Сечения столкновений электронов с атомами инертных газов*Р. И. Голятина, С. А. Майоров*

В работе представлен анализ данных по сечениям упругих и неупругих столкновений электронов с атомами благородных газов. Рассмотрены транспортное (диффузионное) сечение, сечения возбуждения и ионизации. Для выбранных наборов экспериментальных и теоретических данных найдены оптимальные аналитические формулы и для них подобраны аппроксимационные коэффициенты. Полученные полуэмпирические формулы позволяют воспроизводить значения сечений в широком диапазоне энергий столкновения от 0,001 до 10000 эВ с точностью нескольких процентов.

Ключевые слова: электрон атомные столкновения, транспортное сечение, сечение возбуждения, сечение ионизации, аппроксимация сечений, благородные газы.

DOI: 10.51368/1996-0948-2021-3-11-16

Введение

Для численного моделирования многообразных явлений в газоразрядной плазме методом частиц в гидродинамическом приближении или на основе решения кинетического уравнения Больцмана необходимо знание сечений электрон-атомных столкновений [1, 2]. Мы не будем приводить обзор теоретических и экспериментальных работ по упругим и полным сечениям, с которыми можно ознакомиться в работах [3, 4]. Здесь мы ограничимся случаем благородных газов и рассмотрением наиболее существенных при моделировании задач газоразрядной плазмы характеристик электрон-атомных столкновений. Это транспортное сечение, определяющее темп потери импульса и скорость дрейфа электронов, суммарное сечение возбуждения, которое опреде-

ляет энергетические затраты на возбуждение атомов, и сечение ионизации из основного состояния, которое определяет частоту появления новых электронов при ионизации и их энергетический спектр [5].

Исчерпывающе полный обзор и подбор данных содержится в работах [1–4]. Но следует иметь в виду, что критический анализ результатов экспериментальных данных в обзорной работе весьма затруднителен и может быть даже невозможен из-за того, что необходимые для этого исходные данные могут быть только у авторов работ. Приводимые же в оригинальных работах погрешности порядка 1–3 % удивительным образом контрастируют друг с другом, отличаясь между собой иногда на 50 %. Поэтому в обзорной работе реально возможен только сравнительный анализ полученных результатов, который показывает, что в лучшем случае относительные погрешности измерения сечений имеют порядок 5–10 %, а чаще 20–50 %. Сравнение наборов электрон-атомных сечений рассеяния и характеристик дрейфа роя электронов в благородных газах выполнено в [6–8].

Наиболее удобной формой представления экспериментальных и расчетно-теоретических данных является подбор для них аналитических аппроксимаций. В работе [9] по-

Голятина Русудан Игоревна¹, н.с.
Майоров Сергей Алексеевич^{1,2}, в.н.с., д.ф.-м.н.
E-mail: mayorov_sa@mail.ru

¹ Институт общей физики имени А. М. Прохорова РАН.
Россия, 119991, Москва, ул. Вавилова, 38.

² Объединенный институт высоких температур РАН.
Россия, 125412, Москва, ул. Ижорская, 13, стр. 2.

Статья поступила в редакцию 23 апреля 2021 г.

© Голятина Р. И., Майоров С. А., 2021

добраны такие аппроксимации для сечений упругих и неупругих столкновений электронов с атомами инертных газов. Полные сечения радикально отличаются в области меньших энергий от транспортных (диффузионных) сечений, которые и представляют наибольший интерес для прикладных задач физики газового разряда. Отличие в области малых энергий ($< 10\text{--}20$ эВ) составляет порядка 100 раз, в области больших энергий ($> 10\text{--}20$ эВ) полное сечение превосходит транспортное примерно в два раза.

Критический анализ и оценка полных сечений рассеивания электронов на атомах благородных газов были начаты в работах [9, 10]. Мы выбрали данные, которые на основе выполненного анализа рекомендованы в этих работах с незначительными дополнениями из более поздних работ. Это позволило существенно расширить область применимости подобранных аналитических зависимостей по сравнению с приведенными в работах [9, 10].

Аналитическое выражение для транспортного сечения

Рассмотрим задачу аппроксимации транспортного сечения при упругих столкновениях электрона с атомом. Аппроксимацию зависимости транспортных сечений упругих столкновений электронов с атомами благородных газов от энергии соударения ε будем искать в виде суммы ряда слагаемых вида $A + B\varepsilon^C / 1 + D\varepsilon^E$. Естественным масштабом энергии при столкновении электрона с

атомом является первый потенциал ионизации атома I , поэтому удобно перейти к безразмерной энергии $x = \varepsilon / I$. Будем аппроксимировать зависимость сечения $\sigma(x)$ от энергии столкновения в виде суммы ряда:

$$\sigma_{elastic}(x) = \sum_i \frac{A_i + B_i x^{C_i}}{1 + D_i x^{E_i}}. \quad (1)$$

Здесь константы A_i , B_i имеют, как и сечение, размерность площади, а остальные являются безразмерными величинами. Параметры в (1) были получены с помощью метода покоординатного спуска для задачи минимизации среднеквадратического отклонения сечений от их экспериментальных значений

$$\Delta^2 = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \left[\frac{\sigma_{fit}(x_i) - \sigma_{exp}(x_i)}{\sigma_{exp}(x_i)} \right]^2, \quad (2)$$

где $\sigma_{exp}(x_i)$ – экспериментальные значения, а $\sigma_{fit}(x_i)$ – вычисленные значения в точках x_i : $i = 1, \dots, N$. Мы ограничимся использованием двух слагаемых в формуле (1). При использовании трех слагаемых точность аппроксимации удастся повысить в два – три раза, но поскольку погрешности исходных данных составляют величину 10–20 %, то в этом нет смысла.

Коэффициенты аппроксимации транспортных сечений электронов в инертных газах приведены в табл. 1, энергия столкновения должна быть выражена в безразмерных единицах $x = \varepsilon / I$, а сечение получается в единицах $\text{\AA}^2 = 10^{-16} \text{ см}^2 = 10^{-20} \text{ м}^2$.

Таблица 1

Значения параметров аппроксимации транспортных сечений упругих столкновений электронов с атомами благородных газов

Газ, I , эВ	$A_1, \text{\AA}^2$	$B_1, \text{\AA}^2$	C_1	D_1	E_1	$A_2, \text{\AA}^2$	$B_2, \text{\AA}^2$	C_2	D_2	E_2	$\Delta, \%$
He, 24,584	0	7,19	1	3,67	2,79	5,16	6,09	0,41	15,0	1,91	1,7
Ne, 21,564	0	38,7	1	267,	1,64	0,31	2,99	0,50	0,20	1,93	1,7
Ar, 15,759	0	24,1	1	1,03	2,83	7,76	-65,5	0,455	1961	1,37	8,0
Kr, 13,996	0,17	115,	1,82	9,52	3,58	40,5	-101,	0,28	1275	1,40	6,1
Xe, 12,127	-3,1	182	1,53	10,1	2,8	136,	-143,	0,169	1453	1,37	9,0

Отметим важный момент, на который следует обратить внимание при анализе экспериментальных данных для транспортного сечения. При неупругих столкновениях импульс налетающего электрона тоже меняется

и, соответственно, неупругие столкновения дают вклад в торможение потока электронов при их дрейфе в газе. А поскольку сечения возбуждения и ионизации для благородных газов могут превышать сечение упругого

столкновения при энергиях порядка 2–4 потенциалов ионизации, то вклад неупругих столкновений в транспортное сечение для энергичных электронов может быть основным. Для розыгрыша упругих столкновений в процедуре Монте-Карло необходимо знание сечения именно упругих столкновений, поскольку столкновения с возбуждением и ионизацией разыгрываются отдельно. Поэтому надо учитывать различные типы столкновений – «упругие», «передача импульса» (momentum), «возбуждение», «ионизация», где сечение с передачей импульса (momentum) представляет собой сумму упругого и неупругого сечений (это сечение используется для решения уравнения Больцмана в двухчленном приближении).

Аппроксимация сечения возбуждения

Возбуждение атомных уровней во многих случаях является основным каналом энергопотери для электронов в плазме газового

разряда, и их корректный учет очень важен. Для сечения возбуждения вблизи порога возбуждения E_1 иногда используется линейная аппроксимация зависимости сечения от энергии:

$$\sigma_{excitation} \varepsilon = C_{ex} \varepsilon - E_1, \quad \varepsilon > E_1. \quad (3)$$

Для аппроксимации сечения возбуждения в более широком диапазоне энергий выберем формулу

$$\sigma_{excitation} \varepsilon = \frac{A \varepsilon / E_1 - 1}{\varepsilon / E_1 + B} C, \quad (4)$$

где A, B, C – аппроксимационные параметры. Коэффициенты этой аппроксимации приведены в табл. 2, там же приведена относительная погрешность и полученная из формулы (4) константа линейной зависимости начального участка $C_{ex} = A / (E_1(1+B)^C)$.

Таблица 2

Значения параметров аппроксимации сечений возбуждения при столкновениях электронов с атомами благородных газов

Газ, E_1 , эВ	$\varepsilon_{\min} - \varepsilon_{\max}$	$A, \text{\AA}^2$	B	C	$\Delta, \%$	ε_m , эВ	$\sigma(\varepsilon_m), \text{\AA}^2$	$C_{ex}(3), \text{\AA}^2/\text{эВ}$	$C_{ex}, [13], \text{\AA}^2/\text{эВ}$
He, 19,8	30 – 4000	0,99	0,63	1,75	5,9	63	0,21	0,021	0,046
Ne, 16,619	30 – 4000	1,50	1,98	1,85	1,9	75	0,17	0,012	0,015
Ar, 11,50	20 – 4000	6,48	1,83	1,81	3,8	52	0,80	0,086	0,070
Kr, 9,915	20 – 4000	8,95	2,09	1,82	2,8	47	1,01	0,116	–
Xe, 8,315	20 – 4000	15,8	3,08	1,87	3,8	47	1,28	0,137	–

Аппроксимация сечения ионизации

Впервые полуэмпирическая формула для линейной аппроксимации начального участка зависимости сечения ионизации от энергии падающего электрона была предложена Комптоном и ван Вурхисом еще в 1925 году [12]

$$\sigma_{ionization}(\varepsilon) = C_i(\varepsilon - I), \quad I < \varepsilon < 2I. \quad (5)$$

Нами сделана попытка аппроксимации зависимости сечения ионизации от энергии с помощью формулы (4) для аппроксимации

сечений возбуждения. Перепишем ее в виде формулы:

$$\sigma_{ionization}(x) = \frac{A(x-1)}{(x+B)^C}, \quad (6)$$

где $x = \varepsilon / I$, A, B, C – аппроксимационные константы.

Коэффициенты аппроксимаций приведены в табл. 3, там же приведена относительная погрешность (2) и полученная из формулы (6) константа линейной зависимости начального участка $C_{ion} = A / (I(1+B)^C)$.

Таблица 3

Значения параметров аппроксимации сечений ионизации при столкновениях электронов с атомами благородных газов

Газ, I , эВ	$\varepsilon_{\min} - \varepsilon_{\max}$, эВ	A , $\text{\AA}^2$	B	C	Δ , %	ε_m , эВ	$\sigma(\varepsilon_m)$, $\text{\AA}^2$	C_i , (5), $\text{\AA}^2/\text{эВ}$	C_i , [13], $\text{\AA}^2/\text{эВ}$
He, 24,587	30 – 4000	3,95	2,48	1,91	2,8	119	0,34	0,015	0,013
Ne, 21,564	30 – 4000	20,11	6,34	2,00	6,3	180	0,68	0,017	0,016
Ar, 15,759	20 – 4000	30,10	2,51	1,86	2,7	80	2,83	0,185	0,20
Kr, 13,996	20 – 4000	37,39	2,72	1,80	2,9	79	3,80	0,251	–
Xe, 12,127	15 – 4000	46,38	2,86	1,76	6,2	74	4,99	0,355	–

Обсуждение результатов

Экспериментальные данные и аппроксимирующие кривые показаны на рис. 1 и 2 для Ne и Ar соответственно.

Рис. 1. Зависимости сечений столкновения электронов с атомами неона от энергии.

Рис. 2. Зависимости сечений столкновения электронов с атомами аргона от энергии.

На каждом графике экспериментальные значения сечений представлены маркерами, а сплошными кривыми – найденные аппроксимации, приведены также среднеквадратические значения погрешностей аппроксимации.

Данные сечений возбуждения и ионизации для Ne взяты из [10], для Ne, Ar, Kr и Xe

из [11]. Данные для сечений упругих столкновений взяты из различных баз данных. Для He и Ne из BOLSIG+, для Ar и Xe из Puech database, www.lxcat.net, для Kr из SIGLO database, www.lxcat.net.

В наших предыдущих работах [14–17], которые публиковались, начиная с 2010 года, при вычислении частоты возбуждения и ионизации использовались линейные аппроксимации. Тестовые расчеты с новыми данными показали, что отличия в дрейфовых характеристиках для области данных, соответствующих физике низкотемпературной плазмы (газового разряда) незначительны. Но для импульсных разрядов, где важны столкновения с большой энергией и неупругое взаимодействие, отличия могут велики.

Заключение

В настоящей работе на основе обзора имеющихся данных по сечениям столкновений электронов с атомами благородных газов и их критического анализа выбраны наиболее надежные. Для них подобраны формулы аналитической аппроксимации сечений упругих (транспортных) и неупругих (возбуждения из основного состояния и ионизации) столкновений электронов с атомами благородных газов, которые имеют погрешность того же порядка, что и имеющиеся в литературе экспериментальные и теоретические данные.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского Фонда Фундаментальных Исследований, проект 19-08-00611.

ЛИТЕРАТУРА

1. Petrovic' Z., Dujko S., Maric' D., Malovic' G., Nikitovic' Z., Šašić' O., Jovanovic' J., Stojanovic' V., Radmilovic'-Radenovic' M. // J. Phys. D: Appl. Phys. 2009. Vol. 42. P. 194002.
2. Carbone E., Graef W., Hagelaar G., Boer D., Hopkins M., Stephens J., Yee B., Pancheshnyi S., van Dijk J., Pitchford L., on behalf of the LXCat Team. Data Needs for Modeling Low-Temperature Non-Equilibrium Plasmas: The LXCat Project, History, Perspectives and a Tutorial – Atoms 2021, 9, 16.
3. Zecca A., Karwasz G. P., Brusa R. S. // Riv. Nuovo Cim. 1996. Vol. 19. No. 3. P. 1.
4. Pancheshnyi S., Biagi S., Bordage M. C., Hagelaar G. J. M., Morgan W. L., Phelps A. V., Pitchford L. C. // Chemical Physics. 2012. Vol. 398. P. 148.
5. Khrabrov A. V., Kaganovich I. D. // Physics of Plasmas. 2012. Vol. 19. P. 093511.
6. Alves 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., Zatsarinny O. // J. Phys. D: Appl. Phys. 2013. Vol. 46. P. 334002.
7. Pitchford L. C., Alves L. L., Bartschat K., Biagi S. F., Bordage M. C., Phelps A. V., Ferreira C. M., Hagelaar G. J. M., Morgan W. L., Pancheshnyi S., Puech V., Stauffer A., Zatsarinny O. // Journal of Physics D: Applied Physics. 2013. Vol. 46. P. 334001.
8. Bordage M. C., Biagi S. F., Alves L. L., Bartschat K., Chowdhury S., Pitchford L. C., Hagelaar G. J. M., Morgan W. L., Puech V., Zatsarinny O. // Journal of Physics D: Applied Physics. 2013. Vol. 46. P. 334003.
9. Brusa R. S., Karwasz G. P., Zecca A. // Zeitschrift für Physik D Atoms Molecules and Clusters. 1996. Vol. 38. No. 4. P. 279.
10. de Heer F. J., Jansen R. H. J. // J. Phys. B: Atom. Mol. Phys. 1977. Vol. 10. No. 18. P. 3741.
11. de Heer F. J., Jansen R. H. J., van der Kaay W. // J. Phys. B: At. Mol. Phys. 1979. Vol. 12. No. 6. P. 979.
12. Compton K. T., Van Voorhis C. C. // Phys. Rev. 1926. Vol. 27. P. 724.
13. Hasted J. B. Physics of atomic collisions. – Washington: Butterworths, 1964.
14. Майоров С. А. // Кр. Сооб. Физ. ФИАН. 2009. № 10. С. 29.
15. Kodanova S. K., Bastikova N. Kh., Ramazanov T. S., Maiorov S. A. // Ukrainian Journal of Physics. 2014. Vol. 59. № 4. P. 371.
16. Майоров С. А. // Кр. Сооб. Физ. ФИАН. 2014. № 10. С. 20.
17. Golyatina R. I., Maiorov S. A. // Plasma Physics Reports. 2018. Vol. 44. № 4. P. 453.

PACS: 34.80.Bm, 34.80.Dp, 51.50.+v, 51.10.+y, 52.80.Dy, 52.25.Fi

Cross sections of electron collisions with noble gases atoms

R. I. Golyatina¹ and S. A. Maiorov^{1,2}

¹ Prokhorov General Physics Institute of the Russian Academy of Sciences
38 Vavilov st., Moscow, 119991, Russia
E-mail: mayorov_sa@mail.ru

² Joint Institute for High Temperatures of the Russian Academy of Sciences
Bd. 2, 13 Izhorskaya st., Moscow, 125412, Russia

Received April 23, 2021

Consideration is given to the analysis of data on the cross sections of elastic and inelastic collisions of electrons with noble gas atoms. The transport (diffusion) cross section, the excitation and ionization cross sections are studied. For the selected sets of experimental and theoretical data, optimal analytical formulas are found and approximation coefficients are selected for them. The obtained semi-empirical formulas allow us to reproduce the cross section values in a wide range of collision energies from 0.001 to 10000 eV with an accuracy of several percent.

Keywords: electron atomic collisions, transport crosssection, excitation crosssection, ionization crosssection, approximation of crosssections, noble gases.

DOI: 10.51368/1996-0948-2021-3-11-16

REFERENCES

1. Z. Petrovic', S. Dujko, D. Maric', G. Malovic', Z'. Nikitovic', O. Šašic', J. Jovanovic', V. Stojanovic', and M. Radmilovic'-Radenovic', J. Phys. D: Appl. Phys. **42**, 194002 (2009).
2. Emile Carbone, Wouter Graef, Gerjan Hagelaar, Daan Boer, Matthew M. Hopkins, Jacob C. Stephens Benjamin T.Yee, Sergey Pancheshnyi, Jan van Dijk, Leanne Pitchford and on behalf of the LXCat Team. *Data Needs for Modeling Low-Temperature Non-Equilibrium Plasmas: The LXCat Project, History, Perspectives and a Tutorial* (Atoms 2021, 9, 16).
3. A. Zecca, G. P. Karwasz, and R. S. Brusa, Riv. Nuovo Cim. **19** (3), 1 (1996).
4. S. Pancheshnyi, S. Biagi, M. C. Bordage, G. J. M. Hagelaar, W. L. Morgan, A. V. Phelps, and L. C. Pitchford, Chemical Physics **398**, 148 (2012).
5. A. V. Khrabrov and I. D. Kaganovich, Physics of Plasmas **19**, 093511 (2012).
6. L. Alves, K. Bartschat, S. F. Biagi, M. C. Bordage, L. C. Pitchford, C. M. Ferreira, G. J. M. Hagelaar, W. L. Morgan, S. Pancheshnyi, A. V. Phelps, V. Puech, and O. Zatsarinny, J. Phys. D: Appl. Phys. **46**, 334002 (2013).
7. L. C. Pitchford, L. L. Alves, K. Bartschat, S. F. Biagi, M. C. Bordage, A. V. Phelps, C. M. Ferreira, G. J. M. Hagelaar, W. L. Morgan, S. Pancheshnyi, V. Puech, A. Stauffer, and O. Zatsarinny, Journal of Physics D: Applied Physics **46**, 334001 (2013).
8. M. C. Bordage, S. F. Biagi, L. L. Alves, K. Bartschat, S. Chowdhury, L. C. Pitchford, G. J. M. Hagelaar, W. L. Morgan, V. Puech, and O. Zatsarinny, Journal of Physics D: Applied Physics **46**, 334003 (2013).
9. Roberto S. Brusa, Grzegorz P. Karwasz, and Alessandra Zecca, Zeitschrift für Physik D Atoms Molecules and Clusters **38** (4), 279 (1996).
10. F. J. de Heer and R. H. J. Jansen, J. Phys. B: Atom. Mol. Phys. **10** (18), 3741 (1977).
11. F. J. de Heer, R. H. J. Jansen, and W. van der Kaay, J. Phys. B: At. Mol. Phys. **12** (6), 979 (1979).
12. K. T. Compton and C. C. Van Voorhis, Phys. Rev. **27**, 724 (1926).
13. J. B. Hasted, *Physics of atomic collisions* (Butterworths, Washington, 1964).
14. S. A. Mayorov, Bulletin of the Lebedev Physics Institute **36** (10), 299 (2009).
15. S. K. Kodanova, N. Kh. Bastikova, T. S. Ramazanov, and S. A. Maiorov, Ukrainian Journal of Physics **59** (4), 371 (2014).
16. S. A. Mayorov, Bulletin of the Lebedev Physics Institute **41** (10), 285 (2014).
17. R. I. Golyatina and S. A. Maiorov, Plasma Physics Reports **44** (4), 453 (2018).