

Ю.В. КОВТУН

Національний науковий центр "Харківський фізико-технічний інститут" НАН України
(Вул. Академічна, 1, Харків 61108; e-mail: Ykovtun@kipt.kharkov.ua)

ЕНЕРГЕТИЧНІ ВИТРАТИ НА ІОНІЗАЦІЮ МОЛЕКУЛИ ВОДИ ЕЛЕКТРОННИМ УДАРОМ У СЛАБКОІОНІЗОВАНІЙ ПЛАЗМІ

УДК 533.92,537.56

Проведено розрахунки ціни іонізації молекули води моноенергетичним пучком у діапазоні енергії первинних електронів 15–1000 еВ. Отримано залежності ціни іонізації від ступеня іонізації води від 0 до 0,1. Показано, що ціна іонізації зростає із збільшенням ступеня іонізації та для енергії первинних електронів 1000 еВ вона зростає від 25,26 еВ до 52,45 еВ у розрахунковому інтервалі ступеня іонізації.

Ключові слова: ціна іонізації, ступінь іонізації, молекула води, електрони.

1. Вступ

Дослідження фізичних і хімічних процесів, що відбуваються у воді в різному її агрегатному стані при взаємодії з частинками (електронами, іонами, фотонами та ін.) становить інтерес під час вирішення широкого кола фізичних і прикладних завдань у астрофізиці [1, 2] (дослідження планет сонячної системи і їх супутників, міжзоряного середовища та ін.), радіаційній фізиці, хімії, біології та медицині [5, 6] (дослідження впливу на біологічні об'єкти іонізуючого випромінювання й використання цих даних для розробки методів діагностики, лікування захворювань та ін.), фізиці плазми [7–14] (електричні розряди у воді та над її поверхнею, а також у парах води та ін.) і інших галузях науки й техніки.

Одним з напрямків, що викликає значний інтерес у фізиці низькотемпературної плазми та її прикладних технологіях, є дослідження електричних розрядів в рідині і над її поверхнею. Незважаючи на більш ніж вікову історію досліджень електричного розряду в рідині, сучасні дослідження характеризуються великою різноманітністю експериментальних пристроїв та широким діапазоном

початкових експериментальних умов [8]. Великий експериментальний матеріал, отриманий до теперішнього часу, по електричному пробою рідин показує, що існує декілька різних механізмів пробою. Згідно з [15] можна виділити чотири механізми ініціації розряду: 1) вирішальну роль у запалюванні розряду відіграє розчинений у рідині газ (у вигляді газових бульбашок), іонізація якого веде до утворення первинних плазмових каналів, даний механізм найбільш імовірно реалізується в недегазованих рідинах; 2) при високих напруженостях електричного поля у приелектродній області відбувається емісія електронів у рідину (розряд з катода) або іонізація молекул рідини (розряд з анода) з подальшим локальним розігрівом рідини струмом і формуванням ударної хвилі, за фронтом якої відбувається вибухове пароутворення та утворення плазмового каналу шляхом іонізації газопарових бульбашок, 3) при високих напруженостях електричного поля $\sim 10^8$ В/см і малій тривалості імпульсу $\sim 10^{-8}$ с можливе зародження плазмового каналу як наслідок іонізації молекул рідини за рахунок автоіонізації (анодне ініціювання) або ударної іонізації (катодне ініціювання); при цьому напруженості поля достатні для іонізації молекул рідини, але часу недостатньо для фазового перехо-

© Ю.В. КОВТУН, 2016

ду першого роду; 4) для рідин з більшим значенням питомої електропровідності протікання струму призводить до розігріву рідини, її скипанню та іонізації парогазових порожнин і формування плазмового каналу.

При розробці будь-якої технології з використанням електричних розрядів в рідині і над її поверхнею, важливим є визначення основних каналів енерговитрат і, відповідно, сумарних енерговитрат. Таке завдання є досить складним і, в загальному випадку, енерговитрати залежать від конкретних технологічних умов. Однак один з основних каналів енерговитрат, а саме, енерговитрати на створення плазми, принципово можливо визначити. Ряд процесів, що відбуваються в плазмі, такі як іонізація, збудження, рекомбінація, дифузія, перезарядження та інші, є по суті основними факторами справи, які впливають на кінцеву величину енергетичних витрат на створення плазми з необхідними параметрами. Одним з них є енергетичні витрати на іонізацію електронним ударом або так звана ціна іонізації. Процес іонізації електронним ударом може проходити кількома шляхами, а саме шляхом прямого переходу зв'язаного електрона у континуум або шляхом каскадних переходів електрона у континуум. Тобто зіткнення електрона з частинкою може приводити до прямої, дисоціативної, ступінчастої іонізації та автоіонізації. Іонізації електронним ударом не є єдиним можливим процесом, який переводить нейтральну частинку у іонізований стан. Також можлива іонізація за рахунок зіткнення фотонів із частинками (фотоіонізація). У розрядах фотони утворюються за рахунок випромінювання збуджених частинок. Перетин фотоіонізації на декілька порядків нижчий, ніж іонізації електронним ударом. Зіткнення важких частинок (атомів, молекул) з нейтральними або зарядженими важкими частинками також може призвести до утворення іонів. При великих енергіях зіткнення (кеВ, МеВ) частинки ці процеси відіграють помітну роль у іонізаційному балансі, що, наприклад, враховується при дослідженні високо-температурної плазми керованого термоядерного синтезу. Але в електричних розрядах високоенергетичні важкі частинки практично відсутні. Проте зіткнення збуджених атомів (молекул) з нейтральними частинками може бути досить дієвим механізмом утворення іонів, наприклад, в процесі Пеннінговської або асоціативної іонізації. Також

варто відзначити, що при електричних розрядах можлива й термоіонізація. При цьому припускається, що плазма знаходиться у термодинамічній рівновазі (ТР) або відхилення від ТР порівняно невеликі (модель локальної термодинамічної рівноваги або ЛТР). Густина електронів, іонів та нейтралів пов'язана з температурою рівнянням Саха безвідносно до механізмів народження та зникнення зарядів. Проведені останнім часом дослідження електричних розрядів (дугового, іскрового, жевріючого розрядів та інших [8,9]) у рідині та над її поверхнею показують, що в багатьох випадках утворена плазма не термічна [8]. Варто також відзначити, що в плазмі електричних розрядів можливе утворення негативних іонів, які беруть участь в балансі частинок плазми. На жаль, досі нема повних моделей які б враховували велику кількість процесів, які відбуваються в електричних розрядах у рідині та над її поверхнею [8, 9, 15]. Усі перераховані вище процеси можуть на окремих стадіях розрядів відігравати превалюючу роль або вносити суттєвий внесок у загальні іонізаційні процеси. Як відзначається у [15], іонізація електронним ударом є одним із основних процесів при пробі рідини та утворенні плазми. У роботах [11–13] припускається, що головний внесок в утворення плазми вносить група швидких електронів. Тобто іонізація електронним ударом є невід'ємним процесом при формуванні плазми у розрядах.

Під ціною іонізації електронним ударом зазвичай розуміють деяке середнє значення енергії, що витрачається електроном на утворення іон-електронної пари в речовині. Величина ціни іонізації природно не може бути менша за потенціал іонізації, який для води в газовій фазі становить 12,621 еВ [16]. У рідкій фазі величина порогової енергії іонізації пов'язана з різними механізмами, що приводять до іонізації, такими як прямий вертикальний перехід (Франка–Кондона), автоіонізація та ін., знаходиться в діапазоні 8,5–10 еВ та вище, при цьому фотоіонізація може відбуватися при енергії збудження $\sim 6,5$ еВ [17]. Оскільки утворення плазмових каналів в основному відбувається через іонізацію газопарової фази [15], будемо розглядати величину ціни іонізації для води в газовій фазі.

Ціна іонізації визначається експериментальним або розрахунковим шляхом. Одним з ряду підходів визначення ціни іонізації розрахунковим шля-

хом є розгляд елементарних процесів, пов'язаних з проходженням моноенергетичного електронного потоку (пучка) через середовище. При цьому енергія первинних електронів витрачається в пружних і непружних зіткненнях з молекулою, а також частина енергії залишається у вибитого з молекули електрона в процесі іонізації (дисоціативної іонізації), енергія якого лежить в межах від 0 до $E - E_{iz}$, де E – енергія первинного електрона, E_{iz} – енергія іонізації [18, 19]. Частина вибитих (вторинних) електронів з енергією, яка перевищує E_{iz} , також беруть участь в процесі іонізації і, у свою чергу, утворюють нове покоління вторинних електронів. По суті, розглядається повна втрата енергії моноенергетичного електронного потоку (пучка) в середовищі в результаті іонізаційних каскадів. Середню енергію, що витрачається на утворення іон-електронної пари або ціну іонізації, визначають із співвідношення [3]:

$$W = \frac{E}{\langle N_i \rangle}, \quad (1)$$

де $\langle N_i \rangle$ – середнє число утворених іонів при зіткненні електронів з молекулою. Як бачимо з рівняння (1), визначення величини W зводиться до знаходження середнього числа іонів, утворених при зіткненні електронів з молекулою. Для цього потрібне знання значень порогової енергії і перетинів елементарних процесів, які, у свою чергу, впливають на кінцеву величину ціни іонізації, що наголошувалося раніше, наприклад, в [6]. Відповідно, розрахунок ціни іонізації завжди представляє деяке наближення до реальної величини.

Використання даного підходу цілком виправдане, коли основний внесок в іонізацію середовища вносить потік (пучок) первинних електронів і принципово можливе використання його для визначення ціни іонізації води на початковій стадії іонізації газопарової фази рідини. Тим паче, що в даному підході можливо врахувати вплив ступеня іонізації (n_e/n_M , де n_e – густина електронів плазми, n_M – густина нейтралів) середовища на величину ціни іонізації. Оскільки перетин кулонівських зіткнень високий, то із збільшенням ступеня іонізації внесок кулонівських зіткнень в загальну величину ціни іонізації повинен бути значним. Такі розрахунки з урахуванням ступеня іонізації плазми були проведені у ряді робіт для атомарних Н,

He [20], O [21], Ar [22] і молекулярних H_2 [20, 23], CO_2 [24], N_2 [25], CO [26] газів.

Таким чином, проведення розрахунків ціни іонізації молекули води електронним ударом в слабкоіонізованій плазмі становить інтерес, тим паче, що такі розрахунки в літературних джерелах відсутні. Дана робота є продовженням початих раніше досліджень [11–14].

2. Елементарні процеси, що відбуваються при зіткненні електронів з молекулою води

Енергетичні витрати електрона при зіткненнях, зрештою, і визначають величину ціни іонізації. Тому розглянемо детальніше процеси зіткнення електрона з молекулою, на відміну від зіткнення з атомом, характеризується великим числом можливих процесів, що приводять до втрати енергії налітаючого електрона [18, 19].

1. Пружні зіткнення електронів з молекулою ($e + AB \rightarrow e + AB$). Даний процес не має порогового характеру, на відміну від інших процесів, і приводить до передачі імпульсу молекулі, а також сильно впливає на розсіювання електронних пучків при проходженні їх через речовину. При цьому середня частка енергії, що втрачається при зіткненні, дорівнює [18, 19]: $(2m_e\sigma_{nt}/m_M\sigma_{elas})$, де m_e – маса електрона, m_M – маса молекули, σ_{nt} – транспортний (дифузійний) перетин пружного зіткнення, σ_{elas} – перетин пружного зіткнення. Експериментальні виміряні значення перетинів пружних зіткнень по цілому ряду робіт узагальнені і наведені у вигляді рекомендованих даних в [16, 27].

2. Збудження оберально-коливальних рівнів молекули ($e + AB \rightarrow e + AB^{rv}$). При непружних зіткненнях електрона з молекулою кінетична енергія переходить у внутрішню та оскільки повна енергія молекули дорівнює сумі трьох складових $E_{tot} = E_{el} + E_v + E_r$, де E_{el} , E_v , E_r – відповідно енергія електронного, коливального й оберального стану, то можливі збудження як оберальних рівнів, так і оберально-коливальних рівнів, а також електронних рівнів з одночасним збудженням оберальних і коливальних рівнів. Збудження коливальних рівнів відіграє істотну роль в розрядах у середовищі молекулярних газів, будучи одним з головних механізмів передачі енергії від електронів до молекул. Проте втрата енергії електро-

Таблиця 1

Молекула, молекулярний іон	Електронна конфігурація	Електронний стан	Енергія переходу, eV
H ₂ O	(1a ₁) ² (2a ₁) ² (1b ₂) ² (3a ₁) ² (1b ₁) ²	X ¹ A ₁	–
		a ³ B ₁	7,14
		A ¹ B ₁	7,49
		³ A ₂	8,9
		³ A ₁	9,2
H ₂ O ⁺	(1a ₁) ² (2a ₁) ² (1b ₂) ² (3a ₁) ² (1b ₁) ¹	X ² B ₁	12,621
		A ² A ₁	13,748
		B ² B ₂	17,29
H ₂ O ⁺²	(1a ₁) ² (2a ₁) ² (1b ₂) ² (3a ₁) ¹ (1b ₁) ¹	X ³ B ₁	40,2
		1 ¹ A ₁	41,1
		b ¹ B ₁	42
		2 ¹ A ₁	45

нів на збудження обертальних рівнів при низьких енергіях електронів, як наведено у розрахунку, що проведений в [28], переважає над витратами за рахунок пружних зіткнень. Природно, що врахувати всі переходи в молекулі води на сьогоднішній день неможливо; за даними роботи [29] молекула води має 12248 коливально-обертальних і 107 коливальних рівнів, а оскільки немає повного набору перетинів збудження рівнів, то були вибрані ті, що є і рекомендовані в літературі: для обертальних рівнів [16, 28] (розрахункові дані на основі методу R-матриц) і коливальних рівнів [16, 30] (експериментальні дані).

3. Збудження електронних рівнів молекули ($e + AB \rightarrow e + AB^*$). Електронні переходи в молекулі можуть відбуватися в результаті як внутрішнього (спонтанного випромінювання), так і зовнішнього збурення (за рахунок електронного удару, поглинання випромінювання), при цьому відстань між ядрами і швидкість відносного їх руху трохи змінюються (принцип Франка–Кондона) [19]. Це приводить до різних варіантів для електронного переходу залежно від форми кривих потенціальної енергії початкового і кінцевого станів. Експериментально виміряні енергії збудження 25 електронних рівнів і, відповідно, перетини збудження цих рівнів було взято з робіт [31–33]. Перетини збудження, з причини малої кількості експериментальних точок, були апроксимовані емпіричною формулою, запропонованою в роботі [37]. У табл. 1 узагальнені дані робіт [16, 33, 35, 36] відносно енергії переходів для декількох перших еле-

ктронних станів молекули води і її молекулярних іонів.

4. Дисоціація молекули ($e + AB \rightarrow e + A + B$). При переходах з дисоціацією згідно з принципом Франка–Кондона, мінімальна енергія, необхідна для переходу, дорівнює [18]:

$$E_{\min} = E_A + E_B + D_{AB} + W_{\min},$$

де E_A , E_B – повна енергія збудження атомів, D_{AB} – енергія дисоціації, W_{\min} – мінімальна кінетична енергія продуктів розпаду. По суті, мінімальна енергія E_{\min} , необхідна для переходу, є пороговою енергією E_{th} , нижче за яку перехід неможливий. Молекулі H₂O відповідає основний електронний стан X¹A₁ (див. табл. 1) і енергія дисоціації D(H–OH) = 5,0992 eV [16]. Збудження електронних рівнів a³B₁, A¹B₁, b³A₁, та B¹A₁ приводить до дисоціації молекули води по декількох каналах [37] на H і OH(X²Π_i) із збудженням обертально-коливальних рівнів [38].

5. Іонізація та дисоціативна іонізація молекули ($e + AB \rightarrow e + AB^+$, $e + AB \rightarrow e + A^+ + B$, $e + AB \rightarrow e + A^+ + B^+$). Енергія утворення молекулярного іона H₂O⁺ дорівнює енергії переходу на основний електронний стан (див. табл. 1). Процес дисоціативної іонізації молекули води протікає по декількох каналах [39], що мають різну порогову енергію E_{th} . Фрагменти дисоціативної іонізації можуть включати, окрім нейтралів, також кілька одноразово іонізованих частинок, а також двократно заряджені. Процес утворення більш за одну

одноразово іонізовану частинку у фрагментах дисоціативної іонізації може відбуватися як через автоіонізацію [40, 41], так і через утворення двократно іонізованої молекули H_2O^{2+} (див. табл. 1) з подальшим її розпадом [42]. Енергія потрібної іонізації молекули H_2O за даними робіт [43, 44] знаходиться на рівні 75 еВ. Внесок багатократної іонізації молекули H_2O в повну кількість утворених іонів при енергії електронів 30–200 еВ становить згідно з [44]: 0–4,8% при двократній іонізації, 0–0,09% при триразовій іонізації. Значення перетинів іонізації і дисоціативної іонізації, отримані експериментально, узяті з роботи [27].

6. Дисоціативне прилипання та полярна дисоціація ($e + AB \rightarrow e + A^- + B$, $e + AB \rightarrow e + A^+ + B^-$). Процес дисоціативного прилипання відбувається шляхом захоплення електрона молекулою з подальшою її дисоціацією на негативний іон і нейтрал [45], і при низьких енергіях електронів відіграє відповідну роль в балансі частинок, але оскільки даний процес призводить до втрат електронів разом з рекомбінацією і дифузиею, то надалі цей процес в розрахунках ціни іонізації враховуватися не буде. Треба також відзначити, що ці процеси відіграють помітну роль у балансі частинок плазми та впливають на кінцеву величину енергетичних витрат на створення плазми. Полярною дисоціацією [39] також нехтуємо оскільки перетин цього процесу малий порівняно з перетином іонізації (дисоціативної іонізації), наприклад, для кисню та окису вуглецю [18]. Також у літературі відсутні будь-які дані щодо перетину полярної дисоціації для молекули води.

3. Ціна іонізації молекули води електронним ударом

Визначення ціни іонізації атомів і молекул експериментальним і розрахунковим шляхом має багаторічну історію [46]. За минулий час запропоновано цілий ряд різних моделей розрахунку W ціни іонізації моноенергетичним пучком [6, 47], заснованих на вирішенні рівняння Fowler, методі деградаційного спектра Spencer–Fano, методі послідовних поколінь Green–Barth, методі Монте-Карло (МС), наближення безперервного уповільнення (CSDA) і ряду інших. Аналіз результатів розрахунку величини W для декількох моделей був проведений в роботі [47], який показав, що аналізовані моделі

дають близькі по величині значення W для молекули водню.

Для розрахунку ціни іонізації молекули води моноенергетичним пучком використовуємо модель на основі CSDA, запропоновану в [48, 49]. У даній моделі ціна іонізації молекули електронним ударом з урахуванням іонізації вторинними електронами визначається із співвідношення

$$W = \frac{E}{\sum_n \langle N_{i,n} \rangle}, \quad (2)$$

де E – енергія первинних електронів, еВ; $N_{i,n}(E)$ – число іонів, утворених n -ю генерацією електронів ($n = 0$ первинні електрони). Число іонів, утворених первинними електронами:

$$N_{i,0} = \int_{E_{iz}}^E \frac{\sigma_i^{\text{tot}}(E)}{L(E)} dE, \quad (3)$$

де σ_i^{tot} – інтегральний перетин іонізації, см^2 ; $L(E)$ – функція енергетичних втрат, $\text{см}^2\text{еВ}$ ($L(E) = -(dE/ndx)$, де n – число частинок, dE/dx – гальмівна здатність), яка визначається як:

$$L(E) = \frac{1}{n_M v} \frac{dE}{dt} + \sum_{(E-E_{iz})/2} \sigma_{\text{ex}}(E) E_{\text{ex}} + \sum \sigma_{iz}(E) E_{iz} + \sigma_{\text{el}}(E) \frac{3m_e}{m_M} E + \int_0^{(E-E_{iz})/2} \varepsilon \sigma_{iz}(E, \varepsilon) d\varepsilon, \quad (4)$$

де σ_{el} , σ_{ex} , σ_{iz} – перетини пружних зіткнень, збудження та іонізації, см^2 ; $\sigma_{iz}(E, \varepsilon)$ – диференціальний перетин іонізації, $\text{см}^2/\text{еВ}$; ε – енергія вторинних електронів, n_M – густина нейтралів, см^{-3} ; v – швидкість швидких електронів, $\text{см}/\text{с}$, dE/dt – витрати енергії за рахунок кулонівських зіткнень [5], які дорівнюють:

$$\frac{dE}{dt} = \frac{2 \cdot 10^{-4} n_e^{0,97}}{E^{0,44}} \left(\frac{E - T_e}{E - 0,53T_e} \right)^{2,36}, \quad (5)$$

де n_e – густина електронів плазми см^{-3} ; T_e – середня температура електронів плазми. Число іонів, утворених за рахунок іонізації вторинними електронами, визначається як:

$$N_{i,1} = \int_{E_{iz}}^{(E-E_{iz})/2} n(E, \varepsilon) N_{i,0}(\varepsilon) d\varepsilon, \quad (6)$$

$$N_{i,2} = \int_{3E_{iz}}^{(E-E_{iz})/2} n(E, \varepsilon) N_{i,0}(\varepsilon) d\varepsilon, \quad (7)$$

де $n(E, \varepsilon)$ – кількість вторинних електронів з енергією ε , утворених первинними електронами з енергією E , що визначається як:

$$n(E, \varepsilon) = \int_{\varepsilon + E_{iz}}^E \frac{\sigma(E, \varepsilon)}{L(E)} dE. \quad (8)$$

Для розрахунку ціни іонізації молекули води були використані дані по перетинах елементарних процесів, обговорені в попередньому розділі. Диференціальний переріз іонізації води визначався згідно з моделлю подвійних зіткнень Бете (ВЕВ model) [50, 51]. Розрахункові значення диференціального перетину іонізації води знаходяться в задовільній згоді з експериментальними даними роботи [52]. Середня температура електронів плазми для розрахунків була вибрана менше за 1 еВ, що відповідає експериментальним даним, наведеним у [8].

Результати розрахунку ціни іонізації молекули води електронним ударом без урахування витрат за рахунок кулонівських зіткнень наведено на рис. 1. Також на рис. 1 наведено розрахункові та експериментальні дані ціни іонізації молекули води, які взяті з літературних джерел [53–57]. Як бачимо з рис. 1, ціна іонізації молекули води збільшується зі зменшення енергії електронів. Така залежність є цілком передбачуваною, оскільки зі зменшенням енергії електронів зменшується ймовірність прямої іонізації молекули електронним ударом. При цьому хід кривої ціни іонізації пов'язаний з перетином іонізації та при збільшенні енергії електронів, враховуючи внесок тільки первинних електронів, залежність ціни іонізації від енергії електронів мала б мінімум (у максимумі перетину іонізації) та подальше її поступове збільшення. Оскільки в цьому випадку враховувався внесок вторинних електронів, то ціна іонізації досягає деякого значення і при збільшенні енергії електронів надалі слабко змінюється (див. рис. 1), на що зверталася увага й раніше, наприклад, в [6, 55]. У підсумку маємо дві межі величини ціни іонізації. В першому випадку, коли енергія первинних електронів $E \rightarrow E_{iz}$, ціна іонізації $W \rightarrow \infty$, це

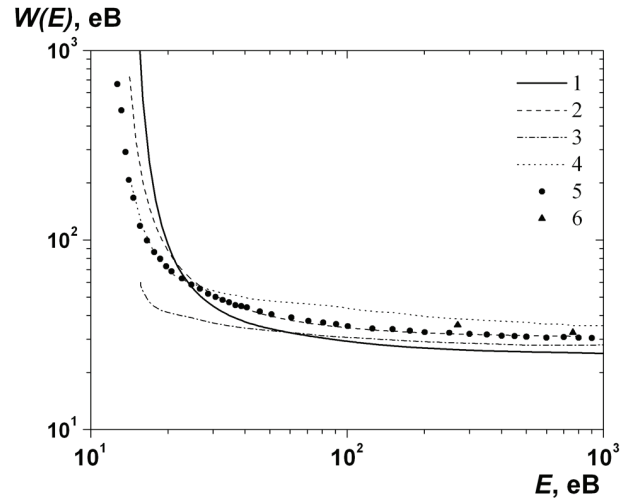


Рис. 1. Залежність ціни іонізації електронним ударом молекули води від енергій первинних електронів: 1 – результат даної роботи, 2 – модель CSDA [53], 3 – модель MC [54], 4 – [55], 5 – [56], 6 – [57] (1, 2, 3, 4 – розрахункові дані; 5, 6 – експериментальні дані)

пов'язано з тим, що пряма іонізація нейтральної частинки електронним ударом має пороговий характер і при енергії електронів $E = E_{iz}$ перетин іонізації дорівнює 0 [18, 19]. Відповідно при енергії первинних електронів $E \leq 2E_{iz}$ та $E \leq 3E_{iz}$ внеску в утворення іонів за рахунок прямої іонізації вторинними та третинними електронами немає. Оскільки можлива іонізація за рахунок інших механізмів, які в данному розрахунку не враховуються, наприклад, каскадної іонізації, то ціна іонізації при енергії електронів $E = E_{iz}$ має значну та кінцеву величину. У другому випадку при енергіях первинних електронів $E \gg 100$ еВ та з урахуванням внеску у іонізаційних каскадах вторинних, третинних і т.п. електронів, ціна іонізації $W \rightarrow \text{const}$.

На рис. 2 наведена залежність ціни іонізації електронним ударом молекули води від ступеня іонізації плазми. При цьому у розрахунках були враховані кулонівські зіткнення на відміну від попередніх робіт, наприклад, [53–55]. При ступені іонізації 10^{-4} стає помітним внесок кулонівських зіткнень в загальну величину ціни іонізації. Зі збільшенням ступеня іонізації цей внесок в ціну іонізації стає більш суттєвішим при $\sim 10^{-3}$ і відносно малих $\lesssim 200$ еВ енергіях первинних електронів та при $\sim 10^{-2}$ для енергій > 200 еВ. Так, для енергій

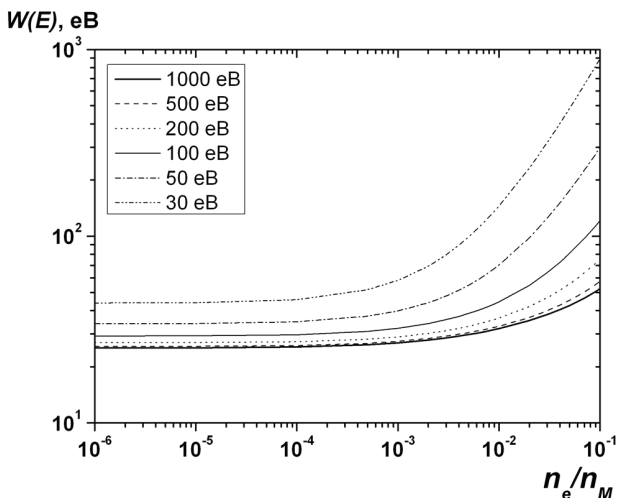


Рис. 2. Залежність ціни іонізації електронним ударом молекули води у діапазоні енергій первинних електронів 30–1000 еВ від ступеня іонізації плазми

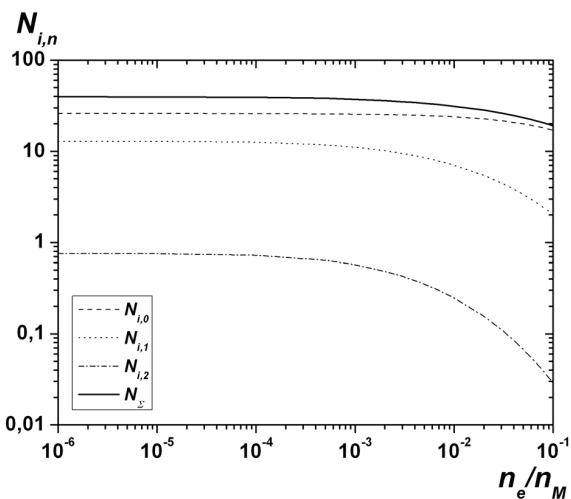


Рис. 3. Залежність середнього числа іонів, утворених первинними $N_{i,0}$, вторинними $N_{i,1}$ та третинними $N_{i,2}$ електронами від ступеня іонізації плазми (початкова енергія первинних електронів 1000 еВ)

первинних електронів 1000 еВ величина ціни іонізації лежить у інтервалі від 25,26 еВ до 52,45 еВ при ступені іонізації 0–0,1. Також зі збільшенням ступеня іонізації змінюється середня кількість іонів та відносний внесок у загальну їх кількість, утворених за рахунок прямої іонізації первинними, вторинними, третинними електронами. Як бачимо з рис. 3, при ступені іонізації 10^{-6} та енер-

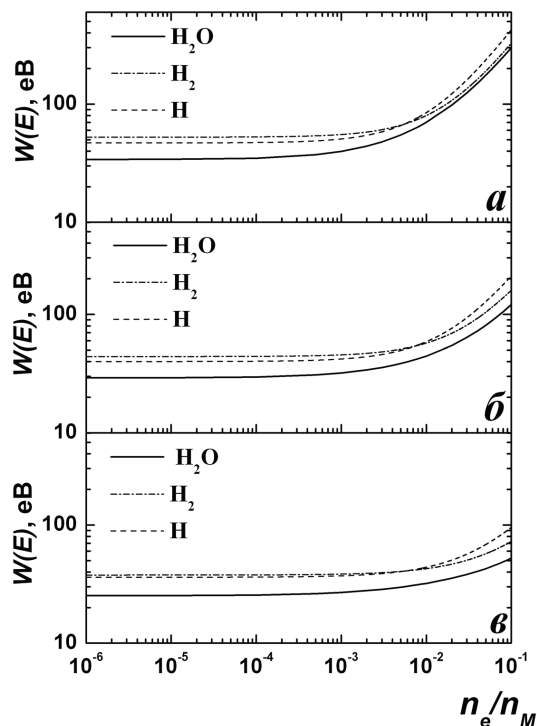


Рис. 4. Порівняння залежностей ціни іонізації H_2O (результат даної роботи) та H_2 , H [20] від ступеня іонізації плазмоутворюючого середовища, відповідно H_2O та H_2 , H . Початкова енергія первинних електронів: 50 еВ (а), 100 еВ (б), 1000 еВ (в)

гії первинних електронів 1000 еВ внесок в повну кількість утворених іонів становить 65,55% первинними, 32,54% вторинними, 1,91% третинними електронами, та при ступені іонізації 0,1 внесок первинними, вторинними та третинними електронами, відповідно, становить 89,25%, 10,6%, 0,15%. Тобто, при збільшенні ступеня іонізації внесок у іонізацію вторинними та третинними електронами зменшується.

4. Обговорення отриманих результатів

У слабо іонізованій молекулярній плазмі присутні молекули та молекулярні іони плазмоутворюючого середовища, а також продукти дисоціації (дисоціативної іонізації) молекул та плазмо-хімічних реакцій. Це може істотно впливати на кінцеву величину ціни іонізації, оскільки для різних атомів (молекул, радикалів) величина ціни іонізації може суттєво відрізнятися. У підтвердження цьому на рис. 4 наведено порівняння ціни іонізації H_2O

з H_2 , H , яке свідчить, що у данному випадку ціна іонізації H_2O в $\sim 1,3$ – $1,5$ разів нижча за ціну іонізації H_2 , H . У роботі [46] розглянуто вплив на ціну іонізації малих домішок у газах, а також ціну іонізації для газових сумішей. Так, наприклад, ціна іонізації для He з домішкою $0,13\%$ Ag становить 30 еВ, відповідно, для чистого He $42,7$ еВ. Тобто ціна іонізації залежить від плазموутворюючого середовища. Треба також зазначити, що у воді завжди можуть бути присутні різні домішки, наприклад, розчинений газ, енерговитрати на іонізацію яких також будуть впливати на кінцеву величину ціни іонізації. Таким чином, надалі очевидно, що у розрахунках потрібно враховувати багатоконпонентний склад води, який, у свою чергу, впливає на величину енергетичних витрат на створення плазми.

У роботах [12, 13] нами на основі експериментальних даних були проведені оцінки ціни іонізації молекули води в імпульсному електричному розряді. Оцінки показали, що її величина, залежно від енергії електронів плазми (50 – 70 еВ), знаходиться в інтервалі від 222 до $92,6$ еВ. Проведемо оцінку ступеня іонізації плазми у даних експериментах. Експериментально вимірювана густина плазми становить $n_e = 1,8 \cdot 10^{13} \text{ см}^{-3}$ [12, 13]. Приймаючи густину рідкої води рівною $9,9821 \cdot 10^{-4} \text{ кг/см}^3$ ($T = 20^\circ \text{C}$, $p = 0,1 \text{ МПа}$) [58], що дорівнює густині нейтральних молекул $n_M = 3,31 \cdot 10^{22} \text{ см}^{-3}$, ступінь іонізації становить $(n_e/n_M) = 5,4 \cdot 10^{-10}$. Для насиченого пару при $T = 100^\circ \text{C}$, $p = 0,1 \text{ МПа}$, щільність дорівнює $5,9822 \cdot 10^{-7} \text{ кг/см}^3$ [58] і, відповідно, $n_M = 1,986 \cdot 10^{19} \text{ см}^{-3}$, $(n_e/n_M) = 9,1 \cdot 10^{-7}$. Тобто ступінь іонізації плазми по порядку величин може дорівнювати $\sim 10^{-6}$. Порівняння оцінки ціни іонізації молекули води, проведених у [12, 13], з результатами розрахунків при ступені іонізації 10^{-6} показує, що розбіжність їх становить 3 – $6,5$ разів.

Таблиця 2

E , еВ	W_0 , еВ	C	α
30	43,3	164,135	0,931
50	34,04	57,968	0,875
100	29,24	18,715	0,782
200	26,95	9,052	0,708
500	25,75	5,307	0,641
1000	25,26	4,288	0,606

При ступені іонізації $\sim 10^{-2}$ розбіжність оцінок і розрахунків становить $\pm 50\%$, але такий ступінь іонізації плазми може і не досягатися у експериментах [12, 13]. Відмінність експериментальних і розрахункових даних пов'язана одночасно з декількома факторами, які впливають на їх кінцеву величину. Деякі фактори та їх вплив на ціну іонізації обговорювалися вище. Таким чином, врахування додаткових факторів у подальших розрахунках і проведення додаткових експериментів дозволить, очевидно, у майбутньому дістати кращу згоду між розрахунками та експериментом.

5. Висновки

1. Проведені розрахунки ціни іонізації молекули води моноенергетичним пучком у діапазоні енергії первинних електронів 15 – 1000 еВ показали, що залежність ціни іонізації молекули води від енергії електронів має тенденцію до збільшення зі зменшенням енергії електронів.

2. Розглянуто модель, що враховує витрати енергії моноенергетичного електронного потоку (пучка) за рахунок кулонівських зіткнень при проходженні його у слабоіонізованій плазмі. При цьому, з розрахунків бачимо, що ціна іонізації молекули води зростає із збільшенням ступеня іонізації плазми.

3. При розрахунках ціни іонізації від ступеня іонізації води у інтервалі від 0 до $0,1$ бачимо, що ціна іонізації молекули води при енергії первинних електронів 1000 еВ зростає від $25,26$ еВ до $52,45$ еВ у розрахунковому інтервалі ступеня іонізації.

ДОДАТОК

Отримані у даній роботі розрахункові значення ціни іонізації молекули води були апроксимовані емпіричним виразом, запропонованим у роботі [20]: $W = W_0(1 + Cx^\alpha)$, де $x = n_e/n_M$ – ступінь іонізації, W_0 – ціна іонізації при $x = 0$, C , α – коефіцієнти. Значення відповідних коефіцієнтів презентовано в табл. 2.

1. M. Larsson, W.D. Geppert, and G. Nyman, Rep. Prog. Phys. **75**, 066901 (2012).
2. D.W. Savin, N.S. Brickhouse, J.J. Cowan *et al.*, Rep. Prog. Phys. **75**, 036901 (2012).
3. R.K. Hobbie and B.J. Roth, *Intermediate Physics for Medicine and Biology* (Springer, Berlin, 2007).
4. В.М. Бяков, С.В. Степанов, УФН **176**, 487 (2006).

5. D.X. Liu, P. Bruggeman, F. Iza *et al.*, Plasma Sources Sci. Technol. **19**, 025018 (2010).
6. Г.Д. Алхазов, ЖТФ **41**, 2513 (1971).
7. S. Samukawa, M. Hori, S. Rauf *et al.*, J. Phys. D **45**, 253001 (2012).
8. P. Bruggeman and C. Leys, J. Phys. D **42**, 053001 (2009).
9. Y. Yang, A. Fridman, and Y.I. Cho, Advances in Heat Transfer **42**, 179 (2010).
10. А.А. Генерал, Ю.О. Шпеник, УФЖ **58**, 116 (2013).
11. Е.И. Скибенко, В.В. Юферов, I.V. Buravilov *et al.*, Ukr. J. Phys. **53**, 356 (2008).
12. Е.И. Скибенко, Ю.В. Ковтун, А.И. Скибенко, В.В. Юферов, *Материалы XV международной конференции Физика импульсных разрядов в конденсированных средах, Николаев-2011*, 70 (2011).
13. Е.И. Скибенко, Ю.В. Ковтун, А.И. Скибенко, and В.В. Юферов, Tech. Phys. **57**, 188 (2012).
14. Ю.В. Ковтун, Е.И. Скибенко, В.В. Юферов, *Материалы XVI международной конференции Физика импульсных разрядов в конденсированных средах, Николаев-2013*, 30 (2013).
15. В.Я. Ушаков, В.Ф. Клишкин, С.М. Коробейников, В.В. Лопатин, *Пробой жидкостей при импульсном напряжении* (Томск, НТЛ, 2005).
16. Y. Itikawa and N. Mason, J. Phys. Chem. Ref. Data **34**, 1 (2005).
17. C.G. Elles, A.E. Jailaubekov, R.A. Crowell, and S.E. Bradforth, J. Chem. Phys. **125**, 044515 (2006).
18. Дж. Хастед, *Физика атомных столкновений* (Мир, Москва, 1965).
19. Г. Месси, Е. Бархоп, *Электронные и ионные столкновения* (Иностранная литература, Москва, 1958).
20. A. Dalgarno, Min Yan, and Weihong Liu, Astrophys. J. Suppl. Ser. **125**, 237 (1999).
21. A. Dalgarno and G. Lejeune, Planet. Space Sci. **19**, 1653 (1971).
22. J.L. Fox, A. Dalgarno, and G.A. Victor, Planet. Space Sci. **25**, 71 (1977).
23. T.E. Cravens, G.A. Victor, and A. Dalgarno, Planet. Space Sci. **23**, 1059 (1975).
24. J.L. Fox and A. Dalgarno, Planet. Space Sci. **27**, 491 (1979).
25. J.L. Fox and G.A. Victor, Planet. Space Sci. **36**, 329 (1988).
26. Weihong Liu and G.A. Victor, Astrophys. J. **435**, 909 (1994).
27. T. Shirai, T. Tabata, and H. Tawara, Atomic Data Nucl. Data Tables. **79**, 143 (2001).
28. Y. Itikawa and N. Mason, Phys. Reports. **414**, 1 (2005).
29. J. Tennyson, N.F. Zobov, R. Williamson, and O.L. Polyansky, J. Phys. Chem. Ref. Data. **30**, 735 (2001).
30. M.A. Khakoo, C. Winstead, and V. McKoy, Phys. Rev. A **79**, 052711 (2009).
31. P.A. Thorn, M.J. Brunger, P.J.O. Teubner *et al.*, J. Chem. Phys. **126**, 064306 (2007).
32. P.A. Thorn, M.J. Brunger, H. Kato *et al.*, J. Phys. B **40**, 697 (2007).
33. P. Thorn, L. Campbell, and M. Brunger, PMC Physics B **2**, 1 (2009).
34. W. Lotz Z. Physik. **206**, 205 (1967).
35. S.Y. Truong, A.J. Yench, A.M. Juarez *et al.*, Chem. Phys. **355**, 183 (2009).
36. S.Y. Truong, A.J. Yench, A.M. Juarez *et al.*, Chem. Phys. Lett. **474**, 41 (2009).
37. T. Harb, W. Kedzierski, and J.W. McConkey, J. Chem. Phys. **115**, 5507 (2001).
38. Kaijun Yuan, Lina Cheng, Yuan Cheng *et al.*, J. Chem. Phys. **131**, 074301 (2009).
39. А.Н. Завилопуло, Ф.Ф. Чипаев, О.Б. Шпеник, ЖТФ **75**, 19 (2005).
40. S.W.J. Scully, J.A. Wyer, V. Senthil *et al.*, Phys. Rev. A **73**, 040701 (2006).
41. H. Sann, T. Jahnke, T. Havermeier *et al.*, Phys. Rev. Lett. **106**, 133001 (2011).
42. H.B. Pedersen, C. Domesle, L. Lammich *et al.*, Phys. Rev. A **87**, 013402 (2013).
43. F. Fremont, C. Leclercq, A. Hajaji *et al.*, Phys. Rev. A **72**, 042702 (2005).
44. S.J. King and S.D. Price, Int. J. Mass Spectrom. **277**, 84 (2008).
45. D.J. Haxto, C.W. McCurdy, and T.N. Rescigno, Phys. Rev. A **75**, 012710 (2007).
46. J.M. Valentine and S.C. Curran, Rep. Progress Phys. **21**, 1 (1958).
47. R.H. Garvey and A.E.S. Green, Phys. Rev. A **14**, 946 (1976).
48. S.P. Khare, J. Phys. B **3**, 971 (1970).
49. S.P. Khare, Rad. Res. **64**, 106 (1975).
50. Y.-K. Kim, M.E. Rudd, Phys. Rev. A **50**, 3954 (1994).
51. W. Hwanga, Y.-K. Kim, and M.E. Rudd, J. Chem. Phys. **104**, 2956 (1996).
52. M.A. Bolorizadeh and M.E. Rudd, Phys. Rev. A **33**, 882 (1986).
53. G.J. Kutcher and A.E.S. Green, Rad. Res. **67**, 408 (1976).
54. C. Champion, Phys. Med. Biol. **48**, 2147 (2003).
55. J.A. La Verne and A. Mozumder, Rad. Res. **131**, 1 (1992).
56. D. Combecher, Rad. Res. **84**, 189 (1980).
57. G.P. Stonell, M. Marshall, and J.A. Simmon, Rad. Res. **136**, 341 (1993).
58. D.R. Lide, *CRC Handbook of Chemistry and Physics, 90th Edition* (CRC Press, Taylor and Francis, Boca Raton, FL, 2010).

Одержано 20.12.14

Ю.В. Ковтун

ЭНЕРГЕТИЧЕСКИЕ ЗАТРАТЫ
НА ИОНИЗАЦИЮ МОЛЕКУЛЫ
ВОДЫ ЭЛЕКТРОННЫМ УДАРОМ
В СЛАБОИОНИЗИРОВАННОЙ ПЛАЗМЕ

Резюме

Проведены расчеты цены ионизации молекулы воды моноэнергетическим пучком в диапазоне энергий первичных электронов 15–1000 эВ. Получены зависимости цены ионизации от степени ионизации воды от 0 до 0,1. Показано, что цена ионизации увеличивается с увеличением степени ионизации и для энергии первичных электронов 1000 эВ она увеличивается от 25,26 эВ до 52,45 эВ в расчетном интервале степени ионизации.

Yu. V. Kovtun

ENERGY EXPENDITURE FOR WATER
MOLECULE IONIZATION BY ELECTRON
IMPACT IN WEAKLY IONIZED PLASMA

S u m m a r y

The energy balance of the water molecule ionization by a monoenergetic electron beam with the energy of primary electrons in the interval of 15–1000 eV has been calculated. The dependences of the ionization cost on the water ionization degree within the interval from 0 to 0.1 are obtained. The ionization cost is shown to increase with the ionization degree. In particular, for a primary electron energy of 1000 eV, it increases from 25.26 to 52.45 eV in the examined ionization degree interval.