

01;03

Решение уравнения непрерывности для ионов в газе при их движении в знакопеременном периодическом несимметричном по полярности электрическом поле

© И.А. Буряков

Конструкторско-технологический институт геофизического и экологического приборостроения СО РАН, Новосибирск
E-mail: buryakov@uiggm.nsc.ru

Поступило в Редакцию 23 августа 2005 г.

На основе решения уравнения непрерывности проведен математический анализ движения ионов в газе в знакопеременном периодическом несимметричном по полярности электрическом поле. Найдены решения уравнения переноса, описывающие распределение ионов в газе в планарной и цилиндрической полостях. Приведены оценки эффекта фокусировки ионов, возникающего в указанном поле. Результаты этого анализа могут быть использованы при проектировании спектрометров приращенной ионной подвижности — устройств, предназначенных для обнаружения микропримесей взрывчатых, наркотических и других опасных веществ.

PACS: 51.10.+y, 41.75.-y

В отсутствие источников и стоков заряженных частиц движение ионов в газе в произвольный момент времени описывают уравнением непрерывности

$$(\partial n(\mathbf{r}, t)/\partial t) + \nabla \cdot \mathbf{J} = 0, \quad (1)$$

$n(\mathbf{r}, t)$ — плотность ионов, \mathbf{r} — радиус-вектор, t — время. При действии электрического поля общий поток ионов определяется комбинацией дрейфового и диффузионного потоков [1]

$$\mathbf{J} = V(\mathbf{r})n(\mathbf{r}, t) - D \cdot \nabla n(\mathbf{r}, t), \quad (2)$$

$V(\mathbf{r})$ — скорость дрейфа ионов, D — коэффициент диффузии. Подставив (2) в (1) и разделив переменные

$$n(\mathbf{r}, t) = n_0(\mathbf{r})T(t), \quad (3)$$

получим уравнение для функции $T(t)$, решение которого имеет вид

$$T(t) = \exp^{-t/\tau}, \quad (4)$$

τ — постоянная времени затухания. Поиск решения в упрощенном виде (3) приводит к уравнению переноса ионов, не зависящему от времени:

$$\nabla \cdot (D\nabla n_0(\mathbf{r}) - V(\mathbf{r})n_0(\mathbf{r})) + n_0(\mathbf{r})/\tau = 0. \quad (5)$$

Характер решения уравнения (5) зависит от геометрии полости, вмещающей газ и ионы, и соответствующих граничных условий.

Введем ограничения, упрощающие решение уравнения (5): а) плотность ионов и, следовательно, поле пространственного заряда пренебрежимо малы; б) искажения электрического поля на краях электродов, формирующих полость, не учитываются; в) плотность ионов обращается в нуль на стенке полости; г) скорость движения газа, вмещающего ионы, равна нулю.

В данной работе рассмотрены полости, имеющие планарную или цилиндрическую геометрии. Планарная полость прямоугольного сечения (одномерная) образована между двумя металлическими плоскопараллельными электродами. Цилиндрическая полость имеет сечение в форме кольца и формируется между двумя коаксиально расположенными цилиндрическими электродами. Расчет производили для полостей, имеющих следующие геометрические размеры: планарная — расстояние между электродами $d = 0.2$ см; цилиндрическая — $r_1 = 0.7$, $r_2 = 0.9$, r_1, r_2 — радиусы внутреннего и внешнего цилиндров. К электродам подключены постоянное (U_c) и знакопеременное периодическое несимметричное по полярности ($U_d f(t)$, U_d — амплитуда, $f(t)$ — форма, P — период) напряжения, вырабатываемые соответствующими генераторами. Форма $f(t)$ удовлетворяет условиям [2]

$$\frac{1}{P} \int_t^{t+P} f^{2m+1}(t) dt \begin{cases} = 0, & n = 0 \\ \equiv \langle f^{2m+1} \rangle \neq 0, & m \geq 1 \end{cases}, \quad (6)$$

m — целое число. Под действием знакопеременного периодического несимметричного по полярности электрического поля ($E_d f(t)$) ионы, совершая колебания с периодом P , дрейфуют вдоль силовых линий поля с характерной средней скоростью $\langle V \rangle$, пропорциональной приращению коэффициента подвижности ($\alpha = (K(E) - K(0))/K(0)$, K — коэффициент подвижности, E — напряженность электрического поля) данного типа ионов. Этот дрейф компенсируется постоянным электрическим полем E_c . Условие компенсации ($\langle V \rangle = 0$) [3]

$$E_c = \alpha_i E_d \langle f^3 \rangle \quad \text{или} \quad U_c = \alpha_i U_d \langle f^3 \rangle. \quad (7)$$

Для полости с планарной геометрией условие (7) выполняется для любого d . Для цилиндрической полости напряженность электрического поля является функцией радиуса $E(r)$. Поэтому, если приложить суперпозицию полей $E_c + E_d f(t)$, при которой $\langle V \rangle = 0$, например, при $r_0 = (r_1 + r_2)/2$, то под действием такого поля ионы с координатами $r \neq r_0$ приобретают скорость, направленную к r_0 (при $\alpha > 0$) [4]:

$$V_f = c_0(r_0 - r)/r, \quad c_0 = K U_c / (r_0 \ln(r_2/r_1)). \quad (8)$$

Наличие скорости V_f приводит к фокусировке ионов вблизи r_0 . Эффект фокусировки ионов, находящихся в газе, под действием знакопеременного периодического несимметричного по полярности электрического поля $E_d f(t)$, напряженность которого имеет пространственный градиент, был впервые описан в [5] и более подробно рассмотрен в [6,7].

Решения уравнения (5) для полостей с различной геометрией имеют вид:

для планарной (одномерной) с граничным условием $n_0(x) = 0$ при $x = \pm g/2$

$$n_0(x, \tau) = A_1 \cos(\pi x/g), \quad \tau = g^2/(\pi^2 \bar{D}), \quad (9)$$

$g = d - l = d - (1/2) \int_P |K E_d f(t)| dt$ — эффективный зазор, \bar{D} — коэффициент диффузии, усредненный по P ;

для цилиндрической (при $r_0 \gg r - r_0$) с $n_0(r) = 0$, при $r_{1,2} = r_1 + l, r_2 - l$

$$n_0(r, \tau) = C_1 \left(1 + \sum_{k=1}^{\infty} \frac{(-1)^k (c)_k}{k!} \left(\frac{(r - r_0)^2}{2\bar{D}} \right)^k \right), \quad (10)$$

$(c)_k = \left(\frac{c_0}{r_0} + \frac{1}{\tau} \right) \dots \left(\frac{c_0}{r_0} + \frac{1}{(2k-1)\tau} \right)$, A_1, C_1 — постоянные интегрирования.

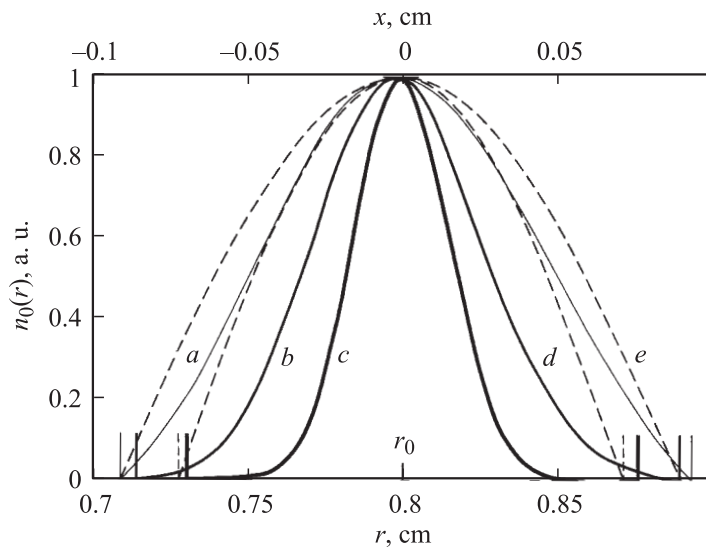


Рис. 1. Распределение ионов ДНТ в цилиндрической $n_0(r)$ (a, b, c — сплошные линии) и планарной $n_0(x)$ (d, e — пунктирные) полостях при различных E_d .

На рис. 1 показаны распределения ионов 2, 4-динитротолуола (ДНТ) в цилиндрической $n_0(r)$ и планарной $n_0(x)$ полостях при различных E_d . Вертикальными линиями вблизи оси x указаны значения $-g/2, g/2$ и $r_{1,2} = r_1 + l, r_2 - l$. Как видно из рисунка, для планарной полости распределение $n_0(x)$ имеет косинусоидальную форму при любой E_d , для цилиндрической — с ростом E_d форма распределения $n_0(r)$ трансформируется от косинусоидальной к распределению, близкому к распределению Гаусса, среднее квадратическое отклонение уменьшается.

На рис. 2 приведены зависимости постоянной времени затухания τ (среднего времени жизни ионов относительно столкновений со стенками полости, содержащей газ) от амплитуды напряженности E_d для ионов ДНТ и 2, 4, 6-тринитротолуола (ТНТ) в цилиндрической и планарной полостях. Значения коэффициентов диффузии в малом поле определялись из соотношения Энштейна ($D = kTK/e, k$ — постоянная

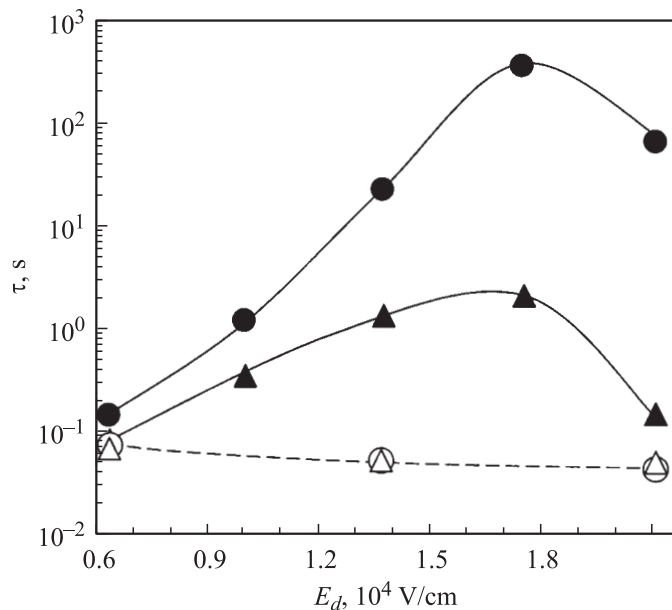


Рис. 2. Зависимости постоянной времени затухания (τ) ионов ДНТ (круг) и ТНТ (треугольник) от амплитуды E_d в цилиндрической (сплошная линия) и планарной (пунктирная линия) полостях.

Больцмана, e — заряд иона, T — температура) с учетом $K_{\text{ДНТ}} = 1.85$, $K_{\text{ТНТ}} = 1.7 \text{ cm}^2/(\text{V} \cdot \text{s})$ при $T = 297 \text{ K}$.

Из рисунка видно, что при малых E_d постоянные времена затухания τ для цилиндрической и планарной полостей близки по величине: для ДНТ = 0.14, 0.078 s; для ТНТ = 0.08, 0.077 s соответственно. Далее, с увеличением E_d величина τ в цилиндрической полости возрастает, достигая максимальных значений при $E_d = 1.8 \cdot 10^4 \text{ V/cm}$: $\tau_{\text{ДНТ}} = 400 \text{ s}$, $\tau_{\text{ТНТ}} = 2 \text{ s}$, затем уменьшается. В планарной полости рост E_d вызывает падение постоянных времени затухания до $\tau = 0.04 \text{ s}$.

Общее решение нестационарного уравнения (1) для полостей с цилиндрической и планарной геометриями в приближении (3) имеют вид

$$n(r, t) = n_0(r, \tau) \exp^{-t/\tau}; \quad n(x, t) = n_0(x, \tau) \exp^{-t/\tau}. \quad (11)$$

Таким образом, математический анализ движения ионов в газе в знакопеременном периодическом несимметричном по полярности электрическом поле, основанный на решении уравнения непрерывности, показал, что наличие пространственного градиента поля значительно увеличивает величину постоянной времени затухания (среднего времени жизни ионов). Найденные решения уравнения переноса описывают распределение ионов в газе в планарной и цилиндрической полостях как функции параметров электрического поля. Это может быть использовано при проектировании спектрометров приращения ионной подвижности.

Список литературы

- [1] *Mason E.A., McDaniel E.W.* Transport Properties of Ions in Gas. N.Y.: John Wiley & Sons, 1988. 560 p.
- [2] *Горшков М.П.* // А. с. СССР. № 966583, G 01 N 27/62, 1980.
- [3] *Вуряков I.A.* // Technical Physics. 2002. V. 47. Is. 11. P. 1453–1457.
- [4] *Вуряков I.A.* // Int. J. For Ion Mobility Spectrometry. 2001. V. 4. N 2. P. 112–116.
- [5] *Буряков И.А., Крылов Е.В., Солдатов В.П.* Патент РФ № 1485808, МКИ G 01 N 27/62, 1987.
- [6] *Guevremont R., Purves R.W.* // Review of Scientific Instrument. 1999. V. 70. N 2. P. 1370–1383.
- [7] *Krylov E.V.* // Int. J. of Mass Spectr. 2003. V. 225. P. 39–51.