Моделирование методом Монте Карло кинетики энергичных отрицательных ионов в разрядной плазме паров воды

Пономарев А.А., Джанибекова С.Х.1, Косарев И.Н.2, Александров Н.Л.3

ГНЦ ФГУП «Центр Келдыша», ponomar\_aa@mail.ru,
1НИУ ВШЭ, sdzhanibekova@hse.ru,
2Московский физико-технический институт, ilyakosarev@gmail.com,
3Московский физико-технический институт, nick\_aleksandrov@mail.ru

Неравновесная разрядная плазма, генерируемая в парах воды и Н2О-содержащих газовых смесях, представляет интерес для многочисленных приложений низкотемпературной плазмы. Свойства такой плазмы зависят от количества и состава отрицательных ионов, которые определяются скоростями их образования, конверсии и гибели. При расчете этих скоростей в слабоионизованной плазме под действием сильного электрического поля вычисляется распределение ионов по энергиям, которое обычно предполагается находящимся в равновесии с электрическим полем.

В настоящей работе исследовался случай, когда ионы рождаются с избыточной энергией и до установления равновесия с электрическим полем успевают вступить в пороговые ионно-молекулярные реакции, эффективность которых относительно мала для «равновесных» ионов. Для этого методом Монте Карло моделировалась эволюция энергии ионов О-, образованных при диссоциативном прилипании электронов в сильном электрическом поле к молекулам Н2О и О2, которые могут присутствовать в парах воды в виде некоторой добавки. Используемый в работе метод моделирования подробно описан в [1]. Такие ионы рождаются в диапазоне от 0 до 0.8 эВ при прилипании электронов к Н2О и в диапазоне от 0.5 до 3 эВ при прилипании к О2. Энергичные ионы могут эффективно участвовать в пороговых столкновительных процессах. При моделировании релаксации ионов в парах воды во внешнем электрическом поле учитывались упругие столкновения с молекулами, перезарядка ионов и отлипание электронов от ионов. Сечения этих процессов взяты из [2], где на основе этих данных было получено хорошее согласие между расчетными и экспериментально измеренными транспортными коэффициентами ионов О- в Н2О. Из расчетов следует, что примерно 6% энергичных ионов О-, образованных из молекул Н2О, гибнет до своей термализации в результате отлипания электронов и перезарядки на молекулах с образованием ОН-. Этот эффект оказывается более выраженным в случае образования энергичных ионов при прилипании электронов к молекулам О2. Здесь доля энергичных ионов О-, погибших за счет отлипания электронов или при перезарядке на молекулах Н2О достигает 70% и более. Таким образом, только малая доля ионов О-, рождающихся при диссоциативном прилипании электронов к молекулам Н2О, успевает термализоваться в плазме паров воды.

Показано, что влияние энергичных ионов О- на скорость пороговых реакций не может быть описано традиционным образом на основе понятия константы скорости процесса. Был предложен подход для количественного описания этого эффекта, который особенно важен при умеренных приведенных полях (100 Тд и ниже), когда средняя энергия ионов мала, а электроны достаточно нагреты для прилипания к молекулам Н2О и О2.

Работа частично поддержана грантом РФФИ № 16-32-00196.

Литература.

1. Ponomarev A.A., Aleksandrov N.L., Plasma Sources Sci. Technol. 26 (2017) 044003.
2. Stojanovic V., Raspopovic Z., Maric D., Petrovich Z.L., Eur. Phys. J. D 69 (2015) 63.