

## ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ КИНЕТИКИ ИОНИЗАЦИИ И ДИССОЦИАЦИИ ВОДОРОДА В ПЛАЗМЕ РАЗРЯДА ПЕННИНГА В ПРИБЛИЖЕНИИ ЛТР

Сторожев Д. А.<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup> *Институт проблем механики Российской академии наук, Москва, 119526, проспект Вернадского 101-1*

<sup>2</sup> *Всероссийский научно-исследовательский институт автоматики им. Н.Л. Духова, Москва*

### Аннотация

В данной работе выполнено исследование кинетики ионизации и диссоциации молекулярного водорода в плазме разряда Пеннинга в приближении локального термодинамического равновесия.

## NUMERICAL SIMULATION OF THE KINETICS OF IONIZATION AND DISSOCIATION OF HYDROGEN IN PENNING DISCHARGE PLASMA IN THE LTE APPROACH

Storozhev D. A.<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup> *Institute for Problems in Mechanics Russian Academy of Sciences, Russia, Moscow, 11952*

<sup>2</sup> *All-Russian Scientific Research Institute of Automatics, Moscow*

In this paper numerical investigation of the kinetics of ionization and dissociation of molecular hydrogen in Penning discharge plasma is performed with the use of local thermodynamic equilibrium approach.

### 1. ВЕДЕНИЕ

В источнике Пеннинга эмитируемые катодом первичные электроны ускоряются в прикатодном слое до энергии, соответствующей падению напряжения на разряде и, осциллируя в пространстве между катодом и отражателем, ионизируют газ. Электроны постепенно диффундируют к аноду, а ионы диффундируют к аноду или ускоряются по направлению к катодам.

Потенциал плазмы в разряде Пеннинга высокого давления ( $p \geq 10^{-3}$  Тор) слабо отличается от потенциала анода. Поэтому электроны в основном объеме плазмы являются относительно холодными. В соответствии с измерениями [3] их температура составляет  $\varepsilon = 15$  эВ.

В работах [4] рассматривался разряд при давлениях  $p \geq 10^{-4}$  Тор. В данных работах было показано большое значение магнитного поля, препятствующего попаданию на анод выбиваемых из катода электронов. Осциллирующие и плазменные электроны движутся по циклоидальным или спиральным траекториям, совершая одновременно гармонические колебания параллельно оси. В этих условиях электрон, прежде чем покинуть разрядный промежуток совершает большое число актов ионизации, поэтому возможно существование разряда при очень малых давлениях, когда величина длины свободного пробега много больше размеров межэлектродного пространства. При этом наибольшее время жизни у электронов, колеблющихся вблизи оси, поэтому в катоде иногда делается специальное углубление для того, чтобы эмиссия электронов происходила преимущественно вблизи оси источника. Стоит также заметить, что существует критическая величина магнитного поля, ниже которой разряд Пеннинга низкого давления не зажигается [1].

В работах [5], отмечается, что в плазме разряда Пеннинга с концентрацией заряженных частиц

$10^{13}$  см<sup>-3</sup> температура ионов достигает значений  $0.3 \div 1$  эВ, а в разряде имеет место аномальная диффузия заряженных частиц, определяющая ток электронов к аноду. В работе показано, что радиальное поле в разрядах пеннинговского типа не превышает 10 В/см.

В [1] предложена одномерная модель расчета радиального распределения заряженных частиц с использованием диффузионно-дрейфового приближения. Авторами также отмечается, что распределение концентрации зарядов в плазме разряда Пеннинга находится в качественном согласии с результатами, рассчитанными по одномерной модели, однако мгновенные распределения параметров плазмы могут существенно отличаться от усредненной картины вследствие неустойчивости разрядной плазмы.

В работах [6] описаны циклотронные источники ионов с разрядом Пеннинга и извлечении ионов перпендикулярно магнитному полю. Авторами отмечается, что с ростом тока происходит разогрев катодов ионной бомбардировкой, что приводит к появлению термоэлектронной эмиссии с катода. Это приводит к тому, что разряд с холодным катодом переходит в дуговой разряд с накаливаемым катодом.

В работе [7] выполнено исследование перехода сильноточного разряда Пеннинга в дуговой. Физические явления, вызывающие этот переход связаны с повышенной локальной электронной эмиссией электронов в тех областях, где присутствуют загрязнения поверхности катода. Авторами также отмечается, что даже после того, как катодное распыление удаляет все загрязнения с поверхности, дуга возникает во время отдельных импульсов с некоторой установившейся частотой переходов.

В работах [8] было предложено использовать импульсный дуговой разряд с холодным катодом, возникающий при переходе разряда Пеннинга в дугу, в ка-

честве источника ионов. При этом падение напряжение становится  $\leq 100$  В, разрядный ток составляет 200 А, а плотность тока извлекаемых ионов равна  $1 \div 10$  А/см<sup>2</sup>. Авторами также отмечается, что содержание атомарных ионов в пучке растет с 10% при токе 0.1 А до 90% при разрядном токе 100 А. Недостаток таких источников состоит в нестабильности тока извлекаемого пучка и малом времени работы ионного источника (определяемым скоростью распыления катодов).

## 2. РАСЧЕТ КИНЕТИЧЕСКИХ ПАРАМЕТРОВ ПЛАЗМЫ

Параметры плазмы разряда Пеннинга определяются процессами набора электронами и ионами энергии в скрещенных электрическом и магнитном полях и потерями энергии на ионизацию, возбуждение колебательных и электронных уровней и диссоциацию молекул газа. Скорость протекания данных процессов определяется дифференциальными сечениями рассеяния электронов на атомах и молекулах и характерной энергией, набираемой электронами в электромагнитном поле. В данной работе выполнены оценки основных физических параметров газоразрядной плазмы в широком диапазоне температуры электронов.

Для расчетов использовался набор сечений рассеяния электронов на молекулах и атомах водорода (сечения рассматриваемых в данной работе процессов мало отличаются от сечений рассеяния на молекулах и атомах дейтерия). Используемый набор включает сечения следующих процессов:

1.  $e + H \rightarrow e + H$  (упругое рассеяние)
2.  $e + H \rightarrow e + H(2p)$  (переход в возбужденное состояние  $H(2p)$ )
3.  $e + H \rightarrow e + H(2s)$  (переход в возбужденное состояние  $H(2s)$ )
4.  $e + H \rightarrow 2e + H^+$  (ионизация атома)
5.  $e + H_2 \rightarrow e + H + H$  (диссоциация молекулы)
6.  $e + H_2 \rightarrow 2e + H_2^+$  (ионизация молекулы)

На рис.1–2 представлены зависимости поведения данных сечений от энергии налетающего электрона. В данной работе использовался набор сечений [9]. В расчетах использовалась кусочно-линейная интерполяция данных сечений. Считая, что соотношение молекулярного и атомарного дейтерия в плазме разряда: 1:1, эффективная частота столкновений электронов рассчитывается по формуле:

$$v(\varepsilon) = v(\varepsilon) \left( N_{H_2} \sum_{n=1}^{n_{\max}} \sigma_{H_2}^n(\varepsilon) + N_H \sum_{l=1}^{l_{\max}} \sigma_H^l(\varepsilon) \right), \quad (1)$$

$$v(\varepsilon) = \sqrt{\frac{3k_B \varepsilon}{m_e}},$$

где  $\varepsilon$  – энергия электронов;  $N_{D_2}$  и  $N_D$  – концентрации соответственно молекулярного и атомарного дейтерия;  $\sigma_{H_2}^n(\varepsilon)$  и  $\sigma_H^l(\varepsilon)$  – сечения рассеяния электронов на молекулах и атомах дейтерия;  $l$  и  $m$  – порядковый номер рассматриваемого процесса.

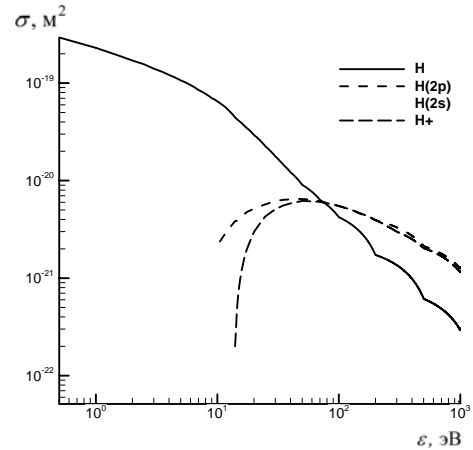


Рис. 1. Зависимость сечений рассеяния электронов на атомах водорода от энергии

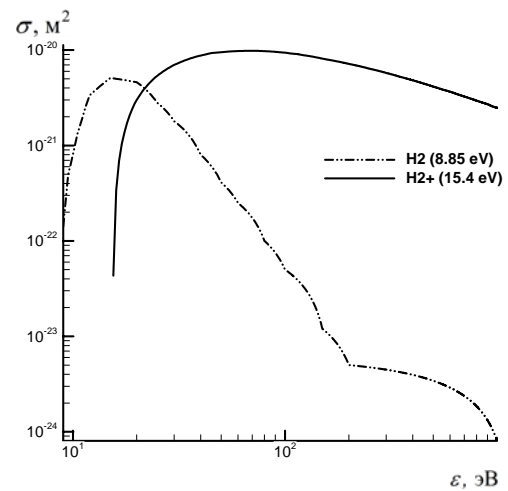


Рис. 2. Зависимость сечений рассеяния электронов на молекулах водорода от энергии

Зная частоту столкновений можно рассчитать длину свободного пробега электронов и коэффициент подвижности:

$$\lambda_{св. \text{ пробега}}(\varepsilon) = \frac{v(\varepsilon)}{v(\varepsilon)}, \quad (2)$$

$$\mu(\varepsilon) = \frac{e}{mv(\varepsilon)} \quad (3)$$

Помимо этого проводились оценки коэффициентов диффузии в продольном магнитном поле, параметров Холла, ларморовского радиуса и коэффициентов Таунсенда в зависимости от энергии электрона.

$$\alpha_{H_2}(\varepsilon) = \sigma_{H_2}^{ioniz}(\varepsilon) N_{H_2}, \quad (4)$$

$$\alpha_H(\varepsilon) = \sigma_H^{ioniz}(\varepsilon) N_H, \quad (5)$$

$$b_e = \frac{\omega_{larm}}{v(\varepsilon)}, \quad \text{где } \omega_{larm} = \frac{eB}{m_e}, \quad (6)$$

$$D^\perp(\varepsilon) = \frac{v(\varepsilon) \cdot \lambda_{св. \text{ пробега}}(\varepsilon)}{3} \times \frac{1}{1 + b_e^2}, \quad (7)$$

$$l_{\text{arm}}(\varepsilon) = \frac{v(\varepsilon)}{\omega_{\text{arm}}} \quad (8)$$

Кинетические параметры, рассчитанные в диапазоне энергий электронов, характерных для различных областей разряда Пеннинга представлены на рис. 3–7.

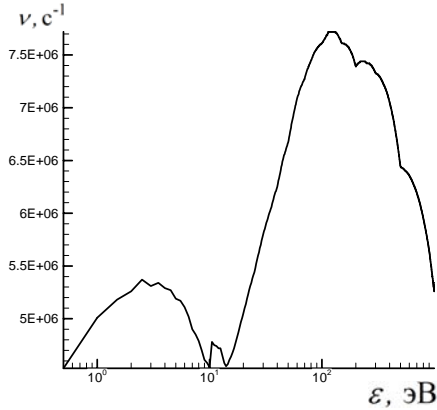


Рис. 3. Частота столкновений электронов с нейтральными частицами

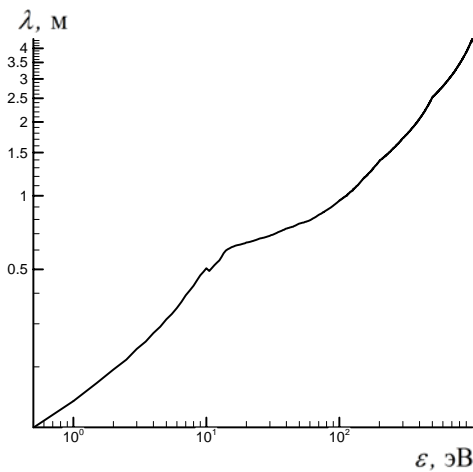


Рис. 4. Зависимость длины свободного пробега электронов от энергии

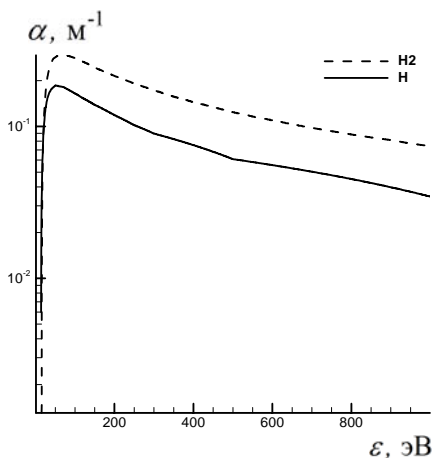


Рис. 5. Коэффициенты ионизации (1-й коэффициент Таунсенда) электронов в молекулярном и атомарном водороде

Стоит отметить, что формулы для расчета коэффициентов (1)–(8) являются приближенными. Для точно-

го расчета кинетических параметров плазмы нужно выполнять осреднение этих данных по энергетическому спектру электронов.

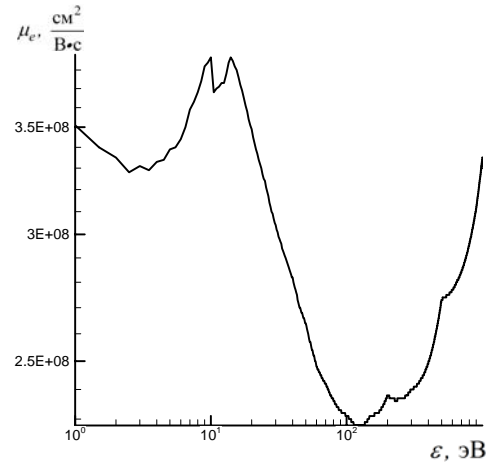


Рис. 6. Зависимость подвижности электронов от энергии частиц

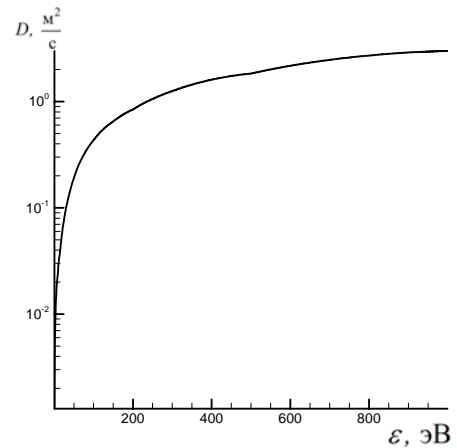


Рис. 7. Зависимость коэффициента диффузии электронов от энергии

Для ионов коэффициенты подвижности и диффузии рассчитываются с использованием газокинетического сечения:

$$\mu_i = \frac{e}{M' \nu_i}, \quad \text{где } M' = \frac{M_i M}{(M_i + M)},$$

$$\nu_i = N_H \bar{\nu}_H \sigma_H + N_{H_2} \bar{\nu}_{H_2} \sigma_{H_2}, \quad \bar{\nu} = \sqrt{\frac{8k_B T}{\pi M}},$$

$$\sigma_{H_2} = 2.29E-15 \text{ cm}^2, \quad \sigma_H = 3.53E-16 \text{ cm}^2 \quad [10].$$

Коэффициенты диффузии рассчитываются из соотношения Эйнштейна  $D_i = \mu_i T_i$ .

### 3. ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ КИНЕТИКИ ИОНИЗАЦИИ И ДИССОЦИАЦИИ

Для расчета концентраций молекулярных и атомарных ионов в данной работе решается система кинетических уравнений, включающая следующие реакции:





В рассматриваемом случае считалось, что для электронной компоненты плазмы имеет место локальное термодинамическое равновесие (ЛТР). Поэтому распределение электронов по энергиям считалось максвелловским:

$$f(\varepsilon) = 2 \sqrt{\frac{\varepsilon}{\pi(kT_e)^3}} \exp\left(-\frac{\varepsilon}{kT_e}\right), \text{ эВ}^{-1} \quad (14)$$

где  $\varepsilon$  и  $T_e$  – тепловая энергия и температура электронов. Заметим, что спектр электронов близок к максвелловскому, если частота электрон-электронных столкновений значительно превышает частоту потерь энергии в неупругих столкновениях. В случае если это условие не выполняется и имеет место отклонение от ЛТР, что чаще всего реализуется в катодном слое, для расчета функции распределения электронов по энергиям необходимо решать кинетическое уравнение Больцмана.

Константы скорости реакций (9)–(11) рассчитывались как свертка экспериментально (либо теоретически) полученных сечений рассеяния с функцией распределения электронов по энергиям:

$$K_n^+ = \sqrt{\frac{2}{\mu_0}} \int \sqrt{\varepsilon} \sigma_n f(\varepsilon) d\varepsilon, \quad (15)$$

Константы скоростей реакций (12)–(13) рассчитывались из соотношений детального баланса:

$$K_n^- = K_n^+ \exp\left(\frac{\varepsilon_{nop}}{k_B T_e}\right),$$

где  $\varepsilon_{nop}$  – пороговая энергия прямой реакции.

Кинетическая схема для набора реакций (9)–(13) имеет вид:

$$\frac{d[H_2^+]}{dt} = K_{H_2-e} [H_2][e] - K_{H_2^+-e} [H_2^+][e],$$

$$\frac{d[H^+]}{dt} = K_{H-e} [H][e] - K_{H^+-e} [H^+][e],$$

$$\frac{d[H]}{dt} = K_{H_2-e} 2[H_2][e] + K_{H^+-e} [H^+][e] - K_{H-e} [H][e],$$

$$\frac{d[H_2]}{dt} = -K_{H_2-e} [H_2][e] + K_{H_2^+-e} [H_2^+][e],$$

$$\frac{d[e]}{dt} = K_{H_2-e} [H_2][e] + K_{H-e} [H][e] - K_{H_2^+-e} [H_2^+][e] - K_{H^+-e} [H^+][e]$$

В начальный момент времени задавались концентрации молекулярного дейтерия и начальное значение концентрации электронов:  $n_e \approx 10^3 \text{ см}^{-3}$ . Результаты численного моделирования представлены на рис. 8–14. Видно, что стационарные значения концентрации устанавливаются за  $\approx 10^{-4}$  с и определяются скоростью процессов диссоциации молекул.

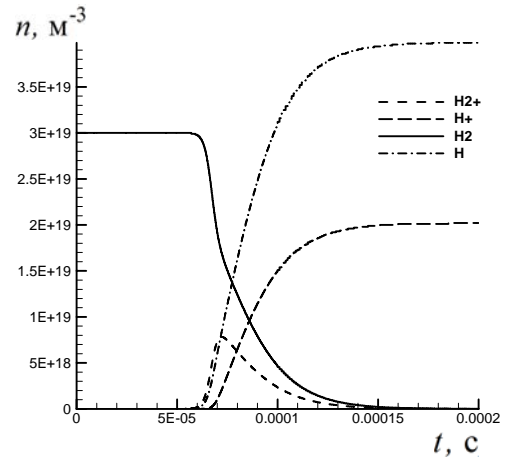


Рис. 8. Зависимость концентрации компонентов плазмы от времени при  $T_e = 20$  эВ

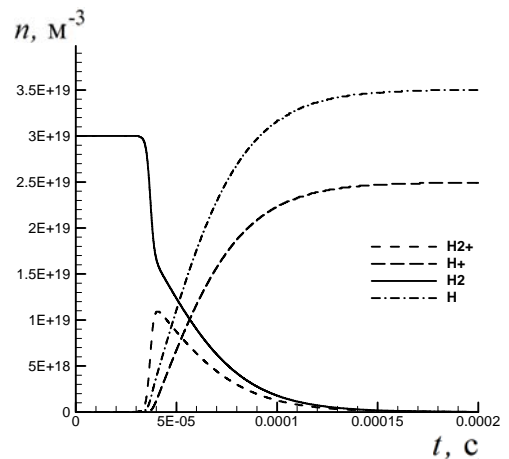


Рис. 9. Зависимость концентрации компонентов плазмы от времени при  $T_e = 40$  эВ

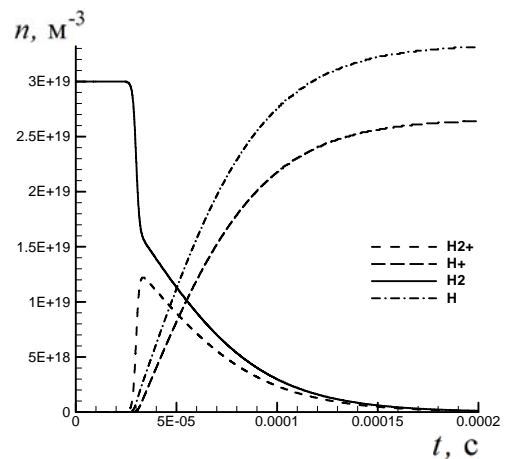


Рис. 10. Зависимость концентрации компонентов плазмы от времени при  $T_e = 60$  эВ

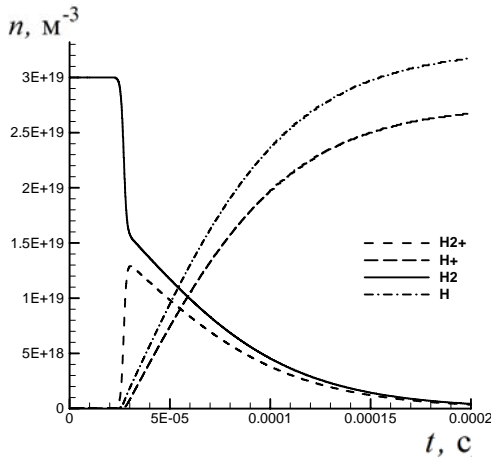


Рис. 11. Зависимость концентрации компонентов плазмы от времени при  $T_e = 80$  эВ

На рис. 12–14 показаны концентрации молекулярных и атомарных ионов водорода в различные моменты времени. Видно, что за  $2 \times 10^{-5}$  с доля атомарных ионов устанавливается на 6 порядков ниже концентрации молекулярных ионов. Сравнимые концентрации атомных и молекулярных ионов достигаются за  $4 \div 6 \times 10^{-5}$  с при температуре электронов  $T_e \geq 30$  эВ.

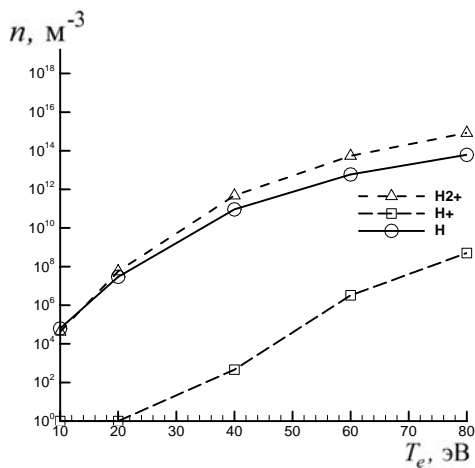


Рис. 12. Зависимость концентрации компонентов плазмы от  $T_e$  в момент времени  $t = 2 \times 10^{-5}$  с

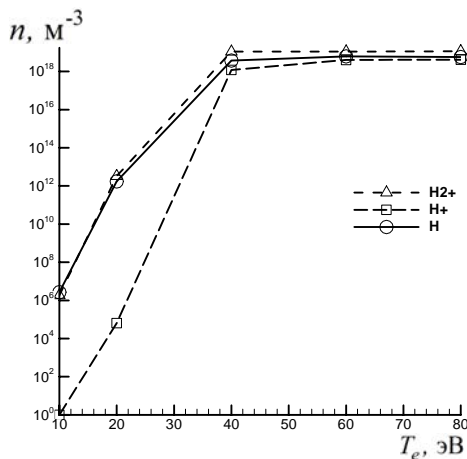


Рис. 13. Зависимость концентрации компонентов плазмы от  $T_e$  в момент времени  $t = 4 \times 10^{-5}$  с

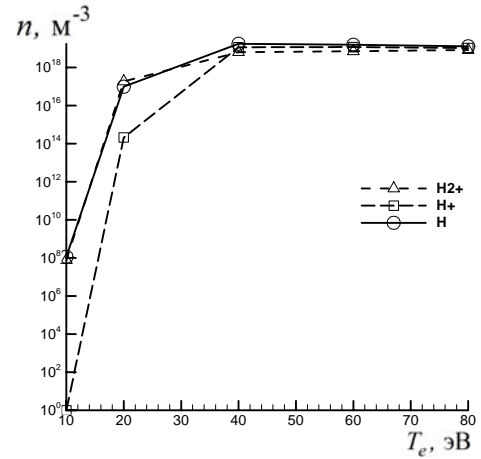


Рис. 14. Зависимость концентрации компонентов плазмы от  $T_e$  в момент времени  $t = 6 \times 10^{-5}$  с

Стоит отметить, что в разрядах Пеннинга большую роль могут играть ступенчатые процессы ионизации и диссоциации [11–15].

**ЗАКЛЮЧЕНИЕ**

Выполнено моделирование кинетики ионизации и диссоциации молекулярного водорода в плазме разряда Пеннинга в приближении локального термодинамического равновесия. Получены оценки кинетических параметров (коэффициентов подвижности, диффузии, Таунсенда) плазмы разряда. В рамках используемой модели рассчитаны концентрации молекулярных и атомарных ионов, показано влияние температуры электронов на компонентный состав плазмы. Требуется дальнейшее развитие модели в области учета влияния соударений второго рода на кинетику ионизации и диссоциации, а также учета неравновесных физико-химических процессов.

Работа выполнена в рамках программы фундаментальных исследований РАН. Автор благодарит чл.-корр. РАН, проф. С.Т. Суржикова за руководство работой.

**СПИСОК ОБОЗНАЧЕНИЙ**

- ЛТР – локальное термодинамическое равновесие;
- $N_{H_2}, N_H$  – концентрации молекул и атомов водорода;
- $\sigma_{H_2}^{ioniz}(\epsilon), \sigma_H^{ioniz}(\epsilon)$  – сечение ионизации молекулы и атома водорода;
- $T_e, T_i$  – температура электронов и ионов;
- $\mu_i$  – подвижность ионов;
- $D_i$  – коэффициент диффузии ионов;
- $f(\epsilon)$  – функция распределения электронов по энергиям.

**СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ**

1. Габович М.Д. Физика и техника плазменных источников ионов. – Атомиздат, 1972.
2. Brown I.G. The physics and technology of ion sources. – John Wiley & Sons, 2004.
3. Пугаров Ю.Д., Морозов П.М. Ионизация азота и кислорода в импульсном разряде //ЖТФ. – 1961. – Т. 31. – №. 4. – С. 467.
4. W. Knauer. J Appl Phys, 33(1962), pp. 2093–2099.

5. *Backus J., Huston N.E.* Ion Energies in a Cold Cathode Discharge in a Magnetic Field //Journal of Applied Physics. – 1960. – Т. 31. – №. 2. – pp. 400–403.
6. *Wells D. K.* IEEE Trans. Nucl. Sci., 1967, 14, 3, 70.
7. *Holliday J.H., Isaacs G.G.* Brit. J. Appl. Phys., 1966, 17, 1572.
8. *Габович М.Д. и др.* «Укр. физ. ж.», 1958, 3, 104.
9. <http://www.lxcat.laplace.univ-tlse.fr/>
10. *Райзер Ю. П.* Физика газового разряда. М.: Наука, 1987. 591 с.
11. *Celiberto R. et al.*, Cross section data for electron-impact inelastic processes of vibrationally excited molecules of hydrogen and its isotopes //Atomic Data and Nuclear Data Tables. – 2001. – Т. 77. – №. 2. – pp. 161–213.
12. *Capitelli M. et al.*, Non-equilibrium plasma kinetics: a state-to-state approach //Plasma Sources Science and Technology. – 2007. – Т. 16. – №. 1. – P. S30.
13. *Селезнев Р.К.* Исследование обобщенного метода Ньютона для решения системы дифференциальных уравнений химической кинетики на примере горения углеводородов в кислороде // Физико-химическая кинетика в газовой динамике. 2013. Т.16. Вып.2. <http://www.chemphys.edu.ru/pdf/2013-12-20-010.pdf>
14. *Сторожев Д.А.* Кинетические процессы в плазме тлеющего разряда// Физико-химическая кинетика в газовой динамике. 2013. Т.16. Вып.1. <http://www.chemphys.edu.ru/pdf/2013-10-12-007.pdf>
15. *Горбунов А.А. , Селезнев Р.К.* Моделирование горения водорода в модельном канале ГПВРД // Физико-химическая кинетика в газовой динамике. 2013. Т.16. Вып.2. <http://www.chemphys.edu.ru/pdf/2013-12-20-001.pdf>