

УДК 533.9

## УПРОЩЕННЫЙ ПОДХОД К ОПИСАНИЮ КИНЕТИЧЕСКИХ СВОЙСТВ ПРИМЕСНЫХ ИОНОВ В СЛАБОИОНИЗОВАННОЙ ПЛАЗМЕ ГЕЛИЯ

© 2024 г. Н. Л. Александров<sup>a, b, c, \*</sup>, А. А. Пономарев<sup>b, c</sup>

<sup>a</sup>Московский физико-технический институт, Долгопрудный, Россия

<sup>b</sup>Институт прикладной физики им. А.В. Гапонова-Грехова РАН, Н.Новгород, Россия

<sup>c</sup>Высшая школа экономики, Москва, Россия

e-mail: nick\_aleksandrov@mail.ru

Поступила в редакцию 14.11.2024 г.

После доработки 18.11.2024 г.

Принята к публикации 19.11.2024 г.

С помощью приближенного подхода, справедливого при большом отношении массы иона к массе нейтральной частицы, вычислена подвижность ионов  $O_2^+$ ,  $N_2^+$ ,  $O_2^-$  и  $O_4^-$  в гелии и получено хорошее согласие с имеющимися результатами расчетов методом Монте-Карло и экспериментальными данными при высоких значениях приведенного электрического поля. Этот упрощенный подход использован для определения средней энергии ионов  $O_4^-$  и константы скорости диссоциации этих ионов в гелии. Проведено сравнение полученных характеристик ионов с результатами более точных расчетов методом Монте-Карло. Получено хорошее согласие между этими двумя подходами для средней энергии ионов, но для константы скорости диссоциации различие оказывается достаточно серьезным, достигающим порядка величины и более. Показано, что это различие связано с особенностями энергетического распределения ионов в случае большого отношения массы иона к массе нейтральной частицы.

**Ключевые слова:** подвижность ионов, метод Монте-Карло, диссоциация молекулярных ионов, слабоионизованная плазма гелия, энергетическое распределение ионов

DOI: 10.31857/S0367292124120112 EDN: EEEPXD

### 1. ВВЕДЕНИЕ

Кинетические характеристики электронов и ионов, включая их коэффициенты переноса и константы скорости неупругих процессов, необходимы для численного моделирования свойств неравновесной слабоионизованной газоразрядной плазмы [1–3]. При рассмотрении заряженных частиц в слабоионизованных плазме или газе в сильном электрическом поле, когда энергетическое распределение частиц является неравновесным, обычно стараются использовать сильное различие в массах заряженных и нейтральных частиц. Это в большинстве случаев существенно облегчает расчет электронных характеристик, поскольку позволяет пользоваться двучленным приближением (приближением слабой анизотропии функции распределения), которое справедливо, когда частота релаксации

энергии электронов значительно меньше частоты релаксации их импульса [1–4]. В случае ионов более типична ситуация, когда их масса сравнима с массой нейтральных частиц [5–7], что вынуждает при вычислении ионных характеристик проводить достаточно сложные расчеты, чаще всего основанные на методе Монте-Карло [7, 8].

Одной из возможных ситуаций, где может иметь место сильное различие в массах ионов и нейтральных частиц в слабоионизованной плазме, является случай ионизованного гелия с примесными ионами. Из-за аномально большого потенциала ионизации атомов гелия ионный состав обычно определяется примесными ионами, которые по массе могут значительно превосходить массу атомов Не. Такая модель – модель движения тяжелых ионов в газе легких нейтральных частиц – называется рэлеевской моделью [5]. Дви-

жение ионов в рамках этой модели рассматривалось, в основном, аналитически, как в пределе слабых электрических полей (малая скорость дрейфа ионов относительно тепловой скорости нейтральных частиц) [9], так и в случае сильных полей [10, 11]. В частности, в [11] в пределе сильных полей было получено простое трансцендентное уравнение, позволяющее определять подвижность и скорость дрейфа тяжелых ионов в газе легких нейтральных частиц по транспортному сечению рассеяния ионов на нейтралах с учетом зависимости сечения от относительной скорости сталкивающихся частиц.

Хотя работа [11] была выполнена давно, но проверить работоспособность полученных формул можно было только при наличии достаточно надежных данных по сечениям взаимодействия ионов с нейтральными частицами, которые стали появляться только в настоящее время. Целью данной работы является расчет подвижности и других характеристик кислородных и азотных ионов в слабоионизованной плазме гелия в зависимости от приведенного электрического поля на основе подхода, предложенного в [11] и сравнение полученных результатов с более строгими расчетами Монте-Карло, справедливыми для любого соотношения масс участвующих в моделировании частиц. Данные такого типа оказываются в настоящее время востребованными в связи с многочисленными исследованиями распространения ионизационных волн в струе гелия (atmospheric-pressure plasma jets, guided ionization waves, plasma bullets). Актуальность таких работ связана с различными приложениями этих плазменных объектов, от обработки поверхности твердых тел и до плазменной медицины [12–15]. В этих исследованиях плазма обычно генерируется с помощью повторяющихся высоковольтных импульсов в тонких диэлектрических трубках в струе гелия (реже – другого инертного газа), которая истекает в окружающий воздух. Поэтому в такой плазме могут присутствовать примесные кислородные и азотные ионы, в том числе – кластерные [16]. Для описания процессов в такой плазме необходимо знать кинетические характеристики заряженных частиц в зависимости от электрического поля в газе, где основным нейтральным компонентом является гелий. Свойства электронов обычно определяются стандартным образом на основе численного решения уравнения Больцмана в рамках двучлен-

ного приближения [1–4]. Коэффициенты переноса и константы скорости ионно-молекулярных реакций различных примесных ионов в слабоионизованной плазме гелия ранее вычислялись ресурсозатратным методом Монте-Карло [16–19]. Цель данной работы – попробовать определить эти величины в рамках упрощенного подхода на основе формул, полученных в работе [11].

## 2. ПОДВИЖНОСТЬ И СРЕДНЯЯ ЭНЕРГИЯ ИОНОВ

Одной из основных характеристик переноса ионов в слабоионизованных газах и плазме под действием электрического поля является их скорость дрейфа  $w$ , которая связана с подвижностью  $K$  простым соотношением  $w = KE$ , где  $E$  – напряженность электрического поля. Коэффициенты переноса ионов, включая упомянутые выше, определяются функцией распределения ионов по скоростям, которая в сильном электрическом поле становится неравновесной. Эту функцию можно определить из численного решения уравнения Больцмана [2, 3] или, что чаще используется для ионов, при моделировании движения ионов методом Монте-Карло [2, 5, 8].

Как было показано в [11], в случае, когда масса ионов  $m$ , значительно больше массы нейтральных частиц  $M$ , из уравнения Больцмана можно получить простое интегральное соотношение между  $E$  и скоростью дрейфа ионов  $w$ . Это соотношение особенно упрощается в сильном электрическом поле, когда скорость  $w$  велика по сравнению с тепловой скоростью нейтральных частиц. В этом случае его можно записать в виде [11]

$$eE/\mu N = w^2 \sigma_m(w), \quad (1)$$

где  $e$  – элементарный заряд,  $\mu$  – приведенная масса сталкивающихся иона и нейтральной частицы,  $N$  – концентрация нейтральных частиц,  $\sigma_m$  – транспортное сечение рассеяния иона на нейтральной частице.

Выражение (1) является трансцендентным уравнением относительно  $w$ , которое позволяет определять эту величину в зависимости от приведенного электрического поля  $E/N$ , если известна зависимость сечения  $\sigma_m(g)$ , где  $g$  – относительная скорость сталкивающихся иона и нейтральной частицы. В данной работе на основе формулы (1) был выполнен расчет скорости дрейфа и подвижности ионов  $O_2^+$ ,  $N_2^+$ ,  $O_2^-$

и  $O_4^-$  в He. Для этого использовались приведенные на рис. 1 данные по сечениям рассеяния для пар  $O_2^+ - \text{He}$  [18],  $N_2^+ - \text{He}$  [18],  $O_2^- - \text{He}$  [19]. На рисунке сечения даны в зависимости от энергии относительного движения  $\mu g^2/2$ . Как и в [16], сечение рассеяния для пары  $O_4^- - \text{He}$  полагалось равным сечению рассеяния для пары  $O_2^- - \text{He}$ .

На рис. 2 представлены результаты расчета приведенной подвижности  $K_0$  для ионов  $O_2^+$  и  $N_2^+$  в He по формуле (1) и их сравнение с результатами расчета этих величин методом Монте-Карло [18] с использованием тех же данных по сечениям рассеяния, а также с экспериментальными данными [20]. Приведенная подвижность определяется как [5]

$$K_0 = (p/760)(273/T)K, \quad (2)$$

где  $p$  – давление в Торр, а  $T$  – температура газа в градусах Кельвина. Аналогичные результаты расчета подвижности  $K_0$  для ионов  $O_2^-$  и  $O_4^-$  в He в сравнении с расчетом методом Монте-Карло (расчет [19] для ионов  $O_2^-$  и расчет данной работы по аналогии с [16] для ионов  $O_4^-$ ) и экспериментальными данными [20] приведены на рис. 3. Экспериментальные данные для подвижности ионов  $O_4^-$  в He имеются только в случае, когда эти ионы тепловые (предел слабого электрического поля) [21]. Поэтому они на рис. 3б не приведены. Из рисунков следует, что расчеты методом Монте-Карло хорошо согласуются с экспериментальными данными в данном диапазоне значений  $E/N$ . Результаты расчета по формуле (1) несколько отличаются от расчетов методом Монте-Карло и экспериментов, но это отличие не превышает 10% при

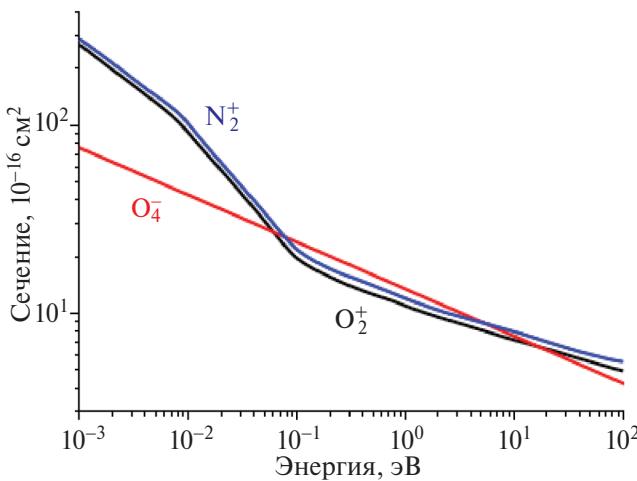


Рис. 1. Транспортные сечения рассеяния ионов на атомах Не в зависимости от энергии относительного движения.

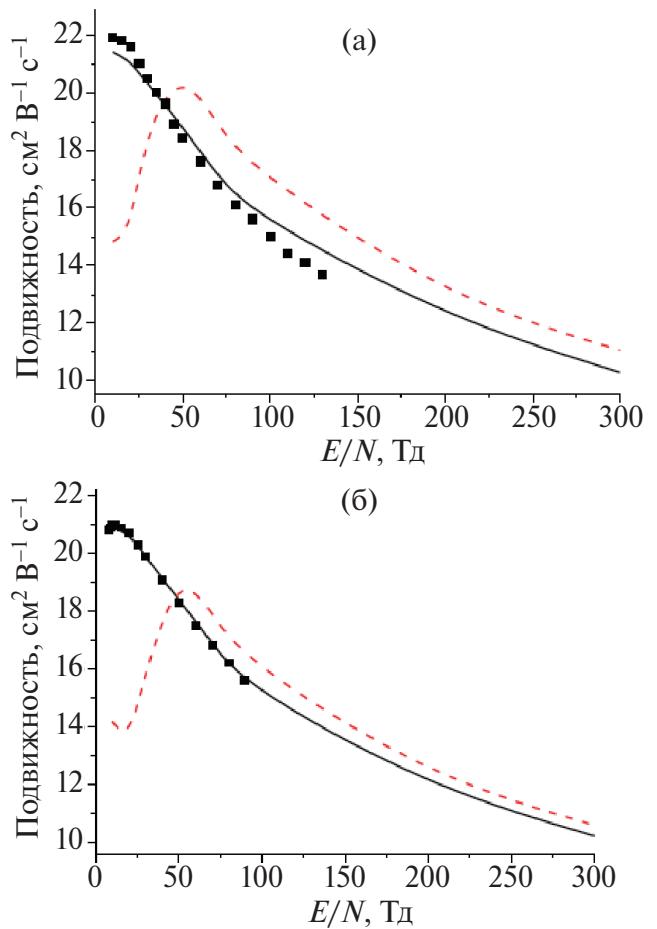


Рис. 2. Приведенная подвижность ионов  $O_2^+$  (а) и  $N_2^+$  (б) в He в зависимости от приведенного электрического поля. Сплошные кривые – расчет методом Монте-Карло [18], штриховые кривые – расчет на основе формулы (1), символы – эксперимент [20].

$E/N > 50$  Тд ( $1 \text{ Тд} = 10^{-17} \text{ В см}^2$ ) для ионов  $O_2^+$ ,  $N_2^+$  и  $O_4^-$  в He. Для более тяжелых ионов  $O_4^-$ , для которых отношение их массы к массе атомов Не больше, это отличие не превышает 10% в более широкой области – при  $E/N > 35$  Тд. Различное поведение полученной из формулы (1) зависимости  $K_0$  от  $E/N$  при малых  $E/N$  для ионов  $O_2^+$  и  $N_2^+$ , с одной стороны, и ионов  $O_2^-$  и  $O_4^-$ , с другой, связано с различными зависимостями сечений рассеяния этих ионов на атомах Не при малых энергиях (см. рис. 1).

### 3. СРЕДНЯЯ ЭНЕРГИЯ И КОНСТАНТЫ СКОРОСТИ НЕУПРУГИХ ИОННО-МОЛЕКУЛЯРНЫХ ПРОЦЕССОВ

Используя данные по подвижности ионов в гелии, можно вычислить их среднюю энергию

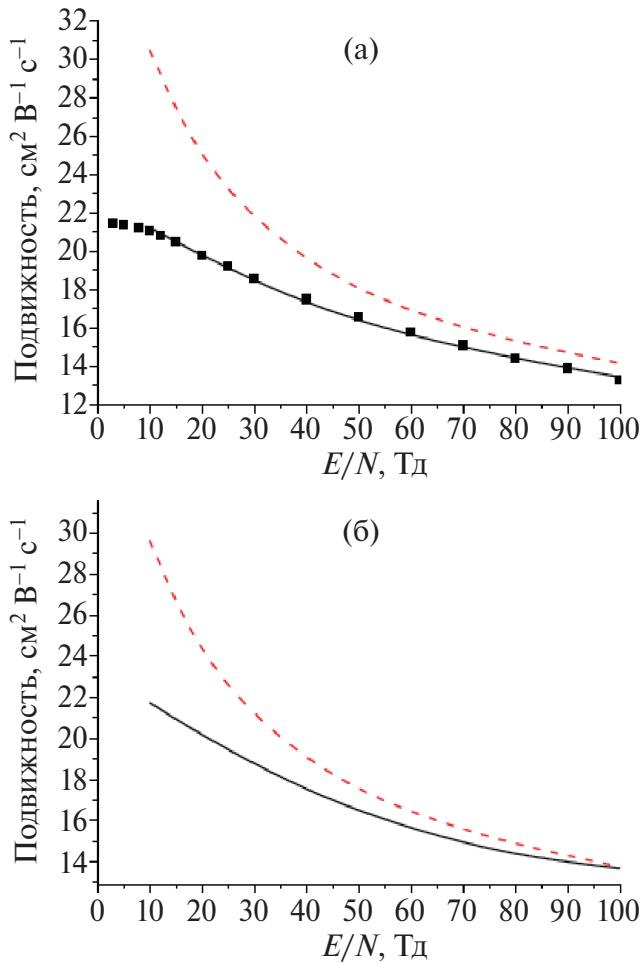


Рис. 3. Приведенная подвижность ионов  $O_2^-$  (а) и  $O_4^-$  (б) в He в зависимости от приведенного электрического поля. Сплошные кривые – расчет методом Монте-Карло (расчет [19] для ионов  $O_2^-$  и расчет данной работы для ионов  $O_4^-$ ), штриховые кривые – расчет на основе формулы (1), символы – эксперимент [20].

и константы скорости неупругих ионно-молекулярных процессов. Для вычисления средней энергии ионов  $E_i$  здесь использовалось уравнение

$$E_i = m_i w^2 / 2 + Mw^2 / 2 + 3k_B T / 2, \quad (3)$$

где  $m_i$  и  $M$  – массы иона и нейтральной частицы соответственно,  $k_B$  – постоянная Больцмана,  $T$  – температура газа. Формула (3) является одной из простейших для описания средней энергии ионов в слабоионизованных газах и плазме под действием сильного электрического поля и восходит к работе Ванье [10]. Впоследствии она многократно уточнялась и использовалась (см. например, [5–7, 22] и ссылки там). В (3) первый член описывает среднюю энергию, связанную с дрейфовым движением ионов, второй член соответствует

энергии хаотического движения, связанного с электрическим полем, а третий член – это средняя хаотическая энергия нейтральных частиц, к которой стремится энергия ионов в пределе слабого электрического поля.

На рис. 4 приведена полная средняя энергия  $E_i$  ионов  $O_4^-$  в He, а также энергия их хаотического движения  $E_{ch} = Mw^2 / 2 + 3k_B T / 2$ . Здесь результаты вычислений, выполненных по формулам (1) и (3), сравниваются с результатами более точных расчетов методом Монте-Карло [16]. В обоих случаях использовались одни и те же данные по сечениям рассеяния ионов  $O_4^-$  на He. Из рис. 4 следует, что, с одной стороны, приближенный подход на основе формул (1) и (3) позволяет хорошо воспроизводить результаты более точного численного подхода методом Монте-Карло. С другой стороны, видно, что в рассматриваемых условиях основной вклад в среднюю энергию ионов дает энергия их дрейфового движения, а вклад хаотического движения относительно мал. Это связано с большой массой ионов относительно массы атомов He. Именно это приближение и использовалось в [11] при выводе выражения (1).

На основе данных по средней энергии ионов можно вычислить константы скорости неупругих ионно-молекулярных процессов в зависимости от  $E/N$ . Один из простейших подходов к определению константы скорости состоит в интегрировании сечения соответствующего процесса с максвелловской функцией распределения по

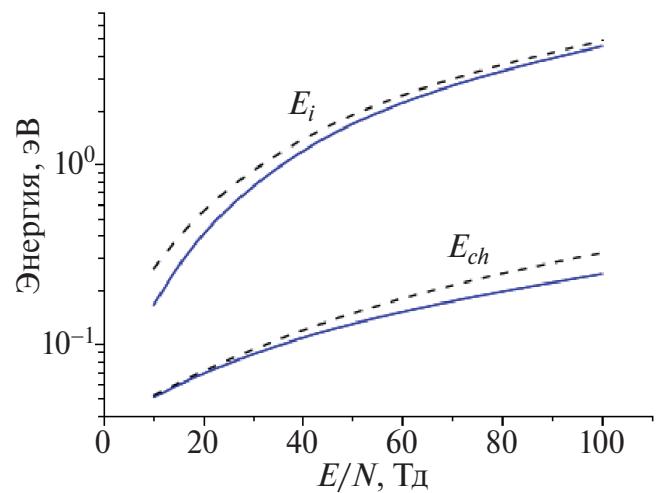


Рис. 4. Полная средняя энергия  $E_i$  и энергия хаотического движения  $E_{ch}$  ионов  $O_4^-$  в He, вычисленные методом Монте-Карло [16] (сплошные кривые) и по формулам (1) и (3) (штриховые кривые), в зависимости от приведенного электрического поля.

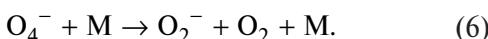
относительным скоростям сталкивающихся частиц, где в роли температуры берется ее эффективное значение [7, 22]:

$$T_{eff} = 2E_r/3k_B. \quad (4)$$

Здесь  $E_r$  – средняя энергия относительного движения ионов и нейтральных частиц, определяемая соотношением

$$E_r = [M/(m_i + M)](E_i - 3k_B T/2) + 3k_B T/2. \quad (5)$$

В данной работе на основе приближенных данных по  $E_i$ , приведенных на рис. 4, был выполнен расчет константы скорости диссоциации ионов  $O_4^-$  в чистом гелии при столкновении с нейтральной частицей М для  $M = \text{He}$ :



Результаты этого расчета приведены на рис. 5 и 6 в зависимости, соответственно, от  $E/N$  и  $T_{eff}$ . Там же приведены результаты, полученные из прямого расчета данной константы скорости методом Монте-Карло без использования каких-либо приближений. Этот расчет выполнен в данной работе по аналогии с расчетом [16]. На рис. 5 и 6 для сравнения также представлены данные по константе скорости процесса (6) с  $M = O_2$  в чистом кислороде, полученные из численного моделирования методом Монте-Карло и на основе приближенного подхода с использованием формул (4) и (5), где значения  $E_i$  брались из расчетов Монте-Карло для чистого  $O_2$ . Эти расчеты выполнены по аналогии с вычислениями [16], но при этом был расширен диапазон полей, для которых они были сделаны. Везде использовалось одно и то же сечение диссоциации  $O_4^-$ , полученное в [21] и приведенное в [16].

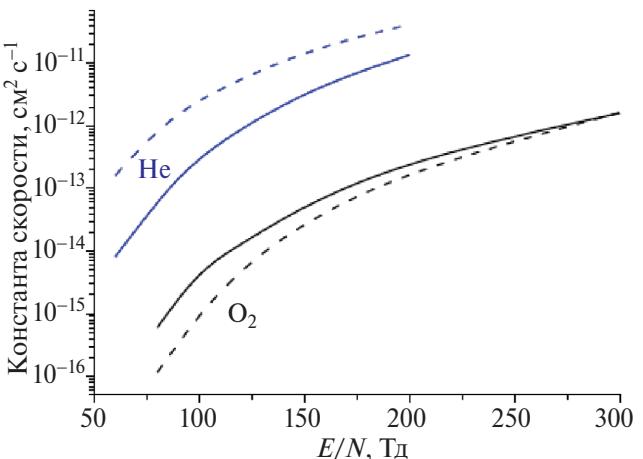


Рис. 6. Константа скорости диссоциации иона  $O_4^-$  (реакция (6)) на атомах He в чистом гелии и на молекулах  $O_2$  в чистом кислороде в зависимости от эффективной температуры ионов  $T_{eff}$ . Сплошные кривые – расчет методом Монте-Карло, штриховые кривые – приближенный расчет данной работы.

нены по аналогии с вычислениями [16], но при этом был расширен диапазон полей, для которых они были сделаны. Везде использовалось одно и то же сечение диссоциации  $O_4^-$ , полученное в [21] и приведенное в [16].

Из сравнения данных расчетов методом Монте-Карло на рис. 5 следует, что отличие констант диссоциации  $O_4^-$  в He и в  $O_2$  в зависимости от  $E/N$  достигает двух порядков величины. Согласно рис. 6 это различие при представлении данных в зависимости от  $T_{eff}$  несколько уменьшается, но все же может достигать одного порядка величины. Если же говорить о сравнении констант скорости, полученных методом Монте-Карло и приближенным методом, то для диссоциации на  $O_2$  в чистом кислороде эти константы отличаются в несколько раз при малых  $E/N$  и  $T_{eff}$ , а с ростом приведенного электрического поля это различие практически исчезает. Различие же в константе диссоциации на He в чистом гелии, посчитанной методом Монте-Карло и приближенным методом, оказывается гораздо больше. Даже в зависимости от  $T_{eff}$  оно больше одного порядка величины при малых полях и остается на уровне 3-х раз при больших полях. Отсюда можно сделать вывод, что основанный на максвелловском распределении подход [7, 22] достаточно хорошо работает для случая ионов  $O_4^-$  в чистом кислороде, где  $m_i \sim M$ , и оказывается неприменим в случае рассмотрения ионов  $O_4^-$  в чистом гелии, где  $m_i \gg M$ .

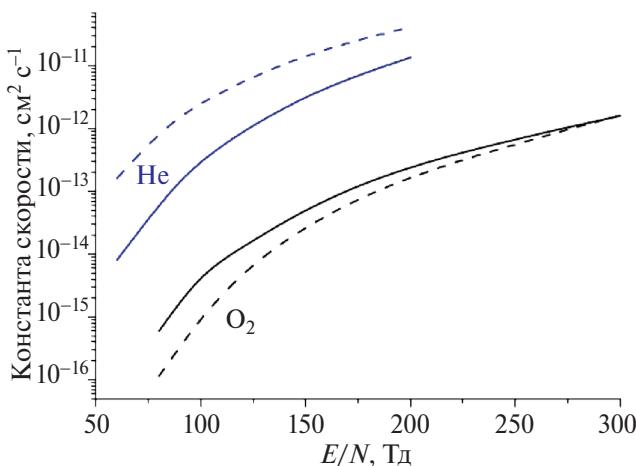


Рис. 5. Константа скорости диссоциации иона  $O_4^-$  (реакция (6)) на атомах He в чистом гелии и на молекулах  $O_2$  в чистом кислороде в зависимости от приведенного электрического поля. Сплошные кривые – расчет методом Монте-Карло, штриховые кривые – приближенный расчет данной работы.

Эта неприменимость данного приближенного подхода для определения констант скорости неупругих ионно-молекулярных процессов связана с особенностью энергетического распределения тяжелых ионов в газе легких нейтральных частиц под действием сильного электрического поля. На рис. 7 сравнивается энергетическое распределение ионов  $O_4^-$  в чистом гелии (в лабораторной системе координат), посчитанное в данной работе методом Монте-Карло для  $E/N = 100$  Тд, с максвелловской функцией распределения при той же средней энергии ионов, которая в этом случае равна  $E_i = 4.6$  эВ. Нормировка этих функций имеет вид

$$\int_0^\infty f(\varepsilon) \sqrt{\varepsilon} d\varepsilon = 1, \quad (7)$$

где  $\varepsilon$  — энергия ионов в лабораторной системе координат. Видно, что эти два распределения существенно отличаются друг от друга. В частности, максвелловская функция монотонно падает с ростом энергии ионов, а функция, полученная методом Монте-Карло, проходит через максимум при энергии, близкой к  $E_i$  и энергии дрейфового движения ионов  $m_i w^2 / 2$ . В максимуме эта функция в несколько раз больше максвелловской функции при этих энергиях и значительно меньше ее в пределах больших и малых энергий ионов.

Согласно используемым здесь данным [21] по сечению диссоциации  $O_4^-$  реакция (6) имеет порог 0.56 эВ. Этой величине соответствует пороговая энергия относительного движения ионов.

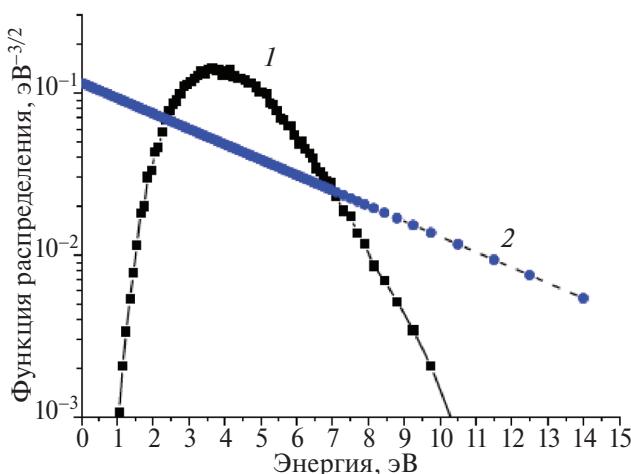


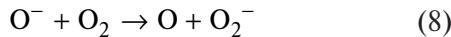
Рис. 7. Функция распределения ионов  $O_4^-$  (1) в чистом гелии (в лабораторной системе координат) при  $E/N = 100$  Тд и максвелловская функция распределения (2), соответствующая той же средней энергии ионов  $E_i = 4.6$  эВ.

Пороговая величина энергии ионов в лабораторной системе координат, как следует из (5), приблизительно в  $(m_i/M + 1)$  раз больше. Для ионов  $O_4^-$  в чистом кислороде она равна 1.7 эВ, а в чистом гелии из-за малой массы атомов оказывается гораздо больше — 9.5 эВ. (Эти величины получены в предположении о том, что ион сталкивается с неподвижной нейтральной частицей.) При  $\varepsilon > 9.5$  эВ, как следует из рис. 7, максвелловская функция распределения оказывается значительно больше функции, посчитанной методом Монте-Карло. Поэтому и приведенные на рис. 5 и 6 константы скорости процесса (6) для  $M = \text{He}$  в чистом гелии, посчитанная приближенным методом на основе максвелловского распределения ионов, существенно больше аналогичной величины, найденной при моделировании на основе метода Монте-Карло.

Из рис. 5 и 6 следует, что разные методы дают близкие результаты для константы скорости реакции (6) в кислороде и сильно различающиеся результаты для этой величины в гелии. Следует отметить, что функции распределения  $f(\varepsilon)$ , посчитанные в [23] методом Монте-Карло для ионов  $O_2^-$  в чистом кислороде, оказываются по форме близкими к максвелловским функциям. При этом высокоэнергичная часть немаксвелловских функций была несколько выше этой части для максвелловских функций. Поскольку в случае ионов  $O_2^-$ , как и ионов  $O_4^-$ , в чистом кислороде масса ионов близка к массе нейтральных частиц, то в качественном отношении функции распределения для этих ионов в чистом кислороде должны быть близки друг к другу. Именно этим можно объяснить только небольшое превышение константы скорости процесса (6) для  $M = O_2$  в чистом кислороде, посчитанной методом Монте-Карло, над аналогичной величиной определенной с использованием максвелловской функции (см. рис. 5 и 6).

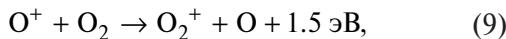
#### 4. ОБСУЖДЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ РАБОТЫ

То, что константы скорости пороговых неупругих ионно-молекулярных процессов в слабоионизованных газах и плазме под действием сильного электрического поля могут зависеть от буферного газа, влияющего на энергетическое распределение и среднюю энергию ионов, хорошо известный факт. Например, константа скорости пороговой (порог  $\approx 1$  эВ) перезарядки

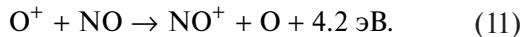


в зависимости от  $E/N$  оказывается в чистом гелии значительно (на порядок величины и более) больше, чем в чистом кислороде [24]. Поэтому константы скорости ионно-молекулярных процессов стараются приводить не в зависимости от  $E/N$ , а в зависимости от энергии относительного движения  $E_r$ , или эффективной температуры  $T_{eff}$ , определяемой из (4) [7, 22].

Вопрос о влиянии неравновесности энергетического распределения ионов на константы скорости ионно-молекулярных процессов исследовался при сравнении измеренных констант скорости в дрейфовых трубках для различных буферных газов [25] с теоретическими значениями, полученными методом Монте-Карло [26] или на основе метода моментов [27] при решении уравнения Больцмана для ионов в сильном электрическом поле. Рассматривались следующие реакции взаимодействия ионов  $\text{O}^+$  с  $\text{O}_2$ ,  $\text{N}_2$  и  $\text{NO}$  в буферных газах гелии и аргоне:



и



Хотя эти реакции не пороговые, но константы скорости для них достаточно сильно зависели от энергии относительного движения  $E_r$ . Общий вывод этих работ (см. также [7]) при сравнении констант скорости этих процессов при фиксированной энергии  $E_r$  состоял в том, что константы скорости в аргоне были больше, чем в гелии. Это различие могло достигать нескольких раз и интерпретировалось как следствие различий в неравновесных энергетических распределениях ионов  $\text{O}^+$  в этих газах. В аргоне при той же энергии  $E_r$  было больше высокoenергичных ионов  $\text{O}^+$ , чем в гелии. Это, в частности прямо следовало из функций распределения этих ионов, вычисленных методом Монте-Карло в этих газах [26]. Следует заметить, что эти расчеты продемонстрировали обеднение высокoenергичной части неравновесной функции распределения в гелии и по сравнению с максвелловской функцией. Однако для ионов  $\text{O}^+$  в аргоне, где массы ионов и атомов близки, в [26] наблюдалось наоборот обогащение высокoenергичной части неравновесной функции по сравнению с максвелловской функцией.

В данной работе на примере диссоциации иона  $\text{O}_4^-$  при столкновении с нейтральной частицей (реакция (6)) также продемонстрировано, что в сильнонеравновесных условиях, вызываемых присутствием электрического поля, константа скорости этого ионно-молекулярного процесса в гелии, посчитанная приближенным образом по максвелловской функции с учетом нагрева ионов в электрическом поле, оказывается существенно больше той же величины, посчитанной методом Монте-Карло. При этом отличие оказывается гораздо более выраженным (достигает порядка величины и более), чем для реакций (9)–(11), рассмотренных в [25–27]. В то же время большого отличия не наблюдается для константы скорости реакции (6) в чистом кислороде. Все это можно связать с тем, что различие в определении константы скорости разными методами увеличивается при увеличении различия в массах иона  $m_i$  и нейтральной частицы  $M$ . В рассмотренном здесь случае ионов  $\text{O}_4^-$  отношение  $m_i/M$  практически равно 16 для гелия и уменьшается до 2 для молекулярного кислорода. В случае же ионов  $\text{O}^+$  в гелии, исследованном в [25–27], отношение  $m_i/M$  принимает промежуточное значение, равное 4.

Поскольку функция распределения ионов по скоростям в слабоионизованных газах и плазме под действием сильного электрического поля, как правило, является сильно анизотропной, то возникает вопрос о том, насколько при этом правильно говорить о распределении ионов по энергиям вместо распределения по скоростям. Естественно, в общем случае функция распределения по скоростям гораздо более детально отражает анизотропное движение ионов. Однако в рассматриваемой ситуации, когда скорость дрейфа тяжелых ионов в газе легких нейтральных частиц оказывается гораздо больше скорости хаотического движения ионов, их описание на основе энергетического распределения оказывается почти эквивалентным описанию на основе распределения по скоростям.

## 5. ВЫВОДЫ

В данной работе исследована правомочность приближенного подхода, предложенного в [11] для расчета подвижности тяжелых ионов в газе легких нейтральных частиц в достаточно сильном электрическом поле, когда можно пренебречь движением этих частиц по сравнению с дрейфом

ионов. В рамках этого подхода вычислена подвижность ионов  $O_2^+$ ,  $N_2^+$ ,  $O_2^-$  и  $O_4^-$  в гелии в зависимости от приведенного электрического поля  $E/N$ . Проведено сравнение полученных данных как с имеющимися в литературе экспериментальными данными, так и с результатами более точных расчетов методом Монте-Карло, свободных от ограничений используемого приближения. Получено хорошее согласие между этими данными при достаточно высоких ( $> 50$  Тд) полях.

На примере ионов  $O_4^-$  продемонстрирована возможность вычисления их средней энергии и константы скорости диссоциации этих ионов в гелии в зависимости от приведенного электрического поля на основе приближенного метода определения подвижности ионов. Константа скорости вычислялась в предположении о максвелловском распределении ионов по энергиям, где в качестве эффективной температуры выступала величина, зависящая от электрического поля и определяемая из средней энергии относительного движения ионов. При этом получено хорошее согласие с расчетом средней энергии ионов методом Монте-Карло. В отношении константы скорости диссоциации ионов  $O_4^-$  такого согласия в гелии получить не удалось, хотя оно наблюдалось в чистом кислороде, где массы ионов и нейтральных частиц близки друг к другу. Анализ этого различия для констант скорости диссоциации ионов в гелии, полученных приближенным способом в предположении о максвелловском энергетическом распределении ионов и более точным методом в рамках моделирования Монте-Карло, показал, что в основе этого различия лежат особенности энергетического распределения ионов в случае большого отношения массы иона к массе нейтральной частицы. При этом основная часть ионов имеют энергию, сравнимую с их средней дрейфовой энергией, а высокоэнергичная часть распределения оказывается обедненной по сравнению с максвелловским распределением.

Из полученных результатов можно сделать вывод о том, что используемое в работе приближение применимо при вычислении подвижности и средней энергии примесных тяжелых ионов в гелии для достаточно высоких приведенных электрических полей. В то же время — это приближение с использованием максвелловского распределения и полученной средней энергии ионов дает существенно завышенные значения

для констант скорости пороговых ионно-молекулярных процессов. Вопрос о том, как можно было бы приблизенно вычислять эти константы в рассматриваемых условиях без привлечения громоздких расчетов типа метода Монте-Карло, требует отдельного рассмотрения.

Исследование выполнено при финансовой поддержке Российского научного фонда в рамках научного проекта № 23-11-00245.

## СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Райзер Ю.П. Физика газового разряда. М.: Наука, 1992.
2. Alves L.L., Bogaerts A., Guerra V., Turner M.M. // Plasma Sources Sci. Technol. 2018. V. 27. P. 023002.
3. Plasma modeling: Methods and applications / Ed. by G. Colonna, A. D'Angola. Bristol: IOP Publishing, 2016.
4. Хаксли Л., Кромптон Р. Диффузия и дрейф электронов в газах. М.: Мир, 1977.
5. Мак-Даниэль И., Мэзон Э. Подвижность и диффузия ионов в газах. М.: Мир, 1976.
6. Mason E.A., McDaniel E.W. Transport properties of ions in gases. New York: Wiley, 1988.
7. Viehland L.A. Gaseous ion mobility, diffusion, and reaction. Springer series on atomic, optical and plasma physics / Ed. G.D.F. Drake. V. 105. Cham: Springer Nature Switzerland AG, 2018.
8. Longo S. // Plasma Sources Sci. Technol. 2006. V. 15. P. S181.
9. Kihara T. // Rev. Mod. Phys. 1952. V. 24. P. 45.
10. Wannier G.H. // Bell Syst. Tech. J. 1953. V. 32. P. 170.
11. Смирнов Б.М. // ДАН СССР. 1966. Т. 168. С. 322.
12. Lu X., Laroussi M., Puech V. // Plasma Sources Sci. Technol. 2012. V. 21. P. 034005.
13. Winter J., Brandenburg R., Weltmann K.D. // Plasma Sources Sci. Technol. 2015. V. 24. P. 064001.
14. Lu X., Naidis G.V., Laroussi M., Ostrikov K. // Phys. Rep. 2014. V. 540. P. 123.
15. Lu X., Naidis G.V., Laroussi M., Reuter S., Graves D.B., Ostrikov K. // Phys. Rep. 2016. V. 630. P. 1.
16. Ponomarev A.A., Aleksandrov N.L. // Phys. Plasmas. 2024. V. 31. P. 093509.
17. Chang L., Nie L., Xiang Y., X. Li X. // Phys. Plasmas. 2016. V. 23. P. 123513.
18. Yousfi M., Hennadi A., Benhenni M., Eichwald O., Merbahi N. // J. Appl. Phys. 2012. V. 112. P. 043301.
19. Ponomarev A.A., Aleksandrov N.L. // Phys. Plasmas. 2024. V. 31. P. 043517.
20. Ellis H.W., Pai R.Y., McDaniel E.W., Mason E.A., Viehland L.A. // At. Data Nucl. Data Tables. 1976. V. 17. P. 177.
21. de Urquijo J., Bekstein A., Ducasse O., Ruiz-Vargas G., Yousfi M., Benhenni M. // Eur. Phys. J. D. 2009. V. 55. P. 637.

22. Sieck L.W., Herron J.T., Green D.S. // *Plasma Chem. Plasma Proc.* 2000. V. 20. P. 2000.
23. Aleksandrov N.L., Ponomarev A.A. // *Plasma Sources Sci. Technol.* 2015. V. 24. P. 035001.
24. Woo S.B., Wong S.F. // *J. Chem. Phys.* 1971. V. 55. P. 3531.
25. Albritton D.L., Dotan I., Lindinger W., McFarland M., Tellinghuisen J., Fehsenfeld F.C. // *J. Chem. Phys.* 1977. V. 66. P. 410.
26. Lin S.L., Bardsley J.N. // *J. Chem. Phys.* 1977. V. 66. P. 435.
27. Viehland L.A., Mason E.A. // *J. Chem. Phys.* 1977. V. 66. P. 422.

## A SIMPLIFIED APPROACH TO DESCRIBING THE KINETIC PROPERTIES OF IMPURITY IONS IN A WEAKLY IONIZED HELIUM PLASMA

N. L. Aleksandrov<sup>a, b, c, \*</sup> and A. A. Ponomarev<sup>b, c</sup>

<sup>a</sup>*Moscow Institute of Physics and Technology, Dolgoprudny, 141701, Russia*

<sup>b</sup>*Gaponov-Grekhov Institute of Applied Physics, Russian Academy of Sciences, Nizhny Novgorod, 603155, Russia*

<sup>c</sup>*Higher School of Economics, Moscow, 101000, Russia*

\*e-mail: nick\_aleksandrov@mail.ru

Using an approximate approach that is valid for a large ratio of the ion mass to the mass of the neutral particle, the mobility of  $O_2^+$ ,  $N_2^+$ ,  $O_2^-$ , and  $O_4^-$  ions was calculated in helium and good agreement was obtained with the available results of Monte Carlo calculations and experimental data at high values of the reduced electric field. This simplified approach was used to determine the average energy of  $O_4^-$  ions and the rate constants of dissociation of these ions in helium. The obtained ion characteristics were compared with the results of more accurate calculations using the Monte Carlo method. Good agreement has been obtained between these two approaches for the average ion energy, but for the dissociation rate constant the difference is quite significant, reaching an order of magnitude or more. It was shown that this difference is associated with the peculiarities of the energy distribution of ions for a large ratio of the ion mass to the mass of the neutral particle.

**Keywords:** ion mobility, Monte Carlo method, molecular ion dissociation, weakly ionized helium plasma, ion energy distribution