Analytische Näherungslösungen für Ladungsdichten bei Elektronenstoßionisation

G. Hertenberger und H. Zeidl
Institut für Allgemeine Physik der TU-Wien *

Z. Naturforsch. **34a**, 691–693 (1979); eingegangen am 29. März 1979

Analytical Approximate Calculation for Electron Impact Ionization Generated Ion Charge State Densities

The time-dependent development of ion charge state densities resulting from ionization of a gas by an electron beam has been calculated with a nonlinear system of coupled differential equations. In the approximation within the presented treatment the nonlinearity is caused by small contributions due to recombination processes.

1. Einleitung

Die Erzeugung von Ionen verschiedener Ladung durch Elektronenstoß in einem Gas wird im folgenden unter Berücksichtigung der zeitlichen Entwicklung der Ladungsdichten durch ein System nichtlinearer Differentialgleichungen beschrieben. Mehrfach geladene Ionen können

1. in einem direkten Stoßprozeß (Wirkungsquerschnitt σ_{0n}) erzeugt werden:

$$e_{\mathrm{p}} + A^{0+} \rightarrow A^{n+} + n\, e_s + e_{\mathrm{p}}' , \tag{1}$$

$e_{\mathrm{p}}, e_{\mathrm{p}}'$ schnelles Primärelektron vor bzw. nach dem Stoß,

e_s langsames Sekundärelektron und

A^{n+} n-fach positiv geladenes Ion;

2. auch durch sukzessive Ionisation (Wirkungsquerschnitt $\sigma_{n-1,\,n}$, bei genügend langer Lebensdauer τ_n der Ionen entstehen. Die Auswahl der berücksichtigten Rekombinationsprozesse soll in dieser Arbeit unter der Annahme des Coronamodells für das betreffende Gas erfolgen [1]:

a) Ladungsaustausch zwischen einem n-fach und einem k-fach geladenen Ion unter Beschränkung auf Elektronenübergänge

$$A^{i+} + A^{k+} \rightarrow A^{(i-1)+} + A^{(k+1)+} . \tag{2}$$

b) Strahlungsrekombination. Sie soll nur über die erzeugten langsamen Sekundärelektronen erfolgen:

$$A^{i+} + \mathrm{e}_s \rightarrow A^{(i-1)+} + h\,\nu . \tag{3}$$

Weiter seien:

n_i (Ionen/cm³) = Dichte des i-ten Ladungszustandes,

n_{e} (Elektronen/cm³) = Dichte der Sekundärelektronen,

$$n_{\mathrm{e}} = \sum_{p=1}^{s} p\, n_{\mathrm{p}} , \tag{4}$$

s höchster berücksichtigter Ladungszustand,

j_{e} (Elektronen/cm² s) = Teilchenstromdichte des Primärelektronenstrahles,

τ_{ik} Stoßrate des Umladungsprozesses (2) und

$\gamma_{i,\,i-1}$ Stoßrate für Strahlungsrekombination (3).

Dann erhält man das Differentialgleichungssystem

$$\begin{aligned}
\mathrm{d}n_0/\mathrm{d}t &= -\, j_{\mathrm{e}}\, n_0 \sum_{k=1}^{s} \sigma_{0k} - n_0 \sum_{k=2}^{s} \tau_{0k}\, n_k + n_1\, n_{\mathrm{e}}\, \gamma_{10} , \\
\mathrm{d}n_i/\mathrm{d}t &= -\, j_{\mathrm{e}}\, n_i \sum_{k=i+1}^{s} \sigma_{ik} + j_{\mathrm{e}} \sum_{k=0}^{i-1} n_k\, \sigma_{ki} \\
&\quad - n_i \sum_{k=i+2}^{s} \tau_{ik}\, n_k - n_i \sum_{k=0}^{i-2} \tau_{ik}\, n_k \\
&\quad + n_{i-1} \sum_{k=i+1}^{s} \tau_{i-1,\,k}\, n_k + n_{i+1} \sum_{k=0}^{i-1} \tau_{i+1,\,k}\, n_k \\
&\quad + n_{i+1}\, n_{\mathrm{e}}\, \gamma_{i+1,\,i} - n_i\, n_{\mathrm{e}}\, \gamma_{i,\,i-1} - n_i/\tau_i , \\
&\qquad i = 1, 2, \ldots .
\end{aligned} \tag{5}$$

Mit der weiteren Vereinfachung, daß der Verlust des Neutralgases (n_0) durch Zufuhr dieses Gases verzögerungsfrei ausgeglichen wird ($\mathrm{d}n_0/\mathrm{d}t = 0$), werden einige der bilinearen Summanden ($n_0 n_k$) linear. Das Differentialgleichungssystem (5) bekommt damit die Struktur

$$\begin{aligned}
\mathrm{d}n_i/\mathrm{d}t &= Q_i + \sum_{k=1}^{s} \alpha_{ik}\, n_k \\
&\quad + \sum_{l=1}^{s} \sum_{m=1}^{s} \beta_{lm}^{(i)}\, n_l\, n_m , \quad \beta_{lm}^{(j)} = \beta_{ml}^{(j)} ,
\end{aligned} \tag{6}$$

* Sonderdruckanforderungen an Institut für Allgemeine Physik, Technische Universität A-1040 Wien, Karlsplatz 13, Österreich.

0340-4811 / 79 / 0600-0691 $ 01.00/0

oder in Matrixform

$$\mathrm{d}\boldsymbol{n}/\mathrm{d}t = \boldsymbol{Q} + \mathbf{A}\,\boldsymbol{n} + \boldsymbol{q}\,,$$

$$\boldsymbol{n} = \begin{pmatrix} n_1 \\ \vdots \\ n_s \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{Q} = \begin{pmatrix} Q_1 \\ \vdots \\ Q_s \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{q} = \begin{pmatrix} q_1 \\ \vdots \\ q_s \end{pmatrix},$$

$$q_j = \tilde{\boldsymbol{n}}\,\mathbf{B}^{(j)}\,\boldsymbol{n}\,. \tag{7}$$

2. Näherungslösung des Differentialgleichungssystems

Wir definieren $\boldsymbol{n}^{(k)}$ $(k=0, 1, 2, \ldots)$ als Lösungsvektor k-ter Annäherung

$$\boldsymbol{n}^{(0)}:\ \mathrm{d}\boldsymbol{n}^{(0)}/\mathrm{d}t = \boldsymbol{Q} + \mathbf{A}\,\boldsymbol{n}^{(0)} \tag{8}$$

mit der Anfangsbedingung

$$\boldsymbol{n}^{(0)}(0) = \boldsymbol{y}_0\,. \tag{9}$$

Die Lösung von (8) ergibt mit (9):

$$\boldsymbol{n}^{(0)}(t) = \{e^{\mathbf{A}t} - 1\}\,\mathbf{A}^{-1}\boldsymbol{Q} + e^{\mathbf{A}t}\boldsymbol{y}_0\,, \tag{10}$$

$$\boldsymbol{n}^{(1)}:\ \mathrm{d}\boldsymbol{n}^{(1)}/\mathrm{d}t = \mathbf{A}\,\boldsymbol{n}^{(1)} + \boldsymbol{Q} + \boldsymbol{q}^{(0)}\,, \tag{11}$$

wobei

$$\boldsymbol{q}^{(0)} = \begin{pmatrix} q_1{}^{(0)} \\ \vdots \\ q_s{}^{(0)} \end{pmatrix} \quad \text{und} \quad q_j{}^{(0)} = \tilde{\boldsymbol{n}}^{(0)}\,\mathbf{B}^{(j)}\,\boldsymbol{n}^{(0)}$$

gesetzt wird.

Analog zu (11) kann der Lösungsvektor $\boldsymbol{n}^{(k)}$ definiert werden:

$$\boldsymbol{n}^{(k)}:\ \mathrm{d}\boldsymbol{n}^{(k)}/\mathrm{d}t = \mathbf{A}\,\boldsymbol{n}^{(k)} + \boldsymbol{Q} + \boldsymbol{q}^{(k-1)}\,, \tag{12}$$

$$q_j{}^{(k-1)} = \tilde{\boldsymbol{n}}^{(k-1)}\,\mathbf{B}^{(j)}\,\boldsymbol{n}^{(k-1)}\,.$$

Die exakte Lösung von (7) ist (Konvergenz vorausgesetzt):

$$\boldsymbol{n} = \lim_{k\to\infty} \boldsymbol{n}^{(k)}\,. \tag{13}$$

Mit dem Ansatz

$$\boldsymbol{n}^{(1)}(t) = e^{\mathbf{A}t}\,\boldsymbol{z}(t) \tag{14}$$

erhält man aus (11)

$$\boldsymbol{n}^{(1)}(t) = \boldsymbol{n}^{(0)}(t) - e^{\mathbf{A}t}\boldsymbol{y}_0 + e^{\mathbf{A}t}\{\boldsymbol{J}_1(t) - \boldsymbol{J}_2(t) - \boldsymbol{J}_3(t) + \boldsymbol{J}_4(t)\}\,, \tag{15}$$

wobei

$$\boldsymbol{J}_k(t) = \int_0^t e^{-\mathbf{A}t'}\,\boldsymbol{C}_k(t')\,\mathrm{d}t'\,, \quad k = 1, 2, 3, 4\,. \tag{16}$$

$$\boldsymbol{C}_k(t') = \begin{pmatrix} C_k{}^{(1)}(t') \\ \vdots \\ C_k{}^{(s)}(t') \end{pmatrix},$$

und

$$C_1{}^{(j)}(t') = \widetilde{\mathbf{A}^{-1}\boldsymbol{Q}}\, e^{\tilde{\mathbf{A}}t'}\,\mathbf{B}^{(j)}\,e^{\mathbf{A}t'}\,\mathbf{A}^{-1}\boldsymbol{Q}\,, \tag{17a}$$

$$C_2{}^{(j)}(t') = \widetilde{\mathbf{A}^{-1}\boldsymbol{Q}}\,\mathbf{B}^{(j)}\,e^{\mathbf{A}t'}\,\mathbf{A}^{-1}\boldsymbol{Q}\,, \tag{17b}$$

$$C_3{}^{(j)}(t') = \widetilde{\mathbf{A}^{-1}\boldsymbol{Q}}\, e^{\tilde{\mathbf{A}}t'}\,B^{(j)}\,\mathbf{A}^{-1}\boldsymbol{Q}\,, \tag{17c}$$

$$C_4{}^{(j)}(t') = \widetilde{\mathbf{A}^{-1}\boldsymbol{Q}}\,\mathbf{B}^{(j)}\,\mathbf{A}^{-1}\boldsymbol{Q} \tag{17d}$$

gesetzt werden.

3. Berechnung der Vektoren $\boldsymbol{J}_k(t)$

Für $k=1$ machen wir den Ansatz

$$\boldsymbol{J}_1(t) = e^{-\mathbf{A}t}\,\boldsymbol{k}_1(t)\,, \quad \boldsymbol{k}_1(t) = \begin{pmatrix} k_1{}^{(1)}(t) \\ \vdots \\ k_1{}^{(s)}(t) \end{pmatrix} \tag{18a}$$

$$k_1{}^{(j)}(t) = \widetilde{\mathbf{A}^{-1}\boldsymbol{Q}}\, e^{\tilde{\mathbf{A}}t}\,\mathbf{K}^{(j)}\,e^{\mathbf{A}t}\,\mathbf{A}^{-1}\boldsymbol{Q}\,, \tag{19a}$$

wobei die $\mathbf{K}^{(j)}$ konstante $(s\times s)$-Matrizen sind.

Durch Differenzieren und Vergleich mit dem Integranden von (16) für $k=1$ erhält man schließlich ein Gleichungssystem für die Matrizen $K^{(j)}$:

$$-\sum_{m=1}^{s} \alpha_{im}\,\mathbf{K}^{(m)} + \tilde{\mathbf{A}}\,\mathbf{K}^{(i)} + \mathbf{K}^{(i)}\,\mathbf{A} = \mathbf{B}^{(i)}\,,$$

$$i = 1, 2, \ldots, s\,, \quad \mathbf{A} = (\alpha_{ik})\,. \tag{20a}$$

Analog lösen wir (16) für $k=2$, mit dem Ansatz

$$\boldsymbol{J}_2(t) = e^{-\mathbf{A}t}\,\mathbf{M}(t)\,e^{\mathbf{A}t}\,,$$

$$\mathbf{M}(t) = \begin{pmatrix} \tilde{\boldsymbol{m}}^{(1)}(t) \\ \vdots \\ \tilde{\boldsymbol{m}}^{(s)}(t) \end{pmatrix}, \tag{18b}$$

$$\tilde{\boldsymbol{m}}^{(j)}(t) = \tilde{\boldsymbol{x}}^{(j)} + \tilde{\boldsymbol{u}}^{(j)}\,t\,. \tag{19b}$$

Wir definieren die $(s\times s)$-Matrizen

$$\mathbf{X} = \begin{pmatrix} \tilde{\boldsymbol{x}}^{(1)} \\ \vdots \\ \tilde{\boldsymbol{x}}^{(s)} \end{pmatrix}, \quad \mathbf{U} = \begin{pmatrix} \tilde{\boldsymbol{u}}^{(1)} \\ \vdots \\ \tilde{\boldsymbol{u}}^{(s)} \end{pmatrix}$$

und

$$\mathbf{W} = \begin{pmatrix} \tilde{\boldsymbol{Q}}\,\widetilde{\mathbf{A}^{-1}}\,\mathbf{B}^{(1)} \\ \vdots \\ \tilde{\boldsymbol{Q}}\,\widetilde{\mathbf{A}^{-1}}\,\mathbf{B}^{(s)} \end{pmatrix}. \tag{20b}$$

Durch Differenzieren von (18b) und Vergleich mit dem Integranden von (16) für $k=2$ erhält man

$$\mathbf{W} = -\,\mathbf{A}(\mathbf{X} + \mathbf{U}\,t) + \mathbf{U} + (\mathbf{X} + \mathbf{U}\,t)\,\mathbf{A} \tag{21}$$

und daraus

$$[\mathbf{U}, \mathbf{A}] = \mathbf{U}\,\mathbf{A} - \mathbf{A}\,\mathbf{U} = \emptyset\,, \tag{22}$$

$$\mathbf{W} = [\mathbf{X}, \mathbf{A}] + \mathbf{U}\,. \tag{23}$$

Transformiert man $\mathbf{A}$ auf eine Diagonalmatrix $\mathbf{D}$

$$\mathbf{A} = \mathbf{S}\,\mathbf{D}\,\mathbf{S}^{-1}\,, \tag{24}$$

und setzt man

$$\mathbf{X}' = \mathbf{S}^{-1}\mathbf{X}\,\mathbf{S}\,, \quad \mathbf{U}' = \mathbf{S}^{-1}\mathbf{U}\,\mathbf{S}\,, \quad \mathbf{W}' = \mathbf{S}^{-1}\,\mathbf{W}\,\mathbf{S}\,, \tag{25}$$

so folgt

$$[\mathbf{U}', \mathbf{D}] = 0\,, \tag{26}$$

$$\mathbf{W}' = [\mathbf{X}', \mathbf{D}] + \mathbf{U}'\,. \tag{27}$$

Mit $\mathbf{W}' = (w'_{ik})$, $\mathbf{D} = (d_{ik})$, $\mathbf{U}' = (u'_{ik})$ und $\mathbf{X}' = (x'_{ik})$ folgt aus (27)

$$u'_{ii} = w'_{ii}\,, \quad u'_{ik} = 0\,, \quad i \neq k\,,$$
$$x'_{ik} = w'_{ik}/(d_{kk} - d_{ii})\,, \quad i \neq k\,. \tag{28}$$

Die x'_{ii} sind frei wählbar. Wir setzen $x'_{ii} = 0$. Man zeigt leicht, daß die Integrale (16) für $k = 2$ und $k = 3$ gleich sind.

Das Integral (16) für $k = 4$ ergibt sofort

$$\boldsymbol{J}_4(t) = \mathbf{A}^{-1}\{1 - e^{-\mathbf{A}t}\}\,\boldsymbol{k}_4\,, \tag{29}$$

wobei $\boldsymbol{k}_4 = \begin{pmatrix} k_4{}^{(1)} \\ \vdots \\ k_4{}^{(s)} \end{pmatrix}$ ein konstanter Vektor mit

$$k_4{}^{(j)} = \widehat{\mathbf{A}^{-1}\boldsymbol{Q}}\,\mathbf{B}^{(j)}\,\mathbf{A}^{-1}\boldsymbol{Q} \tag{30}$$

ist. Damit ergibt sich schließlich als zweite Näherungslösung von (7)

$$\boldsymbol{n}^{(1)}(t) = \{-\boldsymbol{C}^{(1)} + e^{\mathbf{A}t}\,\boldsymbol{C}^{(2)} - 2(\mathbf{X} + \mathbf{U}\,t) \cdot e^{\mathbf{A}t} + \mathbf{C}^{(3)}(t)\}\,\mathbf{A}^{-1}\boldsymbol{Q} \tag{31}$$

mit den konstanten Matrizen

$$\mathbf{C}^{(1)} = \mathbf{1} + \mathbf{A}^{-1}\,\mathbf{W}\,, \quad \text{und} \tag{32}$$

$$\mathbf{C}^{(2)} = \mathbf{1} + 2\,\mathbf{X} + \mathbf{A}^{-1}\,\mathbf{W} - \mathbf{L} \tag{33}$$

mit

$$\mathbf{L} = \begin{pmatrix} \tilde{\boldsymbol{l}}^{(1)} \\ \vdots \\ \tilde{\boldsymbol{l}}^{(s)} \end{pmatrix}, \quad \tilde{\boldsymbol{l}}^{(j)} = \tilde{\boldsymbol{Q}}\,\widetilde{\mathbf{A}^{-1}}\,\mathbf{K}^{(j)} \tag{34}$$

und der von t abhängigen Matrix

$$\mathbf{C}^{(3)}(t) = \begin{pmatrix} \tilde{\boldsymbol{c}}_3{}^{(1)} \\ \vdots \\ \tilde{\boldsymbol{c}}_3{}^{(s)} \end{pmatrix}, \tag{35}$$

wobei die Zeilenvektoren $\tilde{\boldsymbol{c}}_3{}^{(j)}$ folgendermaßen definiert sind:

$$\tilde{\boldsymbol{c}}_3{}^{(j)} = \tilde{\boldsymbol{Q}}\,\widetilde{\mathbf{A}^{-1}}\,e^{\tilde{\mathbf{A}}t}\,\mathbf{K}^{(j)}\,e^{\mathbf{A}t}\,. \tag{36}$$

Zur Berechnung der Matrizen (32) bis (35) wurde ein Programm entwickelt, und die Näherungslösungen von (7) wurden mit den durch ein Iterationsverfahren (1) gewonnenen Lösungen für einen größeren Bereich der Eingabeparameter verglichen. Die Übereinstimmung war zufriedenstellend.

[1] G. Hertenberger, K. Roch u. H. Winter, Z. Naturforsch. **28a**, 1687 (1973). In dieser Arbeit befindet sich ein ausführliches Literaturverzeichnis.