

# Sobre la simulación de la dinámica de electrones en el aire bajo la acción de un campo eléctrico

Egas M. Medina N. Bayas M.

*Programa de Maestría en Física. Departamento de Física*

## 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 su trayectoria final. En primer lugar, desde un análisis semi-clásico, se aborda el problema de calcular la probabilidad del siguiente choque. En segundo lugar, se desarrolla el modelo para el cálculo de las secciones eficaces. Sobre la base a estos resultados, se plantea el método para definir aleatoriamente las condiciones de los choques. El movimiento entre choques se evalúa con el método de la dinámica molecular. Como resultado, se plantean las condiciones para poder simular la trayectoria de electrones en el aire.

**Palabras claves:** Palabras clave: sección eficaz, sección eficaz diferencial, electrones de inyección, probabilidad direccional

## Abstract

The theoretical considerations needed to computationally simulate the dynamics of electrons within a gas under the influence of an external electric field are discussed. The main point of the discussion is the effect of the collisions between electrons and gas molecules in the electronic trajectory. First, the probability of the next collision is analyzed from a semi-classical point of view. Then a model for the cross section calculation is developed. Both the probability of the next collision and the cross section are necessary to define stochastically the conditions of a collision in a computer simulation. The movement of an electron between collisions can be described with the method of molecular dynamics. With these considerations the trajectory of electrons in gases such as air can be simulated.

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

## 1 Introducción

El estudio de las descargas eléctricas requiere de la descripción de la trayectoria de los electrones. Los electrones líderes, también llamados de inyección, generan a lo largo de la trayectoria otros electrones libres que son los que establecen el futuro camino de los ramales y de la descarga principal [1, 2]. La dirección resultante depende de factores como: la relación  $E/p$  (campo eléctrico/presión) [3], el tipo de moléculas que componen el medio de propagación y la temperatura del medio. Esta dirección se caracteriza con la Probabilidad Direccional de la Descarga.

Para la simulación computacional de la trayectoria de electrones en el aire, suelen usarse varios métodos computacionales, entre los que cabe mencionar el método de fluidos para simulación del penacho (streamer)[4], el método de partículas en una celda con colisiones de Monte-Carlo (PIC-MCC) [5], el modelo de las macropartículas [6, 1], el método DSMC (Direct Simulation Monte Carlo) [7], entre otros. Los conceptos sobre los

cuales estos métodos están basados serán utilizados para encontrar la probabilidad de que un grupo de electrones o iones 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, lo que constituye un problema típico a abordarse por simulación.

El objetivo del presente trabajo, es presentar una estrategia para la resolución del problema, introduciendo fundamentalmente los conceptos y parámetros necesarios para simular los choques entre electrones y moléculas neutras. Específicamente, se discuten los conceptos de la probabilidad temporal de la siguiente colisión, las secciones eficaces totales y diferenciales, la rotación del vector velocidad en base a la sección eficaz diferencial, así como los métodos para calcular estos parámetros [8, 9]. Esta estrategia se utiliza para estudiar dos casos de nuestro interés: la descarga en un capacitor de placas planas paralelas y la descarga hacia y desde una punta.

## 2 Conceptos básicos

### Sección diferencial de dispersión

Si consideramos la dispersión de una onda plana  $e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$ , la función de onda lejos de la región de dispersión tiene la forma indicada en la ecuación (1), donde  $\theta$  y  $\phi$  se miden con respecto a  $\mathbf{k}$  [10]:

$$\psi_{\mathbf{k}} = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} + f(\theta, \phi) \frac{e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}}{r}. \quad (1)$$

La corriente entrante de partículas tiene una velocidad  $v = \hbar k/m$ ; por otra parte, la corriente de salida en el ángulo diferencial  $d\Omega$  es  $\hbar \frac{k}{m} |f(\theta, \phi)|^2 d\Omega$ . Esta última expresión corresponde a la corriente incidente multiplicada por el factor  $d\sigma(\theta, \phi) = |f(\theta, \phi)|^2 d\Omega$  [10]; es decir:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f(\theta, \phi)|^2. \quad (2)$$

La expresión (2) se denomina sección transversal diferencial de dispersión en la dirección de los ángulos  $\theta$  y  $\phi$ . Obsérvese que la amplitud de dispersión  $f(\theta, \phi)$  tiene las dimensiones de longitud; por lo tanto, las dimensiones de la sección eficaz ( $\sigma$ ) serán las de una superficie.

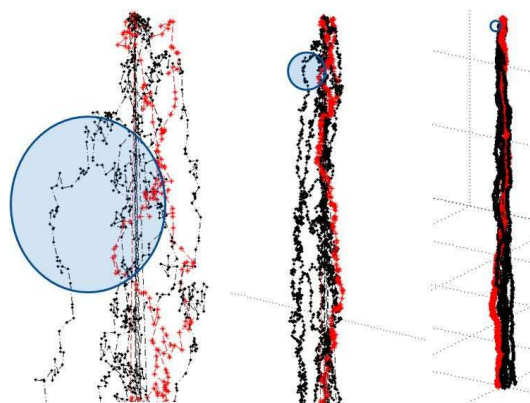
### Modelo de partículas individuales

Se ha planteado que un simple electrón puede iniciar una descarga si tiene la suficiente energía para preionizar el gas [1, 11]. 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 inyección. Por otro lado, experimentos recientes en gases puros han dado evidencia de avalanchas creadas por electrones individuales [12]. En este sentido, el modelo de partículas individuales es completamente válido para el análisis de la trayectoria de los electrones en la descarga. Este modelo sigue el movimiento de los electrones tratando a los átomos y moléculas neutros y cargados del medio como un entorno aleatorio, con una movilidad tan baja que pueden considerarse inmóviles [1]. En general, se supone que las moléculas de aire se encuentran en equilibrio térmico bajo ciertas condiciones preestablecidas de presión y temperatura.

La trayectoria electrónica está determinada por las colisiones entre los electrones y las moléculas del medio. Todos los parámetros que rigen estas colisiones son de naturaleza estocástica; a saber: el parámetro de impacto [13], el ángulo de entrada a la colisión, la velocidad de la molécula antes de la colisión, el tipo de molécula que impactará y la sección eficaz de la colisión.

Por lo expuesto, se ha determinado que el método de dinámica molecular con interacción individual de Monte-Carlo es el más conveniente para estudiar la trayectoria [14, 15]. Para incluir las colisiones, se puede utilizar el modelo de esferas duras [7], en el cual se consideran a los electrones y a las moléculas como esferas

perfectas que experimentan choques elásticos. La simulación computacional con el método de dinámica molecular e interacción con esferas duras permite la generación rápida de trayectorias como aquellas mostradas en la figura 1.



**Figura 1.** Trayectoria de 3 electrones en una descarga de 10mm con  $V = 316kV$ , obtenida en una simulación de una descarga de inyección con únicamente simulación de esferas duras y tiempo constante entre colisiones. Los círculos dibujados sobre la figura son ampliaciones del volumen indicado.

Para desarrollar una simulación computacional más realista, se deben analizar las colisiones con secciones eficaces obtenidas mediante la experimentación y el análisis mecánico cuántico de dispersión entre partículas.

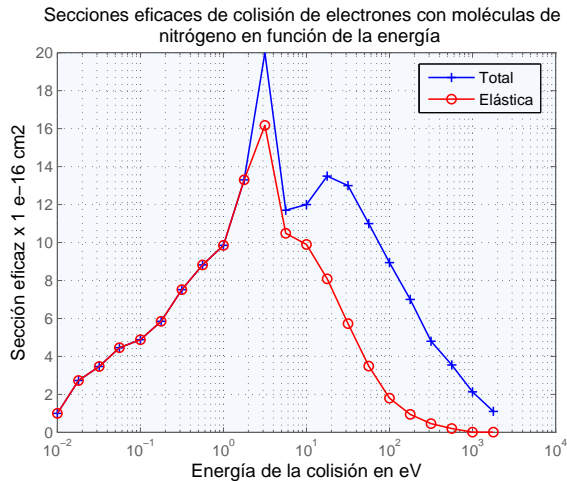
### Secciones eficaces de colisión de electrones con moléculas de Oxígeno y Nitrógeno

Una gran ventaja para la simulación de la dinámica de electrones individuales es que se cuenta con excelentes datos de secciones eficaces de colisión entre electrones y moléculas. Particularmente, se cuenta con datos de las secciones eficaces de colisión de electrones y fotones con moléculas de oxígeno y nitrógeno [16, 17, 18] en el orden de  $10^{-16} \text{ cm}^2$ . Estos valores incluyen las contribuciones de los siguientes procesos:

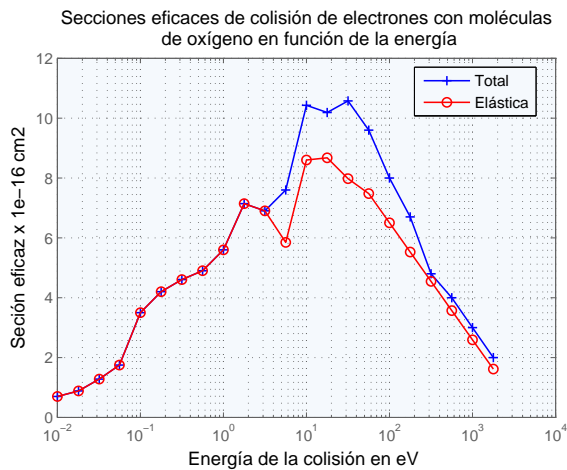
- Dispersión elástica.
- Transferencia de momentum.
- Excitación rotacional.
- Excitación vibracional.
- Excitación de estados electrónicos.
- Disociación.
- Ionización.
- Emisión de radiación.
- Procesos de captura y recombinación.

La contribución más importante a la sección eficaz total para energías electrónicas menores a  $1 \text{ eV}$  corresponde a las colisiones elásticas. Para energías mayores a  $100 \text{ eV}$ , las secciones eficaces decrecen con el aumento de la energía (Ver figuras 2 y 3). La existencia de un

valle después del valor máximo en las secciones eficaces totales sería el factor que determina la existencia de los electrones fuera de control encontrados en experimentos y simulaciones recientes [19].



**Figura 2.** Secciones eficaces de colisión de electrones con moléculas de nitrógeno en base a datos tomados de la referencia [17]. La energía en electrón voltios en el eje horizontal está dada en escala logarítmica



**Figura 3.** Secciones eficaces de colisión de electrones con moléculas de oxígeno en base a datos tomados de la referencia [16]. La energía en electrón voltios en el eje horizontal está dada en escala logarítmica

### 3 Simulación Computacional

A continuación, se describirán los elementos necesarios para simular las trayectorias de electrones, inicialmente en reposo, a una altura  $Z_0$  y que son acelerados por un campo eléctrico, hasta que llegan al plano  $Z = 0$ .

#### Algoritmo

- Se genera un electrón en reposo a la altura  $Z_0$ .

- Se determina aleatoriamente el tiempo para que se presente el siguiente choque [S3]. Para esto se utiliza la sección eficaz total para cada gas de manera individual [16, 17, 18], y se consideran desde ya las concentraciones relativas de los gases moleculares ( $O_2, N_2, CO_2$ ). El tiempo de duración del primer vuelo se puede igualar al tiempo de relajación.
- Se selecciona el tipo de molécula con la cual colisionará el electrón.
- Se determina la trayectoria seguida por el electrón bajo la acción del campo eléctrico con el método de la dinámica molecular [S3].
- Las velocidades de las moléculas que intervienen en las colisiones se determinan mediante la ley de distribución de Maxwell-Boltzmann [20] en una dirección.
- Una vez determinada la ocurrencia de una colisión y el tipo de molécula involucrada, será posible encontrar el tipo de proceso que puede ocurrir. La ocurrencia de un determinado proceso dependerá nuevamente del peso estadístico de la correspondiente sección eficaz ( $\sigma_{total} = \sum_i \sigma_i$ ) [18, 7].
- Se determina el ángulo de salida después del choque utilizando números aleatorios y una expresión teórica para la sección eficaz diferencial [S3].
- Se calcula la velocidad de salida, considerando el tipo de proceso que ocurrió, si fue elástico o inelástico, y en el caso de los inelásticos, la energía absorbida durante la colisión [S3].
- Una vez que el electrón ha salido del choque y conocemos su posición y su velocidad, el mismo volverá a colisionar con otra molécula, una tras otra, hasta que el electrón llegue al plano con  $Z = 0$ , en donde se registran las distancias  $r_0$  con relación al origen de las coordenadas.
- En cada colisión se almacena la posición, con el fin de graficar la trayectoria.

El proceso de salidas y llegadas se repetirá el número de veces necesario hasta obtener una adecuada descripción estadística del proceso. Con los datos obtenidos, se realizará un histograma de radios, ángulos y velocidades de llegada. Estos resultados servirán para determinar la dispersión del ángulo de llegada y la probabilidad direccional de la descarga de los electrones en el aire, para diferentes alturas.

#### Probabilidad de ocurrencia del siguiente choque

Sean  $n$  la densidad del medio en el cual se mueve el electrón y  $\sigma$  la sección eficaz de colisión con las moléculas del medio. Se despreciará inicialmente la dependencia de  $\sigma$  con la velocidad relativa entre el electrón y la molécula. Un electrón barrerá un volumen  $\sigma \cdot v \cdot dt$  en el tiempo  $dt$ ; consecuentemente, la probabilidad de colisión del electrón en el intervalo  $dt$  es  $p \cdot dt = n \cdot \sigma \cdot v \cdot dt$ . Para efectos de cálculo, es mejor considerar que el intervalo de tiempo entre choques  $t$  se divide en  $m$  subintervalos de tiempo  $t/m$ . Entonces, la probabilidad de que ocurra una colisión transcurrido el tiempo  $t$  sería

$p \cdot t/m(1 - p \cdot t/m)^m$ , en donde  $1 - pt/m$  es la probabilidad de que no exista una colisión en cada uno de los  $m$  sub-intervalos anteriores al sub-intervalo  $m$ , y  $p \cdot t/m$  es la probabilidad de que sí se presente la colisión en el sub-intervalo  $m$ ; por lo tanto, la probabilidad  $p^*$  de que exista una colisión al tiempo  $t$  es:

$$p^*(t)[t/m] = n\sigma v[t/m](1 - n\sigma v[t/m])^m. \quad (3)$$

En el límite, cuando  $m \rightarrow \infty$ , tenemos:

$$p^*(t)dt = n\sigma v dt \exp(-n\sigma vt), \quad (4)$$

que es la probabilidad de que exista una colisión entre  $t$  y  $t + dt$ .

La probabilidad de que el choque ocurra en cualquier tiempo entre 0 y  $t$  es:

$$P^*(t) = \int_0^t n\sigma v dt \exp(-n\sigma vt) = 1 - \exp(-n\sigma vt). \quad (5)$$

Durante la simulación, se utilizará esta función de distribución para encontrar el tiempo de ocurrencia del siguiente choque. Para esto, se procede de la siguiente manera:  $P^*(t)$  se iguala a un número aleatorio  $Re_t$ , generado con probabilidad uniforme entre 0 y 1, de donde se obtiene el tiempo como función inversa de  $Re_t$ ; es decir:

$$t_{siguientechoque} = -\frac{1}{n\sigma v} \ln(Re_t). \quad (6)$$

Para el cálculo, se considerará el valor de la sección eficaz total  $\sigma_T$ , que es función de la energía cinética del electrón y de la molécula a impactar para cada caso.

## Método de Dinámica Molecular

Este método consiste en la resolución numérica de las ecuaciones del movimiento. Para el caso general, en el cual el campo eléctrico no es uniforme, las ecuaciones de movimiento para el electrón se resolverán mediante el algoritmo de velocidades de Verlet [14, 15]. De esta forma se encontrarán las coordenadas y velocidades de los electrones en los instantes en los que ocurrirán las colisiones. Según el algoritmo mencionado, las posiciones y velocidades se calcularán según el siguiente esquema iterativo:

$$r_{n+1} = r_n + v_n(\Delta t) + \frac{1}{4}[a_n + a_{n+1}](\Delta t)^2. \quad (7)$$

$$v_{n+1} = v_n + \frac{1}{2}[a_n + a_{n+1}](\Delta t). \quad (8)$$

$$\Delta t = \frac{t_{siguientechoque}}{N_t}. \quad (9)$$

Para conseguir buenos resultados, es suficiente un valor de  $N_t \sim 20$  [21].

## Balance energético en las colisiones

En el caso de las colisiones elásticas, la conservación de la energía permite establecer la relación entre las componentes paralelas y perpendiculares de las velocidades, antes y después del choque. Dado que la masa de la molécula es mucho mayor que la del electrón, se desprecia la velocidad de retroceso de la primera. Entonces tenemos:

$$(v_{\parallel}^*)^2 + (v_{\perp}^*)^2 = (v_{\parallel})^2 + (v_{\perp})^2. \quad (10)$$

En esta ecuación, los subíndices  $\parallel$  indican que es paralelo a la trayectoria del electrón incidente y  $\perp$  que es perpendicular a ella. Las magnitudes con el superíndice \* indican posterioridad al choque.

Para ser más precisos, con el cálculo de las energías, es necesario considerar la dinámica de los choques. La fracción de energía perdida en el impacto por un electrón, cuando resulta dispersado por un átomo, según un ángulo  $\theta$ , se expresa por medio de la ecuación (11) [17, 8], donde  $m$  es la masa del electrón y  $M$  la masa de la molécula contra la que choca. Como es evidente, para este problema, se ha supuesto también la existencia de una simetría cilíndrica. El resultado de la ecuación (12) se obtiene, luego de tomar la aproximación de que la masa del electrón es mucho menor que la masa del blanco.

$$\frac{\Delta E}{E} = \frac{2m}{M}(1 - \cos \theta). \quad (11)$$

De la misma manera, ya que  $\frac{\Delta E}{E} = 2\frac{\Delta v}{v}$ , se obtiene:

$$\frac{\Delta v}{v} = \frac{m}{M}(1 - \cos \theta). \quad (12)$$

Para el caso de colisiones inelásticas de excitación de los niveles propios de energía de la molécula, el balance energético en el caso de las colisiones electrón con moléculas neutras está dado por la ecuación [5, 7]:

$$E_{dispersada} = E_{incidente} - E_{excitacion}. \quad (13)$$

En esta, 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.

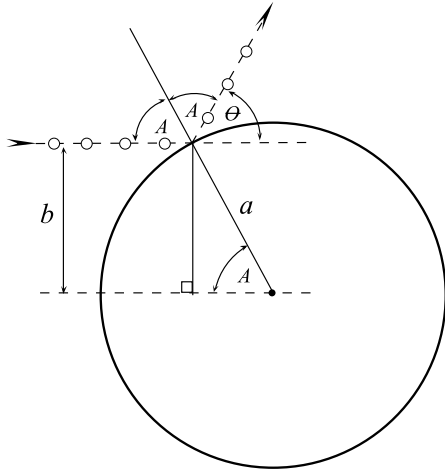
En cambio, para las colisiones entre electrones, con el resultado de la ionización de la molécula neutra, el balance sería el indicado en la ecuación:

$$E_{dispersada,e} = E_{incidente,e} - E_{ionizacion} - E_{creado,e}. \quad (14)$$

Esta ecuación toma en cuenta la posibilidad de una ionización y la creación de un electrón adicional. La energía de ionización en cada caso puede variar de acuerdo al orbital molecular del cual se desprende el electrón. Por ejemplo, para la molécula de oxígeno, se ha medido una energía de la primera ionización equivalente a 12.06 eV [22].

### Cálculo de las Secciones Eficaces

Consideremos, en primer lugar, la colisión entre dos esferas duras de radios  $a_1$  y  $a_2$ , con  $a_1 \ll a_2$  y  $m_1 \ll m_2$ , según se muestra en la figura (4), donde  $a = a_1 + a_2$ :



**Figura 4.** Geometría del choque para el caso de esferas duras,  $b$  es el parámetro de impacto y  $\theta$  es el ángulo de desviación con respecto al eje principal de colisión.

El parámetro de impacto  $b$  está dado por:

$$b = a \sin\left(\frac{\pi - \theta}{2}\right) = a \cos\left(\frac{\theta}{2}\right). \quad (15)$$

Entonces, la sección eficaz es:

$$\sigma = \pi b^2 = \pi a^2 \cos^2\left(\frac{\theta}{2}\right);$$

es decir:

$$\sigma = \pi a^2 \frac{1}{2}(1 + \cos(\theta)). \quad (16)$$

Esta ecuación permite calcular los ángulos  $\theta$  y  $\phi$  mediante los números aleatorios  $Re_\theta$  y  $Re_\phi$ , según las ecuaciones (17) y (18).

$$\theta = \arccos[1 - 2Re_\theta]. \quad (17)$$

$$\phi = 2 \cdot \pi \cdot Re_\phi. \quad (18)$$

Un análisis de las colisiones más aproximado a la realidad utiliza la expresión (2) para la sección diferencial de dispersión. En la aproximación de Born, [10]  $f$  está dada por:

$$f = -\frac{2m}{\hbar^2} \int_0^\infty U(r) \frac{\sin(qr)}{q} \cdot r dr, \quad (19)$$

donde  $q$  es la relación entre el número de onda  $k$  y el ángulo de dispersión  $\theta$ ; y  $q = 2 \cdot k \sin(\theta/2)$ [23].

Según el modelo de Thomas Fermi:

$$U(r) = ZE_0 \cdot \frac{a}{r} \exp\left(-\frac{r}{a}\right), \quad (20)$$

donde  $E_0$  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  $a = 0,529$  *Angstrom* es el radio de Bohr.

Con esta expresión para el potencial  $U(r)$  y con  $\alpha = ZE_0 a$ , se obtiene:

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

Entonces:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f|^2 = 4a^2 \left(\frac{\alpha m a}{\hbar^2}\right)^2 \frac{1}{(q^2 a^2 + 1)^2}. \quad (21)$$

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

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

es decir:

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

Por lo tanto, la sección eficaz total es:

$$\sigma = 16\pi a^2 \left(\frac{\alpha m a}{\hbar^2}\right)^2 \frac{1}{4k^2 a^2 + 1}. \quad (22)$$

Si en la ecuación (21) se reemplaza la energía  $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_e}$  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 (22), se obtiene para la sección eficaz normalizada

$$I(\epsilon, \theta) = \frac{1}{4\pi} \frac{1 + 8\epsilon}{(1 + 4\epsilon - 4\epsilon \cos\theta)^2}, \quad (23)$$

que es, exactamente, la obtenida en la referencia [23]. En la (23),  $\epsilon = E/E_0$ .

Al integrar la ecuación (23) entre 0 y  $\theta$ , se obtiene la probabilidad acumulada de dispersión de los electrones al chocar contra átomos o moléculas no polares.

$$P(\epsilon, \theta) = \frac{(1 + 8\epsilon) \sin^2(\theta/2)}{1 + 8\epsilon \sin^2(\theta/2)}. \quad (24)$$

De acuerdo a [10], las condiciones de aplicabilidad de estas fórmulas son:  $\alpha m a / \hbar^2 \ll 1$  y  $\alpha / \hbar v \ll 1$ .

Por último, para encontrar el ángulo de dispersión, se compara la probabilidad de dispersión acumulada (24) con un número aleatorio  $Re_\theta$ , uniformemente distribuido en el intervalo  $[0, 1]$ , y se encuentra la función inversa. Una vez hallada la función inversa, es posible encontrar el ángulo  $\theta$  para una determinada energía normalizada  $\epsilon$  y para un número aleatorio específico  $Re_\theta$ :

$$\theta = \arccos\left(1 - \frac{2Re_\theta}{1 + 8\epsilon(1 - Re_\theta)}\right) \quad (25)$$

Esta ecuación es muy conveniente para la modelación de procesos estocásticos de Monte-Carlo, en los cuales los electrones colisionan con gases mono-atómicos. Para moléculas diatómicas no polares, tales como el  $N_2$  o

el  $O_2$ , se debe realizar la corrección, indicada en la ecuación (26) [23], en la cual se utiliza un parámetro de perfeccionamiento  $\zeta$ , que depende de la energía  $\varepsilon$ , según se puede observar en la figura 5.

$$I(\varepsilon, \theta, \phi) = \frac{1}{4\pi} \frac{1 - \zeta^2(\varepsilon)}{(1 - \zeta(\varepsilon) \cos(\theta))^2} \quad (26)$$

En la ecuación (26), el valor de  $\zeta$  se puede calcular mediante la ecuación (27), que es una aproximación adecuada para este parámetro de corrección para muchos gases, de acuerdo a [23, 5].

$$\zeta(\varepsilon) = \frac{0.065\varepsilon + 0.26\sqrt{\varepsilon}}{1 + 0.05\varepsilon + 0.2\sqrt{\varepsilon}} - \frac{12\sqrt{\varepsilon}}{1 + 40\sqrt{\varepsilon}} \quad (27)$$

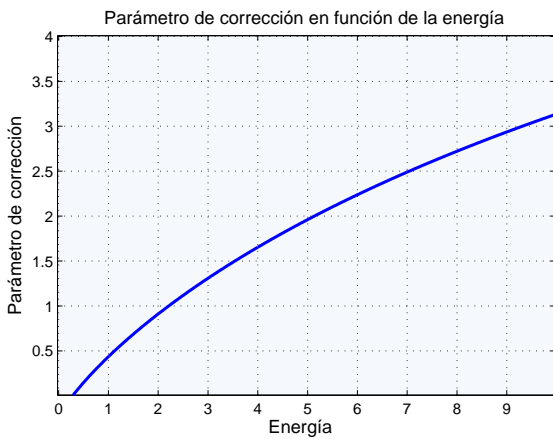


Figura 5. Variación de  $\zeta$  en función de la energía relativa  $\varepsilon$ , obtenida a partir de la ecuación (27)

Luego de integrar la ecuación (26) entre los valores de 0 y  $\theta$ , se puede obtener la nueva fórmula para calcular el ángulo de salida en función de la energía de entrada y del vector unitario de la velocidad de entrada, mediante la ecuación (28) [23]. Se debe notar que estas ecuaciones, que utilizan números aleatorios, no tienen simetría esférica, sólo simetría cilíndrica. Es por esta razón que se necesita rotar el vector unitario de la velocidad de entrada a la colisión, para poder continuar con la simulación.

$$\theta = \arccos \left[ 1 - \frac{2\text{Re}_\theta(1 - \zeta(\varepsilon))}{1 + \zeta(\varepsilon)(1 - 2\text{Re}_\theta)} \right] \quad (28)$$

### Dirección del vector de velocidad después del choque

Una colisión de un electrón con una molécula implica, en general, el cambio de su dirección. En la figura 6, se muestra el referido cambio.

Sean  $\mathbf{v} = \overrightarrow{OM}$  el vector velocidad de la partícula incidente y  $\mathbf{v}' = \overrightarrow{MP}$  el vector velocidad después de la colisión. El cambio de dirección está determinado por dos ángulos: el azimutal o de latitud  $\theta$  y el de rotación o de longitud  $\phi$ . La velocidad de la partícula después del choque tendrá componentes en el plano formado por el eje

$Z$ , la velocidad inicial  $\overrightarrow{OM}$  (plano de incidencia) y la perpendicular a este plano. El vector unitario perpendicular al plano de incidencia viene dado por:

$$\mathbf{u}_{\mathbf{v} \times \mathbf{k}} = \frac{v_y}{v_{xy}} \mathbf{i} - \frac{v_x}{v_{xy}} \mathbf{j}, \quad (29)$$

donde  $v_{xy} = \sqrt{v_x^2 + v_y^2}$ .

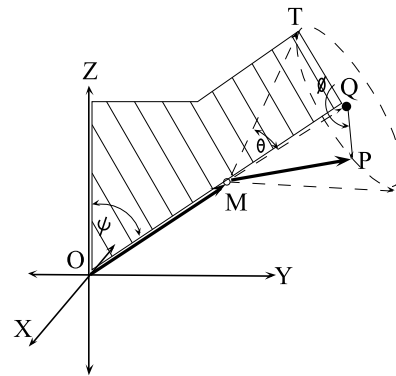


Figura 6. Ángulo de salida en 3 dimensiones. Se ha sombreado el plano que comprende los puntos 0, Z, M, Q, T. El vector de salida final girará alrededor del vector  $\overrightarrow{MQ}$ . El vector de velocidad de salida será el correspondiente a  $\overrightarrow{MP}$ .

En el plano de incidencia, se puede considerar dos vectores unitarios perpendiculares entre sí paralelos a  $\overrightarrow{QT}$  y  $\mathbf{v}$ . El unitario en  $\overrightarrow{QT}$  puede obtenerse como sigue:

$$\mathbf{u}_{\mathbf{v} \times \mathbf{k} \times \mathbf{v}} = -\frac{v_x v_z}{v_{xy} v} \mathbf{i} - \frac{v_y v_z}{v_{xy} v} \mathbf{j} + \frac{v_{xy}}{v} \mathbf{k}. \quad (30)$$

Entonces:  $\mathbf{v}' = v' \cos \theta \mathbf{u}_{\overrightarrow{OM}} + \overrightarrow{QP}$ ; pero  $\overrightarrow{QP}$  es igual a  $v' \sin \theta [u_{\mathbf{v} \times \mathbf{k}} \sin \phi + u_{\mathbf{v} \times \mathbf{k} \times \mathbf{v}} \cos \phi]$ , lo que nos da como resultado:

$$\mathbf{v}' = \frac{v'}{v} \left[ \begin{aligned} & \left( v_x \cos \theta + \frac{v_y v}{v_{xy}} \sin \theta \sin \phi - \frac{v_x v_z}{v_{xy}} \sin \theta \cos \phi \right) \mathbf{i} + \\ & \left( v_y \cos \theta - \frac{v_x v}{v_{xy}} \sin \theta \sin \phi - \frac{v_y v_z}{v_{xy}} \sin \theta \cos \phi \right) \mathbf{j} + \\ & (v_z \cos \theta + v_{xy} \sin \theta \cos \phi) \mathbf{k} \end{aligned} \right] \quad (31)$$

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 (32), 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.

$$\mathbf{v}' = v_z \sin \theta \sin \phi \mathbf{i} + v_z \sin \theta \cos \phi \mathbf{j} + v_z \cos \theta \mathbf{k}. \quad (32)$$

## 4 Conclusiones y Discusión

En este trabajo se han definido la estrategia y las ecuaciones necesarias para la simulación de la trayectoria de los electrones de inyección en el aire. La trayectoria es más bien un concepto relacionado con la Mecánica Clásica, mientras que la Mecánica Cuántica establece que es imposible conocer al mismo tiempo la posición (trayectoria) y el momento de una partícula. Desde esta perspectiva, el estudio se lo realiza desde un punto de vista semi-clásico, pues se usa el concepto de trayectoria, pero se analiza la dispersión desde el punto de vista cuántico.

Los principales puntos abordados tienen que ver con el uso de las secciones eficaces de las moléculas neutras del gas y con el método de la dinámica molecular. Los valores experimentales de las secciones eficaces, conjuntamente con la expresión analítica derivada del modelo de Thomas Fermi, con Apantallamiento de Coulomb, se han utilizado para determinar las direcciones de salida después del choque. El método de la dinámica molecular permite determinar la trayectoria de los electrones entre choques sucesivos. Otros detalles de la simulación que se han estudiado con detenimiento son: la probabilidad de ocurrencia del siguiente choque y la rotación del vector velocidad después del choque.

Para el uso del método de dinámica molecular, se debe escoger adecuadamente el intervalo de tiempo  $\Delta t$ . 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, el éxito de esta parte de la simulación dependerá de la validez de relaciones (7) y (8) durante toda la simulación. Para el caso de un campo uniforme, el uso del método de dinámica molecular no es necesario, ya que existe una expresión analítica exacta.

Una colisión desde el punto de vista computacional implica los siguientes cálculos: el tiempo entre choques [S3]; la dinámica molecular [S3]; la selección de tipo de proceso que va a presentarse en base a las secciones eficaces parciales y totales [S3]; la dirección definida por las secciones diferenciales [Ec. 28]; y la rotación del vector velocidad para la obtención de la nueva dirección [Ec. 31]. Desde esta perspectiva, para la simulación a escalas macroscópicas, los requerimientos computacionales se incrementarán con las dimensiones de los tramos simulados. Como consecuencia de esto, los recursos computacionales disponibles impondrán el límite a las dimensiones y escalas que serán factibles de simular.

## Referencias

- [1] Hundsdorfer Willem Li Chao, Ebert Ute. Spatially hybrid computations for streamer discharges: II fully 3D simulations. *Plasma Physics, Arxiv*, 2011.
- [2] C. Li; C. Köhn; U. Ebert. Modeling hard radiation from streamers and leaders and terrestrial gamma-ray flashes. *30 ICPIG*, 2011.
- [3] V. A. ; Townsend J. S. Bailey. The motion of electrons in gases. *Philosophical Magazine S.6*, 42:873–891, 1921.
- [4] Célestin Sébastien. *Study of the dynamics of streamers in air at atmospheric pressure*. PhD thesis, École Centrale de Paris, París, 2008.
- [5] 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.
- [6] Rakov V.; Rachidi F. Overview of recent progress in lightning research and lightning protection. *IEEE, Transactions on Electromagnetic Compatibility*, 51, 2009.
- [7] Y. Tsuji; T. Tanaka; S. Yonemura. Cluster patterns in circulating fluidized beds predicted by numerical simulation (discrete particle model versus two fluid model). *Powder Technology*, 95(1):254–264, 1998.
- [8] Birdsall C. K. Particle in cell charged particle simulation plus Monte Carlo Collisions with neutral atoms, PIC-MCC. *IEEE Transaction on Plasma Science*, 19(2):123, 1991.
- [9] 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.
- [10] Lifshitz Landau. *Teoría Cuántica No Relativista*, volume 3. Reverté S. A, España, 2a edition, 1983.
- [11] 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.
- [12] T M P Briels; W Hundsdorfer; B Meulenbroek; A Rocco; E M van Veldhuizen U Ebert; C Montijn. The multiscale nature of streamers. *physics.plasmaph*, Apr 2006.
- [13] Mermin N. D. Ashcroft N. *Physics*. Cornell University, New York, U.S.A., 1975.
- [14] Gutiérrez Gonzalo. *Elementos de Simulación Computacional*, chapter 3, 4, pages 7–9. Universidad de Santiago de Chile, Departamento de Física, 2001.
- [15] Smith Berend Frenkel Daan. *Understanding Molecular Simulation*. Academic Press, 1996.
- [16] Itikawa; Ichimura; Sakimoto; Takayanagi. Secciones eficaces de colisión electrones y fotones-Oxígeno electrones- Nitrógeno. *Journal of Physical Chemistry*, 18(1):1–2, 1989.
- [17] Yukikasu Itikawa. Cross sections for electron collisions with Nitrogen molecules. *Journal Physical Chemistry, Ref Data*, 35(1):31–53, Dec 2006.

- [18] 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.
- [19] O. Chanrion; T. Neubert. Production of runaway electrons by negative streamer discharges. *Journal of Geophysical Research*, 115(A00E32):1–10, Jun 2010.
- [20] 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.
- [21] Giovanni Lapenta. The algorithms of the implicit method. *Physics. Comp-Ph*, Jan 2008.
- [22] P. A. Kazaks, P. S. Ganas, and A. E. S. Green. Electron-impact excitation and ionization of atomic Oxygen. *Phys. Rev. A*, 6:2169–2180, Dec 1972.
- [23] 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.