

ESCUELA POLITÉCNICA NACIONAL

FACULTAD DE CIENCIAS

**PATRONES DE DISPERSIÓN DE ELECTRONES ACELERADOS
ENTRE DOS PLACAS CARGADAS EN PRESENCIA DE OXÍGENO
Y NITRÓGENO MOLECULARES**

**TRABAJO DE TITULACIÓN PREVIO A LA OBTENCIÓN DEL TÍTULO DE
FÍSICO**

PROYECTO DE INVESTIGACIÓN

RAÚL FERNANDO MORENO ARIAS

raul.moreno@epn.edu.ec

Director: MARCO VINICIO BAYAS REA, Ph.D.

marco.bayas@epn.edu.ec

Quito, Junio 2018

DECLARACIÓN

Yo, Raúl Fernando Moreno Arias, declaro bajo juramento que el trabajo aquí descrito es de mi autoría; que no ha sido previamente presentada para ningún grado o calificación profesional; y, que he consultado las referencias bibliográficas que se incluyen en este documento.

A través de la presente declaración cedo mis derechos de propiedad intelectual correspondientes a este trabajo, a la Escuela Politécnica Nacional, según lo establecido por la Ley de Propiedad Intelectual, por su Reglamento y por la normatividad institucional vigente.



Raúl Fernando Moreno Arias

CERTIFICACIÓN

Certifico que el presente trabajo fue desarrollado por MORENO ARIAS RAÚL FERNANDO, bajo mi supervisión.



Marco Vinicio Bayas Rea, Ph.D.
Director del Proyecto

AGRADECIMIENTOS

Agradezco a mi director de tesis, Marco Bayas, por guiarme en el desarrollo de este proyecto y en el retorno a mi carrera académica.

DEDICATORIA

A mi madre que me apoyo durante este largo trayecto de la universidad.

ÍNDICE GENERAL

Lista de Figuras	vii
Lista de Tablas	viii
RESUMEN	X
ABSTRACT	XI
1. INTRODUCCIÓN.....	1
1.1. DESCARGAS ELÉCTRICAS EN LA ATMÓSFERA	1
1.2. PROPAGACIÓN DE LOS ELECTRONES DE INCEPCIÓN.....	1
2. MARCO TEÓRICO	3
2.1. MOVIMIENTO DE CARGAS EN UN GAS	3
2.2. COLISIONES ENTRE MOLÉCULAS DIATÓMICAS Y ELECTRONES	4
2.2.1. Probabilidad de Colisión	4
2.2.2. Teoría de la Dispersión	5
2.2.3. Tipo de Colisiones	8
3. METODOLOGÍA	10
3.1. MÉTODO.....	10
3.2. ALGORITMO	11
3.3. CÓDIGO	15
3.3.1. Variables Globales	16
3.3.2. Vuelo del Electrón entre Colisiones	16
3.3.3. Sección Eficaz en Función del Tiempo	17
3.3.4. Probabilidad de Colisión.....	17
3.3.5. Tipo de Interacción.....	18
3.3.6. Velocidad de salida.....	18
3.4. LÍMITES DE SIMULACIÓN	19
3.4.1. Intervalo de Vuelo del Electrón	19
3.4.2. Paso Temporal de la Simulación (δt).....	21
3.5. ANÁLISIS ESTADÍSTICO	21
4. VALIDACIÓN DEL CÓDIGO.....	23
4.1. COMPORTAMIENTO DE LOS ELECTRONES A BAJA PRESIÓN	23
4.2. INFLUENCIA DEL CAMPO ELÉCTRICO	26

5. RESULTADOS Y DISCUSIÓN.....	29
5.1. TRAYECTORIAS	29
5.2. PATRONES DE DISPERSIÓN	32
5.3. IONIZACIONES Y ABSORCIONES EN LAS TRAYECTORIAS	37
5.4. TIEMPO DE VUELO LIBRE MEDIO	42
5.5. REGIÓN DE CAMBIO DE TENDENCIA.....	43
6. CONCLUSIONES.....	48
REFERENCIAS.....	51
ANEXO A.....	53
ANEXO B.....	65

LISTA DE FIGURAS

Figura 2.1. Dispersión de un electrón por una molécula, en el sistema centro de masa	7
Figura 3.1: Esquema de la distancia del punto de impacto al punto de partida y al eje perpendicular a las placas que lo atraviesa.	10
Figura 3.2: Diagrama de flujo del algoritmo	14
Figura 3.3: Trayectoria de un electrón a través de un gas entre dos placas cargadas	15
Figura 3.4: La trayectoria entre dos colisiones (línea sólida) es un segmento de la trayectoria proyectada.....	20
Figura 3.5: Función acumulativa típica; $r_{0.5}$ es el radio característico	22
Figura 4.1: Dispersión de $\langle r^2 \rangle$ en función del tiempo para presión de 3.8mmHg en campos eléctricos de $1 \times 10^2 \text{V/m}$ y $3 \times 10^6 \text{V/m}$	24
Figura 4.2: Dispersión de $\langle r^2 \rangle$ en función del tiempo para 1×10^2 y $3 \times 10^6 \text{V/m}$ a 760mmHg	24
Figura 4.3: Desviación estándar σ_x en función de la presión (izq), y en función del campo eléctrico (der)	25
Figura 4.4: Número medio de colisiones en función de la presión.....	25
Figura 4.5: Desviación estándar en las coordenadas x, y en función de la Presión	26
Figura 4.6: Radio característico ($r_{0.5}$) en función del campo eléctrico para presiones de 3.8 y 7.6mmHg.....	27
Figura 5.1: Trayectorias típicas con presión de 7,6mmHg y campo de $1 \times 10^6 \text{V/m}$	30
Figura 5.2: Trayectorias típicas con presión de 7,6mmHg y campo de $3 \times 10^6 \text{V/m}$	30
Figura 5.3: Trayectorias típicas con presión de 76mmHg y campo de $1 \times 10^6 \text{V/m}$	31
Figura 5.4: Trayectorias típicas con presión de 76mmHg y campo de $3 \times 10^6 \text{V/m}$	31
Figura 5.5: Registro de impactos sobre la placa de llegada. Casos de 7,6 y 76mmHg respectivamente, para un campo de $1 \times 10^6 \text{V/m}$	32
Figura 5.6: Registro de frecuencia de impactos sobre la placa de llegada. Caso de 3,8mmHg y $1 \times 10^5 \text{V/m}$	32
Figura 5.7: Registro de frecuencia de impactos sobre la placa de llegada. Caso de 760mmHg y $1 \times 10^5 \text{V/m}$	33

Figura 5.8: Patrón de impactos con campo de $1 \times 10^6 \text{V/m}$ y presión 7,6mmHg.....	34
Figura 5.9: Múltiples distribuciones de acumulación inversas a 760mmHg y $3 \times 10^6 \text{V/m}$, respecto a diferentes valores de campo y presión respectivamente.....	35
Figura 5.10: Variación del radio característico en función del campo, para diferentes presiones.....	35
Figura 5.11 Variación del radio característico según el campo, hasta 10^5V/m	36
Figura 5.12: El radio característico según la presión para diferentes campos eléctricos. ..	37
Figura 5.13: Número medio de colisiones en función del campo eléctrico.....	38
Figura 5.14: Ionizaciones simples en función del campo eléctrico, para diferentes valores de presión.	40
Figura 5.15: Ionizaciones dobles en función del campo eléctrico, para diferentes valores de presión.	40
Figura 5.16: Absorciones por cada 5000 ensayos, en función del campo eléctrico.....	41
Figura 5.17: Tiempo de vuelo libre medio en función del campo.	43
Figura 5.18: Tiempo de vuelo libre medio como función de la presión.....	43
Figura 5.19: Distribuciones acumulativas inversas en la región del cambio de tendencia.....	44
Figura 5.20: Distribuciones acumulativas inversas de patrones de dispersión.....	44
Figura 5.21: Histogramas en la región del cambio de tendencia	45
Figura 5.22: Histogramas de patrones de dispersión.....	45
Figura 5.23: Clasificación de los ensayos según su número de ionizaciones.....	46
Figura 5.24: Número de ionizaciones versus el número de colisiones.	47
Figura B.0.1: Coordenadas cilíndricas en torno a la dirección de incidencia.....	65
Figura B.0.2: Proyecciones sobre el plano z-z' de la velocidad de salida.....	66
Figura B.0.3: Proyecciones sobre el plano xy de las velocidades de entrada y salida.	67

LISTA DE TABLAS

Tabla 2.1: Procesos de interacción del electrón y nitrógeno molecular	9
Tabla 2.2: Procesos de interacción del electrón con el oxígeno molecular	9
Tabla 4.1. Desviación Estándar en función de la presión	24
Tabla 4.2. Variación de $\langle x \rangle$, $\langle y \rangle$ en función de la presión, para un campo de 10^5 V/m....	26
Tabla 4.3. Radio característico vs Campo eléctrico	27
Tabla 5.1: Radio característico versus la presión	34
Tabla 5.2: Índices de ajuste para la relación (5.1), junto al correspondiente coeficiente de correlación R.	36
Tabla 5.2: Índices de ajuste para la relación (5.2), junto al correspondiente coeficiente de correlación R.	37
Tabla 5.3: Número medio de colisiones en función de la presión y el campo eléctrico	38
Tabla 5.4: Ionizaciones simples en función de la presión y campo eléctrico	39
Tabla 5.5: Ionizaciones simples en función de la presión y campo eléctrico	39
Tabla 5.6: Porcentaje de ionizaciones simples.....	39
Tabla 5.7: Porcentaje de ionizaciones dobles	40
Tabla 5.8: Absorciones en 5000 ensayos.....	41
Tabla 5.9: Tiempo de vuelo libre medio en función de la presión y campo eléctrico.....	42

RESUMEN

En este trabajo se estudió la dispersión de electrones acelerados por un campo eléctrico uniforme a través de una mezcla de oxígeno y nitrógeno, con concentraciones relativas de 0.22 y 0.78 respectivamente. Para ello se utilizaron simulaciones computacionales del movimiento del electrón acelerado por campos de 1×10^2 a 3×10^6 V/m y presiones del gas desde 3.8 hasta 760 mmHg. En las simulaciones se consideró la ocurrencia de colisiones en puntos, de trayectorias pre-proyectadas, seleccionados aleatoriamente. Para ello se utilizó los valores experimentales de las secciones eficaces. La dispersión de los electrones se analizó mediante distribuciones acumulativas inversas. Las desviaciones provocadas por el medio se cuantificaron con el radio correspondiente al 50% en estas distribuciones ($r_{0.5}$). En los resultados se observan relaciones potenciales del tiempo de vuelo libre medio y del radio característico ($r_{0.5}$) con respecto a la presión y el campo. Sin embargo estas tendencias presentan discontinuidades en campos de 1×10^6 a 3×10^6 V/m. Siendo, además, estos valores de campo los únicos que presentan ionizaciones. Estos resultados aportan a la comprensión del comportamiento de los electrones de inyección en el proceso de la formación de descargas eléctricas en el aire.

Palabras clave: Electrones de inyección, descargas eléctricas, método de Montecarlo, secciones eficaces de colisión.

ABSTRACT

The dispersion of electrons accelerated by an electric field through a mixture of oxygen and nitrogen, with relative concentrations of 0.22 and 0.78 respectively, was studied using computer simulations. The electron was accelerated by an electric field between 1×10^2 and 3×10^6 V/m through a medium with pressures from 3.8 to 760 mmHg. This simulations considered random collisions over pre-defined trajectories considering the Itikawa's experimental cross-sections. The electrons dispersion was analyzed using cumulative distribution functions. The deviations produced by the medium were quantified by the radius that corresponds to the 50% of cumulative distribution ($r_{0.5}$). It was found that there are potential relations involving the mean free time and the characteristic radius ($r_{0.5}$) with pressure and electric field. However, these tendencies show discontinuities for 1×10^6 to 3×10^6 V/m fields ionizations are found only at these electric fields. These results contribute to understand the behavior of electron inception in air electric breakdown.

Keywords: Inception electrons, electric breakdown, Monte-Carlo method, scattering cross section.

11/2/2018

Capítulo 1

Introducción

1.1. Descargas Eléctricas en la Atmósfera

La generación de descargas eléctricas en la atmósfera se produce debido a la acumulación de cargas netas no balanceadas entre dos regiones de nubes, o entre éstas y el suelo. Esta acumulación de cargas se debe a las colisiones entre las moléculas y los movimientos convectivos de la atmósfera [1] [2]. El campo electrostático generado en principio favorecería el movimiento de cargas libres si no fuese por las características dieléctricas del aire. Esto, sin embargo, es posible cuando el campo alcanza la rigidez dieléctrica del aire (0,3 – 4 MV/m) [2]. En este punto las características conductivas cambian y se produce el rompimiento dieléctrico, permitiendo el paso masivo de las cargas a través de un canal en el medio [3]. La trayectoria de este canal de conducción se establece por los llamados electrones de inyección que ingresan en el medio en una etapa previa a la descarga e interactúan con las moléculas del aire ionizándolas [1] [2].

1.2. Propagación de los Electrones de Inyección

La corriente eléctrica que aparece en un gas se debe a unos pocos electrones que ingresan en el material, denominados electrones de inyección. La frecuencia, profundidad de penetración y capacidad de ionizar las moléculas de éstos electrones con un campo determinado son una característica propia de cada

sustancia. La frecuencia con la que alcanzan una mayor penetración e ionizan el medio es mayor según se incrementa el campo aplicado. La importancia de esto radica en que los iones favorecen la conducción a través del gas. De manera que el camino trazado por los electrones de inyección se relaciona con la formación de la trayectoria de la subsecuente descarga eléctrica [4].

Para describir el movimiento de los electrones en el aire se han planteado modelos que describen cómo sus interacciones individuales con las moléculas participan en la generación de la descarga eléctrica [3] y de ésta manera se determina su trayectoria [5]. La solución de éstos, sin embargo, no puede implementarse de manera analítica debido al inmenso número de partículas involucradas. Por lo que los cálculos correspondientes requieren una implementación computacional, generalmente basada en el método de Dinámica Molecular con interacciones determinadas según el método de Montecarlo, como en los trabajos de Chanrion [5], Tsuji [6] y Egas [7]. A diferencia de los estudios anteriores, en este trabajo se introduce la variación de la sección eficaz en función del tiempo considerando lo expuesto en los artículos de Birdsall [8] y Skullerud [9]. Además se introduce la pre-proyección de la trayectoria para determinar la distribución temporal de la probabilidad de colisión.

Con la finalidad de obtener información sobre la dirección más probable de propagación de los electrones de inyección, en este trabajo se observó el comportamiento de un electrón entre dos placas cargadas a un centímetro de distancia. El sistema analizado se constituye por el electrón y un medio compuesto de moléculas de oxígeno y nitrógeno en equilibrio termodinámico con la temperatura ambiente ($298,15 \text{ °K} \sim 25 \text{ °C}$). La interacción del electrón con el medio se analizó en casos específicos de presión y campo; tomando valores de 3.8, 7.6, 19, 38, 76 y 760 mmHg, y 1×10^2 , 3×10^2 , 1×10^4 , 1×10^5 , 1×10^6 , 1.5×10^6 y 3×10^6 V/m respectivamente. Las condiciones marcadas en negrillas son casos desarrollados también en el trabajo de Egas [7]. Aunque existen estas condiciones comunes con fines comparativos, ambos trabajos se diferencian no solo en los casos adicionales sino también en un tratamiento más minucioso de la probabilidad de colisión y los mecanismos de interacción involucrados. Este estudio comprende dos partes: La simulación del movimiento de electrones entre las placas cargadas, y el uso de la

información sobre los impactos para llevar a cabo un estudio estadístico sobre los patrones de dispersión en la segunda placa empleando fundamentalmente la distribución acumulativa inversa de cada patrón de dispersión.

Capítulo 2

Marco Teórico

2.1. Movimiento de Cargas en un Gas

Una carga bajo la influencia de un campo eléctrico posee una aceleración definida por:

$$\vec{a} = \frac{\vec{E}q}{m} \quad (2.1)$$

De manera general las componentes vectoriales del campo y la aceleración son distintas de cero, y éstas pueden cambiar su valor según la posición. Esta expresión recoge la información completa sobre la distribución de las cargas en el volumen considerado. En este caso de estudio el campo es homogéneo, con solo una componente diferente de cero. La homogeneidad del campo se debe a que las cargas se encuentran distribuidas homogéneamente en las placas lo que anula las componentes de éste sobre el plano de las mismas; además, a que el medio se considera como un conjunto de moléculas neutras y sin polarización.

La evidencia visible de la descarga eléctrica suele ser la generación de un flujo luminiscente en la región. Esta luminiscencia que proviene de las moléculas excitadas muestra el camino que siguen millones de electrones a través del medio. Lo que significa que el campo aplicado ha superado límite dieléctrico cambiando localmente las características del medio. De manera que para describir el movimiento de cargas en el gas, se parte de un estado previo al rompimiento dieléctrico realizando un seguimiento de las cargas por separado.

Wagner

Bajo estas condiciones el campo eléctrico provoca inicialmente que unas pocas cargas puedan adentrarse en el gas. Sin embargo, éstas son dispersadas y/o absorbidas por las moléculas. Según aumenta la intensidad del campo los electrones pueden alcanzar mayor energía y acceder progresivamente a diferentes tipos de interacción con las moléculas, hasta ser capaces de ionizarlas. Mientras que los electrones secundarios liberados por las ionizaciones producen otras ionizaciones, generando una avalancha de electrones. Como consecuencia, la corriente neta que atraviesa el material se incrementa; no solo por el paso de los electrones de inyección sino también de electrones secundarios provenientes de las ionizaciones [3]. Este proceso aumenta con el campo hasta llegar a un punto crítico en el cual la concentración de iones establece un canal a través del gas [4]. En éste, las condiciones de conducción cambian radicalmente y una gran cantidad de electrones pueden atravesar con una resistencia mínima.

2.2. Colisiones entre Moléculas Diatómicas y Electrones

Dado que la posición de las moléculas en el gas no presenta ningún tipo de orden, la sucesión de las colisiones es aleatoria, de la misma manera que la trayectoria que describen los electrones. Lo cual hace de cada evento único; determinado por la velocidad y masa de las partículas involucradas. Y cada uno de estos eventos determina la nueva velocidad y dirección para el electrón.

2.2.1. Probabilidad de Colisión.

Un aspecto fundamental en el proceso de colisión entre dos partículas es determinar cuando este ocurrirá. Como en este caso las colisiones son aleatorias se busca conocer la probabilidad con que éstas ocurren. Esta función de probabilidad describe la penetración del electrón en el gas e incluye las variables térmicas del gas. De manera general este tipo de funciones se relacionan con la intensidad de un haz de estas partículas a una profundidad l en el medio [10]. Por lo cual presenta un decaimiento exponencial (Ec. 2.2).

$$I = I_0 e^{-n\sigma l} \quad (2.2)$$

Este modelo suele aplicarse a casos en los cuales no existe ninguna fuerza sobre el sistema, haciendo uso de la distancia como una magnitud lineal [7] [5] [6]. Sin embargo cuando las partículas se encuentran bajo el efecto de una fuerza, la longitud varía con el cuadrado del tiempo y la sección eficaz no es constante. Por lo que la probabilidad de que una partícula no haya colisionado al haber recorrido una distancia s sobre la trayectoria sería:

$$P_t = e^{-n\sigma_t s_t} \quad (2.3)$$

Donde s representa el recorrido tangencial de la partícula en el medio sobre una trayectoria curva. La dependencia explícita de la sección eficaz y el recorrido en función del tiempo convierte esta expresión en la distribución de la probabilidad de encontrar al electrón sin colisionar hasta el tiempo t . De manera que la ecuación (2.4) presenta la distribución de probabilidad de colisión en el tiempo [9].

$$P(t) = 1 - e^{-n\sigma_t(v_0 t + 0.5at^2)} \quad (2.4)$$

Esta última expresión presenta de manera explícita la dependencia de la sección eficaz (σ_t) respecto del tiempo. Si bien no existe una expresión que represente esta dependencia, el valor de la sección eficaz está ligado a la velocidad de la partícula [9] [8] [11] y este valor cambia debido al campo.

2.2.2. Teoría de la Dispersión

El proceso de colisión entre un electrón y una molécula diatómica define la dirección de dispersión, en relación a la dirección previa en el sistema centro de masa. La sección eficaz para este proceso supone implementar la teoría de la dispersión general para bajas energías en la definición de la amplitud de dispersión; considerando el efecto del apantallamiento de Coulomb y un radio para la molécula diatómica [7] [12] [13].

$$f(\varepsilon, \theta) = \frac{-2m}{h^2} \int_0^\infty U(r) \frac{\text{Sen}(qr)}{q} r dr \quad (2.5)$$

Con,

$$U(r) = ZE_0 \frac{r_0}{r} e^{-\frac{r}{r_0}} \quad (2.6)$$

$$E_0 = \frac{1}{(4\pi\varepsilon_0)^2} \frac{m_e e}{h^2} \quad (2.7)$$

Donde $U(r)$ es el potencial de dispersión debido a la molécula considerando r_0 el radio de Bohr (0,529 Å), y definiendo E_0 como la unidad de energía [7]. Además r corresponde al radio respecto al centro de masa molecular y Z es el número atómico equivalente para la molécula. De la expresión (2.5) se desprende la sección eficaz diferencial (Ec. 2.8) en función de la energía normalizada y el ángulo de dispersión θ .

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f(\varepsilon, \theta)|^2 = 4 r_0^2 \left(\frac{\alpha m r_0}{\hbar^2} \right)^2 \frac{1}{(q^2 r_0^2 + 1)^2} \quad (2.8)$$

Donde $\alpha = zE_0 r_0$. La sección eficaz total (Ec. 2.10) en función de la energía resulta de integrar la expresión anterior sobre el ángulo de dispersión:

$$\sigma = 2\pi \int_0^\pi \frac{d\sigma}{d\Omega} \text{sen}(\theta) d\theta \quad (2.9)$$

$$\sigma = r_0^2 \left(\frac{\alpha m r_0}{\hbar^2} \right)^2 \frac{1}{(q^2 r_0^2 + 1)^2} \quad (2.10)$$

Por otro lado la relación entre la energía y el ángulo de dispersión se observa con mayor claridad si en la expresión (2.8) se normaliza la energía introduciendo el término $\varepsilon = E/E_0$, e incluyendo la dependencia del ángulo de dispersión con la variación de momento según la aproximación de Born: $q = 2k \text{sen}(\theta/2)$. [14]

$$I(\varepsilon, \theta) = \frac{1}{4\pi} \frac{1 + 8\varepsilon}{(1 + 4\varepsilon - 4\varepsilon \cos \theta)^2} \quad (2.11)$$

La distribución probabilidad de la colisión en función de la energía y el ángulo de dispersión se obtiene de la integración de la sección eficaz diferencial normalizado (Ec. 2.11) entre θ y θ :

$$P(\varepsilon, \theta) = \frac{(1 + 8\varepsilon) \text{sen}^2(\theta/2)}{1 + 8\varepsilon \text{sen}^2(\theta/2)} \quad (2.12)$$

Esta distribución establece la probabilidad de que un electrón con energía ε sea dispersado con un ángulo θ . Para establecer la relación entre este ángulo y la energía de colisión se requiere conocer la probabilidad de dicha dirección. Esto se consiguió al equiparar la probabilidad con un número aleatorio R entre 0 y 1 (Ec.2.13).

$$\theta = \arccos \left(1 - \frac{2R}{1 + 8\varepsilon(1 - R)} \right) \quad (2.13)$$

Este ángulo conjuntamente con un ángulo azimutal aleatorio (ϕ) determina la dirección que toma el electrón luego de la colisión. Por lo que la velocidad de salida en el sistema centro de masa (Figura 2.1) se definió como:

$$V_s = V_s \cos(\theta) u_z + V_s \sin(\theta) u_r \quad (2.14)$$

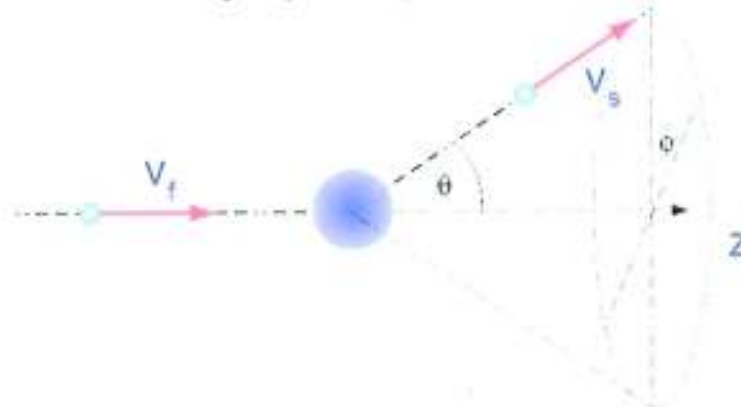


Figura 2.1. Dispersión de un electrón por una molécula, en el sistema centro de masa

La trayectoria del electrón se establece sobre el sistema laboratorio (sistema entre las placas), por lo que esta información debe interpretarse desde este sistema. Esto se logra con una transformación de coordenadas cilíndricas a cartesianas (ver Anexo B). De manera que la velocidad después de la colisión posee las siguientes componentes en el sistema de laboratorio:

$$\begin{aligned} v_{s_x} &= (v_{s_r} \cos(\phi) \cos\psi + v_{s_z} \sin\psi) \cos\alpha - v_{s_r} \sin(\phi) \sin\alpha \\ v_{s_y} &= (v_{s_r} \cos(\phi) \cos\psi + v_{s_z} \sin\psi) \sin\alpha + v_{s_r} \sin(\phi) \cos\alpha \\ v_{s_z} &= v_{s_z} \cos\psi - v_{s_r} \cos(\phi) \sin\psi \end{aligned} \quad (2.14)$$

En éstas expresiones se han introducido varios términos indexados con el objetivo de evitar una expresión muy extensa. Considerando la transformación de coordenadas mencionada y tanto la velocidad de entrada (V_f) como la de salida (V_s) estos términos representan:

$$\begin{aligned} \cos\phi &= v_{f_x} / |V_f| \\ \sin\phi &= \sqrt{(v_{f_x}^2 + v_{f_y}^2)} / |V_f| \\ \cos\alpha &= v_{f_x} / \sqrt{(v_{f_x}^2 + v_{f_y}^2)} \\ \sin\alpha &= v_{f_y} / \sqrt{(v_{f_x}^2 + v_{f_y}^2)} \end{aligned} \quad (2.15)$$

2.2.3. Tipo de Colisiones

El tipo de interacción determina la energía que se transfiere en los procesos de colisión entre el electrón y las moléculas. Esta característica cambia según la energía de impacto, lo cual se determina según las regiones energéticas de interacción. Los límites de estas regiones se han establecido mediante ensayos experimentales que ligan las secciones eficaces de colisión con los procesos ocurridos en determinados rangos de energía [15] [16].

En general, para determinar la distribución de probabilidad de colisión se requiere considerar la sección eficaz total (Ec. 2.4). Este valor recoge la información de todos los posibles procesos entre las partículas involucradas, y la información sobre la composición de la sustancia.

$$\sigma_t = 0,78 \sigma_{N_2} + 0,22 \sigma_{O_2} \quad (2.16)$$

$$\sigma_j = \sigma_{elas} + \sigma_{inelas} \dots j = N_2, O_2$$

El aspecto fundamental de conocer la identidad de la molécula involucrada, al tener más de un tipo de molécula, es que se puede discernir entre los procesos disponibles para un evento en particular. De manera general, éstos se clasifican en procesos elásticos e inelásticos. Los últimos pueden ser de excitación, de ionización o absorción. Según los estudios experimentales de Itikawa los procesos de interacción del electrón con el nitrógeno, disponibles según el rango de energía, son:

Proceso de Interacción	E_min [eV]	E_max [eV]	E. Tranf. [eV]	
Tranf. Elast. de Momento	0	1,00E+02		E + N2 -> E + N2
Colisión Elástica	5,500E-01	1,00E+03	0	E+N2 -> E+N2, Elastic
Excitación Rotacional	1,450E-03	1,25E+00	0,00145	E+N2 -> E+N2(rot), j=0->2
Excitación Vibracional	2,890E-01	3,00E+01	0,289	E+N2 -> E+N2(v1), v=0->1
Excitación A3sigma	6,169E+00	4,00E+01	6,169	E + N2 -> E + N2(A3)
Excitación B3pi	7,353E+00	5,00E+01	7,353	E + N2 -> E + N2(B3)
Excitación W3delta	7,362E+00	5,00E+01	7,362	E + N2 -> E + N2(W3)
Excitación B'3sigma	8,165E+00	4,00E+01	8,165	E + N2 -> E + N2(B'3)
Excitación A'1sigma	8,400E+00	5,00E+01	8,4	E + N2 -> E + N2(a'1)
Excitación A'pi	8,550E+00	1,00E+02	8,55	E + N2 -> E + N2(a1)
Excitación W1delta	8,890E+00	5,00E+01	8,89	E + N2 -> E + N2(w1)
Disociación total	9,754E+00	2,00E+02	9,7537	E + N2 -> E + N+N

Proceso de interacción	E_min [eV]	E_max [eV]	E. Tranf. [eV]	
Excitación C3pi	1,103E+01	5,00E+01	11,03	E + N2 -> E + N2(C3)
Excitación E3sigma	1,187E+01	5,00E+01	11,87	E + N2 -> E + N2(E3)
Excitación A''1sigma	1,225E+01	5,00E+01	12,25	E + N2 -> E + N2(a''1)
Excitación B'1sigma	1,285E+01	3,97E+02	12,854	E + N2 -> E + N2(b'1)
Excitación C'1sigma	1,294E+01	3,96E+02	12,935	E + N2 -> E + N2(c'1)
Ionización Parcial	1,558E+01	1,00E+03	15,58	E + N2 -> E + E + N2+
Ionización Parcial	3,000E+01	1,00E+03	30	E + N2 -> E + E + N+
Doble Ionización	7,000E+01	1,00E+03	70	E + N2 -> E + E + N++

Tabla 2.1: Procesos de interacción del electrón y nitrógeno molecular [15]

Mientras que los procesos de interacción entre el electrón y el oxígeno son:

Proceso de interacción	E_min [eV]	E_max [eV]	E. Tranf. [eV]	
Absorción	4,200E+00	9,90E+00	0	E + O2 -> O+O
Colisión Elástica	1,000E+00	1,00E+03		E + O2 -> E + O2
Trans. Elástica de Momento	1,000E-02	1,00E+02		E + O2 -> E + O2
Transición Vibracional v1	1,900E-01	1,50E+01	0,19	E + O2 -> E + O2(v1), v'=1
Resonancia Vibracional v1	2,131E-01	7,03E-01	0,19	E+O2 -> E+O2(v1res), v=0->1
Transición Vibracional v'2	3,800E-01	1,50E+01	0,38	E + O2 -> E + O2(v2)
Resonancia Vibracional v2	4,570E-01	7,03E-01	0,38	E+O2 -> E+O2(v2res), v=0->2
Excitación Vibracional v'3	5,700E-01	1,50E+01	0,57	E + O2 -> E + O2(v3)
Excitación Resonante v3	5,700E-01	7,03E-01	0,57	E+O2 -> E+O2(v3res), v=0->3
Excitación A1delta	9,770E-01	2,00E+01	0,977	E + O2 -> E + O2(A1)
Excitación B1sigma	1,627E+00	2,00E+01	1,627	E + O2 -> E + O2(B1)
Exc. Est. Electr. A2s, A3d, C1s	4,050E+00	3,00E+01	4,05	E + O2 -> E + O2(A3+A'3+c1)
Disociación	6,120E+00	1,99E+02	6,12	E + O2 -> E + O+O
Excitación 2B	6,120E+00	5,00E+01	6,12	E + O2 -> E + O2(2B)
Excitación B3sigma	6,120E+00	5,00E+01	6,12	E + O2 -> E + O2(B3)
Excitación LB	6,120E+00	5,00E+01	6,12	E + O2 -> E + O2(LB)
Ionización Parcial	1,206E+01	9,98E+02	12,06	E + O2 -> E + E + O2+
Ionización Parcial	2,300E+01	9,98E+02	23	E + O2 -> E + E + O+
Doble Ionización	7,300E+01	9,98E+02	73	E + O2 -> E + E + O++

Tabla 2.2: Procesos de interacción del electrón con el oxígeno molecular [16]

Capítulo 3

Metodología

Con el objetivo de analizar y describir el comportamiento de electrones de inyección sobre las condiciones de interés, se estudió el desplazamiento de un único electrón a través de un medio. Esta tarea requirió implementar computacionalmente un algoritmo que describa las interacciones de éstos electrones con el gas. Para el análisis de los resultados se representó a cada ensayo, obtenido con el algoritmo, por la distancia entre el punto de impacto y el eje perpendicular al punto de partida de los electrones (Figura 3.1). Los resultados obtenidos de la ejecución de este algoritmo fueron, posteriormente, analizados de manera estadística. Para lo cual se definió un radio característico que representa a cada ensamble estadístico.

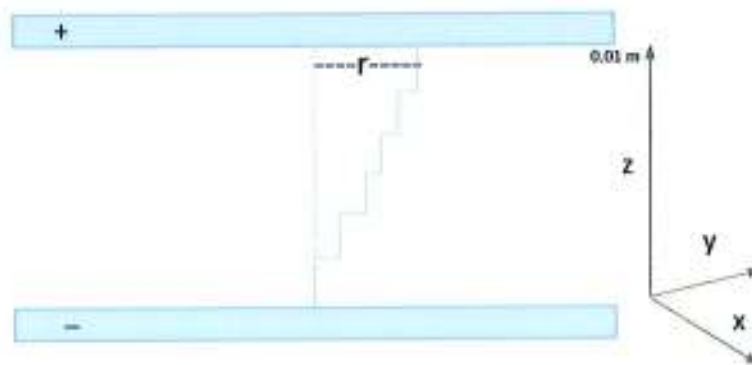


Figura 3.1: Esquema de la distancia del punto de impacto al punto de partida y al eje perpendicular a las placas que lo atraviesa.

3.1. Método

Para efectos prácticos se clasificó las partículas en dos tipos: las moléculas que componen la mezcla de gases y los electrones. Los elementos del primer tipo son

moléculas diatómicas de oxígeno y nitrógeno. Dado que éstas son eléctricamente neutras y no-polares sus movimientos se caracterizan por colisiones aleatorias entre sí, en equilibrio termodinámico. El segundo tipo de partículas son electrones partiendo del reposo. Éstos se analizan uno a la vez siguiendo el camino irregular que describen entre las placas cargadas.

El movimiento del electrón en el gas se determina empleando el método de Dinámica Molecular con interacciones de Montecarlo. La aplicación de este método se basa en los trabajos de Chanrion [5], Tsuji [6] y Egas [7] que examinan el movimiento de un electrón en un gas. Sin embargo, se toma en consideración que la energía cinética es una variable que depende del tiempo, lo cual afecta la sección eficaz [8] [9]. Para aplicar esta variabilidad se introduce en el método la pre-proyección de la trayectoria de los electrones. Es decir, se determina la trayectoria que recorrería el electrón sin colisiones. Sobre esta se calcula la energía cinética y su variación, magnitud con la cual se determina la distribución temporal de la probabilidad de colisión.

Adicionalmente a la determinación de la trayectoria, se analiza la estadística de los puntos de impacto sobre cinco mil ensayos para cada condición estudiada. Se recurre para ello a la distribución acumulativa inversa de cada patrón de dispersión. En ésta se determina como radio característico ($r_{0.5}$) la distancia para la cual se han acumulado el cincuenta por ciento de los ensayos. Determinando también que la probabilidad de que el radio de un impacto sea mayor que $r_{0.5}$ es 0,5.

3.2. Algoritmo

Dado que las colisiones ocurren aleatoriamente se utiliza una distribución de probabilidad para determinar el tiempo entre colisiones (*Ec. 2.4*). Esta distribución incluye información sobre la densidad molecular y la fuerza ejercida sobre el electrón por el campo eléctrico. Para determinar el tiempo de colisión, la molécula involucrada y el tipo de interacción se comparan números aleatorios con la distribución de probabilidad de colisión, la composición molecular del gas y la probabilidad de los proceso de interacción respectivamente. En el último punto, el

tipo de interacción, se utiliza la información sobre las secciones eficaces proveniente de mediciones experimentales [15] [16].

El detalle de este algoritmo consta de los siguientes pasos:

1. Se genera un electrón en la placa negativa con una velocidad inicial cero.
2. Se determina el tiempo de la siguiente colisión utilizando números aleatorios de la siguiente manera:
 - 2.1. Se determina la evolución de la velocidad y la posición en función del tiempo, teniendo en cuenta que la distancia vertical debe ser menor a la distancia entre las placas (*Figura 3.1*).
 - 2.2. Se determina la evolución de la energía cinética en función del tiempo a lo largo de la trayectoria.
 - 2.3. Se interpola la sección eficaz para la trayectoria, a partir de la energía en función del tiempo y los datos experimentales de la sección eficaz total de gas considerando su composición molecular.
 - 2.4. Se determina la distribución de la probabilidad de colisión en el tiempo utilizando la evolución de la posición y de la sección eficaz; según la expresión exponencial: $P = e^{-n\sigma\Delta s}$. Donde n es la densidad molecular, σ es la sección eficaz y Δs es un diferencial de la trayectoria.
 - 2.5. Utilizando la distribución de probabilidad P se encuentra un número aleatorio que determine el tiempo de colisión.
3. Se determinan la posición, velocidad, energía y sección eficaz de colisión.
4. Se utiliza un número aleatorio para determinar la identidad de la molécula con la cual se produce la colisión.
5. Se establece el tipo de colisión, elástica o inelástica utilizando un número aleatorio y la energía de colisión. En caso de ser inelástica se usa otro número aleatorio para determinar el tipo de proceso.
6. Se determina la dirección del electrón luego de la colisión en función de la energía cinética de colisión (*Ec. 2.13*).
7. Se establece energía y velocidad de salida según el tipo de proceso de colisión y el ángulo de dispersión.
8. Se almacenan tiempo, posición, energía, velocidad de salida y número de ionizaciones en un archivo externo.

9. Si el electrón no ha alcanzado la segunda placa, la velocidad de salida se considera como velocidad inicial para la siguiente colisión repitiendo los pasos 2 a 8. Caso contrario se almacena la posición de llegada en un archivo externo.
10. Se concluye el ensayo.

Estos pasos se representan en la *Figura 3.2* como un flujo en el cual pueden apreciarse las diferentes etapas del algoritmo.

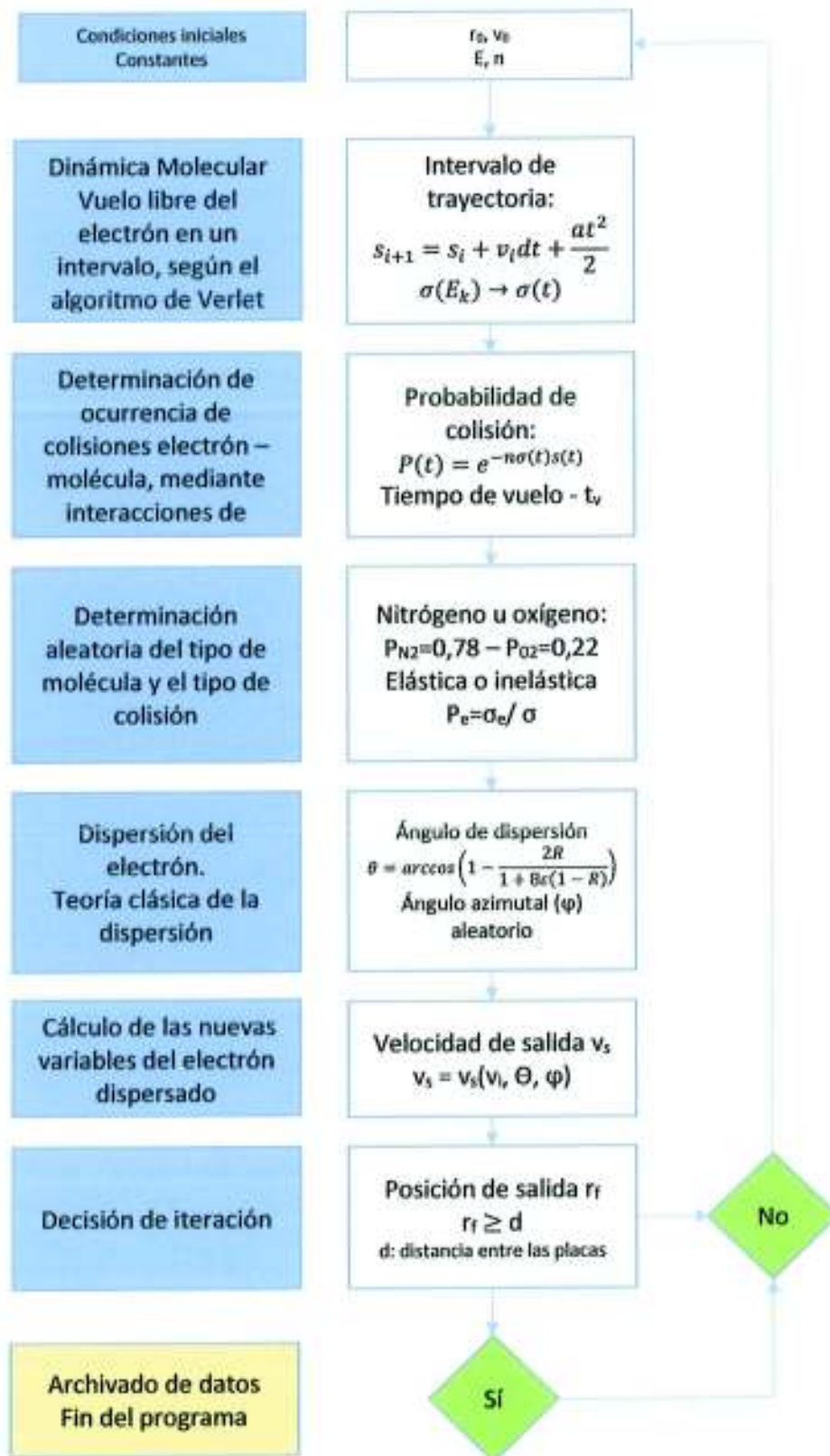


Figura 3.2: Diagrama de flujo del algoritmo

El procedimiento descrito se realiza 5000 veces, a fin de contar con suficientes ensayos para cada una de las condiciones de interés. El gran número de ensayos es necesario para obtener los patrones de dispersión característicos de cada caso. Y la comparación entre éstos permite observar la influencia de las condiciones de prueba sobre el sistema. En los patrones de dispersión se reflejaría la variación gradual de la desviación de los puntos de impacto con relación al punto de partida, r según la *Figura 3.3*. Por ejemplo, en un caso sin moléculas entre las placas (presión = 0mmHg) el radio r sería cero.

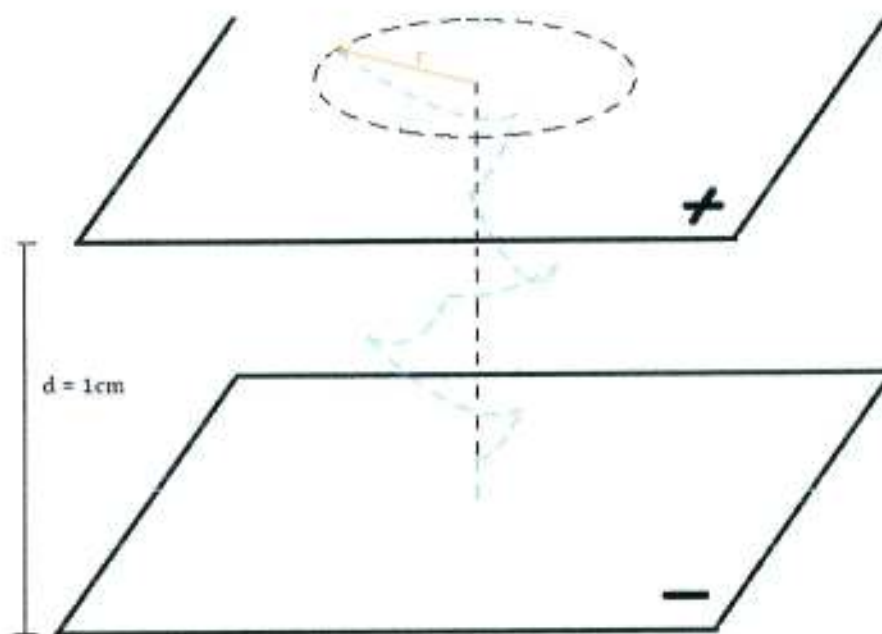


Figura 3.3: Trayectoria de un electrón a través de un gas entre dos placas cargadas

3.3. Código

Para la elaboración de un código más adaptable el algoritmo presentado se ha dividido en varias tareas principales que son: cálculo del vuelo del electrón, los cálculos aleatorios de las colisiones, y la dispersión. Además de estos es necesario fijar ciertas variables globales para todo el proceso, lo cual debe realizarse al principio. Este código fue implementado en lenguaje de programación C++ (Anexo A).

3.3.1. Variables Globales

Las variables globales son los valores constantes para todo el proceso. Entre estas se considera la altura o distancia entre las placas ($d = 1 \text{ cm}$); la masa de las partículas ($M_{N_2} = 28,014u$, $M_{O_2} = 31,9988u$, $m_e = 9,1 \times 10^{-31} \text{ Kg}$), la composición del gas ($X_{N_2} = 0,79$ y $X_{O_2} = 0,21$) y la temperatura ($T = 298,15^\circ \text{K}$). Otro conjunto de valores que permanecen constantes en la simulación corresponde a las secciones eficaces de interacción del electrón con moléculas de oxígeno [16] y nitrógeno [15]. Esta información se encuentra en archivos externos que son leídos por el programa al inicio de la simulación.

Además se establecen valores fijos para la presión y el campo eléctrico según el caso que se esté analizando. Estas magnitudes definen cada caso de estudio por lo que cada grupo de resultados se agrupan bajo estas condiciones en colecciones de 5000 ensayos.

3.3.2. Vuelo del Electrón entre Colisiones

Para el cálculo del vuelo del electrón se ha empleado el método de Verlet, de esta manera el código es fácilmente adaptable a la resolución de la trayectoria del electrón en condiciones no-homogéneas. Partiendo de una posición inicial se acelera el electrón por acción del campo eléctrico y se determina la evolución temporal de la posición (Ec. 3.1) y la velocidad (Ec. 3.2). Considerando como condiciones iniciales \vec{r}_n^u y \vec{v}_n^u para cada etapa, a las magnitudes finales de la etapa anterior.

$$r_{n+1}^u = r_n^u + v_n^u \Delta t + \frac{1}{4} (a_{n+1}^u + a_n^u) (\Delta t)^2, u = x, y, z \quad (3.1)$$

$$v_{n+1}^u = v_n^u + \frac{1}{2} (a_{n+1}^u + a_n^u) \Delta t, u = x, y, z \quad (3.2)$$

Para el caso que se analizó en este trabajo el campo eléctrico es homogéneo por lo que la aceleración es constante sobre todo el volumen (Ec. 2.1). De manera que las ecuaciones anteriores, aplicadas a éste caso, son ligeramente diferentes:

$$r_{n+1}^u = r_n^u + v_n^u \Delta t + \frac{1}{2} a (\Delta t)^2, \quad u = x, y, z \quad (3.3)$$

$$v_{n+1}^u = v_n^u + a \Delta t, \quad u = x, y, z \quad (3.4)$$

3.3.3. Sección Eficaz en Función del Tiempo

Conocida la trayectoria y la velocidad en el intervalo de prueba se busca determinar la sección eficaz de colisión, su valor total y el correspondiente a cada proceso de interacción. Dado que esta magnitud es variable sobre la trayectoria se fijarán valores de la sección eficaz a cada punto a través de la variación de la velocidad.

Para introducir esta idea en el código, se calcula la variación de la energía cinética sobre la trayectoria usando la información sobre la velocidad (Ec. 3.4). Esta información se traduce en un arreglo, que se compara con los valores experimentales presentados por Itikawa [15] [16]. Para hallar los valores de la sección eficaz se realiza una interpolación lineal en el intervalo de interés.

$$\sigma_k^j = \frac{(\sigma_{i+1}^j - \sigma_i^j)}{(E_{i+1} - E_i)} (E_k - E_i) + \sigma_i^j \quad (3.5)$$

En esta expresión el subíndice k denota el punto de interés sobre la trayectoria; el subíndice i corresponde a los datos tabulados en las publicaciones ya mencionadas; y el superíndice j identifica el tipo de proceso de interacción. Así el arreglo σ_k^j corresponde a la variación de la sección eficaz en función del tiempo para un proceso de interacción determinado y una trayectoria en particular. En cuanto a la sección eficaz total, ésta es el resultado de la sumatoria de todos los procesos de interacción para un valor específico de energía.

3.3.4. Probabilidad de Colisión

Para conocer el tiempo de vuelo entre colisiones es necesario conocer la probabilidad con que éstas ocurren. Para determinar la ocurrencia de estos eventos se establece la distribución de probabilidad utilizando la ecuación (2.4) con la evolución de la velocidad en el tiempo y las secciones eficaces experimentales [15] [16]. El resultado es un arreglo de valores de sección eficaz ligados a puntos sobre la trayectoria. Ya que la probabilidad de colisión varía de cero a uno se genera un número aleatorio en este rango ($\hat{\tau} \in]0, 1[$) y se compara con la distribución de colisión (Ec. 3.6).

$$\hat{\tau} = 1 - e^{-n\sigma(v_0 t + 0.5at^2)} \quad (3.6)$$

$$1 - \tau = e^{-n\sigma(t)(v_0t+0,5at^2)} \quad (3.7)$$

El tiempo de vuelo hasta la siguiente colisión queda determinado en el punto donde se cumpla la ecuación anterior. Considerando el número $\tau = 1 - \tau$ entre 0 y 1, se tiene:

$$\ln(\tau) + n\sigma(t)s(t) = 0 \quad (3.8)$$

3.3.5. Tipo de Interacción

Para poder determinar el tipo de interacción es necesario primero conocer la identidad de la molécula involucrada. Dado que se ha considerado una composición molar de 78-22, de nitrógeno y oxígeno respectivamente. La probabilidad de uno u otro evento se determina con la generación de un número aleatorio (*ident*) entre 0 y 1. Si el número de identidad es inferior a 0,78 la colisión sería con nitrógeno y si es mayor con oxígeno.

El segundo aspecto a determinarse es el tipo de colisión: elástica o inelástica. De la misma manera se emplea un número aleatorio y se compara con la probabilidad de uno de los eventos. Para la colisión elástica esta probabilidad viene dada por la expresión.

$$P_{elas}(K) = \frac{\sigma_e(K)}{\sigma_t(K)} \quad (3.9)$$

En caso que la colisión sea inelástica es necesario verificar que tipo de proceso está involucrado, pues este determina la transferencia de energía entre el electrón y la molécula. La ocurrencia de un determinado proceso inelástico se establece al comparar un número aleatorio con su probabilidad entre todos los procesos inelásticos para esa molécula en ese valor de energía. Esta probabilidad se expresa

$$P_{elas}^j(K) = \frac{\sigma_e^j(K)}{\sum_j \sigma_t^j(K)} \quad (3.10)$$

3.3.6. Velocidad de salida

La velocidad de salida se define por dos aspectos: su módulo y su dirección. El cambio en el módulo de la velocidad está relacionado con la elasticidad del impacto.

Éste señala la proporción de la energía cinética que conserva el electrón. Si la colisión es elástica, el módulo de la velocidad no cambia. Pero si la colisión es inelástica, el coeficiente de elasticidad significará una disminución equivalente a la energía utilizada para la excitación de la molécula [15] [16]. Por motivos de portabilidad de la información se utilizó un factor de elasticidad definido en la ecuación (3.11); que establece que proporción de energía se conserva luego de la colisión. Así el módulo de la velocidad de salida se calcula considerando la energía restante luego de la colisión.

$$K_f = \frac{K_0 - E^j}{K_0} \quad (3.11)$$

Por otro lado, el ángulo de dispersión mide el cambio en la dirección del electrón con respecto a su dirección previa. Su valor depende de la energía y fue definido en la ecuación (2.13). Mientras el ángulo azimutal se determina aleatoriamente, entre 0 y 180°. Finalmente las nuevas componentes de la velocidad se calculan haciendo uso de la transformación de coordenadas presentadas en las ecuaciones (2.14) y (2.15).

3.4. Límites de simulación

La obtención de resultados útiles depende del correcto establecimiento de las condiciones de simulación. Se debe considerar que además de las condiciones que se van a simular, existen ciertos parámetros de ajuste que permitan obtener resultados fiables. En ese sentido se debe dotar al código de un tamaño de paso de simulación adecuado, y el rango sobre el cual se desarrolle la simulación. En el primer caso el objetivo es balancear el tiempo de cálculo y la transición de discreto a continuo sin perder información en el proceso. En el segundo contar con un marco de referencia dentro del cual se calculan los procesos aleatorios.

3.4.1. Intervalo de Vuelo del Electrón

Como se estableció en la sección 2.2.1 determinar el tiempo de colisión requiere calcular una función de distribución sobre cada trayectoria, y cada una de estas es única. La construcción de esta distribución requiere determinar un intervalo de

prueba (Sección 3.3.3) dentro del cual se analiza la sección eficaz y se proyecta la evolución de la probabilidad de colisión (Figura 3.4). Este proceso requiere analizar las condiciones de las que se dispone: los límites físicos del ensayo (la distancia entre las placas), el límite relativista ($0,1c = 3 \times 10^7 \text{m/s}$) y la información sobre las secciones eficaces experimentales. Dependiendo de las condiciones que se desee analizar, se puede optar por cualquiera de estas opciones realizando un cambio mínimo en el código. Para las condiciones de este estudio (no-relativista, distancia entre las placas de un centímetro, y las secciones eficaces experimentales de Itikawa [15] [16]) se optó por utilizar el límite tabulado de la energía en los datos experimentales de la sección eficaz.

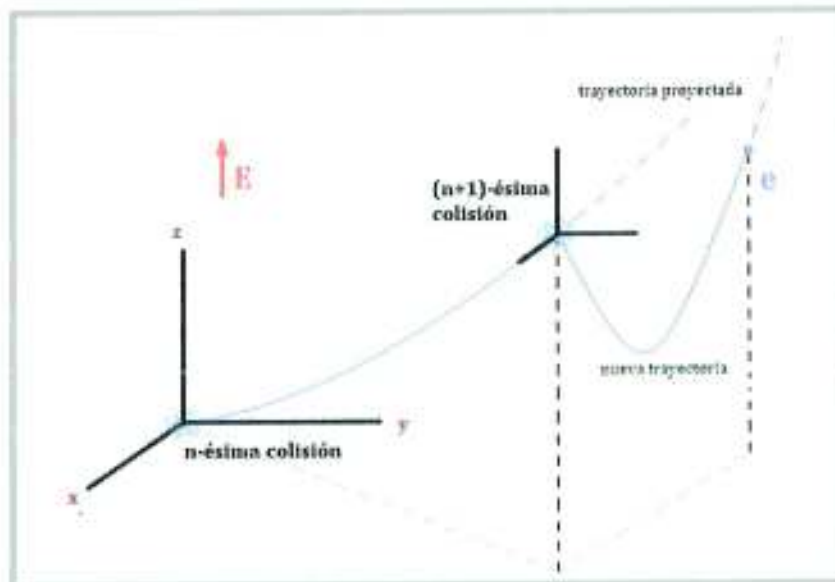


Figura 3.4: La trayectoria entre dos colisiones (línea sólida) es un segmento de la trayectoria proyectada

El valor límite de los datos de Itikawa es de 1000eV. Esta condición cumple con los requerimientos adoptados al inicio de esta sección, pues se enmarca dentro de las dimensiones del sistema y no sobrepasa el límite relativista. De manera que, el rango de tiempo sobre el cual se desarrolla la función de probabilidad se obtiene al calcular el tiempo que le toma al electrón alcanzar la velocidad final para la energía referencial de los datos de Itikawa.

$$v_f = \sqrt{\frac{2E_k}{m_e}} = \sqrt{\frac{2 * 1000\text{eV} \cdot \frac{1,608 \times 10^{-19} \text{J}}{1\text{eV}}}{9,1 \times 10^{-31} \text{Kg}}} \quad (3.12)$$

$$t = \frac{1,8799 \times 10^7 \text{ m/s} + 0 \text{ m/s}}{1,7588 \times 10^{17} \text{ m/s}^2} = 1,0689 \times 10^{-10} \text{ s} \quad (3.13)$$

3.4.2. Paso Temporal de la Simulación (δt)

Al determinar el paso del tiempo en la simulación hay que considerar dos aspectos. Primero, con un valor muy grande se puede perder información y los resultados se alejan de la realidad. Y por otro lado un valor muy pequeño significa un mayor número de cálculos para cubrir la trayectoria lo que se traduce en mayor tiempo de cálculo, aunque crea la ilusión de continuidad y los valores son más precisos. La determinación de este parámetro depende del criterio del investigador y la capacidad de la máquina. Se consideraron dos criterios: los datos experimentales empleados en el estudio [15] [16] y el balance entre la capacidad de la computadora y el tiempo necesario para los cálculos. Tras varios intentos se encontró que introducir 10000 pasos de simulación considerando el intervalo de vuelo calculado en la sección anterior permite un buen balance entre capacidad de la máquina y precisión. Este valor fue probado en sistemas operativos Linux (Ubuntu o Gentu) con procesadores core i7.

Para implementar este tamaño de paso, se tomó el tiempo que se requiere para que el electrón alcance una energía de 1000eV, y se lo dividió en 10000 pasos. De esta manera los puntos sobre la trayectoria son equidistantes en el tiempo, y la división correspondiente en la escala de energía se encuentra en el rango de 0,1eV. Como la velocidad luego de cada colisión es diferente, los valores de energía sobre la trayectoria son distintos entre cada vuelo.

3.5. Análisis Estadístico

Los datos que pueden obtenerse luego de cada ensayo, ejecutando el código presentado en el Anexo A, son la trayectoria formada por todos los puntos donde el electrón chocó con una molécula, el número de colisiones, el tiempo de vuelo entre las placas, la posición del punto de impacto (Figura 3.3) y el número de ionizaciones. Además también se informa si el electrón fue absorbido, en cuyo caso éste no concluye el trayecto entre las placas. Toda esta información es susceptible

de un análisis estadístico, sin embargo las trayectorias formadas por los puntos de colisión requieren un tratamiento mucho más amplio; que se relaciona con la información sobre el punto de impacto.

A fin de contar con datos suficientes se realizaron cinco mil ensayos para cada condición de presión y campo. Los puntos de impacto de éstos sobre la segunda placa constituyen el patrón de dispersión para esas condiciones. Con ésta información se calculan los radios desde el punto de impacto al eje perpendicular trazado desde el punto de partida (Figura 3.1). Estos resultados se emplean en elaborar una distribución acumulativa inversa del caso de estudio. Y sobre ésta se define el radio característico como el valor para el cual esta distribución acumula el cincuenta por ciento de los puntos de los ensayos (Figura 3.5).

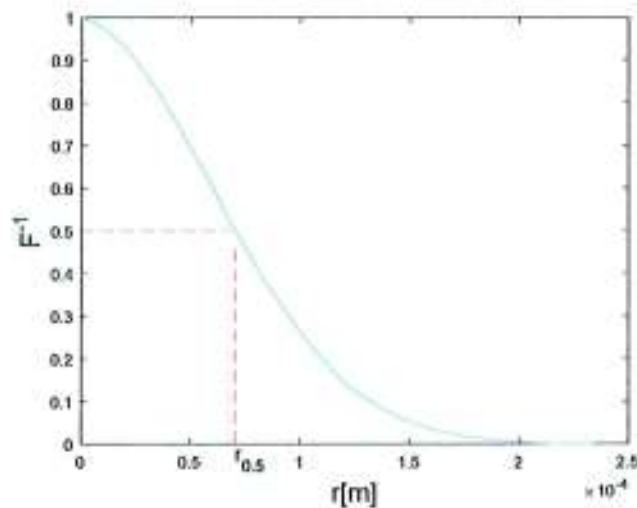


Figura 3.5: Función acumulativa típica; $r_{0.5}$ es el radio característico

Además también se calcula, con la información de cada patrón, el número medio de colisiones considerando las colisiones por cada ensayo. De igual manera se calculan el número medio de ionizaciones y el número medio de ionizaciones dobles. Para encontrar el tiempo de vuelo libre medio, primero es necesario dividir los tiempos de vuelo entre placas para el número de colisiones correspondientes en cada ensayo. La magnitud de interés es el promedio de estas cantidades es, Este paso se juzga necesario pues se verificó que pueden existir diferencias notables entre un ensayo y otro.

Capítulo 4

Validación del Código

El programa fue validado antes de su uso para la generación de los datos empleados en el estudio. La validación del código es un proceso que consiste en evaluar el mismo mediante simulaciones del comportamiento del electrón en dos condiciones que sirven de referencia: El comportamiento de las trayectorias a bajas presiones, y la aplicación de campos débiles.

4.1. Comportamiento de los Electrones a Baja Presión

Al tener un campo homogéneo perpendicular a las placas el movimiento en el plano horizontal no depende directamente del campo. Este desplazamiento se encuentra relacionado con la abundancia de las moléculas. Por lo tanto se espera que las variables horizontales (x, y) reflejen un comportamiento similar al que se produciría en un movimiento con colisiones aleatorias en dos dimensiones.

Uno de los aspectos a analizar es la relación entre la media del cuadrado de la dispersión $\langle r^2 \rangle$ y el tiempo transcurrido. Dado que, la aparición de una relación lineal es característica de un movimiento aleatorio. La *Figura 4.1* muestra la dispersión de los impactos (r^2) respecto al tiempo de arribo entre las placas para una presión de para 3.8mmHg; la presión más baja analizada en este estudio. Se observa que el valor medio cuadrado de los impactos $\langle r^2 \rangle$ sigue una relación lineal con respecto al tiempo de vuelo. Sin considerar los datos dispersos, sino solo aquellos con una mínima incidencia en el patrón, ésta relación se encuentra mejor definida para el campo eléctrico de $1 \times 10^2 \text{V/m}$ en comparación con $3 \times 10^6 \text{V/m}$.

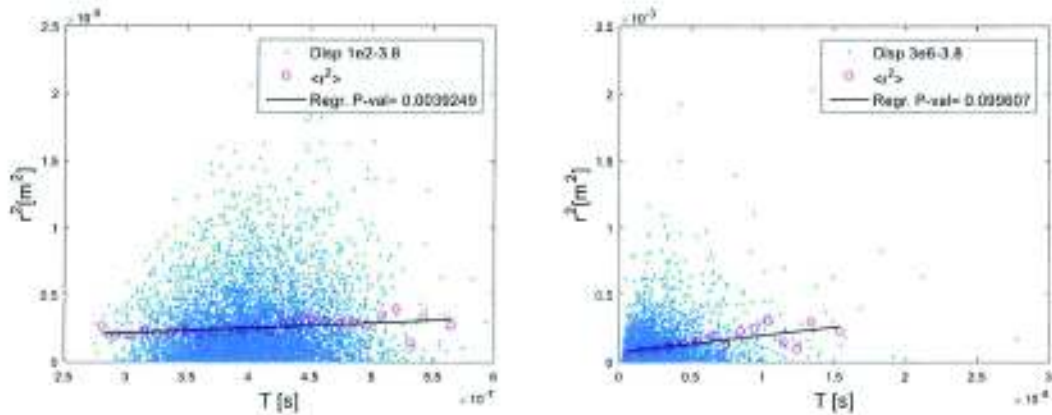


Figura 4.1: Dispersión de $\langle r^2 \rangle$ en función del tiempo para presión de 3.8mmHg en campos eléctricos de $1 \times 10^2 \text{ V/m}$ y $3 \times 10^6 \text{ V/m}$

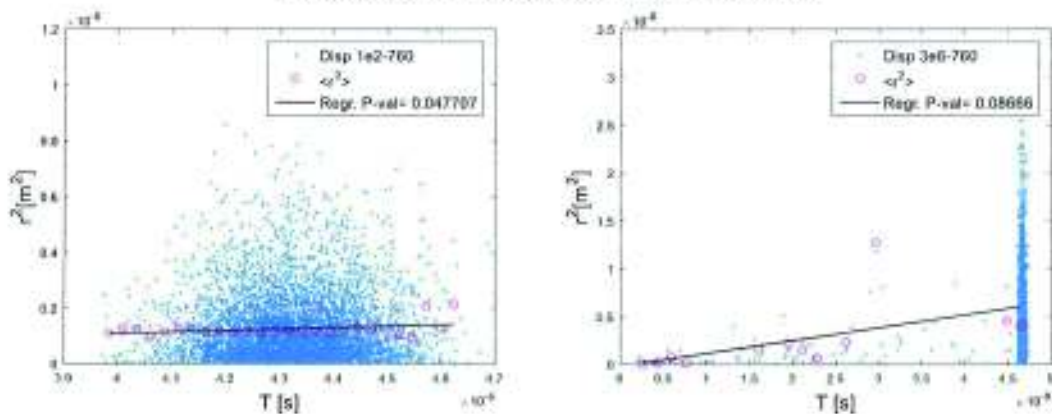


Figura 4.2: Dispersión de $\langle r^2 \rangle$ en función del tiempo para 1×10^2 y $3 \times 10^6 \text{ V/m}$ a 760mmHg

Los registros presentan el mismo comportamiento a presión atmosférica, Figura 4.2. De manera formal esta conducta, de $\langle r^2 \rangle$, implica una menor significancia respecto al ajuste con la línea recta, lo cual se traduce en un mayor valor de P.

La dispersión de los impactos para distintas condiciones se cuantifica mediante la desviación estándar (σ_x) de los puntos de impacto. La tabla a continuación expone su variación en relación a los valores de presión y campo eléctrico estudiados.

		Presión mmHg					
		3,8	7,6	19	38	76	760
Campo Eléctrico	1,0E02	0,00112191	0,00090177	0,00063133	0,00048995	0,00038757	0,00024526
	3,0E02	0,00090756	0,00075942	0,00055115	0,00042453	0,00032711	0,00016401
	1,0E04	0,00059668	0,00045235	0,00031693	0,00025265	0,00019475	9,1174E-05
	1,0E05	0,00057515	0,0003905	0,00024763	0,00018254	0,00014237	6,3657E-05
	1,0E06	0,00642375	0,00505711	0,00048902	0,00018011	0,00012271	4,7291E-05
	1,5E06	0,00650934	0,00604541	0,00252737	0,00018268	0,00012582	4,5912E-05
	3,0E06	0,00675527	0,00648191	0,00596052	0,00322075	0,00013214	4,4404E-05

Tabla 4.1. Desviación Estándar en función de la presión

Estos resultados muestran (**Figura 4.3**) que la dispersión de los datos es mucho mayor cuando la presión es baja. Este comportamiento se relaciona con el menor número de colisiones a bajas presiones.

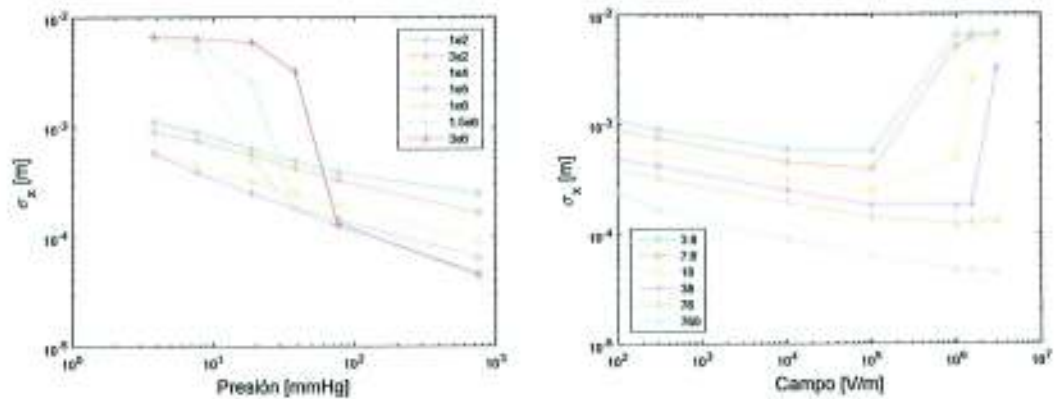


Figura 4.3: Desviación estándar σ_x en función de la presión (izq), y en función del campo eléctrico (der)

Siguiendo el razonamiento anterior se muestra el número de colisiones y su variación con la presión. La **Figura 4.4** presenta claramente un número mayor de colisiones al aumentar la presión para cualquiera de las condiciones de campo eléctrico.

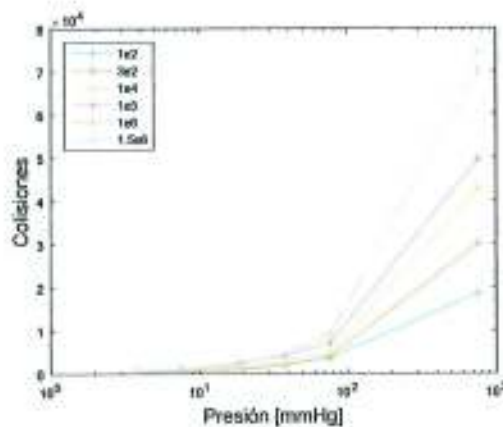


Figura 4.4: Número medio de colisiones en función de la presión

Por otro lado la conducta de la desviación estándar en el plano horizontal no depende de la orientación del eje examinado. Esto puede observarse en la **Figura 4.5**, donde la desviación estándar analizada en el plano xz es completamente similar al caso en el plano yz.

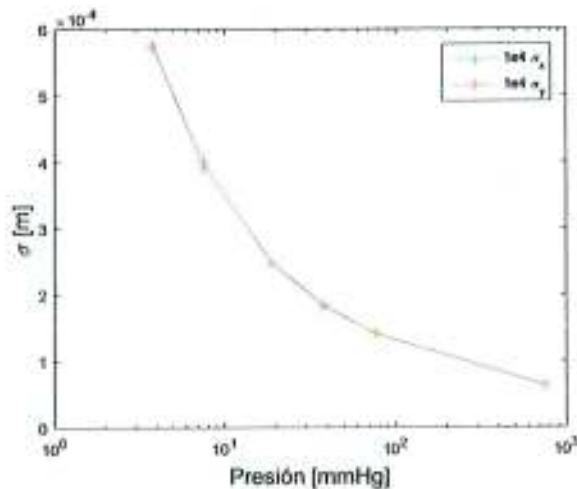


Figura 4.5: Desviación estándar en las coordenadas x , y en función de la Presión

Para concluir, cabe señalar que la importancia de la desviación estándar es su relación con el valor medio de las variables. En todos los casos analizados, el valor medio de los desplazamientos sobre cada eje es cero. Lo cual es consistente con un movimiento aleatorio, y se comprueba al verificar los valores medios de las variables x y y son mucho más pequeños de su desviación estándar. Como muestra la Tabla 4.2 presenta un caso particular de la variación de la media en las coordenadas x y en función de la presión cuando se aplica un campo de $1 \times 10^5 \text{V/m}$.

	Presión en mmHg					
$1e5 \text{ V/m}$	3,8	7,6	19	38	76	760
$\langle x \rangle$	-1,819E-06	-2,08974E-06	-5,20876E-06	3,0239E-06	7,5627E-07	1,4787E-06
sd x	0,00057636	0,000391944	0,000246704	0,00017812	0,00013982	6,1156E-05
$\langle y \rangle$	3,2937E-06	-1,89555E-06	1,71403E-06	-0,138645	-2,127E-06	7,65512E-06
sd y	0,000574375	0,000400725	0,000250391	0,000183599	0,000139189	6,60989E-05

Tabla 4.2. Variación de $\langle x \rangle$, $\langle y \rangle$ en función de la presión, para un campo de 10^5V/m

4.2. Influencia del Campo Eléctrico

El campo eléctrico actúa sobre los electrones dotándoles de una aceleración proporcional a la intensidad del mismo, perpendicular a las placas. Por lo tanto se espera que, con la misma velocidad inicial, el alcance disminuya al aumentar el módulo de la aceleración. La extensión de esta idea a las trayectorias generadas da como resultado que éstas se encuentren confinadas a una región más estrecha; en torno al eje perpendicular al aumentar la intensidad del campo. Esto se traduce

en patrones de dispersión más localizados, si se aumenta la intensidad del campo manteniendo las demás condiciones constantes.

Para la validación del código se realizó un seguimiento al valor del radio como función del campo eléctrico; con presión constante. El radio utilizado para este análisis (Tabla 4.3) fue el radio medio de la distribución acumulativa de los patrones de dispersión, o radio característico.

Campo V/m	$r_{0.5}$ [m]	
	76 mmHg	760 mmHg
1,00E02	1,8794E-07	7,3158E-08
3,00E02	1,3722E-07	3,26549E-08
1,00E04	5,0553E-08	9,9764E-09
1,00E05	2,4277E-08	5,7884E-09
1,00E06	2,0233E-08	2,75549E-09
1,50E06	2,1036E-08	2,62963E-09
3,00E06	2,4359E-08	2,62318E-09

Tabla 4.3. Radio característico vs Campo eléctrico

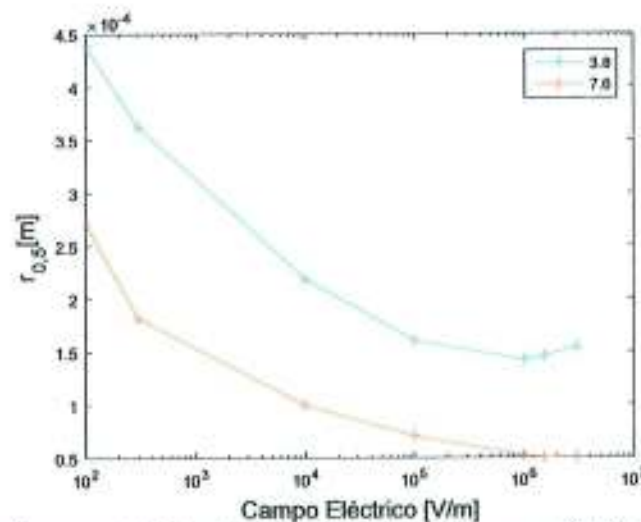


Figura 4.6: Radio característico ($r_{0.5}$) en función del campo eléctrico para presiones de 3.8 y 7.6mmHg

En estos resultados, y los presentados en la sección anterior, se observa que el algoritmo reproduce dos comportamientos específicos de los electrones en un campo homogéneo. El primero, la conducta que presentaría un electrón en el plano perpendicular al campo, corresponde al movimiento de cualquier partícula sometida a colisiones aleatorias en dos dimensiones. El segundo caso refleja el efecto que tiene la aceleración sobre las trayectorias parabólicas entre las colisiones.

Capítulo 5

Resultados y Discusión

En este capítulo se presentan los resultados obtenidos en la simulación del movimiento de electrones de inyección entre dos placas paralelas a 0,01m (1cm) de distancia. El experimento se desarrolló en varios casos de presión y campo eléctrico, manteniendo constantes las condiciones de temperatura y distancia entre las placas y asumiendo la no alteración del campo debido a electrones liberados en las ionizaciones. Se analizaron seis valores de presión: de 3,8; 7,6; 19; 38; 76 y 760mmHg. Estas presiones se analizaron con siete valores de campo eléctrico: 1×10^2 , 3×10^2 , 1×10^4 , 1×10^5 , 1×10^6 , $1,5 \times 10^6$ y 3×10^6 V/m.

5.1. Trayectorias

La simulación de cada ensayo constituye el desplazamiento de un electrón por separado. A este nivel se puede observar un rango de velocidades y frecuencias de colisión que está relacionado con las condiciones de presión y campo eléctrico sobre el sistema. Además que se puede observar las trayectorias completas por separado, gracias a que el código almacena esta información en archivos externos. Los archivos de las trayectorias contienen la información de los puntos de colisión. Estas son las posiciones donde los electrones interactúan con las moléculas del medio, donde se determina de qué manera el electrón es dispersado, si existe una transferencia de energía, si las moléculas se disocian o si el electrón es absorbido. Sin embargo la principal importancia de estos puntos a nivel global radica en que trazan un camino a través del medio. Y según la teoría sobre los electrones de inyección, bajo las condiciones adecuadas este camino presenta una concentración de iones que favorece la formación de un canal de conducción.

En las figuras 5.1 a 5.4 se muestran trayectorias típicas para diferentes condiciones estudiadas de presión y campo eléctrico.

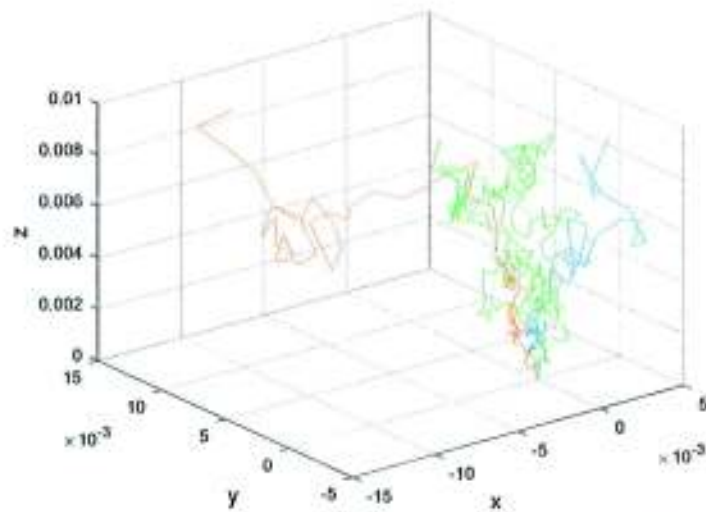


Figura 5.1: Trayectorias típicas con presión de 7,6mmHg y campo de 1×10^6 V/m.

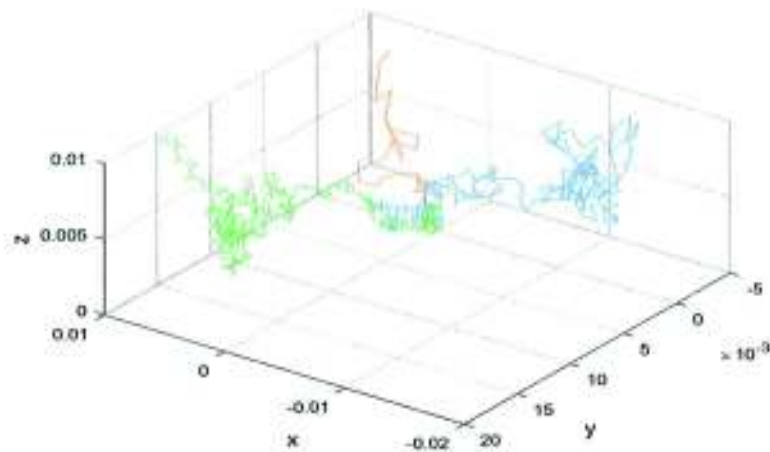


Figura 5.2: Trayectorias típicas con presión de 7,6mmHg y campo de 3×10^6 V/m.

Las imágenes Figura 5.1 y Figura 5.2 muestran las trayectorias de tres electrones; en condiciones de 7,6mmHg de presión, y campo de 1×10^6 y 3×10^6 V/m respectivamente. Se observa que para esta presión la dispersión horizontal es mayor en el caso de 3×10^6 V/m, como también es mayor el número de colisiones.

Las figuras Figura 5.3 y Figura 5.4 presentan trayectorias para 1×10^6 y 3×10^6 V/m para una presión de 76mmHg. Con esta presión los electrones ya no poseen la misma libertad para moverse en el plano horizontal. La acción del campo se

muestra mucho más dominante que en los casos anteriores. Como consecuencia se los electrones sometidos al campo de $3 \times 10^6 \text{V/m}$ poseen menor dispersión horizontal que aquellos bajo la acción del campo de $1 \times 10^6 \text{V/m}$.

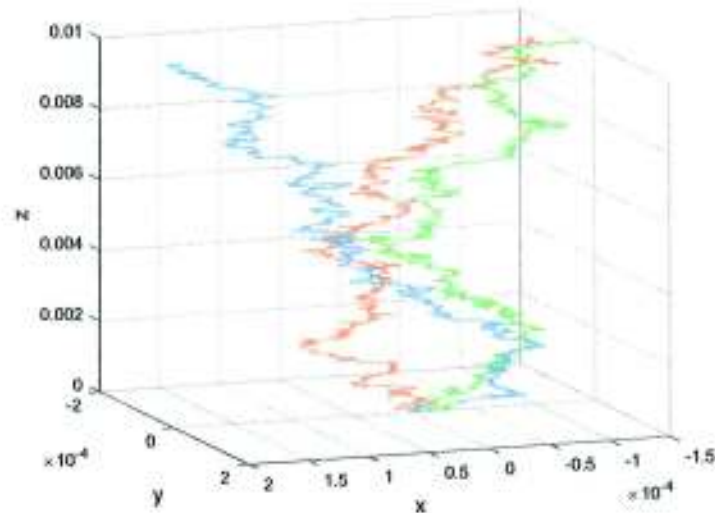


Figura 5.3: Trayectorias típicas con presión de 76mmHg y campo de $1 \times 10^6 \text{V/m}$.

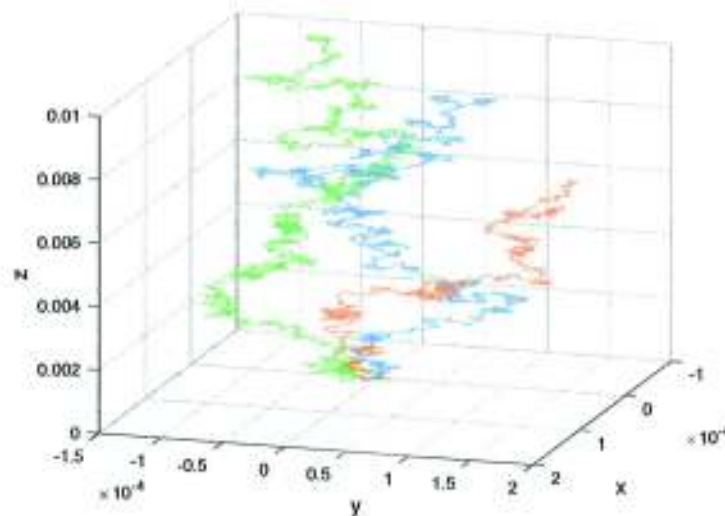


Figura 5.4: Trayectorias típicas con presión de 76mmHg y campo de $3 \times 10^6 \text{V/m}$.

Aunque las trayectorias nos permiten tener una descripción cualitativa se requiere un trabajo previo para diferenciar de mejor manera sus características y poder compararlas. En este caso lo que nos interesa es conocer la concentración de las trayectorias a determinada distancia del punto de partida, a éste también se lo denomina: patrón de dispersión.

5.2. Patrones de Dispersión

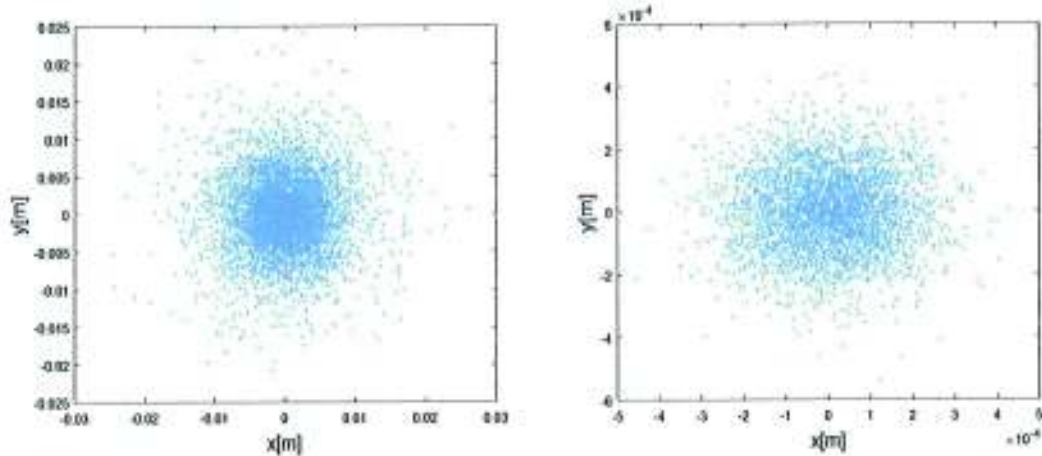


Figura 5.5: Registro de impactos sobre la placa de llegada. Casos de 7,6 y 76mmHg respectivamente, para un campo de $1 \times 10^6 \text{V/m}$.

El patrón de dispersión consiste en la distribución de los puntos de impacto de los electrones sobre la placa de llegada (Figura 5.5). Se observó que los puntos en estas distribuciones se acumulan en torno a un centro, sin embargo este centro en general no presenta la máxima frecuencia de impactos. Ya que existen una o varias regiones cercanas al centro con frecuencias superiores a éste. Esto puede observarse en las ejemplos a continuación:

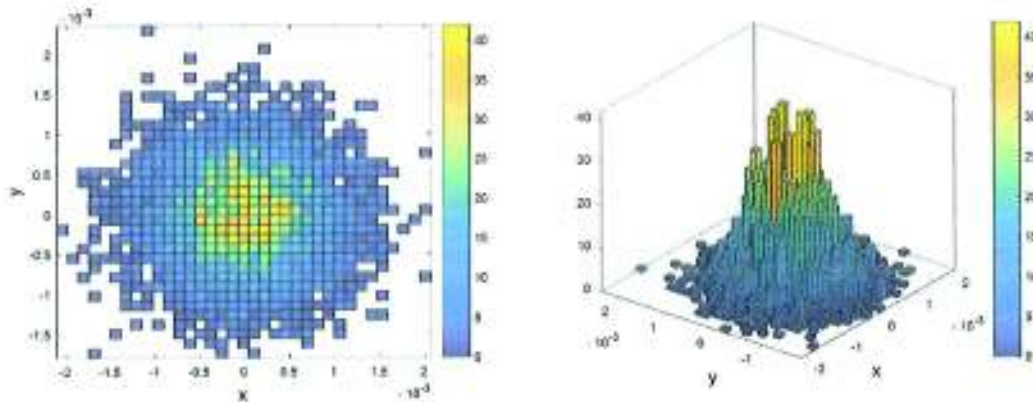


Figura 5.6: Registro de frecuencia de impactos sobre la placa de llegada. Caso de 3,8mmHg y $1 \times 10^5 \text{V/m}$.

La Figura 5.6 presenta la distribución de impactos para una presión de 3.8mmHg y un campo de $1 \times 10^5 \text{V/m}$. Se observan dos regiones de frecuencia máxima: la primera en $(-0,2; -0,3) \times 10^{-3} \text{m}$ y otra en $(-0,1; 0,2) \times 10^{-3} \text{m}$. Además existe una región

cercana a la primera posición que agrupa varias regiones con impactos superiores a regiones más cercanas al centro.

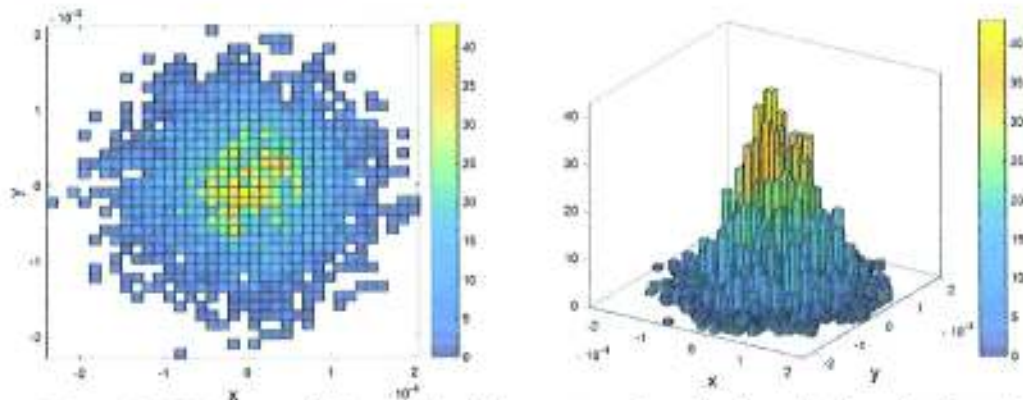


Figura 5.7: Registro de frecuencia de impactos sobre la placa de llegada. Caso de 760mmHg y 1×10^5 V/m.

En el caso de presión 760mmHg y campo 1×10^5 V/m los impactos están mucho más concentrados que en el caso anterior. Aunque dos regiones de alta frecuencia están en contacto con el centro, otra de éstas presenta un valor bajo en relación a regiones más alejadas. Al igual que en el caso anterior, regiones de alta o media frecuencia se agrupan distantes del centro de la distribución.

Para tornar la información que estas distribuciones contienen a un formato más accesible se construye una función de distribución de las distancias de cada punto al eje perpendicular entre el punto de partida y la segunda placa (*Figura 3.3*). De esta manera, se realiza un conteo de los impactos por su radio entre el punto más corto entre la placa de llegada y el punto de partida (*Figura 5.8*). Y con esta información se puede cuantificar la dispersión de los ensayos. Cada patrón de dispersión consta de 5000 ensayos similares a los presentados en la sección anterior (*Figura 5.1 a 5.4*); para cada caso de presión y campo eléctrico.

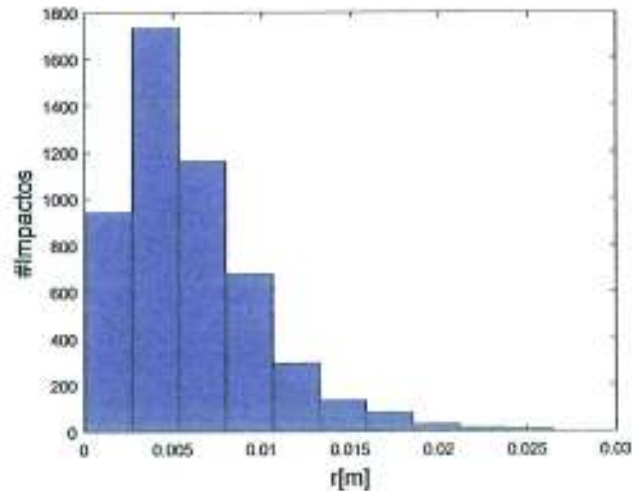


Figura 5.8: Patrón de impactos con campo de $1 \times 10^6 \text{V/m}$ y presión 7,6mmHg.

Estas distribuciones se representan a través de diferentes magnitudes como el radio mínimo, la moda, la media y el máximo. Para el presente estudio se optó por caracterizar cada patrón de dispersión por el radio que recoge el 50% de los ensayos en la distribución acumulativa inversa de cada caso (*Figura 5.9*). A esta magnitud se la ha denominado radio característico ($r_{0,5}$). Tras el análisis de los datos procedentes de los diferentes casos de estudio se obtuvo la variación del radio característico que se presenta en la siguiente tabla.

		Presión mmHg					
		3,8	7,6	19	38	76	760
Campo Eléctrico	$r_{0,5}[\text{m}]$						
	1,0E02	0,001245	0,00099159	0,00071211	0,00053935	0,00043836	0,00027072
	3,0E02	0,00099315	0,00082291	0,00061472	0,00048033	0,00036214	0,00018203
	1,0E04	0,00066082	0,00049632	0,00034731	0,00027706	0,00021887	9,9636E-05
	1,0E05	0,00063238	0,00043451	0,00027491	0,00020405	0,00016031	7,0459E-05
	1,0E06	0,00588502	0,00469024	0,00022696	0,000202	0,00014232	5,2347E-05
	1,5E06	0,00630736	0,00569287	0,00127742	0,00021186	0,00014605	5,0205E-05
3,0E06	0,00627971	0,00615654	0,00564207	0,00169189	0,00015461	5,0545E-05	

Tabla 5.1: Radio característico versus la presión

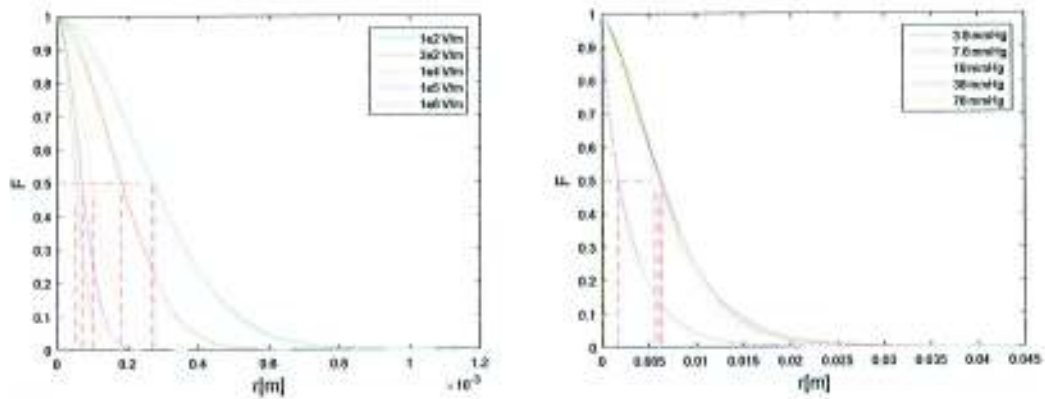


Figura 5.9: Múltiples distribuciones de acumulación inversas a 760mmHg y 3e6V/m, respecto a diferentes valores de campo y presión respectivamente.

Al observar el cambio del radio característico para las diferentes condiciones de presión o de campo se observa que se encuentra una tendencia uniforme, en la escala logarítmica, entre 1×10^2 V/m y 1×10^5 V/m. El radio característico disminuye en todos los casos de presión, pero por sobre este valor la tendencia se mantiene solamente para presiones altas. Como se observa en la **Figura 5.10** los perfiles de presiones por debajo de 38mmHg presentan un cambio bastante marcado en la tendencia.

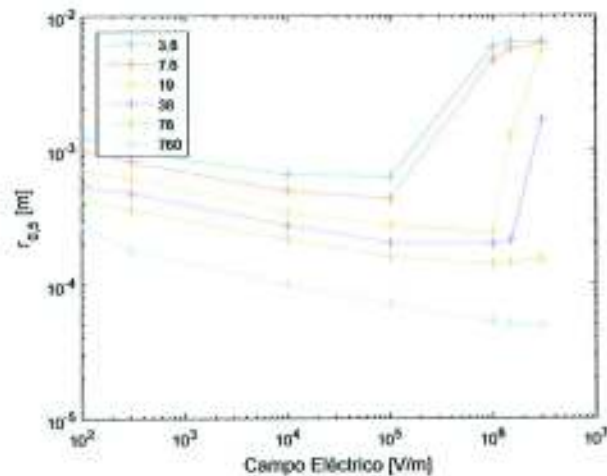


Figura 5.10: Variación del radio característico en función del campo, para diferentes presiones.

Este comportamiento que refleja el descenso del radio al incrementar el campo ya fue observado en trabajos previos sobre las mismas condiciones de presión y

campo [7]. La Figura 5.11 muestra como la tendencia que se mantiene, similar para las diferentes presiones, hasta 1×10^5 V/m.

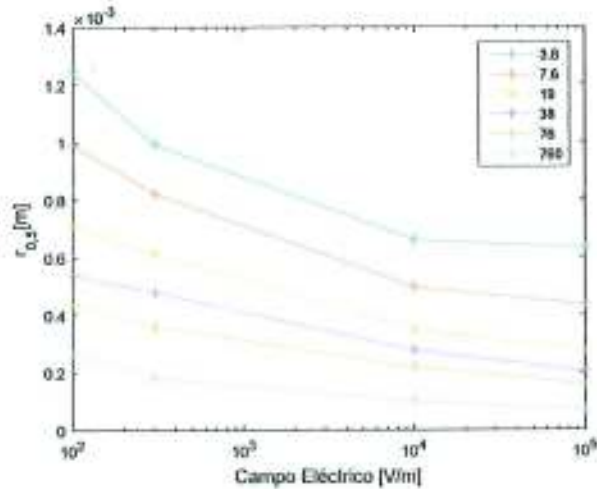


Figura 5.11 Variación del radio característico según el campo, hasta 10^5 V/m.

Una mejor manera de ilustrar esta característica es con las ecuaciones que se ajustan a esta tendencia, que para los valores mostrados en la Figura 5.11 corresponden a una relación del tipo:

$$r_{0,5} = c_1 E^{c_2} \tag{5.1}$$

Donde los coeficientes en la ecuación para cada caso de presión son:

P[mmHg]	c ₁	c ₂	R
3,8	0,0018	0,099	0,9236
7,6	0,0017	0,122	0,9718
19	0,0012	0,128	0,9832
38	0,0009	0,117	0,9475
76	0,0007	0,118	0,9676
760	0,0005	0,168	0,9828

Tabla 5.2: Índices de ajuste para la relación (5.1), junto al correspondiente coeficiente de correlación R.

El radio característico también muestra un cambio de tendencia al observar su relación con la presión, manteniendo constante el campo eléctrico. En este caso (Figura 5.12), se observa un comportamiento marcadamente diferente para las curvas con campo eléctrico mayor a 1×10^6 V/m.

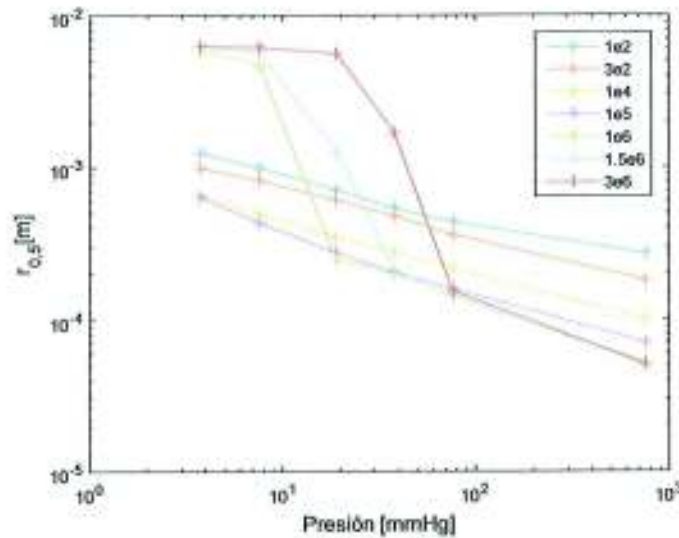


Figura 5.12: El radio característico según la presión para diferentes campos eléctricos.

Al igual que en el caso anterior existe una relación potencial entre el radio y la presión, considerando solo los casos con campo menor a $1 \times 10^6 \text{V/m}$ se tiene.

$$r_{0,5} = c_3 P^{c_4} \quad (5.2)$$

Donde los coeficientes en la ecuación para cada caso de presión son:

E [V/m]	c_3	c_4	R
1,00E+02	0,0017	-0,293	0,9779
3,00E+02	0,0016	-0,326	0,9978
1,00E+04	0,001	-0,354	0,9984
1,00E+05	0,001	-0,41	0,9897

Tabla 5.3: Índices de ajuste para la relación (5.2), junto al correspondiente coeficiente de correlación R.

Tanto este resultado como el presentado en la *Figura 5.10* como en la *Figura 5.12* denotan que existe una discontinuidad en el comportamiento cuando el campo eléctrico alcanza valores de $1 \times 10^6 \text{V/m}$. Por lo que la descripción de este comportamiento requiere una relación más compleja que las mostradas en las ecuaciones (5.1) y (5.2).

5.3. Ionizaciones y Absorciones en las Trayectorias

La presencia de ionizaciones en las trayectorias de los electrones de inyección es un fenómeno de interés desde la perspectiva de las descargas eléctricas a través

del gas. Además de conocer la cantidad de ionizaciones provocadas por el electrón es importante conocer la cantidad de carga liberada en la trayectoria. Es decir, considerar también la posibilidad de la doble ionización.

		Presión mmHg					
Colisión		3,8	7,6	19	38	76	760
Campo Eléctrico V/m	1,0E02	220,2418	427,8238	1030,0316	1972,79712	3698,9572	18500,478
	3,0E02	402,1262	449,90549	1078,89614	2101,4368	4061,579	30100,0061
	1,0E04	420,2742	725,3216	1517,25489	2713,258	4975,2503	42896,0264
	1,0E05	492,9286	1016,00324	2522,3132	4203,71924	7238,5502	49760,887
	1,0E06	262,2104	541,973	2240,9501	4594,6817	9278,965	70067,2229
	1,5E06	213,228	474,7904	1806,7664	4546,3479	8640,58	74750,029
	3,0E06	218,5926	395,948	1118,394	3277,996	8444,688	85954,912

Tabla 5.4: Número medio de colisiones en función de la presión y el campo eléctrico

En este análisis es importante tomar en consideración el número de colisiones. Puesto que si éste se incrementa, bajo condiciones favorables, el número de ionizaciones también lo hace. Como se muestra en la *Tabla 5.4* el número de colisiones depende de la presión y de campo aplicado. En la *Figura 5.13* se observa el incremento progresivo de las colisiones hasta un máximo entre 10^5 y 10^6 V/m; a partir ese valor la tendencia se revierte.

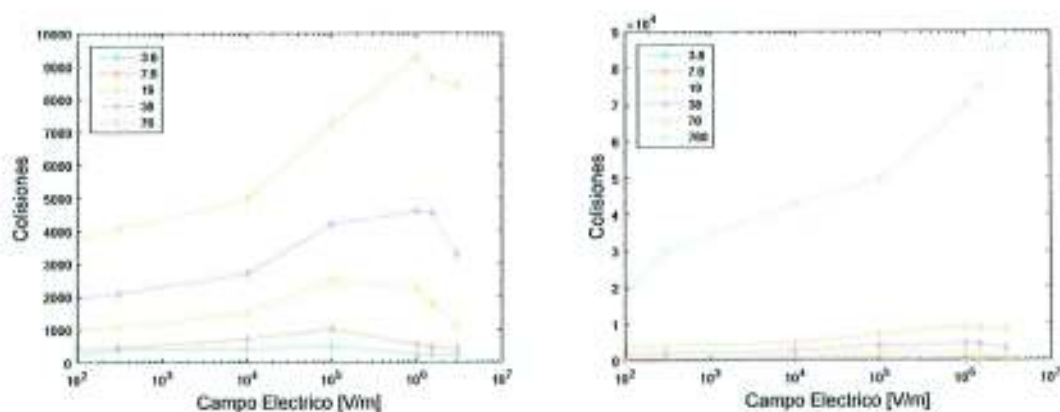


Figura 5.13: Número medio de colisiones en función del campo eléctrico.

Este comportamiento se presenta en condiciones de presión baja; con un máximo que se incrementa según aumenta la presión. Sin embargo al aumentar más la presión se obtiene un comportamiento diferente; como se observa en la última sección de la curva correspondiente a 76mmHg. Resultando que para la presión atmosférica el número de colisiones en función del campo se diferencia de manera significativa (*Figura 5.13* derecha).

Una vez considerada la variación del número de colisiones es interesante conocer cuántas de estas colisiones resultan en una ionización. Para ello es más práctico registrar el porcentaje de ionizaciones. Es decir, considerando el número de colisiones ¿cuántas originaron una ionización o una doble ionización?

Los registros a continuación (Tablas 5.5 y 5.6) muestran el valor medio de las ionizaciones ocurridas bajo diferentes condiciones. Cabe destacar que en este estudio se encontró que no existían ionizaciones por debajo de $1 \times 10^5 \text{V/m}$, por lo que este fenómeno está ligado claramente a un campo eléctrico alto.

		Presión mmHg					
Ion i		3,8	7,6	19	38	76	760
Campo Eléctrico V/m	1,0E04	0	0	0	0	0	0
	1,0E05	0,1112	0,00176626	0	0	0	0
	1,0E06	14,838	48,1982	51,24009	3,973849	0,1223545	0
	1,5E06	21,3934	66,1648	112,1841	9,1546	1,993967	0,01457072
	3,0E06	4,3214	9,430833	44,5856	190,2573	22,82537	0

Tabla 5.5: Ionizaciones simples en función de la presión y campo eléctrico

		Presión mmHg					
Ion ii		3,8	7,6	19	38	76	760
Campo Eléctrico V/m	1,0E04						
	1,0E05	0	0	0	0	0	0
	1,0E06	1,644	2,513514	0,1766345	0,00067054	0	0
	1,5E06	1,412	2,2112	2,538581	0,0196	0	0
	3,0E06	1,3426	1,614246	2,9918	4,515055	0,046875	0

Tabla 5.6: Ionizaciones simples en función de la presión y campo eléctrico

Usando esta información se obtiene un porcentaje de ionización, es decir cuántas colisiones dieron lugar a ionizaciones. Este porcentaje es un acercamiento descriptivo de las características de la colisión en cada caso. La frecuencia con la que este fenómeno se presenta (Tabla 5.7 y Tabla 5.8) nos permite conocer qué condiciones estudiadas favorecen que los electrones alcancen la región energética correspondiente a la ionización.

		Presión mmHg					
%Ion i		3,8	7,6	19	38	76	760
Campo Eléctrico V/m	1,0E04	0	0	0	0	0	0
	1,0E05	0,00022795	1,735E-06	0	0	0	0
	1,0E06	0,07003704	0,08958137	0,02318866	0,00086729	1,2986E-05	0
	1,5E06	0,13441352	0,1690605	0,0617834	0,00202284	0,00022723	2,7573E-06
	3,0E06	0,02972132	0,03936767	0,05566312	0,05940296	0,00270844	0

Tabla 5.7: Porcentaje de ionizaciones simples

		Presión mmHg					
%Ion ii		3,8	7,6	19	38	76	760
Campo Eléctrico V/m	1,0E04	0	0	0	0	0	0
	1,0E05	0	0	0	0	0	0
	1,0E06	0,00831778	0,00464334	8,0656E-05	1,4218E-07	0	0
	1,5E06	0,01054002	0,00547685	0,00142041	4,4499E-06	0	0
	3,0E06	0,01429816	0,00760884	0,00355093	0,00143558	5,5692E-06	0

Tabla 5.8: Porcentaje de ionizaciones dobles

El cálculo de estos porcentajes logra disminuir la influencia del número de colisiones sobre la cantidad de ionizaciones. De esta manera se aprecia claramente el efecto de la presión y el campo eléctrico sobre las ionizaciones. La diferencia se puede observar en las figuras 5.14 y 5.15. Las imágenes a la izquierda reflejan el promedio de las ionizaciones y a la derecha el porcentaje de ionizaciones.

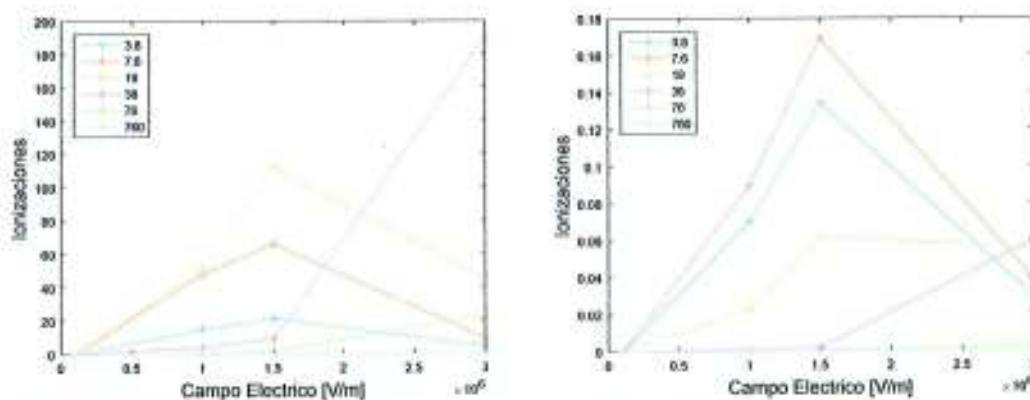


Figura 5.14: Ionizaciones simples en función del campo eléctrico, para diferentes valores de presión.

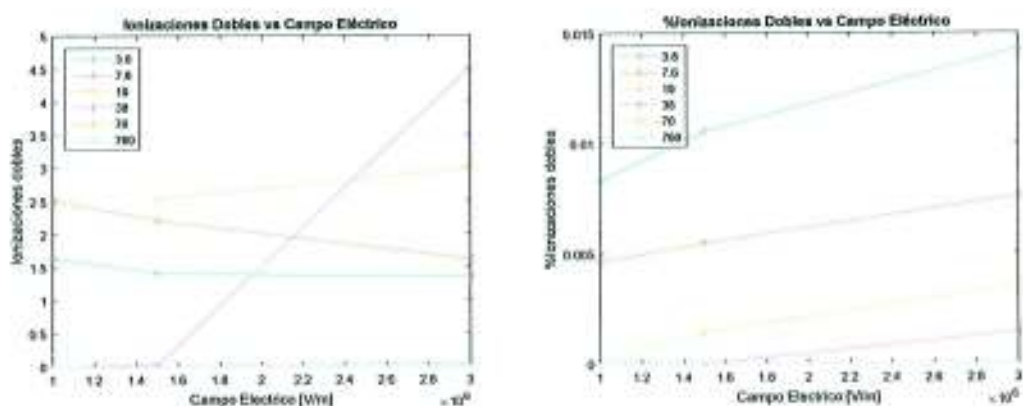


Figura 5.15: Ionizaciones dobles en función del campo eléctrico, para diferentes valores de presión.

Las ionizaciones son solo uno de los tipos de procesos que se producen en la interacción entre el electrón y las moléculas. Otro de los procesos de los cuales es sencillo llevar un registro es la absorción. Aunque a diferencia de la ionización, y de los demás procesos de interacción, este proceso interrumpe la trayectoria del electrón; por lo que de suceder éste no llega a la segunda placa. De manera que este registro de absorciones (*Tabla 5.9*) se realizó sobre el conjunto total de ensayos, contando los electrones absorbidos.

		Presión mmHg					
Absorc		3,8	7,6	19	38	76	760
Campo Eléctrico V/m	1,0E04	0	0	0	0	0	0
	1,0E05	65	81	12	0	0	0
	1,0E06	26	85	228	563	802	0
	1,5E06	34	68	129	516	1052	3
	3,0E06	50	65	178	284	981	98

Tabla 5.9: Absorciones en 5000 ensayos

Estos datos representan solamente una muestra particular de cinco mil ensayos en la cual se cuentan cuantos electrones no logran atravesar el dieléctrico entre las placas. Se observa (*Figura 5.16*) que existe una mayor tendencia creciente ante el aumento de la presión en el caso de $1,5 \times 10^6$ V/m. Pero en todos los casos el número de absorciones disminuye por sobre los 76mmHg. Esto es indicio de que las colisiones ocurren fuera de la región de la absorción. Se debe recordar que para este valor de presión y campo el número de colisiones comienza a mostrar signos de un cambio de tendencia (*Figura 5.13*).

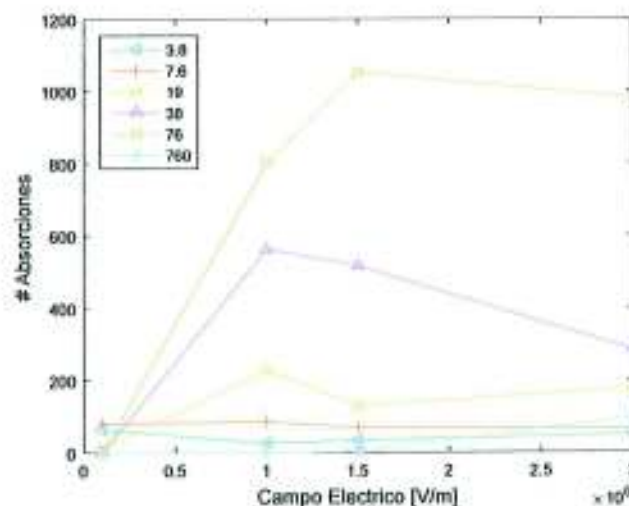


Figura 5.16: Absorciones por cada 5000 ensayos, en función del campo eléctrico

Tanto las ionizaciones como las absorciones dependen de que los electrones alcancen las correspondientes regiones energéticas de colisión. Esto involucra el tiempo de vuelo libre y la distancia entre las moléculas. La primera magnitud se relaciona con la intensidad del campo y la segunda con la presión del gas.

5.4. Tiempo de Vuelo Libre Medio

El tiempo de vuelo libre está relacionado con la energía de colisión, por lo que esta magnitud establece la región energética involucrada en la interacción. Es decir que una mejor comprensión del comportamiento del tiempo de vuelo libre medio permite determinar qué tipo de colisiones están disponibles para los electrones. La *Tabla 5.10* muestra la variación de esta magnitud a través de las diferentes condiciones analizadas.

		Presión mmHg					
<Tv>		3,8	7,6	19	38	76	760
Campo Eléctrico	1,0E02	1,8175E-09	1,3087E-09	8,5225E-10	6,2628E-10	4,6828E-10	2,3363E-10
	3,0E02	9,4906E-10	7,3193E-10	4,7483E-10	3,4274E-10	2,4947E-10	1,0036E-10
	1,0E04	1,2655E-10	9,6633E-11	6,751E-11	5,0929E-11	3,7921E-11	1,3065E-11
	1,0E05	3,5025E-11	2,4559E-11	1,6415E-11	1,265E-11	9,6702E-12	3,792E-12
	1,0E06	2,5166E-11	1,1957E-11	5,0339E-12	3,5475E-12	2,5E-12	1,0066E-12
	1,5E06	2,3965E-11	1,4294E-11	4,6188E-12	2,9315E-12	2,0673E-12	8,0171E-13
	3,0E06	1,9166E-11	1,3565E-11	6,7562E-12	2,6675E-12	1,4937E-12	5,3742E-13

Tabla 5.10: Tiempo de vuelo libre medio en función de la presión y campo eléctrico.

Los datos reflejan que el tiempo de vuelo libre medio en el gas disminuye tanto con el incremento de presión como con el incremento del campo eléctrico. En el primer caso al aumentar la presión disminuye el espacio entre las moléculas. Y en relación a la presión, si esta aumenta los electrones recorren una mayor distancia en menos tiempo.

Al trasladar esta información a un gráfico (*Figura 5.17*) se observa una conducta bastante regular para todas las condiciones de presión. La excepción a esta tendencia se presenta como una pequeña desviación en los casos que combinan una baja presión y alto valor de campo eléctrico.

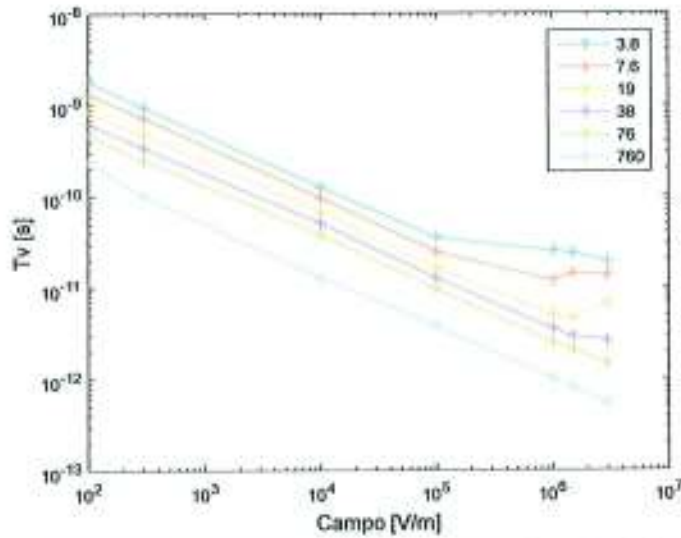


Figura 5.17: Tiempo de vuelo libre medio en función del campo.

De igual manera se observa en la *Figura 5.18* la variación del tiempo de vuelo medio en relación al cambio en la presión, incluyendo una alteración en la tendencia para campos altos.

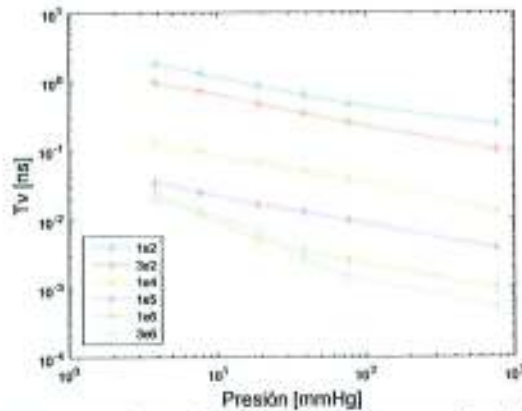


Figura 5.18: Tiempo de vuelo libre medio como función de la presión

Resulta interesante que las condiciones que presentan esta desviación a la tendencia, también presentan un cambio de tendencia al analizar el radio característico de los patrones de dispersión, *Figura 5.10* y *Figura 5.12*.

5.5. Región de Cambio de Tendencia

En las secciones anteriores se observó que la evolución de las magnitudes analizadas, presión (*Figura 5.12*) y campo eléctrico (*Figura 5.10*), presentan un

marcado cambio de tendencia. Esta conducta está vinculada a los campos eléctricos del orden de 10^6V/m . Tras un análisis más minucioso de los patrones de dispersión se encontró que los puntos de cambio de tendencia presentan perfiles distintos al resto de casos, en la función de acumulación.

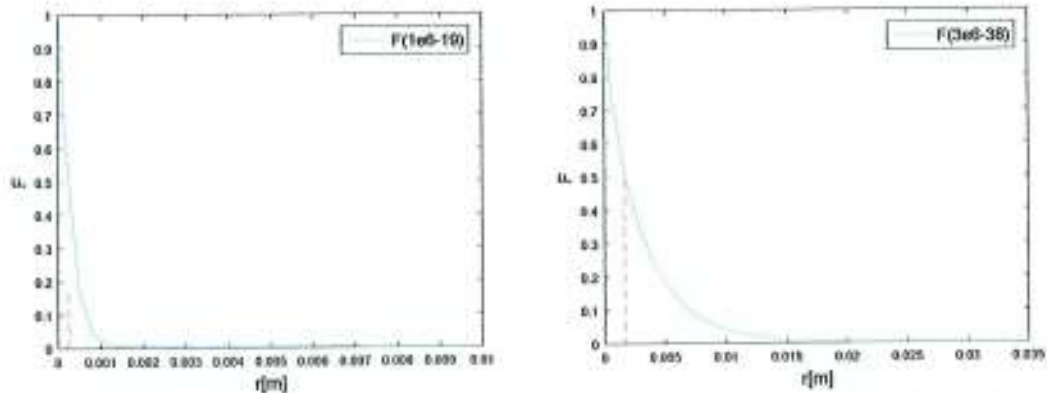


Figura 5.19: Distribuciones acumulativas inversas en la región del cambio de tendencia.

Como se puede apreciar en la *Figura 5.19* existe una rápida caída de la frecuencia acumulada en relación a la dispersión de las observaciones. Estas observaciones corresponden a los casos $\{1 \times 10^6\text{V/m}; 19\text{mmHg}\}$ y $\{3 \times 10^6\text{V/m}; 38\text{mmHg}\}$. Mientras que el comportamiento típico muestra una distribución inicialmente convexa que revierte hacia cóncava al aumentar la distancia. Ejemplos de esta conducta son los casos $\{1 \times 10^4\text{V/m}; 19\text{mmHg}\}$ y $\{3 \times 10^6\text{V/m}; 760\text{mmHg}\}$ en la *Figura 5.20*.

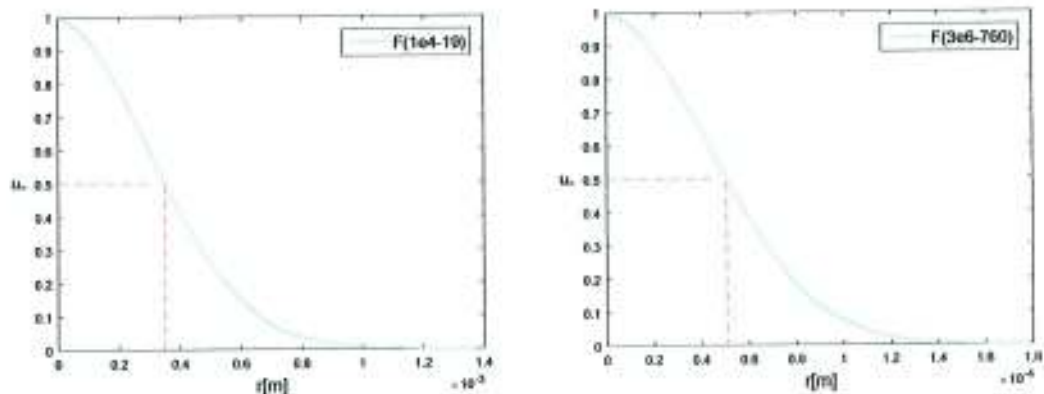


Figura 5.20: Distribuciones acumulativas inversas de patrones de dispersión.

Una conducta similar se observa también en los histogramas de frecuencia. Éstos además hacen evidente la existencia de registros dispersos respecto a la tendencia principal. Así, las imágenes de la *Figura 5.21* poseen el mismo comportamiento que

el resto de distribuciones en valores cercanos a cero, pero estos casos presentan una cola larga.

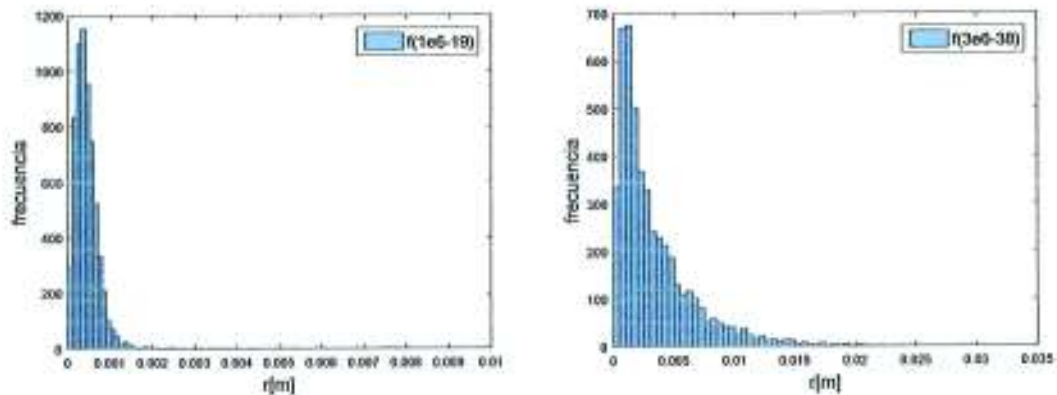


Figura 5.21: Histogramas en la región del cambio de tendencia

En comparación los histogramas de los casos presentados en la **Figura 5.20**, mostrados a continuación, están más localizados con pocos ensayos alejándose de la tendencia general.

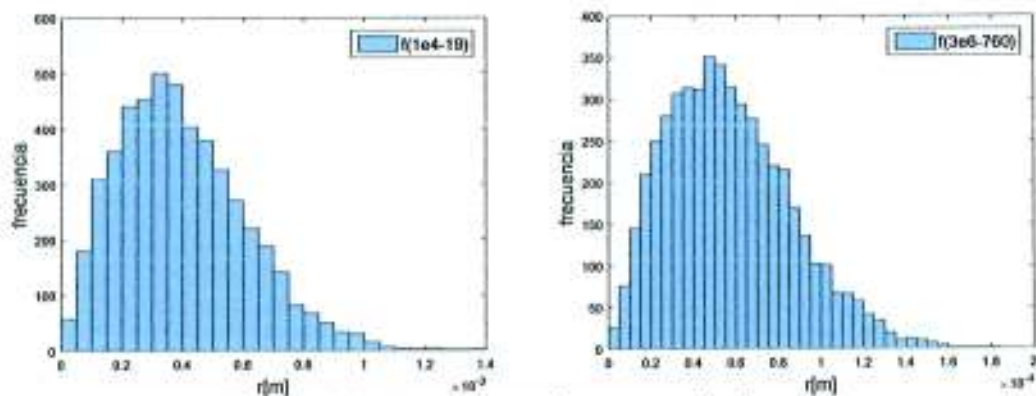


Figura 5.22: Histogramas de patrones de dispersión.

Tras una revisión de los datos obtenidos en las colas de las distribuciones mostradas en la **Figura 5.21**, se pudo observar que en estos casos los ensayos dispersos contenían un alto número de ionizaciones.

Para presentar estos resultados se han elaborado los histogramas de la **Figura 5.23**. En ésta, la frecuencia muestra el número de ensayos con determinado número de ionizaciones. Para el campo de $1,5 \times 10^6 \text{V/m}$, cuando la presión es de 38mmHg existen muchos ensayos con alto registro de ionizaciones. Mientras en los otros casos hay mayor concentración de ensayos con baja ionización.

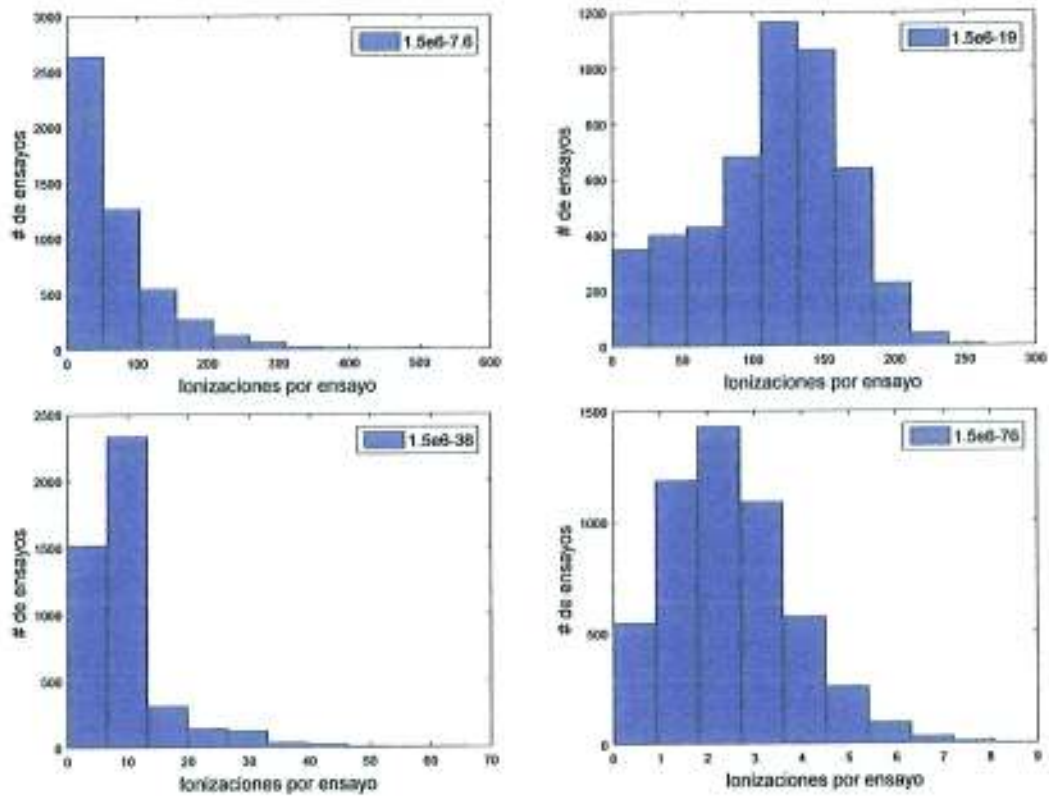


Figura 5.23: Clasificación de los ensayos según su número de ionizaciones.

Aunque estos resultados brindan una explicación sobre la conducta de la función acumulativa inversa de las distribuciones en la región del cambio, la confirmación de ésta requiere de un mayor análisis. Como se expuso en la sección 5.3 el número de ionizaciones está relacionado con la cantidad de colisiones. Aunque también este aspecto presenta peculiaridades en estos puntos. En la **Figura 5.24** las imágenes a la izquierda corresponden a 7,6 mmHg y las de la derecha a 19mmHg. Se nota que a partir de cierto número de colisiones, las ionizaciones muestran una relación inversa.

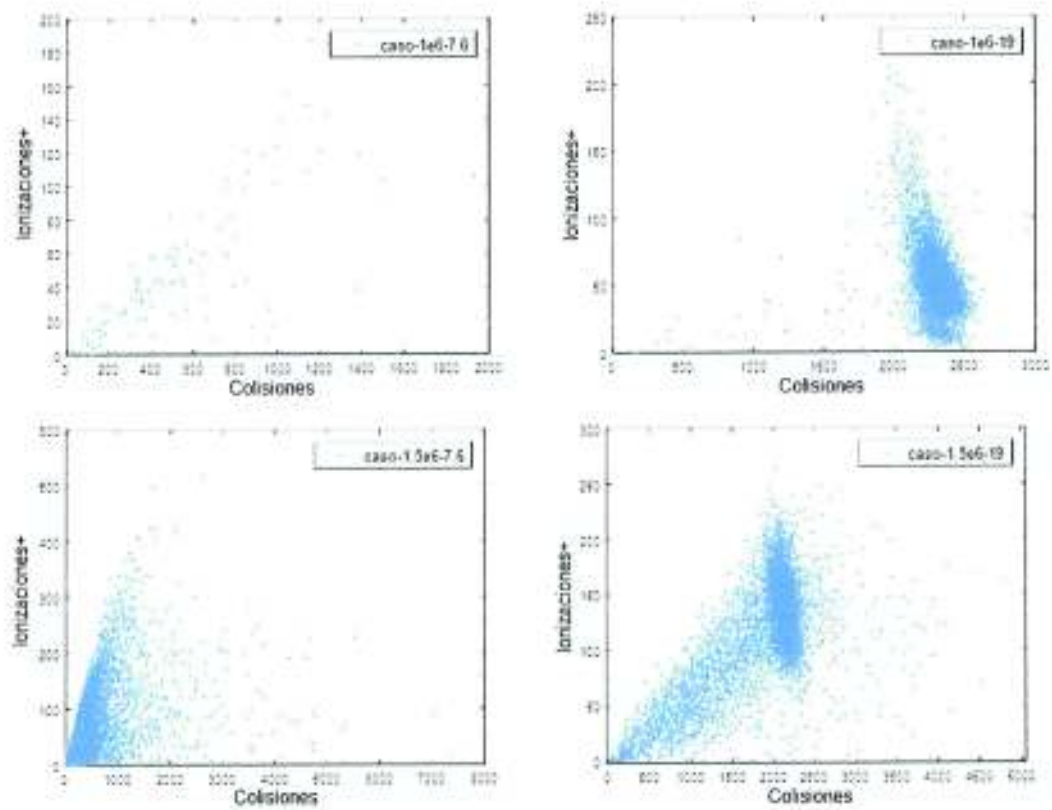


Figura 5.24: Número de ionizaciones versus el número de colisiones.

Capítulo 6

Conclusiones

Hay tres aspectos importantes que deben resaltarse del presente estudio. En primer lugar, el método y estrategia utilizados permiten extender el alcance de estudios anteriores. En segundo lugar, los resultados obtenidos son consistentes con principios físicos conocidos, así como con los resultados obtenidos en trabajos anteriores, principalmente el estudio realizado por Egas M. [7]. En tercer lugar, el estudio aporta con información específica sobre los patrones de dispersión de los electrones dispersados por un gas.

Aunque el algoritmo utilizado en este trabajo se basa en el método de dinámica molecular con interacciones de Montecarlo, se implementó un cambio en la manera como se determina la ocurrencia de las colisiones. La pre-proyección de la trayectoria nos evita tener que ajustar la sección eficaz luego de establecer la posición de colisión. Sin embargo esto implica que el tiempo de cálculo se vea incrementado. Dicho incremento no se presenta como un valor fijo, sino que depende de las condiciones analizadas. Así, el tiempo de cálculo para un ensayo va desde un minuto a veinte y cinco, omitiendo los casos de simulación con muy pocas colisiones o que realizan el viaje directo.

Por otra parte el código, escrito en C++, resulta bastante conveniente al momento de añadir funciones o nueva información a la simulación. Al agruparse varios procesos en distintos bloques; incluir nuevas partículas involucradas y/o nuevos procesos de interacción puede realizarse añadiendo la información de éstos en los bloques respectivos. Esta característica permite la inclusión de átomos y moléculas

diatómicas. La inclusión de otro tipo de moléculas o partículas requiere la introducción de modificaciones a la solución del modelo de dispersión. Así como también permite la inclusión de un potencial no-homogéneo.

Para los datos analizados se observó que la dispersión del radio característico posee una fuerte relación con la presión. De manera que al incrementarse la presión, el movimiento en el plano paralelo a las placas se encuentra progresivamente más restringido. Esto se debe a que el campo no tiene una acción directa sobre el movimiento horizontal de los electrones. La acción indirecta de este se produce a través de las colisiones, en las cuales parte de la energía aportada en el eje vertical afecta la energía de los electrones dispersados. En consecuencia la combinación de campos eléctricos fuertes y bajas presiones producen dispersiones bastante amplias en comparación con el resto de casos. En estas condiciones se producen pocas colisiones y se alcanzan velocidades iniciales altas y longitudes de vuelo libre bastante grandes.

Al analizar los patrones de dispersión se observa que existe un cambio en la tendencia cuando se aplican campos eléctricos altos. No solo el radio característico, sino también el tiempo de vuelo libre medio y el número de colisiones cambian su tendencia cuando el campo eléctrico es del orden de 10^6 V/m. Por debajo de este valor las magnitudes mencionadas siguen una tendencia regular. Pero cuando el campo alcanza los 10^6 V/m la tendencia se interrumpe entre presiones de 19 y 76mmHg, retomándose desde otro valor más adelante. Esto resulta interesante debido a que la rigidez dieléctrica del aire seco es de 3×10^6 V/m. Por lo que se espera que en ese rango se produzca un cambio en las propiedades conductivas [1] [2].

Se observó que las ionizaciones, simples y dobles, solo se presentaron para campos eléctricos del orden de 10^6 V/m, ubicándose principalmente en 3×10^6 V/m. Aunque con las condiciones establecidas la máxima producción de iones estuvo en presiones intermedias, esencialmente 19 a 38 mmHg. Estos casos poseen tiempos de vuelo entre colisiones más largos que a presión atmosférica, aunque del mismo orden de magnitud. Adicionalmente estas regiones, que presentaron un alto número de ionizaciones, también corresponden a la región de cambio de tendencia.

Además de una alta ionización, esta región también afectó el perfil de los patrones de dispersión mediante el surgimiento de puntos dispersos. Todos los patrones observados presentan máximos en las cercanías del eje que parte del punto inicial, mostrando una disminución de frecuencia hacia el centro y los extremos. Pero, la presencia de puntos dispersos en algunos casos da la impresión de frecuencias máximas sobre el centro. Impresión que desaparece al observar las distribuciones con mayor detalle. Lo cual es uno de los comportamientos esperados.

Como se mencionó existe un cambio de comportamiento de cuando el campo alcanza el orden de 10^6 V/m. Sin embargo la obtención valores más precisos con relación a las observaciones en la naturaleza dependerá de incluir varias condiciones que se omitieron para este estudio, como el efecto de un campo eléctrico local debido a las moléculas ionizadas y los electrones liberados. De momento se encontró que la región con presiones superiores a 38 mmHg y campo igual o superior a $1,5 \times 10^6$ V/m es interesante para estudiar el efecto de las moléculas ionizadas en el gas. Pues bajo estas condiciones se combinan una abundante producción de iones y trayectorias poco dispersas.

En resumen, el código desarrollado permitió determinar que todas las magnitudes medidas en los patrones de dispersión presentan tendencias regulares por debajo de 10^6 V/m; y por sobre este valor existe un cambio de tendencia. Por lo cual, es necesario estudiar con mayor detalle esta región de transición. Adicionalmente se encontró que las ionizaciones están presentes solamente cuando se ha superado los 10^6 V/m. De manera que sería interesante analizar, en futuros trabajos, cómo se relacionan las ionizaciones con el cambio de tendencia. Para dicho propósito se recomienda incluir la variabilidad del campo debido a la presencia de iones y electrones liberados. Por otro lado a bajas presiones los electrones presentan una dispersión muy amplia, misma que se reduce al incrementar la presión. Los resultados obtenidos permiten comprender la distribución de los puntos de impacto de los electrones en un gas, por lo que la extensión de este estudio podría usarse para entender los puntos de impacto relativos a las descargas eléctricas en la atmósfera.

Referencias

- [1] D. Lamb y J. Verlinde, *Physics and Chemistry of Clouds*, Cambridge University Press., 2011.
- [2] P. Wang, *Physics and Dynamics of Clouds and Precipitation*, Cambridge University Press, 2013.
- [3] A. Fridman, A. Chirokov y A. F. Gutsol, «Non-thermal atmospheric pressure discharges,» *Journal of Physics D: Applied Physics*, vol. 38, nº 2, p. R1–R24, 2005.
- [4] J. S. Townsend, *Electricity in Gases*, Oxford: Clarendon Press, 1915.
- [5] O. Chanrion y T. Neubert, «A PIC-MCC code for simulation of streamer propagation in air,» *Journal of Computational Physics*, nº 227, p. 7222–7245, 2008.
- [6] Y. Tsuji, T. Tanaka y S. Yonemura, «Cluster patterns in circulating fluidized beds predicted by numerical simulation (discrete particle model versus two-fluid model),» *Powder Technology*, nº 95, pp. 254-264, 1998.
- [7] M. Egas, «Simulación Computacional de la Trayectoria de Electrones de Incepción en un tramo Corto de Aire,» Tesis de Maestría, Quito, 2014.
- [8] C. K. Birdsall, «Particle-in-Cell Charged-Particle Simulations, Plus Monte Carlo Collisions With Neutral Atoms, PIC-MCC,» *IEEE Transactions on Plasma Science*, vol. 19, nº 2, pp. 65 - 86, 1991.
- [9] H. R. Skullerud, «The stochastic computer simulation of ion motion in a gas subjected to a constant electric field,» *Brit. Journal: Applied Physics (J. PHYS. D)*, vol. 1, nº 2, pp. 1567 - 1568, 1968.
- [10] I. K. Kikoin y A. K. Kikoin, *Física Molecular*, Moscú: MIR, 1979.
- [11] F. Reif, *Fundamental Statistical and Thermal Physics*, Berkeley: McGraw-Hill, 1965.
- [12] A. Okhrimovskyy, A. Bogaerts y R. Gijbels, «Electron anisotropic scattering in gases: A formula for Monte Carlo simulations,» *Physical Review E*, vol. 65, nº 037402, pp. 1 - 4, 2002.
- [13] M. Inokvti, «Inelastic Collisions of Fast Charged Particles with Atoms and Molecules - The Bethe Theory Revisited,» *Reviews of Modern Physics*, vol. 43, pp. 287 - 347, 1971.
- [14] L. D. Landau y E. M. Lifshitz, *Quantum Mechanics, non-relativistic theory 3rd Ed.*, Pergamon Press, 1977.
- [15] Y. Itikawa, «Cross Sections for Electron Collisions with Nitrogen Molecules,» *Journal of Physical Chemistry*, nº 31, 2006.
- [16] Y. Itikawa, «Cross Sections for Electron Collisions with Oxygen Molecules,» *Journal of Physical Chemistry*, vol. 38, nº 1, 2009.



- [17] V. A. Rankov y M. A. Uman, *Lightning: Physics and Effects*, Cambridge University Press, 2003.
- [18] M. Rabie y C. Franck, «A study of the avalanche-to-streamer transition in arbitrary gases by particle simulation,» *Journal of Physics D: Applied Physics*, vol. 49, nº 175202, 2016.
- [19] P. Hlawiczka, *Introducción a la electrónica cuántica*, Glasgow: Reverte, 1977.
- [20] C. Kittel, *Introducción a la Física del Estado Sólido 8va Ed.*, John Wiley & Sons, 2005.
- [21] T. A. Warner, M. Saba, C. Schumann, J. Helsdon y R. E. Orville, «Observations of bidirectional lightning leader initiation and development near positive leader channels,» *Journal of Geophysical Research: Atmospheres*, nº 121, p. 9251 – 9260, 2016.
- [22] R. Subramanyan, «Scattering of electrons by diatomic molecules in the approximation of two small-radius wells,» *Soviet Physics JETP*, vol. 28, nº 1, pp. 190 - 192, 1969.