\theta]) \quad (7)$$

где $P_l(\cos[\theta])$ - есть полином Лежандра l -го порядка, $\delta_l(\infty)$ - фазовый сдвиг на бесконечности [8], [9]. Следует отметить, что при расчетах суммирование проводилось до $l = 20$, а сдвиг фаз на бесконечности определяется значением при $R = 14$, где фазовый сдвиг принимает постоянное значение. Численные результаты расчетов дифференциального сечения рассеяния при разных параметров плазмы приведены на рисунках 5-6.

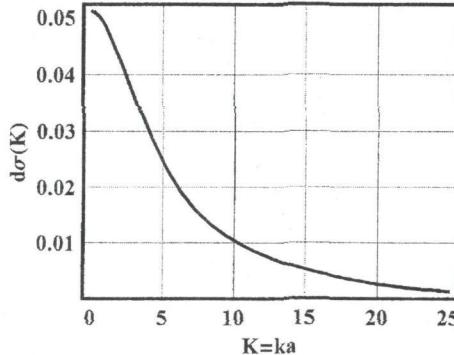


Рисунок 6. Зависимость дифференциального сечения рассеяния от безразмерного волнового вектора налетающего электрона при $r_s = 10$ и $\Gamma = 0.1$.

Из сравнения этих рисунков следует, что дифференциальное сечение рассеяния слабо зависит от параметра связи, но существенно зависит параметра плотности. Дифференциальное сечение рассеяния убывает быстрее с ростом энергии налетающего электрона при большей плотности плазмы.

4. Расчет сечения ионизации частиц частично ионизованной водородной плазмы.

В модели Томпсона при рассмотрении рассеяния налетающего электрона на атоме атомный электрон предполагается свободным. Это предположение позволяет использовать формулу Резерфорда для дифференциального сечения [1], [2]. Обмен энергией между налетающим электроном и атомным электроном учитывается на основе закона сохранения энергии, который приводит к следующей связи между передаваемой энергией и углом рассеяния:

$$\Delta E_k = E_i \Rightarrow E_i = E_k \sin^2 \left[\frac{\theta_{\min}}{2} \right]$$

$$\theta_{\min} = 2 \operatorname{ArcSin} \left[\sqrt{\frac{E_i}{E_k}} \right] \quad (8)$$

В соответствии с моделью Томпсона, найденное в предыдущем разделе дифференциальное сечение рассеяния используется для вычисления сечения ионизации. При этом нижний предел интегрирования по углам рассеяния заменяется минимальным углом, определяемым соотношением (8), т.е.,

$$\sigma_i = 2\pi \int_{\theta_{\min}}^{\pi} d\sigma \sin[\theta] d\theta \quad (9)$$

Результаты численного расчета сечения ионизации при разных параметров плазмы приведены на рисунках 7-8.

Анализ проведенных зависимостей сечения ионизации от безразмерных параметров плазмы показывает, что при фиксированных значениях параметра связи Γ максимальное значение сечения ионизации увеличивается в четыре раза при уменьшении параметра плотности r_s в два раза. Эти факты, по-видимому, связаны с увеличением рассеивающих центров и ослаблением влияния корреляционных эффектов на процесс ионизации на больших плотностях.

5. Сравнение с экспериментальными данными и результатами других авторов.

На рисунках 9, 10 приведено сравнение полученных нами результатов на основе предлагаемой модели взаимодействия электрона с атомом с результатами авторов, использующих другие подходы, а также с экспериментальными данными. На рисунке 13 дано сравнение полученного сечения с результатами Дж. Томпсона и М. Гризинского и экспериментальными данными Fite и Brackmann (1958 г), взятые из [8].

На рисунке 14, показано сравнение наших результатов с результатами работ [10], [11]. Следует отметить, что в работе [10] сечение ионизации вычисляется посредством суммирования орбитальных сечений, в которых учитываются энергия связи данной орбиты, кинетическая энергия электрона, и поправки, учитывающие дипольный момент.

Из этих рисунков нетрудно заметить, что все рассматриваемые модели удовлетворительно описывают зависимость сечения ионизации от энергии налетающего электрона. Отметим, что при учете корреляционных эффектов значение максимума и его положение хорошо согласуются с экспериментальными данными Fite и Brackmann (1958 г), взятые из [8].

6. Выводы.

Таким образом, можно констатировать, что классическая модель является наиболее простой, но грубой моделью ионизации атома электронным ударом. Полученные на ее основе результаты дают правильную качественную картину процесса ионизации. Однако такие параметры сечения ионизации, как положение максимума и его значение лучше согласуются с экспериментальными данными при учете корреляционных эффектов и сдвигов фаз рассеянных волн. Отметим, что учет корреляционных эффектов, т.е. влияние среды на процесс ионизации приводит к более резкому снижению сечения ионизации при больших энергиях налетающего электрона.

ЛИТЕРАТУРА

- Голант В. Е., Жилинский А. П., Сахаров С. А. Основы физики плазмы // Атомиздат — 1977. стр. 47 — 64.
- Смирнов Б. М. Атомные столкновения и элементарные процессы в плазме // Атомиздат — 1968. стр. 157 — 178.

3. Baimbetov F.B., Arkhipov Yu.V., Davletov A.E. Thermodynamics of partially ionized hydrogen plasmas: Pseudopotential approach in chemical models. Phys. Plasma 2005, v.5, p. 315-321

4. Thompson J.J. Phil. Mag. 23,449 (1912).

5. Gryzinski M. Phys. Rev. 138, A336 (1965).

6. Baimbetov F. B., Kudyshev Z. A. Ionization Cross – Section Calculation of Partially Ionized Hydrogen Plasma, Journal of Physics, Journal of Physics: Conference Series 112 (2008) 042085.

7. Calogero F. Variable phase approach to potential scattering // Academic Press, 1967.

8. N. Mott and H Massey. The Theory of Atomic Collisions

9. Davidov A. S. Quantum mechanics // «Nauka». – 1973. p. 536 – 550.

10. Kim Y.-K. and Rudd M.E. Phys. Rev. A 50, 3954 (1994).

11. Younger S. M., Quant J. Spectrosc. Radiat. Transfer 26, 329 (1981).

12. Балашов В. В. Квантовая теория столкновений // Издательство «Наука». – 1985 год.

13. Imad Ladadwa, Sabre Kais Critical behavior of electron impact ionization of atom // International Journal Of Quantum Chemistry vol. 80, no. 4/5 , p.575 – 581 (2000)

14. Shah M. B. , Elliott D. S. , and H. B. Gilbody, J. Phys B 20, 3501 (1987)

Резюме

Жартылай иондалған сутек плазмасындағы ионизациялану қимасы қарастырылған. Корреляция эффекттерді ескеретін псевдопотенциалдық өсерлесу модельдің негізінде, Колоджеро тәндеуін шешу арқылы, фазалық ығысулар алынған. Анықталған фазалар ығысулар арқылы ионизациялану қимасы есептелген. Алынған қимасының плазма параметрлерге тәуелділігі зерттеліп, экспериментпен және басқа авторлардың сөйкес нәтежелерімен салыстырылған.

Summary

In present work the electron impact ionization cross section is considered. The electron impact ionization cross section is calculated with help of variable phase approach to potential scattering. The Calogero equation is numerically solved, based on pseudopotential model of interaction between partially ionized hydrogen plasma particles, which accounts correlation effects. As a result, the scattering phase shifts are obtained. On the basis of the scattering phase shifts, the ionization cross section is calculated. Obtained ionization cross section is compared with experimental data and with suitable results of other authors