

## РАСЧЁТ СЕЧЕНИЯ ИОНИЗАЦИИ ЭЛЕКТРОННЫМ УДАРОМ ДЛЯ АТОМОВ ВОДОРОДА И АЗОТА

Г.В. Андреев

*Московский Физико-Технический институт,  
141700, Московская обл. г. Долгопрудный, Институтский пер., 9*

*Институт проблем механики им. А.Ю. Ишлинского Российской академии наук,  
119526, Москва, проспект Вернадского 101-1*

### Аннотация

В работе приводятся результаты расчёта сечений ионизации атомов азота и водорода по механизму электронного удара. Расчёт сечений для каждого из первых десяти уровней энергии проводится по квазиклассической формуле Дравина. Затем производится усреднение путём суммирования со статистическими весами. Расчёт сечения ионизации атома водорода приведен для сравнения с имеющимися альтернативными данными и верификации используемой модели.

### CALCULATION OF IONISATION CROSS-SECTION FOR ELECTRON IMPACT OF HYDROGEN AND NITROGEN ATOMS

The results of calculation of ionization cross-section of nitrogen and hydrogen atoms by electron impact mechanism are presented in the account. The calculation of cross-section for each of the first ten energy levels was done with quasi-classic Dravin formula. Then was conducted averaging by summation with statistical weights. The calculation of ionization cross-section of hydrogen atom is given for comparison with alternative data and verification the model used.

## 1. ВВЕДЕНИЕ

При изучении ударных волн и построении радиационно-столкновительных моделей немаловажную роль играет подсчёт сечений ионизации соответствующих атомов. При этом возникает проблема учёта состояния ионизируемого атома, в частности, уровня энергии, с которого происходит ионизация. Чтобы учесть возбуждённые атомы, на практике имеет смысл рассматривать средние сечения. В данной работе предлагается модель, согласно которой среднее сечение ионизации – это сумма сечений ионизации с уровня, помноженных на концентрацию атомов, находящихся в соответствующих состояниях.

## 2. ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

В работе рассматриваются первые 10 уровней энергии атомов азота и водорода. В качестве исходных данных использованы таблицы NIST, а для водорода, кроме этого, значения энергии, полученные по известной аналитической формуле. Расчёт проводится для температуры тяжёлых частиц  $T = 4800$  К. Такой выбор обусловлен тем, что используемые для анализа адекватности результатов зависимости для атома водорода приведены в [2] для такой температуры.

## 3. МЕТОД РЕШЕНИЯ

Для расчёта сечения ионизации  $n$ -го уровня используется квазиклассическая формула Дравина:

$$\sigma(n) = 4\pi a_0^2 \left( \frac{I_1^H}{I_n} \right)^2 f_n \xi_n \frac{U_n - 1}{U_n^2} \ln(1.25 \beta_n U_n), \quad (1)$$

где  $U_n = \frac{E_e}{E_n}$ ,  $E_e = \frac{m_e v_e^2}{2}$ ,  $E_n = z^2 \frac{I_1^H}{n^2}$ ,

$$\beta_n = 1 + \frac{z-1}{z+1}, \quad I_1^H = 13.59 \text{ eV};$$

$\xi_n$  – число эквивалентных электронов на  $n$ -м уровне;  
 $f_n$  – сила осциллятора для ионизации с  $n$ -го уровня, соответствующая одному электрону ( $f_1 = 0.66$ ,  $f_2 = 0.71$ ,  $f_3 = 0.81$ ,  $f_4 = 0.94$ ,  $f_{n>5} = 1$ );  $E_n$  – энергия ионизации  $n$ -го уровня.

Усреднение сечения ионизации для 10 уровней проведено путём суммирования сечений всех уровней с учётом их заселённости (полагалось, что сечение ионизации уровня пропорционально его заселённости):

$$\langle \sigma \rangle = \sum_k N_k \sigma_k, \quad (2)$$

где  $\sigma_k$  – сечение ионизации, а  $N_k$  – заселённость  $k$ -го уровня.

$$N_k = N_0 \cdot \frac{g_k \cdot e^{-E_k/kT}}{\sum_{i=1}^N g_i \cdot e^{-E_i/kT}}, \quad (3)$$

где  $N_0$  – концентрация атомов;  $g_k$  – статистический вес  $k$ -го состояния;  $E_k$  – энергия  $k$ -го уровня. Знаменатель дроби представляет собой статистическую сумму атома.

## 4. РЕЗУЛЬТАТЫ

Результаты расчётов представлены на следующих графиках.

Напомним, что расчёт сечения ионизации атома водорода, проведен для проверки адекватности модели и её программной реализации. Из рис.1 видно, что результаты расчёта (синяя линия) хорошо согласуются с данными, представленными в [2].

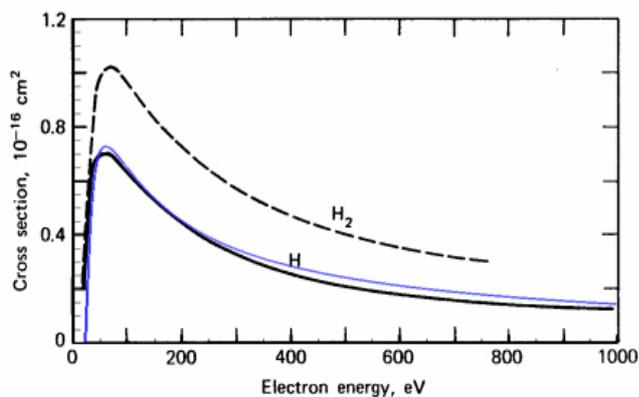


Рис. 1. Зависимость сечения ионизации атома водорода от кинетической энергии ионизирующих электронов

Ниже представлены результаты расчёта сечения ионизации для энергетических уровней атома азота в различных масштабах и среднего сечения.

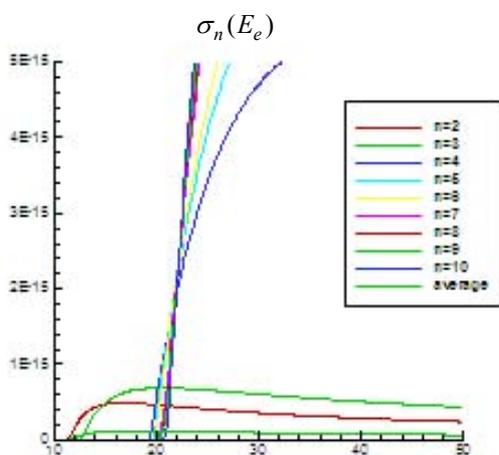


Рис. 2.1. Зависимость сечения ионизации уровней атома азота от энергии ионизирующих электронов

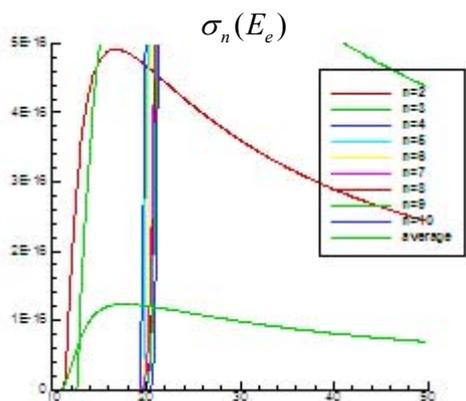


Рис. 2.2. Зависимость сечения ионизации уровней атома азота от энергии ионизирующих электронов

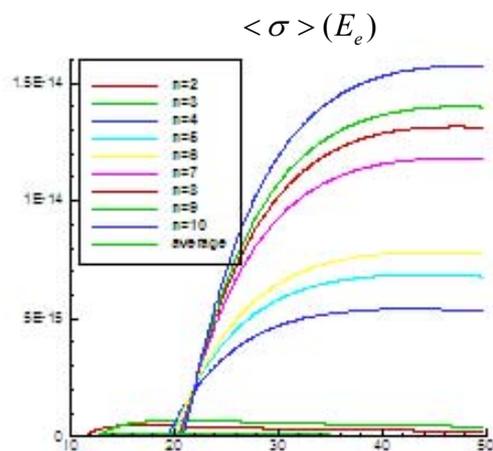


Рис. 2.3. Зависимость сечения ионизации уровней атома азота от энергии ионизирующих электронов

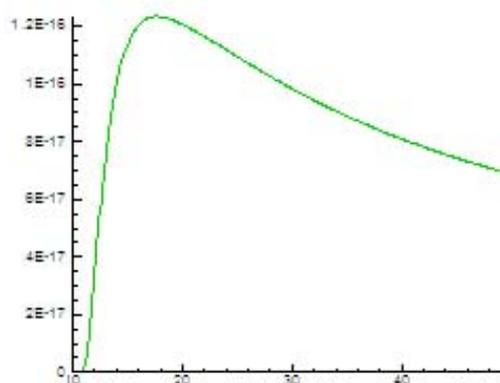


Рис. 3. Зависимость среднего по энергетическим уровням сечения ионизации уровней атома азота от энергии ионизирующих электронов

Хорошее согласование результатов расчёта с данными других авторов говорит об адекватности приведённой модели и возможности её использования для расчётов сечений ионизации других частиц.

Данное исследование также может быть расширено на другие механизмы ионизации.

Работа выполнена в рамках проекта РФФИ № 07-01-00133 (разработка пространственной модели движения химически реагирующего газа), а также в рамках Программы фундаментальных исследований РАН (создание моделей физико-химической кинетики высокотемпературных газовых потоков) и Программы министерства образования и науки Российской Федерации РНПВШ 2.1.1/4693 (создание гибридных радиационно-столкновительных моделей аэрофизики).

**СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ**

1. Surzhikov S.T. Electronic excitation in air and carbon dioxide gas. - Von Karman institute for fluid dynamics - "Non-Equilibrium Gas dynamics from physical models to hypersonic flights" // RTO-AVT/VKI lecture series – 35 p.
2. М. Митчнер, Ч. Кругер. Частично ионизованные газы. М.: Мир, 1976. 496 с.