ESCUELA POLITÉCNICA NACIONAL

FACULTAD DE CIENCIAS

SIMULACIÓN COMPUTACIONAL DE LA TRAYECTORIA DE ELECTRONES DE INCEPCIÓN EN UN TRAMO CORTO DE AIRE

TESIS DE GRADO PREVIA A LA OBTENCIÓN DEL TÍTULO DE MAGISTER EN FÍSICA

EGAS ESCOBAR MARIO EUGENIO

mario.egas@imetrilec.com

DIRECTOR: MEDINA ALVARADO NELSON JAVIER PhD

nmedina@epn.edu.ec

Agosto 2014

Declaración

Yo, Mario Eugenio Egas Escobar, declaro bajo juramento que el trabajo aquí descrito es de mi autoría; que no ha sido previamente presentado para ningún grado o calificación profesional; y, que he consultado las referencias bibliográficas que se incluyen en este documento.

La Escuela Politécnica Nacional puede hacer uso de los derechos correspondientes a este trabajo, según lo establecido por la Ley de Propiedad Intelectual, por su Reglamento y por la normatividad institucional vigente.

Mario Eugenio Egas Escobar

Certificación

Certifico que el presente trabajo fue desarrollado por el Sr. Mario Eugenio Egas Escobar, bajo mi supervisión.

Nelson Medina Alvarado

DIRECTOR

Dedicado a mis padres

Dr. Oswaldo Egas

Lcda. Rosita Escobar

y a mi familia:

Georgi y Jonathan

Agradecimientos

Agradezco especialmente al Doctor Nelson Medina por su interés y colaboración en el desarrollo de la presente tesis de Grado, al Doctor Marco Bayas por su ayuda desinteresada especialmente en la revisión del artículo que permitió llegar a concluir este trabajo, al Doctor Nicolás Vásquez por sus valiosos criterios que condujeron a la aprobación del plan de Tesis, a la Señorita Física Claudia Abril de la Universidad de Colombia por haberme enviado su Tesis de Maestría basada en el Programa Geant IV, a los lectores de la presente Tesis, y a la empresa Imetrilec Cía. Ltda. quien auspició el trabajo de investigación relacionado con los rayos y pararrayos, inicialmente a cargo del Físico Oscar Lasso. Agradezco también a familiares, allegados y colaboradores por su comprensión durante el tiempo que me tomó el desarrollo de esta Tesis, y solicito las más sinceras disculpas a las personas que no pude atender, en razón del intenso trabajo que involucró realizar esta Tesis de Maestría para una de las instituciones educativas más prestigiosas del país.

"Nothing has been accomplished
without passion"

Resumen

En este trabajo se discuten las consideraciones teóricas necesarias para describir la dinámica de electrones en un gas bajo la acción de un campo eléctrico. El punto central de la discusión es el papel de las colisiones de los electrones con las moléculas del medio en la trayectoria final. En los primeros Capítulos se establecen la importancia del tema de investigación, los conceptos básicos de las descargas en gases, el estado del arte, las teorías de Townsend y de la Flámula, entre otras. En el tercer Capítulo se estudia el fenómeno mediante la Teoría Cinética y de los Fluidos. En el cuarto Capítulo se determinan los conceptos necesarios para realizar la simulación computacional, se aborda el problema de la probabilidad del siguiente choque una vez que se ha producido uno, y se desarrollan las ecuaciones para las secciones eficaces totales y diferenciales para colisiones con el modelo del apantallamiento de Coulomb. De esta manera se plantean las condiciones para poder evaluar la trayectoria de electrones en un medio gaseoso como el aire. Por último, se realiza la simulación con el código desarrollado en Lenguaje C y se obtienen los resultados numérica y gráficamente.

Palabras clave: sección eficaz, sección eficaz diferencial, electrones de incepción, probabilidad direccional.

Abstract

In this study, theoretical considerations needed to describe the dynamics of electrons in a gas under the action of an electric field is discussed. The focus of the discussion is the role of collisions of electrons with molecules of the medium in the final trajectory. The early Chapters establish the importance of the research topic, the basic concepts of discharges in gases, the State of the Art, Theories of Townsend and Streamer, and others. In the third Chapter the phenomenon is studied by Kinetic and Fluid theories. In the fourth Chapter the concepts necessary for computer simulation, the problem of the probability of the next shock once one has occurred are determined. Equations for total and differential cross sections for collisions are developed with the model of Coulomb shielding. Thus conditions to assess the trajectory of electrons in a gaseous medium such as air arise. Finally, the simulation is performed with the code developed in C language and results are obtained numerical and graphically.

Keywords: cross sections, differential cross sections, inception discharge, directional probability.

Índice general

1 INTRODUCCIÓN **1**

1.1 Antecedentes e Importancia del Tema de Investigación 1

1.2 Conceptos Relacionados con las Descargas Eléctricas 6

1.2.1 Efecto Corona 6

1.2.2 Trazadores 7

1.2.3 Líderes 8

1.3 Plasmas 9

1.3.1 Tipos de plasmas 10

1.3.2 La longitud de Debye 11

1.3.3 La frecuencia característica de un plasma 12

1.3.4 El número de plasma 12

1.3.5 La Tenaza de Bennett 13

1.4 Procesos iniciados por colisiones 15

1.4.1 Choques elásticos 15

1.4.2 Choques inelásticos con excitación 15

1.4.3 Choques inelásticos con ionización 16

1.4.4 Foto-ionización 16

1.4.5 Colisiones con recombinación 16

1.4.6 Colisiones con atrapamiento 17

1.5 El proceso de ionización 17

1.5.1 La tasa de ionización en Gases 18

1.6 La Difusión en Gases 18

2 ESTUDIOS DENTRO DE LA LÍNEA DE INVESTIGACIÓN 21

2.1 Modelo de la Descarga de Townsend 21

2.1.1 El proceso de conducción en gases 23

2.1.2 Coeficientes de Townsend 26

2.2 Efecto Ramssauer Townsend 27

2.3 Teoría de la Flámula 28

2.3.1 Fotoionización 30

2.3.2 Criterio de Raether Meek 33

2.3.3 Estadísticas avalancha-flámula 36

2.4 Modelo de Aceleración Continua 38

2.4.1 Electrones fuera de control 39

2.5 El Modelo de Dos Grupos 40

2.6 Modelo de la Ruptura Dieléctrica 41

2.7 Modelo de Agregación Limitada por Difusión 43

2.8 El Modelo de Partículas en una Celda 44

2.9 Modelos Para Descargas Largas 45

2.9.1 Modelo fractal 46

2.9.2 El modelo electro-geométrico 48

2.9.3 Modelo del canal 48

3 FUNDAMENTOS TEÓRICOS 51

3.1 Probabilidad Direccional 51

3.2 Difusión de Electrones en un Medio Gaseoso 52

3.2.1 Velocidad de deriva 54

3.3 Teoría Cinética 57

3.3.1 Ecuación cinética de Boltzmann 57

3.3.2 Introducción a la teoría cinética 59

3.3.3 Análisis termodinámico 62

3.3.4 Ecuación de Vlasov 64

3.3.5 El modelo de fluidos 65

3.3.6 Ecuación de Kramers 66

3.4 Secciones Eficaces de Colisión 67

3.4.1 Efecto del campo externo 70
3.5 Modelo Analítico Aproximado 70
3.5.1 Solución de la ecuación radial 71
3.5.2 Solución de la ecuación axial 72
3.5.3 Solución en tres dimensiones 73
3.6 Electrostática en el Caso Punta Placa 74

4 SIMULACIÓN COMPUTACIONAL 79
4.1 Selección del Método de Simulación 80
4.2 Justificación del Método 81
4.2.1 Electrones independientes 81
4.2.2 Electrones en la fase de incepción 81
4.2.3 Método MCC 82
4.3 Algoritmo de Simulación 83
4.3.1 Probabilidad del siguiente choque 86
4.3.2 Impacto con moléculas de diferente especie 89
4.3.3 Probabilidad de un determinado proceso 91
4.3.4 Balance energético en las colisiones 94
4.3.5 Sección eficaz diferencial 95
4.3.6 Secciones eficaces para esferas duras 96
4.3.7 Modelo de Thomas Fermi 98
4.3.8 Velocidades de moléculas neutras 102
4.3.9 Dinámica molecular 104
4.3.10 Corrección relativista para la velocidad 107
4.3.11 Rotación de la velocidad 108

5 RESULTADOS 112
5.1 Resultados para la Geometría de Placas Planas 112
5.1.1 Datos obtenidos para diferentes presiones 112
5.1.2 Resultados gráficos de trayectorias 118
5.1.3 Trayectoria de ionización 121
5.1.4 Histogramas de resultados 122
5.1.5 Ionizaciones en $10\,m$ 125

5.1.6 Comprobación del algoritmo: ángulos de Salida 126
5.1.7 Evaluación de resultados 127
5.2 Simulación de la Descarga desde una Punta 129
5.2.1 Comparación entre radios de llegada 130
5.2.2 Histogramas de ionizaciones 131

CONCLUSIONES 133

TRABAJOS FUTUROS 135

A Moléculas Diatómicas 136
A.1 Nomenclatura de Moléculas Diatómicas 136
A.2 Energías de las moléculas diatómicas 137
A.3 Espectro roto-vibracional 138

B Simulación Estadística 140
B.1 Propiedades de los números aleatorios 141
B.2 Propiedades de las variables aleatorias 142
B.3 Generación de variables aleatorias 142
B.4 Variables aleatorias con distribución normal 143

C Los cuaterniones 145

D Código del Programa en C 146
D.1 Programa principal 146
D.2 Funciones 159
D.3 Particularidades caso: punta-placa 161

E Salida por pantalla 164

Índice de figuras

2.1 Característica corriente-voltaje de una descarga 24
2.2 Distribución de electrones semilla por fotoionización 32
2.3 Fuerza de fricción en función de la energía 39
2.4 Modelo de Ruptura Dieléctrica 43
2.5 Ejemplo de Agregación Limitada por Difusión 44

3.1 Volumen de colisión 59
3.2 Secciones eficaces para el nitrógeno 69
3.3 Secciones eficaces para el oxígeno 69
3.4 Coordenadas hiperbólicas 76
3.5 Campo eléctrico en una punta 78

4.1 Probabilidad de ocurrencia del siguiente choque 88
4.2 Sección eficaz total 89
4.3 Probabilidad de choque con una molécula de O_2 o de N_2 90
4.4 Procesos en el nitrógeno 93
4.5 Procesos en el oxígeno 93
4.6 Geometría del choque para esferas duras 96
4.7 Esfera de puntos equiprobable 98
4.8 Variación de ξ en función de la energía 101
4.9 Esfera aleatoria con $\xi = 0,5$ 102
4.10 Distribución de Maxwell 104
4.11 Ángulo de salida em $3\,D$ 109

5.1 Número de colisiones en función del campo 116
5.2 Número de ionizaciones en función del campo 116

5.3 Radios de llegada en función del campo 117
5.4 Velocidad de llegada en función del campo 117
5.5 Tiempo de llegada en función del campo 118
5.6 Acercamiento profundo en una trayectoria 119
5.7 Acercamiento mediano en una trayectoria 119
5.8 Acercamiento mediano en una trayectoria 120
5.9 Trayectoria completa 120
5.10 Trayectoria de ionización 121
5.11 Histograma del número de colisiones 122
5.12 Histograma del número de ionizaciones 123
5.13 Histograma de radios de llegada 123
5.14 Histograma de velocidades de llegada 124
5.15 Histograma de ángulos de llegada 124
5.16 Histograma de tiempos de arribo 125
5.17 Número de ionizaciones en un tramo de 10 metros 126
5.18 Ángulos de salida del choque a $300\,V/m$ 127
5.19 Ángulos de salida del choque a $1,000\,kV/m$ 127
5.20 Número de ionizaciones en $10\,m$ $\rho = 0{,}1$ 132
5.21 Número de ionizaciones en $10\,m$ $\rho = 0{,}02$ 132

E.1 Salida por pantalla 164
E.2 Salida por pantalla 165

Índice de cuadros

1.1 Características típicas de los rayos 9

1.2 Tipos de plasmas 11

1.3 Energías de ionización del oxígeno 18

2.1 Coeficientes de Townsend 27

4.1 Energías de ionización N_2 y O_2 95

5.1 Resultados a $760\,mmHg$ 113

5.2 Resultados a $380\,mmHg$ 113

5.3 Resultados a $76\,mmHg$ 114

5.4 Datos para $760\,mmHg$ y $10\,cm$ 128

5.5 Datos para $76\,mmHg$ y $10\,cm$ 128

5.6 Comparación de resultados 130

Capítulo 1

INTRODUCCIÓN

1.1 Antecedentes e Importancia del Tema de Investigación

Las descargas eléctricas atmosféricas (rayos) son uno de los fenómenos meteorológicos y atmosféricos que más preocupa a los seres humanos. Es innegable la gran cantidad de daños provocados por los rayos: incendios forestales, daños en centrales de generación eléctrica, daños en líneas de media y alta tensión, destrucción de edificios, muerte de personas, muerte de animales, etc. [1, 2] Los daños producidos anualmente por los rayos en el Ecuador son incalculables. En el año 2.009, se produjo un impacto de rayo sobre la línea de 138 kV, el mismo que ocasionó la caída parcial del Sistema Nacional Interconectado del Ecuador, un congestionamiento vehicular nunca antes visto en la ciudad de Quito, accidentes de tránsito debidos a la falla del sistema de semáforos, etc.

El conocimiento de que las puntas de un material conductor incrementan el campo eléctrico fue el primer avance científico que permitió atraer y controlar las descargas eléctricas atmosféricas. Entre los años de 1.746 y 1.751, Benjamín Franklin fue el primero que experimentó con los rayos y luego diseñó el primer pararrayos [3]. Los exitosos experimentos electrostáticos de Franklin y sus colegas de Filadelfia U.S.A. fueron comunicados formalmente mediante cinco articulos al inglés Collinson de la Royal Society of London, indicándole que las puntas atraen las descargas eléctricas a una mayor distancia y más eficientemente que otras formas geométricas. En años recientes, en forma

similar a lo hecho por Franklin, el equipo del Dr. Vladimir Rakov [4] de la Universidad de Florida, se encuentra experimentando con cohetes que elevan alambres conductores finos hacia el cielo y atraen los rayos con el fin de estudiarlos [5].

Para resguardar la infraestructura general que permite la vida de nuestra civilización, ante la presencia de los rayos, se ha optado por utilizar dos alternativas principales. Una de ellas ha sido la instalación del muy conocido pararrayos tipo punta Franklin. La otra, que no es muy usual, aunque sí muy efectiva, es el del apantallamiento mediante la denominada Jaula de Faraday [2, 6].

Si se llegara a conocer la probabilidad de que un rayo impacte sobre una determinada estructura geométrica, el problema del impacto aleatorio de los rayos estaría prácticamente resuelto. Cabe señalar, que la tortuosidad de la trayectoria en tramos largos, y las ramificaciones del rayo con respecto al tramo principal, han hecho mucho más difícil la predicción del sitio de llegada del rayo. Las dificultades en estudiar este fenómeno radican principalmente en la complejidad del proceso. El conocimiento de la física interna del **líder** [1] descendente permanece todavía incompleto [7]. Por ejemplo, se necesita conocer el efecto del **canal del plasma** [8] sobre el campo eléctrico inicial. Para enfrentar el problema, en laboratorios especializados se han efectuado experimentos con voltajes de hasta un millón de voltios; especialmente para diseñar pararrayos ionizantes que se cree van a atraer mejor este tipo de descargas [9].

La trayectoria que describen las descargas eléctricas atmosféricas tiene una forma errática propia de los fenómenos de tipo browniano. Es lógico que presenten esa forma, porque los electrones e iones que conforman el plasma de un rayo, durante su camino, tienen colisiones con moléculas neutras y otras partículas cargadas que las desvían de su trayectoria original. El movimiento Browniano y los fenómenos de transporte que fueron estudiados por Robert Brown a finales del siglo XIX, y luego por Einstein, Planck, Smoluchowski, y otros científicos a inicios del siglo XX, trata sobre la difusión de una partícula en un medio físico, debida a la interacción de la misma con las moléculas componentes del medio. Puesto que no es posible predecir una trayectoria

[1] Conjunto de electrones que encabezan la descarga en la *etapa de incepción*

con exactitud, es necesario utilizar el concepto de probabilidad direccional para poder describir este fenómeno. En la referencia [10] se menciona que el líder descendente viaja a velocidades equivalentes a $0,1c$ en tramos de 50 metros, y luego se detiene en lapsos de tiempo de 50 *microsegundos*, en donde c es la velocidad de la luz.

Debido a lo explicado anteriormente, cuando se especifica un ángulo de cobertura de un dispositivo de protección contra rayos, no se puede dejar de lado la necesidad de utilizar los conceptos de probabilidad y estadística para predecir el sitio final de impacto de una descarga. Hasta el momento no se ha llegado a determinar con precisión la probabilidad de impacto de rayos sobre una determinada área. La probabilidad de impacto ha sido determinada solamente en casos muy limitados bajo condiciones de laboratorio que no son buenas aproximaciones de los casos reales. Si alguien especifica que el radio de protección de un determinado tipo de pararrayos se lo puede calcular bajo un ángulo interior de 30 grados, comete un error, si no especifica la probabilidad de impacto bajo ese ángulo. Es por esta razón que cuando se especifican radios de protección de 10, 20 ó 30 metros en un volumen de protección cónico virtual, todos los técnicos pueden tener razón, ya que por ejemplo un ángulo de 30 grados daría una protección de un 99 %, uno de 45 grados un 98 % y un ángulo de 60 grados un 95 % [11].

Se piensa que la ruptura dieléctrica en gases en tramos largos ocurre en varias etapas [9]. La primera etapa es la construcción de un canal débilmente ionizado en base a la trayectoria generada por los electrones de origen (*incepción*). Entonces, se producen más avalanchas, y cuando la carga espacial inicia su influencia sobre el campo aplicado, se presenta la flámula. Posteriormente con campos eléctricos más altos la flámula se bifurca. La gran rapidez y la naturaleza multi escala de las descargas atmosféricas hacen que las avalanchas y flámulas sean difíciles de visualizar y describir [12]

Los estudios realizados con respecto a la trayectoria de las descargas eléctricas son insuficientes. Por ejemplo, con el Modelo de Ruptura Dieléctrica [13] se realizan simulaciones computacionales que permiten predecir la trayectoria de una descarga en un medio físico, las mismas que generalmente no guardan relación con el problema físico en sí mismo. Otro ejemplo es el Modelo Electro-Geométrico [9], el cual, a pesar de ser

demasiado empírico, ha permitido por muchos años el diseño de sistemas de protección para líneas de alta tensión y sub-estaciones eléctricas. Por último, con el Modelo de la Descarga de Townsend se obtienen valores macroscópicos de voltaje y corriente de la descarga eléctrica, mas no su camino. Dentro de los avances realizados durante el siglo XX, se puede destacar el criterio de Raether Meek [14, 15] para el cambio de avalancha a descarga de flámula. Asimismo, en años recientes se ha logrado establecer la estadística de las avalanchas predecesoras de las descargas de penacho [16, 17]. Finalmente, también en años recientes, los métodos computacionales han dado excelentes resultados en la simulación de descargas eléctricas en gases, especialmente en distancias cortas; pero se ha dado muy poca relevancia a la trayectoria del líder descendente [18]. El método de Cálculos Híbridos Espaciales de las Descargas en Flámula [19], la Modelación Numérica de la Función de Distribución de Energías [18] y otros estudios, son ejemplo de lo que se ha logrado mediante la Física Computacional. Adicionalmente, los avances en la tecnología de computadoras tanto en velocidad como en capacidad de memoria, han facilitado mucho más la comprensión del fenómeno de la descarga eléctrica en gases.

Para comprender el fenómeno de las descargas eléctricas atmosféricas (tramos largos), se tiene que acudir necesariamente al estudio de la dinámica de sus partes constituyentes, que son partículas de tamaño muy pequeño. La distancia entre las nubes y tierra está usualmente en el orden de los miles de metros. En cambio, la dinámica relevante que determina el comportamiento del rayo, se encuentra en el orden de los nanómetros, micrómetros, o milímetros, dependiendo del grano con el cual se quiera estudiar el fenómeno. Finalmente, existe un factor que liga el estudio entre las descargas largas y cortas, se trata de la similitud en la forma efecto que se conoce como de *auto-similaridad* [13, 20]. Bastará entonces con estudiar la forma de las descargas cortas, para determinar los efectos que pueden presentarse en escalas más grandes.

Por las razones expuestas, en este proyecto se analizará la trayectoria del líder de una descarga de electrones en tramos cortos de aire (desde un centímetro hasta diez metros de longitud). En condiciones normales de presión y temperatura ($760\,mmHg$, $273\,K$), existe una enorme cantidad de moléculas de oxígeno y nitrógeno que constituyen un obstáculo insalvable para que la trayectoria sea libre. Se utilizarán métodos compu-

tacionales para simular la trayectoria de varios electrones, de uno en uno, ante la influencia de un campo eléctrico estático, colisionando vez tras vez contra las moléculas gaseosas, y se contrastarán los resultados, con respecto a un estudio teórico y probabilístico de la trayectoria [21]. En algún estudio posterior, se podrían utilizar los resultados de este proyecto para simular el rayo, ya en un tramo largo, para lo cual, se podría incluso utilizar el concepto de la auto-similaridad dentro del ambiente de la matemática fractal [13, 22, 23]. El tratamiento pormenorizado de este tema permitiría analizar también el *Efecto Corona*, que causa pérdidas de energía especialmente en las líneas de alta tensión, el efecto de contorneo en los aisladores de alta tensión, y el efecto de las Descargas Trichel que producen interferencia electromagnética sobre las redes de telecomunicaciones [24, 1].

Para la investigación en Física existen tres pilares fundamentales: el estudio teórico, la simulación computacional y la experimentación; el autor utilizará solamente los dos primeros [25]. En el Capítulo 4 se propone un algoritmo para la simulación computacional de los electrones en el aire, este algoritmo se utilizará para la simulación correspondiente, y sus resultados se compararán con la fundamentación teórica establecida en el Capítulo 3. No se utilizará en este caso, la experimentación sobre la trayectoria de los rayos, porque es bastante costosa de realizar, debido a la necesidad de equipo sofisticado: laboratorio de alto voltaje (en los laboratorios especializados, se utilizan voltajes de corriente continua de 500 y hasta 2000 kV), cámaras de vacío, osciloscopios de alta velocidad y sensibilidad, y otros.

El problema específico consiste, en encontrar la probabilidad de que un grupo de electrones ubicados dentro del aire, luego de haber sido acelerados por un campo eléctrico, lleguen a una cierta distancia con respecto a un punto que ha sido tomado como objetivo. Para el caso de un campo eléctrico uniforme el sitio de donde parten estará ubicado exactamente sobre el eje $\overrightarrow{OZ}$ a una altura h $(0, 0, h)$, y el objetivo será el origen de las coordenadas $(0, 0, 0)$. La distancia de llegada en este caso será el radio con respecto al origen de las coordenadas. Para el caso de un campo eléctrico creado por una punta, el objetivo será también el origen de coordenadas en el plano con $z = 0$.

1.2 Conceptos Relacionados con las Descargas Eléctricas

A continuación se analizan ciertos detalles y definiciones básicas que son necesarias para avanzar en el estudio de las descargas eléctricas. Se debe notar que existe un interés mundial e inter-disciplinario en conocer técnicamente las particularidades de las descargas eléctricas. El congreso realizado en Octubre del 2.007 en Leiden Holanda titulado: *Streamers, sprites, leaders, lightning: from micro to macro scales* atrajo importantes investigadores relacionados con: la física del plasma, la ingeniería eléctrica e industrial, geofísica, física espacial, ciencia computacional y dinámica no lineal, juntos alrededor del tópico específico de la generación, estructura y productos de las descargas eléctricas de flámula [26].

1.2.1 Efecto Corona

El Efecto Corona es causado por la ionización del aire circundante a un conductor, debido a los altos niveles de intensidad del campo eléctrico presentes en el medio. El resultado de la aplicación de un potencial eléctrico en puntas conductoras, es la creación de un campo eléctrico muy intenso, y la acumulación importante de cargas en esa región espacial. Por tanto, la magnitud del Efecto Corona es función del gradiente de potencial en la superficie del conductor y de la rigidez dieléctrica del aire; este valor a su vez depende de la presión atmosférica, de la humedad y de la temperatura. En el momento en que las moléculas de aire se ionizan, éstas son capaces de convertirse en un medio que permite la conducción de la corriente eléctrica. Los electrones e iones del aire en este caso, conforman un cuarto estado de la materia que se denomina plasma.

Si se eleva el campo aún más se llegará a un valor límite, a partir del cual, el conductor empieza a descargarse directamente hacia el aire circundante. Ello a su vez causa emisión de luz y un sonido característico denominado *siseo*. De la misma forma un cuerpo cargado y aislado en el aire acaba descargándose por las puntas ¿Cómo sucede esto si el aire es un buen aislante?. Lo que pasa, es que en el aire existen de inicio electrones e iones de ambos signos, los mismos que al ingresar en el intenso campo

eléctrico que se crea alrededor de una punta se aceleran y adquieren grandes velocidades. Estas partículas cargadas chocan contra las moléculas neutras de la atmósfera con la energía suficiente como para arrancarles electrones e ionizarlas. El resultado es que aumenta rápidamente la concentración de iones y electrones en las proximidades del cuerpo cargado, hasta que llega un momento en el que se produce una avalancha de cargas, y se disipa la energía acumulada. Están disponibles muchas fórmulas empíricas que señalan, desde qué intensidades de campo se inician el efecto corona y la ruptura dieléctrica; sin embargo, esas fórmulas son válidas solamente dentro de ciertos rangos y su extrapolación conduce a grandes errores. Se acepta que bajo condiciones normales de presión y temperatura, el campo eléctrico necesario para que se produzca el efecto corona es de aproximadamente $1,5 \times 10^6\, V/m$ y para la ruptura dieléctrica de alrededor de $3 \times 10^6\, V/m$ [14].

Existen varios fenómenos adicionales producidos por el efecto corona, como por ejemplo las luminiscencias o flamas azuladas que aparecen alrededor del conductor, más o menos concentradas en las irregularidades de su superficie, el sonido silbante que acompaña a la descarga, y un olor picante característico que se debe a la producción de ozono. La circulación de corriente por el plasma producirá un incremento de temperatura en el gas, que se tornará de un color rojizo para niveles bajos de campo eléctrico, o azulado para niveles altos. Si hay humedad apreciable, se produce ácido nitroso [27]. En las líneas de transmisión, el efecto corona origina pérdidas de energía; y si es intenso, produce la corrosión de los conductores a causa del ácido formado y del bombardeo de iones. El aire ionizado resulta conductor (si bien de alta resistencia) y aumenta el área eficaz de conducción del conductor metálico. El efecto corona ha sido detectado experimentalmente mediante el uso combinado de cámaras fotográficas sensibles a la luz ultravioleta, y cámaras normales de luz visible [10].

1.2.2 Trazadores

Los Trazadores son prolongaciones que se presentan en las estructuras en tierra, que se despliegan en busca de empalmarse con el líder descendente y establecer la descarga del rayo. Normalmente, los trazadores se presentan en esquinas de edificios, antenas y

torres de comunicación. Casi siempre están constituidos por iones moleculares de carga positiva. Cabalmente, todos los edificios ubicados en tierra con geometrías en punta generan trazadores. La probabilidad de empalme con el rayo descendente dependerá de la geometría y del material del edificio [9].

Los iones positivos también son acelerados por el campo; aunque ganan considerablemente menores velocidades que los electrones, ya que además de tener una masa o inercia mucho mayor, también pierden mayor energía en cada colisión con moléculas neutras. Por tanto, es mucho menos probable que ionicen rápidamente el gas. En la referencia [28] se ha hecho un estudio teórico de los procesos de ionización entre iones y moléculas, que podría complementar este punto. En el caso de los experimentos de laboratorio, estos iones producen nuevos electrones al bombardear el electrodo negativo, proceso que se conoce como secundario. Otros procesos secundarios importantes son la emisión fotoeléctrica en el cátodo; la fotoionización del gas causada por los fotones originados en las moléculas excitadas; y los procesos de recombinación de electrones con iones ya formados [29, 14].

1.2.3 Líderes

Los líderes son los electrones e iones iniciales que avanzan en la *etapa de incepción*. Como su nombre lo indica, estas partículas son las que guían y definen la trayectoria final que tendrá la descarga [19]. El estudio del *líder* motivó el Modelo de Progresión del Líder (MPL), que es uno de los modelos más avanzados para el cómputo de las zonas de la protección de estructuras. Se asume en ese estudio, que la trayectoria de progresión del rayo estará definida inicialmente por las líneas correspondientes al campo eléctrico máximo. Sin embargo, también es necesario considerar las tortuosidades al azar del líder del rayo y el enlazamiento con la descarga ascendente proveniente de las estructuras en tierra (Trazadores). En el Cuadro 1.1 que se muestra a continuación, se pueden observar los resultados de varios años de investigación acerca del tema de los rayos, y que tienen que ver con la física del líder.

Parámetro	**Valor típico**	**Uni.**
Longitud promedio del paso	50	m
Velocidad de propagación	$2 \cdot 10^5$	m/s
Potencial de la nube	$100 - 200$	MV
Temperatura del Canal	10,000	$^\circ K$

Cuadro 1.1: Características típicas de los rayos de acuerdo a la referencia [6]

1.3 Plasmas

El concepto de plasma fue usado por primera vez por Irwing Langmuir (1881- 1957), luego de considerar que se trata de un cuarto estado de agregación de la materia, con características propias y diferenciadas [10]. Ejemplos de plasmas son: las atmósferas de la mayoría de las estrellas; los gases en el interior de los tubos fluorescentes de los rótulos y anuncios; y los gases de la capa superior de la atmósfera terrestre.

Se entiende por plasma a un conjunto *cuasi-neutro* de partículas con carga eléctrica que posee un *comportamiento colectivo* característico. Se diferencia de un gas justamente por contener partículas cargadas. Por lo general, pueden coexistir varias especies de partículas cargadas dentro de un plasma, como electrones, moléculas ionizadas positivamente (cationes) y otras que han capturado un electrón y aportan una carga negativa (aniones). La cuasi-neutralidad implica que el plasma visto microscópicamente tiene, en promedio, la misma cantidad de partículas positivas y negativas, y visto macroscópicamente, se comporta mas bien como si fuera un fluido sin carga. El plasma es conductivo y reacciona fuertemente ante los campos eléctricos y magnéticos aplicados. El comportamiento colectivo se debe, a que un plasma en su conjunto es capaz, tanto de generar campos magnéticos y eléctricos propios, como de reaccionar ante ellos. La definición de plasma incluye sólo a aquellos conglomerados en los cuales, la cantidad de partículas cargadas se encuentra equilibrada, ya que cumplen con el requerimiento de cuasi-neutralidad. No se incluyen en la definición, los gases muy débilmente ionizados, como son las llamas las velas, ni las avalanchas previas a una descarga, porque no llenan el requerimiento de un comportamiento colectivo [30].

Se considera que un gas compuesto de partículas neutras y cargadas se transforma en plasma, cuando la energía cinética de las partículas del gas se eleva hasta igualar la energía de ionización del gas [31]. Cuando alcanza este nivel, las colisiones de las partículas del gas provocan una rápida ionización en cascada, y el gas se transforma en plasma. Existen plasmas no neutros o inestables, como el flujo de electrones dentro de un acelerador de partículas, para estabilizar este tipo de plasmas, es necesario un confinamiento electromagnético externo que venza las fuerzas de repulsión electrostática internas.

1.3.1 Tipos de plasmas

Pueden existir distintos tipos de plasmas de acuerdo a la energía y densidad de sus partículas constituyentes. Un punto práctico de división para la clasificación de los plasmas es la energía de sus electrones ε_e, ó su temperatura $T_e \sim \frac{e}{k_B}\varepsilon_e$ (k_B es la constante de Boltzmann). Muchos autores sitúan el valor de energía de $100\,eV$ como un punto conveniente para esa división. La mayoría de los plasmas industriales se presentan a una presión del orden de $1\,atm$, y la temperatura de electrones e iones es de aproximadamente $10^4\,K$, que corresponde a una energía de $1\,eV$; de modo tal, que la densidad de electrones e iones es del orden de $10^{23}\,m^{-3}$. En las descargas incandescentes, como ocurre en las lámparas fluorescentes, láseres de gas y precipitadores electrostáticos, la energía de los electrones es del orden de $1\,eV$, aunque éstos tienen una densidad del orden de sólo $10^{17}\,m^{-3}$. En estos plasmas, la temperatura de los iones pesados y de partículas neutras es generalmente cercana a la temperatura ambiente [10]. Un segundo criterio en la clasificación de los plasmas, se basa en la densidad de electrones del plasma. Se suele elegir una densidad de $10^{20}\,m^{-3}$ como la densidad de la división, simplemente porque con los típicos campos eléctricos, con una densidad de electrones por encima de este valor, las descargas suelen ser arcos eléctricos; mientras que para densidades por debajo de este valor, las descargas son incandescentes. Las descargas incandescentes son muy difíciles de sostener en densidades mayores a $10^{20}\,m^{-3}$, debido a los efectos de calentamiento que se presentan cuando existe una mayor densidad de electrones [10]. Es decir, que con las divisiones de temperatura y densidad anotadas, se

pueden distinguir los tipos de plasmas que se presentan en el Cuadro 1.2, de acuerdo a la energía de sus electrones, y a la presión de $1\,atm$

Energía eV	**Densidad** $electrones\,m^{-3}$	**Temperatura** K	**Tipo de Proceso**
$0,0258$	$2,44 \times 10^{25}$	300	Térmicos
$0,1$	$6,31 \times 10^{24}$	1,160	Colisiones elásticas
1	$6,31 \times 10^{23}$	11,600	Colisiones élásticas
10	$6,31 \times 10^{22}$	116,000	Colisiones inelásticas
100	$6,31 \times 10^{21}$	1,160,000	Ionizaciones

Cuadro 1.2: Tipos de plasmas de acuerdo a la temperatura de los electrones a $1\,atm$ de presión, calculada en base a la ley de los gases ideales

1.3.2 La longitud de Debye

El rango de acción al interior de un plasma ya no es el mismo que el de una partícula cargada libre en el espacio (proporcional a $1/r$). Existe una apantallamiento debido a las otras cargas eléctricas presentes en el plasma, que acorta esta distancia de acción. De acuerdo al desarrollo realizado por Debye Hückel para plasmas clásicos cargados este rango de acción es el que se muestra en la ecuación (1.3.1). En la ecuación (1.3.1) $V(r)$ es el potencial eléctrico que incluye la interacción con las moléculas cargadas vecinas, e es la carga del electrón, Z_α es la carga del ión α (que puede ser positiva o negativa), y λ_D es el rango de acción de la interacción.

$$V(r) = \frac{eZ_\alpha}{r}\mathbf{e}^{-\frac{r}{\lambda_D}} \tag{1.3.1}$$

El factor de $\exp^{-\frac{r}{\lambda_D}}$, se hace rápidamente mucho más pequeño a una distancia mayor que λ_D, que es conocida como la *longitud de apantallamiento de Debye* (1.3.2). En la (1.3.2) ϵ_0 es la permitividad dieléctrica del vacío, ϵ_r es la permitividad relativa del aire, n_j es la densidad de partículas cargadas, q_j es la carga de la especie j, y k_BT es la constante de Boltzmann multiplicada por la temperatura absoluta.

$$\lambda_D = \left(\frac{\epsilon_0\epsilon_r k_B T}{\sum_{j=1}^{N} n_j^0 q_j^2}\right)^{1/2} \tag{1.3.2}$$

Para una descarga en gases, con energía de los electrones de $1\,eV$, con una densidad electrónica de $6,31 \times 10^{23}$ electrones por metro cúbico, es de aproximadamente $10\,nm$

$$\lambda_D = \left(\frac{8,85 \times 10^{-12} \times 1,38 \times 10^{-23} \times 11,6 \times 10^{3}}{6,31 \times 10^{23} \times (1,6 \times 10^{-19})^2} \right)^{1/2} \sim 10\,nm$$

1.3.3 La frecuencia característica de un plasma

Así como la longitud de Debye proporciona una medida de la distancia o del rango de acción en un plasma, la frecuencia del plasma ω_p describe sus tiempos característicos. Supóngase que en un plasma en equilibrio se introduce un pequeño desplazamiento de todos los electrones en cierta dirección. Por la condición de cuasi-neutralidad, éstos sentirán la fuerza de atracción de Coulomb de los iones del conjunto en la dirección opuesta, y se moverán hacia ella, de tal forma que se establezca algo similar a un conjunto masa resorte alrededor de la posición original de equilibrio. La frecuencia de oscilación de este conjunto masa-resorte es lo que se denomina frecuencia de plasma, que se puede calcular mediante la ecuación (1.3.3), donde n_e es la densidad de electrones, m_e es la masa del electrón, y e es la carga del electrón. Con el tiempo, las colisiones electrón-ión amortiguarán las oscilaciones, y el plasma volverá a su equilibrio termodinámico [30].

$$\omega_{pe} = \sqrt{4\pi n_e e^2/m_e} \tag{1.3.3}$$

1.3.4 El número de plasma

El *número de plasma* N_p indica el número medio de partículas contenidas en una esfera cuyo radio es la longitud de Debye (esfera de Debye). La definición de plasma,implica que la interacción electromagnética de una partícula domina sobre la interacción con los pocos vecinos próximos, lo que puede escribirse como $N_p >> 1$, es decir, cuando hay un gran número de partículas contenidas en una esfera de Debye. Es común referirse a esta desigualdad como *condición de plasma*. El número de plasma de los electrones se puede hallar con la ecuación (1.3.4). Finalmente, se considera que la aproximación de fluidos en un plasma también es válida cuando $N_p >> 1$ [10, 32].

$$N_p = \frac{4\pi}{3} n_e \lambda_D^3 \tag{1.3.4}$$

Para un plasma con energía de $1\,eV$, cuya longitud de Debye se analizó anteriormente, el número de plasma sería de aproximadamente $2,1$ (que es cercano a a 1).

$$N_p = \frac{4 \times 3,14}{3} \times 6,31 \times 10^{23} \times (10^{-8})^3 \sim 2,1$$

1.3.5 La Tenaza de Bennett

Una *Tenaza (Pinch)* es el fenómeno de compresión ejercido sobre un conjunto de partículas cargadas, debido a las fuerzas magnéticas producidas por el flujo de éstas mismas cargas. Por lo general, este efecto se manifiesta en un plasma, aunque también podría presentarse en un sólido o en un líquido. En una Tenaza Z la corriente fluye en el sentido axial (dirección Z en un sistema cilíndrico de coordenadas) y el campo magnético producido es acimutal [30]. Aunque las Tenazas se presentan de forma natural en las descargas eléctricas de rayos y otros fenómenos atmosféricos, en los laboratorios para la investigación de la fusión nuclear se recrean y utilizan por su utilidad en el confinamiento de plasmas. Esa última aplicación se ha llevado a cabo a pesar de que las Tenazas pueden volverse inestables. Finalmente, las Tenazas pueden generar radiación en todo el espectro electromagnético, incluyendo las ondas de radio, luz visible y rayos X . Aproximadamente en 1.934 W. H. Bennett encontró una solución para la dinámica y las ecuaciones de campo de una columna de plasma, bajo las siguientes consideraciones:

1. Geometría cilíndrica
2. Permanencia (Distribución de campos y partículas independiente del tiempo)
3. Neutralidad
4. Equilibrio estadístico de los electrones entre sí, aún para muy largos caminos libres medios
5. Equilibrio estadístico de los iones entre sí, posiblemente a temperatura diferente
6. Deriva mutua entre electrones e iones

7. Campo magnético acimutal debido a la corriente producida por la deriva

8. Confinamiento del plasma debido a este campo

9. Validez aún para temperaturas relativistas

A continuación se presenta el desarrollo realizado por Bennett para la determinación de la densidad de partículas en una tenaza tipo Z. De acuerdo a la física estadística, la densidad de partículas N es proporcional a e^{-W/k_BT} en donde W es la energía potencial T es la temperatura absoluta y k_B es la constante de Boltzmann. El campo magnético de atenazamiento H_ϕ, se puede derivar de la componente A_z del potencial vectorial $\mathbf{A}$ en donde A_z juega un papel análogo a W en la determinación de la densidad de partículas N. Se sigue entonces que $\ln N^+$ y $\ln N^-$ (densidad de iones y electrones respectivamente) es proporcional a A_z y además, por la neutralidad del plasma se tendría la ecuación (1.3.5), en donde v^+ y v^- son las correspondientes velocidades de deriva de los iones y electrones respectivamente.

$$\nabla^2 \ln N \propto \nabla^2 A_z = -4\pi J_z = 4\pi(v^- - v^+)eN \tag{1.3.5}$$

En coordenadas cilíndricas esta ecuación diferencial para N tiene como solución $N \propto 1/(r^2 + a^2)^2$ para la densidad de partículas y $H_\phi \propto r/(r^2 + a^2)$ para el campo magnético acimutal, en donde a es una constante que tiene dimensiones de longitud. La dependencia de N con r implica que para un radio infinito la densidad de partículas cargadas tiende rápidamente a cero, y cuando el radio tiende a cero la densidad tiende a un valor finito. La forma en que el campo H_ϕ depende de r explica la presencia de una corriente de deriva radial, la misma que podría ser la responsable de la estructura filamentosa de las descargas eléctricas. Este es el modelo de Bennett para la Tenaza Z [30] que predice una acumulación de cargas alrededor del eje principal en una descarga eléctrica. Otras consecuencias de la teoría de Bennett son:

- La consideración de dos tipos de cargas eléctricas en la descarga, que dan una corriente constante a pesar de tener diferentes concentraciones a lo largo del eje.
- El hecho de que ya se discute acerca de la presencia de dos tipos de equilibrios térmicos instantáneos, el de los electrones y el de los iones. [2]

1.4 Procesos iniciados por colisiones

Las colisiones de electrones y fotones con moléculas y otras partículas presentes en el aire son causantes de una gran variedad de reacciones químicas. Estas colisiones, pueden ser elásticas ó inelásticas de acuerdo a la energía del electrón incidente. Los fotones, especialmente los generados al interior del mismo gas, producirán efectos adicionales. A continuación se detallan los más importantes.

1.4.1 Choques elásticos

En los choques elásticos no ocurren cambios en la energía interna de las partículas ni en su estructura, el electrón solamente pierde algo de su energía por el cambio de dirección. Este proceso normalmente ocurre con una energía cinética baja de los electrones (normalmente menor a $1\,eV$).

1.4.2 Choques inelásticos con excitación

En este tipo de choques se presentan cambios en la energía interna de las moléculas impactadas. Un caso particular es el de excitación electrónica, en el cual, la molécula M pasa a un estado de mayor energía interna M^* debido al desplazamiento de sus electrones internos hacia un orbital molecular superior. Otros estados excitados corresponden a los de rotación y vibración moleculares (Ver los apéndices A.2 y A.3). Por lo general, todos estos estados son inestables, y normalmente después de un tiempo, las moléculas vuelven a su estado de equilibrio liberando el exceso de energía mediante la emisión de fotones. El proceso se puede esquematizar como sigue:

[2] Nótese que el equilibrio térmico instantáneo sólo puede darse en sistemas que justamente están fuera del equilibrio térmico

$$e^- + M \rightarrow e^- + M^* \rightarrow M + e^- + h\nu$$

1.4.3 Choques inelásticos con ionización

Si la energía del electrón es aún mayor (sobre los $10\,eV$), el choque tiene por consecuencia el desprendimiento de un electrón del átomo o molécula chocado. El átomo primitivamente neutro, al quedar con un electrón menos, adquiere carga positiva y se convierte en un ión positivo:

$$e^- + M \rightarrow M + 2e^-$$

1.4.4 Foto-ionización

Cuando la energía del fotón incidente es mayor que la energía de ionización de la molécula de gas, el bombardeo fotónico sobre las moléculas del gas mediante luz ultravioleta, rayos cósmicos, radioactividad natural, y otras radiaciones, da como resultado la ionización de las moléculas. Los fotones para este proceso también puede provenir del mismo gas previamente excitado. El exceso de energía se transmite al electrón en forma de energía cinética. La reacción es del tipo.

$$h\nu + M \rightarrow M^+ + e^-$$

1.4.5 Colisión de electrones con iones positivos: recombinación

Para el caso de choque entre un electrón y un ión positivo, sin la energía suficiente para producir algunos de los resultados ya descritos, ocurre una neutralización de ambas cargas. La reacción produce la liberación de una cierta cantidad de energía la cual es radiada en forma de un fotón, de la siguiente forma:

$$e^- + M^+ \rightarrow M + h\nu$$

1.4.6 Atrapamiento de electrones: enlace con molécula neutra

Un electrón libre dotado de escasa energía puede chocar con una molécula neutra (electro-negativa) ligándose a ella y formando así un ión negativo. El ión negativo tiene menor movilidad que el electrón y por ese motivo, a pesar de conservarse la carga, la descarga tiende a detenerse. Por su naturaleza, las moléculas de nitrógeno no pueden atrapar electrones, en cambio las de oxígeno sí lo pueden hacer,aunque con muy poca probabilidad

$$M + e^- \rightarrow M^-$$

1.5 El proceso de ionización

Cuando un electrón colisiona con un átomo o una molécula de gas con una energía mayor a la de umbral, puede expulsar un electrón, y dejar al mismo tiempo un ión cargado. La cantidad de energía necesaria para extraer un electrón de un átomo se llama *energía de ionización*. La ionización de moléculas neutras (M) por impacto electrónico (e^-) es el mecanismo más importante para la generación de cargas en el seno de una descarga en gases. En este proceso, la carga total se conserva. La tasa del proceso (generación de electrones por unidad de tiempo y volumen) es proporcional al número de electrones presentes, y puede escribirse de acuerdo a la ecuación (1.5.1).

$$\left(\frac{dn_e}{dt}\right)_i = \nu_i n_e = N k_i n_e \tag{1.5.1}$$

En la ecuación (1.5.1) n_e es la densidad de electrones, N es la densidad numérica de partículas blanco, ν_i es la frecuencia de ionización (número de ionizaciones por segundo y por electrón) y k_i es la tasa de producción de electrones de la reacción. Por otra parte, si $f(\varepsilon)$ es la función de distribución de energía de los electrones ε, y $\sigma_i(\varepsilon)$ es la sección eficaz de ionización en función de la energía, entonces la frecuencia ν_i se puede obtener mediante la ecuación (1.5.2) que se muestra a continuación.

$$\nu_i = N k_i = N < v\sigma_i >= N \frac{\int f(\varepsilon) v(\varepsilon)\, \sigma_i(\varepsilon) d\varepsilon}{\int f(\varepsilon) d\varepsilon} \tag{1.5.2}$$

1.5.1 La tasa de ionización en Gases

Para la molécula de oxígeno se han medido las energías de ionización que se muestran en el Cuadro 1.3.

Energía de ionización	kJ/mol	$eV/molécula$
Primera	13,139, 0	13, 64
Segunda	3,388, 3	35, 17
Tercera	5,300, 5	55, 02
Cuarta	7,469, 2	77, 54

Cuadro 1.3: Energías de ionización del oxígeno

En la ecuación (1.5.1), en el caso de que ν_i sea constante, si no hay pérdidas de electrones, la solución es la expresión matemática del crecimiento del número de electrones en una avalancha (1.5.3), que permite llegar a la ecuación de Townsend (2.1.3).

$$n_e = n_{e_0} e^{\nu_i t} \tag{1.5.3}$$

Si la distribución de energía es Maxwelliana, la sección eficaz σ_i resulta ser función de la temperatura T y del potencial de ionización B. En este caso, la ionización es debida a los electrones de alta energía de la distribución $\varepsilon > B$. Si se usa la aproximación $\sigma_i(\varepsilon) = \kappa_i(\varepsilon - B)$ en la ecuación (1.5.2) se obtiene la tasa de ionización, que se muestra en la ecuación (1.5.4).

$$\nu_i = NZ\kappa_i(B + 2k_B T)e^{-\frac{B}{k_B T}} \tag{1.5.4}$$

1.6 La Difusión en Gases

La difusión es un proceso termodinámico irreversible, en el cual ciertas partículas (soluto) se introducen en un medio en el que esa especie estaba inicialmente ausente (solvente). Durante el proceso de difusión de un gas **A** dentro de otro gas **B**, en un volumen determinado, es lógico que las concentraciones de **A** y de **B** varíen momentáneamente de un sitio a otro. Las moléculas de **A** se difundirán en **B** hasta que dentro

de un cierto tiempo la mezcla de gases sea homogénea. En el lugar que aparecían las moléculas de **B** ahora aparecerán las de **A**, y las condiciones de presión y temperatura se mantendrán inalteradas. Durante el proceso se manifestará un transporte temporal de masa, y un aumento definitivo de la entropía del conjunto [33]. El proceso mencionado se comporta de acuerdo a la Ley de Fick $\mathbf{j} = -D\nabla n$, que describe la relación entre la densidad de corriente de difusión de partículas $\mathbf{j}$ y el gradiente de concentración de esas partículas ∇n. El coeficiente de difusión D representa la facilidad con que un soluto en particular se incorpora al interior del solvente [34]; su magnitud depende de tres factores: el tamaño y forma del soluto, la viscosidad del solvente, y la temperatura del medio. Los gradientes de concentración de las especies intervinientes en el proceso producen un flujo de partículas que tiende a homogeneizar la disolución y uniformizar la concentración. El flujo homogeneizador que establece un *orden de largo alcance* en el sistema se origina en el movimiento azaroso de las partículas, el mismo que también permite llegar a la Segunda Ley de la Termodinámica [10]. Para que se establezca ese orden de largo alcance en un sistema compuesto de muchos elementos pequeños, es suficiente que estos elementos interactúen con sus vecinos con fuerzas de corto alcance [34].

El proceso de difusión es lento y el mezclado puede tomar algún tiempo, aunque debido a las altas velocidades moleculares uno pudiera suponer que es rápido [33]. La causa de esta falta de correspondencia está en que durante la dilución no sólo importan las velocidades moleculares, sino también los choques y el desvío de las trayectorias entre ellas. Estos últimos son los factores que dificultan el movimiento libre de las moléculas **A** dentro de **B**.

Durante un tiempo t, una molécula recorrerá un camino *zigzagueante* igual a $\overline{v}t$, donde $\overline{v}$ es la velocidad media de la molécula en el gas. El número de choques por unidad de tiempo en el camino de la trayectoria es ζ, con $\zeta = \sigma\overline{v}n$, en donde n es el número de moléculas del medio por unidad de volumen y σ es la sección eficaz de colisión. El camino libre medio λ se obtiene al dividir $\overline{v}t$ para ζt. El resultado se muestra en la ecuación (1.6.1) [33]. En el caso del aire, λ tiene un valor de aproximadamente 60 nm.

$$\lambda = \frac{\overline{v}}{\zeta} = \frac{1}{\sigma n} \tag{1.6.1}$$

Capítulo 2

ESTUDIOS DENTRO DE LA LÍNEA DE INVESTIGACIÓN

En este capítulo se presentan varios trabajos relacionados con la línea de investigación de la presente tesis; es decir, el estado del arte. Los trabajos se presentan más o menos de manera cronológica. En primer lugar, se presenta el modelo de la descarga eléctrica realizado por Townsend a inicios del siglo XX. Después, se presentan los trabajos experimentales de Ramssauer Townsend que luego fueron explicados por los mismos autores mediante la mecánica cuántica. Luego se presentan: el Modelo de la Flámula, el de Aceleración Continua y el de Dos Grupos. Finalmente se presentan algunos modelos desarrollados para las descargas largas. En el siguiente capítulo, la descarga será estudiada con mayor rigor mediante las ecuaciones de transporte de fluidos cargados.

2.1 Modelo de la Descarga de Townsend

El modelo de Townsend [35] se basa en la descripción matemática de la población de electrones e iones, que viajan en el espacio inter-electródico. Estas partículas generan en su trayecto hacia el electrodo opuesto, un número creciente de nuevas partículas cargadas. En sus estudios, Townsend investigó las relaciones de tensión-corriente en una disposición de electrodos de placas paralelas en un recipiente lleno de gas, irradiando continuamente el cátodo con luz ultravioleta [36].

El modelo de Townsend considera que en el tramo de la descarga, el incremento de partículas cargadas nuevas producidas por ionización y por unidad de longitud es proporcional a α veces el número de partículas cargadas a la distancia x, lo que se representa claramente en la ecuación (2.1.1). Si se aplica un campo eléctrico $E = V/d$, donde V es el potencial eléctrico y d es la distancia entre electrodos, y se inyectan N_0 electrones por segundo (por ejemplo con luz Ultra Violeta), el número de electrones que se producen en la avalancha estará dado por la ley exponencial que se indica en la ecuación (2.1.2), expresión obtenida luego de integrar la ecuación (2.1.1) con α constante [37, 35].

$$\frac{dN}{dx} = \alpha N \tag{2.1.1}$$

$$N(x) = N_0 e^{\alpha x} \tag{2.1.2}$$

En gases electro-negativos α se debe reemplazar por el coeficiente de ionización efectivo $\alpha_{efectivo} = \alpha - \beta$, en donde β es el número de electrones atrapados por las moléculas por unidad de longitud, también denominado como *coeficiente de recombinación* [37]. Los gases *electro-negativos* son aquellos que atrapan fácilmente electrones en su interior. Para campos eléctricos bajos α es mucho menor que β, lo que permite mantener el equilibrio dentro del gas. Sin embargo, el coeficiente α crece rápidamente con el campo eléctrico, y permite que a altos voltajes se manifieste la ruptura dieléctrica; en ese caso α es mucho mayor que β.

El coeficiente de Townsend (α) tiene estrecha relación con la física de las partículas al interior de un gas; por ejemplo, con la velocidad de deriva v_d (que se describe en el Capítulo 3), y la frecuencia de ionización ν_i de acuerdo con la identidad $\alpha = \nu_i/v_d$ (Ver ecuación 1.5.1). La velocidad de deriva v_d es la velocidad límite que alcanzarían los electrones al circular por un medio viscoso como el aire. En cambio, la frecuencia de ionización ν_i representa el número de electrones nuevos generados por ionización, y por unidad de tiempo, ocurridos durante la trayectoria de colisiones de una partícula cargada.

2.1.1 El proceso de conducción en gases

A continuación se explica el proceso de conducción eléctrica en gases desde el equilibrio hasta la descarga, de acuerdo al modelo de Townsend.

a En ausencia de campo eléctrico externo, la densidad de electrones e iones positivos en un gas ordinario se mantiene equilibrada por los procesos de recombinación y decaimiento electrónico de las moléculas (origen de la Figura 2.1). En este punto, la generación de electrones o iones en el aire es producida únicamente por rayos cósmicos, radiación Ultra Violeta u otra fuente artificial. La generación espontánea de electrones e iones es por pares, y tan pequeña que a temperatura y presión normales y con voltajes bajos los gases son buenos aislantes.

b De allí en adelante, con valores pequeños del campo eléctrico, la curva característica corriente-voltaje de un gas, es creciente, mientras no se supere la corriente de saturación I_{sat} (región entre el origen y el punto **a** de la Figura 2.1). En este caso, los electrones aparecen ocasionalmente, y el campo los transporta hacia el ánodo sin que ocurra recombinación. A medida que aumenta el campo eléctrico E, la fracción de electrones perdidos en procesos de difusión o de recombinación con iones positivos disminuye.

c Cuando se alcanza la corriente I_{sat}; es decir, cuando han sido prácticamente suprimidas las pérdidas de electrones por recombinación, y la corriente cesa de depender del voltaje V, el valor de la corriente estará determinado únicamente por la velocidad de generación de carga en la región inter-electródica (región entre los puntos **a** y **b** de la Figura 2.1).

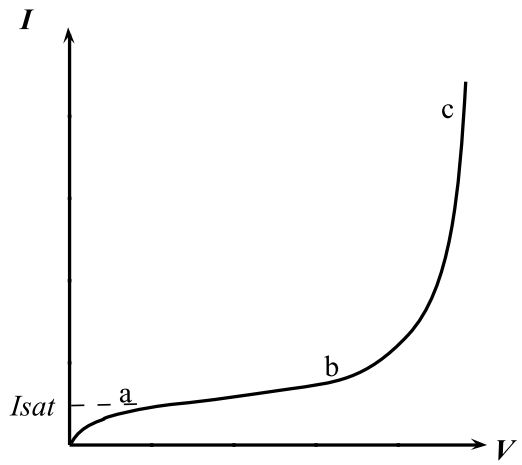

Figura 2.1: Curva característica corriente-voltaje de una descarga en gases. Figura tomada y adaptada de [6]

d A voltajes un poco mayores, se inicia la ionización por impacto electrónico, con lo que se incrementa la corriente que circula por el gas. Si el cátodo es excitado con radiación Ultra Violeta, en éste se genera una foto-corriente I_0 (se supone que en esa región de la curva ya no se presentan mecanismos de recombinación). Al llegar al ánodo, la corriente se habrá incrementado a $I = I_0 e^{\alpha d}$, donde α es el coeficiente de ionización de Townsend. En estado estacionario, la corriente en el cátodo también será $I = I_0 + I_0 e^{\alpha d}$ (región entre **b** y **c** de la Figura 2.1).

e Al subir aún más el valor de V, aparecen procesos secundarios; es decir, la creación de electrones por partículas que aparecieron por el proceso primario de ionización por impacto electrónico. Estos procesos secundarios afectan a la conducción del gas de forma importante, especialmente si producen la emisión electrónica del cátodo. Cabe resaltar que cada nuevo electrón nacido en el cátodo cubre todo el camino entre cátodo y ánodo, y es mucho más efectivo para producir ionización que un electrón nacido, por ejemplo, a mitad de camino. Cada uno de los $e^{\alpha d} - 1$ iones generados por cada electrón, emiten γ electrones del cátodo (donde γ es el coeficiente de emisión secundaria), y entonces esta emisión secundaria debe agregarse a la original . Por lo tanto, la corriente electrónica en el cátodo será $I_1 = I_0 + I_1 \gamma [e^{\alpha d} - 1]$, y la corriente en el ánodo será la que se indica en la ecuación (2.1.3).

$$I = I_1 e^{\alpha d} = I_0 \frac{e^{\alpha d}}{1 - \gamma[e^{\alpha d} - 1]} \tag{2.1.3}$$

La ecuación (2.1.3) [14] obtenida por Townsend en 1.902 permite explicar el proceso de *ignición* de una descarga *auto-sostenida*. Esto ocurre cuando el denominador de (2.1.3) tiende a cero, e I_0 también tiende a cero. Experimentalmente, esto se logra elevando el voltaje entre electrodos.

El criterio de Townsend para la ruptura dieléctrica consiste en considerar que existe una corriente estacionaria auto-sostenida en un campo homogéneo $E_t = V_t/d$, donde el voltaje de umbral V_t se determina cuando se cumple la condición (2.1.4), en (2.1.3). Esto significa que existe una condición de transición y que la corriente no puede ser estacionaria a este voltaje. Matemáticamente, si $V > V_t$ (V_t es el voltaje umbral o de ruptura dieléctrica) , es tal que $\mu \equiv \gamma[e^{\alpha d} - 1] > 1$, entonces el denominador de la ecuación (2.1.3) es negativo, y la expresión no tiene sentido, este es el criterio de Townsend. No da ninguna información acerca del crecimiento de los procesos que conducen a la ruptura, aunque explica la necesidad de que se produzcan algunas avalanchas previas antes de que se manifieste la ruptura dieléctrica [16, 17].

$$\mu = 1 \Leftrightarrow \alpha d = \ln(1/\gamma - 1) \tag{2.1.4}$$

Formalmente, para $V = V_t$, la corriente fluye en ausencia de una fuente externa de electrones. Los procesos en el espacio inter-electródico aseguran la reproducción de los electrones sin ayuda exterior. Un electrón emitido por el cátodo produce $[e^{\alpha d} - 1]$ iones, los que al chocar con el cátodo producen cada uno γ electrones, y en definitiva cada electrón primario es reemplazado por $\mu = 1$ electrones secundarios. La transición desde una descarga *no auto-sostenida* a una *auto-sostenida* puede interpretarse como la ignición de la descarga. El ramal **c** de la Figura 2.1 puede incluso curvarse hacia la izquierda y aproximarse al eje de las ordenadas manifestándose así una resistencia dinámica negativa.

A pesar de los aciertos obtenidos, se han advertido los siguientes inconvenientes en el modelo de Townsend [36]:

- Se encontró que el voltaje de ruptura es virtualmente independiente del material del cátodo en descargas a alta presión ($pd > 200\,Torr\,cm$). Para descargas muy largas, como un rayo, los procesos secundarios que dependen del cátodo, definitivamente ya no juegan un papel importante. En cambio, el modelo de Townsend depende íntimamente de los procesos catódicos para la producción de las descargas auto-sostenidas.

- En un proceso de Townsend, basta un electrón emitido en el cátodo para iniciar una descarga; si se emite un número mayor, el proceso secundario debe establecer una descarga auto-sostenida temprana. Sin embargo, aún con iluminación intensa del cátodo y para valores mayores a $200\,Torr\,cm$ para el producto pd, no se obtuvieron efectos sobre el tiempo de formación de la descarga; y, de acuerdo al experimento de Rogowski [36] el retraso temporal obtenido fue de 5 órdenes de magnitud mayor que el necesario para obtener una densidad de corriente de emisión de $10^7\,electrones/cm^2/s$.

- Se observaron canales de descarga filamentosos en un número apreciable de experimentos. Forma de la descarga que la teoría de Townsend no puede explicar.

Estas discrepancias fueron explicadas en años posteriores mediante la Teoría de la Flámula formulada por Raether y Meek.

2.1.2 Relación de los coeficientes de Townsend con la presión y la temperatura

El coeficiente α está relacionado con los parámetros termodinámicos macroscópicos de presión y temperatura del gas en el cual se desarrolla la descarga. Puesto que la velocidad de deriva v_d, la energía ε, y cualquier expresión en base a la energía $f(\varepsilon)$ son funciones de la relación (E/p), en donde E es el campo eléctrico y p es la presión; entonces, de acuerdo a lo estudiado por Meek [15], es posible considerar la

aplicación de una Ley de tipo $\alpha/p \sim h(E/p)$ [1], en donde h es una función que se especifica en la transición del gas hacia la región de la descarga. Se han realizado medidas experimentales que se ajustan con la ecuación (2.1.5), en la cual A y B son coeficientes que varían de acuerdo al tipo de gas en estudio [6, 38]. En el Cuadro 2.1 se muestran algunos de estos resultados.

$$\frac{\alpha}{p} = A\, e^{\left(-\frac{B}{E/p}\right)} \tag{2.1.5}$$

Gas	A $\frac{1}{cm\,torr}$	B $\frac{V}{cm\,torr}$	E/p $\frac{V}{cm\,torr}$
He	3	34	20 - 150
Ne	4	100	100 - 400
Ar	12	180	100 - 600
Hg	20	370	150 - 600
H_2	5	130	150 - 600
N_2	12	342	100 - 600
O_2	8.8	275	27 - 200
Aire	15	365	100 - 800
CO_2	20	466	500 - 1000

Cuadro 2.1: Coeficientes de Townsend A y B correspondientes a la ecuación (2.1.5) tomados de [6, 38]

2.2 Efecto Ramssauer Townsend

En el año de 1.908 Townsend utilizó la medida de la velocidad de deriva y del coeficiente de difusión de una nube de electrones que se mueven en el seno de un gas, sometidos a un campo eléctrico, para obtener expresiones aproximadas de secciones eficaces. Hasta

[1] Es posible considerar la aplicación de una Ley de Universalidad para el primer coeficiente de Townsend. Una Ley de este implica que sistemas físicos muy diversos pueden exhibir conductas idénticas justo en las Transiciones de Fase.

la llegada de la mecánica cuántica, los métodos de Townsend, y sus posteriores mejoras, fueron la única manera de obtener las secciones eficaces de colisión entre electrones y moléculas de gases. La mecánica cuántica permite un cálculo teórico aproximado de las secciones eficaces, como se verá en el Capítulo 4 de esta Tesis. Hoy en día estos trabajos, con diversas modificaciones, mantienen su importancia en la determinación de secciones eficaces a muy bajas energías, por debajo de la decena de eV, donde otros métodos, como el de dispersión de haces de electrones, no consigue la precisión requerida.

En 1.921, el físico alemán Carl Wilhelm Ramssauer $(1879 - 1955)$ estudió la dispersión de electrones de muy baja energía $(0,75$ a $1,1eV)$ en los gases inertes Argón, Kriptón y Xenón y encontró un mínimo en la sección eficaz a una cierta energía. Para el argón, por ejemplo, observó que la sección efectiva de choque de esta dispersión era mucho mayor que la calculada por la teoría cinética de los gases. Los experimentos de 1.921 con un intervalo de energía mayor para los electrones, reveló una sorprendente variación en la sección eficaz de colisión. En 1.922, los físicos ingleses Sir John Sealy Townsend $(1.868-1.957)$ y V. A. Bailey examinaron la dispersión estudiada por Ramssauer para los electrones en el intervalo de energía 0 a $0,8\,eV$; y al usar un método diferente, encontraron que el camino libre máximo de un electrón ocurre cuando su energía es de $0,39\,eV$. Estos experimentos fueron publicados por Ramssauer en [39] y [40], y por Townsend y Bailey en [35], resultado que hoy es conocido como efecto Ramssauer-Townsend, el cual fue explicado por la mecánica cuántica entre 1.925 y 1.927. Adicionalmente, en 1.929, Ramssauer y R. Kollath confirmaron que los gases nobles utilizados en sus experimentos eran transparentes (no colisionaban) para una cierta *energía cinética crítica.*

2.3 Teoría de la Flámula

Una flámula es un flujo de electrones e iones que se propaga entre los electrodos en base a su propio campo eléctrico, tiene la forma de un filamento conductor. Es un canal ionizado y delgado que se forma a partir de la primera *avalancha* cuando el campo eléctrico externo alcanza la suficiente intensidad. La flámula puede estar conformada

por iones positivos o por electrones; y por tanto, avanza en la dirección correspondiente hacia el electrodo del signo opuesto. Las colas de las flámulas conforman un conductor casi perfecto, y las puntas intensifican de tal manera el campo eléctrico, que provocan el incremento, tanto del nivel de ionización como de la corriente de la descarga en esta región. Finalmente, debe decirse que la creación de la flámula no es una condición necesaria para la manifestación de la Ruptura Dieléctrica, aunque a veces es suficiente [4].

La teoría de la flámula fue desarrollada aproximadamente en el año de 1940 por Loeb, Raether y Meek [14] para tratar de explicar los fenómenos que se producían dentro de una descarga eléctrica. Para el estudio del desarrollo espacial y temporal de una avalancha pre-disruptiva de baja corriente Raether utilizó una cámara de niebla. Aplicó pulsos con intensidades de campo variables de 10 a 20 % mayores a los requeridos para la ruptura dieléctrica, con anchos de pulso variables de 15 a 210 ns, en el interior de una cámara llena de aire, con presiones de 273 y 760 $Torr$. Luego de tomar fotografías de las avalanchas en diferentes grados de desarrollo, Raether concluyó que es necesario un factor de amplificación de $\alpha x = 18,4$; $x = v_d t$, para que una avalancha se vuelva críticamente inestable, donde v_d es una *velocidad de deriva*. En este experimento, se desarrolló una chispa o flámula dirigida hacia el ánodo, a una velocidad de $10^8\, cm/s$. Después que la flámula alcanzó el ánodo, una similar arribó al cátodo, formándose un hilo conductor de tal manera que se elevaron drásticamente, tanto la corriente, como la intensidad de luz generadas. Raether concluyó que las flámulas se formaron como resultado de la foto-ionización molecular en la cabeza de la avalancha (en el caso de la flámula dirigida al ánodo). Dado que el campo eléctrico se intensifica en el frente de la cabeza de la flámula como resultado de la carga espacial, los electrones creados en esta región también ionizan muy eficientemente el gas, y con ello alargan la longitud de la flámula. Una vez que esto ocurre, los fotoelectrones generados entre el líder de la flámula y el cátodo, también ionizan el gas. Este proceso se repite continuamente hasta que la cabeza de la flámula llega al ánodo. Como resultado de lo explicado anteriormente, las flámulas se propagan a una velocidad mucho más rápida que la de una avalancha [36].

La teoría de la flámula intenta solucionar el problema del análisis para las descargas

mayores a 10 cm. El canal de plasma o canal conductor funciona como un electrodo que viaja con la descarga, y a medida que avanza el frente ionizante, disminuye la longitud de la brecha entre la punta de la flámula y el trazador en tierra. La teoría de la flámula garantiza el cumplimiento de la condición del campo eléctrico necesario para lograr la ruptura dieléctrica.

Aunque la teoría de la flámula pareció satisfacer las objeciones de la teoría de Townsend dadas por Meek para valores altos del producto presión $\times$ distancia (pd) entre electrodos, presentaba ya algunos inconvenientes:

- En primer lugar, la teoría era estrictamente cualitativa, dado que el Criterio de Raether-Meek se basa en evidencia empírica. Además de que Meek se basó de forma arbitraria en la condición de que el campo producido por la carga espacial debía ser de igual intensidad que el campo aplicado, para que se presente la transición de avalancha a flámula,

- En segundo lugar, había muchas dudas en cuanto a la validez de la foto-ionización como mecanismo fundamental de la flámula. No está claro si los fotones con la energía suficiente para ionizar podrían haberse originado en la avalancha principal. Aunque, la probabilidad de escapar de la avalancha principal sería necesariamente pequeña.

- Finalmente, incluso con los avances obtenidos faltaba todavía explicar cómo ocurre la producción de electrones libres, y cómo estos electrones pueden ser confinados para crear un canal de plasma [41].

Para el estudio inicial de la dinámica de las flámulas se consideró el modelo de fluidos cargados; pero ¿A partir de qué densidades electrónicas las avalanchas pueden convertirse en descargas de tipo flámula?. Esta pregunta tuvo una respuesta con el *Criterio de Raether Meek* [15] que se describe más adelante.

2.3.1 Efecto de la fotoionización

Sin la producción de electrones semilla en el frente de la cabeza de la flámula sería casi imposible la descarga. En recientes artículos se demuestra que una ligera varia-

ción en la distribución espacial de los electrones semilla en la cabeza de la flámula, conduce a cambios notables sobre todos los parámetros de la flámula catódica. Por tanto, debe existir un proceso que permita proporcionar una producción permanente y suficiente de estos electrones, de tal manera que se produzcan avalanchas secundarias, y posteriormente formen el canal de carga espacial. Hay unos pocos mecanismos para ello:

a El transporte difusivo de partículas cargadas desde una región de ionización intensa. Mecanismo lento que no concuerda con las velocidades altas registradas experimentalmente

b La pre-ionización de fondo normalmente causada por radiación cósmica o acumulación de partículas cargadas debido a otros procesos. Para el aire se encuentra en el rango de 10 a 1000 partículas cargadas por centímetro cúbico.

c La pre-ionización propia producida desde una región de altos campos eléctricos en la cabeza de la flámula.

En las simulaciones de las flámulas, varios investigadores excluyeron los procesos de fotoionización de sus modelos de propagación de la flámula, sustituyéndolos por un promedio de densidad de electrones no perturbados en el *fondo*. Esto debido a la suposición de que existía una dependencia ligera y logarítmica de los parámetros de la distribución espacial de los electrones semilla con respecto a los campos eléctricos fuertes. En la referencias [42], y [43] se explica el papel predominante del proceso de fotoionización del gas en la distribución de electrones semilla.

Se ha demostrado en las simulaciones, que cuando se toma en cuenta la fotoionización del gas, para las mezclas de oxígeno-nitrógeno en condiciones normales de presión y temperatura, se puede despreciar el *fondo de-ionizado*. La sustitución de la distribución real de fotoelectrones en el frente de la cabeza de la flámula mediante el fondo pre-ionizado uniforme, hace posible la coincidencia de algunas de las características de la descarga tipo flámula, aunque no todas ellas al mismo tiempo. Las características coincidentes son normalmente: la velocidad de la flámula, la conducción de corriente, y

la distribución de los electrones en la cabeza de la flámula. La fotoionización también afecta a las magnitudes del campo eléctrico en la punta de la flámula.

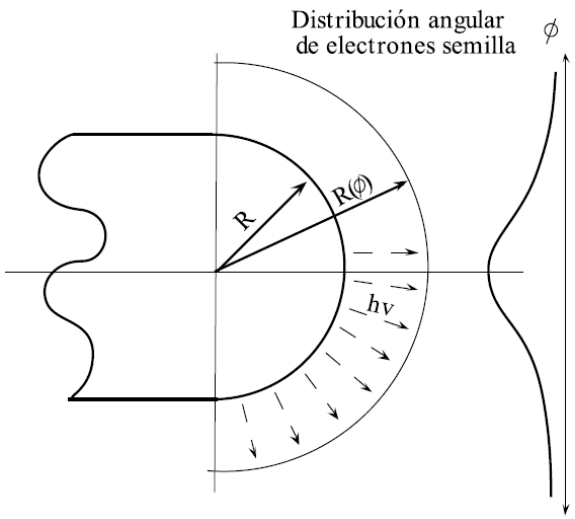

Figura 2.2: Distribución angular de electrones semilla en la cabeza de la flámula, con campo eléctrico intenso. Figura tomada y adaptada de [42]

El modelo analítico propuesto en [42, 43], y [44], permite calcular los valores del radio de la cabeza de la flámula con el valor pico del campo eléctrico. En este modelo, la fotoionización afecta directamente a la formación y propagación de las flámulas. En todo caso, antes de calcular el radio será necesario el conocimiento del potencial en la cabeza de la flámula.

En el aire, los fotones emitidos desde las moléculas pre-excitadas de N_2, pueden ionizar las de O_2, ya que tienen un umbral de ionización un poco más bajo. Los fotones tienen interacciones más débiles con las moléculas de aire que con los electrones, y pueden viajar aún mucho antes de que puedan ser absorbidos o causen la ionización de las moléculas neutras [45]. En la etapa temprana de desarrollo de la flámula, la fotoionización reduce los campos en la punta de la flámula, porque el camino libre medio de un fotón es mayor que el de un electrón, y de esta manera se amplía la región de ionización.

La cantidad de electrones producidos por la fotoionización se reduce con la presencia de vapor de agua, ya que este gas absorbe los fotones. El contenido de vapor de agua

de la atmósfera a 1 atm y 100 % de humedad es de aproximadamente 4 % a 0 $°C$ y 15 % a 20 $°C$. Esta cantidad de vapor de agua reduce la cantidad de fotoelectrones, en alrededor de 1 a 2 órdenes de magnitud a una distancia comprendida entre $0,1$ y 1 cm con respecto al lugar de emisión de los fotones. La combinación de alto contenido de vapor de agua y de presión alta a bajas altitudes tiene el efecto de minimizar la fotoionización en estas regiones.

2.3.2 El criterio de Raether Meek para la transición de avalancha a flámula

En la dinámica de las descargas eléctricas bajo la acción de un campo eléctrico externo, existe una transición desde lo que se considera como una avalancha de electrones hacia la denominada descarga tipo flámula. En la referencia [46] se presenta el criterio que Raether y Meek propusieron para esa transición. En una avalancha, la nube de electrones es controlada únicamente por el campo eléctrico externo; en otras palabras, el número de electrones es lo suficientemente pequeño, como para que la avalancha no sea perturbada por su propio campo eléctrico, también denominado como *campo de carga espacial*. Es necesario mencionar, que a medida que la avalancha se mueve en la dirección opuesta al campo eléctrico, el número de electrones aumenta de forma exponencial y se extiende por difusión. Los electrones por su alta movilidad avanzarán rápidamente en la dirección opuesta al campo eléctrico exterior. Por su parte los iones, debido a su baja movilidad, tenderán a permanecer en la misma posición donde fueron creados. Ocurrirá entonces, una redistribución de la carga espacial en la región recorrida por la avalancha, formándose un dipolo de carga y un nuevo campo eléctrico que se opone al campo eléctrico exterior inicial [41]. Si la amplificación electrónica es lo suficientemente alta, el campo de carga espacial puede perturbar el campo eléctrico externo, el que finalmente conlleva a la descarga de tipo flámula.

El criterio de Raether Meek consiste en suponer que la transición de avalancha a flámula se obtiene cuando la intensidad del campo eléctrico radial, generado a partir de la cabeza de la flámula, tiene el mismo orden de magnitud que el campo aplicado externamente [14]. Esta consideración ha demostrado ser satisfactoria y fácil de cuan-

tificar. Una vez que el campo creado alrededor de la flámula se ha incrementado hasta alcanzar la magnitud del campo aplicado, se altera inexorablemente la evolución normal de la avalancha. Si las distancias son pequeñas y los campos eléctricos son menores que el de disrupción dieléctrica, la transformación ocurre cuando la avalancha termina sus reservas de amplificación; es decir, cuando alcanza el ánodo.

A continuación se realizan las cuantificaciones indicadas, en primer lugar se establece el criterio por el cual se produce la separación de especies de partículas al interior del gas cargado, y luego con estos valores se establece el criterio de Raether Meek para la transición.

En la referencia [41] se calcula la densidad de carga necesaria para crear un dipolo eléctrico capaz de cancelar en su interior el campo eléctrico exterior, y permitir así la formación de un canal conductor. Se hace la analogía con un modelo sencillo de una esfera conductora de radio $a > \alpha^{-1}$ inmersa en un campo eléctrico exterior E_0, donde α es el primer coeficiente de Townsend. En tal caso, la carga eléctrica superficial de la esfera se redistribuirá de tal manera que en su interior se anulará el campo eléctrico E_0 (en el exterior su valor más bien se incrementará). De acuerdo con la referencia [47], la densidad de carga σ en la superficie de la esfera se encuentra dada por la ecuación (2.3.1) , en donde ϵ_0 es la permitividad eléctrica del vacío y θ es el ángulo formado entre el campo eléctrico exterior y el vector normal a la superficie de la esfera en cada punto.

$$\sigma = 3\epsilon_o E_0 \cos\theta \tag{2.3.1}$$

De la densidad de carga espacial se llega a obtener que la carga positiva y negativa que origina la polarización en la esfera de radio a está dada por la ecuación (2.3.2).

$$Q_+ = -Q_- = eN = 3\pi\epsilon_0\, a^2\, E_0 \tag{2.3.2}$$

Tomando la condición límite en la cual $a \sim \alpha^{-1}$, cuando los electrones semilla han realizado una nueva ionización, se estima que el número mínimo de electrones necesarios para la creación del canal conductor sería de:

$$N_{e\,min} \sim \frac{3\pi\,\epsilon_0\,E_0}{e\,\alpha^2} \tag{2.3.3}$$

Con $\alpha \sim 10/cm$ y $E_0 \sim 30kV/cm$, se obtiene para el número mínimo de electrones $N_{e\,min} \sim 10^9$ y para la densidad mínima el valor de $n_{e\,min} \sim 10^{11}/cm^3$.

En razón de las ideas mencionadas, una *onda ionizante* se propagará hacia los polos de la esfera inicial a lo largo de la dirección del campo eléctrico, y en los dos sentidos de acuerdo al tipo de carga. La distribución de carga sobre la esfera generará un campo eléctrico de dipolo que favorecerá la propagación en la dirección paralela al campo eléctrico exterior, mas no en la dirección transversal, creándose un canal conductor longitudinal[41]. Es interesante que se obtenga un resultado similar al realizar el análisis desde un punto de vista estadístico mediante la Tenaza de Bennet, que incluye el vector potencial magnético $\mathbf{A}$ y las densidades de corriente $\mathbf{j}$ [30].

El radio característico de una avalancha, de acuerdo a los estudios de Langevin y de Fokker Planck, puede calcularse con la Ecuación (2.3.4). En esta ecuación: D_e es el coeficiente de difusión de los electrones, x_0 es la posición nueva alcanzada luego de un tiempo t, con una velocidad de deriva v_d para los electrones con una movilidad dada por μ_e. Se puede considerar que al tiempo $t = 0$ ese radio es idénticamente cero, correspondiente a un punto singular; y la densidad de electrones es $n_e(x, t = 0) = \delta(0)$, donde δ es la función delta de Dirac. Recientes cálculos computacionales en espacios entre electrodos mayores a 5 mm permitieron demostrar que los diámetros de las flámulas positivas y negativas dependen del voltaje aplicado de la forma indicada en la ecuación 2.3.4 [12].

$$r_D = \sqrt{4D_e t} = \sqrt{4\frac{D_e x_0}{\mu_e E_0}} \tag{2.3.4}$$

En la ecuación (2.3.4) se puede observar la dependencia del radio de la nube de electrones con $t^{1/2}$; sin embargo, la tasa de crecimiento del radio $\frac{dr_D}{dt}$ en función del tiempo es proporcional a $t^{-1/2}$; de tal manera que la tasa de ensanchamiento por difusión de la esfera será cada vez menor, mientras que la repulsión electrostática aumentará y dominará el proceso de expansión. Por otra parte, el radio de la cabeza de la flámula tiende

a incrementarse debido a la repulsión electrostática interna entre las cargas del mismo signo acumuladas en la punta de la misma [37]. La contribución dada por esa repulsión dependerá de la velocidad de expansión de la nube de electrones y corresponderá al arrastre de los electrones exteriores debido al campo eléctrico E'. Sea r_R el radio de la nube dado por repulsión electrostática, y μ la movilidad de los eletrones, se tiene

$$\frac{dr_R}{dt} = \mu_e E' = \frac{\mu_e e \exp(\alpha \mu_e E_0 t)}{4\pi\epsilon_0 \, r_R^2} \tag{2.3.5}$$

Obteniéndose finalmente

$$r_R = \left(\frac{3e}{4\pi\epsilon_0 \, \alpha E_0}\right)^{1/3} \exp\left(\frac{\alpha x}{3}\right) = \frac{3E'}{\alpha E_0} \tag{2.3.6}$$

Se tiene entonces para el campo eléctrico y la densidad de los electrones:

$$E' = \frac{E_0 \alpha r_R}{3} \tag{2.3.7}$$

$$n_e = \frac{3N_e}{4\pi r_R^3} = \frac{\epsilon_0 \alpha E_0}{e} \tag{2.3.8}$$

De (2.3.7) se tiene que el campo eléctrico generado por la distribución de carga crecerá proporcionalmente al radio, mientras que la densidad permanece constante y por tanto el número de electrones crece proporcionalmente al volumen. Creciendo el radio r_R de manera exponencial, se espera que en los primeros instantes de la avalancha, el proceso de expansión dominante sea la difusión, pero después de una cierta distancia el mecanismo prevaleciente será la repulsión electrostática. Todos estos cálculos implican varias consideraciones, entre ellas, el suponer que el coeficiente de difusión D_e es isotrópico; es decir que tendrá el mismo valor en cualquier dirección, ya sea perpendicular $D_\perp$ o paralela al campo eléctrico $D_\parallel$ [37].

2.3.3 Estadísticas en la transición de avalancha a flámula

Recientemente se ha resuelto uno de los problemas fundamentales de la teoría de las flámulas, se refiere al comportamiento estadístico anómalo de las avalanchas grandes precursoras de las flámulas para poblaciones de electrones con densidad mayor a 10^4 [16]. La anomalía consiste en que para las avalanchas de electrones, existen desviaciones

sistemáticas de la distribución exponencial de Furry, que ha sido considerada como una ley estadística exponencial y general para todas las avalanchas, independientemente de su tamaño. Pruebas experimentales basadas en diferentes métodos de ensayo han identificado a la función de densidad de probabilidad de Pareto como una distribución fiable para avalanchas con población relativamente alta [16]. La estadística de Furry se explica con la ecuación (2.3.9), en donde $w(n, d)$ es la función de distribución de probabilidad de que se presente una avalancha de n electrones a la distancia d.

$$w(n) = \frac{1}{\overline{n}}\left[1 - \frac{1}{\overline{n}}\right]^{n-1} \tag{2.3.9}$$

En la ecuación (2.3.10) $\overline{n}$ es la cantidad de partículas totales a la distancia d con $\alpha(x')$ el primer coeficiente de Townsend a la distancia x'.

$$\overline{n} = exp\left[\int_0^x \alpha(x')dx'\right] \tag{2.3.10}$$

El equipo de Raether reveló que las avalanchas con poblaciones bajas ($\overline{n} < 10^5$) mostraban un comportamiento exponencial. La cual es en efecto la distribución de Furry cuando $\overline{n} \to \infty$ [17].(Ecuación (2.3.11))

$$w(n) = 1/\overline{n} \cdot exp(-n/\overline{n}) \tag{2.3.11}$$

Por otra parte la distribución de Pareto obedece una Ley de Potencias tal como se muestra en la ecuación (2.3.12), en donde c_0 es una constante, y D es una dimensión fractal (Un valor típico es $D = 0,471$ para $E/p = 52\frac{V}{mPa}$)

$$w(n) = c_0 \cdot n^{-(1+D)} \tag{2.3.12}$$

Si se tienen dos distintas estadísticas acerca del mismo problema, con respecto al número de partículas que existen a una cierta distancia del punto inicial de arranque de la avalancha, entonces la una debe llevar a la otra y las dos deben llevar a la estadística exponencial propuesta inicialmente por Townsend. El hecho de que existan dos tipos de estadísticas no es trivial o solamente matemático, tiene una razón de fondo. La razón para esta discrepancia es causada por no haber incluido cargas espaciales interiores cuyos campos eléctricos pueden competir con el campo eléctrico de fondo en

el espacio de la descarga. La observación detallada de la función de distribución estadística generalizada muestra cómo una superposición especial de funciones elementales puede generar una nueva forma funcional que muestra una conducta perfecta de ley de potencia, que es característica de los fenómenos fractales [20, 13]. El nuevo enfoque de las estadísticas de las poblaciones de avalanchas de electrones puede ayudar a mejorar la comprensión de aquellos detalles pertinentes relacionados con la teoría de la flámula, ya que el comportamiento estadístico de las avalanchas pre-flámula, inevitablemente, determina las estadísticas de los procesos posteriores [16]. Las inconsistencias entre los dos tipos de estadísticas se debe a la manifestación de avalanchas laterales adicionales [48].

2.4 Modelo de Aceleración Continua

El mecanismo principal del Modelo de Aceleración Continua es la aceleración de los electrones en un medio gaseoso, de tal forma que el medio parece que no estuviera presente. Stankievich y Kalimin [36] realizaron experimentos que establecieron la existencia de electrones rápidos con energías en el orden del voltaje aplicado, cuando el campo eléctrico aplicado era del 300 al 400 % del necesario para producir la disrupción dieléctrica del aire. En sus experimentos colocaron un centellador y un foto-multiplicador detrás del ánodo, y observaron la presencia de rayos X. En tales investigaciones se llegó a la conclusión de que cada electrón ganó un promedio de $1\,keV$ de energía por unidad de camino libre medio. Babich utilizó la ecuación (2.4.1) para el cálculo de la energía de los electrones.

$$\frac{d\varepsilon}{dx} = e\,E - \left(\frac{d\varepsilon}{dx}\right)_{perdida} \tag{2.4.1}$$

En la ecuación (2.4.1) $\frac{d\varepsilon}{dx}$ es la energía adquirida por un electrón por unidad de distancia. E es el campo eléctrico aplicado, e es la carga del electrón y $\left(\frac{d\varepsilon}{dx}\right)_{perdida}$ es función de la pérdida de energía como resultado de las colisiones inelásticas. La función de pérdida fue investigada por Peterson y Green y se encontró que tienen un máximo cuando la energía es de aproximadamente $100\,eV$. Si el campo eléctrico externo tiene la fuerza suficiente para cruzar este umbral, entonces se produce una aceleración continua

de los electrones porque la función de pérdida disminuye con la energía de los electrones en este caso. A continuación se describe este fenómeno con mayor amplitud.

2.4.1 Electrones fuera de control

Los electrones en una descarga eléctrica no tienen una velocidad límite tal como se pensaba, y pueden convertir al aire en una materia transparente, especialmente cuando los electrones ganan una energía superior a cierto umbral. El concepto antiguo de la velocidad límite se ha utilizado en ciertas simulaciones, especialmente en la del Modelo de Fluidos. En la referencia [45] se estima la probabilidad de que electrones fríos puedan ser acelerados por un campo eléctrico ambiental hacia un régimen de fuera de control, y discuten las implicaciones para la formación de flámulas negativas. Las simulaciones presentadas en [45] muestran que la magnitud del campo eléctrico necesario para que flámulas térmicas produzcan electrones fuera de control es menor que la sugerida por otros estudios publicados en los últimos años, ver [19] y [37].

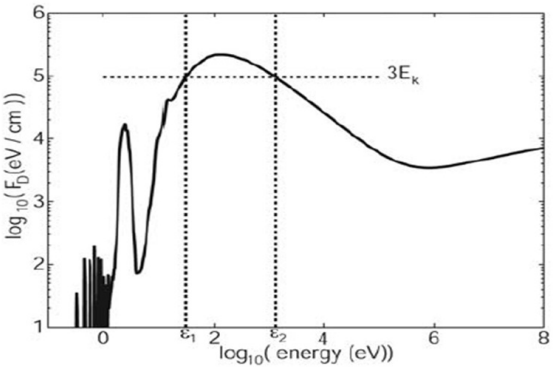

Figura 2.3: Fuerza de fricción del aire compuesto por 80 % de N_2 y 20 % de O_2 a 1 atm. El valor de ε_1 es la primera energía de equilibrio y ε_2 es una energía umbral para que se produzcan los electrones fuera de control. Figura obtenida y adaptada de [45]

El estudio realizado en [45] fue motivado por el descubrimiento de estallidos de rayos Gamma en la estratósfera. Los así llamados rayos Gamma terrestres tienen una duración de pocos milisegundos. Se cree que la radiación es Bremsstrahlung con energías en el orden de los MeV. La observación va en contra del conocimiento convencional de que la descargas en el aire son de electrones con energías por debajo de unas pocas decenas de eV. Los resultados presentados en las referencias bibliográficas sugieren que las teorías de la flámula negativa y la propagación del arco deben ser re-examinadas con una

mejor caracterización de los efectos de la cinética de los electrones. Para la simulación de este fenómeno se utilizaron programas de computación de partículas individuales que han logrado describir adecuadamente el proceso de aceleración. El cálculo de la probabilidad para que los electrones lleguen al régimen de fuera de control, muestra que incluso con campos modestos, los electrones térmicos pueden ser energizados hacia el régimen de fuera de control, debido a que crean una columna en el frente de la flámula que afecta a su propagación. El efecto explicado anteriormente ha sido simulado con un algoritmo de tipo $PIC - MCC$ (Particle in Cell Monte Carlo Collision) [45]. En las simulaciones se aceleraron electrones fríos hacia el régimen de fuera de control para una serie de campos eléctricos de fondo, muy por debajo de $E_{max} = 7,5\ E_k$ en el aire. En donde E_k es el valor de la disrupción dieléctrica del aire en condiciones normales de presión y temperatura $\sim 30\ kV/cm$.

Como comprobación de los resultados teóricos y de simulación para los electrones fuera de control, se han podido medir Rayos X duros de 300 keV, y Rayos Gamma de 10 MeV con 10 μs de duración. Los resultados indican que existe en principio una probabilidad finita de que un electrón frío se acelere hacia el régimen de fuera de control. Con bajos campos eléctricos el equilibrio es estable; sin embargo, con campos altos los electrones se disparan hacia el régimen fuera de control. Hay evidencias de aceleración desde electrones fríos hacia rayos en trayectorias de hasta 90 km de longitud. En la referencia [49] se proveen incluso datos de secciones eficaces para la producción de pares electrón-positrón en el régimen fuera de control, aunque este último proceso parece ser muy poco probable.

2.5 El Modelo de Dos Grupos

Motivados en parte por los resultados tanto teóricos como experimentales, en parte por las inconsistencias en los otros modelos, y en parte por los experimentos de Phillips y Allen sobre el retardo de tiempo de la descarga, Kunhardt y Byszewski introdujeron el Modelo de Dos Grupos para la descarga. El modelo es atractivo, ya que proporciona una imagen completa: para sobre-tensiones elevadas, con el modelo de aceleración continua;

y para sobre-tensiones bajas con el modelo Townsend . La premisa fundamental fue de que la función de distribución de energía de electrones, se compone de electrones rápidos y lentos (térmicos). Dado que la sección eficaz de colisión de un electrón es una función decreciente de la energía después que alcanza el umbral, existe una probabilidad finita de que se produzcan electrones fuera de control, la misma que depende del campo eléctrico aplicado, y de los parámetros del gas. La carga espacial electrónica juega en este modelo el mismo papel importante que en la teoría de la flámula, pues intensifica el campo eléctrico en la cabeza de la avalancha. En este caso, los electrones fugitivos salen fuera de la avalancha principal, hacia regiones en donde el campo local disminuye, y muchos de ellos son atrapados. El crecimiento de ionización se produce a diversas distancias de la avalancha madre, y la avalancha se extiende con rapidez hacia el ánodo [36].

2.6 Modelo de la Ruptura Dieléctrica

El Modelo de la Ruptura Dieléctrica (MRD) es un modelo matemático y computacional para simular una descarga eléctrica en un medio material [22, 13, 50]. Las descargas eléctricas en gases constituyen un sistema dinámico en el cual las ecuaciones de Maxwell y particularmente la electrostática de Laplace se manifiestan a cada instante. La similitud entre el (MRD) y el Modelo de Fluidos que se presenta en el siguiente capítulo, radica en que la nube electrónica de una flámula, mientras fluye, se convierte en algo parecido a un conductor cuyo efecto domina incluso sobre el campo eléctrico externo aplicado. El algoritmo consiste en resolver la ecuación de Laplace en una rejilla discreta en dos o tres dimensiones, y el crecimiento de la descarga en ese medio se basa en las siguientes reglas:

1. La estructura de la descarga crece paso a paso. El potencial eléctrico se actualiza en cada iteración, para todas las posiciones de la cuadrícula, mediante la solución de la ecuación de Laplace en su versión discreta, con las siguientes condiciones de frontera: Voltaje 0 para cada punto de la descarga, y Voltaje de valor 1 para cada punto de un círculo externo, que atrae la descarga. (Esto último, si se considera una simetría cilíndrica)

2. A cada paso, un segmento nuevo es adherido al patrón, el mismo que une a un punto de la estructura con un nuevo punto. Los posibles candidatos son los puntos cercanos que se encuentran a un solo paso de algún otro punto de la estructura.

3. A cada uno de los posibles puntos se les asocia una probabilidad que depende de la diferencia de potencial entre los puntos (el campo eléctrico local resuelto con la ecuación de Laplace)

4. La probabilidad de que un punto (i, j) pase a ser un nuevo punto (i', j') y sea alcanzado por la estructura viene dada por la ecuación (2.6.1).

$$p(i, j \to i', j') = \frac{(\phi_{i,j})^{\eta}}{\sum(\phi_{i,j})^{\eta}} \tag{2.6.1}$$

La ecuación (2.6.1) describe una dependencia, bajo una ley de potencias con exponente η, entre el potencial eléctrico y la probabilidad. La suma en el denominador se refiere a todos los posibles pasos para el crecimiento de la estructura. Con esta distribución de probabilidad se escoge aleatoriamente un nuevo punto, el cual se adhiere al patrón de descarga. Evidentemente, el segmento que los une también pasa a formar parte de la estructura. A partir de esta última adhesión, el proceso se inicia nuevamente.

Estas reglas definen el crecimiento desde el centro, y no permiten que un segmento cruce a otro, y por tanto el camino es siempre conexo. Lo más importante de este modelo estocástico es que la probabilidad de crecimiento depende del potencial eléctrico determinado por el patrón de descarga equipotencial. A cada paso se debe resolver la ecuación de Laplace [51], la cual en su versión discreta para una cuadrícula bidimensional se escribe como la ecuación (2.6.2).

$$\phi_{i,j} = \frac{\phi_{i-1,j} + \phi_{i,j-1} + \phi_{i+1,j} + \phi_{i,j+1}}{4} \tag{2.6.2}$$

En la Figura (2.4) se muestra una estructura creada usando el MRD para una simetría cilíndrica. El modelo se asemeja al DLA (Diffusion Limited Aggregation) que se describe a continuación.

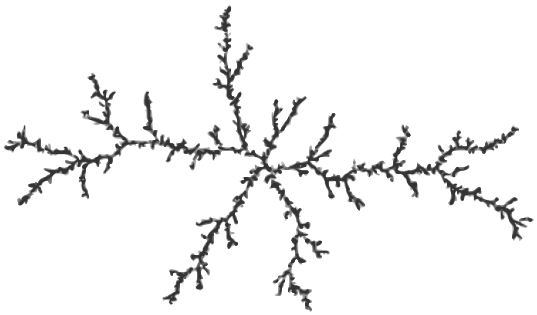

Figura 2.4: Ruptura dieléctrica en 2 dimensiones con $\eta = 2$, Figura tomada y adaptada de la referencia [13]

Como se puede observar de la Figura (2.4), el MRD permite explicar muchos fenómenos que se observan en las descargas. A pesar de que el modelo es bastante sencillo, los resultados de las simulaciones son bastante sorprendentes, pues incluso se llega a predecir la presencia de ramales. Una de las deficiencias del modelo está en que para la evaluación del parámetro η no se considera la física del problema. Tampoco se estudia la dinámica de las partículas del sistema, y mucho menos la generación de electrones e iones mediante el impacto de los electrones acelerados contra otras moléculas del medio gaseoso. Un modelo más elaborado se presenta en la referencia [50].

2.7 Modelo de Agregación Limitada por Difusión

El Modelo de Agregación Limitada por Difusión (DLA) simula la forma geométrica que se presenta cuando se impregnan partículas de carbón de la atmósfera sobre un sólido y forman un conglomerado. El modelo DLA fue propuesto por L. M. Sander y Witten [50, 52] de la Universidad de Michigan en el año de 1.981 como una explicación matemática para este fenómeno. El agregado es justamente un conjunto conectado de sitios ocupados. Imaginemos una partícula que viene desde el infinito y llega hasta una celda vecina en esa red. A esta partícula se la puede considerar como un caminador aleatorio debido a que a cada paso, la dirección que toma es al azar. Este proceso continúa paso a paso hasta que el caminante llega a una celda en la cual existe un sitio que ya está ocupado y se estaciona junto a él, y de esta manera, el agregado crece en una unidad. Es entonces que un nuevo caminante es emitido desde el infinito y el proceso

comienza de nuevo. La estructura que se forma mediante este proceso, tiene ramales y sitios vacíos, tal como se muestra en la figura (2.5).

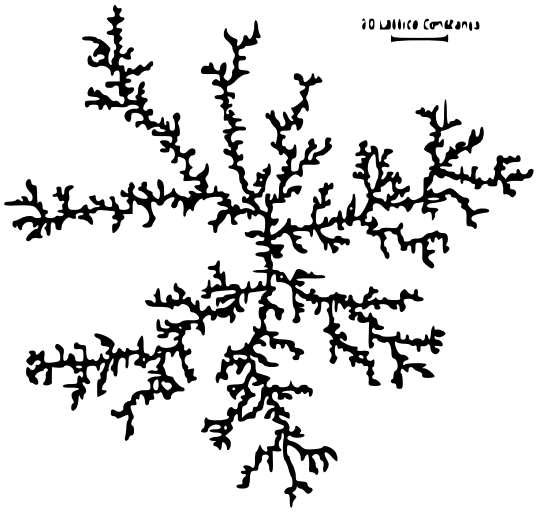

Figura 2.5: Agregado de 3,600 partículas en 2 dimensiones. Figura tomada y adaptada de [52]

Luego de varios estudios comparativos, se ha determinado que tanto el proceso descrito por el DLA como el MRD están relacionados con una matemática fraccionaria. La utilidad de los modelos fractales se encuentra en que las gráficas predichas son invariantes de escala, más precisamente son *auto-similares*, incluso ciertos objetos fractales pueden tener diferentes factores de escala simultáneos, que son estudiados actualmente con el análisis multi-fractal. En la referencia [52] se estudian las correlaciones de la densidad dentro de este modelo, y de acuerdo a ellos se ha hecho evidente que el radio de acción tiene un comportamiento de ley de potencias. Incluso en la Figura (2.5) se puede notar, la propiedad de auto-similaridad, pues si se amplifica una pequeña región dentro de un ramal del DLA, se observa que no hay diferencias fundamentales con relación a la gráfica completa.

2.8 El Modelo de Partículas en una Celda

El Modelo de Partículas en una Celda (PIC) se apoya en la división del espacio del sistema de partículas bajo estudio en un número no muy grande de pequeñas celdas.

En cada instante de la evolución se cuenta el número de partículas y la velocidad media en cada celda, con lo que se obtienen densidades de carga y de corriente que, insertadas en las ecuaciones de Maxwell, permiten calcular los campos electromagnéticos [32]. Tras ello, se calcula la fuerza ejercida por estos campos sobre cada partícula y se actualiza su posición, repitiendo este proceso tantas veces como sea necesario. Es claro que para conseguir el máximo detalle del modelado de un plasma, se debería describir la dinámica de cada una de sus partículas de acuerdo con la segunda ley de Newton. Para hacer esto con total exactitud en un sistema de N partículas habría que calcular N^2 interacciones en cada momento [53]. El PIC es muy exigente en recursos computacionales y está intrínsecamente sujeto a la distribución del campo electromagnético. En la gran mayoría de los casos, se exceden las capacidades de cálculo de los mejores ordenadores actuales. Es por esta razón, que la mayoría de las simulaciones PIC se realizan en una dimensión, aunque el uso de técnicas numéricas más rápidas y de ordenadores más potentes ha permitido su desarrollo en más dimensiones. En este sentido las técnicas de PIC se presentan como un complemento de los métodos basados en la mecánica de fluidos, ya que éstos se comportan de forma adecuada para determinar los efectos macroscópicos de un plasma, aunque no son tan útiles para determinar el comportamiento no lineal de pequeños subgrupos. Mediante el PIC las densidades de carga se determinan en los puntos de la red mediante la interpolación de la carga desde las distintas posiciones de las partículas, y la ecuación de Poisson se resuelve en la red utilizando métodos de diferencias finitas. Los campos eléctricos calculados en la malla a partir de los potenciales pueden ser interpolados de nuevo utilizando las coordenadas de las posiciones de las partículas, y las ecuaciones de Newton se utilizan para mover las partículas. Por esta razón las partículas de simulación también se conocen como *nubes*, ya que tienen un tamaño finito y pueden pasar la una a través de la otra [10, 45, 54].

2.9 Modelos Para Descargas Largas

El conocimiento de la forma geométrica de las descargas largas es crucial para obtener la probabilidad de que una descarga eléctrica atmosférica impacte sobre alguna estructura definida o algún edificio. Para lograr este cometido, cree el autor, que es necesario

estudiar primero las descargas cortas, debido a que contienen la física de las partículas que intervienen en el proceso. La interrelación entre los estudios de las descargas cortas con las largas, permitiría obtener un modelo más integral.

2.9.1 Modelo fractal

Una de las características más llamativas de las descargas eléctricas atmosféricas, es el comportamiento aleatorio de su propagación en el espacio. La trayectoria del líder del relámpago tiene una estructura compleja y tortuosa, tanto del canal como de los ramales principales, la misma que normalmente se desvía de las líneas del campo eléctrico. La característica al azar inherente a la propagación de la descarga conduce, por una parte al aumento del voltaje de ruptura dieléctrica del aire, y por otra, al cambio de dirección del canal del líder en el espacio. En las referencias [22] y [7] se han realizado simulaciones computacionales en las que se ha tomado en cuenta este modelo.

El modelo fractal de las descargas eléctricas consiste en considerar que su estructura topológica es reproducible en una dimensión fraccionaria. Se ha definido de acuerdo a la geometría euclidiana que la dimensión de una línea recta es $d = 1$; la de una superficie es $d = 2$; y la de un volumen es $d = 3$. Puesto que no se trata de ninguna de éstas, la dimensión fraccionaria de la trayectoria de una descarga eléctrica en el espacio tendrá que estar entre 1 y 3. Una dimensión fractal no es más que una representación matemática de un objeto geométrico determinado, que permite facilitar ciertos cálculos, la dimensión verdadera sobre la cual se desarrolla una descarga es definitivamente $d = 3$. Para determinar la dimensión de este tipo de forma geométrica se pueden utilizar diferentes definiciones de medida fraccionara, la que se define a continuación es la denominada Dimensión de Hausdorff-Besicovitch [20]. Con la ecuación (2.9.1) se puede calcular la dimensión del camino de una descarga, como el valor crítico de d para el cual $M(d)$ cambia desde cero hasta infinito. En la ecuación (2.9.1) $N(r)$ es el número de cuadrados de tamaño r necesarios para recubrir la estructura de la trayectoria, γ y ζ son constantes, y D_H es la Dimensión de Hausdorff del sistema en particular [20, 13].

$$M(d) = \gamma N(r) r^d \tag{2.9.1}$$

$$N(r) = \zeta\, r^{-D_H} \tag{2.9.2}$$

El modelo fractal permite predecir los caminos observados de las descargas eléctricas y describir los efectos de la tortuosidad del canal del rayo. Por esta razón, recientemente, esta teoría se ha utilizado para modelar las trayectorias observadas de los rayos y vaticinar el impacto de un rayo sobre estructuras típicas. Algunos de los resultados exitosos del modelado fractal incluyen:

- La determinación de la probabilidad de impacto en función del ángulo de intercepción
- La predicción del punto de impacto en una estructura
- El cálculo de la probabilidad del impacto lateral en estructuras altas, y
- La descripción de los efectos de la tortuosidad y ramificación del canal del rayo

Como resultado del análisis fractal se llega a la conclusión de que el acercamiento del líder del relámpago de la nube tormentosa, mientras está lejos, no depende de la existencia de los objetos en tierra. Esto es válido únicamente hasta que el líder llega a una distancia cercana a la estructura en tierra u objetivo [9]. La distancia determinante para que una descarga eléctrica se empalme con los trazadores en tierra puede variar de caso en caso. Esto se debe a las variaciones en la intensificación del campo eléctrico en la vecindad de la estructura, causada por las características al azar del canal del rayo.

En [22] se demuestra que tanto la polaridad del rayo, como la geometría del objetivo o blanco hacia donde confluirán los rayos, tienen efectos significativos sobre la probabilidad del impacto. También se han examinado los efectos del blindaje de las estructuras cercanas más altas, las probabilidades de impacto a los objetos supuestamente protegidos, y los efectos de la topografía del terreno. Los resultados obtenidos teóricamente permitirían definir ciertas normas para la protección de estructuras contra el rayo [11].

2.9.2 El modelo electro-geométrico

Este modelo consiste en considerar que una esfera imaginaria de radio R gira en tres dimensiones alrededor de los puntos críticos del lugar a proteger, y aquellos puntos en donde esta esfera no toca, implica que estarán protegidos ante el impacto de rayos. Este es un modelo totalmente empírico que tiene mucha aceptación en ingeniería [55, 6, 56]. Para la determinación de la zona de la protección de una estructura, y para el cálculo del radio de la esfera, se han utilizado métodos experimentales bastante elaborados. Este modelo se basa en pruebas de laboratorio del alto voltaje que implican chispas relativamente cortas. También, mediante el Klydonómetro, [1, 2] se han medido las corrientes de los rayos y se ha calculado el radio de protección. En la ecuación (2.9.3), se muestra la relación que existe entre el radio de la esfera rodante de protección R, en función de la corriente de descarga, en donde A_0 e I_0 son constantes de proporcionalidad. Usualmente, R y A_0 se dan en metros, I e I_0 se dan en Amperios. Valores típicos son $A_0 = 10\ m$ e $I_0 = 1{,}000\ A$.

$$R = A_0(I/I_0)^{2/3} \tag{2.9.3}$$

Con la ecuación (2.9.3) se puede calcular el volumen de protección práctico para muchos tipos de estructuras, aunque el radio de cobertura parece ser demasiado pequeño comparado con el de la protección supuestamente real. Por otra parte, para calcular el radio con la ecuación (2.9.3), se deberá asumir algún valor de la corriente del supuesto rayo que va a impactar. Por todas estas razones, este modelo resulta ser empírico e insuficiente desde el punto de vista físico, aunque se debe destacar, que ya se presenta cierta compatibilidad con el modelo fractal anteriormente descrito.

2.9.3 Modelo del canal

Las descargas atmosféricas Nube-Tierra han sido las más ampliamente estudiadas, debido a la mayor cantidad de registros y medidas existentes en el mundo. Estos conocimientos han orientado el estudio de la física del rayo hacia este tipo de descarga. Las siguientes son las etapas del proceso completo de la Descarga Eléctrica a Tierra (DEAT) aceptadas por la Comunidad Científica Internacional [9]:

- Encendido de la descarga (Preliminary breakdown)
- Líder escalonado (Stepped leader)
- Proceso de enlace (Attachment process)
- Descarga de Retorno (Return stroke)
- Corriente continuada (Continuing current)
- Componentes M (M components)
- Cambios K (K changes)
- Descargas subsecuentes (Subsequent strokes)

Sólo las dos primeras etapas están relacionadas con el presente trabajo, ya que son las que determinan la conexión del líder descendente del rayo con tierra o con alguna estructura presente. El inicio de la DEAT negativa se debe a la formación de flámulas dentro de la nube (en la región inferior de carga negativa, de acuerdo al modelo tripolar de Wilson y Simpson) [9], a causa de los altos campos eléctricos allí presentes (de $0,1$ a 1 MV/m). La propagación de estas flámulas lleva a la recombinación de cargas en la base de la nube y a la formación de un *canal eléctrico* a partir del cual comienza a desarrollarse el líder del rayo. Aún no hay total claridad de la forma exacta de cómo se producen estas flámulas dentro de la nube; sin embargo, la mayor discusión y controversia se concentra en la forma cómo se propagan. Existen dos principales modelos conceptuales, el unipolar y el bipolar. El concepto unipolar fue propuesto inicialmente por Schonland en 1.938, y asume que el rayo es iniciado por el desarrollo de flámulas unipolares, lo cual concordó con las interpretaciones de mediciones de campo eléctrico hechas posteriormente por Ogawa y Brook. Phelps concluyó adicionalmente que las flámulas unipolares podían propagarse e intensificarse en un campo aproximadamente igual a $300\,kV/m$, basándose en su comportamiento de propagación. Por otra parte, el concepto bipolar fue planteado por Kasemir en 1,950, y considera que el rayo es iniciado por flámulas bipolares con carga neta cero y cuya fuente de energía es el campo electrostático. Posteriormente, Loeb aseguró que el rayo se iniciaba por la auto-propagación simultánea de flámulas positivas ascendentes y negativas descendentes; es decir, como flámulas bipolares acorde con la teoría de Kasemir, que se producen ante un campo

eléctrico alto. Las diferencias en cuanto al inicio del rayo a partir de flámulas unipolares o bipolares, han llevado también a diferentes modelos del líder del rayo. La localización del punto de origen de la DEAT se ha hecho mediante la medición de las variaciones del campo eléctrico del encendido de la descarga, o determinando las fuentes de radiación VHF (Very High Frequency) producidas dentro de la nube y mediante sistemas tridimensionales de mapeo [9].

Capítulo 3

FUNDAMENTOS TEÓRICOS

En este Capítulo se estudia la trayectoria de los electrones en el aire a partir de la teoría relacionada con los fenómenos de transporte y difusión. En primer lugar se analiza la ecuación de Boltzmann, y su relación con las funciones de distribución y las colisiones entre sus partículas constituyentes. En segundo lugar, se presenta el modelo de fluidos para enlazar la densidad de electrones y las densidades de corriente con las tasas de ionización y recombinación. En tercer lugar, se presentan la ecuaciones de Kramers y de Vlasov. Después, se desarrolla una solución analítica para la geometría de placas planas, en base a conceptos de probabilidad, estadística y el movimiento Browniano bajo la acción de un campo externo. Finalmente, se presenta la solución a la ecuación de Laplace para el caso de una geometría de tipo punta placa, resultado que se utilizará en la simulación correspondiente del siguiente capítulo.

3.1 Probabilidad Direccional de una Descarga

Para determinar el destino probable de impacto de una descarga eléctrica atmosférica, es necesario conocer la trayectoria de las partículas, es decir, su ecuación de movimiento en las tres dimensiones espaciales y el tiempo. La enorme cantidad de partículas presentes en el medio complican el conocimiento de ese camino. Sería imposible conocer en donde están, y a qué velocidad se mueven cada una de las 6×10^{23} partículas presentes en una mol de sustancia en cada instante de tiempo. El estudio se facilita si se toma en cuenta el efecto del *fondo positivo* de los iones del gas [57], ya que en ese caso, los electrones pueden considerarse como *independientes*. Es por esto, que el pro-

blema debe estudiarse desde del punto de vista de un *grano* de dimensiones adecuadas, ya que existe un compromiso en cuanto al enfoque del problema: si es macroscópico, se pierde información acerca del camino de los electrones en el medio; en cambio, si es microscópico, resulta dificultoso el estudio de la influencia del medio sobre los electrones. De hecho, la Teoría Cinética que se describe después en este Capítulo, implica un conocimiento a nivel *mesoscópico*, es decir, un nivel intermedio, entre la dinámica individual de las partículas y los modelos continuos.

Dado que la dirección que toman los electrones de la descarga no es única, el radio del conglomerado se ensancha a medida que los electrones se separan del cátodo. Los radios y/o ángulos de ensanchamiento se los puede contabilizar estadísticamente, y tendrán un cierto valor medio y una cierta desviación estándar. Esta dirección se define como la Probabilidad Direccional de una Descarga. El camino que toma una descarga eléctrica en el aire o en un gas de otro tipo, depende de varios factores, como son: la relación E/p (campo eléctrico/presión) [15], las especies de moléculas y otras partículas entre las cuales circulan los electrones, el tiempo transcurrido, la temperatura del medio, entre otros. No se puede dejar de lado el cambio de dirección de la descarga, debido: al efecto del campo eléctrico local producido por la acumulación de partículas cargadas; a la formación de estructuras de tipo flámula; a la generación de otras partículas cargadas a lo largo de la trayectoria; y al efecto magnético de la Tenaza de Bennett producido por la corriente de partículas cargadas [30]. De cualquier forma, son los electrones líderes recientemente creados, los que establecerán el futuro crecimiento de los ramales y de la descarga principal.

3.2 Difusión de Electrones en un Medio Gaseoso

Podría considerarse que la propagación de electrones en un medio gaseoso, es similar a la difusión de moléculas de una especie **A** en un gas molecular de especies **B** § 1.6. En un proceso de difusión, los choques entre las moléculas son los responsables del

establecimiento del equilibrio [1], y por consiguiente del establecimiento de la Ley de Distribución de Velocidades de Maxwell. Es necesario mencionar, que tanto los electrones como las moléculas de aire a nivel microscópico, ya no se comportan más como las partículas que nos son familiares, sino más bien como ondas de materia, de acuerdo a los conceptos básicos de la Mecánica Cuántica (QM). En todo caso, la similitud de este proceso con uno de difusión molecular es válida, a pesar de que se trata de partículas esencialmente diferentes; por una parte, las moléculas normalmente se estudian mediante la estadística de Bose-Einstein, mientras que los electrones son estudiados con la estadística de Fermi-Dirac.

Con las consideraciones indicadas, dentro de un análisis muy simplificado de este tema, se pueden hacer ciertos cálculos preliminares. De acuerdo a la ley de Distribución de Velocidades de Maxwell, la velocidad de las moléculas de un gas, depende únicamente de la temperatura, y de la masa individual de cada molécula [33]. A temperatura ambiente, las moléculas de aire tienen velocidades medias de aproximadamente 500 m/s, y las de Hidrógeno de 1.800 m/s, valores que se calculan al despejar la velocidad v de $\frac{mv^2}{2} = \frac{3}{2}k_BT$. De acuerdo a este análisis, la velocidad promedio de los electrones en el aire, a temperatura ambiente, sin considerar que existe ningún campo eléctrico o magnético aplicado, sería de 114.000 m/s.

La difusión de electrones de *incepción* en gases, puede estudiarse sin mayores inconvenientes, en vista de que los electrones pueden considerarse independientes § 4.2.1 uno del otro; entre otras cosas, porque el potencial de interacción de una partícula dentro de un gas cargado de tipo plasma, ya no es de rango infinito, sino que se disipa a una cierta longitud de Debye (ecuación 1.3.1). Aún más, la energía de ionización de las moléculas de Oxígeno y de Nitrógeno sobre los 10 eV, previene la posibilidad de que un electrón con energías relativamente bajas, menores a este umbral, pueda producir reacciones químicas inmediatas después de cada choque.

[1] Los procesos de descarga se estudian en la física fuera del equilibrio, siendo realmente mecanismos lejanos a ese equilibrio [58]. Además, son procesos irreversibles, ya que el paso del estado final al inicial sería imposible sin antes realizar alguna compensación [59].

3.2.1 Difusión en el transcurso del tiempo, velocidad de deriva

La dinámica de una partícula cargada en el interior de un ensamble de moléculas se puede analizar con ayuda de la ecuación de Langevin (3.2.1) [60]. Se debe recordar, que las colisiones cambian brusca y aleatoriamente la dirección del movimiento de los electrones; y que después de cada choque, cada uno de ellos es nuevamente acelerado por el campo externo a lo largo de las líneas de fuerza del campo eléctrico $\mathbf{E}$ [2]. A este movimiento sistemático a lo largo de $\mathbf{E}$ se le denomina de *deriva*.

$$m\dot{\mathbf{v}} = \mathbf{F} - \gamma\mathbf{v} + [\sigma][\zeta] \tag{3.2.1}$$

Cuando un conjunto de partículas se comportan de manera similar en un sistema dado, es posible tomar el valor medio en cada lado de la ecuación (3.2.1) para obtener la (3.2.2). Al realizar el promedio, el tercer término de la derecha se hace cero, ya que las colisiones a las cuales representa, son debidas al azar, y por lo tanto, están en todas las direcciones. Con esta consideración, se obtiene la ecuación (3.2.2).

$$m\frac{d\langle\mathbf{v}\rangle}{dt} = \mathbf{F} - \gamma\langle\mathbf{v}\rangle \tag{3.2.2}$$

Si se considera únicamente la dirección en Z, con un campo eléctrico E_z, como la única fuerza que actúa sobre la partícula inmersa en el fluido, se obtiene la velocidad que se muestra en la ecuación (3.2.3).

$$\langle\mathbf{v}\rangle = -\frac{eE_z}{\gamma}(1 - e^{-\gamma t/m}) \tag{3.2.3}$$

Al reemplazar γ por k_BT/D de acuerdo al *Teorema de Fluctuación Disipación*, se obtiene la ecuación (3.2.4), donde k_B es la constante de Boltzmann y D es el coeficiente de difusión en el tiempo t.

$$\langle\mathbf{v}\rangle = -\frac{eDE_z}{k_BT}(1 - e^{-tk_BT/Dm}) \tag{3.2.4}$$

[2] En un gas débilmente ionizado, las colisiones son primordialmente con partículas neutras.

Se puede observar en la (3.2.4) que cuando t tiende al infinito, la exponencial tiende a cero, y la velocidad de deriva v_d tiende a un valor independiente del tiempo (ecuación (3.2.5)) [3]; en cambio, si t tiende a cero, la velocidad es más bien dependiente del tiempo, tal como la que se muestra en la ecuación (3.2.6) [61].

$$\langle \mathbf{v}(t) \rangle_{t\to\infty} = v_d = -\frac{eDE_z}{k_B T} \tag{3.2.5}$$

A partir de la ecuación (3.2.5) se puede definir el concepto de movilidad de los electrones μ como $v_d \equiv -\mu E_z$.

$$\langle \mathbf{v}(t) \rangle_{t\to 0} = v_0 = -\frac{eE_z t}{m} \tag{3.2.6}$$

En la ecuación (3.2.6) se puede observar, que la velocidad inicial durante los primeros instantes de tiempo dentro de la difusión, se acelera uniformemente, como si la partícula estuviera libre.

En (3.2.4), y (3.2.5), el único término supuestamente desconocido, es el de la constante de difusión D. El coeficiente D se puede estimar con la ecuación (3.2.7), obtenida a partir de la teoría cinética [62]. En ella p es la presión a la cual se encuentra el fluido, m es la masa reducida considerada entre el electrón y las moléculas de aire $\left(\frac{1}{m} = \frac{1}{m_{Aire}} + \frac{1}{m_e}\right)$, y a es el diámetro de las moléculas de aire (el diámetro de los electrones se supone de valor despreciable). El valor de πa^2 se puede interpretar como la sección eficaz de colisión .

$$D_{e^- \to Aire} = \frac{2m}{3pa^2}\left(\frac{k_B T}{\pi m}\right)^{3/2} \tag{3.2.7}$$

El coeficiente de difusión D, en el aire a $760\,mmHg$ de presión y $27\,°C$ de temperatura se puede calcular con la ecuación (3.2.7), y los datos que se muestran a continuación:

[3] La corriente real está compuesta de dos flujos cargados: uno de electrones y otro de iones. La corriente de deriva de electrones v_d^- circula en un sentido, mientras que la corriente de iones v_d^+ circula en el sentido contrario. Las magnitudes de esas corrientes no son iguales debido a la diferencia en las masas de cada una de las partículas involucradas. Al parecer cada una de estas especies llega a un *equilibrio propio*, sin olvidar que el sistema en su totalidad se encuentra fuera del equilibrio [30].

$$
\begin{aligned}
m = & \quad 9,1 \times 10^{-31} \quad kg \\
a = & \quad 1{,}784 \times 10^{-10} \quad m \\
T = & \quad 300 \quad K \\
p = & \quad 1,013 \times 10^{5} \quad Pa \\
k_B = & \quad 1{,}38 \times 10^{-23} \quad J/K
\end{aligned}
$$

De esta manera:

$$D_{e^- \to Aire} = 10,37 \times 10^{-3}\, m^2/s$$

De acuerdo a este valor para la constante de difusión, la velocidad de deriva (3.2.5) para el campo eléctrico expresado en kV/m sería de.

$$v_d = \frac{1,6 \times 10^{-19}\, C \times E \times 1000\, V/kV/m \times 10,37 \times 10^{-3}\, m^2/s}{1{,}38 \times 10^{-23}\, J/K\, 300K} \sim 400\, E\, m/s$$

Con estos datos, la velocidad de deriva cuando se alcanza la ruptura dieléctrica del aire a 3,000 kV/m, sería de $\sim 1 \times 10^6\, m/s$ que es menor al 1 % de la velocidad de la luz. Claro está, que es necesario comprobar estos valores con la simulación computacional que se realiza en esta Tesis, para que sean útiles en el análisis correspondiente.

El tiempo de estabilización $t_s = \frac{D\, m}{k_B\, T}$ de acuerdo con la ecuación (3.2.4) también se puede evaluar con el coeficiente de difusión (*difusividad*) D. El valor obtenido con este cálculo sería de $2,27 \times 10^{-12}\, s$, lo que indica, que la *velocidad límite* o de *deriva* se alcanza casi instantáneamente.

3.3 Teoría Cinética

A finales del siglo XIX, Boltzmann desarrolló uno de los pilares de la física actual, al cual lo denominó como Teoría Cinética. Para su trabajo consideró un gas formado por esferas duras, y suficientemente diluido, de tal manera que sólo puedan presentarse colisiones binarias. En este tipo de diluciones, las colisiones en que intervienen simultáneamente tres o más partículas, son tan remotamente improbables, que pueden despreciarse. Además, en lugar de suponer una distribución uniforme de partículas, ésta se la sustituyó por una ecuación íntegro-diferencial que establecía la forma cómo evoluciona en el tiempo la función de distribución. El trabajo de Boltzmann se lo realizó bajo la consideración, de que las velocidades moleculares antes del choque no están correlacionadas, conocida como *hipótesis del caos molecular*, y la consideración adicional, de que una fuerza externa no cambia las secciones eficaces de las moléculas [63, 64]. Un resultado importante de la Teoría Cinética de Boltzmann, es que con ella se logró inferir las ecuaciones de conservación de la masa, el momento y la energía para los sistemas gaseosos. Las ecuaciones para determinar estos parámetros fueron deducidas simultáneamente después por Chapman y Enskog en 1.919. Estos investigadores pudieron resolver la ecuación de Boltzmann con un método tan poderoso, que prácticamente hasta 1.950 fue el procedimiento preferido para calcular los coeficientes de transporte en gases diluidos. Sin embargo, en nuestros días, la Teoría Cinética no es completamente satisfactoria, debido a que en su desarrollo matemático, se asumió la existencia de infinitésimos en los valores, tanto del tiempo como de la densidad del gas.

3.3.1 Ecuación cinética de Boltzmann

La ecuación cinética de Boltzmann permite calcular la función de distribución $f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t)$ de las partículas en un gas. La función de distribución representa la densidad de partículas contenida en una región infinitesimal del espacio de fases; es decir el espacio cuyas coordenadas son las posiciones $\mathbf{r}$ y las cantidades de movimiento $\mathbf{p}$. Cuando la densidad de partículas es suficientemente grande, es conveniente reducir el conocimiento de las mismas, a una función de distribución promedio. La igualdad (3.3.1) se conoce como

la Ecuación Cinética de Boltzmann, y es una descripción matemática del movimiento de la densidad media de partículas con momentum $\mathbf{p}$ en la posición $\mathbf{r}$, al tiempo t. [4] Una posible deducción de esta ecuación para f, se puede desarrollar sobre la base del Teorema de Liouville clásico [30]. De la forma indicada, se obtiene la ecuación (3.3.1), en la cual el primer gradiente se lo toma con respecto a las coordenadas $\mathbf{r}$, y el segundo se lo toma con respecto a los momentos $\mathbf{p}$ [65].

$$\frac{\delta f}{\delta t} = \frac{\partial f}{\partial t} + \frac{\mathbf{p}}{m} \cdot \nabla_{\mathbf{r}} f + \dot{\mathbf{p}} \cdot \nabla_{\mathbf{p}} f \tag{3.3.1}$$

Si en el último término se reemplaza el valor de $\dot{\mathbf{p}}$ correspondiente a una fuerza, por ejemplo, la que produce el campo eléctrico, se obtiene la ecuación (3.3.2). En la cual $\mathbf{E}$ es el campo eléctrico, e es la carga del electrón y m es la masa de la partícula en aceleración.

$$\frac{\delta f}{\delta t} = \frac{\partial f}{\partial t} + \frac{\mathbf{p}}{m} \cdot \nabla_{\mathbf{r}} f + e\mathbf{E} \cdot \nabla_{\mathbf{p}} f \tag{3.3.2}$$

En las ecuaciones (3.3.1) y (3.3.2), el término $\delta f/\delta t$ se relaciona con la *integral de colisiones*. La ecuación (3.3.2) es similar a la que se utiliza para la simulación de plasmas con el método de fluidos [32] que se explica después en este Capítulo. La resolución de estas ecuaciones se puede hacer mediante integración numérica [19] incluyendo en el término $\delta f/\delta t$ tanto las colisiones elásticas como las inelásticas. Por otra parte, para la derivada temporal de f se deben tomar en cuenta los siguientes efectos:

- Las partículas con momento $\mathbf{p}$ continuamente entran y salen del volumen elemental de espacio alrededor de $\mathbf{r}$.

- Las colisiones que toman lugar en este volumen, cambian casi instantáneamente el momento individual de cada una de las partículas; sin embargo, estadísticamente las fuerzas promedio que actúan sobre las partículas, cambian de forma gradual los momentos de las partículas del conglomerado.

[4] Notar que de acuerdo al Principio de Incertidumbre de la Mecánica Cuántica es imposible especificar simultáneamente tanto la posición como el momento; sin embargo, en este caso no interesa especificar la posición de una partícula con una precisión mejor que la longitud de onda de una perturbación. Por lo tanto, dado que la perturbación varía sólo sobre distancias macroscópicas, es posible especificar el momento de una partícula con precisión microscópica [57].

- Las colisiones en un sistema de partículas corrigen inmediatamente la densidad de estados finales.

- Puesto que los electrones son *fermiones*, obedecen el *Principio de Exclusión de Pauli*, y son dispersados hacia estados *no ocupados*; en cambio los *bosones*, son dispersados hacia estados *ocupados* [57].

3.3.2 Introducción a la teoría cinética

A continuación se considera la colisión entre dos partículas, cuyos estados iniciales tienen momentos $\mathbf{p}_1$ y $\mathbf{p}_2$, y se encuentran localizadas dentro de un contenedor de volumen V. En la Figura (3.1) se muestra una colisión de este tipo. La probabilidad por unidad de tiempo $\frac{d\wp}{dt}$, de que las partículas sean dispersadas hacia algún estado $\mathbf{p}_1^*$ en $d\mathbf{p}_1^*$ y $\mathbf{p}_2^*$ en $d\mathbf{p}_2^*$, es proporcional al número de estados en el espacio de fases finales $Vd\mathbf{p}_1^*$ y $Vd\mathbf{p}_2^*$. De esta manera, la probabilidad $\wp$ de transición por unidad de tiempo es la que se indica en la ecuación (3.3.3) [65]. En donde $\mathbf{S}(\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2, \mathbf{p}_1^*, \mathbf{p}_2^*)$ es la **Matriz de Dispersión** (**Scattering**) que es función de los momentos; entonces $\mathbf{S} \cdot (2\pi\hbar)^6$ es la probabilidad por unidad de tiempo, de que las partículas en los estados 1 y 2, sean dispersadas hacia los estados 1^* y 2^*.

$$\frac{d\wp}{dt} = \mathbf{S}(\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2, \mathbf{p}_1^*, \mathbf{p}_2^*) \cdot Vd\mathbf{p}_1^* \cdot Vd\mathbf{p}_2^* \tag{3.3.3}$$

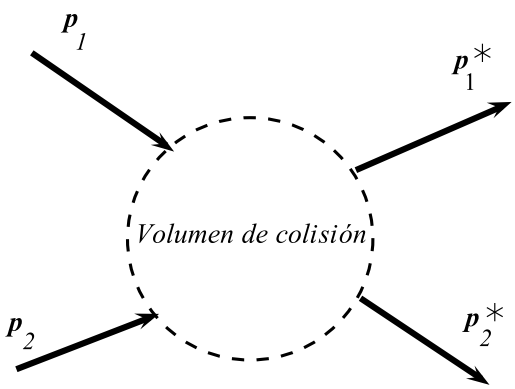

Figura 3.1: Volumen de colisión

En una colisión elástica, $\mathbf{S}(\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2, \mathbf{p}_1^*, \mathbf{p}_2^*)$ contiene un factor $\delta(E_1 + E_2 - E_1^* - E_2^*) \times \delta^3(\mathbf{p}_1 + \mathbf{p}_2 - \mathbf{p}_1^* - \mathbf{p}_2^*)$, que asegura la conservación de la energía y del momento. El número de partículas con momento $\mathbf{p}_1$ en $d\mathbf{p}_1$ es $f(\mathbf{p}_1) \cdot Vd\mathbf{p}_1$. En donde $f(\mathbf{p}_1) \cdot (2\pi\hbar)^3$

es el número de partículas en el estado 1. Por lo tanto, el número de colisiones por unidad de tiempo de partículas con momentos inicialmente en $d\mathbf{p}_1$ y $d\mathbf{p}_2$, y finales $d\mathbf{p}_1^*$ y $d\mathbf{p}_2^*$, es el indicado en la ecuación (3.3.4).

$$\frac{dn^+}{dt} = f(\mathbf{p}_1)Vd\mathbf{p}_1 \cdot f(\mathbf{p}_2)Vd\mathbf{p}_2 \cdot \mathbf{S}(\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2, \mathbf{p}_1^*, \mathbf{p}_2^*) \cdot Vd\mathbf{p}_1^* \cdot Vd\mathbf{p}_2^* \tag{3.3.4}$$

De manera similar; pero para el caso de *inversión de la causalidad*, el número de colisiones por unidad de tiempo de partículas con momentos inicialmente en $d\mathbf{p}_1^*$ y $d\mathbf{p}_2^*$, y finales $d\mathbf{p}_1$ y $d\mathbf{p}_2$ es (3.3.5).

$$\frac{dn^-}{dt} = f(\mathbf{p}_1^*)Vd\mathbf{p}_1^* \cdot f(\mathbf{p}_2^*)Vd\mathbf{p}_2^* \cdot \mathbf{S}(\mathbf{p}_1^*, \mathbf{p}_2^*, \mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2) \cdot Vd\mathbf{p}_1 \cdot Vd\mathbf{p}_2 \tag{3.3.5}$$

Se conoce de la mecánica clásica y cuántica, que $\mathbf{S}(\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2, \mathbf{p}_1^*, \mathbf{p}_2^*)$, y $\mathbf{S}(\mathbf{p}_1^*, \mathbf{p}_2^*, \mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2)$ son iguales; lo que es una consecuencia de la invariancia de la teoría con respecto a la inversión del tiempo; es decir, el cambio $t \to -t$. Al substraer (3.3.5) menos (3.3.4), e integrar sobre $d\mathbf{p}_2$ $d\mathbf{p}_1^*$ y $d\mathbf{p}_2^*$, se obtiene la tasa de cambio del número de partículas en $d\mathbf{p}_1$, que está dada por $[df(\mathbf{p}_1)/dt] \cdot Vd\mathbf{p}_1$, con la cual se obtiene la ecuación de Boltzmann (3.3.6)

$$\frac{df(\mathbf{p}_1)}{dt} = \int [f(\mathbf{p}_1^*)f(\mathbf{p}_2^*) - f(\mathbf{p}_1)f(\mathbf{p}_2)]\mathbf{S}(\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2, \mathbf{p}_1^*, \mathbf{p}_2^*)Vd\mathbf{p}_2 \cdot Vd\mathbf{p}_1^* \cdot Vd\mathbf{p}_2^* \tag{3.3.6}$$

De acuerdo a [57] en términos de la aproximación de Born para las secciones eficaces de colisión, el término $\delta f/\delta t$ correspondiente a las colisiones de la ecuación (3.3.6) sería:

$$\begin{aligned}\left(\frac{\delta f}{\delta t}\right)_{colision} = \int \frac{d\mathbf{p}_1^*}{(2\pi)^3}\frac{d\mathbf{p}_2}{(2\pi)^3}\frac{d\mathbf{p}_2^*}{(2\pi)^3}(1/2)[U(\mathbf{p}_1 - \mathbf{p}_1^*) \pm U(\mathbf{p}_1 - \mathbf{p}_2^*)]^2 \times \\ \times(2\pi)^3 \cdot \delta^3(\mathbf{p}_1 + \mathbf{p}_2 - \mathbf{p}_1^* - \mathbf{p}_2^*) \times \\ \times(2\pi) \cdot \delta(\varepsilon_1 + \varepsilon_2 - \varepsilon_1^* - \varepsilon_2^*) \times \\ \times[(1 \pm f_1)(1 \pm f_1^*)f_2 f_2^* - f_1 f_1^*(1 \pm f_2)(1 \pm f_2^*)]\end{aligned} \tag{3.3.7}$$

El término $(1/2)[U(\mathbf{p}_1 - \mathbf{p}_1^*) \pm U(\mathbf{p}_1 - \mathbf{p}_2^*)]^2$ en la ecuación (3.3.7) representa la primera aproximación de Born para la sección eficaz de colisión con intercambio incluido. Las funciones $U(\mathbf{p})$ no son otra cosa que la representación en el espacio de los momentos de los potenciales $U(\mathbf{r}, t)$; es decir la transformada de Fourier de esta magnitud.

El signo $'+'$ es para los bosones, mientras que el $'-'$ es para los fermiones. Además, en la ecuación (3.3.7) las funciones de distribución f_1 y f_1^* están representadas por:

$$f_1 = f(\mathbf{p}_1, \mathbf{r}, t)$$

$$f_1^* = f(\mathbf{p}_1^*, \mathbf{r}, t)$$

De la misma manera para las funciones f_2 y f_2^*.

En el equilibrio, la función de distribución $f(\mathbf{p}_1)$ es independiente del tiempo, de tal manera que la derivada con respecto al tiempo se hace cero, por lo que se obtiene la condición indicada en la ecuación (3.3.8), que establece lo que se conoce como **balance detallado**

$$f(\mathbf{p}_1) \cdot f(\mathbf{p}_2) = f(\mathbf{p}_1^*) \cdot f(\mathbf{p}_2^*) \tag{3.3.8}$$

El **Principio del Balance Detallado** especifica, que para un sistema en equilibrio con un medio, el número de transiciones por unidad de tiempo de un sistema desde el estado A hacia el estado B, es igual al número de transiciones por unidad de tiempo, desde el estado B hacia el estado A. La condición de balance detallado implica, que en el equilibrio, el producto $f(\mathbf{p}_1) \cdot f(\mathbf{p}_2)$ es un invariante con respecto a las colisiones, y por lo tanto debería ser función de las constantes del movimiento; es decir, que se cumple el conjunto de ecuaciones (3.3.9) en forma simultánea. Todo esto, ya que especialmente para el el caso de las colisiones elásticas, se conservan tanto la energía ε, como el momentum $\mathbf{p}$.

$$\begin{aligned} \varepsilon_1 + \varepsilon_2 &= \varepsilon_1^* + \varepsilon_2^* \\ \mathbf{p}_1 + \mathbf{p}_2 &= \mathbf{p}_1^* + \mathbf{p}_2^* \\ f(\mathbf{p}_1) \cdot f(\mathbf{p}_2) &= f(\mathbf{p}_1^*) \cdot f(\mathbf{p}_2^*) \end{aligned} \tag{3.3.9}$$

Luego de aplicar el método de los *Multiplicadores Indeterminados de Lagrange* a las ecuaciones (3.3.9) se obtiene una función de distribución de tipo exponencial, tal como se indica en la ecuación (3.3.10), en la cual $\overrightarrow{\alpha}$ y β son constantes independientes.

Se puede notar en la ecuación (3.3.10), que cuando el gas no tiene un movimiento en su conjunto, se obtiene la típica distribución de Boltzmann.

$$f(\varepsilon, \mathbf{p}) \propto \exp(\overrightarrow{\alpha} \cdot \mathbf{p} + \beta\varepsilon) \tag{3.3.10}$$

En la (3.3.10), el término junto al momento especifica una *dirección privilegiada* en el espacio, que en este caso de estudio, estaría dada por el vector del campo eléctrico. Aún más, las funciones de distribución especialmente en coordenadas cilíndricas, de acuerdo a la geometría del problema, no sólo dependen de la energía total ε, y del momento total P, sino también del momento angular L. De acuerdo a la referencia [30], la función de distribución para el caso de coordenadas cilíndricas, debería tener la forma indicada en la ecuación (3.3.11), en donde θ, ζ, y τ son constantes. Adicionalmente, el momento total P debe considerarse como $\mathbf{p} - \mathbf{A}/c$, debido al potencial magnético $\mathbf{A}$, generado por la corriente de partículas circulantes I [30].

$$f \propto e^{\theta L + \zeta P - \tau\varepsilon} \tag{3.3.11}$$

3.3.3 Análisis termodinámico con la ecuación cinética

Una solución general para la ecuación (3.3.2), en ausencia de campo externo es la siguiente:

$$f(\mathbf{p}, \mathbf{r}, t) = \frac{1}{\exp(\beta[(\mathbf{p} - m\mathbf{v})^2/(2m) - \mu]) \pm 1} \tag{3.3.12}$$

La solución representa el equilibrio termodinámico. Los parámetros β, μ y $\mathbf{v}$ son uno de los cinco necesarios para especificar el estado termodinámico del sistema. El vector $\mathbf{v}$ es una velocidad media dentro del sistema. Se debe notar que la solución (ecuación 3.3.12), es la típica función de distribución de un conjunto de partículas en el equilibrio termodinámico. Por lo tanto, la ecuación de Boltzmann ignora el cambio en la distribución de equilibrio, causado por el potencial entre partículas.

Cuando el potencial aplicado externamente $U(\mathbf{r}, t)$ varía lentamente en el tiempo, $f(\mathbf{p}, \mathbf{r}, t)$ también variará de la misma forma. Entonces, el lado izquierdo de la ecuación (3.3.2) deberá ser muy pequeño, debido a que es proporcional a derivadas espaciales o

temporales; por tanto, el término de las colisiones también será pequeño. Para una f arbitraria, el término de colisiones estará en el orden de Γf, en donde Γ es la típica tasa de colisiones. La condición de que el término de colisiones sea muy pequeño, es un requerimiento fuerte para buscar la solución de f. En el orden más bajo con la condición de que $\left(\frac{\delta f}{\delta t}\right)_{colision} \to 0$, la solución para f sería:

$$f(\mathbf{p},\mathbf{r},t) = \frac{1}{\exp(\beta(\mathbf{r},t)[\frac{(\mathbf{p}-m\mathbf{v}(\mathbf{r},t))^2}{2m} - \mu(\mathbf{r},t)]) \pm 1} \tag{3.3.13}$$

La función de distribución f representada en (3.3.13), describe el sistema, como si estuviera en el equilibrio termodinámico; sin embargo, el sistema no está en completo equilibrio, dado que las constantes en la "típica condición de equilibrio", se han convertido en variables que dependen del espacio y del tiempo. Para completar la solución en el orden más bajo, es necesario determinar las cinco funciones desconocidas que aparecen en (3.3.13). Para determinar estos valores, se deberán utilizar las cinco leyes de conservación que existen en la termodinámica: el número de partículas (1), el momento (3), y la energía (1). Estas leyes de conservación se pueden encontrar luego de multiplicar la ecuación (3.3.13) por: 1, $\mathbf{p}$, y $p^2/(2m)$ respectivamente, y luego de la integración de las ecuaciones resultantes. En los tres casos, los términos de las integrales de colisión se desvanecen, y con sus resultados se determinan las leyes de conservación en forma diferencial: la ecuación (3.3.14) es la ley de conservación del número de partículas que se verá en el modelo de fluidos, la (3.3.15) es la conservación de la energía, y la (3.3.16) es la conservación del momento:

Conservación del número de partículas:

$$\frac{\partial n(\mathbf{r},t)}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{j}(\mathbf{r},t) = o \tag{3.3.14}$$

Conservación de la energía:

$$\frac{\partial \varepsilon(\mathbf{r},t)}{\partial t} + \nabla_{\mathbf{r}} \cdot \int \frac{d\mathbf{p}}{(2\pi)^3} \frac{\mathbf{p}}{m} \frac{p^2}{2m} f(\mathbf{p},\mathbf{r},t) = -\mathbf{j}(\mathbf{r},t) \cdot \nabla_{\mathbf{r}} U(\mathbf{r},t) \tag{3.3.15}$$

Conservación del momento:

$$m\frac{\partial \mathbf{j}(\mathbf{r},t)}{\partial t} + \int \frac{d\mathbf{p}}{(2\pi)^3} \mathbf{p} \cdot \nabla_{\mathbf{r}} \left[\frac{\mathbf{p}}{m} f(\mathbf{p},\mathbf{r},t)\right] = -n(\mathbf{r},t)\nabla U(\mathbf{r},t) \tag{3.3.16}$$

En donde:

$$n(\mathbf{r},t) = \int \frac{d\mathbf{p}}{(2\pi)^3} f(\mathbf{p},\mathbf{r},t)$$

$$\mathbf{j}(\mathbf{r},t) = \int \frac{d\mathbf{p}}{(2\pi)^3} \frac{\mathbf{p}}{m} f(\mathbf{p},\mathbf{r},t)$$

$$\varepsilon(\mathbf{r},t) = \int \frac{d\mathbf{p}}{(2\pi)^3} \frac{p^2}{2m} f(\mathbf{p},\mathbf{r},t)$$

Como se puede observar, el nivel de complejidad matemática para la resolución del problema de la descarga eléctrica en gases, es cada vez mayor cuando se incluyen los conceptos termodinámicos y cuánticos. Al introducir el campo eléctrico en las ecuaciones anteriores, el problema se hace aún mayor, la ecuación de Vlasov que se presenta a continuación, da una vía de solución a este problema adicional. Con pocas adiciones a las ecuaciones presentadas, se podría analizar la descarga, luego de solucionar las ecuaciones integro-diferenciales desarrolladas en este punto.

3.3.4 Ecuación de Vlasov

La ecuación (3.3.7) es apropiada solamente para sistemas con fuerzas interactuantes de corto alcance. Cuando las partículas interaccionan con fuerzas de largo alcance, como la de Coulomb, tanto la figura de *colisiones locales instantáneas*, como la ecuación de transporte de Boltzmann, se tornan ciertamente equivocadas. En este caso, es mejor eliminar completamente el término de colisiones, y considerar que las partículas se mueven independientemente a través de un campo potencial promedio (*Teoría del Campo Medio*). Este campo efectivo $U_{eff}(\mathbf{r},t)$, es la suma del campo aplicado directamente $U(\mathbf{r},t)$ más el campo promedio producido por las otras partículas del sistema $V(\mathbf{r}-\mathbf{r}')$, tal como se puede observar en la ecuación (3.3.17) [57].

$$U_{eff}(\mathbf{r},t) = U(\mathbf{r},t) + \int d\mathbf{r}' V(\mathbf{r}-\mathbf{r}') \int \frac{d\mathbf{p}'}{(2\pi)^3} f(\mathbf{p}',\mathbf{r},t) \tag{3.3.17}$$

Al introducir el valor de este campo efectivo promedio en la ecuación (3.3.2) se obtiene la mencionada ecuación de Vlasov-Landau (3.3.18). Se debe notar que el potencial U_{eff} de la ecuación (3.3.17) también depende de f.

$$\left[\frac{\partial}{\partial t} + \frac{\mathbf{p}\cdot\nabla_{\mathbf{r}}}{m} - [\nabla_{\mathbf{r}} U_{eff}(\mathbf{r},t)\cdot\nabla_{\mathbf{p}}]\right] f(\mathbf{p},\mathbf{r},t) = 0 \tag{3.3.18}$$

La ecuación de Vlasov describe la evolución temporal de la función de distribución de un plasma con interacciones de largo alcance. Como parte de su teoría, Vlasov argumenta, que el enfoque de la Teoría cinética de Boltzmann, cuando se aplica a la descripción de un plasma con interacciones de Coulomb, basada en las colisiones entre pares, tiene las siguientes dificultades [30, 66]:

- La Teoría no está de acuerdo con el descubrimiento de Rayleigh, Irving Langmuir y Lewi Tonks acerca de las vibraciones naturales de electrones en un plasma
- La Teoría no es formalmente aplicable a la interacción de Coulomb, debido a la divergencia de los términos cinéticos de orden superior.
- La Teoría no puede explicar los experimentos de Harrison Merrill y Harold Webb, acerca de la dispersión anómala de electrones en un plasma gaseoso.

3.3.5 El modelo de fluidos

Básicamente, el modelo de fluidos utiliza las ecuaciones de balance del número de partículas aplicadas sobre cada una de las especies, y adicionalmente la ecuación de Poisson. En las ecuaciones propuestas, se considera como base, el principio físico de la conservación de la carga. Es posible obtener una muy buena descripción de la dinámica de las partículas, con los primeros momentos de la ecuación (3.3.1); sin embargo, la dinámica del momento v^k está acoplada con la del momento v^{k+1}. Es necesario entonces, truncar la serie hasta algún orden finito, por ejemplo el segundo. El primer momento ($k = 0$) da como resultado la ecuación de continuidad [37].

$$\frac{\partial n_i}{\partial t} + \nabla\cdot(n_i\mathbf{v}) = G_i - L_i \tag{3.3.19}$$

En la ecuación (3.3.19), n_i es la densidad de carga por unidad de volumen de la especie i, $n_i\mathbf{v}_i$ es equivalente a una densidad de corriente, G_i es la tasa generación de esta especie y L_i es la tasa de pérdida de la misma. Los valores de las distintas tasas de ionización, juegan un papel importante en el desarrollo del modelo descrito por la

ecuación (3.3.1). Esta es una ecuación general, de la cual se desprenden las ecuaciones de Kulikovsky (3.3.20), (3.3.21), y (3.3.22) [44].

$$\frac{\partial n_e}{\partial t} + \nabla \cdot n_e \mathbf{v} - \nabla \cdot (\hat{D}_e \nabla n_e) = S_{ph} + S_e^+ - S_e^- \tag{3.3.20}$$

En la ecuación (3.3.20): n_e es la densidad de electrones, $\hat{D}_e$ es el tensor de difusión, S_{ph} es la tasa de fotoionización; y, S_e^+, y S_e^- son las tasas de ionización, para la producción de iones positivos y negativos respectivamente.

$$\frac{\partial n_p}{\partial t} = S_{ph} + S_p^+ - S_e^- \tag{3.3.21}$$

En la ecuación (3.3.21): n_p es la densidad de iones positivos, S_{ph} es la tasa de fotoionización; y, S_p^+, y S_p^- son las tasas de ionización, para la producción de iones positivos y negativos respectivamente.

$$\frac{\partial n_n}{\partial t} = S_n^+ - S_e^- \tag{3.3.22}$$

En la ecuación (3.3.22): n_n es la densidad de los iones negativos; y, S_n^+, y S_n^- son las tasas de producción de iones de carga negativa, luego de la recombinación con iones positivos y negativos respectivamente.

Finalmente, las ecuaciones del modelo de fluidos incluyen también a la ecuación de Poisson (3.3.23).

$$\nabla^2 V = -\frac{q_e}{\epsilon_0}(n_p - n_n - n_e) = -\frac{\rho}{\epsilon_0} \tag{3.3.23}$$

3.3.6 Ecuación de Kramers

La ecuación de Kramers permite determinar la probabilidad $p(z, v, t)$ de encontrar una partícula al tiempo t, con velocidad v en la posición z [21]. La misma puede derivarse a partir de la ecuación probabilística de Fokker Planck con muy pequeñas consideraciones. En una sola dimensión la ecuación de Kramers es la (3.3.24).

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + v\frac{\partial}{\partial z} - \frac{1}{m}\frac{\partial V}{\partial z}\frac{\partial}{\partial v}\right) p(z, v, t) = \gamma \frac{\partial}{\partial v}\left(v + \gamma D \frac{\partial}{\partial v}\right) p(z, v, t) \tag{3.3.24}$$

La ecuación (3.3.24) considera la derivada con respecto a la velocidad $\frac{\partial}{\partial v}$, el campo eléctrico se encuentra en el gradiente con respecto a z; es decir en el término $\frac{\partial V}{\partial z}$. La constante de difusión es D, y la constante que da cuenta de las fluctuaciones es γ. Esta ecuación es similar a la ecuación de Boltzmann (3.3.1), y es una mejor aproximación para calcular la dispersión de las partículas en la dirección del campo eléctrico.

3.4 Secciones Eficaces de Colisión de Electrones con Moléculas

Una gran ayuda para la simulación de los electrones en la fase de incepción, es que se cuenta con suficientes datos de secciones eficaces de colisión entre electrones y moléculas. Por ejemplo, en las referencias [67, 68] los autores han obtenido, en base a la recolección de decenas de artículos relacionados, los datos y curvas de las secciones eficaces de colisión de electrones y fotones, con moléculas de Oxígeno y Nitrógeno. Para la verificación de la información, los autores de esos artículos, han preferido los resultados experimentales a los teóricos, y han seleccionado los datos que son similares entre sí, en más de una investigación. Para las mediciones se utilizaron experimentos de Tiempo de Vuelo (TOF), experimentos con haces de electrones mono-energéticos, análisis con enjambres de electrones de múltiples energías, cálculos teórico-computacionales, experimentos de difusión, métodos espectroscópicos, e incluso irradiación con fotones producidos en sincrotrones. Los datos recopilados en [67, 68] se encuentran en el rango comprendido entre $0,1$ y $1.000\ eV$.

Las colisiones con moléculas del medio gaseoso pueden ser elásticas o inelásticas. En las colisiones elásticas, los electrones (en promedio) pierden poca energía, y adquieren rápidamente gran cantidad de energía cinética, en su interacción con el campo eléctrico externo. En cambio, en las colisiones inelásticas, gran parte de la energía cinética del choque, se transforma en ya sea: energía potencial electrónica, energía rotacional, y vibracional. Los orbitales moleculares excitados pueden des-excitarse después y causar la fotoionización de otras moléculas neutras [29]. Con campos eléctricos altos, la

ionización por impacto de electrones es el proceso más importante, y su consecuencia inmediata es la ruptura dieléctrica del gas. Los datos obtenidos en [67], y [68] corresponden a los siguientes tipos de colisiones:

- Dispersión elástica
- Excitación rotacional
- Excitación vibracional
- Excitación de estados electrónicos
- Disociación
- Ionización
- Emisión de radiación
- Procesos de captura

En general, los valores de secciones eficaces de colisión entre electrones y moléculas de O_2 y de N_2, en los procesos más importantes, se encuentran en el rango de 10^{-15} y 10^{-16} cm^2. Casi todas las colisiones se pueden considerar elásticas entre 0 y 10 eV, e inelásticas a partir de los 10 eV. En todo caso, las secciones eficaces para todos los procesos tienen un valor descendente a partir de los 10 eV; esta tendencia sería el factor que determina la existencia de los electrones fuera de control descubiertos en simulaciones recientes. En las Figuras 3.2 y 3.3 se muestran las secciones eficaces en función de la energía del electrón incidente para el nitrógeno y oxígeno respectivamente.

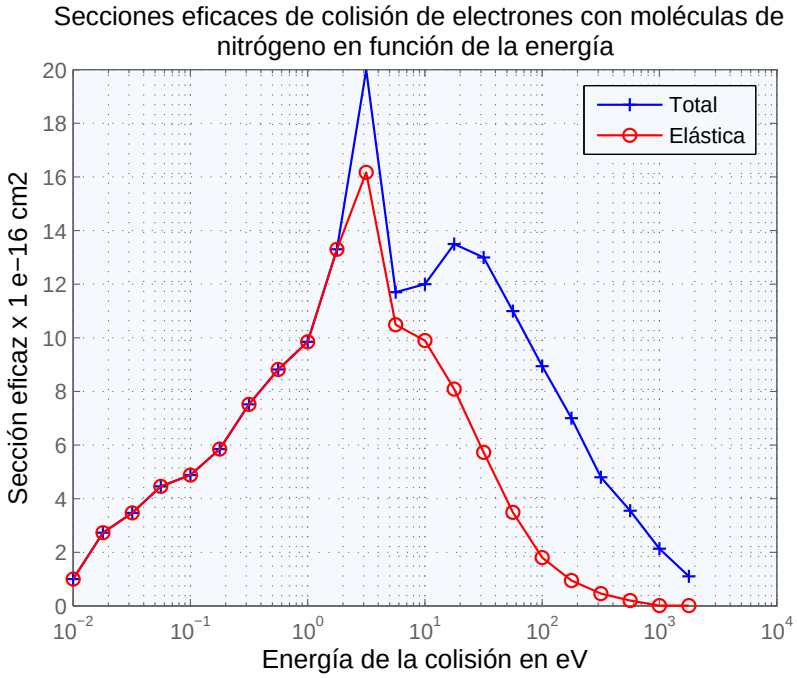

Figura 3.2: Secciones eficaces de colisión de electrones con moléculas de nitrógeno en base a datos tomados de la referencia [68]. La energía en electrón voltios en el eje horizontal está dada en escala logarítmica

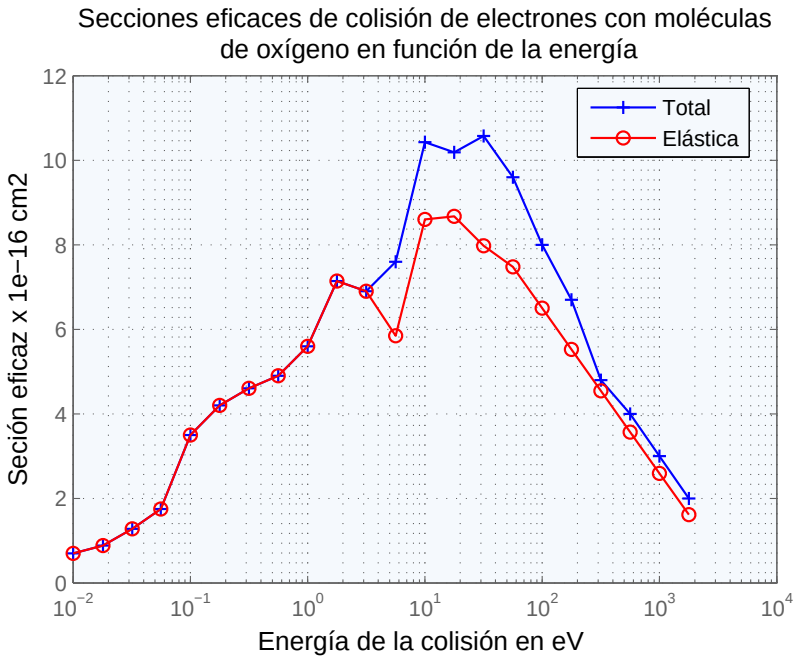

Figura 3.3: Secciones eficaces de colisión de electrones con moléculas de oxígeno en base a datos tomados de la referencia [67]. La energía en electrón voltios en el eje horizontal está dada en escala logarítmica

3.4.1 Efecto del campo externo sobre las secciones eficaces

En cuanto al efecto del campo externo y local sobre la magnitud de las secciones eficaces, se considerará que es mínimo. Algunos autores no lo han tomado en cuenta [69]. El efecto de los campos eléctricos intensos que ocurre a nivel atómico y molecular, se lo puede estudiar como una perturbación, que desdobla las energías de los orbitales moleculares (Efecto Stark). Además, el efecto del des-doblamiento es proporcional al campo eléctrico aplicado [70]; y es mayor, cuanto mayor es el número cuántico principal. Se presentan efectos importantes a partir de los 500.000 V/m, rango en el cual no se trabajará en la presente tesis. El pequeño efecto del campo eléctrico sobre las moléculas de aire, también se lo puede evidenciar en el valor de la polarizabilidad, y su influencia sobre el valor de la permitividad dieléctrica del aire, está en el orden de la diezmilésima parte con respecto a la unidad [47]. En todo caso, dado que las secciones eficaces diferenciales de colisión se determinan a partir del modelo de Thomas Fermi [71, 65], el efecto del campo eléctrico externo sobre las secciones eficaces deja de ser importante. En ese modelo, los electrones internos de las moléculas se consideran como un fluido que se comporta de acuerdo a la estadística de Fermi [71, 65].

3.5 Modelo Analítico Aproximado

Como primera aproximación analítica, se utilizarán las ecuaciones de transporte y de difusión de un gas dentro de otro gas, aceleradas por un campo eléctrico constante y uniforme a lo largo del eje Z. De acuerdo a la simetría del problema, el movimiento Browniano es el que domina en los ejes perpendiculares a la dirección del campo, pues se supone que allí no se presenta la influencia del campo eléctrico externo. En el caso de la componente en la dirección del campo eléctrico aplicado, se utilizará la ecuación de Smoluchowski. No se considerará el efecto de las cargas eléctricas aceleradas sobre el campo eléctrico local, debido a que el caso de interés, se desarrolla en los instantes en que los electrones son líderes y presentan bajas densidades electrónicas. En el caso de una descarga corta bajo la acción de fuerzas externas de baja intensidad, las ecuaciones de Einstein y Smoluchowski son válidas como primera aproximación, en estas condiciones, los electrones pueden considerarse simplemente como partículas de gas que se

difunden en el aire. Para el caso de descargas eléctricas en tramos largos y con alto voltaje, como por ejemplo las atmosféricas, se deberán utilizar otros métodos de cálculo.

3.5.1 Solución de la ecuación radial

Cuando se estudia el movimiento browniano de un sistema perturbado con fuerzas externas de baja intensidad, es posible despreciar el valor de la inercia en la ecuación (3.2.1). El término a la izquierda de la igualdad representa el bien conocido término de la masa por la aceleración, el primer término del lado derecho es la fricción del medio, y el segundo da cuenta del proceso de fuerzas aleatorias y del efecto del *ruido* producido por las moléculas de gas sobre los electrones. Los corchetes en la ecuación (3.2.1) indican que se trata de matrices. Si se considera además que las fuerzas externas $\mathbf{F}$ sobre este sistema son cero, se obtiene la ecuación (3.5.1):

$$\gamma \mathbf{v} = [\sigma][\zeta] \tag{3.5.1}$$

Esta igualdad, de acuerdo a las reglas de cálculo de Itto y a la ecuación de Fokker Planck [60] se puede transformar a su equivalente probabilística, o ecuación de Einstein-Wiener (3.5.2) en las 3 dimensiones.

$$\partial_t p(\mathbf{r}, t) = D\nabla^2 p(\mathbf{r}, t) \tag{3.5.2}$$

En la ecuación (3.5.2) $p(\mathbf{r}, t)$ es la probabilidad de encontrar a la partícula Q en la ubicación $\mathbf{r}$ al tiempo t, y D es el coeficiente de difusión. El coeficiente D en algunos casos puede considerarse que es un tensor ($\widehat{D}$) y encontrarse después del operador ∇^2. Se puede notar, que mientras en la ecuación (3.2.1) se plantean términos físicos, en la (3.5.2) los términos son probabilísticos.

Para determinar la *probabilidad direccional* de una descarga, se considerará un movimiento Browniano en las dimensiones x - y del plano perpendicular a la trayectoria, en las cuales no actúa la fuerza externa del campo eléctrico; y, adicionalmente un movimiento Browniano *acelerado* en la dirección del eje Z. La ecuación (3.5.2) en dos dimensiones es muy similar a la inicial; sin embargo, en ese caso, el Laplaciano solo

depende de x e y. Se utilizará la simetría cilíndrica porque el campo eléctrico paralelo al eje Z impone ese tipo de geometría . De esta manera, el movimiento Browniano no depende del ángulo θ de las coordenadas polares, y el Laplaciano se convierte en la ecuación (3.5.3) que depende de $r \equiv |\mathbf{r}| = (x^2 + y^2)^{1/2}$ y de t.

$$\frac{\partial p(r,t)}{\partial t} = D\left(\frac{\partial^2 p(r,t)}{\partial r^2} + \frac{1}{r}\frac{\partial p(r,t)}{\partial r}\right) \tag{3.5.3}$$

La solución de la ecuación radial (3.5.3) es la (3.5.4).

$$p(r,t) = \frac{1}{(4\pi Dt)} \exp\left[-\frac{r^2}{4Dt}\right] \tag{3.5.4}$$

Como se puede observar, la solución radial es una función de distribución normal centrada en $r = 0$, con una varianza $\sqrt{2Dt}$. El término $\frac{1}{4\pi Dt}$ se debe a que en r están realmente dos dimensiones: x e y

3.5.2 Solución de la ecuación axial

Para el caso del eje Z, la ecuación que gobierna el movimiento de la probabilidad, es la de Smoluchowski, y más propiamente la de Kramers. Por tanto, la solución axial utilizará la ecuación de Langevin (3.2.1) completa, y en una sola dimensión. Si nuevamente se considera que el término inercial $m\dot{\mathbf{v}}$ es mucho menor que $\mathbf{F}$, se llega a la ecuación (3.5.5).

$$\gamma\mathbf{v} = \mathbf{F} + [\sigma][\zeta] \tag{3.5.5}$$

Normalmente, la fuerza aplicada es de tipo conservativa e irrotacional, con el campo eléctrico descrito por la ecuación (3.3.23). Con esta última, las reglas de cálculo de Itto y la ecuación de Fokker Planck, se obtiene la ecuación (3.5.6) de Smoluchowski para un movimiento Browniano en un campo de fuerzas [60].

$$\partial_t p(\mathbf{r},t) = \left[\nabla^2 D - \frac{1}{\gamma}\nabla\cdot\mathbf{F}\right] p(\mathbf{r},t) \tag{3.5.6}$$

En la ecuación (3.5.6), los términos entre corchetes son operadores. Si en ella se reemplaza γ por $D\beta$; con $\beta = \frac{1}{k_B T}$ en razón del Teorema de Fluctuación Disipación, se restringe a una sola dimensión en el eje z, y por último, se considera el campo eléctrico sobre la partícula cargada $F = -eE_z$, se obtiene la ecuación (3.5.7).

$$\frac{\partial}{\partial t}p(z,t) = \frac{\partial^2}{\partial z^2}[Dp(z,t)] + \frac{\partial}{\partial z}[D\beta e E_z p(z,t)] \tag{3.5.7}$$

Al realizar apropiados cambios de variable se llega a la solución axial (3.5.8).

$$p(z,t) = \frac{1}{\sqrt{4\pi Dt}} \exp\left[-\frac{(z + DeE_z\beta t)^2}{4Dt}\right] \tag{3.5.8}$$

El valor medio de esta nueva función de distribución normal se encuentra desplazado con respecto al origen de partida en $z_d(t) = -DeE_z\beta t$. De la misma manera tiene una varianza $\sqrt{2Dt}$.

3.5.3 Solución en tres dimensiones

Las ecuaciones (3.5.4) y (3.5.8) son válidas como una primera aproximación pues fueron desarrolladas a partir del movimiento Browniano. No se han tomado en cuenta específicamente en (3.5.4) y (3.5.8) otros fenómenos, tales como el de ionización, recombinación y fotoionización. Para descargas en medios con altos potenciales de aceleración, se deberá utilizar preferiblemente la ecuación de Kramers (3.3.24). Como las soluciones indicadas en (3.5.4) y (3.5.8) tienen que ver con sucesos independientes y en coordenadas diferentes (ecuaciones 3.5.9, y 3.5.11), es posible combinarlas en una sola ecuación, de la siguiente forma:

$$p(r,z,t) = p(r,t).p(z,t) \tag{3.5.9}$$

Por otra parte, si se considera que la expansión espacial de la avalancha se debe a dos mecanismos: la difusión, y el movimiento debido a la carga eléctrica, la ecuación hidrodinámica a aplicar sería la (3.5.10) tomada de [41] y que es similar a la (3.3.19), donde: Γ es la densidad de flujo de partículas dada por los flujos de arrastre debidos al campo eléctrico exterior y a la difusión; μ_e la movilidad de los electrones en el medio; y D es el coeficiente de difusión electrónica o *difusividad*.

$$\frac{\partial n_e}{\partial t} + \nabla \cdot \Gamma_e = \alpha v_e n_e, \;\; \Gamma_e = n_e \mu_e \mathbf{E}_0 - D\nabla n_e \tag{3.5.10}$$

Hasta este punto, se ha considerado que los coeficientes de difusión, para el caso perpendicular $D_\perp$ a la trayectoria o radial, y el paralelo al camino $D_\parallel$ tienen el mismo

valor; sin embargo, debido al efecto del campo eléctrico sobre el medio, estos coeficientes suelen ser distintos, y se conforma lo que se conoce como el tensor de difusión $\hat{D}$. En este tensor, puede considerarse que está incluido en forma proporcional, el valor de la movilidad de los electrones en el gas μ_e. De esta manera:

$$p(r,z,t) = \frac{1}{(4\pi D_\perp t)} \exp\left[-\frac{r^2}{4D_\perp t}\right] * \frac{1}{\sqrt{4\pi D_\parallel t}} \exp\left[-\frac{(z + D_\parallel e E_z \beta t)^2}{4D_\parallel t}\right] \tag{3.5.11}$$

La ecuación (3.5.11), es la distribución de probabilidad de que un electrón con carga e, se encuentre en la posición (x, y, z) al tiempo t luego de haberse encontrado inicialmente en la posición $(0, 0, z_0)$ luego de haberse difundido en un medio gaseoso con coeficientes de difusión $D_\perp$ y $D_\parallel$ a una temperatura T. Es obvio que la posición $(0, 0, 0)$ será privilegiada; es decir, la que tenga la mayor probabilidad de recibir a los electrones que partieron desde el punto $(0, 0, h)$

3.6 Solución Electrostática para el Caso de una Punta

Uno de los objetivos de esta Tesis, era el obtener la trayectoria de los electrones de incepción para el caso de una geometría de tipo punta-placa. Para lograr este objetivo, es necesario conocer la forma matemática del campo eléctrico en esa geometría. Una punta es un caso especial, en el cual las derivadas parciales pueden llevar a ciertos resultados infinitos y/o singularidades. El problema de las singularidades se soluciona, en parte, considerando que los electrodos son hiperboloides infinitas. A continuación se presenta la solución matemática a este problema, aunque no se trata de un punta en sí misma, sino de una hipérbola.

Desde un punto de vista electrostático, la configuración de punta a placa es muy similar a la configuración de punta a punta. En efecto, ya que la configuración geométrica de los dos electrodos es simétrica, el plano de simetría en el centro de la brecha, es un lugar geométrico de un sistema electrostático similar. Para una hiperboloide doble, la resolución de la ecuación de Laplace da como resultado la ecuación (3.6.1) [44].

$$V(\xi) = \frac{A}{2} \ln \frac{1+\xi}{1-\xi} + B \tag{3.6.1}$$

En la ecuación (3.6.1) A y B están dados por las ecuaciones (3.6.2) y (3.6.3), en donde V_a y V_c son los potenciales en el ánodo y en el cátodo respectivamente.

$$A = \frac{V_a - V_c}{\ln\left(\frac{1+\xi_0}{1-\xi_0}\right)} \tag{3.6.2}$$

Y

$$B = \frac{V_a + V_c}{2} \tag{3.6.3}$$

Para una simetría como el caso de la presente Tesis se necesita que $V = V_a = -V_c$, en ese caso, $A = 2V\left[\ln\left(\frac{1+\xi_0}{1-\xi_0}\right)\right]^{-1}$, y $B = 0$. Las coordenadas r, y z se definen en función de las coordenadas hiperbólicas ξ y η de acuerdo a las ecuaciones (3.6.4) y (3.6.5)

$$z = \alpha\xi(1+\eta^2)^{1/2} \tag{3.6.4}$$

$$r_{xy} = \alpha\eta(1-\xi^2)^{1/2} \tag{3.6.5}$$

Las ecuaciones anteriores, constituyen la representación matemática de una hipérbola de revolución $\frac{z^2}{a^2} - \frac{r_{xy}^2}{b^2} = 1$, en donde $a^2 = \alpha^2\xi^2$, y $b^2 = \alpha^2(1-\xi^2)$, y el cuadrado de la longitud inter-focal es $\alpha^2 = a^2 + b^2$. En tal sistema de coordenadas, una hipérbola con el centro de coordinación de longitud α se define con $\xi = C$, donde C es una constante, y la superficie del electrodo se define por $\xi_0^2 = a^2/\alpha^2$, donde $r_{xy}^2 = x^2 + y^2$; y $r^2 = x^2 + y^2 + z^2 = r_{xy}^2 + z^2$. Finalmente, para un uso más sencillo de la ecuación (3.6.1) Celestin [44] ha derivado una expresión para ξ en coordenadas cartesianas de tal manera que:

$$\xi^2(\mathbf{r}) = \frac{\alpha^2 + r^2 - \left[(\alpha^2+r^2)^2 - 4\alpha^2 z^2\right]^{1/2}}{2\alpha^2} \tag{3.6.6}$$

De aquí, se obtiene también para η

$$\eta^2(\mathbf{r}) = \frac{-\alpha^2 + r^2 + \left[(\alpha^2+r^2)^2 - 4\alpha^2 z^2\right]^{1/2}}{2\alpha^2} \tag{3.6.7}$$

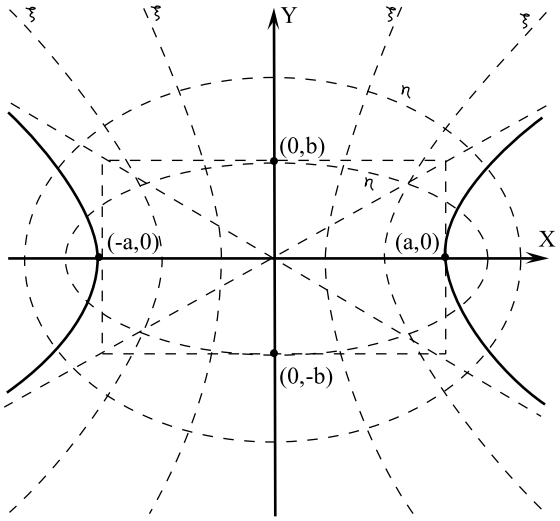

Figura 3.4: Diagrama explicativo de las coordenadas hiperbólicas

Dado que V no depende de η, el campo eléctrico tendrá la siguiente forma,:

$$\mathbf{E} = -\frac{\partial V}{\partial \xi}\frac{\partial \xi}{\partial x}\mathbf{i} - \frac{\partial V}{\partial \xi}\frac{\partial \xi}{\partial y}\mathbf{j} - \frac{\partial V}{\partial \xi}\frac{\partial \xi}{\partial z}\mathbf{k} \tag{3.6.8}$$

El primer término de estas derivadas parciales es común, y es:

$$\frac{\partial V}{\partial \xi} = 2A\,\frac{1}{1-\xi^2} \tag{3.6.9}$$

La derivada parcial de ξ con respecto a la cartesiana x (ó y) es:

$$\frac{\partial \xi}{\partial x} = \frac{x}{2\alpha^2\,\xi}\left[1 - \frac{\alpha^2 + r^2}{\sqrt{(\alpha^2+r^2)^2 - 4\,\alpha^2 z^2}}\right] \tag{3.6.10}$$

Con el objeto de simplificar la expresión anterior, se utilizarán las siguientes identidades obtenidas de las mismas ecuaciones anteriores

$$\alpha^2 + r^2 = \alpha^2(1+\xi^2+\eta^2)$$

y

$$\sqrt{(\alpha^2+r^2)^2 - 4\,\alpha^2 z^2} = \alpha^2(1-\xi^2+\eta^2)$$

Por tanto, al reunir las expresiones anteriores se obtiene:

$$E_x = -\frac{\partial V}{\partial \xi}\frac{\partial \xi}{\partial x} = \frac{x\,A}{2\alpha^2}\,\frac{\xi}{(1-\xi^2)[(1-\xi^2)+\eta^2]} \tag{3.6.11}$$

y

$$E_y = -\frac{\partial V}{\partial \xi}\frac{\partial \xi}{\partial y} = \frac{y\,A}{2\alpha^2}\,\frac{\xi}{(1-\xi^2)[(1-\xi^2)+\eta^2]} \tag{3.6.12}$$

En cambio, para la coordenada z

$$E_z = -\frac{\partial V}{\partial \xi}\frac{\partial \xi}{\partial z} = -\frac{z\,A}{2\alpha^2}\,\frac{1}{\xi\,[(1-\xi^2)+\eta^2]} \tag{3.6.13}$$

Un caso especial se obtiene cuando x e y son infinitésimos o cero. El valor de η también tiende a cero y ξ tiende a $\frac{z}{\alpha}$. El campo eléctrico en el eje Z, en ese caso será de:

$$E_z = -\frac{\alpha V}{\alpha^2 - z^2}\,\frac{1}{\ln\left|\frac{1+\xi_0}{1-\xi_0}\right|} \tag{3.6.14}$$

Ó en términos de $\xi_0 = \frac{h}{\alpha}$, en donde α es la distancia inter-focal, y h es la altura en la cual inicia la aceleración del electrón.

$$E_z = -\frac{\alpha V}{\alpha^2 - z^2}\,\frac{1}{\ln\left|\frac{\alpha+h}{\alpha-h}\right|} \tag{3.6.15}$$

Para obtener resultados interesantes, se considerará que $\alpha = h + \varrho$ con ϱ de valor muy pequeño relacionado con el aguzamiento de la punta, y ϱ^2 despreciable. Con las aproximaciones indicadas, el valor del campo en el eje x (ó y), es:

$$E_x = \frac{xz\alpha V}{[h^2 + 2h\varrho - z^2]^2 \ln\left|\frac{2h}{\varrho}\right|} \tag{3.6.16}$$

Como se puede observar, en la ecuación (3.6.16), cuando x ó y tienden a cero (radio $r_{xy} \to 0$), en la región cercana el eje de la trayectoria vertical, el campo eléctrico también tiende a cero. A pesar de esto, en las simulaciones de la presente Tesis, también se tomaron en cuenta las componentes del campo eléctrico en estos ejes coordenados.

Para el eje z se tiene:

$$E_z = -\frac{hV}{h^2 + 2h\varrho - z^2}\,\frac{1}{\ln\left|\frac{2h}{\varrho}\right|} \tag{3.6.17}$$

Tomando el factor común, y con relación a un campo $E = V/h$; con $w = z/h \in [0, 1]$ y el factor de aguzamiento $\rho = \varrho/h$, para el caso de placas planas, se tiene::

$$\frac{E_z(w)}{E} = \frac{1}{1 + 2\rho - w^2} \frac{1}{\ln\left|\frac{2}{\rho}\right|} \tag{3.6.18}$$

Para el eje x (Para el eje y es similar) con $\chi = x/h$ se tiene:

$$\frac{E_x(w)}{E} = \frac{\chi w}{(1 + 2\rho - w^2)^2} \frac{1}{\ln\left|\frac{2}{\rho}\right|} \tag{3.6.19}$$

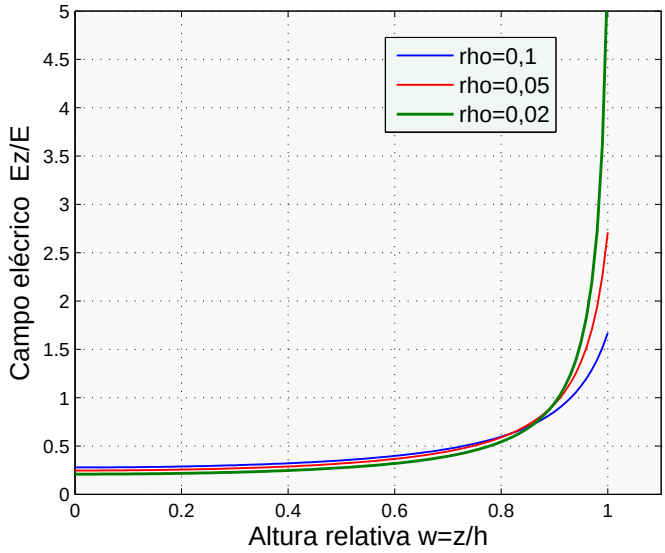

Figura 3.5: Campo eléctrico en una punta E_z/E en función de la distancia relativa w para 3 distintos valores de aguzamiento $\rho = 0,1;\ 0,05;\ y\ 0,02$

Como se puede observar en la Figura 3.6, mientras el factor de aguzamiento de la punta es menor, el campo eléctrico aumenta. También, que existe un codo alrededor de $w \sim 0,9$, en donde el campo eléctrico E_z/E se hace prácticamente 1. El resultado de la ecuación (3.6.19) servirá para la simulación de la geometría punta-placa que se presenta en el Capítulo 4.

Capítulo 4

SIMULACIÓN COMPUTACIONAL

En este Capítulo se diseña un algoritmo para la simulación de la trayectoria de electrones de incepción, acelerados en el aire por un campo eléctrico externo. El estudio se enfoca en determinar la probabilidad de que estos electrones, luego de circular por una determinada longitud de camino, lleguen a una cierta distancia radial, con respecto a un punto que ha sido tomado como objetivo. Se simularán únicamente dos casos particulares: la descarga en un capacitor de placas planas paralelas, y la descarga desde una punta sobre una placa. Posteriormente, se comprobarán los resultados con respecto a los teóricos, para el caso de placas planas, y se discutirá acerca de las semejanzas y diferencias. Evidentemente, los resultados de la simulación serán distintos, de acuerdo a la geometría de los electrodos, la intensidad del campo eléctrico, el tipo de gas del medio, e incluso la presión y la temperatura.

Para la simulación que se describe a continuación, se utilizarán los valores de secciones eficaces de colisión electrón molécula indicadas anteriormente (§ 3.4) [72]. El cambio de dirección de los electrones en el eje de la colisión se evaluará con el análisis mecánico cuántico de la dispersión aplicado sobre moléculas diatómicas descritas con el modelo de Thomas-Fermi [73]. Se supondrá que las moléculas de aire se encontraban inicialmente en equilibrio térmico, bajo ciertas condiciones pre-establecidas de presión y temperatura.

4.1 Selección del Método de Simulación

Luego de analizar algunos métodos de simulación computacional, se ha decidido utilizar el método de Dinámica Molecular (DM) con interacciones individuales de Monte-Carlo (MC), con el pensamiento de que es el más conveniente para estudiar la trayectoria [53, 74]. Ninguno de los métodos mencionados es adecuado por sí solo para estudiar la trayectoria de los electrones en un gas bajo la acción de un campo eléctrico. Por una parte, en el DM [1]se pierde la noción de trayectoria cuando se considera una celdilla de trabajo muy pequeña; y por otra parte, en el método MC [2] el conocimiento de la trayectoria se elimina desde el inicio. En el presente caso, el volumen de trabajo es distinto, porque se necesita encontrar la trayectoria tridimensional de los electrones en su viaje del cátodo al ánodo.

Luego de realizar las primeras simulaciones, se pudo comprobar que el método seleccionado es el más adecuado, por su velocidad y eficiencia. Debe notarse que era deseable un algoritmo de simulación rápido, debido a la gran cantidad de moléculas con las que impactaría el electrón. Por una parte, el número de impactos contra las moléculas del medio es proporcional a la longitud del recorrido; por ejemplo, si la distancia media intermolecular es de $1\,nm$, y el recorrido total es de $1\ cm$, el número de choques y por lo tanto de iteraciones sería de 10 millones. Por otra parte, es evidente que los requerimientos de tiempo de máquina sean mayores mientras se incrementa la complejidad del potencial de interacción entre las partículas. En un trabajo previo de simulación computacional con el método DM e interacción de *esferas duras* [3] , se obtuvo una velocidad de respuesta muy rápida, entre otras cosas, porque el cálculo de

[1]El DM permite calcular las posiciones y velocidades de cada una de las partículas contenidas en una celda de trabajo mediante sus ecuaciones de movimiento. En tales casos, la celda de trabajo suele ser muy pequeña, con unas decenas de moléculas en su interior. En el caso típico de análisis con DM es necesario que el sistema llegue previamente al equilibrio, antes de ser perturbado por fuerzas externas.

[2]El método de Monte-Carlo (MC) es esencialmente estocástico. Para estudiar la evolución de un sistema con el MC es necesaria la utilización de conceptos de probabilidad y estadística.

[3]La interacción de esferas duras, consiste en considerar a los electrones y a las moléculas como esferas perfectas de un material sólido, similar a las bolas de billar, que colisionan elásticamente entre ellas.

la dispersión era el más sencillo.

4.2 Justificación del Método

4.2.1 Electrones independientes

Los electrones dentro de un gas bajo determinadas condiciones pueden ser considerados independientes; y, los átomos y moléculas neutros y cargados del medio pueden ser tomados como un entorno aleatorio, con velocidades tan bajas con respecto a los electrones, que en ciertas simulaciones han sido despreciadas [19]. En general, un conjunto de partículas cargadas dentro de un plasma, pueden considerarse como poseedoras de un potencial con rango de acción mucho más pequeño que el del voltaje eléctrico externo aplicado, con dependencia exponencial decreciente (e^{-r}/r), de acuerdo a la teoría de apantallamiento de Debye. No se debe perder de vista el hecho, de que la interacción electromagnética para partículas cargadas tomadas de una en una, ya tiene una dependencia inversamente proporcional a la distancia ($1/r$). Adicionalmente, dado que los iones con baja movilidad se acumulan en el espacio entre electrodos, esta región adquiere un *fondo positivo* [61]. Todas estas propiedades permiten considerar a los electrones del gas débilmente cargado como independientes, en forma similar a los electrones en un sólido con estructura cristalina. Finalmente, para el caso de los electrones de incepción, el *número de plasma* de acuerdo a la ecuación (1.3.4), es aproximadamente cercano a uno, lo cual indica que bajo esta consideración, todavía no es necesario utilizar el Modelo de Fluidos [19]. Esto es cierto, mientras la descarga sea de tipo avalancha. Finalmente, es necesario comentar, que en la mayor parte de los modelos de partículas individuales, el número de partículas que se puede examinar depende directamente de las limitaciones de memoria y poder computacionales [10].

4.2.2 Electrones en la fase de incepción

Los electrones en la fase de incepción son aquellos que lideran el proceso de avalancha y la descarga eléctrica posterior. Se ha llegado a determinar que un simple electrón puede iniciar una descarga [19], y que los electrones iniciales con alta energía pre-ionizan el

gas [18]. Es más, se asegura que el camino estocástico de la descarga puede ser seguido históricamente por la distribución de los electrones en la fase de incepción. Experimentos recientes en gases puros con cámaras *ICCD* han dado evidencia de avalanchas creadas por electrones individuales [26]. El bulto de iones positivos dejados atrás por el avance del enjambre de electrones iniciales se concentran en una región de fuerte ionización justo detrás de la cabeza de la avalancha, que permite el avance de la futura descarga [15]. Esto a pesar de que, de acuerdo a las observaciones realizadas por Raether las avalanchas de electrones justo antes de la ruptura dieléctrica no forman todavía un filamento [15]. Se ha desarrollado una simulación computacional híbrida para las flámulas, que permite seguir la trayectoria de los electrones de incepción de forma individual en la región de altos campos eléctricos en la cabeza de la flámula. En ese modelo, por su importancia en la futura descarga, la pequeña cantidad de electrones que avanzan en la punta (de incepción), se siguen individualmente, mientras que los lentos se simulan bajo la aproximación de densidad o del modelo de fluidos (flámula). En la referencia [49] se describe otro procedimiento utilizado para la simulación de flámulas, y la producción de electrones con energías en el rango de los keV (kilo electrón voltios).

4.2.3 Método de Monte-Carlo para las Colisiones

El método de Monte-Carlo (MC) permite encontrar la solución de un problema físico mediante el cálculo de parámetros estadísticos de una población hipotética, y usando una secuencia de números aleatorios con una función de distribución conocida, para construir una muestra de la población bajo estudio [75]. La definición muestra que el alcance de aplicaciones es enorme y fascinante. Muchos problemas que a primera vista parecieran no tener que ver con el método MC pueden ser transformados a sistemas estocásticos con posibilidad de solucionarse con el MC. Con este método, todos los observables son calculables usando la función de distribución y la correspondiente función de partición. El método MC en física computacional toma un giro diferente; se empieza por una descripción del sistema en términos de un hamiltoniano sobre un ensamble apropiado de partículas del problema seleccionado. La técnica MC en Física Estadística se centra en el cálculo de los valores esperados de observables [76].

Por otra parte, el método Monte Carlo Collisions (*MCC*) permite evaluar la evolución de un sistema, observando las colisiones de una partícula de un conglomerado. El resultado de esas colisiones caracteriza la dinámica de ese conjunto de partículas. Casi siempre el tamaño de esa celda se expresa en relación con la longitud de Debye y el número de plasma [32] (§ 1.3).

Los dos motores principales que controlan el movimiento de las partículas individuales en plasmas son: el campo eléctrico aplicado y las colisiones entre partículas. El método *MCC* se puede acoplar con el método de *CFP* (Collisions Free Particle) para obtener el algoritmo de *PIC-MCC*. El *MCC* es útil porque su algoritmo recorre a través de todas las partículas iniciales, poniendo a prueba a cada partícula en cada colisión. En el *MCC*, las partículas chocan con un objetivo de *nube*; en cambio, en el *DSMC* (Direct Simulation Monte Carlo) las partículas chocan de una en una. Esto permite evaluar los cambios en la energía y el momento resultantes de la colisión.

4.3 Algoritmo de Simulación

Para simular la trayectoria de los electrones en un medio gaseoso se utilizará el algoritmo que se describe en esta sección. No se incluye en este algoritmo la influencia de las partículas cargadas sobre el campo local, ni el cálculo iterativo de la ecuación de Laplace-Poisson, por tratarse de electrones líderes en la etapa de incepción. El procedimiento utilizado es similar al utilizado en la referencia [77]. Se seguirá el camino del electrón a través de las coordenadas de los choques o mejor aún, con las coordenadas en donde se produjeron ionizaciones de moléculas neutras. A las moléculas del aire se les asignará velocidades aleatorias de acuerdo a la distribución de velocidades de Boltzmann. El análisis inicial se lo hará a una temperatura de 300 K y una presión de 760 $mm\ Hg$, para luego variar estas cantidades dentro de un rango de interés. Todo esto, se lo hará con un computador Intel Core 5 con 4 GB de memoria `RAM`, 500 GB en disco, y equipado con paquetes de Software de última generación.

En la presente Tesis se utilizará el método de *MCC* y la *Simulación Estadística* (§ Apéndice B) para escoger aleatoriamente los parámetros que rigen las colisiones; estos son: el tipo de molécula que impactará el electrón, el tiempo para el siguiente choque, y el tipo de colisión, entre otros. Para simular las colisiones inelásticas, se utilizarán los datos existentes para la sección eficaz, y la energía perdida en cada colisión (§ 3.4).

- Se generará un electrón en el eje Z a una altura z_0, que inicialmente se encuentra en reposo en el sistema de coordenadas.
- El tiempo del recorrido inicial se calcula con la ecuación $t_{choque\,inicial} = \frac{1}{n\,\sigma\,v_{media\,electrones}}$, en donde $v_{media\,electrones}$ es la velocidad media de los electrones térmicos; esto, dado que la velocidad inicial es cero, y esta ecuación daría un tiempo infinito.
- Se realiza el proceso de aceleración en base al conocimiento del campo eléctrico en esa posición, durante un tiempo determinado por $t_{choque\,inicial}$ ó por $t_{siguiente\,choque}$.
- En base a la velocidad calculada con la *DM* se calcula la velocidad de entrada a la colisión. Si la velocidad obtenida es comparable con la velocidad media molecular, se añade la velocidad de la molécula colisionante, dada por la distribución de velocidades moleculares de Maxwell. Con esta velocidad se calcula la energía del electrón en su entrada a la colisión.
- Con el valor de la energía obtenido en el punto anterior, se calculan las secciones eficaces. En base a estos valores y a la densidad inicial de moléculas de cada especie de gas presente en el medio se determina el tipo de molécula con la cual habrá de impactar el electrón.
- El tipo de proceso que puede ocurrir en esa colisión dependerá nuevamente de la sección eficaz de cada proceso particular. Se considerará para este efecto que la sección eficaz total es la suma de las secciones eficaces de cada uno de los procesos en particular.
- En base a la energía de entrada a la colisión, al tipo de proceso elástico, inelástico, y/o de ionización se calcula la energía de salida. Para el cálculo de la energía de entrada se tomará en cuenta que las moléculas de aire tienen una energía cinética

y velocidad que a la temperatura T obedecen la ley de distribución de Maxwell Boltzmann.

- Los ángulos de salida después del choque, se los calculará de forma estocástica con la sección eficaz diferencial obtenida mediante el modelo de apantallamiento de Coulomb. (En el caso particular de esferas duras, las direcciones de salida tienen simplemente una distribución esférica uniforme).

- Se considerará en toda esta simulación, que los electrones son diminutos y mucho más livianos que las moléculas contra las cuales chocan. Se tomará en cuenta la pequeña variación de velocidad debida al retroceso de la molécula que fue objeto del choque.

- Una vez que el electrón ha salido del choque y conocemos su posición y su velocidad, el mismo volverá a acelerarse mediante el campo eléctrico y colisionará con otra molécula.

- Luego de cada choque se contabilizará el tiempo para el siguiente choque, con la sección eficaz total para cada especie de gas de manera individual, y se considerarán desde ya las concentraciones relativas de los gases moleculares (O_2, N_2, CO_2).

- En cada colisión se almacena el lugar del choque, si se ha escogido esa opción durante el funcionamiento del programa.

- El proceso de colisiones seguirá hasta que el electrón llegue al plano $Z = 0$, y se repetirá un número de veces escogido externamente.

- En el instante en que el electrón llegue al plano con $z = 0\,(x, y, 0)$, se registrarán las distancias r_0 con relación al origen de las coordenadas.

- Para un número dado de partículas que lleguen al *piso* se realizará un histograma tanto de radios, velocidades de llegada, y tiempos de arribo. También se registrarán el número de colisiones en el trayecto, y el número de ionizaciones.

- Con los datos obtenidos, se calculará la dispersión del ángulo de llegada y la probabilidad direccional de la descarga de los electrones en el aire, para diferentes alturas, y diferentes valores de intensidad de campo eléctrico

4.3.1 Probabilidad de ocurrencia del siguiente choque

Para evaluar la probabilidad de ocurrencia del siguiente choque, se considerará un gas formado por átomos o moléculas neutros, iones y electrones libres. Se asume que la mayor parte de sus partículas constituyentes son neutras. Al aplicar un campo eléctrico, las partículas cargadas se desplazarán a través del plasma y producirán una corriente eléctrica. Consideremos primero a los electrones libres. Estos electrones tienen una distribución de energía cinética que en el límite de bajas densidades y altas temperaturas obedece la ley de Maxwell Boltzmann con una energía cinética media de $\left\langle \frac{1}{2}mv^2 \right\rangle = \frac{3}{2}k_B T$. Por ejemplo, a $0°C$ $(273,25\ °K)$, la raíz cuadrada media de las velocidades de los electrones libres sería de $1,1 \times 10^5\ m/s = 3,7 \cdot 10^{-4}c$. Estos electrones libres repetitivamente colisionarán con átomos o moléculas neutras. Sea σ la sección eficaz de la colisión entre un electrón y un átomo o molécula del plasma. Se despreciará inicialmente la dependencia de σ con la velocidad relativa entre un electrón y una partícula neutra. Un electrón barrerá un volumen $\sigma\, v\, dt$ en el tiempo dt. Por lo tanto la probabilidad de colisión de un electrón en el intervalo dt es la que se indica en la ecuación 4.3.1 [65].

$$p\, dt = n\, \sigma\, v\, dt \tag{4.3.1}$$

El valor de la probabilidad indicada en la ecuación (4.3.1) es necesario evaluarlo entre 0 y t que es el tiempo al que se presentará el siguiente choque. Para esto, se debe considerar que el tiempo t se lo divide en m sub-intervalos de tiempo t/m. Entonces, la probabilidad de que ocurra una colisión sería $p\, t/m(1 - p\, t/m)^m$, en donde $1 - p\, t/m$ es la probabilidad de que no exista una colisión en cada uno de los m intervalos anteriores al m y $p \cdot t/m$ es la probabilidad de que se presenta la colisión en el intervalo m; por lo tanto:

$$p^*(t)[t/m] = n\, \sigma\, v[t/m](1 - n\, \sigma\, v[t/m])^m \tag{4.3.2}$$

Por lo indicado anteriormente, y tomando el límite en (4.3.2) cuando $m \to \infty$, se obtiene la probabilidad p^*, de que exista una colisión al tiempo t. Esta aseveración es válida, si se toman en cuenta muchos sucesos o eventos idénticos; de esta forma, la probabilidad será evaluada sobre el promedio estadístico obtenido entre muchos

ensambles preparados de la misma manera. El resultado se muestra en la ecuación (4.3.3).

$$p^*(t)dt = n\,\sigma\,v\,dt\exp(-n\,\sigma\,v\,t) \tag{4.3.3}$$

La función de distribución acumulada se la evaluará en los límites de integración 0 y t mediante la ecuación (4.3.4), que claramente está normalizada a 1. Este valor concuerda muy de cerca con el obtenido por Birdsall [32] para el mismo proceso, con la única diferencia, de que en ese artículo, la sección eficaz está en función de la energía.

$$P^*(t) = \int_0^t n\,\sigma\,v\,dt\exp(-n\,\sigma\,v\,t) = 1 - \exp(-n\,\sigma\,v\,t) \tag{4.3.4}$$

Encontrada la función de distribución de probabilidad acumulada, se puede utilizar el procedimiento indicado en el Apéndice B para simularla mediante números aleatorios. En la ecuación (4.3.4) si $P^*(t)$ se hace igual que un número aleatorio $\Re_t$ generado con probabilidad uniforme entre 0 y 1; se simplifica la ecuación (4.3.4) considerando la propiedad de los números aleatorios (B.2.1); y luego se despeja el tiempo que simula la probabilidad de ocurrencia de un choque, se obtiene la ecuación (4.3.5).

$$P^*(t) = 1 - \exp(-n\sigma vt) = \Re_1 \Leftrightarrow \exp(-n\sigma vt) = \Re_t$$

$$t_{siguiente\,choque} = -\frac{1}{n\,\sigma\,v}\ln(\Re_t) \tag{4.3.5}$$

Es necesario tener cuidado con el logaritmo natural del número aleatorio $\Re_t$ de la ecuación (4.3.5), porque existe una probabilidad finita de que $\Re_t$ sea exactamente igual a 1 ó 0. En esos casos, al evaluar el logaritmo natural, se obtendrían respectivamente valores de 0 (equivalente a que el siguiente choque sería en un tiempo de 0 nanosegundos, o sea un *choque inmediato*), ó de $-\infty$ *(que indicaría en adelante no se producirá otra colisión)*. Para eliminar estas posibilidades absurdas se incluirán dentro del paréntesis del logaritmo natural los términos B y $1-2B$, con $B << 1$, tal como se muestra en la ecuación (4.3.6).

$$t_{siguiente\,choque} = -\frac{1}{n\,\sigma_T\,v}\ln\left[B + (1-2B)\Re_t\right] \tag{4.3.6}$$

Un caso particular es el cálculo de tiempo para que se presente el primer choque, dado que la velocidad inicial sería 0. De acuerdo a las ecuaciones (4.3.5), y (4.3.6) el tiempo calculado sería infinito. Por tanto, es necesario asumir una velocidad inicial, la que podría ser la misma de los electrones térmicos $v = \sqrt{3k_BT/m_e} \sim 114{,}000\, m/s \sim 0,032\, eV$. Los datos faltantes serían: su sección eficaz correspondiente $\sigma(0,032\, eV) = 3,5\times10^{-20}\, m^2$, y la densidad del gas $n \sim 2,44\times10^{25}\, electrones/m^3$. Con estos últimos datos el tiempo para la siguiente colisión sería de $t_{primer\, choque} \sim 10^{-11}\, s$.

En la Figura 4.1, se encuentra un histograma para cien mil números generados con una función de distribución similar a la probabilidad de ocurrencia del siguiente choque, obtenida con la ecuación (4.3.6) con $B = 0{,}1$.

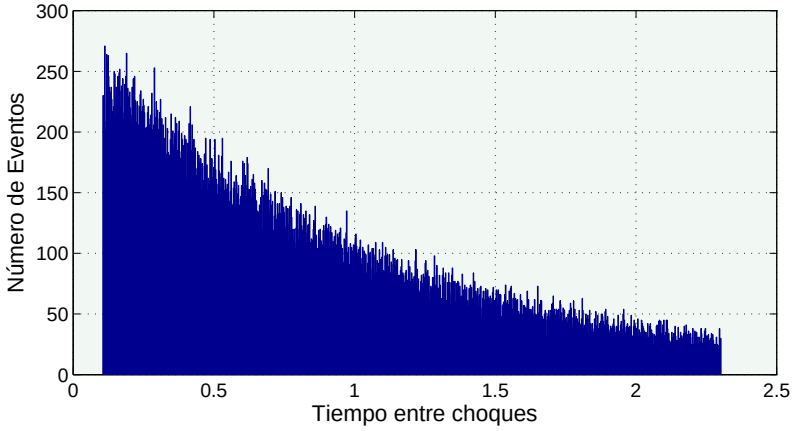

Figura 4.1: Histograma de eventos para cien mil números con función de distribución similar a la probabilidad de ocurrencia del siguiente choque

Para el cálculo del tiempo del siguiente choque, es necesario tener en cuenta los términos correspondientes a la densidad parcial y sección eficaz particular de cada especie. En este caso se utilizará el valor de la sección eficaz total σ_T que es función de la energía cinética del electrón y de la molécula a impactar para cada caso. Dado que existen varias especies de moléculas con las que pudiera chocar el electrón en este momento, se realizará un promedio estadístico ponderado sobre las densidades moleculares y secciones eficaces. Por ejemplo: $n\sigma_T = n_{O_2}\sigma_{O_2} + n_{N_2}\sigma_{N_2}$. Se conoce que cada uno de los gases dentro del aire tiene una densidad parcial; por ejemplo el oxígeno tiene típicamente una proporción del 21 %,y el nitrógeno del 79 %. Al revisar la ecuación

(4.3.5) se nota que en la misma existen: un término para la velocidad v; otro para la sección eficaz σ; y otro para el número de partículas por unidad de volumen n. Para el caso de un gas compuesto de varios tipos de especies, con densidades parciales n_i y secciones eficaces $\sigma_{T\,i}$ se obtiene una expresión similar a la que se muestra en la referencia [32]. La velocidad v que se utilizará en este caso es la de salida después de la colisión, y la sección eficaz Gran Total σ_T a la que se refiere la ecuación (4.3.7) tiene la forma que se indica en la Figura 4.2, obtenida en base a los datos de la referencias [67, 68, 78] y al paquete de datos de la referencia BOLSIG [72].

$$t_{siguiente\,choque} = -\frac{1}{\sum_{i=1}^{\nu} n_i\,\sigma_{T_i}(v)\,v}\ln[B + (1-2B)\Re_t] \tag{4.3.7}$$

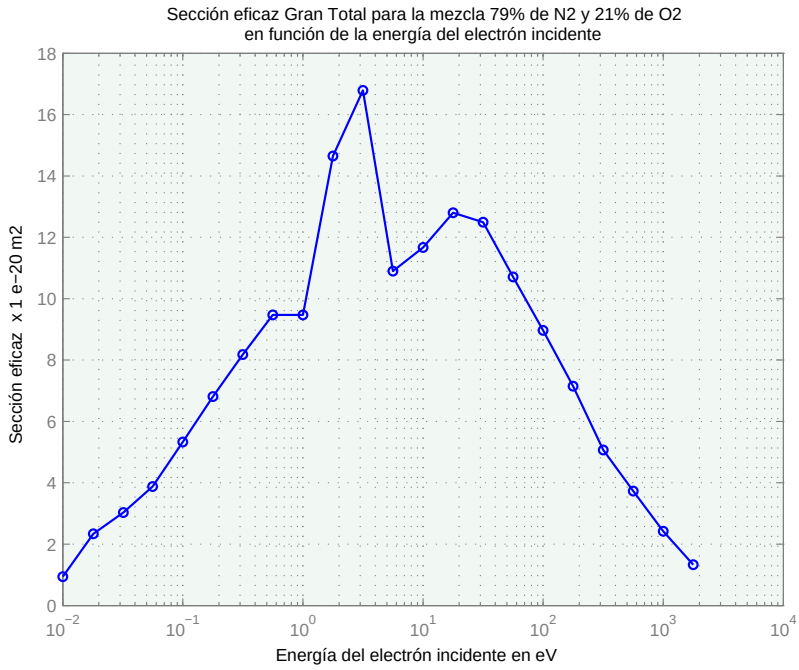

Figura 4.2: Sección eficaz Gran Total para la mezcla de Nitrógeno y Oxígeno en proporciones de 79 % y 21 % respectivamente

4.3.2 Probabilidad de impacto con moléculas de diferente especie

Una vez que se conoce el tiempo necesario para que se presente el siguiente choque, es necesario determinar la especie de molécula con la cual va a chocar el electrón, el cálculo

se lo realizará nuevamente con las densidades parciales y secciones eficaces totales de colisión para cada caso. La probabilidad de que se presente la colisión con la especie i se puede calcular con la ecuación (4.3.8), en la cual los términos con el subíndice i se suman para las ν especies.

$$p_i = \frac{n_i \sigma_{T_i}}{\sum_{i=1}^{\nu} n_i \sigma_{T_i}(v)} \tag{4.3.8}$$

Puesto que se conocen las secciones eficaces totales para cada especie dentro de la gama de valores desde $0,1$ hasta $1.000\ eV$; entonces, es posible obtener una curva para la probabilidad de choque con la especie i. En la Figura 4.3 se puede observar cómo cambia esta probabilidad, de acuerdo con la energía del electrón incidente, y la referencia de $0,21$ ó $21\,\%$. De acuerdo al Apéndice B, bastará con comparar un número aleatorio con esta curva. Si está sobre la cota, la colisión será con el N_2 de lo contrario será con el O_2.

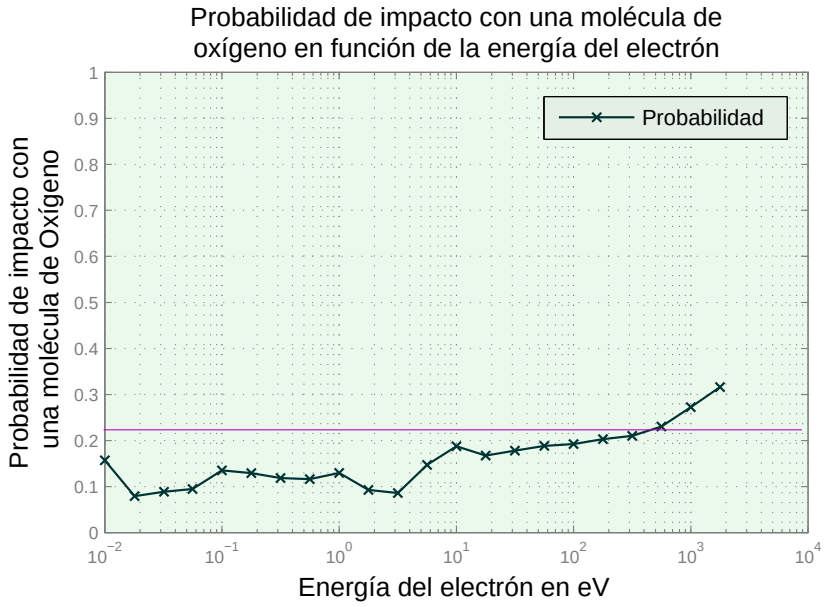

Figura 4.3: Probabilidad de choque con una molécula de oxígeno, en función de la energía del electrón, obtenida para el aire, con densidades parciales de 79 y $21\,\%$, y evaluadas en el rango de $0,1$ a $10000\ eV$. En color magenta se muestra la referencia que corresponde al $21\,\%$ en densidad

4.3.3 Probabilidad de un determinado proceso

Una vez determinada la ocurrencia de un choque, y el tipo de molécula con la cual impactará, es posible encontrar el tipo de proceso que ocurrirá dentro del menú de opciones indicado en §3.4. La ocurrencia de un determinado proceso dependerá nuevamente de la sección eficaz de cada proceso particular. Para determinar la probabilidad de cada proceso individual, se utilizará el hecho de que la sección eficaz total, es la suma de las secciones eficaces parciales para todos los procesos energéticamente factibles (Ver Ecuación (4.3.9)) [78].

$$\sigma_T(\epsilon) = \sum_n \sigma_n(\epsilon) \tag{4.3.9}$$

Entonces, la probabilidad de ocurrencia de una colisión particular, es la que se indica en la ecuación (4.3.10) [79], en la cual σ_T es la sección eficaz total, y los n procesos factibles tienen cada uno secciones eficaces σ_n. No se debe perder de vista la dependencia de las secciones eficaces parciales, con respecto a la energía de entrada a la colisión.

$$p_{proceso\,n} = \frac{\sigma_n}{\sigma_T} \tag{4.3.10}$$

La información que aporta cada uno de los procesos a la dinámica de las colisiones se encuentra realmente en dos valores, por un lado la sección eficaz parcial dada por $\sigma_n(\varepsilon)$, y por otro, la energía umbral para este proceso $\varepsilon_{umbral\,n}$. Si uno desea enfatizar en un proceso particular, deberá tomar estos valores de manera individual. Por ejemplo, para una energía del electrón entrante de $0,562\,eV$ en la colisión con el Nitrógeno molecular, para el proceso de excitación rotacional con número cuántico $v = 0 \rightarrow 1$ se tiene una sección eficaz parcial de $0,025 \times 10^{-16}\,cm^2$ y una energía umbral de 0,020 eV.

Sin embargo, dado que el número de procesos bajo estudio es muy grande, y que para este tipo de simulación carece de significado real en forma individual, es necesario simplificar el problema y dejar de lado la información no relevante de ciertos procesos. Para el programa computacional se distinguieron y tomaron en cuenta únicamente cuatro grupos de procesos de acuerdo a su importancia:

- Las colisiones elásticas

- Las colisiones inelásticas correspondientes a excitaciones rotacionales, vibracionales, electrónicas, resonancias, y otras del mismo tipo
- Las colisiones con ionización
- Los procesos de atrapamiento de electrones por moléculas neutras

De esta manera, la sección eficaz total quedaría así:

$$\sigma_{Total} = \sigma_{elasticas} + \sigma_{inelasticas} + \sigma_{atrapamiento} + \sigma_{ionizacion} \tag{4.3.11}$$

En donde

$$\sigma_{inelasticas} = \sum_{n} \sigma_{inelasticas\, n} \tag{4.3.12}$$

Quiere decir entonces, que se han fundido las colisiones inelásticas como si fueran un único proceso [79]. Al hacerlo de esta forma se ahorra una gran cantidad de cálculos, y de alrededor de 20 tablas de valores de colisiones inelásticas, se reduce a un sólo tipo de proceso virtual que engloba estadísticamente a todos los inelásticos. Para completar la información contenida en este nuevo proceso virtual, se debe calcular la energía virtual de excitación, para lo cual, se utilizará un promedio con un peso estadístico dado por las probabilidades de que sucedan cada uno de ellos, en base a las secciones eficaces parciales de los procesos inelásticos. En la ecuación (4.3.13) se encuentra el valor de esta energía.

$$\varepsilon_{virtual\, inelasticos} = \sum_{n} \frac{\sigma_{inelasticas\, n}}{\sigma_{Total}} \cdot \varepsilon_{umbral\, n} \tag{4.3.13}$$

En las Figuras 4.4 y 4.5 que se insertan a continuación, se presenta la probabilidad en tanto por unidad de la ocurrencia de los distintos procesos en función de la energía en eV para la colisión de electrones con moléculas de nitrógeno y oxígeno respectivamente.

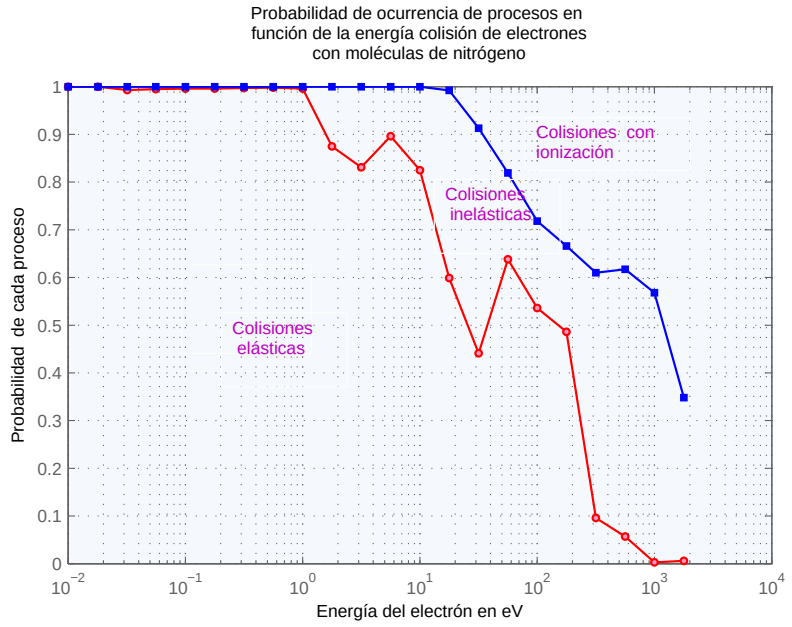

Figura 4.4: Procesos en el nitrógeno

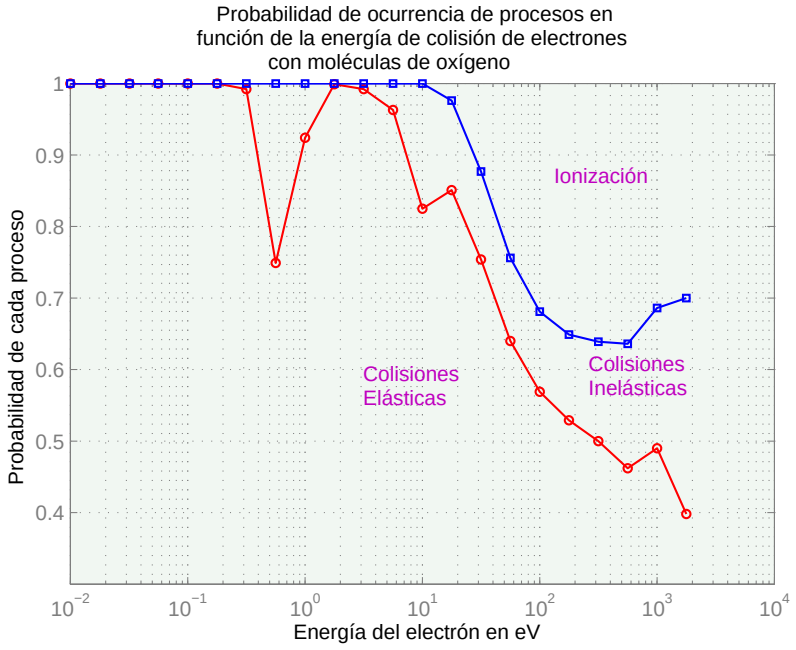

Figura 4.5: Procesos en el oxígeno

4.3.4 Balance energético en las colisiones

En las colisiones elásticas se conserva la energía y se cumple la ecuación (4.3.14), o su equivalente en velocidades, ecuación (4.3.15), en la cual, los superíndices con asterisco (*) corresponden a las variables después del choque. En este caso, se ha considerado que el electrón choca elásticamente contra una molécula de masa mucho mayor. Los subíndices $\parallel$ indican que es paralelo a la trayectoria del electrón incidente y $\perp$ que es perpendicular a ella.

$$E_{e^- \, dispersado} = E_{e^- \, incidente} \tag{4.3.14}$$

$$(v_{\parallel}^*)^2 + (v_{\perp}^*)^2 = (v_{\parallel})^2 + (v_{\perp})^2 \tag{4.3.15}$$

A partir de un análisis clásico del choque, la fracción de energía perdida en el impacto de un electrón dispersado por una molécula en un ángulo θ se expresa en la ecuación (4.3.16) [80, 68, 32], donde m es la masa del electrón, y M la masa de la molécula contra la que choca.

$$\frac{\Delta E}{E} = \frac{2m}{M}(1 - \cos\theta) \tag{4.3.16}$$

Para el cálculo numérico de la energía de salida en función de la energía de entrada, se utilizará el módulo $|1 - \cos\theta|$ en $E_{salida} = E_{entrada}(1 - \frac{2m}{M}|1 - \cos\theta|)$; de esa manera, la energía de salida será siempre menor que la de entrada. De la misma manera, ya que

$$\frac{\Delta E}{E} = 2\frac{\Delta v}{v}$$

Se obtiene:

$$\frac{\Delta v}{v} = \frac{m}{M}(1 - \cos\theta) \tag{4.3.17}$$

El resultado anterior se obtiene luego de tomar la aproximación claramente válida de que la masa del electrón es mucho menor que la masa del blanco (y por tanto, la masa reducida es casi igual a la masa del electrón).

Para el caso de las colisiones inelásticas de electrones con moléculas neutras, cuyo efecto es la excitación de los niveles propios de energía de la molécula, el balance

energético está dado por la ecuación (4.3.18). En ésta, la energía del electrón saliente se puede calcular mediante la resta de la energía del electrón incidente menos la energía que se empleó en la excitación de algún tipo de mecanismo, como por ejemplo el vibracional (Ver Apéndice A.2).

$$E_{dispersado} = E_{incidente} - E_{excitacion} \tag{4.3.18}$$

En cambio, para las colisiones de electrones con moléculas neutras, que dan como resultado la ionización de estas últimas, el balance energético sería el indicado en la ecuación (4.3.19). Esta ecuación toma en cuenta la posibilidad de una ionización y la creación de un electrón adicional. La energía de ionización en este caso, puede variar de acuerdo al orbital molecular del cual se desprendió el electrón.

$$E_{e^- \, dispersado} = E_{e^- \, incidente} - E_{ionizacion} - E_{e^- \, creado} \tag{4.3.19}$$

Para las moléculas de nitrógeno y oxígeno, de acuerdo a los datos del paquete *BOLSIG* [72] se han tomado las energías de ionización que se muestran en el Cuadro 4.1.

Energía de ionización	kJ/mol	$eV/molécula$
Nitrógeno	1.313,9	15,60
Oxígeno	3.388,3	12,06

Cuadro 4.1: Energías de ionización del Nitrógeno y Oxígeno moleculares [72]

Los electrones, tanto el dispersado como el creado, son indistinguibles entre sí, de tal manera que el rastro dejado por el uno o por el otro también es indistinguible el uno del otro; por esta razón, la energía de cada uno de ellos es también indistinguible, y se escogerá aleatoriamente la energía del electrón del cual seguiremos su trayectoria.

4.3.5 Sección eficaz diferencial

Una vez determinada la probabilidad de colisión que depende de la sección eficaz en función de la energía, cabe realizarse la siguiente pregunta: ¿Cuál será el ángulo de

dispersión de los electrones luego de impactar contra las moléculas de aire?. Para responder a esta pregunta se han estudiado dos modelos principales.

- El modelo de esferas rígidas, discutido en el punto 4.3.6
- Modelo de dispersión por apantallamiento de Coulomb

4.3.6 Sección eficaz diferencial y total para la colisión con esferas duras

El desarrollo siguiente se encuentra enmarcado en el ámbito de la mecánica clásica, en el cual, la colisión entre dos partículas está determinada por sus velocidades y por el parámetro de impacto; es decir, la distancia a la que pasarían la una de la otra si no existiera interacción. El objeto de la teoría es calcular la probabilidad de que, como resultado de la colisión, las partículas se dispersen y formen un ángulo determinado con respecto a la dirección del flujo de partículas [71]. La validez de los resultados de las ecuaciones de colisión obtenidas por Rutherford en los albores de la física atómica es notorio, una vez que se han conseguido resultados muy similares al tratar el mismo problema mediante la mecánica cuántica [81]. En la mecánica cuántica, cambia el planteo del problema, ya que tanto el movimiento con velocidades determinadas como el concepto de trayectoria y el parámetro de impacto dejan de tener sentido.

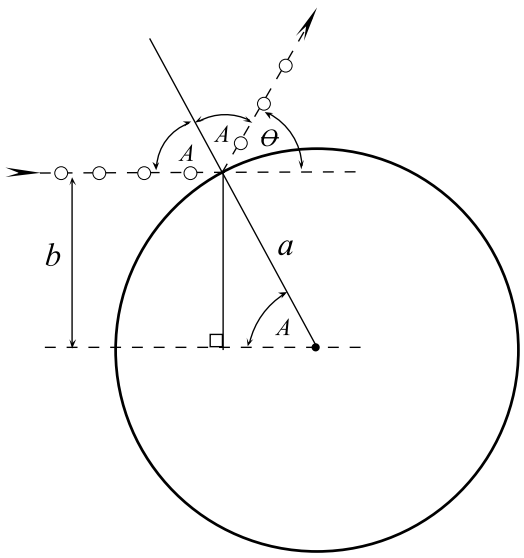

Figura 4.6: Geometría del choque para el caso de esferas rígidas

En una primera aproximación, se considerará que tanto el blanco como el proyectil son esferas duras de radios a_B y a_P respectivamente. Ambas rebotan de tal manera que se cumple la ecuación (4.3.20) con $a = a_B + a_P$. En la ecuación (4.3.20) b es el parámetro de impacto y θ es el ángulo de desviación con respecto al eje principal de colisión. En la Figura (4,6) se puede ver que $\theta = \pi - 2 \cdot \arcsin(b/a)$, por lo tanto:

$$b = a \sin\left(\frac{\pi - \theta}{2}\right) = a \cos\left(\frac{\theta}{2}\right) \tag{4.3.20}$$

Al tomar en cuenta la sección eficaz diferencial obtenida a partir de las consideraciones de la corriente de partículas y la sección diferencial se obtiene la ecuación (4.3.21). Se puede observar que en este caso la dispersión es isotrópica; es decir, que los proyectiles pueden ser dispersados en cualquier dirección de manera equiprobable.

$$\frac{d\sigma}{d\Omega_{CM}} = \frac{b}{|\sin(\theta)|}\left|\frac{db}{d\theta}\right| = \frac{a\cos(\theta/2)}{|\sin(\theta)|}\left|\frac{1}{2}a\sin(\theta/2)\right| = \frac{1}{4}a^2 \tag{4.3.21}$$

Para obtener la sección eficaz total se necesita integrar la sección eficaz diferencial. De esta manera se obtiene la ecuación (4.3.22), en la cual se nota claramente que toda el área lateral es la que enfrenta el haz incidente.

$$\int \frac{d\sigma}{d\Omega_{CM}} d\Omega_{CM} = \int \frac{d\sigma}{d\Omega_{SL}} d\Omega_{SL} = \frac{1}{4}a^2 \cdot 4\pi = \pi a^2 \tag{4.3.22}$$

El resultado de la ecuación (4.3.21) es my importante para la modelización, pues permite calcular los ángulos θ y ϕ de una manera bastante sencilla mediante números aleatorios, tal como se describe en el Apéndice B. Con este procedimiento, no es necesario realizar los cálculos de la dinámica del choque para el caso de las colisiones elásticas. El resultado se muestra en las ecuaciones (4.3.23) y (4.3.24) [82, 69].

$$\theta = \arccos[1 - 2\Re_1] \tag{4.3.23}$$

$$\phi = 2 \cdot \pi \cdot \Re_2 \tag{4.3.24}$$

En la Figura 4.7 se muestra una esfera de radio unitario, en la cual, mediante 10.000 números aleatorios $\Re_1$ y $\Re_2$ uniformemente distribuidos entre 0 y 1, se ha ubicado cada uno de los pares de ángulos obtenidos con (4.3.23) y (4.3.24). En cada punto obtenido

se ha colocado una cruz para demostrar visualmente la probabilidad uniforme en cada pedazo de ángulo sólido . La transformación de ángulos a puntos en el espacio tridimensional se ha realizado mediante una matriz de conversión de coordenadas esféricas a cartesianas.

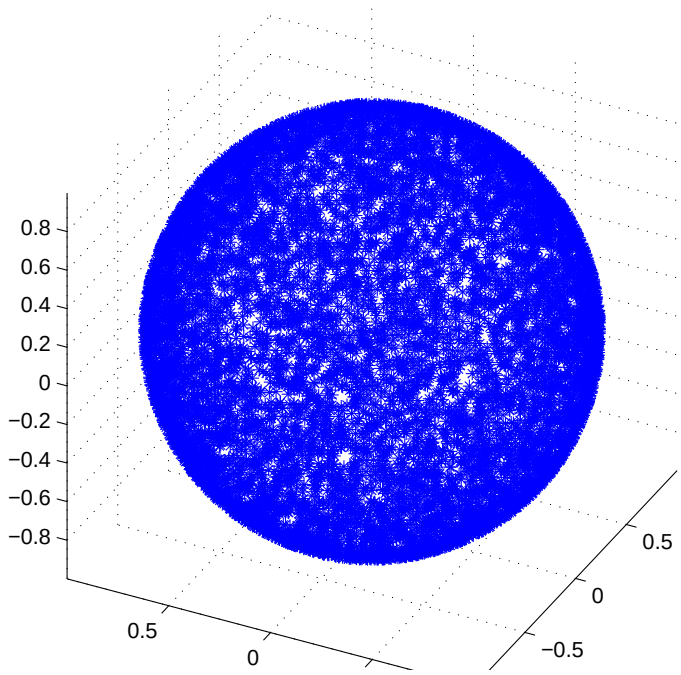

Figura 4.7: Esfera de puntos aleatorios obtenida con las ecuaciones (4.3.23) y (4.3.24). Se nota la uniformidad de la distribución en todos los ángulos de la esfera.

4.3.7 Sección eficaz diferencial en el modelo de Thomas Fermi

El desarrollo hecho para el modelo de *esferas duras* es muy importante, porque permite realizar un estudio similar para el caso de las *esferas suaves* mediante el modelo de apantallamiento de Coulomb, aplicado tanto a los átomos, como a las moléculas. De acuerdo al modelo atómico y molecular establecido por Thomas y Fermi, la densidad de probabilidad electrónica depende del radio [4]. Con esa densidad se ha podido calcular la energía potencial en función del radio, la misma que tiene una forma similar a la ecuación (4.3.25) [82, 69]. En la referencia [65] se encuentra una deducción de la energía

[4]En el caso de las moléculas diatómicas homo-nucleares por la propia geometría del problema no se puede definir un radio único; sin embargo, en este punto se considera de esta forma como una primera apoximación

potencial en función del radio, que es muy similar a la ecuación (4.3.25). En ella E_0 es la unidad atómica de energía equivalente a un *Hartree* o a $27,21eV = \frac{1}{(4\pi\epsilon_0)^2}\frac{m_e e^4}{\hbar^2}$, y $r_0 = 0,529$ *Angstrom* es el radio de Bohr. En esta expresión se ha utilizado el radio exterior del átomo de acuerdo al modelo de Thomas Fermi.

$$U(r) = ZE_0 \cdot \frac{r_0}{r} \exp\left(-\frac{r}{r_0}\right) \tag{4.3.25}$$

A continuación se utiliza la teoría cuántica de la dispersión, para encontrar la sección eficaz de colisión de un par de partículas. Luego de utilizar la primera aproximación de Born, que se indica en la ecuación (4.3.26) [71], se puede llegar, luego de integrarla, a una ecuación similar a la ecuación (4.3.32) [82]. En la (4.3.26) f es una amplitud de probabilidad de colisión, q es la relación entre el número de onda k y θ es el ángulo de dispersión, donde $q = 2k\sin(\theta/2)$.

$$f = -\frac{2m}{\hbar^2}\int_0^\infty U(r)\frac{\sin(qr)}{q} \cdot rdr \tag{4.3.26}$$

Con la expresión para el potencial $U(r)$ indicado en la ecuación (4.3.25) y con $\alpha = zE_o a$, se obtiene:

$$-\frac{2\alpha m}{q\hbar^2}\int_0^\infty e^{-r/a}\sin(qr)dr = -\frac{2\alpha m a^2}{\hbar^2}\frac{1}{q^2a^2+1}$$

De acuerdo a la teoría de la dispersión de la mecánica cuántica, y dado que la sección eficaz diferencial $d\sigma/d\Omega$ es igual al cuadrado del valor absoluto de la amplitud de probabilidad, se obtiene la ecuación (4.3.27).

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f|^2 = 4a^2\left(\frac{\alpha m a}{\hbar^2}\right)^2\frac{1}{(q^2a^2+1)^2} \tag{4.3.27}$$

Y la sección eficaz total, se puede calcular mediante la integración por todo el ángulo sólido de la sección eficaz diferencial; de esta manera:

$$\sigma = 2\pi\int_0^\pi\left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)\sin\theta d\theta$$

En la igualdad anterior, se ha introducido el valor de la sección eficaz diferencial obtenido mediante la ecuación (4.3.27).

$$= 4a^2 \left(\frac{\alpha ma}{\hbar^2}\right)^2 \int_0^\pi \frac{\sin\theta d\theta}{(4k^2a^2\sin^2(\theta/2)+1)^2}$$

Por lo tanto, la sección eficaz total es la que se indica en la ecuación (4.3.28).

$$\sigma = 16\pi a^2 \left(\frac{\alpha ma}{\hbar^2}\right)^2 \frac{1}{4k^2a^2+1} \tag{4.3.28}$$

Si en la ecuación (4.3.27) se reemplaza la energía $E = \frac{\hbar^2k^2}{2m_e}$ y $a = \frac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{m_e e^2}$ como el radio de Bohr, y se divide para la sección eficaz total (4.3.28), se obtiene la ecuación (4.3.29) para la sección eficaz diferencial normalizada. La ecuación (4.3.29) es la misma que ha sido obtenida en la referencia [82], en donde $\varepsilon = E/E_0$.

$$I(\varepsilon,\theta) = \frac{1}{4\pi}\frac{1+8\varepsilon}{(1+4\varepsilon-4\varepsilon\cos\theta)^2} \tag{4.3.29}$$

Al integrar la ecuación (4.3.29) entre 0 y θ, se obtiene la probabilidad acumulada de dispersión de los electrones al chocar contra átomos o moléculas no polares.

$$P(\varepsilon,\theta) = \frac{(1+8\varepsilon)\sin^2(\theta/2)}{1+8\varepsilon\sin^2(\theta/2)} \tag{4.3.30}$$

De acuerdo a [71], las condiciones de aplicabilidad de estas fórmulas son: $\alpha ma/\hbar^2 \ll 1$ y $\alpha/\hbar v \ll 1$.

Por último, para encontrar el ángulo de dispersión, se compara la probabilidad de dispersión acumulada (4.3.30) con un número aleatorio $\Re_2$ uniformemente distribuido en el intervalo $[0,1]$ y se encuentra la función inversa (Apéndice B). Con la función inversa es posible encontrar el ángulo θ para una determinada energía normalizada ε y para un número aleatorio específico $\Re_2$.

$$\theta = \arccos\left(1 - \frac{2\Re_2}{1+8\varepsilon(1-\Re_2)}\right) \tag{4.3.31}$$

La ecuación (4.3.31) es muy conveniente para la modelación de procesos estocásticos de Monte-Carlo y el comportamiento de los electrones en gases atómicos [83]. De acuerdo a la referencia [82], para moléculas no polares tales como el N_2 o el O_2 se debe realizar la corrección indicada en la ecuación (4.3.32), en la cual se utiliza un

parámetro de perfeccionamiento ξ que depende de la energía ε según se puede observar en la Figura 4.8.

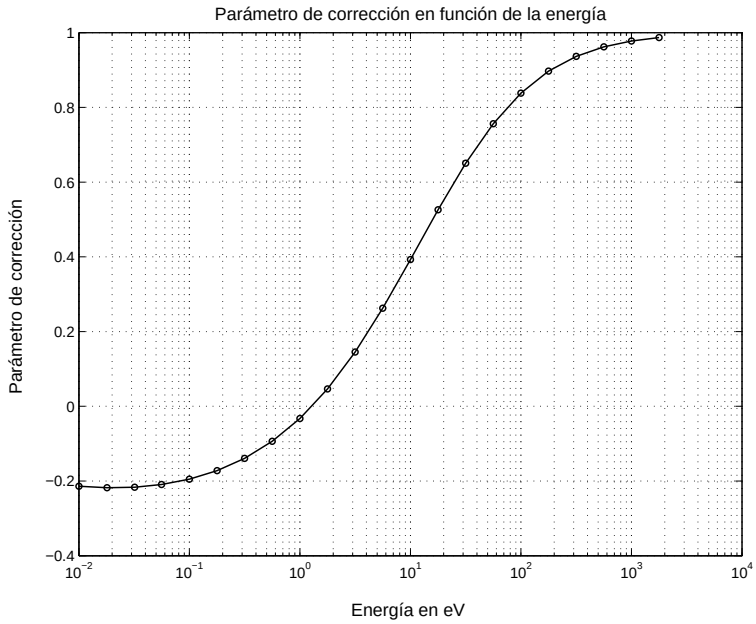

Figura 4.8: Variación de ξ en función de la energía ε, obtenida a partir de la ecuación (4.3.33)

$$I(\varepsilon, \theta, \phi) = \frac{1}{4\pi} \frac{1 - \xi^2(\varepsilon)}{(1 - \xi(\varepsilon)\cos(\theta))^2} \tag{4.3.32}$$

En la ecuación (4.3.32) el valor de ξ se puede calcular mediante la ecuación (4.3.33) que es una aproximación adecuada para este parámetro de corrección para muchos gases, de acuerdo a la referencia [82, 69]. Para el nitrógeno molecular se ha encontrado el ajuste empírico dado por la ecuación (4.3.33), en donde ε es la energía del electrón incidente en eV.

$$\xi(\varepsilon) = \frac{0{,}065\varepsilon + 0{,}26\sqrt{\varepsilon}}{1 + 0{,}05\varepsilon + 0{,}2\sqrt{\varepsilon}} - \frac{12\sqrt{\varepsilon}}{1 + 40\sqrt{\varepsilon}} \tag{4.3.33}$$

Luego de integrar la ecuación (4.3.32) entre los valores de 0 y θ, se puede obtener la nueva fórmula para poder calcular el ángulo de salida en función de la energía de entrada y del vector unitario de la velocidad de entrada, mediante la ecuación (4.3.34) [82]. Se debe notar que estas ecuaciones, no tienen simetría esférica sino cilíndrica. Es por esta razón que se necesita rotar el vector unitario de la velocidad de entrada a la colisión, para continuar con la simulación.

$$\theta = \arccos\left[1 - \frac{2\Re_2(1-\xi(\varepsilon))}{1+\xi(\varepsilon)(1-2\Re_2)}\right] \tag{4.3.34}$$

En la Figura 4.9 se observa la densidad de puntos correspondiente a la sección eficaz diferencial relativa obtenida con la ecuación 4.3.32, con un valor de $\xi = 0,5$. Se puede observar que existe una menor densidad de puntos en la cascarón esférico inferior con respecto al superior. Esta figura hace notar la diferencia con respecto a la esfera aleatoria equiprobable obtenida para el caso de esferas duras.

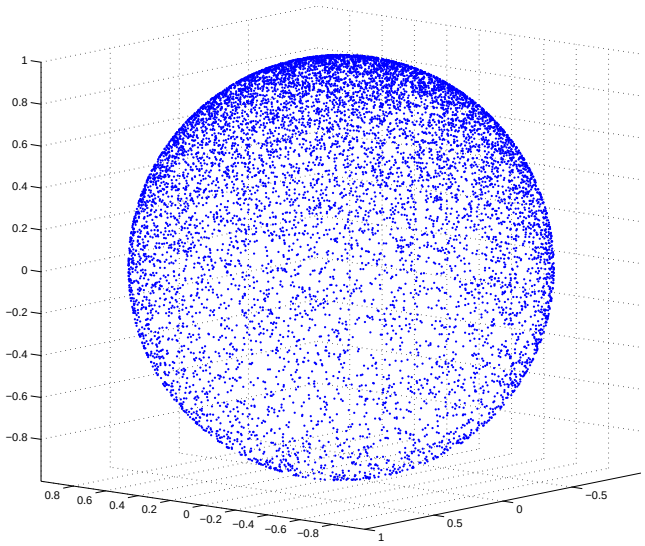

Figura 4.9: Esfera aleatoria con $\xi = 0,5$. Se puede observar que existe una menor densidad de puntos en la parte inferior con respecto a la superior

4.3.8 Distribución de velocidades de las moléculas neutras

Para la simulación se requiere tomar en cuenta la velocidad de la moléculas neutras del gas en el cual se desplazan los electrones. Hasta este punto, prácticamente la única forma de diferenciar el tipo de moléculas contra las cuales chocan los electrones ha sido a través de sus secciones eficaces. Tanto la masa de esas partículas como la velocidad que tienen cada una de ellas, aún no se ha introducido en la simulación. Para hacerlo, es necesario considerar que esas moléculas, por estar en la fase previa a una avalancha, obedecen la ley de distribución de Maxwell Boltzmann. En las simulaciones de tipo PIC-MCC [84] el algoritmo que se usa para inyectar partículas dentro de un plasma es

mucho más complejo que el que se presenta en este punto.

En la presente simulación, la velocidad de las moléculas neutras será utilizada únicamente cuando la velocidad de los electrones tenga una magnitud comparable con la velocidad de las moléculas en el equilibrio. Lo que se puede conseguir, si por ejemplo la velocidad de los electrones es menor que 10 veces la velocidad media de las moléculas a esa temperatura. Esto ocurre en los primeros instantes de aceleración de los electrones; es decir, a partir de que estaban en reposo en una cierta posición inicial; ó, después de haber perdido gran parte de su energía cinética en alguna colisión. Luego de poco tiempo de aceleración, los electrones por su masa tan pequeña, adquieren velocidades mucho mayores que la velocidad media de las moléculas neutras, y para velocidades electrónicas mayores, la velocidad de las moléculas del medio pierde su importancia en razón de su pequeña magnitud. En muchas simulaciones la velocidad de las moléculas y átomos neutros ha sido totalmente despreciada [79, 69]. Adicionalmente, la velocidad de las moléculas neutras facilita el cálculo de la rotación del vector velocidad, ya que impide que las velocidades tengan únicamente componentes en la dirección en z, y que ciertos denominadores se hagan nulos.

De acuerdo a la ley de distribución de velocidades de Maxwell Boltzmann, el número de moléculas $n(\varepsilon)$ con energía entre ε y $\varepsilon + d\varepsilon$, es proporcional a $\exp(-\beta\varepsilon)$, donde $\beta = \frac{1}{k_B T}$. Para el caso no relativista $\varepsilon = \frac{1}{2}mv^2$, y $v = \sqrt{v_x^2 + v_y^2 + v_z^2}$; por lo tanto:

$$n(\mathbf{v}) \propto \exp\left(-\frac{mv^2}{2k_B T}\right)$$

De la misma manera para cada uno de los ejes $i = x, y,\ o\, z$

$$f_i(v_i) = \sqrt{\frac{m}{2\pi k_B T}} \exp\left(-\frac{mv_i^2}{2k_B T}\right)$$

Por lo tanto, para generar una partícula con velocidad aleatoria sólo en la dirección del choque hará falta simplemente hallar un número aleatorio con distribución normal entre $-\infty$ y $+\infty$, y luego multiplicarlo por la velocidad media cuadrática. Eso es lo que se hizo para obtener la Figura 4.10 que se muestra a continuación

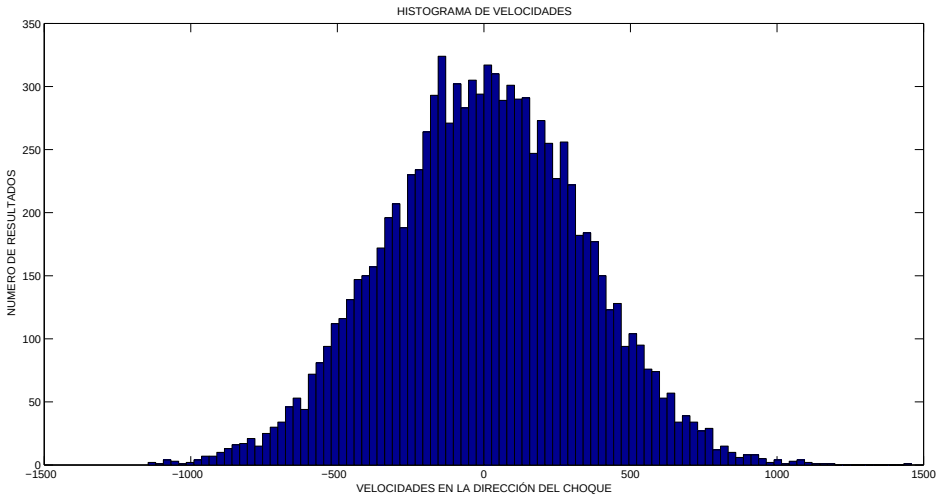

Figura 4.10: Histograma de velocidades para 10.000 partículas con distribución normal de Maxwell

Para obtener en coordenadas cartesianas las velocidades aleatorias de las moléculas se utilizarán las ecuaciones (B.4.3,B.4.4,y B.4.5).

Con el fin de evitar errores en la simulación computacional, es necesario reducir el rango de acción de las moléculas neutras de un gas. De acuerdo con la teoría de la relatividad, ninguna partícula puede moverse con velocidades mayores a las de la luz. A pesar de que en la función de distribución de Maxwell la velocidad más probable es $v = 0$, podríamos encontrar partículas con velocidades mayores a la velocidad de la luz $c = 3 \times 10^8\, m/s$. aunque con una probabilidad muy pequeña. Esto se debe a que las colas de la distribución se extienden en principio hasta una velocidad infinita. [5]

4.3.9 Dinámica molecular

El método de Dinámica Molecular (DM) posibilita el cálculo de la dinámica de las partículas microscópicas, componentes de un sistema físico particular, sobre la base de sus ecuaciones de movimiento. Estas ecuaciones pueden derivarse a partir de la di-

[5] Max Planck se dio cuenta, de que debido a la invariancia de la velocidad de la luz, sería necesaria una modificación a la función de distribución de velocidades de Maxwell-Boltzmann, ya que ésta no tiene un límite para las velocidades de las partículas; es decir, pueden tener velocidades infinitas [85].

námica de Newton, y permiten obtener las posiciones y velocidades de las partículas bajo estudio. Los datos obtenidos con este procedimiento para las coordenadas de posición y velocidad, pueden utilizarse después, para realizar una mecánica estadística muy aproximada del problema. La descripción puede ser mediante un Lagrangiano, un Hamiltoniano, o directamente mediante la resolución analítica de sus ecuaciones de movimiento. Generalmente, se utiliza este modelo para partículas con velocidades no relativistas, aunque también es posible el análisis con altas energías y velocidades relativistas. Finalmente, con este método se pueden simular las fuerzas, colisiones e interacciones de las partículas componentes de un gas, y obtener la trayectoria en 3 dimensiones para el caso de los electrones de incepción.

Para determinar las coordenadas y velocidades en cada instante de tiempo, se utilizará el método de aceleración de velocidades de Verlet. La dinámica del movimiento de los electrones entre colisiones se calculará con las ecuaciones (4.3.35), y (4.3.36), que corresponden a las ecuaciones de Newton discretizadas en intervalos de tiempo Δt.

$$r_{n+1} = r_n + v_n(\Delta t) + \frac{1}{4}[a_n + a_{n+1}](\Delta t)^2 \tag{4.3.35}$$

$$v_{n+1} = v_n + \frac{1}{2}[a_n + a_{n+1}](\Delta t) \tag{4.3.36}$$

Para la simulación, se considerará que las moléculas neutras contra las cuales chocan los electrones, se encuentran cerca del equilibrio termodinámico. Cabe mencionar, que en ciertas simulaciones de *DM*, es necesario realizar numéricamente un precalentamiento, para que el sistema sea previamente estabilizado cerca del equilibrio termodinámico, antes de proceder a perturbarlo. En el presente caso no es necesario llegar a ese nivel de complejidad, debido a que en la simulación de electrones de incepción en el aire, se considera que las velocidades de las moléculas neutras del aire se encuentran ya en equilibrio termodinámico, y se pueden calcular con la ley de distribución de velocidades de Maxwell.

Errores en la simulación con dinámica molecular

Dado que en el procedimiento de *DM* la resolución de las ecuaciones de movimiento se las realiza numéricamente, es claro que existirá un pequeño error debido a la transición desde variables continuas a discretas. El error obtenido normalmente depende del algoritmo que se haya escogido. En principio, el error puede ser hecho tan pequeño como se requiera, sólo restringido por la velocidad y la capacidad de memoria del sistema de computación [76].

En el caso particular de un campo eléctrico uniforme, el cálculo de la dinámica del electrón en el espacio intermolecular no arrojará ningún error si se utiliza la ecuación (4.3.36). Esto se debe en primer lugar, a que por una parte, la aceleración es constante en todos los puntos dentro del espacio de simulación ($a = constante = a_n = \frac{1}{2}[a_n + a_{n+1}]$) , y por otra, a que bajo esa consideración, la trayectoria entre dos choques sucesivos es esencialmente la descrita por una parábola, y el error que se obtendría es cero.

Para la simulación con campos eléctricos no uniformes, como por ejemplo el producido por una punta, se debe tener precaución en escoger adecuadamente el intervalo de tiempo Δt. Si este intervalo es demasiado largo, se corre el riesgo de no representar adecuadamente la dinámica de la simulación. En cambio, si es demasiado corto, se incrementa excesivamente el tiempo de simulación. Entonces, para escoger el tiempo Δt, se deberá tomar en cuenta la velocidad de los electrones antes del choque, nuevamente la sección eficaz de colisión, y la densidad de partículas, de acuerdo a la ecuación (4.3.5). De esta manera, el nuevo sub-intervalo de tiempo $\Delta t_{nuevo\,subintervalo}$ para la siguiente trayectoria, sería el que se indica en la ecuación (4.3.37), en donde N_t sería el número de sub-intervalos en que se dividirá el tiempo para el siguiente choque.

$$\Delta t_{nuevo\,subintervalo} = -\frac{1}{n\sigma v N_t} \log \Re_t \tag{4.3.37}$$

De acuerdo al criterio de cálculo de los errores cometidos con el modelo la Dinámica Molecular con el *Algoritmo de Velocidades de Verlet* se encontrará una pauta para determinar el número de sub-intervalos entre choques N_t. En la referencia [53] se indica

que el error cometido en una simulación con ese algoritmo es del orden $O(T^4)$ [84], en donde T es el intervalo de tiempo escogido aleatoriamente para el siguiente choque determinado anteriormente ($t_{siguiente\,choque}$). De la misma manera en la referencia [53] se especifica que cuando el intervalo T se divide de tal manera que $T = N_t \Delta t$ (N_t sub-intervalos) el error que se comete es del orden de $\frac{N_t(N_t+1)}{2}\Delta t^4$; por lo tanto para un valor de error en por unidad ϵ_{pu}, se puede realizar la siguiente aseveración:

$$\frac{n(n+1)}{2}\,\Delta t^4 = \epsilon_{pu}\,T^4 = \epsilon_{pu}\,N_t^4\,\Delta t^4 \;\Leftrightarrow\; \frac{N_t(N_t+1)}{2} = \epsilon_{pu} N_t^4 \tag{4.3.38}$$

De esa manera, dado un valor de ϵ_{pu}, ya sería posible encontrar el número de sub-intervalos N_t. Es algebraicamente más fácil encontrar ϵ_{pu} en función de N_t. De esta forma, si $N_t = 20$, el error que se obtendría sería de aproximadamente 0,13 %, que es bastante razonable.

$$\epsilon_{pu} = \frac{1}{2N_t^2} + \frac{1}{2N_t^3}$$

4.3.10 Corrección relativista para la velocidad de los electrones

Durante el proceso de aceleración de los electrones en el campo eléctrico aplicado exteriormente, puede darse el caso de que los electrones alcancen velocidades relativistas. Esto se debe que el cálculo con Dinámica Molecular no incluía esta corrección relativista. Durante corridas previas del programa se pudieron observar velocidades cercanas e incluso sobre la velocidad de la luz. Esto no podía darse, de tal manera que fue necesario realizar la corrección.

La energía cinética K de un electrón en función de la velocidad v de las partículas se puede obtener con la ecuación (4.3.39), en la cual c es la velocidad de la luz

$$K = \frac{m\,c^2}{\sqrt{1-\frac{v^2}{c^2}}} - m\,c^2 \tag{4.3.39}$$

Luego de despejar la velocidad v en esta ecuación, se obtiene:

$$v = \frac{c\sqrt{K^2 + 2K\,m\,c^2}}{K + m\,c^2} \tag{4.3.40}$$

La corrección relativista que da la ecuación (4.3.40) llega a ser de importancia a partir de una energía de los electrones de $1.000\,eV$; por tanto, a partir de este valor se la utilizará para el cálculo de la velocidad en función de la energía cinética.

O en términos de $\zeta = \frac{K}{m\,c^2}$

$$v = \frac{c\,\sqrt{\zeta^2 + 2\zeta}}{\zeta + 1} \tag{4.3.41}$$

4.3.11 Rotación de la velocidad en 3 dimensiones

Para la simulación, es necesario resolver matemática y geométricamente el cambio de dirección después del choque. Para el efecto, se utilizarán los ángulos de salida calculados en los puntos anteriores. Es claro que se necesitan dos rotaciones, una para el ángulo de latitud θ, y la otra, para el ángulo de latitud ϕ que gira alrededor del vector de velocidad de entrada al choque. En el caso del modelo de esferas rígidas, la rotación del vector de entrada es trivial, ya que la distribución angular de las velocidades de salida es totalmente aleatoria y esféricamente uniforme. No ocurre lo mismo con las colisiones en las cuales se calculan las secciones eficaces diferenciales con el método de Thomas Fermi. En ese caso, es necesario realizar la rotación del vector de velocidad en las tres dimensiones del espacio. La solución, es posible mediante tres métodos: el de las matrices de rotación, que tiene 9 elementos contenidos en la matriz; el de los cuaterniones con 6 elementos [86] (Ver Apéndice D); y por último, la solución directa mediante vectores. La solución vectorial directa es la que se ha optado por realizar, y se explica a continuación.

En la Figura (4.11) se pueden observar las definiciones de los ángulos correspondientes antes y después de la dispersión. Se puede observar la geometría cilíndrica. El ángulo ψ se encuentra comprendido entre el vector de velocidad de entrada a la colisión ($\overrightarrow{OM}$) y el eje $\overrightarrow{OZ}$. El ángulo θ es el de la latitud, que se lo ha mencionado con anterioridad, y que corresponde a la dispersión calculada con la sección eficaz diferencial obtenida con el modelo de Thomas Fermi. El ángulo de longitud ϕ corresponde al de rotación con respecto al vector de velocidad de entrada ($\overrightarrow{OM}$ ó $\overrightarrow{MQ}$).

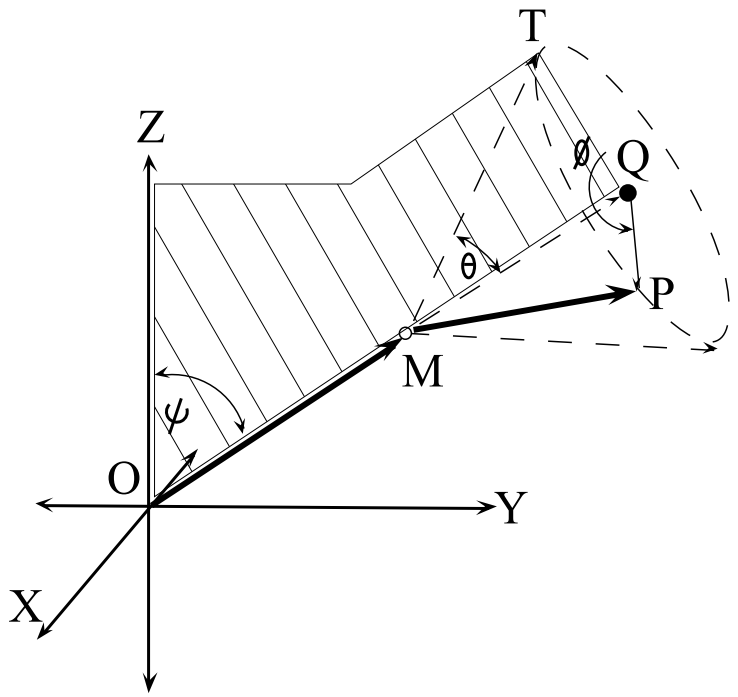

Figura 4.11: Ángulo de salida en 3 dimensiones. Se ha sombreado el plano que comprende los puntos $0, Z, M, Q, T$. El vector de salida final girará alrededor del vector $\overline{MQ}$. El vector de velocidad de salida será el correspondiente a $\overline{MP}$

Se puede notar a partir de la Figura (4.11) que el ángulo de latitud θ se lo puede tomar en cualquiera de las direcciones establecidas por el ángulo de rotación ϕ. Sin pérdida de generalidad se puede trabajar con un ángulo que esté en el mismo plano que el conformado por los vectores $\overrightarrow{0Z}$ y el vector de velocidad de entrada $\overrightarrow{OM}$. Del análisis de la ecuación (B.2.2) se puede concluir que el ángulo de rotación ϕ alrededor del vector velocidad de entrada, es independiente de la orientación inicial $\overrightarrow{QT}$. Todo esto debido al escogimiento aleatorio de este ángulo y a la simetría cilíndrica, en este caso alrededor del eje de la velocidad de entrada.

Para obtener el ángulo de salida directamente mediante el uso de los vectores, se debe primero obtener un vector perpendicular al plano $\widehat{OMZ}$. Como se conoce del Algebra Lineal, eso se puede hacer mediante el producto vectorial. En la ecuación (4.3.42) se indica esta operación, en la cual $\mathbf{v} = v_x\mathbf{i} + v_y\mathbf{j} + v_z\mathbf{k}$.

$$\mathbf{v} \times \mathbf{k} = \begin{vmatrix} \mathbf{i} & \mathbf{j} & \mathbf{k} \\ v_x & v_y & v_z \\ 0 & 0 & 1 \end{vmatrix} = v_y\mathbf{i} - v_x\mathbf{j} = \mathbf{n}_{\mathbf{v}\times\mathbf{k}} \tag{4.3.42}$$

El unitario correspondiente sería el indicado en la ecuación (4.3.43), en donde $v_{xy} = \sqrt{v_x^2 + v_y^2}$

$$\mathbf{u}_{\mathbf{v}\times\mathbf{k}} = \frac{v_y}{v_{xy}}\mathbf{i} - \frac{v_x}{v_{xy}}\mathbf{j} \tag{4.3.43}$$

De la misma manera, para obtener la dirección del vector QT, una vez conocido el vector perpendicular al plano, sólo basta con hacer otro producto vectorial entre el mismo vector obtenido con la ecuación (4.3.42), y el vector de la velocidad de entrada, que se muestra en la ecuación (4.3.44).

$$\mathbf{n}_{\mathbf{v}\times\mathbf{k}} \times \mathbf{v} = \begin{vmatrix} \mathbf{i} & \mathbf{j} & \mathbf{k} \\ v_y & -v_x & 0 \\ v_x & v_y & v_z \end{vmatrix} = -v_x v_z\mathbf{i} - v_y v_z\mathbf{j} + v_{xy}^2\mathbf{k} \tag{4.3.44}$$

Asimismo el unitario correspondiente sería:

$$\mathbf{u}_{\mathbf{v}\times\mathbf{k}\times\mathbf{v}} = -\frac{v_x v_z}{v_{xy} v}\mathbf{i} - \frac{v_y v_z}{v_{xy} v}\mathbf{j} + \frac{v_{xy}}{v}\mathbf{k} \tag{4.3.45}$$

Se han obtenido hasta aquí solamente las direcciones, para las dimensiones se debe considerar que $||\overrightarrow{QP}|| = ||\overrightarrow{MP}|| \sin\theta$, y que $||\overrightarrow{MQ}|| = ||\overrightarrow{MP}|| \cos\theta$. Todo esto, debido a la suma vectorial correspondiente $\overrightarrow{MP} = \overrightarrow{MQ} + \overrightarrow{QP}$, y a la ortogonalidad entre $\overrightarrow{MQ}$ y $\overrightarrow{QP}$ obtenida por construcción. Finalmente, es necesario rotar el vector $\overrightarrow{QT}$ alrededor del eje $\overrightarrow{MQ}$. Para lograr este objetivo, es suficiente conocer que el lugar geométrico de los puntos descritos al rotar el vector $\overrightarrow{QT}$ alrededor del eje $\overrightarrow{MQ}$ está en el plano cuyos vectores unitarios se indican en las ecuaciones (4.3.43) y (4.3.45), y que son ortogonales entre sí. De esta manera, la velocidad de salida se describirá mediante las operaciones indicadas en la ecuación (4.3.46).

$$\mathbf{v}_{salida} = \mathbf{v}\cos\theta + v\left[\mathbf{u}_{\mathbf{v}\times\mathbf{k}}\cos\phi + \mathbf{u}_{\mathbf{v}\times\mathbf{k}\times\mathbf{v}}\sin\phi\right]\sin\theta \tag{4.3.46}$$

El resultado final se muestra en la ecuación (4,3,47). Puede notarse que una de las condiciones para que se cumpla esta igualdad, es justamente que v_{xy} sea distinto

de 0. Esta condición es obvia, ya que en el caso de que la velocidad de entrada al choque sea paralela al eje Z, de la forma en que se hizo este cálculo no sería posible hallar los vectores perpendiculares, y se trataría de un caso particular. Nótese que $||\overrightarrow{MP}|| = ||\mathbf{v}|| = \sqrt{v_x^2 + v_y^2 + v_z^2} = v$, lo que se puede verificar fácilmente.

$$\mathbf{v}_{salida} = \begin{bmatrix} \left(v_x \cos\theta + \frac{v_y v}{v_{xy}} \sin\theta \cos\phi - \frac{v_x v_z}{v_{xy}} \sin\theta \sin\phi\right) \mathbf{i} & + \\ \left(v_y \cos\theta - \frac{v_x v}{v_{xy}} \sin\theta \cos\phi - \frac{v_y v_z}{v_{xy}} \sin\theta \sin\phi\right) \mathbf{j} & + \\ \left(v_z \cos\theta + v_{xy} \sin\theta \sin\phi\right) \mathbf{k} & \end{bmatrix} \tag{4.3.47}$$

Cuando la velocidad está totalmente alineada con el eje OZ; es decir, cuando la velocidad v_{xy} es prácticamente cero, la velocidad de salida resultante será la indicada en la ecuación (4.3.48), en la cual v_z conserva el signo del vector de entrada, porque la velocidad puede ser paralela o antiparalela con respecto al eje OZ. Nuevamente se puede notar que el signo de las componentes de velocidad tanto en el eje OX como en el OY pierden su sentido por la misma propiedad de los números aleatorios que se empleó para el desarrollo anterior. Se tendrá entonces:

$$\mathbf{v}_{salida} = v_z \sin\theta \sin\phi \mathbf{i} + v_z \sin\theta \cos\phi \mathbf{j} + v_z \cos\theta \mathbf{k} \tag{4.3.48}$$

Capítulo 5

RESULTADOS

En este Capítulo se presentan y evalúan los resultados obtenidos con el código fuente desarrollado en Lenguaje `C` que se muestra en el Apéndice § D. Se utilizó este Lenguaje porque permite una gran transportabilidad del código fuente y una gran velocidad de cómputo. La transportabilidad quiere decir que el mismo programa puede ser compilado sin mayores correcciones en diferentes computadores y bajo distintos sistemas operativos [87]. En cambio, la velocidad de cómputo se debe a que el Lenguaje `C` está directamente relacionado con el lenguaje de máquina.

5.1 Resultados para la Geometría de Placas Planas

5.1.1 Datos obtenidos para diferentes presiones

Se realizó la simulación con distintos campos eléctricos para un tramo de $10\,cm$, con tres valores de presión atmosférica diferentes: 760, 380, $y\,76\ mm\ Hg$. Se utilizaron valores de campo eléctrico entre $0,3$ y $1000\,kV/m$, a una temperatura de $27°C \Leftrightarrow 300°K$. Los datos para cada simulación fueron ingresados por pantalla (Ver Apéndice § E). Se realizaron 100 iteraciones, cada una con un Campo Eléctrico diferente, y se registraron en sendos archivos los datos de: Número de Colisiones, Número de Ionizaciones, Radio de Llegada ($r = \sqrt{x^2 + y^2}$), Velocidad de Llegada, y Tiempo de Arribo. Se obtuvieron los resultados que se muestran en los Cuadros 5.1, 5.2, y 5.3. En el Cuadro 5.1 se muestran los datos obtenidos con una presión de $760\,mmHg$, en el 5.2 con la mitad de la presión; es decir a $380\,mmHg$; y en el 5.3 con la décima parte de la presión normal;

todo esto con el objeto de analizar las tendencias de estos resultados numéricos. Los valores indicados en esos cuadros, representan el promedio estadístico, las varianzas no se han incluido para facilitar el análisis. No se han incluido en los Cuadros indicados los ángulos de llegada, pero se puede afirmar que los mismos estuvieron uniformemente distribuidos entre $-90°$ y $90°$, como se demostrará con la Figura 5.15. Estos ángulos se obtuvieron como resultado de la operación $\theta = \arctan(y/x)$ aplicado sobre las coordenadas $(x, y, 0)$ de llegada.

Campo Eléctrico kV/m	Número de Colisiones $Millones$	Número de Ionizaciones $Unidades$	Radio de Llegada mm	Velocidad de Llegada km/s	Tiempo de Arribo μs
0,1	1,980	0	3,983	81	95,29
0,3	3,466	0	3,350	104	70,72
1,0	5,501	0	2,760	156	51,68
3,0	7,443	0	2,338	244	35,70
10,0	9,756	0,03	1,867	380	22,15
30,0	6,617	0,67	1,293	562	10,46
100,0	5,999	14,38	1,142	1.466	5,00
300,0	4,703	44,12	0,859	3.981	2,45
1.000,0	4,781	98,90	0,706	16.880	1,19

Cuadro 5.1: Resultados para electrones en un tramo de $10\,cm$ a $760\,mmHg$ y $27°C$

Campo Eléctrico kV/m	Número de Colisiones $Millones$	Número de Ionizaciones $Unidades$	Radio de Llegada mm	Velocidad de Llegada km/s	Tiempo de Arribo μs
0,1	1,428	0	4,579	92	76,56
0,3	2,301	0	4,168	134	60,00
1,0	3,365	0	3,481	206	41,31
3,0	4,375	0	2,884	312	27,40
10,0	4,215	0,15	2,369	488	14,58
30,0	2,473	2,47	1,569	822	6,03
100,0	2,688	14,92	1,301	2.315	3,34
300,0	2,127	37,93	1,079	5.821	1,54
1.000,0	1,962	162,49	1,004	12.590	0,80

Cuadro 5.2: Resultados para electrones en un tramo de $10\,cm$ a $380\,mmHg$ y $27°C$

Campo Eléctrico kV/m	Número de Colisiones $Millones$	Número de Ionizaciones $Unidades$	Radio de Llegada mm	Velocidad de Llegada km/s	Tiempo de Arribo μs
0,1	0,546	0	8,381	159	51,48
0,3	0,739	0	7,591	241	35,49
1,0	0,978	0	5,673	378	22,28
3,0	0,666	0,05	4,722	539	10,54
10,0	0,616	1,31	3,732	1.307	5,13
30,0	0,497	3,75	2,797	3.219	2,58
100,0	0,500	11,88	2,300	7.096	1,29
300,0	0,281	151,22	1,890	29.290	0,53
1.000,0	0,064	888,30	0,947	95.850	0,09

Cuadro 5.3: Resultados para electrones en un tramo de $10\,cm$ a $76\,mmHg$ y $27°C$

En las Figuras 5.1, 5.2, 5.3, 5.4, y 5.5 se muestran los resultados indicados en los cuadros 5.1, 5.2 y 5.3. Las Figuras corresponden al número de colisiones, número de ionizaciones, radio de llegada, velocidad de llegada, y tiempo de arribo en función del campo eléctrico y de la presión atmosférica. Las gráficas para las distintas presiones se muestran en colores diferentes:

- Se puede notar en la Figura 5.1, que el número de colisiones se incrementa con el aumento de la presión atmosférica. Este comportamiento con respecto a la presión atmosférica puede explicarse sencillamente porque el número de moléculas presentes en el gas también aumenta con la presión. El comportamiento con respecto al campo eléctrico es un tanto diferente, ya que primero aumenta hasta un pico máximo alrededor de los $10\,kV/m$ y luego disminuye con él. Este comportamiento se parece a la forma funcional de la sección eficaz de colisión, que tiene un máximo cerca de los $10\,kV$

- El número de ionizaciones que se muestra en la Figura 5.2 aumenta con la disminución de la presión atmosférica, y es creciente y significativo alrededor de los $100\,kV/m$. La elevación del número de ionizaciones con la disminución de

la presión del gas se explica por la reducción del número de moléculas, la ampliación del espacio intermolecular, y obviamente el aumento de la velocidad de los electrones producido por el alargamiento del tiempo entre choques. También es razonable el incremento del número de ionizaciones con la intensificación del campo eléctrico, por el aumento de la velocidad de los electrones. El umbral ubicado alrededor de los $100\,kV/m$ se puede explicar porque los electrones con este voltaje de aceleración ya son capaces de alcanzar la energía de ionización de las moléculas.

- El radio de llegada que se muestra en la Figura 5.3 aumenta mientras disminuye la presión, y disminuye de forma monótona cuando aumenta el campo eléctrico. Cuando aumenta el espacio intermolecular, el electrón tiene mayor oportunidad de desplazarse y de cambiar su dirección, esto explicaría el incremento del radio de llegada con la disminución de la presión. Por otro lado, un campo eléctrico de mayor intensidad impediría que el electrón se desplace en una dirección diferente a la del campo, y el radio de llegada sería menor mientras el campo aumenta.

- La velocidad de llegada que se muestra en la Figura 5.4, aumenta cuando disminuye la presión atmosférica, y también aumenta cuando se intensifica el campo eléctrico. Este comportamiento se explica porque la velocidad instantánea se incrementa cuando aumentan, tanto el espacio intermolecular, como el campo eléctrico aplicado.

- El tiempo de llegada que se muestra en la Figura 5.5 disminuye de forma monótona tanto con el aumento de la presión, como con la intensificación del campo eléctrico. Obviamente, al incrementarse la velocidad por las razones expuestas en el punto anterior, el tiempo de llegada disminuye, razonamiento sencillo que explica el comportamiento verificado.

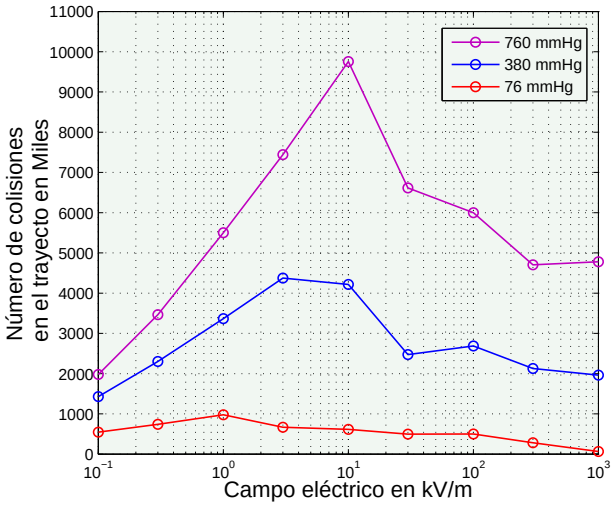

Figura 5.1: Número de colisiones en el trayecto en función del campo eléctrico. El campo eléctrico se ha graficado en escala logarítmica ($\log kV/m$). Se han representado en magenta los valores para $760\,mmHg$, en azul para $380\,mmHg$ y en rojo para $76\,mmHg$.

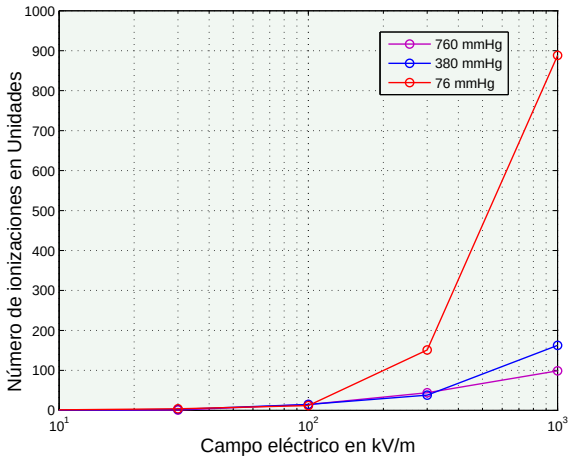

Figura 5.2: Número de ionizaciones en el trayecto de $100\,mm$ en función del campo eléctrico. El campo eléctrico se ha graficado en escala logarítmica ($\log kV/m$). Se han representado en magenta los valores para $760\,mmHg$, en azul para $380\,mmHg$ y en rojo para $76\,mmHg$.

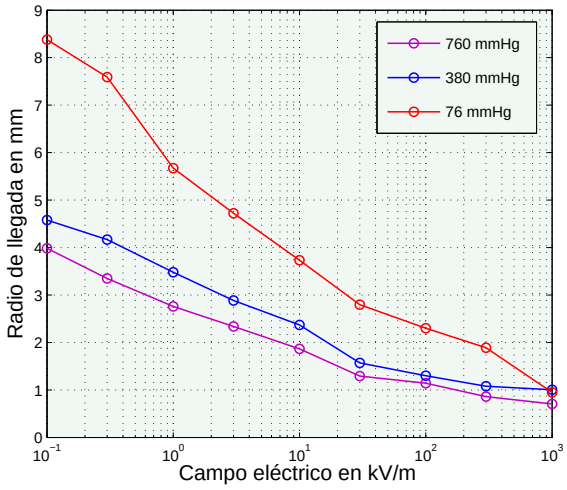

Figura 5.3: Radio de llegada en función del campo eléctrico. El campo eléctrico se ha graficado en escala logarítmica ($\log kV/m$). Se han representado en magenta los valores para $760\,mmHg$, en azul para $380\,mmHg$ y en rojo para $76\,mmHg$.

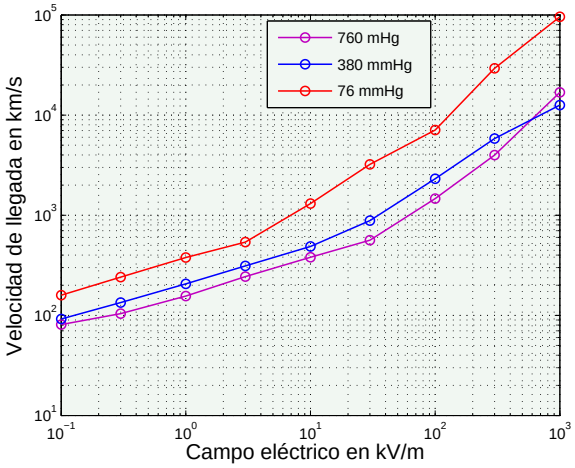

Figura 5.4: Velocidad de llegada en función del campo eléctrico. El campo eléctrico se ha graficado en escala logarítmica ($\log kV/m$). La velocidad se ha representado en km/s. Se han representado en magenta los valores para $760\,mmHg$, en azul para $380\,mmHg$ y en rojo para $76\,mmHg$.

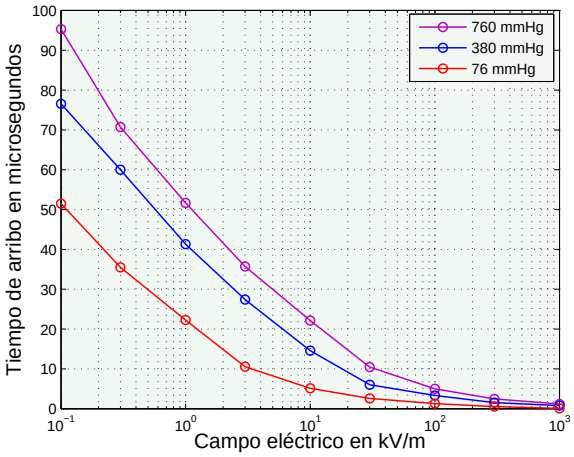

Figura 5.5: Tiempo de llegada en μs en función del campo eléctrico. El campo eléctrico se ha graficado en escala logarítmica ($\log kV/m$). Se han representado en magenta los valores para $760\,mmHg$, en azul para $380\,mmHg$ y en rojo para $76\,mmHg$.

5.1.2 Resultados gráficos de trayectorias

Para graficar la trayectoria se utilizaron las coordenadas de colisión obtenidas con un campo de $30\,kV/m$ a una presión $760\,mmHg$ y $27°C$ de temperatura, en un recorrido de $10\,mm$. La cantidad de información para un tramo de $10\,mm$ rápidamente superó los $30\,Mega\,Bytes$, y produjo las Figuras 5.6, 5.7, 5.8, y 5.9, en las que se muestran diferentes acercamientos en forma secuencial. Debido a la gran cantidad de datos obtenidos en la simulación, el procesamiento gráfico de la información se hizo lento, y cada vez que se realizaba un acercamiento, el computador se retardaba apreciablemente.

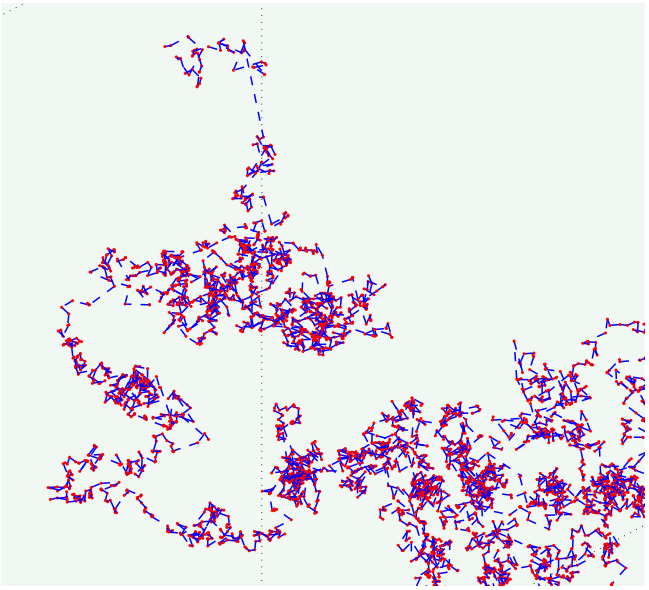

Figura 5.6: Acercamiento profundo en una trayectoria de 1 electrón en una descarga de $10\,mm$ con campo eléctrico $E = 30\,kV/m$ a $760\,mmHg$. Se nota que la dirección que toman los electrones luego de las colisiones no siempre es la misma que la del campo eléctrico externo; es decir, hacia abajo.

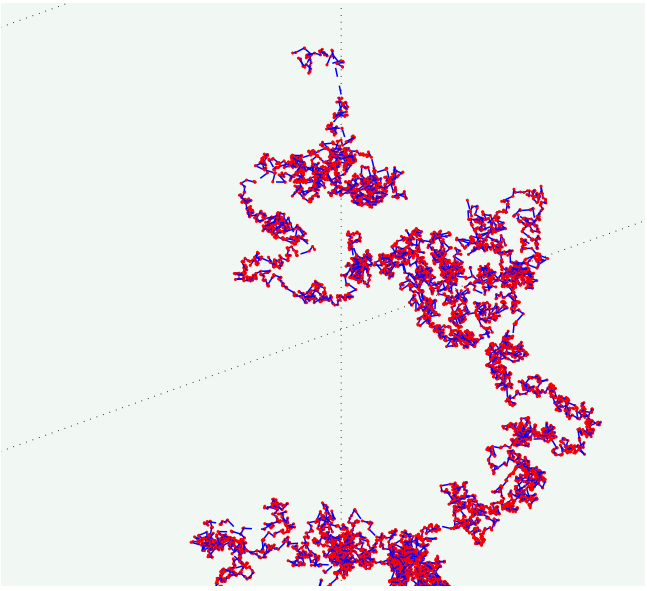

Figura 5.7: Acercamiento mediano en una trayectoria de 1 electrón en una descarga de $10\,mm$ con campo eléctrico $E = 30\,kV/m$. La dirección del campo eléctrico es de arriba hacia abajo en esta lámina

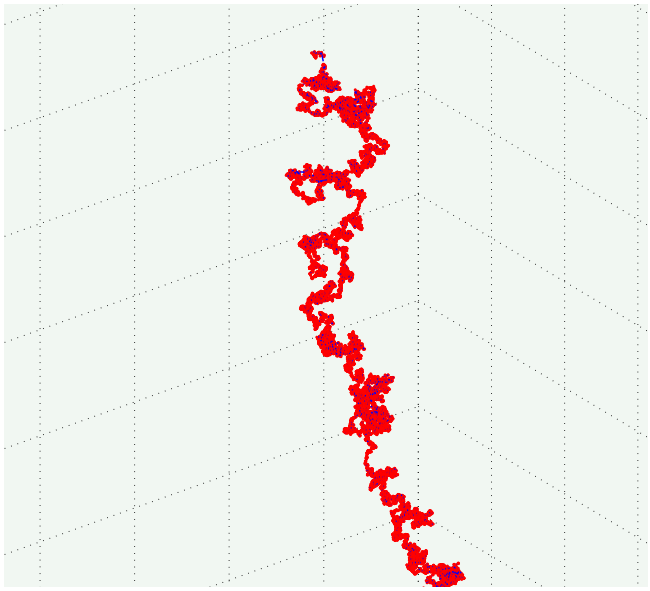

Figura 5.8: Acercamiento mediano para la trayectoria de 1 electrón en una descarga de $10\,mm$ con $E = 30\,kV/m$. La dirección del campo eléctrico es de arriba hacia abajo en esta lámina

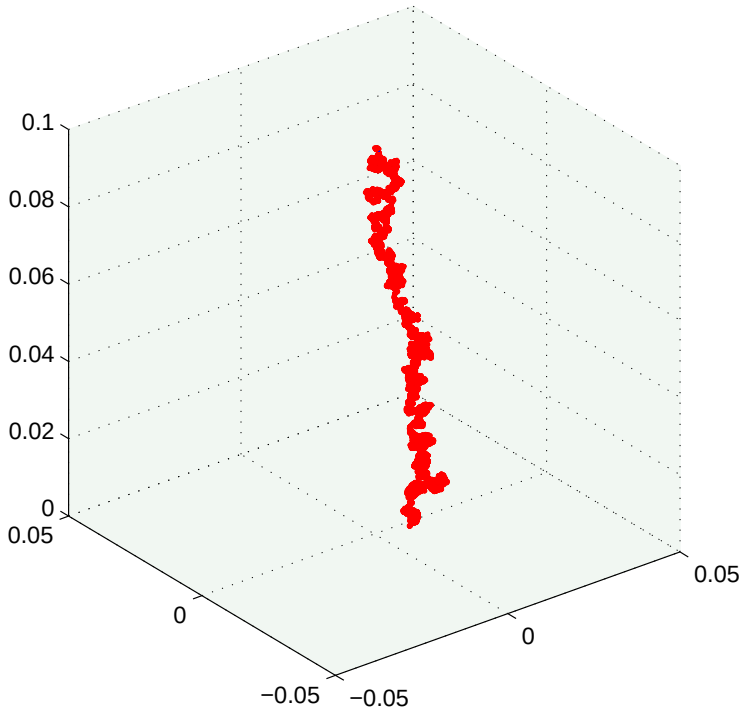

Figura 5.9: Trayectoria de 1 electrón en una descarga de $10\,mm$ con $E = 30\,kV/m$. La dirección del campo eléctrico es de arriba hacia abajo en esta lámina

5.1.3 Trayectoria de ionización

La trayectoria que verdaderamente interesaba, no era tanto la descrita por las colisiones efectuadas contra las moléculas neutras de aire, sino más bien aquella graficada por los choques que produjeron ionización. Los datos obtenidos con este tipo de evaluación son mucho menos numerosos y su análisis es más sencillo. Por ejemplo, en el Cuadro 5.1 se puede observar que el número de ionizaciones en ese trayecto de $100\,mm$, es de alrededor de 98, en cambio, el número de colisiones es de 4,7 millones. En la Figura 5.10 se muestra la trayectoria de ionización para los iones producidos por un sólo electrón acelerado a $1.000\,kV/m$ en un tramo de $100\,mm$.

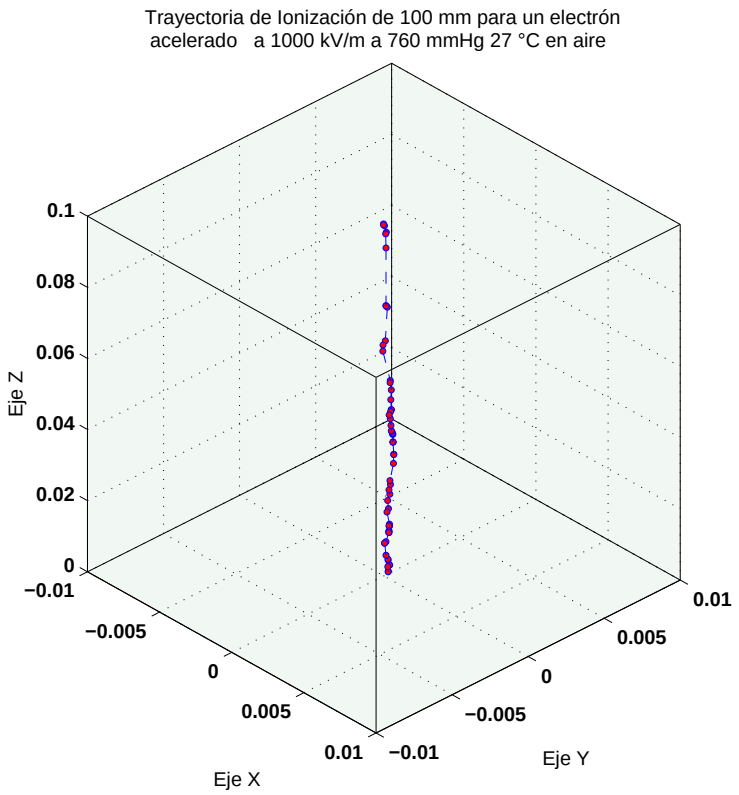

Figura 5.10: Trayectoria de ionización para 1 electrón en una descarga de $100\,mm$ acelerado con $E = 1.000\,kV/m$. La dirección del campo eléctrico es de arriba hacia abajo en esta lámina

5.1.4 Histogramas de resultados

Se realizó la simulación de 1.000 electrones tomados de uno en uno para un campo eléctrico de $100\,kV/m$, sobre una distancia entre placas de $100\,mm$ a una presión atmosférica de $760\,mmHg$ y se tomaron datos del: número de colisiones, número de ionizaciones, radio de llegada, ángulo de llegada, velocidad de llegada y tiempo de arribo para los datos obtenidos. Con estos datos se realizaron los histogramas que se presentan en las Figuras 5.11, 5.12, 5.13, 5.14, 5.15, y 5.16. Con la información obtenida se pudieron realizar los análisis estadísticos correspondientes.

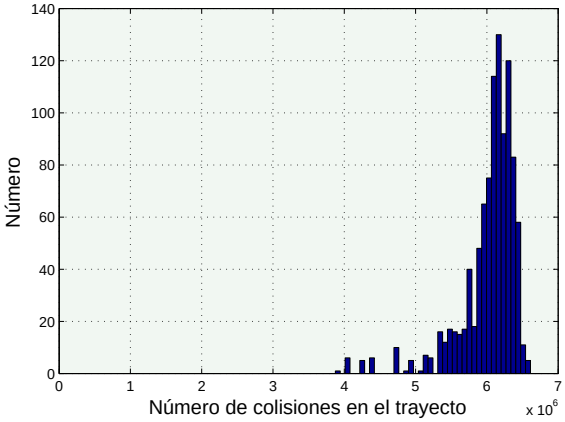

Figura 5.11: Histograma de número de colisiones para 1.000 electrones acelerados a $E = 100\,kV/m$ y $760\,mmHg$. Se nota un pico alrededor de los $6,2$ millones de colisiones

En la Figura 5.11 se puede observar que la función de distribución correspondiente a este histograma es aproximadamente el de una gaussiana con valor promedio de 6,0 millones de colisiones y una dispersión con respecto al valor medio de 372 mil colisiones.

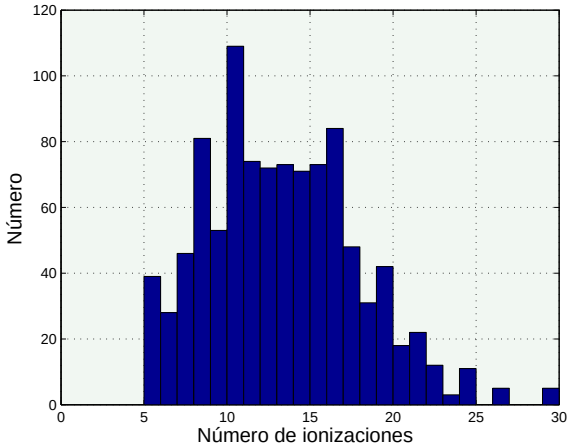

Figura 5.12: Histograma de número de ionizaciones para 1.000 electrones acelerados a $E = 100\,kV/m$ y $760\,mmHg$. El número de ionizaciones fluctúa entre 5 y 25 aproximadamente, con un valor medio de alrededor de 14 ionizaciones

La función de distribución correspondiente a la Figura 5.12 se asemeja a una gaussiana con valor medio de 14,38 ionizaciones y una dispersión con respecto al valor medio de 4,72 ionizaciones.

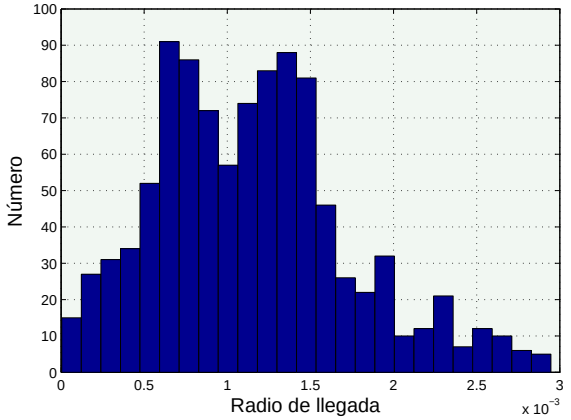

Figura 5.13: Histograma de radios de llegada para 1.000 electrones acelerados a $E = 100\,kV/m$ y $760\,mmHg$. Se puede observar que el radio de llegada tiene un valor medio de aproximadamente $1,2\,mm$, y que fluctúa entre 0 y casi $3\,mm$

La función de distribución correspondiente a la Figura 5.13 es similar a una gaussiana o mejor aún a una distribución de Landau [88] con valor promedio de 1,142 mm y una dispersión con respecto al valor medio de 0,6 mm. La presencia de los dos picos observados no se eliminó incluso luego de realizar $3,000$ simulaciones adicionales. Estos picos adicionales pueden deberse a los siguientes motivos:

a La digitalización de las secciones eficaces de colisión y otros parámetros utilizados en la simulación computacional

b La manifestación de ionizaciones o *avalanchas hijas* en en el trayecto

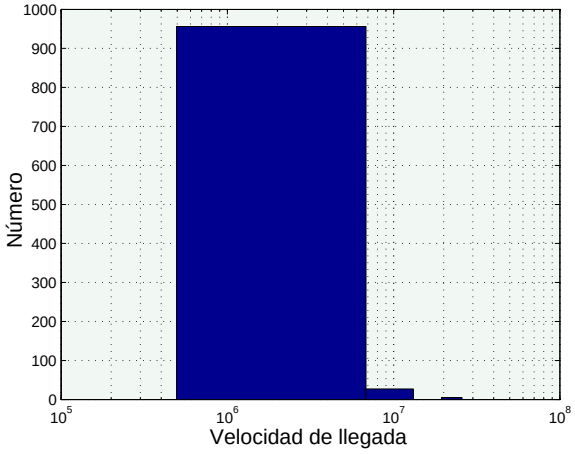

Figura 5.14: Histograma de velocidades de llegada para 1.000 electrones acelerados a $E = 100\,kV/m$ y $760\,mmHg$. Se observa en esta Figura de tipo logarítmico, que el 95 % de las velocidades de llegada están comprendidas entre 500 y $7.000\,km/s$

La función de distribución correspondiente a la Figura 5.14 es también gaussiana, a pesar que por el estilo de gráfico de tipo logarítmico parece ser uniforme. La distribución tiene un valor promedio de $1{,}466 \times 10^6\ m/s$ y una dispersión de $2{,}621 \times 10^6\ m/s$.

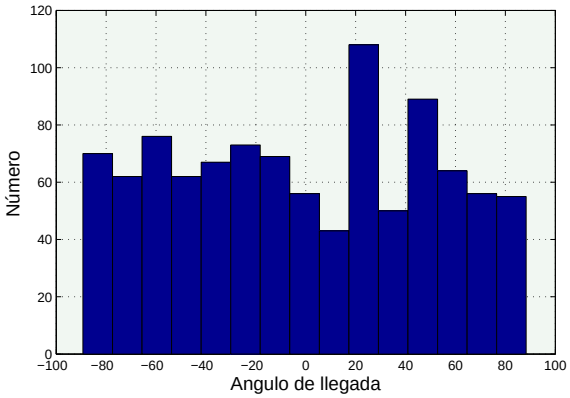

Figura 5.15: Histograma de ángulos de llegada para 1.000 electrones acelerados a $E = 100\,kV/m$ y $760\,mmHg$. Se puede notar la tendencia apenas en 1.000 números que los ángulos de llegada ya configuran una función de distribución uniforme en el rango entre -90 y $+90°$

La función de distribución correspondiente a la Figura 5.15 parece ser uniforme en el rango entre -90 y $+90°$. Al llegar al piso ($z = 0$) éstos ángulos tuvieron un valor

medio de 0,70 grados y una varianza de $\sigma = 52{,}05$ grados. Cabe indicar que estos ángulos se obtuvieron con la función arco tangente (arctan), que tiene una simetría de 180 grados y que se perdió cierta información valiosa al pasar los valores angulares desde los 4 a los 2 cuadrantes.

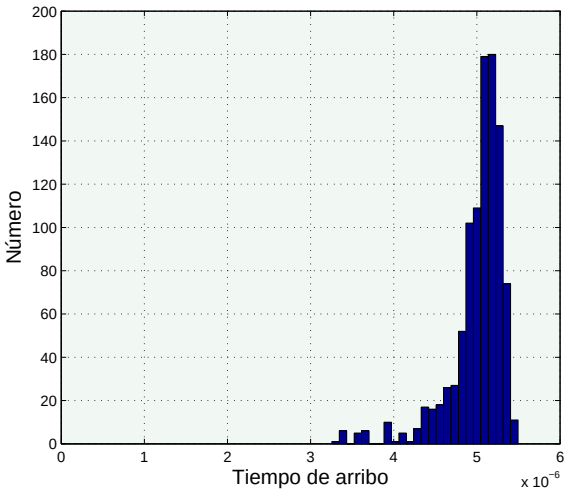

Figura 5.16: Histograma de tiempos de arribo para 1.000 electrones acelerados a $E = 100\,kV/m$ y $760\,mmHg$. Se observa claramente que el tiempo esperado de arribo es de aproximadamente $5{,}1\,\mu s$

La función de distribución correspondiente a la Figura 5.16 es aproximadamente una gaussiana con un valor medio de $5{,}1\,\mu s$ y una dispersión de $0{,}36\,\mu s$.

5.1.5 Número de ionizaciones en un tramo de 10 metros

En un tramo de $10\,metros$ se realizó la simulación con un sólo campo eléctrico para obtener las coordenadas de ionización y el número de ionizaciones producidas a lo largo de la trayectoria. Los resultados se muestran gráficamente mediante el histograma de la Figura 5.17 para el número de ionizaciones correspondientes a la posición en el eje Z . Se nota uniformidad con aproximadamente 125 ionizaciones por cada metro de recorrido.

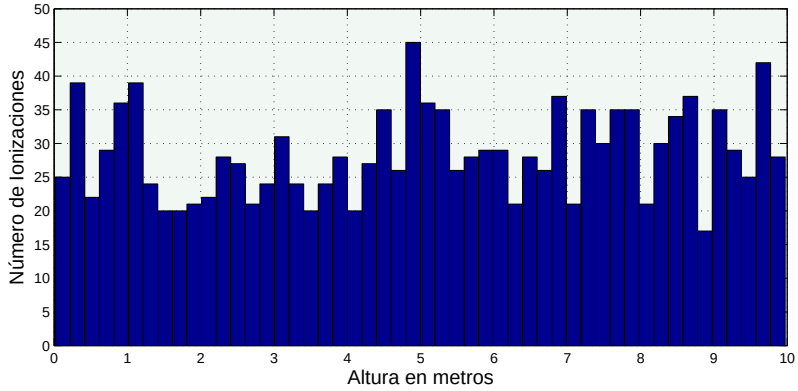

Figura 5.17: Número de ionizaciones producidas por un electrón acelerado a $E = 30\,kV/m$ y $760\,mmHg$ en un tramo de $10\,m$. Se nota uniformidad con aproximadamente 125 ionizaciones por cada metro de recorrido.

5.1.6 Comprobación del algoritmo mediante los ángulos de salida después del choque

En las Figuras 5.18 y 5.19 se muestran los histogramas correspondientes a los ángulos de salida después de las colisiones para trayectorias independientes de $300\,V/m$ y $1.000\,kV/m$. Se puede notar en estos gráficos un comportamiento semi-sinusoidal de la función de distribución del ángulo θ. En el caso de los $300\,V/m$ se nota un desplazamiento hacia ángulos mayores a 90° y para el caso de $1.000\,kV/m$ un desplazamiento más bien hacia ángulos menores a 90°. Se puede entender este comportamiento debido a la dispersión obtenida con las ecuaciones indicadas en el Capítulo § 4. El comportamiento del ángulo ϕ no se lo ha graficado por ser trivial, y porque su función de distribución es uniforme entre 0 y 360°; sin embargo, cabe indicar que la uniformidad fue verificada con los datos correspondientes.

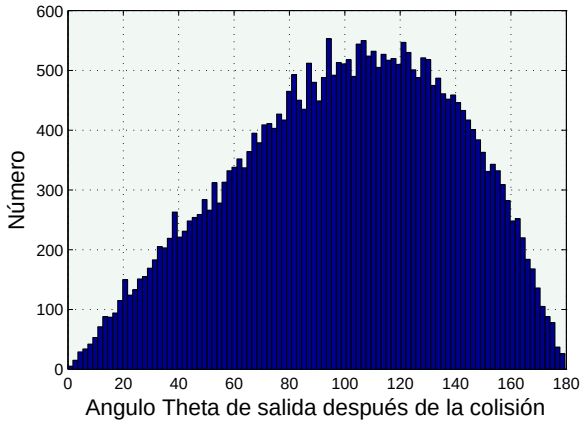

Figura 5.18: Histograma de los ángulos de salida después del choque para un electrón acelerado a $E = 300\,V/m$ y $760\,mmHg$. Se nota un comportamiento semi-sinusoidal y un desplazamiento hacia ángulos mayores a los 90°

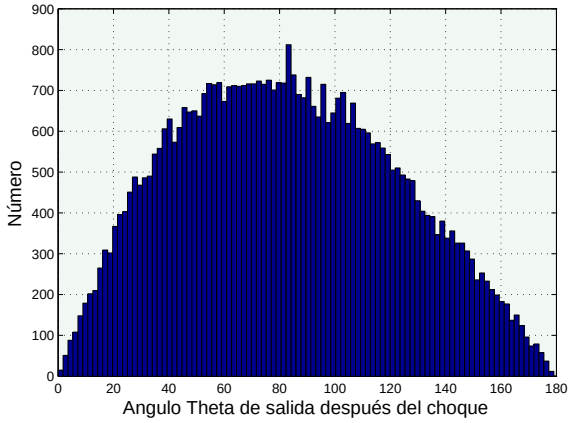

Figura 5.19: Histograma de los ángulos de salida después del choque para un electrón acelerado a $E = 1,000\,kV/m$ y $760\,mmHg$. Se nota un comportamiento semi-sinusoidal y un desplazamiento hacia ángulos menores a los 90°

5.1.7 Evaluación de resultados

Los resultados obtenidos se han colocado en los Cuadros 5.4 y 5.5 que se muestran a continuación. Se han utilizado los valores del radio de difusión r y el tiempo de arribo t para obtener el coeficiente de difusión perpendicular al campo mediante la ecuación $D_\perp = r^2/4t$ obtenida en el Capítulo § 3. El coeficiente de difusión paralelo al campo con la ecuación $D_\parallel = k_B T v_d / e E_z$ (Capítulo § 3). La movilidad con $\mu = v_d/E_z$. La energía potencial con $U = E_z d$, en donde d es la distancia entre las placas. La energía

cinética con $K = 1/2\, mv_d^2$; y la energía perdida con $L_{\%} = \frac{U-K}{U}$.

Cuadro 5.4: Datos para $760\, mmHg$ y $10\, cm$

Campo kV/m	Radio mm	Velocidad km/s	Tiempo μs	$D_\perp$ m^2/s	$D_\parallel$ m^2/s	Movilidad m^2/Vs	Energía Potencial eV	Energía Cinética eV	Energía Perdida %
0,1	3,98	81	95,29	0,0416	20,959	810,0	10	0,02	99,81
0,3	3,35	104	70,72	0,0397	8,970	346,6	30	0,03	99,90
1,0	2,76	156	51,68	0,0368	4,037	156,0	100	0,07	99,93
3,0	2,34	244	35,70	0,0383	2,105	81,3	300	0,17	99,94
10,0	1,87	380	22,15	0,0393	0,983	38,0	1.000	0,41	99,96
30,0	1,29	562	10,46	0,0400	0,485	18,7	3.000	0,90	99,97
100,0	1,14	1.466	5,00	0,0652	0,379	14,6	10.000	6,11	99,94
300,0	0,86	3.981	2,45	0,0753	0,343	13,3	30.000	45,07	99,85
1000,0	0,71	16.880	1,19	0,1047	0,437	16,9	100.000	810,28	99,19

Cuadro 5.5: Datos para $76\, mmHg$ y $10\, cm$

Campo kV/m	Radio mm	Velocidad km/s	Tiempo μs	$D_\perp$ m^2/s	$D_\parallel$ m^2/s	Movilidad m^2/Vs	Energía Potencial eV	Energía Cinética eV	Energía Perdida %
0,1	8,38	159	51,48	0,3411	41,141	1.590,0	10	0,07	99,28
0,3	7,59	241	35,49	0,4059	20,786	803,3	30	0,17	99,45
1,0	5,67	378	22,28	0,3611	9,781	378,0	100	0,41	99,59
3,0	4,72	539	10,54	0,5289	4,649	179,6	300	0,83	99,72
10,0	3,73	1.307	5,13	0,6787	3,382	130,7	1.000	4,86	99,51
30,0	2,80	3.219	2,58	0,7581	2,776	107,3	3.000	29,47	99,02
100,0	2,30	7.096	1,29	1,0252	1,836	70,9	10.000	143,19	98,57
300,0	1,89	29.290	0,53	1,6850	2,526	97,6	30.000	2.439,66	91,87
1000,0	0,95	95.850	0,09	2,4911	2,480	95,8	100.000	26.126,16	73,87

Se puede observar que el coeficiente de Difusión perpendicular, para una presión atmosférica de $760\, mmHg$, varía entre 0,0416 y $0{,}1047\, m^2/s$, valores que están comprendidos en el orden de magnitud esperado, de acuerdo a los cálculos realizados en el Capítulo § 3. En ese Capítulo se obtuvo un coeficiente de difusión perpendicular

de aproximadamente $0{,}01\,m^2/s$. Se debe notar que en ese cálculo se utilizó un *radio molecular* obtenido mediante tablas, y una temperatura de los electrones y el medio de 300 K; datos que no necesariamente están correcta ni completamente determinados en el presente caso de estudio. Para una presión atmosférica de $76\,mmHg$ los coeficientes $D_\perp$ están ubicados entre 0,3411 y $2{,}4911\,m^2/s$. Se nota claramente que la difusividad perpendicular aumenta inversamente con la presión atmosférica $D \propto p^{-1}$.

Los datos de los mismos Cuadros 5.4 y 5.5 muestran que la movilidad μ es inversamente proporcional al campo eléctrico (lógico de acuerdo a la fórmula de cálculo); y también, que es inversamente proporcional a la presión atmosférica, aunque no muy claramente. Se puede explicar la disminución de la movilidad con el aumento del campo eléctrico luego de conocer que la sección eficaz de colisión de los electrones con las moléculas de aire (que dificultan el movimiento) aumenta desde $0{,}01\,eV$ hasta $10\,eV$, de acuerdo a los datos obtenidos del paquete BOLSIG [72] utilizado en el Capítulo 3 y luego en la simulación.

También se puede observar en los Cuadros 5.4 y 5.5 que los electrones pierden casi toda su energía en el trayecto. Se explicarían de este modo, el calentamiento del aire circundante y las coloraciones indicadas en el *Efecto Corona* mencionado en los Capítulos 1 y 2. Sin la pérdida de energía tan significativa, los electrones alcanzarían velocidades relativistas muy fácilmente, y casi todos los electrones saldrían *fuera de control* de acuerdo a lo explicado en el Capítulo 2.

5.2 Simulación de la Descarga desde una Punta

La descarga en una punta se realizó con un algoritmo muy similar al establecido en la sección § 5.1, pero se considerará adicionalmente que el campo eléctrico ya no es constante, porque está influenciado por la punta. Para esto, se utilizará el valor del campo eléctrico desarrollado en § 3.6. Cabe señalar, que la punta estará ubicada justo en el punto $(0, 0, h)$. El sitio de llegada para este caso será idéntico al caso anterior; es decir en el plano $(x, y, 0)$. En el Apéndice § D.3 se pueden observar las diferencias

introducidas en el código para el caso punta-placa, con respecto al programa de placas planas.

5.2.1 Comparación entre radios de llegada

Para la comparación entre los radios de llegada obtenidos para el caso placa-placa con respecto al de punta placa fue necesario llegar al compromiso de que sea a igualdad de voltajes, presiones y distancias entre electrodos, y no a igualdad de campos eléctricos; esto quiere decir para $10\,kV$, $760\,mmHg$ y $10\,cm$ respectivamente. En el caso del campo uniforme el voltaje se obtuvo con $V = E\,d$; donde E es el campo eléctrico y d la distancia entre los electrodos. Para el caso punta-placa se realizaron simulaciones computacionales con factores de aguzamiento de $0,1$ y $0,02$, cuyos datos se observan en el Cuadro 5.6

Cuadro 5.6: Comparación de resultados

Factor de Aguzamiento Por unidad	Radio de llegada mm	Velocidad de llegada km/s	Tiempo de arribo μs
Placas planas	1,142	1.466	5,00
0,10	1,757	469	8,54
0,02	1,880	546	10,26

Los resultados del Cuadro 5.6 muestran que si el factor de aguzamiento disminuye, el radio de llegada aumenta, y que la velocidad de llegada no está claramente determinada mientras que el tiempo de arribo aumenta. Este comportamiento puede deberse entre otros motivos, a que las líneas del campo eléctrico se dispersan cerca de la punta, y los electrones seguirán unas nuevas líneas de campo que ampliarán el radio de llegada. La disminución en la velocidad de llegada parece deberse a que el campo se intensifica sólo en la punta pero disminuye cerca de la placa, incrementando de esta manera tanto el número de colisiones como el tiempo de arribo a la placa plana.

5.2.2 Histogramas de ionizaciones

En las Figuras 5.20, y 5.21 se presentan los resultados para el número de ionizaciones obtenidos en las simulaciones de trayectorias de $10\,m$ de longitud, para electrones acelerados con un campo eléctrico de $100\,kV/m$, para una presión de $760\,mmHg$ y temperatura de $300°K$, para dos diferentes coeficientes de aguzamiento ρ: 10 %, y 2 %. Se puede observar, en primer lugar, que el factor de aguzamiento ρ es determinante, tanto para el número de ionizaciones, como para la altura de inicio de ellas. En el caso de $\rho = 10\,\%$, se produjeron 20 ionizaciones entre los 2 y los $10\,m$; y en el caso de $\rho = 2\,\%$, se produjeron 50 ionizaciones entre los $9\,m$ y los $10\,m$ se presentan esas ionizaciones. Estos resultados confirmarían la presencia de algo similar al *Efecto Corona*, puesto que se presenta este fenómeno alrededor del electrodo en forma de punta. El resultado obtenido para el caso de placas planas, es esencialmente diferente, pues existe una relativa uniformidad durante todo el trayecto. La explicación de los resultados encontrados sería en base a la alta intensidad del campo eléctrico en la región cercana al ánodo. Otros resultados importantes de estos experimentos son los siguientes:

- El número de colisiones para el caso de $\rho = 0{,}02$ fue de $8{,}76 \times 10^8$ para $\rho = 0{,}1$ fue de $9{,}12 \times 10^8$. Estos valores tan similares entre sí, no son concluyentes para observar tendencias
- El radio de llegada para el caso de $\rho = 0{,}02$ fue de $13\,mm$ para $rho = 0{,}1$ fue de $12\,mm$. Para condiciones similares, en el caso de placas planas, se obtuvieron radios de llegada mayores en un orden de magnitud.
- La velocidad de llegada para el caso de $\rho = 0{,}02$ fue de $314\,km/s$ para $rho = 0{,}1$ fue de $367\,km/s$. Estos valores tan similares entre sí, no son concluyentes para observar tendencias
- El tiempo de arribo para el caso de $\rho = 0{,}02$ fue de $2,15\,ms$ para $rho = 0{,}1$ fue de $1{,}97\,ms$.Como se puede ver, se han obtenido tiempos de arribo relativamente largos en el tramo de $10\,m$. Este tiempo tan largo sólo se podría explicar para los electrones en la etapa de incepción. Para una flámula, estos tiempos serían mucho menores, de acuerdo a lo estudiado en los Capítulos introductorios de la presente

Tesis. Como se explicó en esos Capítulos, la presencia de fotones ionizantes en la cabeza de la flámula aceleraría el avance de este tipo de descarga.

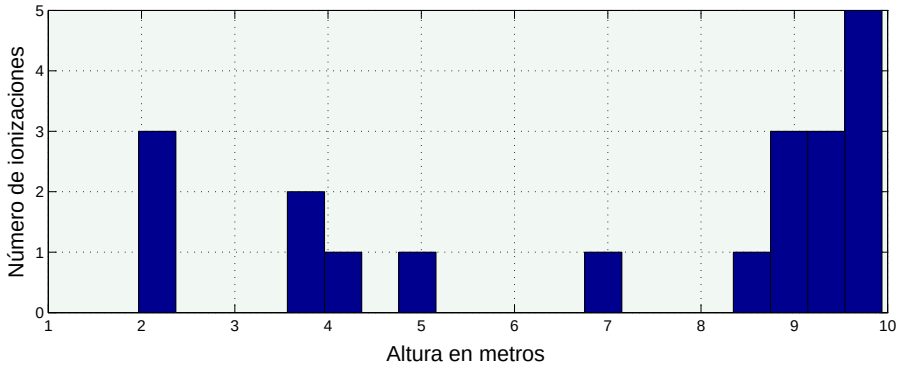

Figura 5.20: Histograma para el número de ionizaciones en un trayecto de $10\,m$ con $100\,kV$, $300\,°K$ y $760\,mmHg$. con factor de aguzamiento de $\rho = 0{,}1$

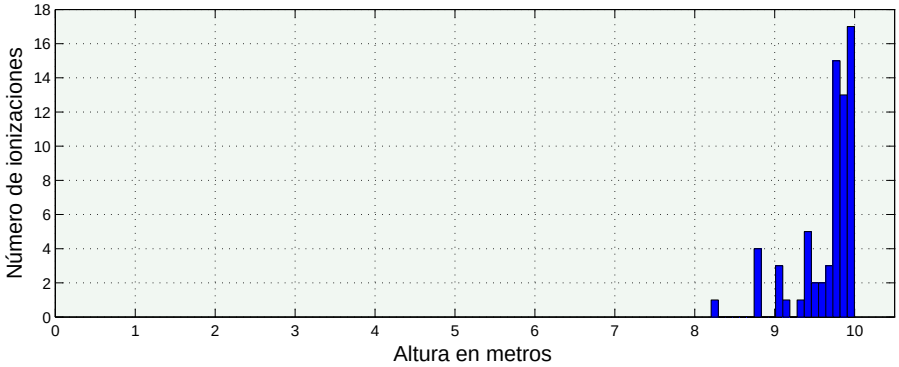

Figura 5.21: Histograma para el número de ionizaciones en un trayecto de $10\,m$ con $100\,kV$, $300\,°K$ y $760\,mmHg$. con factor de aguzamiento de $\rho = 0{,}02$

CONCLUSIONES

Entre otras, las siguientes son las conclusiones acerca de los resultados del trabajo realizado. En el Capítulo § 5 se han incluido otras conclusiones importantes.

- El algoritmo utilizado es muy rápido y dió excelentes resultados en este tipo de investigación; entre otras razones porque el Lenguaje `C` empleado en las simulaciones permite una gran velocidad de procesamiento, debido especialmente a su estrecha relación con el lenguaje de máquina [87]. En las simulaciones iniciales se obtuvo una pobre velocidad de respuesta, provocada entre otras cosas por la salida en pantalla de los datos de posiciones y velocidades después de cada choque. Una vez que se suprimió la salida por pantalla de las coordenadas de cada una de las colisiones, la velocidad aumentó en 10 veces. Por ejemplo, para el caso de la trayectoria de un electrón en la cual se presentaban alrededor de 5 millones de colisiones, con la mejora realizada se obtenían datos de llegada aproximadamente cada 10 segundos.

- Los radios de llegada realmente mostraron muy poca dispersión con respecto al eje de la trayectoria, principalmente para campos eléctricos elevados. Se estima que en promedio estadístico, los radios de llegada podrían incrementarse si se toma en cuenta adicionalmente la dispersión de los electrones producidos en el trayecto de ionización; es decir, los provocados por las avalanchas *hijas*.

- La función de distribución de los radios de llegada parece ser distinta a la de una gaussiana sencilla, y se parece mas bien a una función de distribución de Landau [88], con una valor de cero para el radio $r = 0$, e incluso con dos o más picos para ciertos valores de radio de llegada.

- Existen diferencias importantes entre el modelo de difusión desarrollado en § 3.5 con respecto a los radios de llegada obtenidos en esta Tesis. Parece ser que la falta de información acerca de las colisiones e ionizaciones en el desarrollo del modelo teórico fue determinante para el cálculo del radio de llegada así como también para la determinación del tiempo de arribo. No se debe dejar de lado en esta discusión, la difícil explicación sobre la gran diferencia entre los coeficientes de difusión paralelos y perpendiculares.

- Se puede notar que a menores presiones el radio de llegada se amplía, lo que está en acuerdo con los conceptos del parámetro D para la difusión, pues D es inversamente proporcional a la presión p.

- La forma de la trayectoria de los electrones se parece bastante a aquella de las descargas eléctricas en gases observadas experimentalmente.

- Los ángulos de llegada obtenidos tienen una distribución aproximadamente uniforme. Al llegar al piso ($z = 0$) éstos ángulos estuvieron comprendidos entre -180 y $+180$ grados, con un valor medio de aproximadamente cero grados $\langle\theta\rangle = 0°$, y una varianza cercana a $\sigma = 51{,}96° = \sqrt{1/12} \times 180°$ para todo el rango de valores de campos eléctricos. Este valor de varianza indica que la distribución es cercana a la uniforme (Ver Apéndice § B). En el histograma correspondiente de la Figura 5.14 se puede observar este comportamiento en detalle.

- Las velocidades de llegada se incrementan con la magnitud del campo eléctrico aplicado y tienen muy poca dispersión con respecto a su valor medio. En el histograma de velocidades de la Figura 5.15 se puede observar este comportamiento en detalle.

- Con el algoritmo utilizado en la presente Tesis, se puede investigar la trayectoria para cualquier tipo de campo eléctrico, no necesariamente uniforme. Se ha utilizado el mismo algoritmo a pesar de no ser el más apropiado para velocidades cercanas a las relativistas (Ver Capítulo § 5).

- Se demuestra que el estudio de la descarga de electrones en tramos cortos de aire aporta información útil relativa a los mecanismos físicos subyacentes.

TRABAJOS FUTUROS

- Desarrollar el estudio de la trayectoria de un electrón y de los radios de llegada para los casos placa-punta y punta punta. Este estudio sería concluyente porque llevaría a excelentes conclusiones con respecto a la probabilidad de impacto de las descargas eléctricas atmosféricas sobre los pararrayos.

- Desarrollar un estudio acerca del efecto Corona que se manifiesta en las líneas de transmisión de alto voltaje. Es innegable la importancia de este tema especialmente para la Ingeniería Eléctrica de Alta Tensión.

Apéndice A

Moléculas Diatómicas

A.1 Nomenclatura electrónica de moléculas diatómicas

Para diferenciar el tipo al que pertenecen las secciones eficaces de los distintos procesos que se presentan en las colisiones de electrones con moléculas diatómicas, especialmente los electrónicos, es necesaria una nomenclatura para los estados electrónicos correspondientes. Las siguientes herramientas permiten nombrar adecuadamente estos estados. Por ejemplo el primer estado excitado del Nitrógeno tiene la nomenclatura $A-^3\Sigma_u^+$. Este estado está dominado por la configuración $3\sigma_g^2\,1\pi_u^3\,1\pi_g^1$ [89]. A continuación se explica la información contenida para el estado multi-electrónico de una molécula, designada por:

$$etiqueta\ -\ {}^{2S+1}\Lambda_{g|u}^{+|-}$$

- En la representación anterior, *etiqueta* es algún elemento adicional que identifica el estado particular de los restantes estados de la misma simetría. Por ejemplo, X en la notación espectroscópica, identifica siempre al estado fundamental. La etiqueta también puede corresponder a una configuración electrónica, que determine la estructura electrónica del estado.

- La letra Λ es la designación que corresponde al valor del número cuántico magnético orbital a lo largo del eje internuclear $|m_l|$. En el caso de los orbitales

multi-electrónicos moleculares es una letra griega mayúscula: Σ, Π, Δ, ó Φ.

- Los estados con valor propio $+1$ (-1) respecto de la inversión se denominan *gerade* (*ungerade*), lo que se representa mediante un subíndice g (u). El índice g ó u denota la existencia de un centro de simetría (o centro de inversión), e indica la paridad de la función de onda total. El estado g (en alemán *incluso*) indica una paridad par, la letra u indica una paridad impar.

- Los estados con valor propio $+1$ (-1), relacionados con la reflexión en el plano σ_v que contiene a los dos núcleos, reciben como indicación un superíndice $(+)$ si son simétricos ó $(-)$ si no lo son.

Algunos ejemplos adicionales, serían los estados:

$$X\,-^1\Sigma_g^+\,,\quad {}^2\Pi_u\,,\quad 1\sigma^1 2\sigma^1\,-^3\Sigma^+ \tag{A.1.1}$$

A.2 Energías de los estados de las moléculas diatómicas

Existen varios modelos teórico experimentales que permiten caracterizar los estados energéticos de las moléculas diatómicas. En todos los modelos, los estados se caracterizan por tres números cuánticos principales: vibracional $(v = 0, 1, 2, 3, ...)$, rotacional $(J = 0, 1, 2, 3, ...)$, y acimutal de rotación $(M = 0, \pm 1, \pm 2, 3, ... \pm J)$. La energía en el modelo del oscilador armónico-rotor rígido $(OA - RR)$ [89] es:

$$E_{int} = U_e + h\nu_e(v + 1/2) + hB_e J(J + 1)$$

Donde aparecen las siguientes constantes espectroscópicas: constante de vibración fundamental $(\nu_e = \frac{1}{2\pi}\sqrt{k_e/\mu})$, rotacional $(B_e = \frac{h}{8\pi^2\mu R_e^2})$. En ellas, μ es la masa reducida en el sistema de los dos átomos componentes de la molécula diatómica $(\mu = M_{molecular}/2)$, k_e es la constante de fuerza de resorte, o curvatura en el fondo del pozo de potencial del sistema compuesto por los dos átomos, h es la constante de Planck, y R_e es el radio promedio de los orbitales electrónicos de la molécula.

A.3 Espectro roto-vibracional de moléculas diatómicas

El análisis de los espectros roto-vibracionales representa una importante fuente de información sobre la estructura molecular, de extraordinaria precisión y calidad. Las energías ε_J, asociadas a los estados rotacionales de una molécula diatómica, están dadas por $\varepsilon_J = \frac{\hbar^2}{2I}J(J+1)$. En donde $\hbar$ es la constante de Planck, I es el momento de inercia de la molécula, y J es un entero, que representa el número cuántico del momento angular total de la molécula [80]. Por otra parte, el momento angular rotacional de la molécula en el estado J es $P_J = \hbar\sqrt{J(J+1)}$.

Para que se produzca una transición rotacional entre el estado J y el excitado J', es necesario que la diferencia de energías $\Delta\varepsilon_{J'-J} = \varepsilon_{J'} - \varepsilon_J$ sea mayor que cero; pero esa no es la única condición; también es necesario que exista una diferencia a favor, en los momentos angulares $\Delta L_{J'-J} = L_{J'} - L_J \geq 0$, y que se cumplan las reglas de selección correspondientes.

Las reglas de selección por el mecanismo de dipolo eléctrico dan lugar al característico espectro roto-vibracional de las moléculas diatómicas. Su medición tiene lugar en la región de microondas (espectro de rotación puro), o de infrarrojo (vibración-rotación), y se realiza habitualmente empleando técnicas de absorción LASER, y la Trasformada de Fourier [89]. Son transiciones permitidas las que cumplen:

- $\Delta v = 0$, $\Delta J = \pm 1$ y $\Delta M = 0, \pm 1$, en donde los números v, corresponden a los estados cuánticos vibracionales, ν_J es la frecuencia del fotón correspondientes a la transición, B_v y D_e son constantes específicas, y h es la constante de Planck. Estos estados originan el espectro de rotación pura, en el cual las frecuencias de las transiciones permitidas cumplen:

$$\nu_J = \frac{\varepsilon_{v,J+1} - \varepsilon_{v,J}}{h} = 2B_v(J+1) - 4D_e(J+1)^3$$

- $\Delta v = (\pm 1, \pm 2, \pm 3, ...), \Delta J = \pm 1$ y $\Delta M = 0, \pm 1$. Las transiciones con $\Delta v = \pm 1$ son las más intensas, particularmente la de $v : 0 \rightarrow 1$ o transición fundamen-

tal. Las transiciones con $\Delta v = \pm 2, \pm 3, ...$ decaen rápidamente en intensidad, y constituyen los primeros armónicos, segundos armónicos, y así en adelante.

Apéndice B

Simulación Estadística

La simulación estadística es un método computacional de gran utilidad para estudiar Fenómenos Aleatorios o Estocásticos. Desde el inicio del trabajo con computadoras, se pensó en la posibilidad de utilizar las técnicas de generación de números aleatorios, para estudiar temas tan disímiles como por ejemplo: el mercado bursátil, el número de fallecimientos en una posible guerra, ó el crecimiento de una cepa de bacterias unicelulares. La técnica consiste en generar números aleatorios con diferentes funciones de distribución relacionadas con el caso de estudio, y obtenidos a partir de números uniformemente distribuidos en el rango comprendido entre 0 y 1. Los siguientes teoremas facilitan el trabajo con números aleatorios

Teorema 1: Sean U una variable aleatoria con distribución $U(0,1)$ y G una función de distribución acumulada continua y estrictamente creciente. Si $X = G^{-1}(U)$, entonces la función de distribución acumulada de X es G ; es decir $F_X = G$.

Teorema 2: Sean U una variable aleatoria con distribución $U(0,1)$ y G una función de distribución acumulada. Existe una función H tal que $H(U)$ tiene distribución acumulada G . Quiere decir que se puede generar cualquier tipo de función de distribución a partir de una distribución uniforme.

Con los teoremas anteriores se puede generar casi todo tipo de números aleatorios con funciones de distribución de acuerdo los requerimientos de la simulación. Utilizan-

do el Teorema 1, se podrá generar por ejemplo una función de distribución en rampa, una de tipo exponencial, ó una de tipo *normal*. Para el caso en el cual la distribución G tiene saltos o es constante de a trozos, se puede utilizar el Teorema 2. Este último proceso permitió seleccionar si el próximo impacto sería con una molécula de Nitrógeno o de Oxígeno, con probabilidades de 79 % y 21 %, respectivamente.

B.1 Propiedades de los números aleatorios

Los números aleatorios son la base de la Simulación Estadística, y se clasifican de acuerdo con sus funciones de densidad de probabilidad. La función de distribución uniforme estandarizada $U(0,1)$ está dada por:

$$U(0,1) = f(x) = \begin{cases} 0 & \text{si} \quad -\infty < x < 0 \\ 1 & \text{si} \quad 0 \leq x \leq 1 \\ 0 & \text{si} \quad 1 < x < \infty \end{cases} \tag{B.1.1}$$

Los valores de las variables aleatorias consideradas en las simulaciones de la presente Tesis son funciones de probabilidad basadas en números pseudoaleatorios. Para generar variables aleatorias uniformemente distribuidas en una computadora, como por ejemplo en el lenguaje `C` se puede emplear las instrucciones `rand()` y `srand()`. Los números generados por estas instrucciones se denominan números pseudoaleatorios, porque se generan a partir de una fórmula computacional totalmente determinística. Los siguientes son los requisitos que debe tener un buen generador de números pseudo aleatorios con distribución uniforme para lograr excelentes resultados.

- La distribución de los números debe ser uniforme en todo el intervalo $[0,1]$
- Los números deben ser independientes dentro de toda la serie generada.
- Deben tener una media de $\mu_{\Re} = \frac{1}{2}$, y una varianza de $\sigma^2_{\Re} = \frac{1}{12}$
- El ciclo del generador debe ser lo suficientemente grande, para que la serie no se vuelva a repetir.

- El código será capaz de generar números pseudo aleatorios a altas velocidades, con una mínima cantidad de bytes de memoria de una computadora.

B.2 Propiedades de las variables aleatorias

Son variables cuyos valores y mediciones se obtienen a partir de algún tipo de experimento aleatorio. Un experimento aleatorio presenta un tratamiento matemático, en el cual se deben cuantificar los resultados luego de asignar un número real a cada uno de los posibles resultados de ese experimento. Las variables aleatorias son aquellas que tienen un comportamiento probabilístico de la realidad. Existen dos tipos de variables aleatorias: las discretas, en las cuales se generan números enteros, por ejemplo, el número de hijos; y, las continuas, en las cuales se generan números enteros y fraccionarios; por ejemplo el peso y la estatura.

Una propiedad fundamental que se empleará muy a menudo de las variables aleatorias $\Re \in [0,1]$ y $\Re' \in [0,1]$, es que:

$$\Re\prime = 1 - \Re \tag{B.2.1}$$

Esta propiedad se basa en que la función de distribución de la variable $1 - \Re$ es complementaria con la correspondiente a $\Re\prime$ [84].

De la misma manera, en funciones angulares como el seno y el coseno, el desplazamiento del ángulo θ cualquiera entre 0 y 2π radianes vuelve al número aleatorio inicialmente ubicado entre 0 y 2π a estar nuevamente entre 0 y 2π; por ejemplo:

$$\sin(2\pi\Re\prime) = \sin(\theta + 2\pi\Re) \tag{B.2.2}$$

B.3 Generación de variables aleatorias

Para la generación de variables aleatorias existen varios métodos:

- El método de la Transformada Inversa

- El método de la Convolución
- El método de Composición
- El método de la Transformada Directa
- El método de Aceptación y Rechazo.

El método de la Transformada Inversa (Teorema 1) se utiliza para la generación de variables continuas, consiste en primero definir la función densidad de probabilidad, luego se encuentra la función de distribución acumulada por integración directa entre $-\infty$ y x, se iguala a un número aleatorio con distribución uniforme entre 0 y 1. Encontrada esta última se debe despejar la variable aleatoria en función del número aleatorio. Una vez obtenida la ecuación correspondiente, se la simplifica y luego prueba mediante un algoritmo computacional para ver si realiza la función correspondiente.

Para la generación de variables aleatorias discretas, se utiliza típicamente el método de aceptación y rechazo. El método de aceptación o rechazo es muy sencillo, consiste en generar un número aleatorio entre 0 y 1, y luego se realiza una comparación entre el número aleatorio y un valor fijo, el cual representa una probabilidad. Si el número es menor que el valor fijo se realiza el procedimiento A de lo contrario se realiza el procedimiento B. Si se requieren mas procedimientos, basta con dividir los números aleatorios entre 0 y 1 en más regiones. Por ejemplo para simular el lanzamiento de dados, bastaría con elegir los valores en las regiones $\Omega_1 \in [0, \frac{1}{6}], \Omega_2 \in [\frac{1}{6}, \frac{2}{6}], ..., \Omega_6 \in [\frac{5}{6}, 1]$.

B.4 Generación de variables aleatorias con distribución normal

A continuación se explica el método de Box Muller para la generación de variables aleatorias con distribución normal. Sean x e y dos variables aleatorias independientes con distribución normal de media 0 y varianza 1. Sean r y θ las coordenadas polares del vector (x, y) en el plano; esto es, $r = \sqrt{x^2 + y^2}$, y $\tan\theta = \frac{y}{x}$. Si r^2 y θ son variables aleatorias independientes, r^2 con distribución de densidad de probabilidad de una

exponencial con valor medio igual a 2, mientras que θ tiene una distribución uniforme en el intervalo $(0, 2\pi)$. Entonces, una muestra aleatoria distribuida normalmente para cada variable del par (x, y) es obtenida con el siguiente procedimiento (a) se generan dos números aleatorios u_1 y u_2 distribuidos uniformemente en el intervalo $(0, 1)$; y (b)se calculan x e y con las siguientes ecuaciones:

$$x = r\, cos\theta = \sqrt{-2\ln u_1}\cos(2\pi u_2) \tag{B.4.1}$$

$$y = r\, sin\theta = \sqrt{-2\ln u_1}\sin(2\pi u_2) \tag{B.4.2}$$

Para números aleatorios con distribución normal pero en 3 dimensiones se tienen las siguientes ecuaciones; en donde el número πu_2 representa a θ, el $2\pi u_3$ a ϕ y $\sqrt{-2\ln u_1}$ representa a r.

$$x = \sqrt{-2\ln u_1}\sin(\pi u_2)\cos(2\pi u_3) \tag{B.4.3}$$

$$y = \sqrt{-2\ln u_1}\sin(\pi u_2)\sin(2\pi u_3) \tag{B.4.4}$$

$$z = \sqrt{-2\ln u_1}\cos(\pi u_2) \tag{B.4.5}$$

Apéndice C

Los cuaterniones

Los cuaterniones fueron introducidos por W. R. Hamilton en 1843, después que él y otros matemáticos buscaran por muchos años, un sistema numérico tridimensional con números complejos. Los cuaterniones son números *hiper-complejos* de la forma $a + b\hat{i} + c\hat{j} + d\hat{k}$, donde a, b, c, y d son números reales, y las tres unidades imaginarias $\hat{i}, \hat{j}, \hat{k}$ tienen las siguientes propiedades:

$$\begin{aligned} \hat{i}^2 = \hat{j}^2 = \hat{k}^2 = -1 \\ \hat{i}\hat{j} = \hat{k} = -\hat{j}\hat{i} \\ \hat{j}\hat{k} = \hat{i} = -\hat{k}\hat{j} \\ \hat{k}\hat{i} = \hat{j} = -\hat{i}\hat{k} \end{aligned} \tag{C.0.1}$$

Existen varias propiedades de los cuaterniones, que son muy útiles; de las cuales, casi siempre se ocupa la de rotación espacial alrededor de un eje que pasa por el origen de las coordenadas. La rotación de un vector $\mathbf{r}$ alrededor de un eje dado por un cuaternión puro [1] $\mathbf{n}$; de norma igual a 1 [2], por un ángulo α está representada por la aplicación :

$$\mathbf{r} \mapsto \left(\cos\frac{\alpha}{2} + \sin\frac{\alpha}{2}\mathbf{n}\right)\mathbf{r}\left(\cos\frac{\alpha}{2} - \sin\frac{\alpha}{2}\mathbf{n}\right) \tag{C.0.2}$$

Para realizar la multiplicación entre dos cuaterniones de la forma $q_1 = (w_1, \mathbf{v}_1) = w_1 + x_1\hat{i} + y_1\hat{j} + z_1\hat{k}$ por $q_2 = (w_2, \mathbf{v}_1) = w_2 + x_2\hat{i} + y_2\hat{j} + z_2\hat{k}$ tiene la forma:

$$\begin{aligned} q_1q_2 = & [(w_1w_2 - x_1x_2 - y_1y_2 - z_1z_2) + (w_1x_2 - x_1w_2 - x_1w_2 - y_1z_2)\hat{i} + \\ & (w_1y_2 - y_1w_2 - z_1x_2 - x_1z_2)\hat{j} + (w_1z_2 - z_1w_2 - x_1y_2 - y_1x_2)\hat{k}] \end{aligned} \tag{C.0.3}$$

[1] Un cuaternión puro tiene la forma $(0, v_x, v_y, v_z) = (0, \mathbf{v})$ es decir, es un vector puro

[2] La norma está dada por $||q|| = \sqrt{qq^\star}$

Apéndice D

Código del Programa en C

D.1 Programa principal

```
//%-----------------------------------------------------------------------%
//%      E S C U E L A   P O L I T E C N I C A   N A C I O N A L          %
//%                                                                       %
//%            F A C U L T A D   D E   C I E N C I A S                    %
//%                                                                       %
//%         SIMULACIÓN DE LA TRAYECTORIA DE ELECTRONES DE INCEPCIÓN       %
//%                       EN UN TRAMO CORTO DE AIRE                       %
//%                                                                       %
//%                    CASO:CAMPO ELÉCTRICO CONSTANTE                     %
//%                                                                       %
//%                      AUTOR:  MARIO EGAS ESCOBAR                       %
//%                                                                       %
//%                  DIRECTOR:  DR. NELSON MEDINA ALVARADO                %
//%-----------------------------------------------------------------------%
//% PROGRAMA PARA SIMULAR EL CHOQUE DE ELECTRONES CON MOLÉCULAS DE AIRE    %
//% LOS ELECTRONES SON ACELERADOS ÚNICAMENTE POR  UN CAMPO ELÉCTRICO DE    %
//% VALOR CONSTANTE                                                        %
//% SE INTRODUCE EL VALOR DE LA TEMPERATURA T Y LA PRESION COMO DATOS      %
//% SE ESTUDIA LA DINÁMICA DEL ELECTRÓN MEDIANTE EL ALGORITMO DE           %
//% VELOCIDADES DE VERLET  Y SU ACELERACIÓN HASTA QUE CHOCA CON LAS        %
//% MOLÉCULAS DEL GAS.                                                     %
```

```
//%-----------------------------------------------------------------------%
//INCLUSIÓN DE FUNCIONES AUXILIARES DEL LENGUAJE C
#include <stdio.h>
#include <math.h>
#include <stdlib.h>
#include <time.h>
//F U N C I O N E S
#include "imprimir.h"
#include "sumavect.h"
//oooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooo
//I N I C I O     D E L      P R O G R A M A
//.......................................................................
void main(void){
int hora =time(NULL);
srand(hora);
impresion_entrada();
//.......................................................................
//EL CAMPO ELÉCTRICO SE INTRODUCE EN kiloVoltios/metro, Y AUTOMÁTICAMENTE SE
// TRANSFORMA A Voltios/metro
float campo;        // %[kV/m]
printf("Ingrese el valor del campo electrico en kV/m \n\n");
fflush(stdin);
scanf("%f",&campo);
printf("El valor ingresado fue de %g  kiloVoltios/metro \n\n",campo);
campo=campo*1000;
printf("Equivalente a %g  Voltios/metro\n\n",campo);
//.......................................................................
//LA PRESIÓN ATMOSFÉRICA SE INTRODUCE EN MILIMETROS DE MERCURIO EN mmHg
float presion;
printf("Ingrese el valor de la presion atmosferica en mmHg \n\n");
fflush(stdin);
scanf("%f",&presion);
printf("\n El valor ingresado fue de %g  mmHg \n",presion);
printf("\n O de %g Newton/metro cuadrado \n",presion*133.2894737);
```

```
printf("\nEl valor del campo eléctrico dividido sobre la presión es de %g
en V/m/mmHg\n",campo/presion);
//.....................................................................
//LA TEMPERATURA SE INTRODUCE EN GRADOS CELSIUS E INMEDIATAMENTE SE
TRANSFORMAN A GRADOS KELVIN........
float temperatura; // [Celsius]
printf("\n Ingrese el valor de la temperatura en Grados Celsius \n\n");
fflush(stdin);
scanf("%f",&temperatura);
printf("\n El valor ingresado fue de %g  Grados Celsius \n\n",temperatura);
temperatura=temperatura+273;
printf("\n Equivalente a %g  Grados Kelvin \n\n",temperatura);
//.....................................................................
//INGRESO DE CONSTANTES
const float Navogadro=6.02214129e23;  //%[moléculas/mol]
const float Rcte=.08205746;          //%[atm.lt/mol/°K]
const float kB=1.3806504e-23;        //constante de Boltzmann
//.....................................................................
// CÁLCULO DE LA DENSIDAD MOLECULAR
printf("\n CALCULO DE VALORES INICIALES \n\n");
float densidad=(presion/760)*Navogadro*1000/Rcte/temperatura;
printf("\n La densidad molecular sera de %g moleculas/m^3 \n\n",densidad);
printf("\n O de %g moleculas/nanometro cubico \n\n",densidad*1e-27);
//....................................................................
//CÁLCULO DE LA VELOCIDAD MEDIA DE LAS MOLÉCULAS DE AIRE
float masa_aire=(32*.2+28*.8)*1.660538e-27;
float vmedia=sqrt(3*kB*temperatura/masa_aire);
printf("La velocidad media de las moléculas de aire es de %g metros/segundo
\n",vmedia);
//.....................................................................
//ALTURA A LA QUE SE COLOCA EL ELECTRON INICIAL
float altura;        // [mm]
printf("\nIngrese el valor de la altura en mm\n");
fflush(stdin);
```

```
scanf("%f",&altura);
printf("\n El valor ingresado fue de %g  milímetros \n",altura);
altura=altura*1e-3;
printf("\n La altura inicial sera de %g metros \n",altura);
//.....................................................................
// GENERACIÓN DE UN  ELECTRÓN EN EL EJE Z A UNA ALTURA Z0, QUE INICIALMENTE SE
// ENUENTRA EN REPOSO EN EL SISTEMA DE COORDENADAS DEL LABORATORIO
// INGRESO DE LA POSICION INICIAL
double  posicion[]={0,0,altura};
printf("\n La posicion inicial del electron sera \n x:%g m \n y:%g m \n z:%g
 m \n",posicion[0],posicion[1],posicion[2]);
// INGRESO DE LA VELOCIDAD INICIAL
double velocidad[]={0,0,0};
printf("\n La velocidad inicial del electron \n x:%g m/s \n y:%g m/s \n z:%g
 m/s \n",velocidad[0],velocidad[1],velocidad[2]);
//INGRESO DE LA ACELERACIÓN =-qe*Ecampo/masa
double aceleracion_cte=-1.6e-19*campo/9.1e-31;
printf("\n La aceleracion sera de %g m/s^2 \n\n",aceleracion_cte);
double aceleracion[]={0,0,aceleracion_cte};
printf("\n La aceleracion inicial del electron sera \n x:%g m/s^2 \n y:%g
m/s^2 \n z:%g m/s^2 \n",aceleracion[0],aceleracion[1],aceleracion[2]);
//.....................................................................
// SE INGRESA EL NÚMERO TOTAL DE VUELTAS O DE ELECTRONES INDEPENDIENTES
int num_total;
printf("\n Ingrese el valor del numero de vueltas totales \n");
fflush(stdin);
scanf("%d",&num_total);
printf("\n El valor ingresado fue de %d  vueltas \n\n",num_total);
//.....................................................................
// SE INGRESA EL TIPO DE IMPRESION REQUERIDO
printf("\n Ingrese un numero  0 o 1 para seleccionar el tipo de impresion \n");
int impresion1;
int impresion2;
int impresion3;
```

```
int impresion4;
int impresion5;
//.....................................................................
printf("\n Impresion de coordenadas de colisiones en \t Colision.dat \n\n");
fflush(stdin);
scanf("%d",&impresion1);
//.....................................................................
printf("\n Impresion de coordenadas de ionizacion en \t Ioniza.dat \n\n");
fflush(stdin);
scanf("%d",&impresion2);
//.....................................................................
printf("\n Impresion de numeros de choques e ionizacion en \t Numero.dat
 \n \n");
fflush(stdin);
scanf("%d",&impresion3);
//.....................................................................
printf("\n Impresion de radios angulos y velocidades de llegada \t Llegada.dat
 \n\n");
fflush(stdin);
scanf("%d",&impresion4);
//.....................................................................
//DECLARACIÓN DE PUNTEROS PARA ENTUBADO DE ARCHIVOS DE SALIDA
FILE *fp;
FILE *gp;
FILE *hp;
//.....................................................................
//DECLARACIÓN Y DEFINICIÓN DE VARIABLES
double  tiempo,deltat,deltat_cuadrado;
double  velocidad_sqrt,nvsigma;
double  seccion_eficaz;
float   aleatorio1,aleatorio2,aleatorio3,aleatorio4,aleatorio5,aleatorio6;
int     numero_choque;
int     numero_vuelta=0;
int     nu;
```

```
float   alea_uni;
float   datofloat;
int     datoint;
double  velocidad_xy;
double  velo_alea, theta_velo,phi_velo,theta,phi;
double  energia_salida,energia_entrada_eV;
double  velocidad_salida;
int     numero_ionizacion=0;
double  energia_entrada,zeta;
int     m;
int     especie;
double  tiempo_choque;
int     bandera_ionizacion;
//.....................................................................
// DATOS PARA LAS COLISIONES
//.....................................................................
//PROBABILIDAD DE QUE LA COLISION SEA CON EL OXÍGENO O EL NITRÓGENO
float probo2[22]={0.1569,0.0791,0.0888,0.0947,0.1183,0.1255,0.1183,0.1724,
0.1659,0.1024,0.0838,0.1520,0.1876,0.1671,0.1778,0.1883,0.2126,.2262,
0.2525,0.2478,0.3040,0.3161};
//SECCION EFICAZ TOTAL PESADA ENTRE EL OXÍGENO Y EL  NITRÓGENO
float seccion_vector[22]={0.94,2.34,3.03,3.91,4.59,5.50,6.91,8.00,8.96,
11.85,17.25,10.84,11.67,12.80,12.49,10.71,8.74,6.94,4.80,3.64,2.31,1.29};
//DATOS DEL NITRÓGENO
float lim1probn2[22]={1,1,0.993,0.995,0.996,0.996,0.997,0.998,0.996,0.875,
0.831,0.896,0.825,0.599,0.441,0.638,0.536,0.486,0.096,0.057,0.003,0.006};
float lim2probn2[22]={1,1,1,1,1,1,1,1,1,1,1,1,1,0.992,0.913,0.819,0.718,
0.666,0.610,0.617,0.568,0.348};
float energian2[22]={0,0,0,0,0,0,0,0,0,0.067,0.119,0.001,0.327,1.345,
1.868,2.246,2.341,2.325,2.579,2.619,3.256,3.975};
//DATOS DEL OXÍGENO
float lim1probo2[22]={1,1,1,1,1,1,0.992,0.749,0.924,0.999,0.992,0.963,
0.825,0.851,0.754,0.640,0.569,0.529,0.500,0.462,0.490,0.398};
float lim2probo2[22]={1,1,1,1,1,1,1,1,1,1,1,1,1,0.976,0.877,0.756,0.681,
```

```
0.649,0.639,0.636,0.686,0.700};
float energiao2[22]={0,0,0,0,0,0,0,0.045,0.019,0.002,0.009,0.043,1.394,
0.945,0.994,0.975,0.946,1.031,1.193,1.504,1.703,2.651};
//PARAMETRO DE PERFECCIONAMIENTO PARA LA SECCION EFICAZ DIFERENCIAL XI
float parametro_xi[22]={-0.2139,-0.2178,-0.2165,-0.2092,-0.1950,-0.1723,
-0.1394,-0.0938,-0.0327,0.0465,0.1454,0.2626,0.3927,0.5260,0.6505,
0.7562,0.8382,0.8970,0.9366,0.9619,0.9776,0.9870};
//.....................................................................
//CÁLCULO DE LA VELOCIDAD MEDIA DE LOS ELECTRONES
float velocidad_media_electrones=sqrt(3*kB*temperatura/9.1e-31);
//.....................................................................
//INGRESO DE LA SECCIÓN EFICAZ INICIAL PARA LA COLISION DE ELECTRONES
//CON MOLÉCULAS NEUTRAS
            seccion_eficaz=10e-20;  //SECCIÓN EFICAZ INICIAL

//.....................................................................
// SE INICIA LA ACELERACION DEL ELECTRON
printf("SE INICIA EL VUELO DEL ELECTRON");
//OOOOOOOOOOOOOOOOOOOOOOOOOOOOOOOOOOOOOOOOOOOOOOOOOOOOOOOOOOOOOOOOOOOOOOOOO
//.....................................................................
// LAZO PRINCIPAL
// SE INICIA EL NUMERO DE VUELTAS DE ACUERDO AL VALOR ESCOGIDO
for(numero_vuelta=0;numero_vuelta<num_total;numero_vuelta++){
//SE PONEN EN CERO LAS CONDICIONES INICIALES EN CADA VUELTA
            tiempo=0;               //TIEMPO INICIAL DE VUELO
            numero_choque=0;        //NÚMERO DE CHOQUES EN CERO
            numero_ionizacion=0;    //NÚMERO DE IONIZACIONES EN CERO
//POSICIONES INICIALES EN CERO
            posicion[0]=0;
            posicion[1]=0;
            posicion[2]=altura;
//VELOCIDADES INICIALES EN CERO
            velocidad[0]=0;
            velocidad[1]=0;
```

```
            velocidad[2]=0;
//CÁLCULO DE NVSIGMA PARA  LOS ELECTRONES
            nvsigma=densidad*seccion_eficaz*velocidad_media_electrones;
//SE CALCULA EL TIEMPO PARA EL PRIMER CHOQUE
            tiempo_choque=1/nvsigma;
//OOOOOOOOOOOOOOOOOOOOOOOOOOOOOOOOOOOOOOOOOOOOOOOOOOOOOOOOOOOOOOOOOOOOOOOOOO
//MIENTRAS EL VALOR DE Z SEA MAYOR QUE CERO SE CALCULA LA DINÁMICA MOLECULAR
        while(posicion[2] > 0){
               deltat=tiempo_choque;
               tiempo=tiempo+deltat;
               deltat_cuadrado=tiempo_choque*tiempo_choque;
//CÁLCULO DE LAS NUEVAS POSICIONES Y VELOCIDADES DE ACUERDO A LA DINÁMICA
 MOLECULAR
                   for(nu=0;nu<3;nu++){
                        posicion[nu]=posicion[nu]+deltat*velocidad[nu]+
                        0.5*deltat_cuadrado*aceleracion[nu];
                        velocidad[nu]=velocidad[nu]+deltat*aceleracion[nu];
                    }
//IMPRESION EN PANTALLA DE LA POSICIÓN DE CADA CHOQUE
            if(impresion1==1){
                printf("\nSe produjo un choque en la posicion");
                printf("x: %g  y: %g z: %g \n al tiempo t: %g segundos\n",
                posicion[0],posicion[1],posicion[2],tiempo);
            }
// SI HA SIDO SELECCIONADO SE GUARDA LA POSICION DE LA COLlSION  EN EL ARCHIVO
// "Colision.dat" ÚNICAMENTE EN LA SEGUNDA VUELTA
          if(numero_vuelta==1&&impresion1==1) {
           fp = fopen("Colision.dat","a");
           fprintf(fp,"%g \t %g \t %g \t \n",posicion[0],posicion[1],
           posicion[2]);
           fclose(fp);
           }
// CÁLCULO DEL MODULO DE LA VELOCIDAD Y DE LA VELOCIDAD DE X E Y
            velocidad_sqrt=modulo(velocidad[0],velocidad[1],velocidad[2]);
```

```
            velocidad_xy=modulo_xy(velocidad[0],velocidad[1]);
//.....................................................................
//SI LA VELOCIDAD ES PEQUEÑA SE DEBE TOMAR EN CUENTA LA VELOCIDAD MOLECULAR
           if (velocidad_xy<=vmedia) {
                aleatorio6=(float)rand()/32768;
                velo_alea=vmedia*sqrt(-2*log(aleatorio6));  //CÁLCULO DEL
                 MÓDULO DE LA VELOCIDAD
                theta_velo=3.1416*(float)rand()/32768; //CÁLCULO DEL ÁNGULO
                 THETA PARA LA VELOCIDAD DE LAS NEUTRAS
                phi_velo=6.2832*(float)rand()/32768;//CÁLCULO DEL ÁNGULO PHI
                PARA LA VELOCIDAD DE LAS NEUTRAS
                //CÁLCULO DE LA NUEVA VELOCIDAD DEL ELECTRÓN
                velocidad[0]=velocidad[0]+
                velo_alea*sin(theta_velo)*cos(phi_velo);
                velocidad[1]=velocidad[1]+
                velo_alea*sin(theta_velo)*sin(phi_velo);
                velocidad[2]=velocidad[2]+velo_alea*cos(theta_velo);
                //CÁLCULO DE LOS VALORES NUEVOS DEL MÓDULO DE LA VELOCIDAD Y
                DE LA V_xy
                velocidad_xy=modulo_xy(velocidad[0],velocidad[1]);
                velocidad_sqrt=modulo(velocidad[0],velocidad[1],velocidad[2]);
           }
//oooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooo
//CÁLCULO DE UN ENTERO PROPORCIONAL AL LOGARITMO DE LA ENERGÍA DEL ELECTRÓN
//PARA CUANTIFICAR LA ENERGÍA DEL ELECTRÓN
        datoint=entero_velocidad(velocidad_sqrt);
// DETERMINACIÓN DE LA ESPECIE DE MOLÉCULA CON LA CUAL CHOCARÁ EL ELECTRÓN:
// NITRÓGENO (1), OXÍGENO (0)
         aleatorio1=(float)rand()/32768;
         if(aleatorio1>probo2[datoint]){especie=1;}
         else{especie=0;}
// DETERMINACIÓN DEL TIPO DE COLISION
// ENERGÍA DEL ELECTRON=1/2*9.1E-31/1.6E-19*VELOCIDAD^2
        energia_entrada_eV=2.842815e-12*velocidad_sqrt*velocidad_sqrt;
```

```
        //OBTENCIÓN DE DOS NÚMEROS ALEATORIOS
        //PARA EL TIPO DE COLISION EN EL NITRÓGENO O EN EL OXÍGENO
        aleatorio2=(float)rand()/32768;
        //PARA SELECCIÓN DE LA ENERGÍA DE SALIDA DE LA COLISIÓN DESPUÉS DE
         LA IONIZACIÓN
        aleatorio3=(float)rand()/32768;
//EN EL CASO NÚMERO 1 SE TRATA DEL NITRÓGENO Y  EN CASO 0 SE TRATA DEL OXÍGENO
        bandera_ionizacion=0;
        switch(especie){
                case 1://caso del nitrógeno

                if(aleatorio2<lim1probn2[datoint]){
                        energia_salida=energia_entrada_eV;} //colision elastica
                else if(aleatorio2<lim2probn2[datoint]){
                 energia_salida=energia_entrada_eV-
                 energian2[datoint];}//colision inelastica
                else {
                        numero_ionizacion++;
                        bandera_ionizacion=1;
                        energia_salida=
                        aleatorio3*(energia_entrada_eV-15.6);}//IONIZACIÓN
                break;
                case 0://caso del oxígeno
                if(aleatorio2<lim1probo2[datoint]){
                        energia_salida=energia_entrada_eV;} //colision elástica
                else if(aleatorio2<lim2probo2[datoint]) {
                        energia_salida=
                        energia_entrada_eV-energiao2[datoint];}//colision inelastica
                else {
                        numero_ionizacion++;
                        bandera_ionizacion=1;
                        energia_salida=
                        aleatorio3*(energia_entrada_eV-12.06);}//IONIZACIÓN
                break;
```

```
                }
//SI SE PRODUJO UNA IONIZACIÓN SE ALMACENARÁ LAS COORDENADAS EN EL ARCHIVO
 "Ioniza.dat"
                if(bandera_ionizacion==1&&impresion2==1&&numero_vuelta==1){
                        fp = fopen("Ioniza.dat","a");
                        fprintf(fp,"%g \t %g \t %g \t \n",posicion[0],
                        posicion[1],posicion[2]);
                        fclose(fp);
                }
//oooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooo
//  CÁLCULO DE LOS ÁNGULOS DE SALIDA DESPUÉS DE LA COLISIÓN EN BASE A LA
SECCIÓN EFICAZ DIFERENCIAL
            //ÁNGULO PHI ACIMUTAL A LA COLISIÓN
            aleatorio4=(float)rand()/32768;
            phi=angulo_phi(aleatorio4);
            //ÁNGULO THETA DEFLEXIÓN CON RESPECTO AL EJE DE COLISIÓN
            aleatorio5=(float)rand()/32768;
            theta= angulo_theta(aleatorio5,parametro_xi[datoint]);
//SI SE HA ESCOGIDO LA IMPRESIÓN  SE GUARDAN LOS ÁNGULOS DE COLISIÓN EN
 ARCHIVO "Angulos.dat"
              if(numero_vuelta==1&&impresion5==1){
                  hp=fopen("Angulos.dat","a");
                    fprintf(hp,"%g %g \n",phi*57.3,theta*57.3);
                    fclose(hp);
                 }
//SE OBTIENE LA VELOCIDAD DE SALIDA DEL ELECTRÓN EN FUNCIÓN DE LA ENERGÍA
//QUE INCLUYE LA CORRECCIÓN RELATIVISTA
                zeta = 1.9536e-6*energia_salida;
                velocidad_salida= 3e8*sqrt(zeta*zeta+2*zeta)/(zeta+1);
//  ROTACIÓN DEL VECTOR DE VELOCIDAD DE SALIDA EN BASE A THETA Y PHI
CALCULADOS ANTERIORMENTE
//.........................................................................
            double vx_v=velocidad[0]/velocidad_sqrt;
            double vy_v=velocidad[1]/velocidad_sqrt;
```

```
            double vz_v=velocidad[2]/velocidad_sqrt;
            double vy_xy=velocidad[1]/velocidad_xy;
            double vx_xy=velocidad[0]/velocidad_xy;
            double vxy_v=velocidad_xy/velocidad_sqrt;
//.............................................................................
            velocidad[0]= velocidad_salida*(vx_v*cos(theta)+
            vy_xy*sin(theta)*sin(phi)-vx_xy*vz_v*sin(theta)*cos(phi));
            velocidad[1]= velocidad_salida*(vy_v*cos(theta)-
            vx_xy*sin(theta)*sin(phi)-vy_xy*vz_v*sin(theta)*cos(phi));
            velocidad[2]= velocidad_salida*(vz_v*cos(theta)+
            vxy_v*sin(theta)*cos(phi));
//oooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooo
// CÁLCULO DEL TIEMPO PARA EL SIGUIENTE CHOQUE EN BASE A LA NUEVA VELOCIDAD
 DEL ELECTRÓN
         nvsigma=
         densidad*seccion_vector[entero_velocidad(velocidad_salida)]*
         1e-20*velocidad_salida;
//ACOTAMIENTO DEL FACTOR NVSIGMA ENTRE 1 E 7 Y 1 E 17
            if(nvsigma>1e17) {nvsigma=1e17;}
            if(nvsigma<1e7) {nvsigma=1e7;}
// CÁLCULO DEL INTERVALO DE TIEMPO PARA EL SIGUIENTE CHOQUE tiempo_choque=
1/nvsigma;
         aleatorio1=(float)rand()/32768;
         tiempo_choque=-log(.01+0.98*aleatorio1)/nvsigma;
//SE HA DADO UN CHOQUE  SE INCREMENTA EL CONTADOR
         numero_choque++;//Incremento del contador de choques
        }
//SE HA LLEGADO AL PLANO Z=0 POR TANTO SE IMPRIME EN PANTALLA EL TIEMPO
DE LA VUELTA
        printf("\n El tiempo  de esta vuelta fue de %g \n",tiempo);
//SE CALCULA EL RADIO Y EL ÁNGULO DE LLEGADA
        double radio_xy=modulo_xy(posicion[0],posicion[1]);
        double angulo_xy=atan(posicion[1]/posicion[0]);
//SI SE HA ESCOGIDO SE ALMACENA EN UN ARCHIVO DE MEMORIA DE DISCO EN
```

```
"Numero.dat"
        if(impresion3==1){
         gp=fopen("Numero.dat","a");
            fprintf(gp,"%d \t %d \t %d \n",numero_vuelta,numero_choque,
            numero_ionizacion);
            fclose(gp);
            }
        if(impresion4==1){
             hp=fopen("Llegada.dat","a");
             fprintf(hp,"%g \t %g \t %g\n",radio_xy,57.3*angulo_xy,
             velocidad_sqrt);
             fclose(hp);
             }
   }//DEL LAZO FOR
//SE HA TERMINADO EL NÚMERO DE VUELTAS ESCOGIDAS POR PANTALLA
//SE IMPRIME POR PANTALLA EL NÚMERO DE VUELTAS O ELECTRONES QUE SE HAN DADO
 Y OTROS DATOS IMPORTANTES
printf("\nSe han producido %d vueltas\n",numero_vuelta);
printf("densidad %g m-3 vmedia %g m/s  seccion eficaz %g m2  nvsigma %g
s-1\n",densidad,vmedia,seccion_eficaz,nvsigma);
//SE TERMINA EL PROGRAMA
return 0;
}// DEL LAZO MAIN
```

D.2 Funciones

Archivo: sumavect.h

```
//FUNCION PARA HALLAR EL MÓDULO DE UN VECTOR
float modulo(float vectorx,float vectory, float vectorz){
float suma=0;
suma =sqrt(vectorx*vectorx+vectory*vectory+vectorz*vectorz);
return suma;
}
//FUNCIÓN PARA CALCULAR EL ÁNGULO DE SALIDA HI
float angulo_phi(float num_aleatorio){
    float phi=6.2832*num_aleatorio;
    return phi;
}
//FUNCIÓN PARA CALCULAR EL ÁNGULO DE SALIDA THETA
float angulo_theta(float num_aleatorio,float xi_energia){
   float theta=acos(1-((2*num_aleatorio*(1-xi_energia))/
   (1+xi_energia*(1-2*num_aleatorio))));
//    float theta=3.1416*num_aleatorio;
    return theta;
}
//FUNCIÓN PARA CALCULAR UN ENTERO QUE CORRESPONDE A LA VELOCIDAD
 DE ENTRADA
int entero_velocidad(float velocidad_entrada){
         float datofloat=
         3.474355*log(velocidad_entrada)-38.1844;
         int datoint=(int)datofloat;
         if(datoint<0)  datoint=  0;
         if(datoint>21) datoint= 21;
         return datoint;
}
//FUNCIÓN PARA CALCULAR EL MÓDULO DEL VECTOR EN X E Y
float modulo_xy(float vectorx,float vectory){
```

```
float suma=0;
suma =sqrt(vectorx*vectorx+vectory*vectory);
return suma;
}

Archivo:  imprimir.h
//FUNCION DE IMPRESION DE ENTRADA

void impresion_entrada(){
    printf("PROGRAMA PARA SIMULAR EL CHOQUE DE ELECTRONES
    CON MOLECULAS DE AIRE\n");
    printf("DURANTE EL VUELO DE LOS ELECTRONES, ESTOS SON
    ACELERADOS UNICAMENTE POR\n");
    printf("UN CAMPO ELECTRICO DE VALOR CONSTANTE\n");
    printf("SE INTRODUCE EL VALOR DE LA TEMPERATURA T Y LA
    PRESION COMO DATOS\n");
    printf("LA VELOCIDAD INICIAL ES CERO\n");
    printf("SE ESTUDIA LA DINAMICA DEL ELECTRON MEDIANTE
    EL ALGORITMO DE VELOCIDADES \n");
    printf("DE VERLET Y SU ACELERACION HASTA QUE CHOCA
    CON LAS MOLECULAS DEL GAS\n\n");
    printf("PROGRAMA PRINCIPAL\n\n\n");
    return;
}
void impresion_entrada_punta(){
    printf("PROGRAMA PARA SIMULAR EL CHOQUE DE ELECTRONES
    CON MOLECULAS DE AIRE\n");
    printf("DURANTE EL VUELO DE LOS ELECTRONES, ESTOS SON
    ACELERADOS  POR\n");
    printf("EL CAMPO ELECTRICO PRODUCIDO POR UNA PUNTA\n");
    printf("SE INTRODUCE EL VALOR DE LA TEMPERATURA T Y LA
    PRESION COMO DATOS\n");
    printf("LA VELOCIDAD INICIAL ES CERO\n");
    printf("SE ESTUDIA LA DINAMICA DEL ELECTRON MEDIANTE
```

```
    EL ALGORITMO DESARROLLADO \n");
    printf("EN ESTA TESIS \n\n\n\n");
    printf("PROGRAMA PRINCIPAL\n\n\n");
    return;
}
```

D.3 Particularidades caso: punta-placa

```
//%-----------------------------------------------------------------------%
//%      E S C U E L A   P O L I T E C N I C A   N A C I O N A L          %
//%                                                                       %
//%            F A C U L T A D   D E   C I E N C I A S                    %
//%                                                                       %
//%         SIMULACIÓN DE LA TRAYECTORIA DE ELECTRONES DE INCEPCIÓN       %
//%                       EN UN TRAMO CORTO DE AIRE                       %
//%                                                                       %
//%                    CASO:CAMPO ELÉCTRICO TIPO PUNTA PLACA              %
//%                                                                       %
//%                      AUTOR:  MARIO EGAS ESCOBAR                       %
//%                                                                       %
//%                  DIRECTOR:  DR. NELSON MEDINA ALVARADO                %
//%-----------------------------------------------------------------------%
//% PROGRAMA PARA SIMULAR EL CHOQUE DE ELECTRONES CON MOLÉCULAS DE AIRE    %
//% LOS ELECTRONES SON ACELERADOS ÚNICAMENTE POR  EL CAMPO ELÉCTRICO DE    %
//% UNA PUNTA                                                              %
//% SE INTRODUCE EL VALOR DE LA TEMPERATURA T Y LA PRESION COMO DATOS      %
//% SE ESTUDIA LA DINÁMICA DEL ELECTRÓN MEDIANTE EL ALGORITMO DE           %
//% VELOCIDADES DE VERLET  Y SU ACELERACIÓN HASTA QUE CHOCA CON LAS        %
//% MOLÉCULAS DEL GAS.                                                     %
//%-----------------------------------------------------------------------%
//
//I N I C I O    D E L     P R O G R A M A
//.......................................................................
void main(void){
```

```
int hora =time(NULL);
srand(hora);
impresion_entrada_punta();
//.....................................................................
//EL VOLTAJE DEL ELECTRODO SE INTRODUCE EN kilo Voltios, Y AUTOMÁTICAMENTE SE
// TRANSFORMA A Voltios/metro
float voltaje;        // %[kV/m]
printf("Ingrese el valor del voltaje del electrodo en kV \n\n");
fflush(stdin);
scanf("%f",&voltaje);
printf("El valor ingresado fue de %g  kiloVoltios \n\n",voltaje);
voltaje=voltaje*1000;
printf("Equivalente a %g  Voltios\n\n",voltaje);
//.....................................................................
//SE INTRODUCE EL FACTOR DE AGUZAMIENTO EN porcentaje, Y AUTOMÁTICAMENTE SE
// TRANSFORMA A por unidad
float aguzamiento;        // %[%]
printf("Ingrese el valor del voltaje del porcentaje de aguzamiento en tanto
por ciento \n\n");
fflush(stdin);
scanf("%f",&aguzamiento);
printf("El valor ingresado fue de %g  en tanto por ciento \n\n",aguzamiento);
aguzamiento=aguzamiento/100;
printf("Equivalente a %g  en tanto por unidad\n\n",aguzamiento);
//.....................................................................
//SE CALCULA EL CAMPO ELÉCTRICO INICIAL EN BASE AL FACTOR DE AGUZAMIENTO,
EL VOLTAJE Y LA ALTURA
float inverso_aguza=voltaje/altura/log(2/aguzamiento);
float campo=
inverso_aguza/(1+2*aguzamiento-(posicion[2]*posicion[2]/altura/altura));
printf("\n El campo electrico inicial sera de %g  V/m \n\n",campo);
//.....................................................................
//CALCULO DE LA ACELERACION DE ACUERDO A LA POSICION ANTERIOR
                        doblev=posicion[2]/altura;
```

```
auxiliar_acelera=
1+2*aguzamiento-(doblev*doblev);
aceleracion[0]=
1.7604e11*inverso_aguza*posicion[0]
*doblev/altura/auxiliar_acelera/auxiliar_acelera;
aceleracion[1]=
1.7604e11*inverso_aguza*posicion[1]*
doblev/altura/auxiliar_acelera/auxiliar_acelera;
aceleracion[2]=
-1.7604e11*inverso_aguza/auxiliar_acelera;
```

Apéndice E

Salida por pantalla

```
PROGRAMA PARA SIMULAR EL CHOQUE DE ELECTRONES CON MOLECULAS DE AIRE
DURANTE EL VUELO DE LOS ELECTRONES, ESTOS SON ACELERADOS UNICAMENTE POR
UN CAMPO ELECTRICO DE VALOR CONSTANTE
SE INTRODUCE EL VALOR DE LA TEMPERATURA T Y LA PRESION COMO DATOS
LA VELOCIDAD INICIAL ES CERO
SE ESTUDIA LA DINAMICA DEL ELECTRON MEDIANTE EL ALGORITMO DE VELOCIDADES
DE VERLET Y SU ACELERACION HASTA QUE CHOCA CON LAS MOLECULAS DEL GAS

PROGRAMA PRINCIPAL


Ingrese el valor del campo electrico en kV/m

100
El valor ingresado fue de 100  kiloVoltios/metro

Equivalente a 100000  Voltios/metro

Ingrese el valor de la presion atmosferica en mmHg

760

 El valor ingresado fue de 760  mmHg

 O de 101300 Newton/metro cuadrado

El valor del campo elúctrico dividido sobre la presi¾n es de 131.579 en V/m/mmHg


 Ingrese el valor de la temperatura en Grados Celsius

27

 El valor ingresado fue de 27  Grados Celsius


 Equivalente a 300  Grados Kelvin


 CALCULO DE VALORES INICIALES


 La densidad molecular sera de 2.44631e+025 moleculas/m^3


 O de 0.0244631 moleculas/nanometro cubico

La velocidad media de las molúculas de aire es de 509.733 metros/segundo

Ingrese el valor de la altura en mm
100

 El valor ingresado fue de 100  milýmetros

 La altura inicial sera de 0.1 metros
```

Figura E.1: Salida por pantalla del programa de simulación

```
La altura inicial sera de 0.1 metros

La posicion inicial del electron sera
x:0 m
y:0 m
z:0.1 m

La velocidad inicial del electron
x:0 m/s
y:0 m/s
z:0 m/s

La aceleracion sera de -1.75824e+016 m/s^2


La aceleracion inicial del electron sera
x:0 m/s^2
y:0 m/s^2
z:-1.75824e+016 m/s^2

Ingrese el valor del numero de vueltas totales
10

El valor ingresado fue de 10  vueltas


Ingrese un numero  0 o 1 para seleccionar el tipo de impresion

Impresion de coordenadas de colisiones en       Colision.dat

1

Impresion de coordenadas de ionizacion en       Ioniza.dat

1

Impresion de numeros de choques e ionizacion en         Numero.dat

1

Impresion de radios angulos y velocidades de llegada    Llegada.dat

1

Impresion de angulos despues de la colision     Angulos.dat

1
```

Figura E.2: Ingreso de datos por pantalla

Bibliografía

[1] Wagner C. F. ; Mc. Cann G. D. *Lightning Phenomena Reference Book.* Electrical Transmission and Distribution, Michigan U. S. A., 1950.

[2] Casas Ospina Fabio. *Tierras, Soporte de la Seguridad Eléctrica*, volume 1. Linotipia Bolívar, Bogotá, 2a edition, 2003.

[3] Krider Philip E. Benjamin Franklin and the first lightning conductors. *Proceedings of the International Commision on Meteorological History*, 2004.

[4] Rakov V.; Rachidi F. Overview of recent progress in lightning research and lightning protection. *IEEE, Transactions on Electromagnetic Compatibility*, 51, 2009.

[5] Biagi C.J.; Jordan D. M. High speed video observations of rocket and wire initiated lightning. *Geophysical Research Letters*, 36, 2009.

[6] Horacio Torres. *El Rayo Mitos, Leyendas, Ciencia y Tecnología*, volume 1. UNIBIBLOS, Bogotá, 2 edition, 2002.

[7] Jeremy A. Riousset; Victor P. Pasko; Paul R. Krehbiel; Ronald J. Thomas; and William Rison. Three-dimensional fractal modeling of intracloud lightning discharge in a New Mexico thunderstorm and comparison with lightning mapping observations. *Journal of Geohysical Research*, 112(d15203):1–17, May 2007.

[8] Maslowsky Grzegorz; Rakov Vladimir. Dynamics of lightning channel corona sheath predicted by return stroke models with specified longitudinal current distribution. *Institute Geophysics Pol. Acad, Sc D*, 73:412, 2009.

[9] Vargas Lezama Fabio. *Nuevo Modelo Integral del Canal de la Descarga Eléctrica Atmosférica y su Enlace con Estructuras en Tierra.* PhD thesis, Universidad Nacional de Colombia, Bogotá, 2006.

[10] Antonio Bello Morales. Estudio sobre la aparición de arcos eléctricos en catenarias ferroviarias. Master's thesis, Universidad Pontificia Comillas, Madrid, Junio 2010.

[11] UNE. Protección de estructuras, edificaciones y zonas abiertas mediante pararrayos con dispositivo de cebado. *Normas Españolas*, 1(21-186):61, 1996.

[12] T M P Briels1; J Kos1; E M van Veldhuizen; U Ebert. Circuit dependence of the diameter of pulsed positive streamers in air. *Physcs D: Applied Physica*, 39(0022-3727):5201–5210, Oct 2006.

[13] Niemeyer; L. Pietronero ; H.J.Wiesmann. Fractal dimension of dielectric breakdown. *Physical Review Letters*, 52(12):1033–1036, March 1984.

[14] A. Pedersen. Calculation of spark breakdown or corona starting voltages in nonuniform fields. *IEEE Transactions on power apparatus and systems*, PAS 86(2):200–205, Feb 1967.

[15] J. M. Meek. A theory of spark discharge. *Physical Review*, 57(1):722–728, Apr 1940.

[16] Ficker. Electron avalanche statistics. *Acta Physica Polonica A*, 116(6):1018–1020, Oct 2009.

[17] Tomás Ficker. Electrical breakdown in gases via a new mechanism of avalanche and streamer multiplications. *Plasma Fusion Res. Series*, 8(1):744–749, Nov 2008.

[18] Starikovskaia S. M. and Starikovskii Yu. Numerical modelling of the electron energy distribution function in the electric field of a nanosecond pulsed discharge. *Journal of Physics D: Applied Physics*, 2001.

[19] Hundsdorfer Willem Li Chao, Ebert Ute. Spatially hybrid computations for streamer discharges: II fully 3D simulations. *Plasma Physics, Arxiv*, 2011.

[20] Larraz R. La dimensión de Hausdorff-Besicovitch en el diseño de la banda de rodadura de neumáticos. *Revista Internacional de Métodos Numéricos para Cálculo y Diseño en Ingeniería*, 18:19–30, 2002.

[21] Tsekov R. Comment on semi classical Klein-Kramers and Smoluchowski equations for the brownian motion of a particle in an external potential. *Phys. A: Math. Theory.*, 40:10945–10947, 2007.

[22] Petrov N. I; Petrova G. Quantification of the probability of lightning strikes to structures using fractal approach. *IEEE, Transactions on Dielectrics and Electrical Insulation*, 10:4, 2003.

[23] Valdivia Juan. *The Physics of High Altitude Lightning.* PhD thesis, University of Maryland, Maryland, USA, 1997.

[24] José Luis Sebastian. *Fundamentos de Compatibilidad Electromagnética*, volume 1. Addison Wesley, Madrid, España, 1999.

[25] Smith Berend Frenkel Daan. *Understanding Molecular Simulation.* Academic Press, 1996.

[26] Ute Ebert; Davis D. Sentman. Streamers, sprites, leaders, lightning: from micro to macroscales. *Physics, Plasma Phys*, pre-print(1):1–13, Nov 2008.

[27] Jaramillo Angel. Oscilaciones del plasma-electrón en el efecto corona de las líneas de potencia eléctrica para telecomunicaciones bpl/plt. *Revista Cintex*, 14:17–20, 2009.

[28] R. D. Rivarola C. A. Tachino, M. E. Galassi. Estudio teórico de procesos de ionización múltiple en colisiones entre iones y moléculas. *Anales A F A*, 18:55–58, 2006.

[29] Ningyu Liu; Victor P. Pasko. Effects of photoionization on propagation and branching of positive and negative streamers in sprites. *Geophysical Research*, 109(A04301):1–17, Apr 2004.

[30] James E. Drummond. *Plasma Physics.* The Maple Press Company, Mc. Graw Hill Book Company, New York, 1961.

[31] Fitzpatrick Richard. Plasma physics. Austin.

[32] Birdsall C. K. Particle in cell charged particle simulation plus Montecarlo Collisions with neutral atoms, PIC-MCC. *IEEE Transaction on Plasma Science*, 19(2):123, 1991.

[33] Kikoin A. K.; Kikoin I. K. *Física Molecular.* Editorial MIR, Moscú, 1979.

[34] Denis Boyer. Introducción a la física no lineal y los sistemas complejos. Technical report, Instituto de Física UNAM, Agosto 2005.

[35] V. A. ; Townsend J. S. Bailey. The motion of electrons in gases. *Phylosophical Magazine S.6*, 42:873–891, 1921.

[36] Scott Joseph Levinson. Investigations of overvoltage breakdown. Master's thesis, Texas Tech, August 1981.

[37] Célestin Sebástien. *Study of the dynamics of streamers in air at atmospheric pressure.* PhD thesis, École Centrale de París, París, 2008.

[38] Von Angel. *Ionized Gases.* Clarendon Press, 1965.

[39] Ramssauer. A uber den wirkungsquerschnitt der gasmolekule gegenuber langsamen elektronen. *Annalen der Physik*, 64:513, 1921.

[40] Ramssauer. A uber den wirkungsquerschnitt der gasmolekaule gegenauber langsamen elektronen. *Annalen der Physik*, 66:546, 1921.

[41] Abril Claudia. Simulación de descargas atmosféricas usando Geant4. Master's thesis, Universidad Nacional de Colombia, Bogotá, 2011.

[42] S. V. Pancheshnyi; S. V. Sobakin; S. M. Starikovskaya; and A. Yu. Starikovskii. Discharge dynamics and the production of active particles in a cathode-directed streamer. *Plasma Physics Reports*, 26(12):1054 1065, March 2000.

[43] S. Pancheshnyi; M. Nudnova; and A. Starikovskii. Development of a cathode-directed streamer discharge in air at different pressures: Experiment and comparison with direct numerical simulation. *PHYSICAL REVIEW E,*, 71(016407):1 12, January 2005.

[44] Célestin Sebástien; Bonaventura Sdenek; Seghondy Barbar; Bourdon Ann; Spegur Pierre. The use of the ghost fluid method for poisson equation to simulate streamer propagation in point-to-plane and point-to-point geometries. *J. Phys. D: Appl.Phys.*, 42:065203, 2009.

[45] O. Chanrion; T. Neubert. Production of runaway electrons by negative streamer discharges. *Journal of Geophysical Research*, 115(A00E32):1–10, Jun 2010.

[46] J. M. Meek. A theory of spark discharge. *Phys. Rev.*, 57:722–728, Apr 1940.

[47] Albella Martin; Martínez Duart. *Física de Dieléctricos*, volume 1. Marcombo Boixareu Editores, Barcelona, 1984.

[48] Ficker T. Statistics of electron avalanches and streamers. *Acta Polytechnica*, 47(6):31–35, 2007.

[49] C. Li; C. Köhn; U. Ebert. Modeling hard radiation from streamers and leaders and terrestrial gamma-ray flashes. Technical report, ICPIG, Belfast Northern Ireland UK, August 2011.

[50] Witten and Sander. Diffusion limited agregation a kinetic critical phenomenon. *Physical Review Letters*, 47:19, 1981.

[51] Barra F.; Davidovitch B.;Levermann A.; Procaccia I. Laplacian growth and diffusion limited aggregation: different universality classes. *Condensed Matter*, 2001.

[52] Kadanoff L.P. Chaos and complexity: The results of non-linear processes in the physical world. *Springer Proceedings in Physics*, 1991.

[53] Gutiérrez Gonzalo. *Elementos de Simulación Computacional*, chapter 3, 4, pages 7–9. Universidad de Santiago de Chile, Departamento de Física, 2001.

[54] O. Chanrion; T. Neubert. A PIC-MCC code for simulation of streamer propagation in air. *Journal of Computational Physics*, 227(1):7222–7245, Apr 2008.

[55] William D. Greason. Electrostatic discharge: a charge driven phenomenon. *Journal of Electrostatics*, 28(3):199–218, 1992.

[56] R.B. Soares Rodríguez. Nuevo método para la simulación del modelo electrogeométrico utilizando autocad como herramienta de dibujo. *Inf. Tecnológica*, 15(1):61–66, 2004.

[57] Baym Gordon Kadanoff P. Leo. *Quantum Statistical Mechanics.* W. A. Nejamin Inc., 2465 Broadway, New York 25, New York, 1 edition, 1962.

[58] Prigogine Ilya. Time, structure, and fluctuations. *Science*, 201(4358):777–785, September 1978.

[59] Eva Martínez Pérez. Curso de termodinámica irreversible. http://www.um.es/docencia/barzana/DIVULGACION/QUIMICA/termirre.html, Febrero 2014.

[60] Kosztin I. Schulten K. *Lectures in Theoretical Biophysics.* Department of Physics and Beckman Institute, University of Illinois, Urbana, IL., 2000.

[61] R. K. Pathria. *Statistical Mechanics.* Department of Physics, University of Waterloo, Waterloo, Ontario Canada, 2nd edition, 1996.

[62] Isabel Berrocal. Principios de transferencia de masa en la ingeniería de alimentos. Technical report, Universidad Nacional del Callao, Callao, Abril 2011.

[63] L. Botzmann. Weitere studien über das wärmegleichgewicht unter gasmolekülen. *Sitzungsberichte Akad.*, II(66):275–370, 1872.

[64] Leopoldo García Scherer. Las ideas de Boltzmann: El problema de la segunda ley de la Termodinámica. Technical report, Universidad Autónoma Metropolitana Iztapalapa, Septiembre 2006.

[65] Honeisen Bruce. *Thermal Physics*, volume 1. The Edwin Mellen Press, CA 94133, 1993.

[66] Morrison Philip J. The Maxwell Vlasov equations as a continuous hamiltonian system. *Physics Letters*, 80A(5–6):383–386, December 1980.

[67] Itikawa; Ichimura; Sakimoto; Takayanagi. Secciones eficaces de colisión electrones y fotones- Oxígeno electrones- Nitrógeno. *Journal of Physical Chemistry*, 18(1):1–2, 1989.

[68] Yukikasu Itikawa. Cross sections for electron collisions with Nitrogen molecules. *Journal Physical Chemistry, Ref Data*, 35(1):31–53, Dec 2006.

[69] O. Chanrion; T. Neubert. A PIC-MCC code for simulation of streamer propagation in air. *Journal of Computational Physics*, 227(1):7222–7245, Apr 2008.

[70] E. U. Condon; G. H. Shortley. *The Theory of Atomic Spectra*. Cambridge University Press, 1935.

[71] Lifshitz Landau. *Teoria Cuántica No Relativista*, volume 3. Reverté S. A, España, 2a edition, 1983.

[72] W. L. Morgan; J. P.Boeuf; L. C. Pitchford; KINEMA SOFTWARE; CPAT. *BOLSIG Boltzmann Solver Freeware*. Centre de Physique des Plasmas et Applications de Toulouse, Monument CO USA; Toulouse France, December 1996.

[73] M. Segura; G. Martínez Tamayo; C. Espejo. El ión H en el modelo de Thomas-Fermi-Amaldi. *Revista Colombiana de Física*, 39(1):195–198, Abril 2007.

[74] Davis Irrazábal Sergio Michael. Estudio del orden a nivel atómico en sistemas magnéticos y amorfos. Master's thesis, Universidad de Santiago de Chile, Santiago, 2002.

[75] Metropolis Nicholas. The Monte Carlo method. *Journal of the American Statitical Association*, 44(247):335–341, 1949.

[76] Heermann D. W. *Computer Simulation Methods in Theoretical Physics*, chapter 1, pages 1–35. Springer, 2nd edition, 1990.

[77] Celestin Sebastien; Pasko Victor. Energy and fluxes of thermal runaway electrons produced by exponential growth of streamers during the stepping of lightning leaders and in transient luminous events. *Journal of Geophysical Research*, 116(A03315):1–14, March 2011.

[78] Michael J. Brunger; Stephen J. Buckman. Electron molecule scattering cross sections I experimental techniques and data for diatomic molecules. *Physics Reports*, 357(1):215–458, 2002.

[79] A. Bogaerts; M. V. Straaten; R. Gijbels. Monte Carlo simulation of an analytical glow discharge: motion of electrons, ions and fast neutrals in the cathode dark space. *Spectrochimica Acta*, 50B(2):179–196, 1995.

[80] L. G. H. Huxley. Formulae for the mean losses of energy in collisions of slow electrons moving in diatomic gases. *Australian Journal of Physics*, pages 44–53, September 1955.

[81] Mermin N. D. Ashcroft N. *Physics.* Cornell University, New York, U.S.A., 1975.

[82] A. Okhrimovsky; A. Bogaerts; R. Gijbels. Electron anisotropic scattering in gases: A formula for Monte Carlo simulations. *Physical Review E*, 65(037402):1–4, Feb 2002.

[83] M. Egas; N. Medina; M. Bayas. Sobre la simulación de la dinámica de electrones en el aire bajo la acción de un campo eléctrico. *Revista Politécnica*, 32(3):55–62, Julio 2013.

[84] K. L. Cartwright; J. P. Verboncoeur; C. K. Birdsall. Loading and injection of maxwellian distributions in particle simulations. *Journal of Computational Physics*, 1(162):483–513, May 2000.

[85] G. Chacón; Acosta. Cien años de la función de distribución de Jüttner para el gas relativista. *Revista Mexicana de Física*, 58(1):117–126, Abril 2012.

[86] G. F. Torres del Castillo. La representación de rotaciones mediante cuaterniones. *Miscelánea Matemática*, 29:43–50, 1999.

[87] Diego Bravo. Ventajas y desventajas: Comparación de los lenguajes C, C++ y Java. Technical report, Lima Data, Noviembre 2006.

[88] M. Marucho; C. A. García; H. Fanchioti. The Landau distribution for charged particles traversing thin films. *International Journal of Modern Physics*, 17(10):1461–1476, Oct 2006.

[89] Víctor Luaña. *Estructura Electrónica Molecular*, chapter 6, pages 1–68. Universidad de Oviedo, 2003–2010.

ESCUELA POLITÉCNICA NACIONAL

FACULTAD DE CIENCIAS

MAESTRÍA EN FÍSICA

ORDEN DE EMPASTADO

De acuerdo a lo estipulado en el artículo 83 del Reglamento del Sistema de Estudios de las Carreras de Formación Profesional y de Postgrados, aprobado por el Consejo Politécnico en sesión del 16 de agosto del 2011 y una vez verificado el cumplimiento del formato de presentación establecido, se autoriza la impresión y encuadernación final de la Tesis de Grado presentado por el señor **MARIO EUGENIO EGAS ESCOBAR**.

Fecha de autorización: Quito, D.M., 21 de agosto de 2014

ESCUELA POLITECNICA NACIONAL
FACULTAD DE CIENCIAS
DECANATO

Dr. Marco Calahorrano
DECANO
FACULTAD DE CIENCIAS