УДК 537.521

DOI: 10.21779/2542-0321-2019-34-3-52-57

В.С. Курбанисмаилов¹, С.А. Майоров^{2,3}, Г.Б. Рагимханов¹, З.Р. Халикова²

**Расчет характеристики дрейфа металлических ионов
Li, Be, Al, Fe, Cu, W, Au, Hg в аргоне**

¹ Дагестанский государственный университет; Россия, 367001, Махачкала, ул. М. Гаджиева, 43а; vali_60@mail.ru;

² Институт общей физики им. А.М. Прохорова РАН; Россия, 125412, Москва, ул. Вавилова, 13; mayorov_sa@mail.ru;

³ Объединенный институт высоких температур РАН; Россия, 125412, Москва, ул. Ижорская, 13; gb-r@mail.ru

Приведены результаты расчетов методом Монте-Карло характеристик дрейфа ионов металлов (Li, Al, Fe, Cu, W, Hg, Au, Be) в постоянном и однородном электрическом поле при $1 < E/N < 1000$ Тд в аргоне. Рассчитаны скорость дрейфа, средняя кинетическая энергия, коэффициенты продольной и поперечной диффузии, длина свободного пробега. Выполнен анализ функции распределения ионов металлов по скорости вдоль и поперек направления поля при дрейфе в аргоне при различных напряженностях электрического поля.

Ключевые слова: дрейф ионов, электрическое поле, благородные газы, пары металла.

Кинетические характеристики металлических ионов в собственных парах и инертных газах представляют большой интерес, поскольку в современных технологиях часто используют плазменные процессы, при которых в активной зоне имеются пары металлов. Хорошо известно, что иногда даже очень малые примеси (миллионные доли) способны радикально менять свойства разряда [1–3]. Поэтому исследования кинетических характеристик ионов в газах и их смесях ведутся давно, и на сегодняшний день представлен обзор экспериментальных и теоретических результатов в ряде книг [5–10].

В настоящей работе, являющейся продолжением работы [1], приведены результаты расчетов методом Монте-Карло характеристик дрейфа ионов металлов (Li, Al, Fe, Cu, W, Hg, Au, Be) в аргоне в постоянном и однородном электрическом поле при $1 < E/N < 1000$ Тд ($1 \text{ Тд} = 10^{-17} \text{ В} \cdot \text{см}^2 = 10^{-21} \text{ В} \cdot \text{м}^2$).

Для моделирования ион-атомных столкновений при движении иона в однородном электрическом поле проводилось интегрирование уравнений движения ионов по схеме Рунге–Кутты второго порядка точности. На каждом шаге по времени разыгрывалось столкновение иона с атомом. Алгоритм моделирования ион-атомного столкновения описан в работе [1].

Рассмотрим характеристики дрейфа ионов металлов в аргоне.

На рис. 1 представлены результаты расчета функции распределения ионов по скорости вдоль (рис. 1а, в, д) и поперек (рис. 1б, г, е) поля в аргоне для значений напряженности поля 10 и 100 Тд и температур газа 77 и 300 К.

Рис. 1. Результаты расчета функции распределения ионов металлов (Li, Al, Fe, Cu, W, Hg, Au, Be) по скорости вдоль направления поля (а, в, д) и поперек направления поля (б, г, е) при дрейфе в аргоне при различных напряженностях электрического поля и температуры газа: $E/N = 10$ Td, $T = 77$ К (а, б); $E/N = 100$ Td, $T = 77$ К (в, г); $E/N = 100$ Td, $T = 300$ К (д, е)

Как видно из представленных зависимостей, при малых полях (рис. 1а, б) функции распределения ионов по скорости как вдоль, так и поперек направления поля различаются слабо. Причем эта разница становится более заметной при высоких полях и

низкой температуре газа (рис. 1б–е) и менее заметной с ростом температуры газа. Следует также отметить, что с ростом напряженности поля E/N увеличивается величина дисперсии функции распределения и уменьшается при увеличении температуры газа и наибольшее значение имеет для ионов легких атомов.

Из анализа функций распределения ионов по скоростям следует, что в распределении по модулю скорости и по проекциям скоростей имеет существенные отличия от соответствующих максвелловских распределений. Причем имеет место отличие не только в хвостах функций распределения, но и в центральной части. Соответственно функция распределения ионов по скоростям при их дрейфе в газе не может быть описана гауссовой кривой.

Следует отметить, что даже при достаточно высокой приведенной напряженности электрического поля происходит формирования ионного потока, при котором скорость направленного движения (скорость дрейфа ионов) значительно превышает скорость теплового хаотического движения, даже несмотря на то, что при увеличении напряженности поля с одновременным увеличением скорости дрейфа (рис. 2а) происходит увеличение дисперсии функции распределения (рис. 1), т. е. увеличиваются значения продольной и поперечной температур ионов (рис. 3).

На рис. 2а приведены характерные зависимости скорости ионов металла от E/N . Следует отметить, что скорость дрейфа иона не находится в прямой зависимости от массы иона. В частности (рис. 2а), наибольшее значение скорости имеем для ионов Be, хотя $m_{Be^+} > m_{Li^+}$, также можно заметить, что, несмотря на то, что $m_{Al^+} > m_{Fe^+}$, скорости дрейфа $v_{dr}(Al^+) < v_{dr}(Fe^+)$, что, видимо, связано с потенциалом взаимодействия иона металла с атомами аргона.

Рис. 2. Скорость дрейфа (а) и эффективная температура (б) ионов металлов (Li, Al, Fe, Cu, W, Hg, Au, Be) при их дрейфе в постоянном и однородном электрическом поле в аргоне при 300 K и плотности атомов $2,68 \cdot 10^{19} \text{ см}^{-3}$

На рис. 2б приведены характерные зависимости эффективной температуры ионов металлов в зависимости от E/N . Эффективная температуры ионов металла T_{eff} тем выше, чем выше масса иона, хотя и здесь нет прямой зависимости, например, $T_{eff}(Al^+) > T_{eff}(Fe^+)$, хотя $m_{Al^+} > m_{Fe^+}$.

На рис. 3а, б приведены характерные зависимости температуры ионов металлов от E/N . Следует отметить, если продольная составляющая температуры иона растет с ростом массы иона, а поперечная составляющая температуры обратно пропорциональна массе. Имеется большая разница между продольной и поперечной температурами ионов $T_{||}$ и $T_{\perp}$ (рис. 3), также сильно различаются и коэффициенты диффузии вдоль и

поперек поля (рис. 4). Здесь следует отметить интересную закономерность. Коэффициент продольной диффузии находится в прямой зависимости от массы иона, чем меньше масса иона, тем выше коэффициент продольной диффузии.

В то же время для продольной составляющей коэффициента диффузии такой закономерности не наблюдается. Как видно из рис. 4а, наибольшие и наименьшие значения коэффициента продольной диффузии наблюдаются для ионов Be^+ и Li^+ соответственно, у которых наименьшие массы среди всех рассмотренных в работе металлических ионов.

Рис. 3. Продольная (а) и поперечная (б) температуры ионов металлов (Li, Al, Fe, Cu, W, Hg, Au, Be) при их дрейфе в постоянном и однородном электрическом поле в аргоне при 300 К и плотности атомов $2,69 \cdot 10^{19} \text{ см}^{-3}$

Рис. 4. Коэффициенты диффузии вдоль (а) и поперек (б) направления поля ионов металлов (Li, Al, Fe, Cu, W, Hg, Au, Be) при их дрейфе в постоянном и однородном электрическом поле в аргоне при 300 К и плотности атомов $2,69 \cdot 10^{19} \text{ см}^{-3}$

Рис. 5. Средняя длина свободного пробега ионов металлов (Li, Al, Fe, Cu, W, Hg, Au, Be) при их дрейфе в постоянном и однородном электрическом поле в аргоне при 300 К и плотности атомов $2,69 \cdot 10^{19} \text{ см}^{-3}$

На рис. 5 приведена средняя длина свободного пробега ионов в зависимости от E/N . Здесь также мы наблюдаем интересную закономерность. В частности, при полях $E/N < 100 \text{ Td}$ средняя длина свободного пробега уменьшается с увеличением массы иона, однако с увеличением прикладываемого поля эта закономерность нарушается. Например, для ионов Li^+ при полях $E/N > 300 \text{ Td}$ средняя длина свободного пробега становится меньше, чем для всех остальных ионов, а для бериллия средняя длина свободного пробега оказывается выше, чем у других ионов.

Заключение

В работе приведены результаты расчетов методом Монте-Карло характеристик дрейфа ионов различных металлов (Li, Al, Fe, Cu, W, Hg, Au, Be) в аргоне. Приведены данные по зависимости от напряженности электрического поля коэффициентов подвижности и диффузии, эффективной, продольной и поперечной температур, длины свободного пробега. Проанализировано влияние отношения масс иона и атома на характеристики дрейфа. Полученные результаты могут иметь практическое применение при выборе условий экспериментов и анализе экспериментальных данных с примесями паров материала электродов.

Работа выполнена при частичной финансовой поддержке грантов РФФИ: № 19-08-00333, № 19-08-00611.

Литература

1. *Maierov S.A.* Ion drift in a gas in an external electric field // *Plasma Physics Reports*. – 2009. – Vol. 35. – P. 802.
2. *Golyatina R.I. and Maierov S.A.* Approximation of the characteristics of ion drift in parent gas // *Plasma Physics Reports*. – 2017. – Vol. 43, № 1. – P. 75–82.
3. *Kurbanismailov V.S., Maierov S.A., Omarov O.A., Ragimkhanov G.B.* // *Journal Technical Physics*. – 2019. – V. 89, № 3. – P. 388–391.
4. *Курбанисмаилов В.С., Майоров С.А., Омаров О.А., Рагимханов Г.Б., Рамазанов И.Г.* Характеристики дрейфа электронов в гелии с парами железа // *Вестник ДГУ*. – 2019. – Вып. 1. – С. 7–15.
5. *Мак-Даниэль И., Мэсон Э.* Подвижность и диффузия ионов в газах. – М.: Мир, 1976.

6. Ellis H.W. Transport properties of gaseous ions over a wide energy range // Atomic Data and Nuclear Data Tables. – 1976. – Vol. 7, № 3. – P. 177–210.
7. Viehland L.A., Johnsen R., Gray B.R. and Wright T.G. Transport coefficients of He⁺ ions in helium // The Journal of chemical physics. – 2016. – Vol. 144. – P. 074306.
8. Viehland L.A. et al. Transport Properties of Gaseous Ions over a Wide Energy Range, IV // Atomic Data and Nuclear Data Tables. – 1995. – Vol. 60. – P. 37–95.
9. Golyatina R.I., Maierov S.A. and Ragimkhanov G.B. Alkali ions mobility in parent vapor // Physical Sciences and Technology. – 2018. – Vol. 5, № 2. – P. 83–89.
10. Golyatina R.I., Maierov S.A. Ion drift in parent gas for cesium, rubidium, and mercury // Physical Sciences and Technology. – 2018. – Vol. 3, № 2. – P. 12–19.

Поступила в редакцию 15 июля 2019 г.

UDC 537.521

DOI: 10.21779/2542-0321-2019-34-3-52–57

Calculation of the drift characteristics of metal ions Li, Be, Al, Fe, Cu, W, Au, Hg in argon

V.S. Kurbanismailov¹, S.A. Mayorov^{2,3}, G.B. Ragimkhanov¹, Z.R. Khalikova²

¹ Dagestan State University; Russia, 367001, Makhachkala, M. Gadzhiev st., 43a; Vaili_60@mail.ru;

² Prokhorov General Physics Institute of RAS; Russia, 119991, Moscow, Vavilov st., 38; mayorov_sa@mail.ru;

³ Unified Institute for High Temperatures of RAS; Russia, 125412, Izhorskaya st., 13; gbr@mail.ru

The results of Monte-Carlo calculations of the characteristics of the drift of metal ions (Li, Al, Fe, Cu, W, Hg, Au, Be) in a constant and uniform electric field at $1 < E/N < 1000$ Td in argon are presented. The drift velocity, the average kinetic energy, the longitudinal and transverse diffusion coefficients, and the mean free path are calculated. The analysis of the distribution function of metal ions in velocity along and across the field direction with drift in argon at various electric field strengths was performed.

Keywords: *ion drift, electric field, noble gases, metal vapors.*

Received 15 July, 2019