

01,03

Кинетика ионов в нейтральном газе при резком включении электрического поля. Ч. I. СЕМ-модель

© А.Я. Эндер,¹ И.А. Эндер²¹ Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе РАН,
194021 Санкт-Петербург, Россия² Санкт-Петербургский государственный университет,
199164 Санкт-Петербург, Россия
e-mail: andrei.ender@mail.ioffe.ru

(Поступило в Редакцию 27 апреля 2009 г.)

Новый метод расчета матричных элементов интеграла столкновений использован как для решения задач о подвижности ионов на фоне атомов, так и для построения функции распределения ионов при резком включении электрического поля. Показано, как с помощью нестационарного моментного метода можно строить стационарную функцию распределения там, где стационарный моментный метод оказывается совершенно непригодным. С помощью аналитически построенного авторами решения нестационарной задачи для СЕМ-модели, соответствующей резонансной перезарядке с постоянной частотой столкновений, изучены границы применимости нестационарного моментного метода.

Введение

Одним из основных методов решения уравнения Больцмана является моментный, предложенный еще Барнеттом [1]. Развитие этого метода сдерживалось отсутствием матричных элементов (МЭ) интеграла столкновений, особенно в нелинейном случае. В работах [2–4] было показано, что между МЭ существует множество связей. Были разработаны и построены рекуррентные процедуры, с помощью которых вычисляются все нелинейные МЭ, если заданы самые простые линейные изотропные МЭ. В ходе этих вычислений заодно строятся линейные неизотропные МЭ с большими значениями индексов. Именно линейные МЭ необходимы для изучения малой примеси ионов в газе.

На примере решения нелинейных релаксационных задач в случае изотропной функции распределения (ФР) было показано, что моментный метод может быть использован не только для построения моментов ФР, но и для построения самой ФР при достаточно сильных отклонениях от равновесия вплоть до 5–10 тепловых скоростей [2,3].

В настоящей работе моментный метод с использованием большого количества МЭ применяется к решению задачи о построении ФР ионов в электрическом поле. Наиболее ранний кинетический подход к решению задач переноса заряженных частиц можно найти в работах [5–8]. Общие результаты как теоретических, так и экспериментальных исследований, выполненных до 70-х–80-х годов прошлого века, обсуждаются в [9,10]. В этих монографиях проведена классификация рассмотренных проблем: наибольшее число результатов получено в двух крайних случаях: очень слабого или очень сильного электрического поля. Обзор последующих работ в этом направлении за последние десятилетия можно найти в [11,2].

Большое число работ по изучению кинетики заряженных частиц инициировано Кумаром [13], предложившим оригинальный способ расчета МЭ интеграла столкновений с помощью коэффициентов Талми. Многие результаты по развитию методов решения уравнения Больцмана применительно к заряженным частицам представлены в статье [14]. Цикл работ, развивающих эти идеи, в основном по теории переноса электронов, предложен Робсоном, Вайтом, Нессом, Ли [11,12,15,16] и др.

Ввиду сложности интеграла столкновений при решении задач о кинетике ионов в электрическом поле большое развитие получила приближенная моментно-транспортная теория (МТТ) [17,18]. Во многих случаях эта теория дает хорошее согласие с экспериментальными данным по коэффициентам переноса.

На кинетическом уровне задачи в основном решались моментным методом с помощью полиномиальных разложений функции распределения, а именно разложения ФР по сферическим полиномам Эрмита (функционал Барнетта). Несмотря на то что в данном случае рассматривается линейный интеграл столкновений, до последнего времени не удавалось построить достаточное количество членов разложения ФР. Большие надежды для преодоления этой трудности возлагались на переход от стандартного моментного метода к двухтемпературному [10]. Если в стандартном моментном методе температура базисного максвеллиана, около которого проводится разложение, совпадает с температурой нейтрального газа, то в двухтемпературном (модифицированном) моментном методе эти значения различаются.

В этой, первой, части статьи будут исследованы возможности стандартного моментного метода на примере СЕМ-модели. В следующей, второй, части будут рассмотрены другие сечения взаимодействия ионов с

атомами и рассмотрены пути улучшения сходимости, в частности, модифицированный моментный метод.

1. Постановка задачи

Пусть в равновесном газе имеется небольшая примесь ионов. Включение электрического поля \mathbf{E} приводит к возникновению потока ионов в направлении поля.

Кинетическая теория в нейтральном газе получила наибольшее развитие при слабых отклонениях от равновесия — это метод Чэпмена–Энскога и расчет коэффициентов переноса для обычных газов [19,20]. В этом методе проводится линеаризация уравнения Больцмана с выделением у ФР малой поправки к равновесному (максвелловскому) распределению.

Для малой примеси заряженных частиц в электрическом поле переход к линейному уравнению значительно проще, чем в нейтральном газе. Здесь есть два возможных источника нелинейности: прямой (по причине ион-ионных взаимодействий) и не прямой (по причине возможного искажения распределения атомов за счет ионов и его обратного влияния на распределение ионов). Оба эти источника весьма малы, если плотность ионов очень мала по сравнению с плотностью фонового газа.

Основные процессы переноса в данном случае — это диффузия и подвижность. Связь потока ионов \mathbf{J} с градиентом концентрации n при малой величине ∇n устанавливается законом Фика

$$\mathbf{J} = -D\nabla n. \quad (1)$$

Здесь D — коэффициент диффузии.

Если к пространственно однородной смеси приложить электрическое поле, то также возникает поток ионов. Скорость движения центра масс ионного облака (средняя скорость ионов) носит название скорости дрейфа \mathbf{u}_d . Если поле достаточно слабое, то дрейфовая скорость прямо пропорциональна напряжению поля:

$$\mathbf{u}_d = K\mathbf{E}. \quad (2)$$

Подвижность в случае слабого внешнего поля и коэффициент диффузии в случае малого градиента связаны соотношением Эйнштейна

$$K = \frac{eD}{kT}, \quad (3)$$

где e — заряд иона, k — постоянная Больцмана, T — температура газа.

Если увеличить напряженность так, чтобы средняя энергия ионов стала соизмеримой (или даже больше) тепловой энергии атомов, то ситуация меняется. Во-первых, подвижность K в (2), вообще говоря, не является более константой, а зависит от E . Тем не менее принято использовать (2) для определения K при любом электрическом поле. Во-вторых, коэффициент диффузии становится тензором. Подчеркнем, что при расчете диффузии ионов даже в сильных полях предполагается, что

градиент концентрации есть малая величина. Отметим, что исследование диффузии выходит за рамки этой статьи.

Тот факт, что для примеси ионов в нейтральном газе интеграл столкновений является линейным оператором, не предполагает малости отклонения от равновесия. Более того, можно утверждать, что степень отклонения от равновесия при наличии сильного электрического поля оказывается исключительно высокой.

Сильно неравновесный процесс описывается уравнением Больцмана, которое в рассматриваемом случае имеет вид

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{v} \frac{\partial f}{\partial \mathbf{r}} + \frac{e\mathbf{E}}{m_i} \frac{\partial f}{\partial \mathbf{v}} = J(f). \quad (4)$$

Здесь $f(\mathbf{v}, \mathbf{r}, t)$ — ФР ионов, \mathbf{E} — напряженность электрического поля, $J(f)$ — линейный интеграл столкновений ионов с максвелловским распределением атомов, m_i — масса иона. В пространственно однородном случае уравнение Больцмана имеет вид

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \frac{e\mathbf{E}}{m_i} \frac{\partial f}{\partial \mathbf{v}} = J(f). \quad (5)$$

Как правило, в литературе рассматривается стационарное состояние, которое устанавливается за счет уравновешивания разгона ионов в промежутках между соударениями с атомами их торможением в процессе столкновений. Функция распределения в стационарном состоянии f_{st} удовлетворяет стационарному уравнению Больцмана

$$\frac{e\mathbf{E}}{m_i} \frac{\partial f_{st}}{\partial \mathbf{v}} = J(f_{st}). \quad (6)$$

По стационарной ФР находят стационарные дрейфовая скорость и подвижность. Если необходимо построить тензор диффузии, то сделать это можно, только зная $f_{st}(\mathbf{v})$ (см. [21]), поскольку при наличии сильного электрического поля за счет градиента происходит отклонение ФР не от максвелловского распределения, а от сильно неравновесной стационарной ФР. Таким образом, построение решения уравнения (6) является непременным условием для нахождения всех коэффициентов переноса ионов в нейтральном газе и, следовательно, наличие полевого члена приводит к существенным отличиям от метода Чэпмена–Энскога в нейтральном газе.

Возникает вопрос: всегда ли существует решение уравнения (6)? Этот вопрос обсуждался в [14]. Если для достаточно жестких потенциалов, например, для модели твердых шаров, теорема существования и единственности решения уравнения (6) доказана, то для очень мягких потенциалов, например, для кулоновского взаимодействия это далеко не очевидно. Для кулоновского взаимодействия может иметь место эффект убегания ионов, когда часть ионов, получив за счет электрического поля большую энергию, в дальнейшем неограниченно разгоняется.

Ответ на вопрос о существовании стационарного состояния можно получить, если построить решение нестационарного уравнения (5). Пусть первоначально ионы находятся в равновесии с атомами, а в момент времени $t = 0$ мгновенно включается электрическое поле \mathbf{E} . После этого происходит переходный процесс. Если на больших временах будет устанавливаться постоянная ФР, то это и будет решение стационарного уравнения Больцмана (6). Если же процесс не будет заканчиваться выходом на стационарное состояние, то, решая нестационарное уравнение, можно проследить за формированием убегающих ионов. Построение ФР на переходной стадии представляет самостоятельный интерес, особенно если удастся проследить, как варьирует характер этого процесса при изменении сечения рассеяния ионов на атомах.

В литературе в основном исследуются стационарные коэффициенты переноса. Нами ставится значительно более сложная задача изучить поведение ФР в нестационарном процессе после включения электрического поля. При этом будет решаться и наша основная задача — исследование пределов применимости моментного метода.

Будем считать массу иона m_i равной массе атома m_a . Отметим, что это наиболее сложный случай, поскольку в предельных случаях $m_i/m_a \rightarrow 0$ и $m_i/m_a \rightarrow \infty$ интеграл столкновений существенно упрощается. Кроме того, в предположении $m_i = m_a$ можно рассмотреть характерные для кинетики ионов в собственном газе процессы резонансной перезарядки ионов на атомах.

2. Метод решения

Будем использовать моментный метод решения уравнения Больцмана. Разложим ФР по сферическим полиномам Эрмита (функциям Барнетта) [1,3]:

$$f(\mathbf{c}, \mathbf{r}, t) = M(\alpha, c) \sum C_{rlm}^i(\mathbf{r}, t) H_{rlm}^i(\mathbf{c}), \quad \alpha = \frac{m_i}{2kT}, \quad (7)$$

$$H_j = Y_{lm}^i(\Theta, \varphi) c^l S_{l+1/2}^{(r)}(c^2), \quad i = 0, 1; \quad \mathbf{c} = \sqrt{\alpha}(\mathbf{v} - \mathbf{u}), \quad (8)$$

$$Y_{lm}^0(\Theta, \varphi) = P_l^m(\cos \Theta) \cos m\varphi,$$

$$Y_{lm}^1(\Theta, \varphi) = P_l^m(\cos \Theta) \sin m\varphi, \quad 0 \leq m \leq l. \quad (9)$$

Здесь индекс j состоит из четырех индексов (r, l, m, i) , M — весовой максвеллиан с температурой T и средней скоростью \mathbf{u} , $Y_{lm}^i(\theta, \varphi)$ — вещественные сферические гармоники, $P_l^m(\cos \Theta)$ — присоединенные полиномы Лежандра, а $S_{l+1/2}^{(r)}(c^2)$ — полиномы Сонина (Лагерра).

Для сходимости (7) функция распределения должна удовлетворять условию

$$\int_0^\infty f^2 \exp(c^2) d^3c < \infty, \quad (10)$$

которое будем называть критерием Греда. Ограничение, связанное с критерием Греда, возникает при разложении

по полиномам Сонина, а не на стадии разложения по сферическим гармоникам, поскольку именно полиномы Сонина ортогональны с максвелловским весом.

В самом общем случае поведение смеси газов описывается системой нелинейных уравнений Больцмана. Чтобы не выписывать лишних индексов и не загромождать выкладок представим нелинейное уравнение Больцмана для однокомпонентного газа:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{v} \frac{\partial f}{\partial \mathbf{r}} + \frac{\mathbf{F}}{m} \frac{\partial f}{\partial \mathbf{v}} = \hat{I}(f, f). \quad (11)$$

Здесь $\hat{I}(f, f)$ — нелинейный интеграл столкновений, \mathbf{F} — вектор внешней силы, m — масса частицы.

В моментном методе уравнений (11) заменяется бесконечной системой моментных уравнений

$$\frac{D(C_i)}{Dt} = \sum_{j,k} K_{j,k}^i C_j C_k. \quad (12)$$

Оператор D/Dt в (12) соответствует дифференциальной (левой) части уравнения Больцмана; при отсутствии внешних сил он изучался в [1].

При наличии внешних сил в самом общем случае левая часть моментных уравнений (12) как в глобальном, так и в произвольном локальном базисе была выведена нами в [22]. Напомним, что в локальном базисе параметры максвеллиана (средняя скорость и температура), около которого проводится разложение ФР, зависят от координаты и времени. Здесь приведем только окончательный вид моментной системы в глобальном базисе

$$\begin{aligned} \frac{\partial C_j}{\partial t} + \mathbf{u} \frac{\partial C_j}{\partial \mathbf{r}} + \frac{1}{\alpha^{1/2}} \sum_{k=1}^3 \frac{\partial}{\partial x_k} G_j^{(k)} + \alpha^{1/2} \sum_{k=1}^3 \frac{F_k}{m_0} L_j^{(k)} \\ = \sum_{j_1, k} K_{j_1, k}^j C_{j_1} C_k. \end{aligned} \quad (13)$$

Коэффициенты разложения C_j связаны с ФР следующим образом:

$$C_j(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{g_j} \int f(\mathbf{v}, \mathbf{r}, t) H_j(c) d^3v, \quad g_j = \int M H_j^2 d^3v. \quad (14)$$

Приведем явный вид нормировочного множителя g_j [3]

$$\begin{aligned} g_j = y_{lm} \sigma_{rl}, \quad y_{lm} = \frac{2\pi(1 + \delta_{m0})(l+m)!}{(l-m)!(2l+1)}, \\ \sigma_{rl} = \frac{\Gamma(r+l+3/2)}{2\pi^{3/2} r!}. \end{aligned} \quad (15)$$

Выражения $G_j^{(k)}$ и $L_j^{(k)}$ довольно громоздки и подробно выписаны в [23].

2.1. Матричные элементы интеграла столкновений

Нелинейные матричные элементы K_{j_1, j_2}^i определяются следующим образом:

$$K_{j,k}^i = \int H_i \tilde{I}(MH_j MH_k) d^3v / g_i. \quad (16)$$

Линейные МЭ соответствуют линейному интегралу столкновений и могут быть первого ($K_{j_1, 0}^j$) и второго (K_{0, j_2}^j) типов. Обозначим их Λ . В осесимметричном случае ($m = 0$) имеем

$$\Lambda_{r,r,1}^{(1)} = K_{r_1, l, 0, 0}^{r,l}; \quad \Lambda_{r,r,2,l}^{(2)} = K_{0, 0, r_2, l}^{r,l}. \quad (17)$$

При расчете малой добавки ионов на фоне атомов понадобятся линейные МЭ первого типа.

В одномерных задачах ФР по скоростям осесимметрична и разлагается по сферическим полиномам Эрмита с двумя индексами r и l : $H_{r,l} = S_{l+1/2}^r P_l$. В [3] было показано, что трехмерные МЭ пропорциональны соответствующим осесимметричным МЭ, и коэффициенты пропорциональности легко выражаются через коэффициенты Клебша–Гордана.

В основу получения соотношения между МЭ была положена инвариантность интеграла столкновений относительно выбора базисных функций, по которым проводится разложение ФР [3,4]. Рассматривались базисы, которые различаются параметрами весового максвеллиана. В осесимметричном случае этими параметрами являются температура T и величина средней скорости u , которые будем обозначать одной буквой W .

Коэффициенты разложения ФР в базисах W_0 и W_1 связаны между собой матрицей перехода D :

$$C_j^1 = \sum_{k=0}^{\infty} D_{j,k}(W_1, W_0) O_k^0. \quad (18)$$

Матрица D была построена в [3] с использованием α - u представления уравнения Больцмана [21].

Из принципа инвариантности интеграла столкновений относительно выбора базисных функций следует, что МЭ интеграла столкновений в двух различных базисах выражаются друг через друга следующим образом:

$$K_{k',j'}^{i'}(W_1) = \sum_i D_{i',i}(W_1, W_0) \sum_{k,j} K_{k,j}^i(W_0) \times D_{k,k'}(W_0, W_1) D_{j,j'}(W_0, W_1). \quad (19)$$

Если это выражение продифференцировать по T_1 или u_1 и положить $W_1 = W_0$ ($u_1 = u_0$, $T_1 = T_0$), то получим „температурные“ рекуррентные соотношения

$$\left(T \frac{d}{dT} - R \right) K_{r_1, l_1, r_2, l_2}^{(a,b)r,l} = r K_{r_1, l_1, r_2, l}^{(a,b)r-1,l} - (r_1 + 1) K_{r_1+1, l_1, r_2, l}^{(a,b)r,l} - (r_2 + 1) K_{r_1, l_1, r_2+1, l_2}^{(a,b)r,l}, \quad (20)$$

где $R = r_1 + r_2 - r + (l_1 + l_2 - l)/2$, и „скоростные“ рекуррентные соотношения

$$\begin{aligned} & \beta(l-1) K_{r_1, l_1, r_2, l_2}^{(a,b)r,l-1} + \gamma(r-1, l+1) K_{r_1, l_1, r_2, l_2}^{(a,b)r-1, l+1} \\ & - \beta(l_1) K_{r_1, l_1+1, r_2, l_2}^{(a,b)r,l} - \gamma(r_1, l_1) K_{r_1+1, l_1-1, r_2, l_2}^{(a,b)r,l} \\ & - \sqrt{(m_b/m_a)} (\beta(l_2) K_{r_1, l_1, r_2, l_2+1}^{(a,b)r,l} \\ & - \gamma(r_2, l_2) K_{r_1, l_1, r_2+1, l_2-1}^{(a,b)r,l}) = 0, \end{aligned} \quad (21)$$

$$\beta(l) = -\frac{l+1}{2l+1}, \quad \gamma(r, l) = \frac{(r+1)l}{2l+1}.$$

Здесь матричные элементы $K_{r_1, l_1, r_2, l_2}^{(a,b)r,l}$ соответствуют смеси двух сортов частиц a и b с массами m_a и m_b , при этом частицы сорта a рассеиваются на частицах сорта b .

Соотношение (20) упрощается в случае степенных потенциалов, когда потенциал взаимодействия V зависит от расстояния r степенным образом ($V \sim \frac{1}{r^\nu}$) и сечение рассеяния представляется в виде

$$\sigma(g, z) = g^{\gamma-1} F(z), \quad z = \sin^2 \theta / 2, \quad \gamma = (\nu - 4) / \nu. \quad (22)$$

Здесь θ — угол рассеяния, а $F(z)$ — угловая часть сечения рассеяния, которая однозначно определяется параметром ν . Напомним, что для модели твердых шаров рассеяния изотропно, т.е. $F(z) = \text{const}$. В кинетике часто используют модель псевдостепенных потенциалов, в которой рассеяние по углам предполагается изотропным, а зависимость сечения рассеяния от модуля скорости — такой же, как у степенного потенциала. Можно определить множество моделей „квазистепенных потенциалов“ с фиксированным значением ν (или γ), для которых следует сохранить зависимость от g для степенного потенциала, а угловую зависимость предполагать произвольной. Для всех моделей квазистепенных потенциалов с фиксированным ν будет одинакова зависимость играющих важную роль в кинетической теории Ω -интегралов от температуры. Следовательно, все МЭ будут также одинаково зависеть от температуры, а именно $\sim T^\mu$, где $\mu = \gamma/2 = (\nu - 4)/(2\nu)$. Например, $\mu = 0$ для максвелловских молекул, $\mu = 0.5$ — для твердых шаров, $\mu = -1.5$ — в случае кулоновского взаимодействия.

Во всех этих случаях левая часть (20) принимает вид

$$\left(T \frac{d}{dT} - R \right) K_{r_1, l_1, r_2, l_2}^{(a,b)r,l} = (\mu - R) K_{r_1, l_1, r_2, l_2}^{(a,b)r,l}. \quad (23)$$

В [3] для произвольных потенциалов выведены универсальные, не зависящие от сечения взаимодействия, рекуррентные формулы для коэффициентов разложения нелинейных МЭ по Ω -интегралам.

Были разработаны рекуррентные процедуры и показано, что все нелинейные (и линейные) МЭ могут быть найдены, если известны линейные изотропные ($l = 0$) МЭ одного типа. Для линейных изотропных МЭ, как первого, так и второго типов, были получены

простые формулы [2,3]. Был создан пакет программ, позволяющий рассчитывать все МЭ вплоть до МЭ с очень большими индексами для произвольных масс сталкивающихся частиц.

Отметим, что линейные МЭ с $l \neq 0$ находятся только с использованием полной рекуррентной процедуры для нелинейных МЭ. Поэтому при построении любых (даже линейных) МЭ необходимо рассматривать полный нелинейный интеграл столкновений в уравнении Больцмана.

2.2. Переход к безразмерным переменным

В качестве единицы измерения скорости выберем тепловую скорость $v_T = \sqrt{2kT/m_i}$, а за единицу измерения времени — среднее время между столкновениями τ . Для безразмерной хаотической скорости используем обозначение \mathbf{c} , а для безразмерных средней скорости, времени и ФР сохраним прежние обозначения: \mathbf{u} , t и f . Безразмерный интеграл столкновений будем обозначать J .

При переходе к этим переменным уравнение Больцмана для ионов при наличии электрического поля (5) переходит в

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \varepsilon \frac{\partial f}{\partial c_z} = \hat{J}(f). \quad (24)$$

Здесь ε — безразмерная напряженность электрического поля

$$\varepsilon = \frac{eE\tau}{m_i v_T}, \quad (25)$$

направление оси z совпадает с направлением электрического поля, а ФР является осесимметричной.

Для моделей с постоянной частотой столкновений ($\tau = \text{const}$), в частности для рассматриваемой в данной части статьи СЕМ-модели, выбор единицы времени очевиден, и при переходе к этим единицам получаем для безразмерного электрического поля

$$\varepsilon = \frac{eE\tau}{\sqrt{2kTm_i}}. \quad (26)$$

Отметим, что для других сечений взаимодействия частота столкновений завивит от относительной скорости, и выбор единицы измерения времени не столь очевиден. Например, для модели твердых шаров сечение рассеяния не зависит от скорости и постоянной оказывается не частота столкновений, а длина свободного пробега $\lambda = N_a \pi d^2$, где N_a — концентрация атомов, а d — диаметр (в общем случае сумма радиусов сталкивающихся частиц). Для моделей с $\lambda = \text{const}$ естественно выбрать λ в качестве единицы длины. При выбранных единицах длины и скорости время τ определяется однозначно как $\tau = \lambda v_T$. Тогда для ε имеем

$$\varepsilon = \frac{eE\lambda}{2kT}. \quad (27)$$

2.3. Моментные уравнения для примеси ионов

Стандартным моментным методом будем называть такой, в котором разложение функции распределения проводится около максвеллиана с температурой атомов.

Систему безразмерных моментных уравнений, соответствующих уравнению Больцмана (24), можно получить из общей моментной системы (13), если учесть отсутствие пространственных производных и симметрию задачи относительно оси z . Из этой симметрии следует, что из всех коэффициентов разложения ФР остаются только коэффициенты с $i = 0$ и $m = 0$. Из всех громоздких коэффициентов $G_j^{(k)}$ и $L_j^{(k)}$ остаются только $L_j^{(3)}$. Используя явный вид этих коэффициентов, получаем систему моментных уравнений для ионов в электрическом поле

$$\begin{aligned} \frac{\partial C_{r,l}}{\partial t} + \varepsilon \left(\frac{2}{2l+3} r(l+1) C_{r-1,l+1} - \frac{2l}{2l-1} C_{r,l-1} \right) \\ = \sum_{r_1} \Lambda_{r,r_1,l} C_{r_1,l}. \end{aligned} \quad (28)$$

Если в этих уравнениях опустить члены с временной производной и учесть различия в определениях частоты столкновений и нормировки, то система полностью совпадает со стационарной системой из [9], для решения которой Кихара [25] предложил метод итераций.

Как правило, при решении кинетических уравнений для ионов во внешнем поле ищут стационарное состояние системы. Нами предложен нестационарный подход с удержанием в системе моментных уравнений членов с временной производной. При решении нестационарной моментной системы использовался метод Рунге–Кутты 4-го порядка.

3. СЕМ-модель

При изучении сходимости моментного метода очень важно иметь аналитические решения задач, хотя бы в некоторых частных случаях. В кинетике ионов, взаимодействующих с атомами того же сорта, существенную роль играет резонансная перезарядка ионов на атомах: ион, пролетая мимо атома, отнимает у него электрон, в результате чего атом превращается в ион, а ион — в атом. Это явление возникает при столкновении с большими прицельными расстояниями и практически не изменяет направления движения тяжелых частиц, т.е. в случае резонансной перезарядки угловая часть сечения эквивалентна рассеянию на 180° .

Назовем СЕМ-моделью (Charge Exchange Maxwell) такую модель резонансной перезарядки, для которой полное сечение обратно пропорционально относительной скорости. Для этой модели столкновительный оператор имеет вид

$$J = \frac{M(\mathbf{c}) - f(\mathbf{c})}{\tau}. \quad (29)$$

По виду он совпадает с линейной ВГК-моделью [25], которая часто используется для получения аналитических и численных решений в газе одного сорта. Если ВГК-модель создана с целью упрощения интеграла столкновений и не имеет физического обоснования,

то СЕМ-модель является следствием выбора вполне определенного сечения рассеяния. В то же время СЕМ-модель обладает всеми достоинствами ВГК-модели и может быть использована для построения аналитических решений.

3.1. Аналитические решения

Следует отметить, что в транспортной теории заряженных частиц на СЕМ-модель из-за ее простоты уже обращалось внимание в работах [14,27,28]. Однако ФР строили либо только для холодного газа, либо только в стационарном случае. Наша цель — построить нестационарное аналитическое решение для произвольных температур и на его примере проследить возможности нестационарного моментного метода.

Для этой модели матричные элементы $\Lambda_{r,r_1,l}$ в моментной системе (28) имеют вид:

$$\Lambda_{r,r_1,l} = (\delta_{l0}\delta_{r0} - 1)\delta_{r,r_1}. \quad (30)$$

Видно, что матрица МЭ при любом l диагональна, и все ее собственные значения, кроме $\Lambda_{0,0,0}$, равны -1 , а $\Lambda_{0,0,0} = 0$.

Из системы (28) в данном случае легко построить зависимость подвижности от времени. Действительно, при $r = 0$ и $l = 0$ имеем

$$\frac{\partial C_{01}}{\partial t} + C_{01} = 2\varepsilon. \quad (31)$$

Это уравнение имеет простое решение, поскольку дрейфовая скорость ионов $u_d = C_{01}/2$ и в безразмерных переменных $u_d = K\varepsilon$ (ср. с (2)), то из (31) имеем

$$K = 1 - \exp(-t). \quad (32)$$

Таким образом, для СЕМ-модели функция $K(t)$ является универсальной, т.е. не зависит от ε . Эта функция монотонна и выходит на единицу при $t \rightarrow \infty$.

Уравнение Больцмана для СЕМ-модели имеет вид

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \varepsilon \frac{\partial f}{\partial c_z} + f = M. \quad (33)$$

В стационарном случае в (33) производная по t отсутствует, и можно показать, решив сначала однородное уравнение, что уравнение (33) при $t \rightarrow \infty$ имеет следующее решение:

$$f(c_p, c_z) = M(c_p)f(c_z),$$

$$f(c_z) = \frac{\sqrt{\pi}}{2} M(c_z) \frac{1}{\varepsilon} \exp(Z^2)(1 + \operatorname{erf}(Z)),$$

$$Z = c_z - \frac{1}{2\varepsilon}. \quad (34)$$

Рассмотрим нестационарный процесс при мгновенном включении электрического поля, когда при $t < 0$ ФР ионов максвелловская, и поле равно 0, а при $t \geq 0$

поле имеет постоянное значение ε . При выбранных нами начальных условиях ФР по поперечной компоненте (c_p) остается все время максвелловской. Поделим обе части (33) на $M(c_p)$ и сохраним обозначение f для оставшейся функции распределения. Для решения получившегося уравнения воспользуемся методом характеристик и перейдем от переменных t, c_z к переменным $t, Y = c_z - \varepsilon t$. После ряда преобразований (более подробно см. [28]) получаем нестационарное решение для ФР на оси симметрии в виде

$$f(c_z, t) = \frac{\sqrt{\pi}}{2} M(c_z) \exp(Z^2) \frac{1}{\varepsilon} (\operatorname{erf}(\varepsilon t - Z) + \operatorname{erf}(Z)) + \exp(-t)M(c_z - \varepsilon t). \quad (35)$$

При $t \rightarrow \infty$ ФР выходит на построенное выше стационарное решение (34). Заметим, что для СЕМ-модели решение может быть построено и для других нестационарных процессов, например, для описания поведения

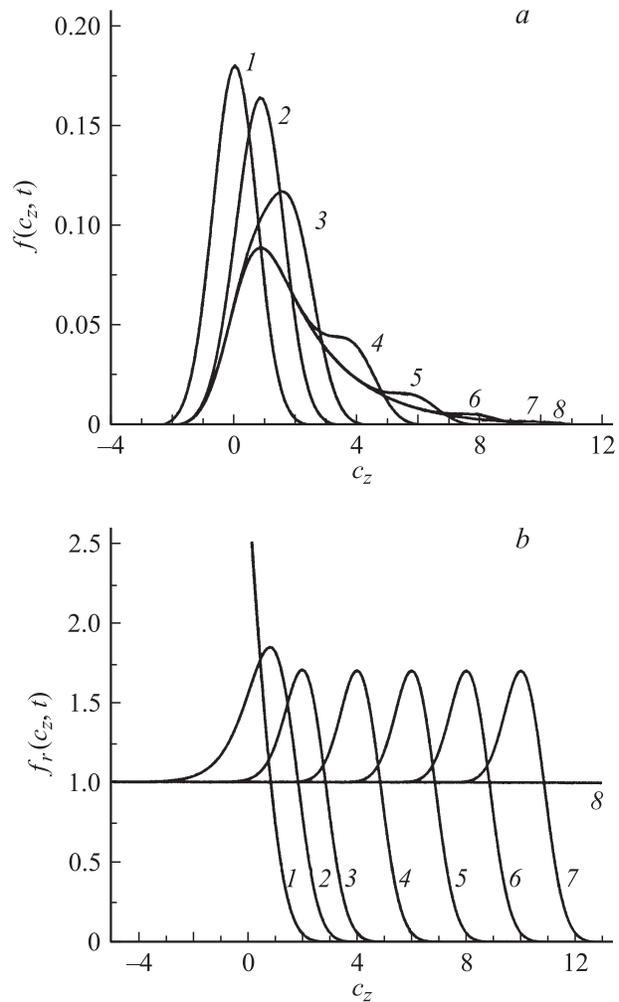


Рис. 1. Функции распределения на оси симметрии в разные моменты времени при $\varepsilon = 2$: $f(c_z, t)$ (a) и $f_r(c_z, t) = f(c_z, t)/f(c_z, \infty)$ (b). Аналитическое решение, СЕМ-модель. $t = 0$ — кривая 1, 0.5 (2), 1 (3), 2 (4), 3 (5), 4 (6), 5 (7), 10 (8).

ионов в периодическом внешнем электрическом поле. Здесь также можно использовать метод характеристик.

На рис. 1 представлены результаты вычислений ФР по аналитическим формулам (35) при $\varepsilon = 2$. Можно видеть распространение фронта в скоростном пространстве по направлению электрического поля. Позади этого фронта устанавливается стационарная ФР. Как видно из рисунка, релаксация в области больших положительных значений c_z происходит исключительно медленно и выход на стационарное решение в этой области скоростей реализуется с большой задержкой.

Для сходимости моментного метода принципиальным является выполнение критерия Греда (10), для чего необходимо достаточно быстрое убывание ФР на бесконечности. Проанализировав поведение функций (34) и (35) при $c_z \rightarrow \infty$, можно показать, что стационарное решение для рассматриваемой модели не удовлетворяет критерию Греда, но при любом конечном времени t ФР в области больших скоростей убывает настолько быстро, что критерий Греда выполнен и принципиальных ограничений для сходимости моментного метода нет. В результате в ходе нестационарного процесса может быть построена большая часть стационарной ФР.

Помимо аналитического решения непосредственно для ФР в случае СЕМ-модели нам удалось получить аналитическое решение моментной системы (28). Для этой модели система (28) рекуррентно разрешима. Стартуя с момента $C_{00} = 1$, легко получаем решение для момента C_{01} (31). Далее находим решения в слоях $N = l + 2r = \text{const}$, последовательно наращивая N . Можно показать, что аналитическое решение системы (28) для СЕМ-модели имеет вид

$$C_{r,l}(t) = B_{r,l} \varepsilon^N S_N(t), \quad N = l + 2r, \quad (36)$$

в котором коэффициент $B_{r,l}$ равен

$$B_{r,l} = (-1)^r \frac{(2l + 4r)!!(2l + 1)}{2^r(2r + 2l + 1)!!}. \quad (37)$$

Функция $S_N(t)$ одна и та же для всего слоя $N = l + 2r$:

$$S_N(t) = 1 - \exp(-t) \sum_{k=0}^{N-1} \frac{t^k}{k!}. \quad (38)$$

Эта функция обращается в нуль при $t = 0$ и в единицу — при $t \rightarrow \infty$. Однако с ростом N увеличивается задержка по времени выхода на насыщение.

3.2. Исследование сходимости моментного метода на примере СЕМ-модели

Для СЕМ-модели можно всегда сравнить ФР, восстановленную по моментам, с точным решением и объективно установить, когда моментный метод сходится. Выводы, получаемые для СЕМ-модели, во многом оказываются справедливыми и для других потенциалов взаимодействия. При этом удается разделить вопрос о

сходимости ФР при ее восстановлении по аналитически построенным моментам от излучения погрешностей, возникающих при численном решении самой моментной системы.

При численном решении кинетических задач моментным методом неизбежно происходит обрезание системы моментных уравнений. При этом выделяется некоторая конечная область, в которой лежат индексы l и r . Исследовалось, как влияет на сходимость форма этой области. При обрезании надо стремиться к тому, чтобы приращение момента, лежащего на границе области, зависело только от моментов, находящихся внутри нее. В этом случае подстановка нулевых значений для моментов, находящихся вне области, никак не повлияет на приращение моментов внутри области.

Было проведено сравнение расчетов при различных областях суммирования:

- треугольная область REG1: $r \leq N_0 - l$;
- треугольная область REG2: $r \leq (N_0 - l)/2$,
- и прямоугольная область REG3: $r < R_0, l < L_0$.

Здесь N_0 — число полиномов Сонина при $l = 0$ в разложении ФР в треугольных областях; R_0 — число полиномов Сонина, а L_0 — число полиномов Лежандра в прямоугольной области. Для СЕМ-модели наиболее естественной представляется область REG2. Расчеты показали, что при одном и том же количестве моментов результаты получаются не хуже, если выбрать область REG1. Расчеты по треугольным областям более оптимальны, чем по прямоугольной. Тем не менее, для того чтобы исключить очень большие значения l и тем самым еще уменьшить число моментов, суммирование можно проводить по трапецевидной области REG4

$$l \leq N_0 - r, \quad l \leq L_0, \quad L_0 \leq N_0 \quad (39)$$

при соответствующем выборе N_0 и L_0 . Дальнейшие расчеты, как правило, проводились с суммированием по области REG4.

Для построения ФР по моментам сначала вычисляются $f_l(c)$ (ФР в l -подпространстве) по формуле

$$f_l(c) = M(c) \sum_r c^l S_{l+1/2}^r(c^2) C_{rl}, \quad (40)$$

затем по формуле

$$f(c) = \sum f_l(c) P_l \cos(\Theta) \quad (41)$$

находится ФР.

Последовательно проводились численные исследования для случаев слабого, умеренного и сильного электрических полей. Эти диапазоны определяются следующим образом:

- слабое электрическое поле — $\varepsilon \leq 0.1$,
- умеренное электрическое поле — $0.1 < \varepsilon < 1$,
- сильное электрическое поле — $\varepsilon \geq 1$.

Остановимся сначала на возможностях стационарного моментного метода. В области слабых электрических

полей можно с помощью моментного метода по стационарным моментам построить ФР в достаточно широкой области, с выходом на очень малые значения порядка 10^{-22} . Сделать это удастся несмотря на нарушение критерия Греда, однако при этом необходимо очень четко определять область обрезания на плоскости (r, l) при восстановлении ФР по ее моментам. Попытка расширить диапазон сходимости за счет расширения этой области выше оптимального значения R_0 приводит к обратному эффекту — сужению области сходимости. Оптимальное значение R_0 лежит в окрестности минимума на зависимости $|C_{r,l}(r)|$.

При переходе в область умеренных полей с ростом ϵ происходит очень быстрое уменьшение глубины минимума на зависимости $|C_{r,l}(r)|$. Попытка построить стационарную ФР по стационарным моментам не приводит к удовлетворительному результату уже при $\epsilon = 0.25$.

На рис. 2 представлено отношение приближенной ФР f_{Σ} к точному решению для $\epsilon = 0.25$. Показаны результаты суммирования в разных областях. Суммирование в области REG2 при $N_0 = 2$ соответствует приближению, когда учитываются все сферические полиномы Эрмита в слоях $r + l/2 \leq 2$. Самым лучшим оказался результат при суммировании по области REG3 при $R_0 = 2, L_0 = 6$. С ростом R_0 и L_0 положение только ухудшалось. Видно, что нигде не удастся приблизиться к точному решению. Результаты еще хуже при больших значениях ϵ .

В методе итераций, предложенном Кихарой [25] для построения стационарного решения, численно ищутся моменты. Подчеркнем, что для СЕМ-модели стационарные моменты известны аналитически. Тем не менее восстановить стационарное решение по ним не удастся. Следовательно, нет никакой надежды на успех построения стационарной ФР в области умеренных полей итерационным методом.

Совсем иначе обстоит дело при восстановлении ФР по моментам в ходе нестационарного процесса. Рассмотрим

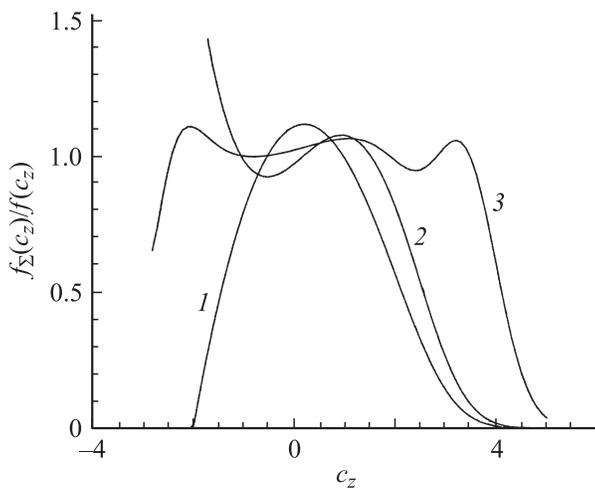


Рис. 2. Отношение $f_{\Sigma}(c_z)$ к точному решению $f(c_z)$ в стационарном состоянии, $\epsilon = 0.25$, СЕМ-модель. Суммирование в областях REG2: 1 — $N_0 = 1$; 2 — $N_0 = 2$; 3 — суммирование в областях REG3: $R_0 = 2, L_0 = 6$.

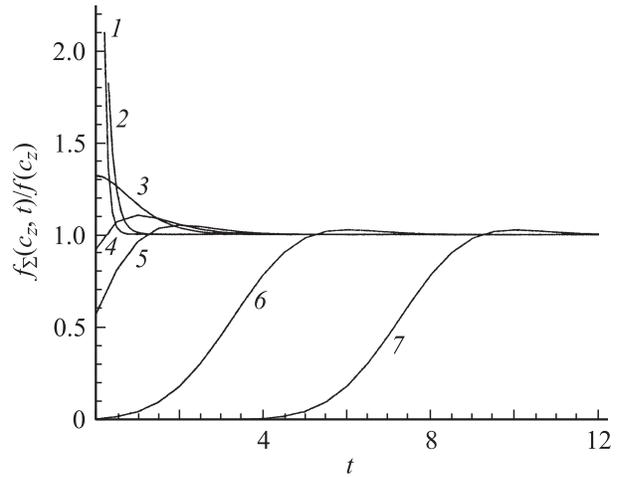


Рис. 3. Зависимости отношения $f_{\Sigma}(c_z, t)/f(c_z)$ от t при различных значениях c_z , $\epsilon = 0.5$: 1 — $c_z = -10$, 2 — -5 , 3 — 0 , 4 — 0.5 , 5 — 1 , 6 — 3 , 7 — 5 .

это на примере включения поля $\epsilon = 0.5$, когда по стационарным моментам невозможно восстановить ФР. При времени $t = 3$ во всем диапазоне $-10 < c_z < 10$ удастся добиться полного совпадения с точным решением, для этого надо выбрать REG3 с $R_0 = 30, L_0 = 50$. К моменту времени $t = 3$ во всей области отрицательных скоростей ФР достигает своего предельного, стационарного значения. Поэтому в нестационарном методе можно при больших временах не добиваться сходимости в области отрицательных скоростей, а это существенно уменьшает область суммирования, т.е. значения R_0, L_0 .

Для иллюстрации того, как происходит установление стационарного значения $f(c_z)$, на рис. 3 по точным формулам построены зависимости $f(c_z, t)$ от t при $\epsilon = 0.5$ и фиксированных значениях c_z . Из рисунка видно, что в области отрицательных c_z , включая $c_z = 0$, в ходе релаксационного процесса происходит монотонное уменьшение ФР. Время, необходимое для выхода на стационарное значение, не превышает трех, и оно значительно меньше трех при больших отрицательных значениях c_z . Для положительных значений c_z релаксационный процесс немонотонен, характерно наличие заметной задержки начала процесса, и при больших c_z требуется значительное время для выхода на стационарное значение, так например, при $c_z = 5$ процесс оканчивается при $t \sim 10$. Следовательно, выход на стационарное решение происходит неравномерно по c_z . Такой характер релаксации связан с распространением волны возмущения в пространстве скоростей вдоль характеристики $c_z = c_z^0 + \epsilon t$. Эта характеристика находится из левой, дифференциальной части кинетического уравнения и, следовательно, не зависит от характера взаимодействия ионов с атомами. Поэтому можно ожидать, что продемонстрированный выше процесс релаксации с распространением фронта в пространстве скоростей имеет место не только в случае СЕМ-модели, но и при любом потенциале взаимодействия ионов с атомами.

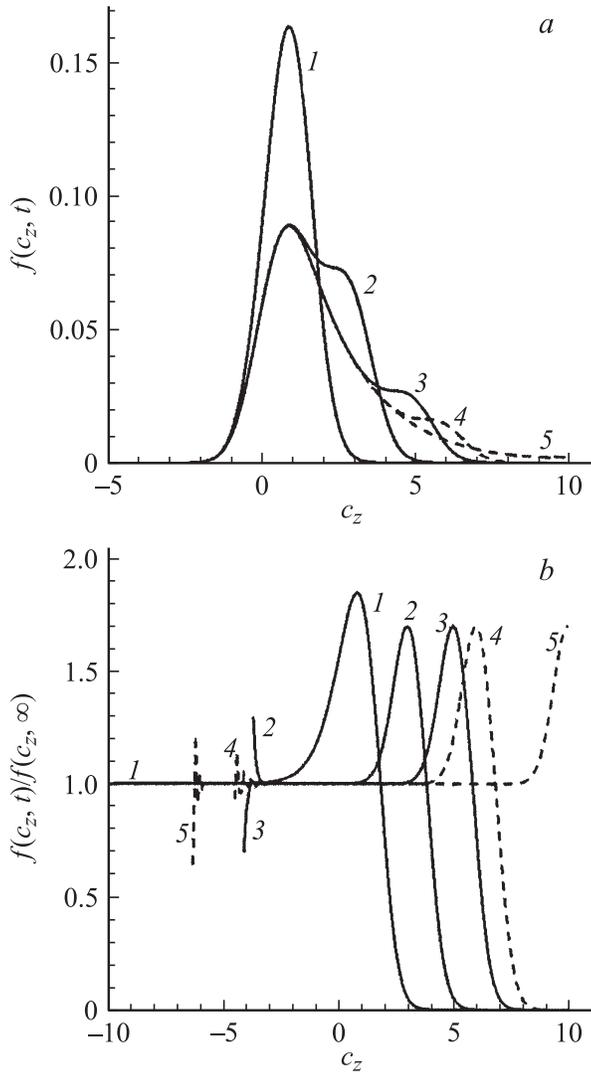


Рис. 4. Функция распределения на оси симметрии в различные моменты времени для СЕМ-модели при $\varepsilon = 2.0$. *a* — $f(c_z, t)$, *b* — $f(c_z, t)/f(c_z, \infty)$. Кривые 1–5 относятся к значениям времени $t = 0.5$ ($L_0 = 35$, $R_0 = 23$); 1.5 ($L_0 = 30$, $R_0 = 26$); 2.5 ($L_0 = 37$, $R_0 = 70$); 3 ($L_0 = 75$, $R_0 = 100$); 5 ($L_0 = 100$, $R_0 = 280$) соответственно.

Увеличение как электрического поля ε , так и времени t приводит к ухудшению сходимости процесса восстановления ФР по моментам. Связано это с тем, что с ростом ε на зависимостях $|C_{r,l}|(r)$ вместо минимума наблюдается максимум. При увеличении t координата максимума и его высота неограниченно увеличиваются. Для того чтобы ряд (40) сходил к точному решению, необходимо при суммировании по r пройти через максимум и зайти в область r , где значения $|C_{r,l}|$ будут достаточно малы. При очень больших временах, когда координаты максимума велики, выполнение такого суммирования становится проблематичным. Однако в области умеренных электрических полей удастся восстановить ФР до достаточно больших значений времени.

В области сильных электрических полей проблема преодоления максимума становится более сложной. Для сходимости надо очень сильно расширять область обрезания в плоскости (r, l) .

Было установлено, что если одновременно изменять ε и t так, чтобы произведение εt оставалось постоянным, то зависимости $|C_{r,l}|(r)$ оказываются очень похожими. Таким образом, найден некоторый параметр подобия — εt . Показано, что хорошая сходимость во всем рассматриваемом диапазоне скоростей: $-10 \leq c_z \leq 10$ имеет место при $\varepsilon t < 5$.

На рис. 4 для СЕМ-модели представлена ФР на оси симметрии ($c_p = 0$) в разные моменты времени при $\varepsilon = 2$. Продемонстрировано, как с ростом времени вырастает число полиномов Сонина R_0 и Лежандра L_0 , которые должны быть учтены в разложении ФР.

На рис. 4, *b* для $c_z > -4$ наблюдается прекрасное совпадение с соответствующим отношением аналитических решений. Для $c_z < -4$ происходит очень быстрый выход на стационарное решение, но с ростом t становится все сложнее построить решение моментным методом. Когда значение в максимуме $|C_{r,l}|(r)$ превышает 10^{16} , то пройти через него при суммировании в (40) с использованием стандартных операций на компьютере оказывается невозможным. Несколько дальше удастся продвинуться при использовании процедур с большим числом десятичных разрядов (штриховые кривые на рис. 4).

Таким образом, с помощью нестационарного моментного метода удалось построить решение в области умеренных и достаточно сильных электрических полей. При этом, по крайней мере, на порядок увеличено значение ε , для которого моментным методом удастся построить ФР в стационарном состоянии.

Работа поддержана EOARD N FA8655-03-D-0001/0017 (CRDF Project N RUM1-1500-ST-04), грантом РФФИ № 09-08-01017-а и научной программой СПбНЦ РАН.

Список литературы

- [1] Burnett D. // Proc. London Math. Soc. 1935. Vol. 40. P. 382–435.
- [2] Ender A.Ya., Ender I.A. // Phys. Fluids. 1999. Vol. 11. P. 2720–2730.
- [3] Эндер А.Я., Эндер И.А. Интеграл столкновений уравнения Больцмана и моментный метод. СПб, 2003. 224 с.
- [4] Ender A.Ya., Ender I.A. // Transport Theory and Stat. Phys. 2007. Vol. 56. P. 563–588.
- [5] Sena L. // ЖЭТФ. 1946. Т. 8. С. 734–738.
- [6] Wannier G.H. // Bell. Syst. Tech. J. 1953. Vol. 32. P. 170–254.
- [7] Каган Ю.М., Перель В.И. // ДАН СССР. 1954. Т. 98. С. 575–578.
- [8] Смирнов Б.М. // ЖТФ. 1966. Т. 36. Вып. 10. С. 1864–1871.
- [9] Mason E.A., McDaniel E.W. The Mobility and Diffusion in Gases. NY: Wiley, 1973. 375 p.
- [10] Mason E.A., McDaniel E.W. Transport Properties of Ions in Gases. NY: Wiley, 1988. 489 p.

- [11] *White R.D., Ness K.F., Robson R.E.* // Appl. Surface Sci. 2002. Vol. 192. P. 26–49.
- [12] *Li B., Robson R.E., White R.D.* // Phys. Rev. E. 2006. Vol. 74. P. 026 405-1 — 026 405-13.
- [13] *Kumar K.* // Ann. Phys. 1966. Vol. 37. P. 113–141.
- [14] *Kumar K., Skullerud H.R., Robson R.E.* // Aust. J. Phys. 1980. Vol. 33. P. 343–348.
- [15] *Robson R.E., Ness K.F.* // Phys. Rev. A. 1986. Vol. 33. P. 2068–2077.
- [16] *Ness K.F.* // J. Phys. D. Appl. Phys. 1994. Vol. 27. P. 1848–1861.
- [17] *Robson R.E.* // Aust. J. Phys. 1994. Vol. 47. P. 279–301.
- [18] *Jovanovic J.V., Vrhovac S.B., Petrovic Z.L.* // Eur. Phys. J. D. 2002. Vol. 21. P. 335–342.
- [19] *Чепмен С., Каулинг Т.* Математическая теория неоднородных газов. М., 1960. 510 с.
- [20] *Ферцигер Дж., Канер Г.* Математическая теория процессов переноса в газах. М., 1976. 554 с.
- [21] *Эндер А.Я., Эндер И.А.* // Аэродинамика / Под ред. Р.Н. Мирошина. М.: Издатель И.В. Балабанов, 2008. С. 95–157.
- [22] *Эндер И.А., Эндер А.Я.* // Докл. АН СССР. 1970. Т. 193. № 1. С. 61–64.
- [23] *Эндер А.Я., Эндер И.А.* // Аэродинамика / Под ред. Р.Н. Мирошина. СПб: НИИХ СПбГУ, 2003. С. 179–203.
- [24] *Ender A.Ya., Ender I.A., Gerasimenko A.B.* // Open Plasma Physics J. 2009. Vol. 2. P. 24–62.
- [25] *Kihara T.* // Rev. of Modern Physics. 1953. Vol. 25. N 4. P. 844–852.
- [26] *Bhatnagar P.L., Gross E.P., Krook M.* // Phys. Rev. 1954. Vol. 94. P. 511–525.
- [27] *Robson R.E., Makabe T.* // Aust. J. Phys. 1994. Vol. 47. P. 305–314.
- [28] *Sugawara H., Tagashira H., Sakay Y.* // J. Phys. D. Appl. Phys. 1996. Vol. 29. P. 1168–1174.
- [29] *Эндер А.Я., Эндер И.А.* // Четвертые поляховские чтения. Избранные тр. СПб: Изд-во „ВВМ“, 2006. С. 455–464.