

## Эволюция примеси ионов в переменном высокочастотном электрическом поле

© А.Я. Эндер,<sup>1</sup> И.А. Эндер,<sup>2</sup> А.Б. Герасименко<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе РАН,  
194021 Санкт-Петербург, Россия

<sup>2</sup> Санкт-Петербургский государственный университет,  
199034 Санкт-Петербург, Россия  
e-mail: andrei.ender@mail.ioffe.ru

(Поступило в Редакцию 16 июня 2014 г.)

Рассмотрена пространственно-однородная задача о поведении примеси ионов после включения гармонического электрического поля для различных законов взаимодействия ионов с атомами. Проведено разложение по параметру  $\alpha$ , который оказывается малым при низкой напряженности электрического поля или при высокой частоте. Использована введенная нами ранее специальная нормировка, в которой подвижность в слабом электрическом поле равна единице. Показано, что в этой нормировке зависимости от времени электрического тока для любых частот и приобретаемой ионами полной энергии для высоких частот становятся универсальными и не зависят от сечения взаимодействия. Показано, как происходит накопление поправки к поперечной энергии ионов. Изучено поведение функции распределения ионов. Предложен простой способ определения эффективного времени между столкновениями для любых законов взаимодействия.

### Введение

Изучение поведения ионов в периодическом электрическом поле необходимо для многих приложений: физика плазмы, обработка материалов, плазменная химия, ВЧ-разряд и т.д. [1–4]. Для ВЧ-разряда важно знать поведение функции распределения (ФР) заряженных частиц особенно в области больших энергий, поскольку это определяет интенсивность возбуждения атомов и молекул и в конечном счете скорость ионизации.

Получить аналитическое решение уравнения Больцмана, описывающее поведение примеси ионов, можно в случае простого вида интеграла столкновений, а именно для резонансной перезарядки ионов на атомах с постоянной частотой столкновения. Мы назвали такую модель СЕМ-моделью; она соответствует резонансной перезарядке (Charge Exchange) с полным сечением рассеяния, обратно пропорциональным относительной скорости, т.е. таким же как в случае максвелловских (Maxwell) молекул. В этом случае интеграл столкновений принимает вид линейной БГК-модели [5]. Аналитическое решение для периодической части ФР для СЕМ-модели в случае холодного газа было получено Робсоном и Макабе [6]. Для этой же модели взаимодействия с учетом температуры фонового газа ФР в периодическом электрическом поле была построена Сугаварой и др. [7]. Рассматривались времена, далекие от момента включения поля, т.е. переходный процесс в этих работах не рассматривался. Кроме того, в [7] не был проведен достаточно подробный анализ полученного решения.

В [8] для СЕМ-модели было получено аналитическое решение для ФР ионов не только для чисто периодиче-

ского, но и для переходного процесса после включения гармонического электрического поля и проанализированы особенности этого решения. В частности, было отмечено, что при очень высоких частотах колебаний электрического поля решение мало отличается от равновесного.

В настоящей работе для СЕМ-модели в области высоких частот мы выделили малый параметр и провели разложение аналитического решения около максвелловского распределения вплоть до второго порядка. Получены также аналитические выражения для плотности электрического тока и полной энергии ионов.

Остальная часть работы посвящена изучению поведения ионов при высоких частотах для других моделей взаимодействия, для которых не существует аналитических решений. В этом случае основными методами решения задач кинетики заряженных частиц являются численные методы. К ним относятся либо моментный метод и его различные модификации [9], либо метод разложения по сферическим гармоникам, либо прямое численное моделирование методом Монте-Карло. Развитием подходов на основе метода Монте-Карло занимается Белградская школа [10]. Большое число работ по изучению кинетики заряженных частиц было инициировано Кумаром [11]. Многие результаты по развитию моментного метода решения уравнения Больцмана применительно к заряженным частицам представлены в работе [12].

Моментный метод развивался многими авторами. Так, например, Виланд в своих работах проводил вычисления различных моментов ФР [13,14], австралийская группа (Уайт, Робсон, Несс) [15,16,17] приводит результаты исследования коэффициентов переноса для заряженных частиц в переменных электрическом и магнитном полях.

Как известно, главной проблемой, сдерживающей развитие моментного метода, была сложность вычисления матричных элементов интеграла столкновений, возникающих при разложении ФР по сферическим полиномам Эрмита (функциям Барнетта). Эта трудность была преодолена после получения рекуррентных соотношений для нелинейных матричных элементов А.Я. Эндером и И.А. Эндер [18]. Это позволило получать матричные элементы практически со сколь угодно большими индексами и открыло новые возможности решения многих задач [19–22].

В работах [21,22] мы изучали поведение примеси ионов в случае включения постоянного электрического поля. Там использовалась нестандартная нормировка системы нестационарных моментных уравнений, при которой для любых сечений при стремлении напряженности поля к нулю стационарная подвижность равнялась единице. В настоящей работе мы доказываем, что при введении такой нормировки в периодическом электрическом поле при высоких частотах поведение электрического тока и полной энергии становится универсальным и не зависящим от сечения взаимодействия частиц.

В работе помимо СЕМ-модели рассматривались в основном следующие модели взаимодействия: твердые шары (HS) — рассеяние изотропно, сечение не зависит от скорости; charge exchange hard sphere (CEHS) — резонансная перезарядка, сечение не зависит от скорости; максвелловские молекулы (ММ) — потенциал взаимодействия обратно пропорционален  $r^4$ , сечение рассеяния обратно пропорционально относительной скорости; псевдомаксвелловские молекулы (РММ) — рассеяние изотропно, сечение рассеяния обратно пропорционально относительной скорости.

## Постановка задачи

Рассмотрим нестационарную пространственно-одномерную задачу о поведении малой примеси ионов после резкого включения периодического электрического поля. Фоновый атомный газ имеет максвелловское распределение с температурой  $T$

$$f_a(v) = N \left( \frac{m_a}{2kT\pi} \right)^{3/2} \exp(-Mv^2/2kT),$$

где  $N$  и  $m_a$  — соответственно плотность и масса атомов,  $k$  — постоянная Больцмана, а  $v$  — скорость атомов. В настоящей работе расчеты проводятся в основном в предположении равенства масс ионов и атомов.

Пусть внешнее электрическое поле направлено по оси  $z$ .

При обезразмеривании в качестве единицы измерения времени выберем среднее время между столкновениями —  $\tau$ , а в качестве единицы измерения скорости — тепловую скорость  $v_T = \sqrt{2kT/m}$ . Тогда безразмерная

напряженность электрического поля определяется следующим образом:

$$\epsilon(t) = \frac{eE(t)\tau}{\sqrt{2kTm}}, \quad (1)$$

где  $E(t)$  — напряженность внешнего электрического поля,  $e$  — величина заряда электрона, а  $m$  — масса иона.

Для справки отметим, что если принять сечение рассеяния иона на атоме  $\Sigma = 5 \cdot 10^{-19} m^2$  [9], то значению  $\epsilon = 1$  при нормальных условиях будет соответствовать  $E/N \approx 23Td$ .

Уравнение Больцмана в безразмерных переменных имеет вид

$$\frac{\partial f(\mathbf{c}, t)}{\partial t} + \epsilon(t) \frac{\partial f(\mathbf{c}, t)}{\partial \mathbf{c}} = \hat{I}(f(\mathbf{c}, t), M(\mathbf{c})), \quad (2)$$

где

$$M(\mathbf{c}) = \left( \frac{1}{\pi} \right)^{3/2} \exp(-\mathbf{c}^2), \quad (3)$$

а  $\hat{I}(f(\mathbf{c}, t), M(\mathbf{c}))$  — линейный интеграл столкновений уравнения Больцмана.

Пусть до момента  $t = 0$  электрическое поле равно нулю, а при  $t = 0$  поле включается и затем меняется по гармоническому закону

$$\epsilon(t) = \Theta(t)\epsilon_0 \cos(\omega t), \quad (4)$$

где  $\Theta(t)$  — функция скачка Хевисайда. В этом случае напряженность электрического поля сразу после включения принимает максимальное значение  $\epsilon_0$ , а затем совершает периодические гармонические колебания с частотой  $\omega$ .

Начальное распределение ионов совпадает с максвелловским распределением атомов (3).

## Функция распределения для СЕМ-модели при высоких частотах

В [8] было получено аналитическое решение поставленной выше задачи для СЕМ-модели. Это решение имеет вид

$$F(c_\rho, c_z, t) = M_\rho(c_\rho) f(c_z, t),$$

$$f(c_z, t) = e^{-t} \left( \int_0^t e^x M(y) dx + M(Y) \right). \quad (5)$$

Здесь

$$y = c_z - \epsilon_0 \frac{\sin(\omega t) - \sin(\omega x)}{\omega}.$$

$$M(y) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} e^{-y^2}, \quad M(Y) = M(y) \Big|_{x=0},$$

$$M_\rho(v_\rho) = \frac{1}{\pi} e^{-v_\rho^2}.$$

Помимо такого представления решения в [8] было проведено разделение решения на периодическую и затухающую части и получено следующее выражение для плотности ионного тока:

$$j(t) = j_p(t) + j_a(t),$$

$$j_p(t) = \epsilon_0 \frac{\omega \sin \omega t + \cos \omega t}{1 + \omega^2} = \epsilon_0 \frac{\cos(\omega t - \arctg(\omega))}{\sqrt{1 + \omega^2}},$$

$$j_a(t) = -\epsilon_0 \frac{\exp(-t)}{1 + \omega^2}. \quad (6)$$

Здесь  $j_p(t)$  и  $j_a(t)$  — периодическая и аperiodическая части зависимости плотности тока от времени.

Отметим, что для СЕМ-модели при выбранных нами начальных условиях распределение ионов в поперечном направлении остается постоянным (максвелловским). Из (5) видно, что коэффициенты у гармонических функций являются степенями параметра  $\alpha = \epsilon_0/\omega$ . Этот параметр оказывается малым или в случае больших частот и конечных  $\epsilon_0$ , или в случае малых  $\epsilon_0$ .

Численное исследование показало, что ФР в случае  $\alpha \ll 1$  очень мало отличается от максвеллиана. Следовательно, при малых  $\alpha$  решение можно искать в виде

$$f(c_z, t) = M(c_z)(1 + \Phi(c_z, t)), \quad (7)$$

где  $\Phi(c_z, t) \ll 1$ .

Разложим  $\Phi(c_z)$  в ряд по степеням  $\alpha$  и сохраним первые два члена разложения, т.е. представим

$$\Phi(c_z, t) = \alpha \Phi^{(1)}(c_z, t) + \alpha^2 \Phi^{(2)}(c_z, t). \quad (8)$$

Разложим функцию  $M(y)$  из (5) в ряд до второй степени  $\alpha$

$$M(y) \simeq M(c_z) [1 + 2c_z \alpha (\sin(\omega t) - \sin(\omega x)) + (2c_z^2 - 1) \alpha^2 (\sin(\omega t) - \sin(\omega x))^2]. \quad (9)$$

При подстановке в (5) приближенного выражения  $M(y)$  (9) необходимы следующие три интеграла:

$$I_0(x) = \int_0^t e^x dx = e^x \Big|_0^t,$$

$$I_1(x) = \int_0^t e^x \sin(\omega x) dx = \frac{e^x (-\omega \cos(\omega x) + \sin(\omega x))}{1 + \omega^2} \Big|_0^t,$$

$$I_2(x) = \int_0^t e^x \sin^2(\omega x) dx = -\frac{e^x (-1 - 4\omega^2 + \cos(2\omega x) + 2\omega \sin(2\omega x))}{2 + 8\omega^2} \Big|_0^t.$$

Если учесть экспоненту, стоящую перед скобками в (5), то нетрудно понять, что вклад в периодическую часть

ФР будут давать только значения последних трех интегралов на верхнем пределе, т.е. при  $x = t$  и соответственно для аperiodической части на нижнем пределе, т.е. при  $x = 0$ .

В результате после несложных преобразований для ФР вплоть до второго приближения имеем

$$\Phi(c_z, t) = 2c_z \alpha (\varphi_p^{(1)}(\omega, t) + \varphi_a^{(1)}(\omega, t)) + (2c_z^2 - 1) \alpha^2 (\varphi_p^{(2)}(\omega, t) + \varphi_a^{(2)}(\omega, t)), \quad (10)$$

где

$$\varphi_p^{(1)}(\omega, t) = \frac{\omega^2}{(1 + \omega^2)} \sin(\omega t) + \frac{\omega}{(1 + \omega^2)} \cos(\omega t), \quad (11)$$

$$\varphi_a^{(1)}(\omega, t) = -e^{-t} \frac{\omega}{1 + \omega^2}, \quad (12)$$

$$\varphi_p^{(2)}(\omega, t) = \sin^2(\omega t) + \frac{\omega \sin(2\omega t) - 2 \sin^2(\omega t)}{1 + \omega^2} + \frac{1 + 4\omega^2 - \cos(2\omega t) - 2\omega \sin(2\omega t)}{2 + 8\omega^2}, \quad (13)$$

$$\varphi_a^{(2)}(\omega, t) = -2e^{-t} \left[ \frac{\omega^2}{1 + 4\omega^2} + \sin(\omega t) \frac{\omega}{1 + \omega^2} \right]. \quad (14)$$

## Моментный метод

Стандартный моментный метод в самом общем нестационарном пространственно неоднородном случае при наличии внешних сил подробно описан в [22]. Применительно к поставленной пространственно однородной осесимметричной задаче этот метод приводит к следующему разложению функции распределения:

$$f(\mathbf{c}, t) = M(c) \sum C_{r,l}(t) H_{r,l}(\mathbf{c}), \quad (15)$$

$$H_{r,l}(\mathbf{c}) = P_l(\cos \Theta) c^l S_{l+1/2}^r(c^2). \quad (16)$$

Здесь  $M$  — весовой максвеллиан,  $P_l(\cos \Theta)$  — полиномы Лежандра, а  $S_{l+1/2}^r(c^2)$  — полиномы Сонина (Лагерра).

Система безразмерных моментных уравнений, соответствующая уравнению Больцмана (2), имеет вид

$$\frac{\partial C_{r,l}}{\partial t} + \epsilon(t) \left( \frac{2}{2l+3} r(l+1) C_{r-1,l+1} - \frac{2l}{2l-1} C_{r,l-1} \right) = \sum_{r_1} \Lambda_{r,r_1,l} C_{r_1,l}, \quad (17)$$

где  $\Lambda_{r,r_1,l}$  — линейные матричные элементы интеграла столкновений, которые определяются следующим образом:

$$\Lambda_{r,r_1,l} = \int H_{r,l}(\mathbf{c}) \hat{I}(M(\mathbf{c}) H_{r_1,l}(\mathbf{c}), M(\mathbf{c})) d\mathbf{c} / g_{r,l},$$

$$g_{r,l} = \frac{(2r+2l+1)!!}{(2r)!! 2^l (2l+1)}. \quad (18)$$

Для успешного применения метода особенно важной оказалась возможность построения матричных элементов  $\Lambda_{r,r,l}$  с большими индексами. По построенной в [18] рекуррентной процедуре были созданы программы расчета матричных элементов до практически сколь угодно больших значений индексов. Это позволило строить как все моменты, так и функцию распределения для достаточно сильных электрических полей.

Момент  $C_{r,l}$  связан с функцией распределения следующим образом

$$C_{r,l}(t) = \frac{1}{g_{r,l}} \langle H_{r,l}(\mathbf{c}) \rangle = \frac{1}{g_{r,l}} \int f(\mathbf{c}, t) H_{r,l}(\mathbf{c}) d\mathbf{c}. \quad (19)$$

Выпишем первые несколько моментов:

$$C_{0,1} = 2\langle c_z \rangle, \quad C_{1,0} = \left\langle 1 - \frac{2}{3} c^2 \right\rangle, \\ C_{0,2} = \left\langle 2c_z^2 - \frac{2}{3} c^2 \right\rangle. \quad (20)$$

Через эти моменты выражаются безразмерные физические моменты. Так, плотность электрического тока (скорость дрейфа)  $j(t)$  будет равна

$$j(t) = C_{0,1}/2. \quad (21)$$

Поперечная  $W_t$  и продольная  $W_l$  энергии ионов относительно атомов выражаются через  $C_{r,l}$  следующим образом:

$$W_t = 1 - C_{1,0} - \frac{1}{2} C_{0,2}, \quad W_l = \frac{1}{2} (1 + C_{0,2} - C_{1,0}).$$

Определим приведенные физические моменты, возникающие за счет движения ионов в электрическом поле,

$$\tilde{j} = \frac{j}{\alpha} = \frac{C_{0,1}/2}{\alpha}, \quad (22)$$

$$w_t = \frac{W_t - 1}{\alpha^2} = \frac{-C_{1,0} - 0.5C_{0,2}}{\alpha^2}, \quad (23)$$

$$w_l = \frac{W_l - 0.5}{\alpha^2} = \frac{C_{0,2} - C_{1,0}}{2\alpha^2}. \quad (24)$$

Последние два момента представляют собой поправки к поперечной и продольной энергиям, связанным с электрическим полем. Приведенная поправка к полной энергии имеет вид

$$w = w_t + w_l = -\frac{3C_{1,0}}{2\alpha^2}. \quad (25)$$

В случае СЕМ-модели для произвольной зависимости поля от времени мы получили аналитическое решение для моментов с помощью преобразования Лапласа. В случае гармонического поля моменты  $C_{r,l}$  представляются в виде

$$C_{r,l}(t) = B_{r,l} \alpha^{l+2r} G_{l+2r}(t), \\ B_{r,l} = (-1)^r \frac{(2l+4r)!!(2l+1)}{2^r(2r+2l+1)!!}, \quad (26)$$

$$G_0(t) = 1,$$

$$G_{l+2r}(t) = e^{-t} \omega^{l+2r} \int_0^t e^{\tau} \cos(\omega\tau) G_{l+2r-1}(\tau) d\tau. \quad (27)$$

Отсюда видно, что в случае СЕМ-модели вклад в первое и второе приближение ( $l+2r=1, 2$ ) могут давать только три момента  $C_{0,1}$ ,  $C_{1,0}$  и  $C_{0,2}$ . Соответственно

$$C_{0,1}(t) = 2\alpha G_1(t), \quad C_{1,0}(t) = -\frac{4}{3} \alpha^2 G_2(t), \\ C_{0,2}(t) = \frac{8}{3} \alpha^2 G_2(t). \quad (28)$$

Более того, из (23) и (28) видно, что для СЕМ-модели поправка к поперечной энергии  $\tilde{W}_t = 0$  и вклад во второе приближение определяется только одним моментом  $C_{1,0}$ .

Используя разложение ФР (15) с точностью до  $\alpha^2$ , явный вид нескольких младших сферических полиномов Эрмита ( $H_{0,1} = c_z$ ,  $H_{1,0} = 3/2 - c^2$ ,  $H_{0,2} = (3c_z^2 - c^2)/2$ ), а также формулы (22), (25), (28), можно записать

$$f(\mathbf{c}, t) \approx M(c) (1 + 2\alpha c_z \tilde{j}(t) + \alpha^2 (2c_z^2 - 1) w(t)). \quad (29)$$

Сопоставляя это выражение для ФР с (10), получаем, что  $\tilde{j} = \varphi^{(1)}$ , а  $w = \varphi^{(2)}$ , где  $\varphi^{(1)}$  и  $\varphi^{(2)}$  определяются формулами (11)–(14).

В дальнейшем удобно периодические части тока и энергии представлять в виде гармонических колебаний с различным сдвигом фаз. Для приведенного тока имеем

$$\tilde{j}_p(t) = A^j \cos(\omega t + \Delta_E^j), \\ A^j = \frac{\omega}{\sqrt{1 + \omega^2}}, \quad \Delta_E^j = -\arctg \omega. \quad (30)$$

Здесь  $A^j$  — амплитуда приведенного тока  $\tilde{j}$ , а  $\Delta_E^j$  — его фазовый сдвиг относительно электрического поля.

Для приведенной энергии после ряда преобразований функцию  $w_p$  можно представить в виде

$$w_p = a_0 + a_s \sin(2\omega t) + a_c \cos(2\omega t), \quad (31)$$

где

$$a_0 = \frac{\omega^2}{1 + \omega^2}, \quad (32) \\ a_s = \frac{3\omega^3}{(1 + \omega^2)(1 + 4\omega^2)}, \quad a_c = \frac{\omega^2(1 - 2\omega^2)}{(1 + 4\omega^2)(\omega^2 + 1)}. \quad (33)$$

Теперь нетрудно выделить амплитуду и фазовый сдвиг  $w_p$

$$w_p = a_0 + A^w \cos(2\omega t + \Delta_E^w), \quad (34)$$

где  $a_0$  — среднее значение периодической части приведенной энергии. Именно к ней асимптотически стремится среднее значение полной энергии  $w$ . Амплитуда  $A^w$  имеет вид

$$A^w = \sqrt{a_s^2 + a_c^2} = \frac{\omega^2}{\sqrt{(1 + 4\omega^2)(\omega^2 + 1)}}. \quad (35)$$

Если частота колебаний тока совпадает с частотой колебаний поля, то частота колебаний энергии оказывается в 2 раза выше. Для фазового сдвига относительно поля  $\Delta_E^w$  имеем

$$\Delta_E^w = \begin{cases} \arctg \frac{3\omega}{(2\omega^2-1)}, & \omega^2 \leq 0.5, \\ \arctg \frac{3\omega}{(2\omega^2-1)} - \pi, & \omega^2 > 0.5. \end{cases} \quad (36)$$

Выше мы нашли фазовый сдвиг приведенного тока относительно электрического поля  $\Delta_E^j$ . Найдем теперь фазовый сдвиг приведенной полной энергии относительно тока, т.е. запишем (34) в виде

$$w_p = a_0 + A^w \cos(2\omega t + \Delta_E^j + \Delta_j^w), \quad (37)$$

где

$$\Delta_j^w = \Delta_E^w - \Delta_E^j. \quad (38)$$

Функция  $\Delta_E^w(\omega)$  стремится к нулю при  $\omega \rightarrow 0$  и к  $-\pi$  при  $\omega \rightarrow \infty$ . Функция  $\Delta_j^w(\omega)$  стремится к нулю на обоих пределах, чем и обусловлено удобство в использовании этой функции. Характерным для нее является глубокий минимум в окрестности  $\omega = \sqrt{2}/2$ .

Итак, для СЕМ-модели с помощью аналитического решения для ФР построены первое и второе приближения по параметру  $\alpha$ , а с использованием аналитического решения для моментов показано, что коэффициенты в первом и втором приближениях выражаются через ток и поправку в энергии соответственно. Получены зависимости этих коэффициентов от частоты колебаний внешнего электрического поля.

Выявлен ряд свойств решений. Представляется, что некоторые из этих свойств носят общий характер и не зависят от модели взаимодействия. Построению решений для ряда сечений взаимодействия ионов с атомами и анализу свойств этих решений будут посвящены следующие разделы.

## Численное решение моментной системы

Анализ аналитического решения для СЕМ-модели показал [22], что стационарное решение  $f_{st}(\epsilon)$  не может быть разложено по полиномам Сонина, так как оно не удовлетворяет условию сходимости

$$\int_0^\infty f^2 \exp(c^2) d^3 c < \infty. \quad (39)$$

С другой стороны, нестационарное решение в любой конечный момент времени удовлетворяет критерию (39). В [22] был предложен и использован нестационарный моментный метод. Рассматривалась задача об эволюции ионов после включения постоянного электрического поля, но только для постоянного электрического поля. В этом случае моментная система решалась до

Коэффициент перехода от стандартной к нестандартной нормировке  $\beta$  для различных моделей взаимодействия

СЕМ-модель	PMM	СЕНС-модель	НС-модель	ММ
1	2	0.4826	0.9578	0.4547

довольно больших времен ( $8\tau - 10\tau$  и более), когда ФР близко подходит к стационарному решению. Таким образом, наряду с нестационарным строилось и стационарное решение.

Решалась безразмерная система моментных уравнений (17) при  $\epsilon(t) = \text{const}$ . Характерное время определялось по разному. В случае стандартной нормировки это было среднее время между столкновениями  $\tau$ .

Для степенного (или псевдостепенного) потенциала взаимодействия полное сечение рассеяния степенным образом зависит от скорости  $\Sigma(g) = C_\mu g^{2\mu-1}$  и частота столкновений  $1/\tau = NC_\mu(2kT/m)^\mu$ , где  $C_\mu$  — размерная константа. Например, для твердых шаров  $C_{0.5} = \pi d^2$ . Безразмерное электрическое поле в стандартной нормировке имеет вид  $\epsilon = eE\tau/(mv_T)$ , а уравнение связи плотности тока и напряженности электрического поля  $I = KE$ , где  $K$  — подвижность, переходит в  $j = k\epsilon$ . В стандартной нормировке даже при слабом электрическом поле для разных сечений взаимодействия получаются разные значения подвижности  $k$  в стационарном состоянии. Отметим, что для СЕМ-модели  $k = 1$ .

Обозначим через  $\beta$  отношение подвижности для некоторой модели взаимодействия к подвижности для СЕМ-модели, рассчитанных в стандартной нормировке. В таблице приведены значения  $\beta$  для нескольких моделей взаимодействия. Величина  $\beta$  зависит от угловой части сечения рассеяния, так, например, переход от рассеяния назад в СЕМ-модели к изотропному рассеянию в РММ-модели увеличивает  $\beta$  в 2 раза. Для немасвелловских молекул ( $\mu \neq 0$ ) значение  $\beta$  зависит также от числа полиномов Сонина в разложении ФР. Отметим, что нестационарным моментным методом проводился расчет ФР. Для этого привлекалось большое число членов разложения, что обеспечивало высокую точность расчета  $K$  и соответственно  $\beta$ .

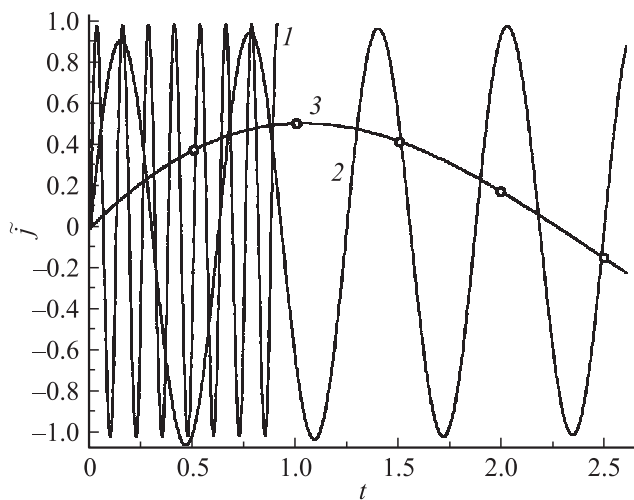
В [22] при включении постоянного электрического поля мы предложили использовать нестандартную нормировку, которая находилась из условия, что при  $\epsilon \rightarrow 0$  и  $t \rightarrow \infty$  подвижность не зависит от сечения рассеяния и равняется единице. Для перехода к нестандартной нормировке в качестве единицы времени выбирается

$$\tau_{ef} = \beta\tau,$$

а безразмерное поле связано с полем в стандартной нормировке соотношением

$$\epsilon_{ns} = \beta\epsilon.$$

Для перехода к нестандартной нормировке достаточно все матричные элементы интеграла столкновений, рассчитанные в стандартной нормировке, умножить на  $\beta$ .



**Рис. 1.** Приведенный ток  $\tilde{j}(t)$  для трех частот: 1 —  $\omega = 50$ , 2 — 10, 3 — 1. Сплошные линии — СЕМ-модель, кружки — HS-модель.

Ниже все расчеты процессов в переменном электрическом поле проводились нами нестационарным моментным методом в нестандартной нормировке. Именно в такой нормировке удобно проводить сравнение результатов расчетов для различных моделей взаимодействия с аналитическими результатами для СЕМ-модели. Рассматривались следующие сечения взаимодействия: HS, СЕНС, РММ, ММ. Подробное описание этих моделей приведено выше.

Прежде чем переходить к ФР, рассмотрим поведение физических моментов. В качестве примера (рис. 1) приведем зависимость тока от времени для  $\omega = 1, 10, 50$ .

Была разработана специальная программа, с помощью которой анализировалась полученная зависимость физического момента от времени и определялись частота, фазовый сдвиг и амплитуда его колебаний. В основном анализировалась периодическая часть процесса. Для этого моментная система решалась до настолько больших времен, когда апериодическая часть становилась пренебрежимо малой.

Было установлено, что для всех моделей частота колебаний как полной энергии, так и ее продольной и поперечной составляющих равна удвоенной частоте колебаний поля.

Анализируя фазовый сдвиг тока относительно поля, мы убедились, что для всех рассмотренных моделей зависимость  $\Delta_E^j(\omega)$  оказалась универсальной и совпала с соответствующей зависимостью для СЕМ-модели (рис. 2, *a*). На основании этого мы пришли к выводу, что для любого сечения взаимодействия при малых значениях  $\alpha$  и нестандартной нормировке

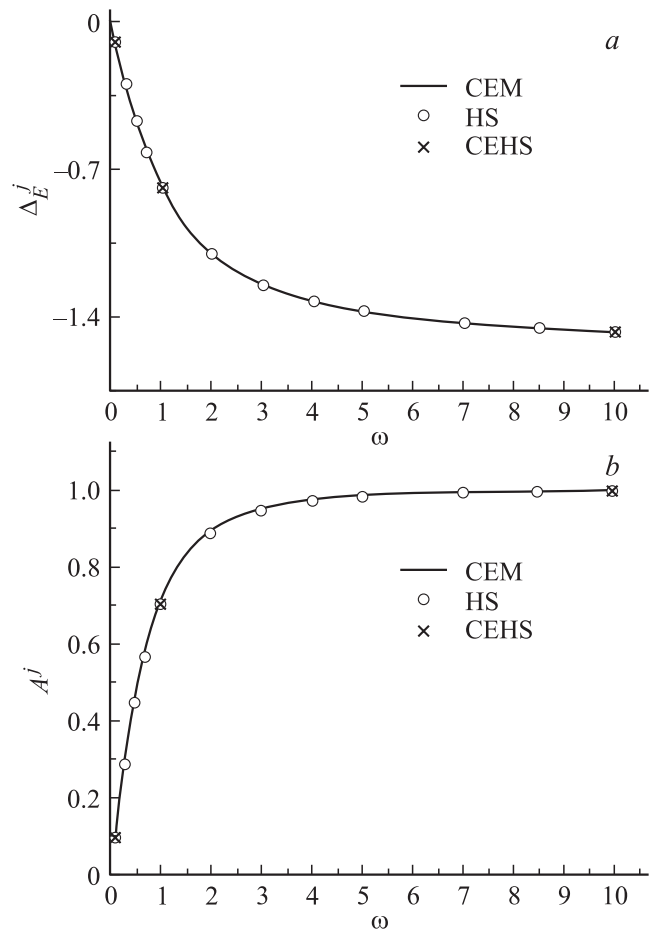
$$\Delta_E^j(\omega) = -\arctg \omega. \quad (40)$$

Зависимость амплитуды приведенного тока  $\tilde{j}$  от частоты поля оказалась такой же как и для СЕМ-модели

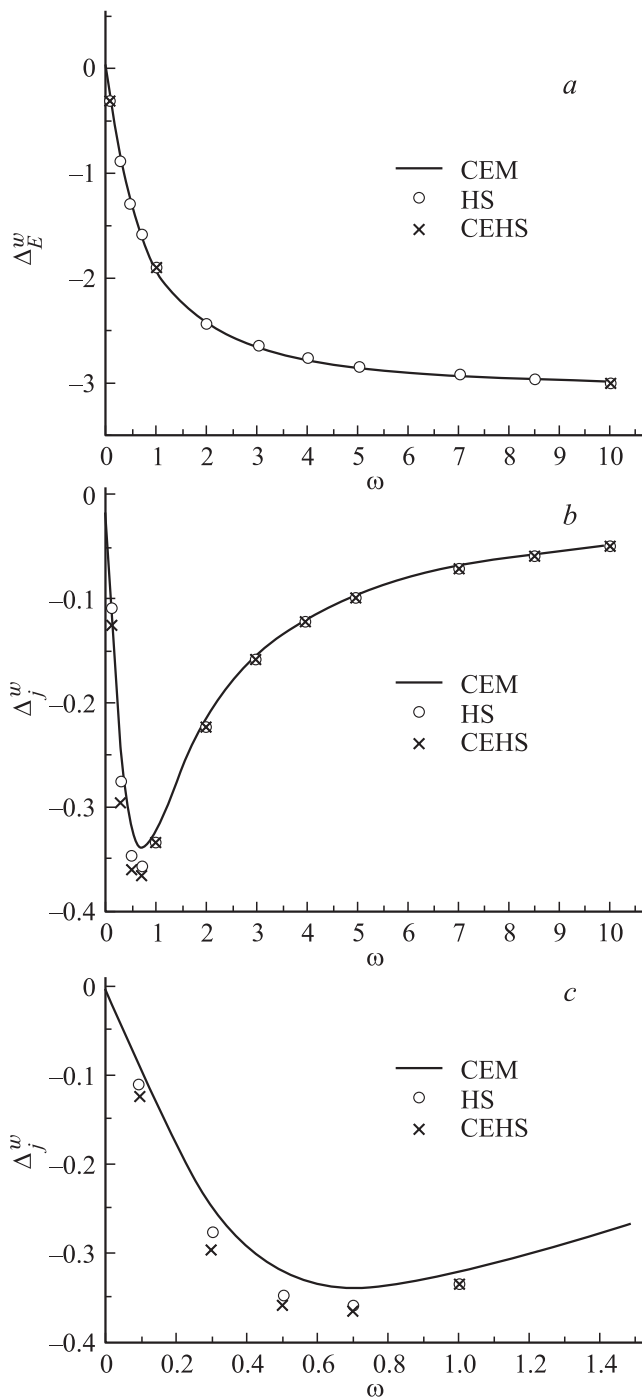
(рис. 2, *b*),

$$A^j(\omega) = \frac{\omega}{\sqrt{1 + \omega^2}}. \quad (41)$$

Анализируя поправку к энергии  $w$ , мы установили, что для всех рассматриваемых моделей взаимодействия, кроме СЕМ- и СЕНС-моделей, соответствующих резонансной перезарядке, помимо поправки к продольной энергии  $w_l$ , появляется поправка к поперечной энергии  $w_t$ . Сначала мы исследовали поправку к полной энергии (25). На рис. 3, *a* представлена зависимость фазового сдвига поправки к полной энергии относительно поля  $\Delta_E^w(\omega)$ . На этом рисунке почти незаметно влияние сечения взаимодействия на фазовый сдвиг. Значительно более выразительной оказывается зависимость фазового сдвига энергии относительно тока  $\Delta_j^w(\omega)$  (рис. 3, *b*). При больших частотах влияния моделей взаимодействия на фазовый сдвиг не наблюдается. Если у моделей с постоянной частотой столкновений (ММ и РММ) нет отклонений от СЕМ-модели, то для других моделей его можно увидеть в окрестности минимума при  $\omega = \sqrt{0.5}$ . На рис. 3, *c* представлена именно эта область. Наиболее сильные отклонения от СЕМ-модели оказались у СЕНС-модели.



**Рис. 2.** Зависимости: *a* — фазы тока относительно поля  $\Delta_E^j(\omega)$ , *b* — амплитуды приведенного тока  $A^j(\omega)$  для различных моделей взаимодействия.



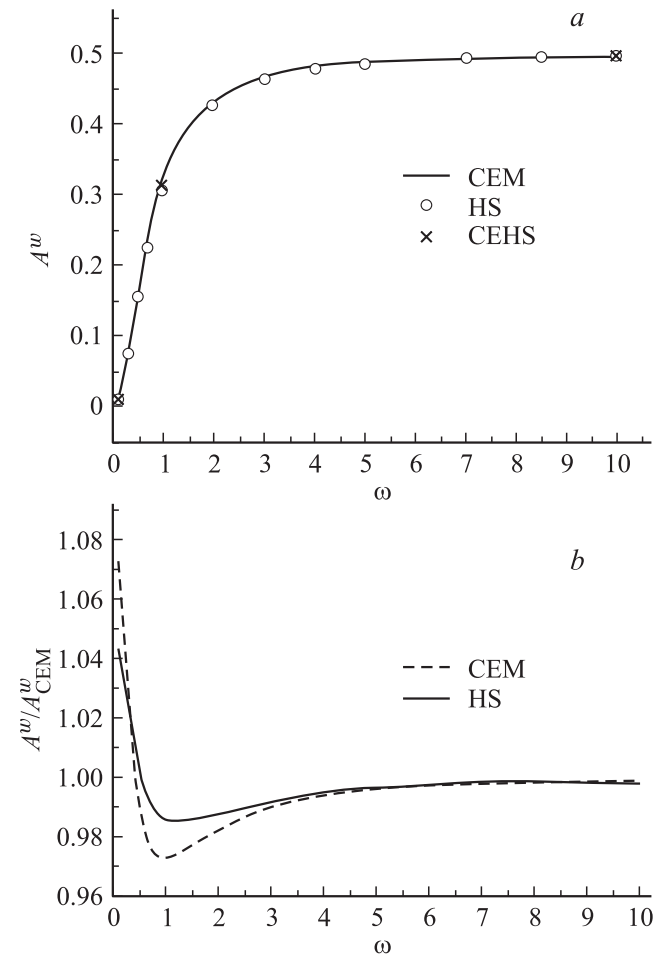
**Рис. 3.** Фазовый сдвиг приведенной полной энергии: *a* —  $\Delta_E^w(\omega)$ , *b, c* —  $\Delta_J^w(\omega)$  для различных моделей взаимодействия.

На рис. 4, *a* представлены зависимости поправки амплитуды колебаний  $A^w(\omega)$  и средней энергии  $a_0(\omega)$ . На рис. 4, *b* представлена зависимость отношения амплитуды колебаний к соответствующей амплитуде для СЕМ-модели. Видно, что в области низких частот заметно влияние сечения рассеяния на амплитуду колебаний. Поправки к среднему значению энергии также оказались близкими к соответствующей поправке для СЕМ-

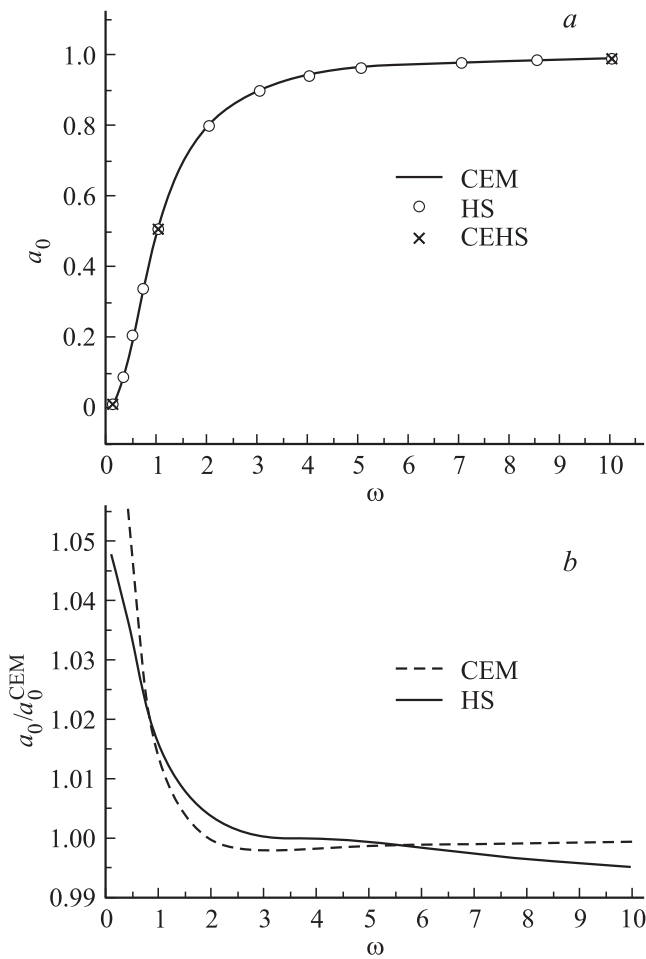
модели (32). На рис. 5, *b* представлены отношения этих поправок к поправке для СЕМ-модели.

Рассмотрим теперь, как в зависимости от сечения рассеяния полная энергия разделяется на продольную и поперечную. На рис. 6, *a* для HS-модели представлена зависимость от времени всех энергетических поправок при  $\omega = 0.3$ , а на рис. 6, *b* представлены зависимости поправки поперечной энергии для различных значений  $\omega$ . Видно, что с ростом частоты амплитуда колебаний поперечной поправки стремится к нулю. Однако среднее значение накапливаемой поперечной энергии увеличивается и при  $t \rightarrow \infty$  выходит на постоянное значение, которое для HS-модели равно 0.25 (напомним, что для CEHS-модели эта величина равна 0). На рис. 7 представлен фазовый сдвиг для различных компонент энергии ( $\Delta_E^w, \Delta_E^{w_l}, \Delta_E^{w_t}$ ) для HS-модели. Из рисунка видно, что  $\Delta_E^w$  и  $\Delta_E^{w_l}$  практически совпадают, а  $\Delta_E^{w_t}$  значительно больше по величине.

Для изучения влияния угловой части сечения на поперечную энергию мы рассмотрели ряд моделей с постоянной частотой столкновений и с угловыми зави-



**Рис. 4.** Зависимость амплитуды приведенной полной энергии  $A^w(\omega)$  для различных моделей взаимодействия.



**Рис. 5.** *a* — приведенная средняя энергия  $a_0(\omega)$ , *b* — отношения поправки средней энергии к соответствующей поправке для CEM-модели от частоты  $\omega$  для различных моделей взаимодействия.

симостями вида

$$\chi(\theta) = 1 + dz, \quad z = 1 - \sin^2(\theta/2), \quad (42)$$

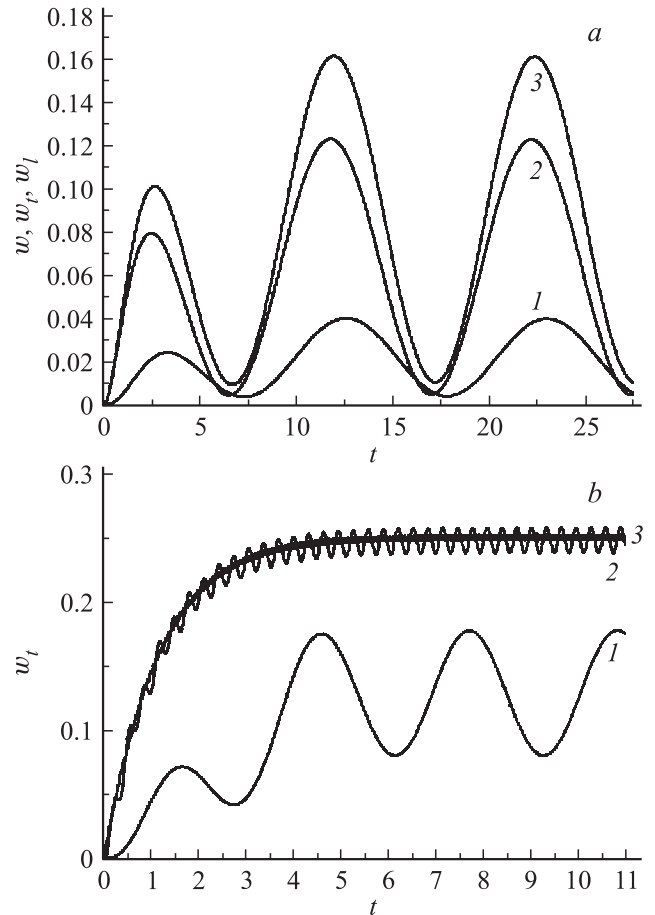
где  $d$  — параметр, который может меняться от  $-1$  до  $\infty$ . Значение  $d = -1$  соответствует максимально возможному рассеянию назад для угловой зависимости (42), с ростом  $d$  усиливается рассеяние вперед, а при  $d = 0$  имеет место изотропное рассеяние (РММ-модель). Легко показать, что параметр  $\beta$ , появляющийся при переходе к нестандартной нормировке, связан с коэффициентом  $d$  простой формулой

$$\beta = \frac{6}{3 + 2d}.$$

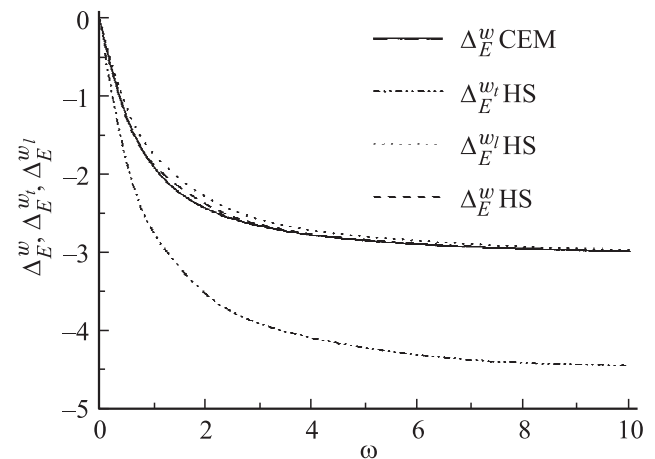
На рис. 8 представлена поправка к поперечной энергии для различных  $d$ . Кроме того, на этом же рисунке представлена поперечная энергия для истинных максвелловских молекул. Предельное значение поправки при  $\omega \rightarrow \infty$  для максвелловских молекул равно 0.29, а для псевдомаквелловских  $-0.22$ . Удивительным является

тот факт, что происходит монотонный рост поперечной поправки энергии при росте рассеяния вперед.

Начав с изучения очень высоких частот, мы во многих случаях рассматривали поведение физических моментов в области низких частот, сохраняя малым отношение

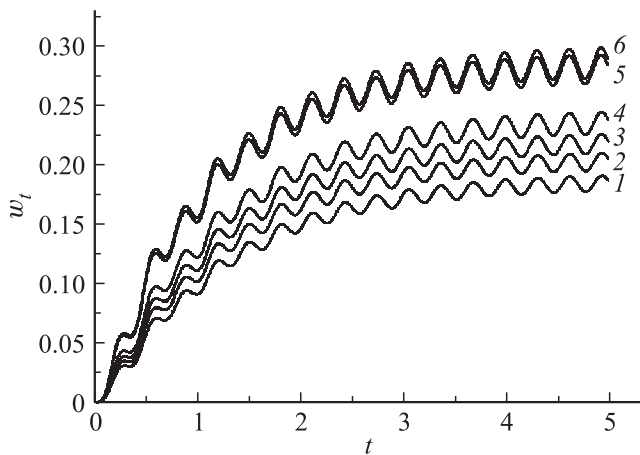


**Рис. 6.** *a* — зависимости  $w(t), w_l(t), w_l(t)$  при  $\omega = 0.3$ , HS-модель; *b* — приведенная поперечная энергия  $w_l(t)$  для различных частот: 1 —  $\omega = 1$ , 2 — 10, 3 — 50.



**Рис. 7.** Фазовые сдвиги приведенных энергий относительно поля  $\Delta_E^w(\omega), \Delta_E^{w_l}(\omega), \Delta_E^{w_l}(\omega)$  для HS-модели.





**Рис. 8.** Зависимость поправки к поперечной энергии  $w_t(t)$  для моделей с постоянной частотой столкновений и различными угловыми зависимостями: 1 —  $d = -1, \beta = 6$ ; 2 —  $d = -0.5, \beta = 3$ ; 3 —  $d = 0, \beta = 2$ ; 4 —  $d = 1, \beta = 1.2$ ; 5 —  $d = 8.5, \beta = 0.3$ ; 6 — ММ,  $\beta = 0.454734$ .

$\alpha = \epsilon_0/\omega$ . Учитывая, что зависимости тока и энергии от  $\omega$  оказались очень близкими к соответствующим зависимостям для СЕМ-модели, воспользуемся формулами (30), (32), (34) и (35), из которых следует, что при малых  $\omega$  амплитуда приведенного тока пропорциональна  $\omega$ , а амплитуда колебаний и среднее значение приведенной поправки к полной энергии пропорциональны  $\omega^2$ . Отсюда следует, что если при низких частотах не переходить к приведенным величинам, то

$$j_p = \epsilon_0 \cos(\omega t - \arctg(\omega)),$$

$$W_p - 3/2 = \epsilon_0^2 (b_0 + B^w \cos(2\omega t + \Delta_j^w)).$$

Здесь константы  $b_0$  и  $B^w$  зависят от модели взаимодействия и незначительно отличаются от единицы.

В заключение рассмотрим поведение ФР. Прежде всего необходимо было проверить, будут ли в случае других сечений моменты  $C_{r,l}$  пропорциональны целым степеням  $\alpha$ . Для этого сначала проводился расчет процесса с некоторым малым значением  $\alpha$ , а затем  $\alpha$  уменьшалось в 10 раз и проводился повторный расчет. После этого сравнивались  $C_{r,l}$  в этих двух расчетах. Те моменты, которые уменьшались на порядок, представляли собой величины первого порядка по  $\alpha$  и определяли поправку к ФР первого порядка, а те, которые уменьшались на 2 порядка, определяли поправку к ФР второго порядка малости. Оказалось, что при произвольных частотах  $\omega$  для всех рассматриваемых нами сечений взаимодействия в группу моментов первого порядка по  $\alpha$  вошли только  $C_{r,l}$  при  $l = 1$  и всех значениях  $r$ . В группу моментов второго порядка вошли  $C_{r,l}$  при  $l = 0, r > 0$  и все при  $l = 2$ .

Таким образом, можно утверждать, что всегда при малых  $\alpha$  ФР вплоть до второго приближения можно

представить в виде

$$f(\mathbf{c}, t) = M(c) \left( 1 + \alpha \Phi^{(1)} + \alpha^2 \Phi^{(2)} \right), \quad (43)$$

$$\Phi^{(1)} = \sum_{r=0}^{N_0-1} H_{r,1}(\mathbf{c}) C_{r,1}(t) / \alpha,$$

$$\Phi^{(2)} = \sum_{r=1}^{N_0-1} H_{r,0}(\mathbf{c}) C_{r,0}(t) / \alpha^2 + \sum_{r=0}^{N_0-2} H_{r,2}(\mathbf{c}) C_{r,2}(t) / \alpha^2,$$

где  $N_0$  — максимальное число полиномов Сонина в разложении функции распределения (в наших расчетах  $N_0 \leq 128$ ).

Рассмотрим для HS-модели периодическую часть поправок к функции распределения. Напомним, что для СЕМ-модели

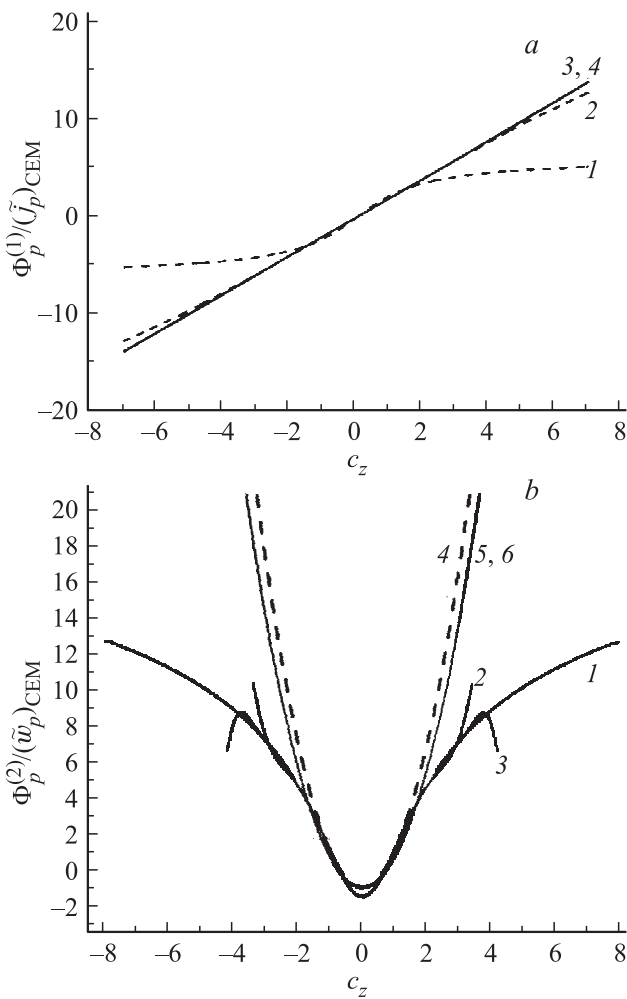
$$\left( \Phi_p^{(1)} \right)_{\text{СЕМ}} = 2c_z (\tilde{j}_p)_{\text{СЕМ}}, \quad (44)$$

$$\left( \Phi_p^{(2)} \right)_{\text{СЕМ}} = (2c_z^2 - 1) (\tilde{w}_p)_{\text{СЕМ}}, \quad (45)$$

где  $(\tilde{j}_p)_{\text{СЕМ}}$  и  $(\tilde{w}_p)_{\text{СЕМ}}$  — приведенные ток и поправка к полной энергии, которые определялись формулами (11) и (13).

На рис. 9, *a, b* представлены первая и вторая поправки к ФР для модели твердых шаров в сечении  $c_\rho = 0$ . На рис. 9, *a* представлено отношение  $\Phi_p^{(1)}(c_z, 0) / (\tilde{j}_p)_{\text{СЕМ}}$  для трех частот  $\omega = 0.3, 10, 50$ . При низких частотах для расчета  $\Phi_p^{(1)}$  потребовалось достаточно большое число полиномов Сонина (при  $\omega = 0.1$  величина  $N_0 = 64$ ). При больших частотах моменты  $C_{r,1}$  убывают настолько быстро, что уже даже для  $\omega = 10$  можно ограничиться  $N_0 = 1$ . Видно, что при малых частотах  $\Phi_p^{(1)}$  сильно отличается от СЕМ-модели. Важно подчеркнуть, что при больших частотах  $\Phi_p^{(1)}$  практически совпадает с  $\Phi_p^{(1)}$  для СЕМ-модели. Более того, это же свойство было подтверждено и для других моделей. Таким образом, для любых сечений взаимодействия при больших частотах  $\Phi_p^{(1)}$  определяется формулой (44).

Поправка  $\Phi_p^{(2)} / (\tilde{w}_p)_{\text{СЕМ}}$  в случае произвольных сечений рассеяния при  $\omega \rightarrow \infty$  не может стремиться к  $\Phi_p^{(2)} / (\tilde{w}_p)_{\text{СЕМ}}$  для СЕМ-модели. Действительно, как мы показали выше, поправка к полной энергии сходится при  $\omega \rightarrow \infty$  к соответствующей поправке для СЕМ-модели. Однако для любых сечений рассеяния, кроме резонансной перезарядки, происходит накопление поперечной энергии, продольная энергия становится меньше чем в случае СЕМ-модели, и ФР в направлении оси  $z$  будет отличной от СЕМ-модели. Это видно на рис. 9, *b*, где при  $\omega = 50$  отношение  $\Phi_p^{(2)} / (\tilde{w}_p)_{\text{СЕМ}}$  для HS-модели оказалось ниже чем для СЕМ-модели. Здесь же на кривой *b* видно, что точный результат получается при минимальном числе коэффициентов разложения ФР, учитываются только  $C_{1,0}$  и  $C_{0,2}$ .



**Рис. 9.** Зависимости  $\Phi_p^{(1)}(c_z, 0)/(\tilde{j}_p)_{SEM}$  и  $\Phi_p^{(2)}(c_z, 0)/(\tilde{w}_p)_{SEM}$ . *a*: HS-модель, кривая 1 —  $\omega = 0.3$ , 2 — 10, 3 — 50, 4 — SEM-модель; *b*: HS-модель, кривая 1 —  $\omega = 0.3, N_0 = 64$ ; 2 —  $\omega = 0.3, N_0 = 4$ ; 3 —  $\omega = 0.3, N_0 = 8$ ; 5 —  $\omega = 50, N_0 = 1$ ; 6 —  $\omega = 50, N_0 = 64$ ; 4 — SEM-модель.

Расчеты для различных сечений показали, что с ростом частоты все моменты, кроме  $C_{1,0}$  и  $C_{0,2}$  сильно убывают. Ограничиваясь только двумя моментами, можно поправку второго приближения представить в виде

$$\Phi^{(2)}(c_z, c_\rho) = \left(\Phi^{(2)}(c_z)\right)_{SEM} - 2c^2 P_2(\cos \theta) w_t, \quad (46)$$

где поперечная поправка к энергии  $w_t$  выражается через моменты  $C_{1,0}$  и  $C_{0,2}$  по формуле (23).

На рис. 9, *b* показаны также  $\Phi_p^{(2)}(\tilde{w}_p)_{SEM}$  при низкой частоте,  $\omega = 0.3$ . Видно, что здесь сходимость к решению с ростом числа полиномов Сонина значительно более медленная чем при высоких частотах.

### Обсуждение полученных результатов

Сравнение расчетов ФР и ее моментов для произвольных сечений взаимодействия с аналитическими резуль-

татами для SEM-модели показало удивительно хорошее совпадение. В первом приближении полное совпадение наблюдается в пределе очень высоких частот. Разница во втором приближении при высоких частотах связана с генерацией поперечной энергии для любых сечений рассеяния кроме резонансной перезарядки. Такое совпадение делает особенно значимыми аналитические результаты для SEM-модели.

Напомним, что совпадение результатов наблюдается только при проведении расчетов моментным методом в нестандартной нормировке, которая определяется так, чтобы безразмерная подвижность в постоянном поле при малых  $\epsilon$  равнялась единице.

В частности, для любых сечений взаимодействия наблюдается полное совпадение зависимостей фазового сдвига между током и полем от частоты (40).

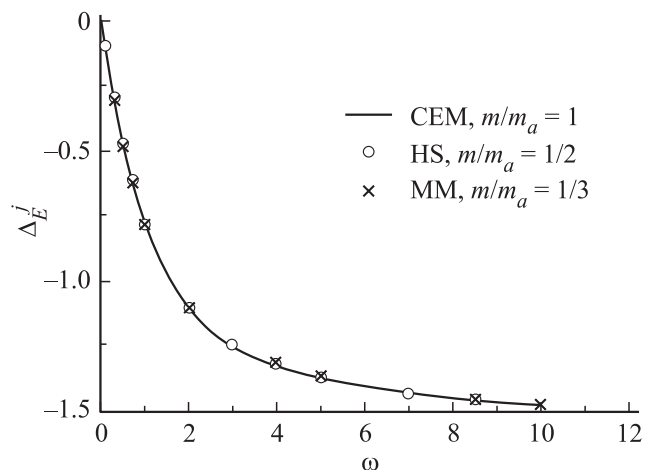
Этот факт можно использовать для экспериментального определения эффективной частоты столкновений или эффективного среднего времени между столкновениями.

Наибольшей крутизны зависимость фазового сдвига от частоты достигает в окрестности  $\omega = 1$  или для размерной частоты  $\Omega$  в окрестности  $\Omega \tau_{ef} = 1$ . При  $\omega = 1$  фазовый сдвиг равен  $-\pi/4$ . При проведении эксперимента необходимо выбирать амплитуду колебаний электрического поля  $E_0$ , достаточно малой так, чтобы в окрестности  $\omega = 1$  выполнялось условие  $\alpha \ll 1$ . Затем, изменяя частоту и измеряя  $\Delta_E^j$ , находим точку  $\Omega_0$ , где  $\Delta_E^j = -\pi/4$ , и находим  $\tau_{ef}$  для исследуемой пары ионы-атомы

$$\tau_{ef} = \frac{1}{\Omega_0}. \quad (47)$$

Теперь по (1) с  $\tau = \tau_{ef}$  находится безразмерная амплитуда колебаний электрического поля  $\epsilon_0$  и уточняется выполнение условия  $\alpha = \epsilon_0/\omega_0 = \epsilon_0 \ll 1$ . В случае необходимости эксперимент повторяется с другим значением  $E_0$ .

Отметим, что все расчеты проводились для случая равных масс ионов и атомов. В то же время важным яв-



**Рис. 10.** Зависимость  $\Delta_E^j(\omega)$  для разных отношений масс и различных сечений.

ляется определение  $\tau_{ef}$  для различного отношения масс ( $m/m_a \neq 1$ ). Полное исследование этой проблемы далеко выходит за рамки настоящей работы. Здесь рассмотрим только некоторые примеры по определению сдвига фаз тока относительно поля. Изменение отношения масс влияет в уравнении Больцмана только на интеграл столкновений и, следовательно, на матричные элементы. Рекуррентные соотношения для МЭ в случае неравных масс сталкивающихся частиц были получены в [18,23]. На основе этих соотношений были составлены программы расчета МЭ в случае произвольного отношения масс. Для расчета зависимости тока от времени и фазового сдвига использовались описанные выше программы. На рис. 10 представлены зависимости  $\Delta_E^j$  от  $\omega$  для двух моделей взаимодействия (HS и MM) и нескольких значений  $m/m_a$ . Видно, что зависимость  $\Delta_E^j(\omega)$  остается универсальной. Кроме того, при  $\omega = 1$  были проведены расчеты для HS-модели при значительно больших отклонениях  $m/m_a$  от единицы ( $m/m_a = 0.01, 0.1, 10$ ). Всюду наблюдалось прекрасное совпадение с универсальным значением  $-\pi/4$ . Следовательно, метод определения  $\tau_{ef}$  по фазовому сдвигу может быть использован для произвольных сечений взаимодействия и произвольного отношения масс ионов и атомов.

В заключение отметим, что вместе с  $\tau_{ef}$  находится подвижность ионов при малых  $\epsilon$  в стационарном состоянии, а по соотношению Эйнштейна и коэффициент диффузии ионов относительно атомов.

Работа частично поддержана грантом РФФИ № 12-08-00490 и грантом СПбГУ 6.0.24.2010.

## Список литературы

- [1] *Maneschi A., Goedheer W.J.* // J. Appl. Phys. 1991. Vol. 69. P. 2923.
- [2] *Kypers A.D., Hopman H.J.* // J. Appl. Phys. 1988. Vol. 63. P. 1894.
- [3] *Chen F.F., Chang J.P.* Lecture Notes on principles of plasma processing. Springer, 2003. 208 p.
- [4] *Lieberman M.A., Lichtenberg A.J.* Principles of Plasma Discharge and Material Processing. Hoboken, NJ: Wiley Interscience, 2005. 800 p.
- [5] *Bhatnagar P.L., Gross E.P., Krook M.* // Phys. Rev. 1954. Vol. 94. P. 511–525.
- [6] *Robson R.E., Makabe T.* // Aust. J. Phys. 1994. Vol. 47. P. 305–314.
- [7] *Sugawara H., Tagashira H., Sakay Y.* // J. Phys. D: Appl. Phys. 1996. Vol. 29. P. 1168–1174.
- [8] *Эндер А.Я., Эндер И.А., Герасименко А.Б.* // ЖТФ. 2013. Т. 83. Вып. 7. С. 6–15.
- [9] *Mason E.A., McDaniel E.W.* Transport Properties of Ions in Gases. NY: Wiley, 1988. 489 p.
- [10] *Dujko S., White R.D., Petrovic Z.Lj., Robson R.E.* // Phys. Rev. E. 2010. Vol. 81. P. 046403.
- [11] *Kumar K.* // Ann. Phys. 1966. Vol. 37. P. 113–141.
- [12] *Kumar K., Skullerud H.R., Robson R.E.* // Aust. J. Phys. 1980. Vol. 33. P. 343–406.
- [13] *Viehland L.A.* // Int. J. Ion Mobil. Spec. 2011. Vol. 15. P. 21–29.
- [14] *Viehland L.A., Siems W.F.* // J. Am. Soc. Mass. Spectrom. 2012. Vol. 11. N 23. P. 1841–1854.
- [15] *Li B., Robson R.E., White R.D.* // Phys. Rev. E. 2006. Vol. 74. P. 026405.
- [16] *White R.D., Ness K.F., Robson R.E., Li B.* // Phys. Rev. E. 1999. Vol. 60. P. 2231–2249.
- [17] *White R.D., Ness K.F., Robson R.E.* // App. Surf. Sci. 2002. Vol. 192. P. 26–49.
- [18] *Эндер А.Я., Эндер И.А.* Интеграл столкновений уравнения Больцмана и моментный метод. СПб.: СПбГУ, 2003. 224 с.
- [19] *Ender A.Ya., Ender I.A.* // Phys. Fluids. 1999. Vol. 11. P. 2720–2730.
- [20] *Эндер А.Я., Эндер И.А.* // ЖТФ. 2010. Т. 80. Вып. 2. С. 8–17.
- [21] *Эндер А.Я., Эндер И.А., Герасименко А.Б.* // ЖТФ. 2010. Т. 80. Вып. 2. С. 18–28.
- [22] *Ender A.Y., Ender I.A., Gerasimenko A.B.* // The Open Plasma Phys. J. 2009. Vol. 2. P. 24–62.
- [23] *Ender A.Ya., Ender I.A.* // Transport Theor. Stat. 2007. Vol. 56. P. 563–588.