

02;03

## Транспортные свойства электронов в смеси ксенона с водородом

© В.М. Атражев, В.В. Дмитренко, И.В. Чернышева

Институт теплофизики экстремальных состояний РАН, Москва

E-mail: atrazhev@yandex.ru

Московский инженерно-физический институт

(государственный университет)

E-mail: dmitren@kfl.mephi.ru, Chernysheva@nm.ru

Поступило в Редакцию 20 августа 2003 г.

Представлены результаты численного решения уравнения Больцмана в двухчленном приближении с учетом упругих и неупругих столкновений электронов в смесях Xe + H<sub>2</sub>. С использованием полученных функций распределения электронов по энергиям проведены расчеты транспортных коэффициентов электронов — скорости дрейфа, подвижности, средней и характеристической энергий, коэффициента диффузии — в интервале изменения параметра  $E/N$  (отношение напряженности внешнего электрического поля к плотности газа) до нескольких Td. Для электронных транспортных коэффициентов в смеси Xe + H<sub>2</sub> с различной концентрацией молекул выведено правило подобия, позволяющее определять значения транспортных коэффициентов в смеси с малым (менее 4%) содержанием водорода.

Одним из перспективных направлений развития гамма-спектрометрии является разработка детекторов на основе ионизационных камер, заполненных сжатым ксеноном [1]. Основная задача спектротрических измерений заключается в определении интенсивности дискретных гамма-линий от различных источников и их идентификации. Для этого необходимы приборы, обладающие хорошим энергетическим разрешением, высокими быстродействием и эффективностью регистрации по пику полного поглощения, хорошими эксплуатационными параметрами (такими, как простота в эксплуатации, надежность, долговечность), устойчивостью к воздействию внешних факторов, низкой стоимостью. Возможности детекторов на основе ионизационных камер определяются транспортными свойствами электронов, порожденных гамма-квантом в рабочем газе. Энергетическое и пространственное раз-

решение, быстрдействие зависят от способности электронов двигаться в рабочем газе с максимальной скоростью дрейфа и минимальным диффузионным расплыванием. Для оптимизации параметров рабочего газа ионизационных камер (давления и температуры газа-наполнителя, необходимых молекулярных добавок в атомарный газ) необходимы исследования транспортных свойств электронов, инжектированных в такую среду.

Добавление молекулярного водорода в инертные газы (Ar, Kr или Xe) является одним из широко используемых методов увеличения скорости дрейфа электронов в газонаполненных детекторах излучений [2]. В данной работе представлены результаты расчетов электронных транспортных коэффициентов в смеси Xe + H<sub>2</sub>, полученные при численном решении уравнения Больцмана для функции распределения электронов по энергиям. Результаты расчетов сравниваются с имеющимися в литературе экспериментальными данными по скорости дрейфа и поперечной характеристической энергии в смеси Xe+H<sub>2</sub> [3,4] и в чистом водороде [5]. Проведенные расчеты предоставляют необходимые данные по электронным транспортным коэффициентам в широком интервале электрических полей и концентрации молекулярной примеси.

Кинетика электронов в молекулярных и атомарных газах существенно различается. В атомарных газах электроны, имеющие энергию менее 10 eV, испытывают лишь упругие столкновения с атомами, при которых теряют малую долю своей энергии, пропорциональную  $\delta \sim 2m/M \ll 1$ , где  $M$  — масса атома. Малость параметра  $\delta$  позволяет записать интеграл упругих столкновений электронов с атомами в дивергентной форме и свести уравнение Больцмана к дифференциальному уравнению второго порядка для симметричной части функции распределения  $f_0(\varepsilon)$  в пространстве энергий. При упругих столкновениях потери энергии имеют место при любых энергиях электронов.

Ситуация кардинально меняется в молекулярных газах, где возможны возбуждения вращательных и колебательных степеней свободы молекул при их столкновениях с электронами. При таких столкновениях электроны теряют значительную часть своей энергии, равную кванту вращательного или колебательного возбуждения  $\varepsilon_i$ . Другой характерной чертой неупругих процессов является их порог: электроны с энергией, меньшей кванта возбуждения  $\varepsilon < \varepsilon_i$ , не испытывают неупругих столкновений с потерей энергии. Исключением являются неупругие удары II рода, когда электрон сталкивается с молекулой в возбужденном

состоянии и приобретает от нее энергию, равную кванту этого возбуждения. Такие процессы возможны для электронов любых энергий и обладают основным свойством неупругих процессов: при столкновении электрон приобретает значительный квант энергии. Неупругие столкновения не приводят к диффузионному блужданию электронов в пространстве энергий (основное условие, необходимое для записи интеграла столкновений в дивергентной форме), а реализуются как уход электрона энергии  $\varepsilon$  из фазового объема  $d\varepsilon$  в фазовый объем около энергии  $(\varepsilon - \varepsilon_i)$  в случае неупругого соударения I рода или около энергии  $(\varepsilon + \varepsilon_i)$  в случае соударения II рода.

Будем решать стационарное уравнение Больцмана для изотропной части функции распределения электронов  $f_0(\varepsilon)$  в однородном (или слабо меняющемся) электрическом поле  $E$  при наличии упругих и неупругих столкновений электронов с молекулами газа. Нагрев электронов полем будем учитывать в двучленном приближении [6]. Будем пренебрегать влиянием градиента плотности электронов на функцию распределения, что оправдано при вычислении подвижности электронов  $\mu(E/N)$  и коэффициента диффузии  $D_T(E/N)$  поперек электрического поля. Ниже речь будет идти о смеси атомарного и молекулярного газов с концентрацией молекул  $\chi = N_M/N$ , где  $N = N_A + N_M$ , а  $N_A$  и  $N_M$  — парциальные плотности атомов и молекул в смеси. Частота упругих столкновений будет включать как столкновения электронов с атомами, так и их упругие столкновения с молекулами. В частоте передачи энергии при упругом рассеянии также будут учитываться упругие соударения электронов с атомами и молекулами. Интеграл неупругих столкновений в правой части пропорционален концентрации молекул  $N_M$ . В разреженных газах электронные транспортные коэффициенты зависят от поля  $E$  и плотности газа  $N$  в виде комбинации  $E/N$ . Поэтому запишем уравнение Больцмана в виде

$$\begin{aligned} \frac{d}{d\varepsilon} \left\{ \left[ \frac{e^2}{3} \left( \frac{E}{N} \right)^2 \frac{\varepsilon}{q_A(\varepsilon)(1-\chi) + q_M(\varepsilon)\chi} \right. \right. \\ \left. \left. + T\varepsilon^2 \left( \frac{2m}{M_A} q_A(\varepsilon)(1-\chi) + \frac{2m}{M_M} q_M(\varepsilon)\chi \right) \right] \frac{df_0}{d\varepsilon} \right. \\ \left. + \varepsilon^2 \left( \frac{2m}{M_A} q_A(\varepsilon)(1-\chi) + \frac{2m}{M_M} q_M(\varepsilon)\chi \right) f_0(\varepsilon) \right\} \end{aligned}$$

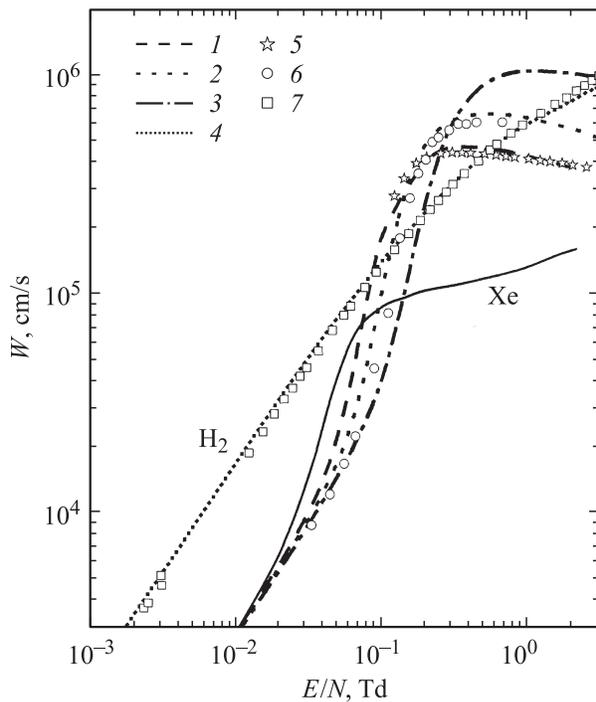
$$\begin{aligned}
+\chi \sum_i S_i (q_i(\varepsilon) + q_{-i}(\varepsilon)) \varepsilon f_0(\varepsilon) = \chi \sum_i S_i ((\varepsilon + \varepsilon_i) q_i(\varepsilon + \varepsilon_i) f_0(\varepsilon + \varepsilon_i) \\
+ (\varepsilon - \varepsilon_i) q_{-i}(\varepsilon - \varepsilon_i) f_0(\varepsilon - \varepsilon_i)), \quad (1)
\end{aligned}$$

где  $q_A(\varepsilon)$  и  $q_M(\varepsilon)$  — известные транспортные сечения упругого рассеяния электронов на атомах Хе и молекулах  $H_2$  [7],  $M_A$  и  $M_M$  — массы атомов и молекул,  $q_i(\varepsilon)$  — сечение неупругих столкновений I рода, при которых электрон теряет энергию  $\varepsilon_i$ , и  $q_{-i}(\varepsilon)$  — сечение столкновений II рода, при которых электрон приобретает энергию  $\varepsilon_i$ . Будем учитывать следующие неупругие процессы: возбуждение вращательных уровней молекул  $H_2$   $J: 0 \rightarrow 2, J: 1 \rightarrow 3, J: 2 \rightarrow 4, J: 3 \rightarrow 5$ , где  $J$  — вращательное квантовое число; удары II рода  $J: 2 \rightarrow 0, J: 3 \rightarrow 1, J: 4 \rightarrow 3, J: 5 \rightarrow 3$ ; возбуждение колебательного уровня  $V: 0 \rightarrow 1$ . Сечения возбуждения вращений молекул и сечения ударов II рода даются формулой Герджоя–Штейна [8]. Пороговые энергии вращательных переходов имеют следующие значения:  $\varepsilon_{02} = 0.0434$  eV;  $\varepsilon_{13} = 0.0727$  eV;  $\varepsilon_{24} = 0.107$  eV,  $\varepsilon_{35} = 0.138$  eV.  $S_i$  — статистический фактор, определяющий заселенность вращательных состояний  $J$  молекул, запишем в виде [9]:

$$S_J = \frac{p_J \cdot \exp(-E_J/kT)}{\sum_J p_J \cdot \exp(-E_J/kT)},$$

где статистические веса  $p_J = (2t + 1)(t + a)(2J + 1)$ ,  $t$  — спин ядра (1/2 для  $H_2$ ),  $a = 0$  или 1 для четных и нечетных  $J$  соответственно. Возбуждение электронным ударом колебательных степеней свободы молекулы имеет значительно больший порог  $\varepsilon_v = 0.52$  eV. Эти сечения табулированы в [7] как функции энергии электронов и не аппроксимируются элементарными функциями.

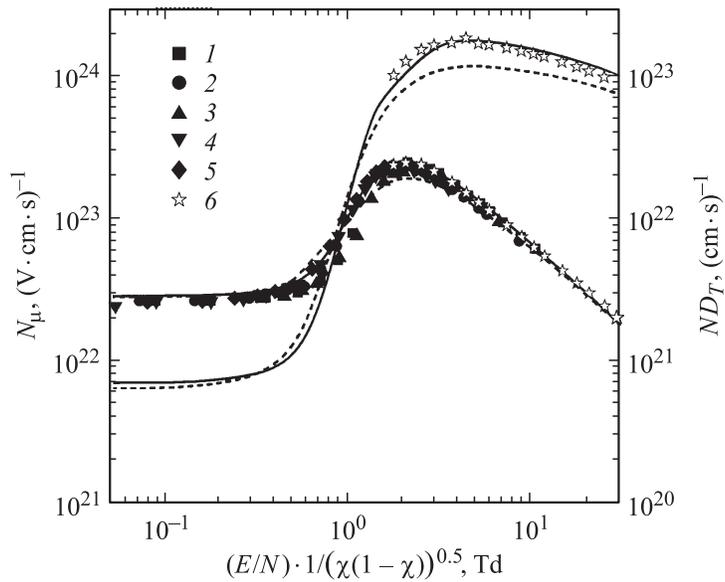
Уравнение (1) численно решалось с помощью алгоритма, предложенного в [10]. Полученные функции распределения  $f_0(\varepsilon)$  использовались для расчета скорости дрейфа электронов, их подвижности и коэффициента диффузии для  $E/N \leq 4$  Td и любых значений концентраций водорода в ксеноне. Результаты расчетов скоростей дрейфа в смеси представлены на рис. 1 вместе с экспериментальными данными. Видно, что уже малые (доли процента) добавки водорода увеличивают скорость дрейфа горячих электронов в несколько раз. Были проведены расчеты для предельно малых концентраций примеси для



**Рис. 1.** Расчетные скорости дрейфа электронов в смеси Xe + H<sub>2</sub> для концентраций H<sub>2</sub> 0.46% (1), 1% (2), 3% (3), 100% (4) в сравнении с экспериментальными данными [4] (5), [3] (6) и [5] (7). Сплошная линия — расчет для чистого Xe.

определения минимального количества H<sub>2</sub>, при котором он начинает влиять на электронные транспортные свойства газообразного ксенона. Такое предельное значение концентрации молекулярной примеси равно  $\chi_{\min} = 0.01\%$ .

Из анализа результатов численных расчетов и структуры уравнения Больцмана (1) следует, что транспортные коэффициенты электронов (подвижность, средняя и характеристическая энергии, коэффициент диффузии) в смеси с малым количеством молекулярной примеси удовлетворяют правилу подобия по параметру  $E/(N\chi\sqrt{1-\chi})$  [11]. Это означает, что значения транспортных коэффициентов, имеющие при



**Рис. 2.** Подвижность и коэффициент поперечной диффузии электронов в смесях Xe + H<sub>2</sub> с различным содержанием H<sub>2</sub> как функции приведенного параметра  $E/N\sqrt{\chi(1-\chi)}$ . Экспериментальные данные [3]: 1 — 0.4% H<sub>2</sub>, 2 — 0.6% H<sub>2</sub>, 3 — 1% H<sub>2</sub>, 4 — 1.6% H<sub>2</sub>, 5 — 2% H<sub>2</sub>; [4]: 6 — 0.46% H<sub>2</sub>; расчет: сплошная линия — 1% H<sub>2</sub>, пунктирная линия — 4% H<sub>2</sub>.

различных концентрациях примеси  $\chi$  различные значения при одних и тех же  $E/N$ , ложатся на одну кривую, построенную как зависимость от параметра подобия  $E/(N\chi\sqrt{1-\chi})$ . Это правило продемонстрировано на рис. 2, где представлены результаты расчетов подвижности и коэффициента диффузии в смесях Xe + H<sub>2</sub> с различными концентрациями водорода и экспериментальные данные. Значения  $N\mu(E/(N\chi\sqrt{1-\chi}))$  и  $ND_T(E/(N\chi\sqrt{1-\chi}))$  сконцентрированы на универсальных кривых. Отклонения от правила подобия проявляются при концентрации примеси  $\chi > 0.04$  (4%). Эта верхняя граница определяется соотношением упругих сечений рассеяния электронов на атомах и молекулах.

В заключение отметим, что проведенные исследования позволяют вычислить с достаточно высокой точностью значения электронных

транспортных коэффициентов в широком диапазоне условий (плотность газа  $N$ , напряженность поля  $E$ , концентрация присадки  $\chi$ ), где отсутствуют экспериментальные данные. Такая информация чрезвычайно полезна при проектировании гамма-спектров на основе ионизационных камер, наполненных сжатым ксеноном.

Авторы выражают благодарность Российскому фонду фундаментальных исследований (грант 03–02–16451) и Совету по грантам Президента Российской Федерации для поддержки молодых российских ученых и ведущих научных школ Российской Федерации (НШ–1953.2003.2).

## Список литературы

- [1] *Vlasik K.F., Gratchev V.M., Dmitrenko V.V. et al.* // Instruments and Experimental Techniques. 1999. V. 42. N 5. P. 114.
- [2] *Christophorou L.G., Maxey D.V., McCorkle D.L. et al.* // Nuclear Instr. and Methods. 1980. V. 171. P. 4913.
- [3] *Кириленков А.В., Коновалов С.П., Муравьев С.В.* и др. Препринт ФИАН. М., 1981. № 149.
- [4] *Elford M.T., Sasaki S., Ness K.F.* // Australian J. of Physics. 1994. V. 47. P. 253.
- [5] *Dutton J.A.* // J. Phys. Chem. Ref. Data. 1975. V. 4. P. 577.
- [6] *Гинзбург В.Л., Гуревич А.В.* // УФН. 1960. Т. 50. № 2. С. 201.
- [7] *Trajmar S., Register D.F.* // Chutjian A. Phys. Rep. 1983. V. 97. N 5. P. 219.
- [8] *Gerjuoy E., Stein S.* // Phys. Rev. 1955. V. 97. P. 1671; 1955. V. 98. P. 1848.
- [9] *Frost L.S., Phelps A.V.* // Phys. Rev. 1962. V. 127. P. 1621.
- [10] *Дятко Н.А., Кочетов И.В., Напартович А.Д.* и др. Препринт ИАЭ им И.В. Курчатова. ИАЭ-3842/12. М., 1983.
- [11] *Atrazhev V.M., Chernysheva I.V., Davydovskaya E.V. et al.* // Научная сессия МИФИ-2003. International seminar „High pressure xenon“. Сб. науч. тр. М., 2003. Т. 7. С. 200.