

Cálculo numérico de transitorios
electrónicos e iónicos en plasmas
débilmente ionizados

Juan Carlos Rodríguez Luna

26 de Febrero del 2008

Sin duda alguna, Sancho, que ya debemos de llegar a la segunda región del aire, donde se engendra el granizo o las nieves; los truenos, los relámpagos y los rayos se engendran en la tercera región; y si es que desta manera vamos subiendo, presto daremos en la región del fuego, y no sé yo cómo templar esta clavija para que no subamos donde nos abrasemos.

El ingenioso hidalgo Don Quijote de la Mancha
Miguel de Cervantes Saavedra

Índice general

1. Introducción	7
1.1. Aspectos generales de los plasmas	8
1.2. Motivación y aplicaciones	10
2. Conceptos	12
2.1. Procesos colisionales fundamentales	12
2.1.1. Ionización	12
2.1.2. Captura	13
2.1.3. Estabilización	14
2.1.4. Despojo electrónico	14
2.2. El método pulsado de Townsend y las propiedades de transporte de los portadores de carga	15
2.2.1. El dispositivo experimental	15
2.2.2. Propiedades de transporte	17
2.3. Solución analítica al problema y su uso en la obtención de datos relevantes del plasma	19
2.3.1. Transitorio electrónico	21
2.3.2. Transitorio iónico positivo	21
2.3.3. Transitorio iónico negativo	22
2.3.4. Obtención experimental de los coeficientes de ionización y captura	22
2.3.5. Limitaciones de los resultados analíticos	23
3. El modelo matemático	25
3.1. Las características del modelo	25
3.2. Las ecuaciones de continuidad para los portadores de carga	26
3.3. Esquema para el método	28
3.3.1. Diagrama de partición de la brecha	28
4. La solución numérica	30
4.1. La aproximación de diferencias finitas	30
4.2. Derivación de la ecuación de recurrencia para electrones e iones negativos	32
4.3. Derivación de la ecuación de recurrencia para iones positivos	34

<i>ÍNDICE GENERAL</i>	3
4.4. Condiciones de frontera	35
4.4.1. Pulso delta de Dirac	35
4.4.2. Pulso láser	36
4.5. El cálculo numérico del transitorio	36
5. Resultados y comparaciones	38
5.1. Ejemplos del cálculo	38
5.1.1. Un transitorio completo	38
5.1.2. El efecto del pulso láser	40
5.1.3. El efecto de la difusión	40
5.1.4. El efecto del auto despojo	43
5.1.5. El efecto de la estabilización	45
5.1.6. Comparación con transitorios experimentales	46
6. Discusión y conclusiones	51
Bibliografía	54

Índice de figuras

1.1. En esta fotografía de la aurora boreal(luces del norte), los velos de luz forman un anillo aparentemente suspendido justo por encima de los árboles que hay en primer plano. En realidad, el anillo de luz esta a más de 100 kilómetros por encima de los árboles, y el resplandor verdoso se produce por el oxígeno molecular que interactúa con los electrones energéticos, cerca de los límites con el espacio exterior.	8
2.1. Esquema del arreglo experimental. HVSF-Fuente de alto voltaje, UVLS-Láser pulsado, A-Ánodo, K-Cátodo, AM-amplificador de banda ancha, OSC-osciloscopio	17
2.2. Fotografías de los electrodos dentro del contenedor de gas	18
2.3. Un ejemplo de transitorio electrónico para CF_3I , y el ajuste analítico Ec.2.20. Para este caso $\frac{E}{N} = 445Td$, $p = 9,888torr$, y $d = 3,1cm$	23
3.1. En esta figura se ilustran las cuatro especies de portadores de carga considerados en nuestro modelo	26
3.2. Diagrama de la brecha entre las placas metálicas	29
3.3. Esquema para el método de diferencias finitas	29
5.1. Transitorio completo, en el cual se muestran todos los portadores de carga. Los datos de entrada al programa son: $\frac{\alpha}{p}=0.92\frac{1}{cm\ torr}$, $\frac{\eta}{p}=0.77\frac{1}{cm\ torr}$, $\frac{\delta}{p}=0.103\frac{1}{cm\ torr}$, $\frac{\sigma}{p}=2.00\frac{1}{cm\ torr}$, y el pulso inicial esta modelado por un pulso delta.	39
5.2. Un acercamiento a la Fig 5.1 para distinguir la evolución temporal de la corriente originada por cada uno de los portadores de carga.	39
5.3. Con esta figura se ilustra el efecto que tiene sobre el transitorio electrónico un pulsos láser de diferente duración. En esta corrida, los datos que alimentan el programa son: $\frac{\alpha}{p}=3.00\frac{1}{cm\ torr}$, $\frac{\eta}{p}=2.95\frac{1}{cm\ torr}$, $D_L=0.00cm^2/s$	40

5.4. Transitorio electrónico que ilustra el efecto de diferentes valores de difusión cuando existen más procesos de captura que de ionización $\frac{\alpha}{p} - \frac{\eta}{p} = -0.1 \frac{1}{cm \ torr}$, el pulso láser es modelado por una delta de Dirac para hacer más claro el ejemplo. 41

5.5. Un acercamiento a la Fig 5.4 para apreciar mejor el efecto de la difusión 41

5.6. Transitorio electrónico que muestra el efecto de la difusión cuando existen igual número procesos de captura que de ionización $\frac{\alpha}{p} - \frac{\eta}{p} = 0.00 \frac{1}{cm \ torr}$, el pulso láser es modelado por una delta de Dirac. 42

5.7. Transitorio electrónico que muestra el efecto de la difusión cuando existen un mayor número procesos de ionización que de captura $\frac{\alpha}{p} - \frac{\eta}{p} = 0.20 \frac{1}{cm \ torr}$, el pulso láser es modelado por una delta de Dirac. 42

5.8. Transitorios electrónicos, en los cuales los diferentes valores de δ , nos muestran la contribución a la corriente electrónica debida al proceso de autodespojo de los iones negativos inestables. Los datos de entrada para este cómputo son: $\frac{\alpha}{p} = 0.920 \frac{1}{cm \ torr}$, $\frac{\eta}{p} = 0.770 \frac{1}{cm \ torr}$, $\frac{\sigma}{p} = 0.282 \frac{1}{cm \ torr}$, y el pulso láser es modelado por una delta de Dirac 43

5.9. Un acercamiento a la Fig 5.8 para apreciar mejor el efecto del auto despojo en el intervalo del primer transitorio electrónico. . . 44

5.10. Un acercamiento a la Fig 5.8 para apreciar mejor el efecto del auto despojo para tiempos mayores al primer transito electrónico. 44

5.11. Transitorios electrónicos, en los cuales los diferentes valores de σ , nos muestran la inhibición a la corriente electrónica debida al proceso de conversión de los iones negativos inestables a iones negativos estables. Los datos de entrada para este cómputo son: $\frac{\alpha}{p} = 0.920 \frac{1}{cm \ torr}$, $\frac{\eta}{p} = 0.770 \frac{1}{cm \ torr}$, $\frac{\delta}{p} = 0.103 \frac{1}{cm \ torr}$, y el pulso láser es modelado por una delta de Dirac. 45

5.12. Un acercamiento a la Fig 5.11 para apreciar mejor el efecto de la conversión. 46

5.13. Transitorio electrónico para el cual el número de procesos de ionización es casi igual al de capturas, es por esto que $\frac{\alpha}{p} - \frac{\eta}{p} = -1,639 \times 10^{-3} \frac{1}{cm \ torr}$. Los otros datos de entrada para este cómputo son: $p = 15.15 \text{ torr}$, $\frac{E}{N} = 140 \text{ Td}$, $D_L = 1,9 \times 10^4 \frac{cm^2}{s}$, $v_e = 7,9 \times 10^3 \frac{cm}{s}$ y el pulso láser tiene un ancho de 15ns. 47

5.14. Transitorio electrónico para el cual el número de procesos de ionización es menor que el de capturas, es por esto que $\frac{\alpha}{p} - \frac{\eta}{p} = -8,877 \times 10^{-2} \frac{1}{cm \ torr}$. Los otros datos de entrada para este cómputo son: $p = 9.888 \text{ torr}$, $\frac{E}{N} = 430 \text{ Td}$, $D_L = 5,316 \times 10^4 \frac{cm^2}{s}$, $v_e = 1,993 \times 10^7 \frac{cm}{s}$ y el pulso láser tiene un ancho de 15ns. . . . 48

- 5.15. En este último caso, tenemos una situación en la cual el número de procesos de ionización es menor que el de capturas, por lo cual tenemos que $\frac{\alpha}{p} - \frac{\eta}{p} = -7,676 \times 10^{-2} \frac{1}{cm \ torr}$. Los otros datos de entrada para este cómputo son: $p=9.888\text{torr}$, $\frac{E}{N}=430\text{Td}$, $D_L = 1,154 \times 10^5 \frac{cm^2}{s}$, $v_e = 2,092 \times 10^7 \frac{cm}{s}$ y el pulso láser tiene un ancho de 15ns. 49
- 5.16. Transitorio electrónico para el cual el número de procesos de ionización es mayor que el de capturas, por lo cual tenemos que $\frac{\alpha}{p} - \frac{\eta}{p} = 5,430 \times 10^{-2} \frac{1}{cm \ torr}$. Los otros datos de entrada para este cómputo son: $p=9.888\text{torr}$, $\frac{E}{N}=445\text{Td}$, $D_L = 1,555 \times 10^5 \frac{cm^2}{s}$, $v_e = 2,095 \times 10^7 \frac{cm}{s}$ y el pulso láser tiene un ancho de 15ns. . . . 50

Capítulo 1

Introducción

Cuando, partículas provenientes del espacio exterior interactúan con las moléculas de nuestra atmósfera, aparece un hermoso fenómeno natural que consiste en despliegues de luces danzarinas que se presentan en gran variedad de colores y formas, los cuales adornan la alta atmósfera en las regiones cercanas a los polos, ver Fig 1.1. Las auroras son la mas cercana manifestación visible de los plasmas en la naturaleza.

Al explorar nuestro entorno inmediato resulta natural suponer que sus características son representativas de todo el universo, y en el caso particular de la naturaleza de la materia, difícilmente se podría estar más equivocado. Hasta hace unas cuantas décadas se creía que toda la materia del universo era sólida, líquida o gaseosa, lo que llamamos los tres estados de la materia. Al descubrir el estado de plasma, se le nombró el cuarto estado de la materia, por que en general equivale a un estado de mayor energía, aunque a juzgar por su enorme abundancia en el universo, tal vez se le debería llamar el primer estado de la materia dado que más del 99% de la materia del universo se encuentra en estado de plasma. A pesar de su importancia, la física de plasmas está muy poco difundida, aún entre los físicos, y esto se debe en parte a la dificultad del tema, a los serios problemas con el desarrollo de los dispositivos experimentales en el laboratorio, elementos teóricos que aún no ha sido posible desarrollar y al hecho de que la física de plasmas rara vez se encuentra en los temarios de física a nivel universitario, esto tal vez porque su estudio formal requiere de considerables conocimientos de física.

Actualmente, la investigación en plasmas representa una parte importante para entender realmente el comportamiento de nuestro universo, y ofrece contribuciones valiosas a la tecnología del futuro y del presente. Es por esto que es primordial hacer esfuerzos para perfeccionar esta fascinante área del conocimiento, para que, de esta manera sea posible contribuir un poco más a la comprensión de nuestro universo.

La finalidad del presente trabajo es el desarrollo e implementación(en un programa de computadora escrito en FORTRAN 77) de un modelo matemático



Figura 1.1: En esta fotografía de la aurora boreal(luces del norte), los velos de luz forman un anillo aparentemente suspendido justo por encima de los árboles que hay en primer plano. En realidad, el anillo de luz esta a más de 100 kilómetros por encima de los árboles, y el resplandor verdoso se produce por el oxígeno molecular que interactúa con los electrones energéticos, cerca de los límites con el espacio exterior.

que nos permita representar de manera más realista las condiciones experimentales en el estudio de plasmas pulsados, así como obtener datos relevantes del plasma para después comparar con las mediciones experimentales para validar el modelo.

Este trabajo es la continuación e implementación de un programa inicialmente desarrollado por el Dr. Jaime de Urquijo Carmona en el ININ. Su implementación en computadoras modernas, prueba, adaptación para su facilidad de uso por parte del usuario y comparación con resultados experimentales constituye una parte importante del presente trabajo.

1.1. Aspectos generales de los plasmas

Los átomos en su estado natural son eléctricamente neutros. Cuando se extraen del átomo uno o más electrones, lo que queda tiene un exceso de carga positiva y constituye lo que se conoce como ion. En un caso extremo, un ion puede ser simplemente un núcleo atómico al que se le han desprendido todos sus electrones circundantes. Una sustancia que contiene iones, a la vez que conserva los electrones, aunque ya libres del amarre atómico, es un plasma. Así pues, el plasma no es un material particular, sino cierto estado específico de la materia en el que, en conjunto, el material es eléctricamente neutro, pero que contiene iones y electrones libres capaces de moverse en forma independiente.

Se le ha llamado el cuarto estado de la materia porque, en general, equivale a un estado de mayor energía. Una sustancia suficientemente fría se presenta en estado sólido, es decir, tiene una forma específica e internamente se caracteriza por el hecho de que los átomos que la constituyen se encuentran firmemente unidos. Al calentar la sustancia, la unión entre los átomos se hace más débil debido a la agitación térmica, y la sustancia pasa a otro estado que conocemos como líquido, en el cual ya no tiene una forma específica, pero ocupa un volumen definido. Al seguir calentando la sustancia, sus átomos pueden llegar a liberarse completamente de las ligas mutuas y entonces pasa a un estado de gas, en el que ya no tiene forma ni volumen fijos, sino que adquieren la del recipiente que la contiene. Si esta sustancia se calienta aún más se produce un nuevo cambio, ahora ya en el interior de los átomos, los cuales empiezan a desprenderse de sus electrones, esto es, se ionizan y se forma un plasma. Conforme el material se calienta más, sus átomos se mueven con mayor rapidez (adquieren más energía) y al chocar unos con otros a gran velocidad puede originarse el desprendimiento de algunos de sus electrones orbitales quedando así los átomos ionizados y algunos electrones libres. Así pues, cualquier sustancia puede encontrarse en estado de plasma siempre que se den las condiciones para que toda ella o sólo una parte se encuentre ionizada. Por encima de los 10 000 Kelvin ($^{\circ}\text{K}$), cualquier sustancia ya es un plasma.

Es importante destacar que el estado de plasma no implica necesariamente altas temperaturas; la ionización de un material puede producirse por diversos medios. Se pueden producir plasmas por medio de la absorción de fotones (que son las partículas de luz) suficientemente energéticos. Éstos desprenden electrones de los átomos cuando chocan con ellos; a este proceso se le llama fotoionización. La mayor parte de los plasmas presentes en el medio interestelar a lo largo de todo el Universo ha sido producido por fotoionización, por la luz ultravioleta de las estrellas.

Una forma relativamente sencilla de obtener un plasma débilmente ionizado es por medio del método pulsado de Townsend; si a un gas neutro en el seno de un campo eléctrico intenso se le inyecta un haz de electrones, los electrones libres serán acelerados por el campo eléctrico y chocarán con otros átomos, desprendiendo algunos de sus electrones y, por lo tanto generando átomos ionizados y electrones libres; de esta forma, el proceso continúa como una avalancha. Esto es lo que se llama una descarga eléctrica, y un gas ionizado por una descarga eléctrica es un típico ejemplo de un plasma. Tales plasmas se producen en forma natural con los relámpagos, como en forma artificial con el método pulsado de Townsend (como se acaba de mencionar), las lámparas fluorescentes y los tubos de neón, por mencionar algunos ejemplos. Es conveniente aclarar que, a ciertas energías, es probable el proceso inverso, es decir, que las moléculas del gas capturen electrones. Un modelo físico de la descarga debe incluir tanto ionización como captura, así como otros fenómenos que serán descritos en esta tesis, tales como la difusión longitudinal, la movilidad tanto iónica como electrónica y el despojo colisional.

La avalancha electrónica ocurre como resultado de un crecimiento excesivo de

portadores de carga libres, en la cual, además, ocurren varios procesos colisionales tales como ionización, captura electrónica, despojo electrónico y conversión. En el capítulo 2 se da una adecuada descripción de tales procesos. Por lo general la ionización y la captura electrónica son considerados los procesos predominantes.

Una de las principales características de la materia en estado de plasma es su capacidad de responder colectivamente a impulsos internos y externos. Los movimientos colectivos de los plasmas son consecuencia del gran alcance de las fuerzas electrostáticas que sienten entre sí las partículas cargadas que lo componen. En el interior de un gas compuesto por átomos o moléculas neutras, las interacciones entre sus componentes sólo se darán a distancias comparables a las dimensiones geométricas de las mismas (estas interacciones son originadas por las fuerzas intermoleculares de Van der Waals). Pero en el interior de un plasma las partículas interactúan a distancias mucho mayores y de esta manera, aún los plasmas de muy baja densidad se comportan de manera cohesiva. Cada ion y cada electrón en el interior de un plasma puede sentir la influencia de muchas partículas a su alrededor, de manera que el comportamiento del plasma estará determinado por interacciones colectivas y no solamente por la interacción entre dos partículas individuales. Además de lo anterior, el plasma reacciona fuertemente a los efectos de las fuerzas electromagnéticas. Es por esto que el comportamiento de los plasmas presenta una complejidad que excede a la del comportamiento exhibido por la materia en los estados sólidos, líquido o gaseoso. Por esta razón el estudio formal de los plasmas constituye una de las áreas de mayor dificultad de la física de hoy.

1.2. Motivación y aplicaciones

El creciente número de aplicaciones para plasmas de baja temperatura, requiere de procesos de simulación numérica o medición experimental que nos permitan conocer los coeficientes de ionización y transporte para un amplio rango de valores de $\frac{E}{N}$. Éste parámetro normalizado, $\frac{E}{N}$ es la razón entre el campo eléctrico aplicado y la densidad del gas neutro. Una de las principales aplicaciones de la teoría de plasmas de baja temperatura, se da en la fabricación de semiconductores, los aislantes gaseosos para alto voltajes, la física atmosférica y el abatimiento de la contaminación atmosférica. Resultaría de gran utilidad contar con una herramienta fiable, que nos permitiese simular las características de un gas ionizado a baja temperatura, cuando se cuenta con el conjunto de coeficientes que caracteriza dicho gas. Contribuir en este sentido, de proporcionar métodos de cálculo de coeficientes es uno de los objetivos del presente trabajo. Proporcionar una herramienta computacional que permita extraer, de manera precisa y confiable algunos de éstos parámetros a partir de mediciones experimentales, éste es otro de los objetivos del presente trabajo.

En el capítulo 2 se presenta el marco concetual y las definiciones que es indispensable conocer para comprender el trabajo que se expone. En el capítulo 3

se describe el modelo matemático que se propone, el cual es el punto central de este trabajo. En el capítulo 4 se presenta a detalle el proceso de solución numérica, el cual por sí solo tiene gran mérito. En el capítulo 5 se exponen varios ejemplos de validación de nuestro modelos con datos experimentales, con lo cual se muestran las virtudes y aspectos novedosos de nuestro modelo. Por último, en el capítulo 6 se presenta una discusión final sobre los logros obtenidos y las perspectivas a futuro.

Capítulo 2

Conceptos

En el plasma, la producción y pérdida de electrones e iones, son gobernados por la frecuencia con la que ocurren algunos procesos colisionales fundamentales y las propiedades de transporte de electrones e iones. En las secciones subsiguientes se discutirán algunos de los conceptos fundamentales y fenómenos asociados a un plasma de baja temperatura. En particular, se discutirán los conceptos de: ionización, captura, despojo, estabilización, movilidad y difusión.

2.1. Procesos colisionales fundamentales

2.1.1. Ionización

Los procesos de ionización consisten en el desprendimiento de uno o varios electrones de un átomo o molécula inicialmente neutros. este tipo de procesos puede tener diversos orígenes. A continuación describiré los más relevantes para el presente trabajo, a saber: fotoionización e ionización por impacto electrónico.

Fotoionización

Cuando un fotón con suficiente energía ($h\nu$) colisiona con una molécula de gas neutra (A), la molécula tiene una probabilidad de ser ionizada. Esta probabilidad se cuantifica por la así denominada “sección eficaz de ionización”. Como resultado del proceso de ionización se origina un ión positivo, además de un electrón libre:



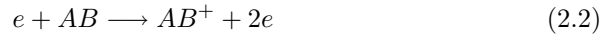
Ionización por impacto electrónico

Cuando los electrones se mueven a través del gas bajo la influencia del campo eléctrico externo, éstos pueden colisionar con las moléculas del gas elástica o inelásticamente. Si la colisión es elástica la energía cinética total es conservada, sin embargo, si la colisión es inelástica parte de la energía cinética del electrón

es transferida a la molécula en forma de energía potencial.

Sólo es posible la ionización de la molécula si la energía transferida por el electrón es mayor que su potencial de ionización. Si tomamos en cuenta la ionización disociativa de una molécula AB, el proceso de ionización de ésta se puede expresar por medio de las siguientes reacciones:

Ionización simple:



Ionización disociativa:



El coeficiente de ionización por impacto electrónico, α , es definido como el número medio de colisiones ionizantes de un electrón que se desplaza una unidad de longitud en la dirección del campo.

2.1.2. Captura

Captura disociativa

Cuando un electrón colisiona con una molécula AB (donde A y B representan átomos individuales), ésta puede fragmentarse y dar origen a un ion negativo A^- y a una molécula neutra B. El proceso se puede representar de la siguiente manera:



Captura no disociativa

El proceso de captura no disociativa puede ser expresado de la siguiente manera.



Captura que da origen a iones negativos inestables

Cuando un elemento suficientemente electronegativo captura un electrón, se forma un ión negativo, o anión. Este anión puede ser estable y durar varios segundos, o inestable, en cuyo caso espontáneamente el átomo se liberará del electrón extra. En el caso en el que se da origen a un ión negativo inestable A^{-*} , el proceso se puede representar de la siguiente manera.



En todo este trabajo se usa el coeficiente η_{ns} para representar a todos los procesos de captura que dan origen a iones negativos estables (como las reacciones descritas por las Ecs. (2.4) y (2.5)), y otro coeficiente η_{nu} para representar todos los procesos de captura que producen iones negativos inestables (como las

reacciones descritas por la Ec. (2.6)). Ambos coeficientes η_{ms} y η_{nu} son definidos como el número promedio de procesos de captura producidos por un electrón cuando éste se desplaza 1cm en la dirección del campo. El coeficiente de captura total esta dado por $\eta = \eta_{ms} + \eta_{nu}$

2.1.3. Estabilización

El proceso de estabilización es aquel en el cual un ion negativo inestable recupera su estado base, manteniendo el electrón ganado, mediante la liberación del excedente de energía en forma de radiación electromagnética; esto se representa mediante la siguiente reacción.



La estabilización es descrita por el coeficiente σ , el cual es definido como el número promedio de procesos de conversión para cada ion negativo inestable en el tiempo en que un electrón recorre 1cm en la dirección del campo.

2.1.4. Despojo electrónico

Autodespojo

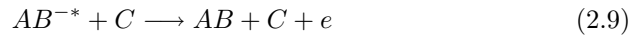
Un ion negativo inestable eventualmente liberará su electrón capturado (puesto que poseen un tiempo de vida medio τ^*). Lo anterior se sostiene si uno supone que antes del tiempo τ^* el ion inestable no es estabilizado por alguna colisión. Al proceso en el cual el ión negativo se desprende espontáneamente del electrón excedente se le conoce como “autodespojo”.



Despojo Colisional

Cuando un ion negativo inestable AB^{-*} colisiona con un átomo C, pueden ocurrir varios tipos de despojo colisional, los cuales se representan con las siguientes reacciones.

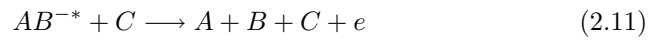
Despojo directo



Despojo asociativo



Despojo disociativo



El coeficiente de despojo, tanto para el autodespojo como para el despojo colisional es representado con la letra griega δ , y es definido como el número promedio de procesos de despojo para un ion negativo inestable en un tiempo en el cual un electrón se desplaza 1cm en la dirección del campo eléctrico E .

Fotodespojo

El fotodespojo se expresa por medio de la siguiente reacción



En el contexto de este trabajo, este proceso no es tan relevante como los dos anteriores, a menos que una fuente de luz intensa sea usada para irradiar el gas.

2.2. El método pulsado de Townsend y las propiedades de transporte de los portadores de carga

Con el fin de ilustrar con mayor detalle la manera en que se genera un plasma débilmente ionizado, en esta sección se presentarán detalles del método pulsado de Townsend. Esto tiene dos objetivos: presentar el sistema físico en el que nos basamos para realizar nuestras simulaciones numéricas, y por otro lado presentar otras definiciones útiles que se emplearán a lo largo de este trabajo, tales como brecha, transito electrónico e iónico, corriente de desplazamiento, entre otros.

2.2.1. El dispositivo experimental

En este apartado se da una descripción del método pulsado de Townsend (The Time - Resolved - Townsend (TRT) metod), el cual permite la observación espacio-temporal del desarrollo de la densidad de los portadores de carga en el seno de la descarga -iones y electrones- en una región característica V-I del plasma en la que, debido a la influencia muy pequeña de la acumulación de carga, los portadores se mueven bajo la influencia de un campo eléctrico uniforme, acelerador, y el efecto dispersor del gas neutro, mayoritario. En consecuencia, el grado de ionización del plasma es tan bajo (menor que 10^{-6}) que los efectos colectivos son mínimos, y por ello, es posible relacionar la variación temporal de las corrientes de los portadores de carga con los coeficientes macroscópicos que se han descrito previamente, tales como el transporte de carga, la ionización, etc. El método pulsado de Townsend permite evaluar, de manera cuantitativa, los distintos parámetros que caracterizan a una descarga de bajo nivel de ionización. Empleando este método es posible evaluar los coeficientes de ionización, captura, difusión y movilidad electrónica. Sin embargo, la interpretación de los transitorios experimentales requiere de una descripción precisa de la mayor parte de los procesos que ocurren en la descarga. Dado que el objetivo del presente

trabajo consiste en modelar este tipo de descargas pulsadas, esta sección se abocará a describir las particularidades del Método Pulsado de Townsend(MPT).

El método pulsado de Townsend radica en el monitoreo de la corriente de desplazamiento total, originada por el flujo de electrones e iones que se mueven a través de la región entre las placas bajo el influjo del campo eléctrico E . La descarga en el gas neutro es producida por una liberación de fotoelectrones del cátodo por medio de la acción de un pulso láser de corta duración(0.5-15ns de duración). Este método permite la observación de la evolución temporal de la *corriente total*, la cual es la suma de las corrientes originadas por cada uno de los portadores de carga. Procesos como difusión, ionización por impacto electrónico, captura electrónica, entre otros, son analizados para inferir los coeficientes de ionización y transporte como función de la razón entre el campo eléctrico E , y la densidad del gas neutro N , $\frac{E}{N}$. Las unidades de $\frac{E}{N}$, es el Td (1 Townsend = $10^{-17} Vcm^2$).

El arreglo experimental mostrado esquemáticamente en la Fig.2.1 consiste en un par de placas paralelas, pulidas a espejo, de forma circular con un diámetro de 12cm, y separadas una distancia de 3.1cm. El ánodo A está hecho de acero no magnético con un agujero central de 1.5cm de diámetro, cubierto por una malla muy delgada de cobre, con una densidad de 90 hilos por pulgada que, además de permitir el paso de la luz UV hacia el cátodo, mantiene la homogeneidad del campo eléctrico. La luz que atravesiza la malla es un pulso de luz ultravioleta de 337nm con una energía de 6mJ, el cual incide sobre el cátodo de aluminio (electrodo K). Típicamente, dependiendo de la energía del haz, un solo pulso es capaz de liberar $10^3 - 10^8$ fotoelectrones lentos del cátodo, en un intervalo entre 0.5-15 ns.

La cámara de vacío dentro de la cual se encuentran los electrodos(ver Fig 2.2) tiene forma cilíndrica, con un diámetro de 50cm y una altura de 60cm; este contenedor está hecho de acero no magnético. Con el sistema de vacío se pueden lograr presiones por debajo de $300\mu Pa$ antes del llenado del recinto con el gas o la mezcla de gases a analizar.

La presión del gas es medida por un transductor de presión absoluta(MKS Baratron 270A), con una precisión del 0.01 %, mientras que la temperatura es medida con un termómetro de termopar a una precisión de 0.2% en el rango 293-302K.

La corriente de desplazamiento producida por los portadores de carga en el seno de la brecha interelectrónica fluye a través de un amplificador de transimpedancia, conectado entre el cátodo y tierra. Dicho amplificador tiene una transimpedancia de $1,0 \times 10^5 \frac{V}{A}$, y un ancho de banda de 40MHz. La salida del amplificador se conecta a un osciloscopio digital, el cual la despliega, y también transmite la forma de onda digitalizada(1000 puntos, 8bits) a través de una interfase IEEE 488 a la computadora para su análisis.

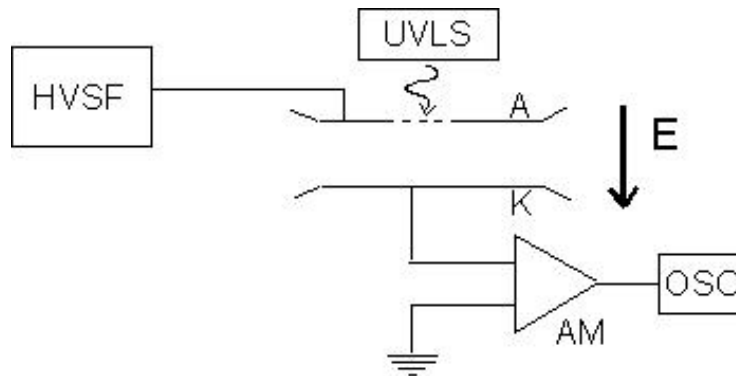


Figura 2.1: Esquema del arreglo experimental. HVSF-Fuente de alto voltaje, UVLS-Láser pulsado, A-Ánodo, K-Cátodo, AM-amplificador de banda ancha, OSC-osciloscopio

2.2.2. Propiedades de transporte

Velocidad de deriva electrónica

Cuando un campo eléctrico E es aplicado a un gas en el cual existen portadores libres de carga, sobre cada uno de estos portadores actuará una fuerza geE , donde g es el estado de carga (el número de electrones arrebatados al átomo o molécula); en la mayoría de los casos, pero no en todos, el estado de carga es uno $g = 1$. En el presente trabajo se considera $g = 1$.

Debido a la fuerza eE , la partícula cargada será acelerada con una aceleración \dot{v} , donde

$$\dot{v}_e = \frac{eE}{m} \quad (2.13)$$

donde m es la masa de la partícula. Cuando la nube electrónica se desplaza debido a la presencia del campo eléctrico, si bien cada electrón en la nube se mueve a su propia velocidad, el cúmulo electrónico como un todo se desplaza con una *velocidad de deriva* v_e paralela a la dirección del campo. La velocidad de deriva v_e es definida como el promedio de velocidad de todos los electrones

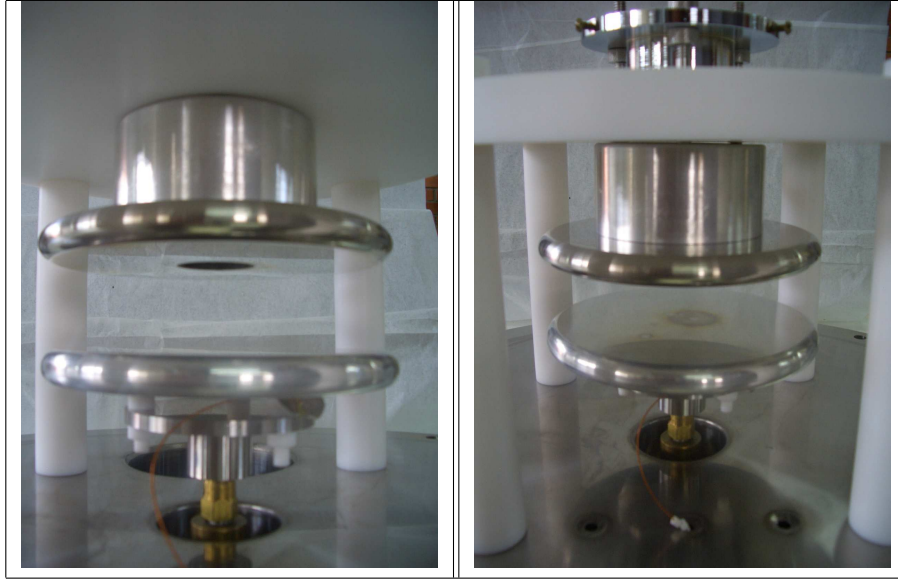


Figura 2.2: Fotografías de los electrodos dentro del contenedor de gas

del cúmulo.

La *movilidad* K de una partícula, es definida como la razón entre su velocidad en la dirección del campo y la magnitud de la intensidad del campo.

$$K_e = \frac{v_e}{E} \frac{m^2}{V s} \quad (2.14)$$

Los electrones no se acelerarán libremente bajo el efecto del campo E . Debido a pérdidas de momento por colisiones, la velocidad de deriva v_e será mucho menor a aquella que se alcanzaría si los electrones estuvieran libres.

El parámetro con el que se mide la energía depositada en los portadores de carga, es $\frac{E}{N}$, es decir, el campo normalizado a la densidad.

Difusión

La difusión del portador de carga i -ésimo, es descrita por la ecuación general de difusión

$$\vec{j}_i = -D \cdot \nabla \rho_i \quad (2.15)$$

donde ρ_i es la densidad del portador de i -ésimo tipo, y \vec{j} es el flujo de electrones que atraviesan una unidad de área por unidad de tiempo. La constante de proporcionalidad D_i es el coeficiente de difusión del i -ésimo portador de carga.

En ausencia del campo eléctrico, la difusión es isotrópica, pero cuando el campo está presente, entonces el espacio-fase deja de ser isotrópico, y por ende el coeficiente de difusión. Para la adecuada descripción del enjambre de electrones en el campo eléctrico uniforme es necesario distinguir las dos componentes de la difusión. El coeficiente de difusión transversal, D_T , describe la difusión del cúmulo de partículas en una dirección perpendicular al campo eléctrico E . El coeficiente de difusión longitudinal, D_L , describe la difusión del cúmulo de portadores de carga en una dirección paralela al campo eléctrico E . En el experimento, solo es posible medir el coeficiente de difusión longitudinal D_L .

En un flujo unidimensional (como el que se considera en nuestro modelo), el número de partículas que cruza una unidad de área por unidad de tiempo es

$$\vec{j}_i = -D \frac{\partial \rho_i}{\partial x} \quad (2.16)$$

donde \vec{j} esta dado por

$$\vec{j}_i = \rho_i v_i^d \quad (2.17)$$

donde v_i^d es la velocidad de difusión, la cual esta dada por

$$v_i^d = -\frac{D}{\rho_i} \frac{\partial \rho_i}{\partial x} \quad (2.18)$$

Las definiciones dadas en la ecuaciones 2.16 a 2.18 son importantes y se emplearán en la sección 3.2 donde se detallan las ecuaciones de continuidad para los portadores de carga.

2.3. Solución analítica al problema y su uso en la obtención de datos relevantes del plasma

Las investigaciones teóricas son importantes para la comprensión y el modelado de los diferentes fenómenos que ocurren en los gases ionizados. Existen dos formas de atacar este tipo de fenómenos, los cuales son mediante una descripción microscópica (en la cual se tiene a la Ecuación de Boltzmann, y la Simulación de Monte Carlo, donde es necesario conocer secciones eficaces de dispersión), o mediante una descripción macroscópica (en la cual se aplican las leyes de la hidrodinámica). Este último punto de vista presupone que el sistema puede ser descrito por un conjunto de parámetros macroscópicos, como pudieran ser la presión, temperatura, densidad, difusión, los coeficientes de ionización, captura, estabilización y despojo, etc.

Descripción microscópica

La forma en que un plasma se comporta, se puede inferir, en principio, de las interacciones de todas las partículas. Evidentemente este procedimiento, que proporcionaría lo que se conoce como la teoría cinética del estado de plasma, es

muy difícil de llevar a cabo, dada la gran cantidad de partículas que componen al plasma. Sin embargo, es posible realizar el estudio del comportamiento de las partículas que conforman el plasma contenidas en el seno de un campo eléctrico, usando los métodos estadísticos (Ecuación de Boltzmann) que el físico austriaco Ludwig Eduard Boltzmann desarrolló para los átomos en movimiento aleatorio que componen un gas.

Otra manera de describir el comportamiento macroscópico (a gran escala) del plasma es mediante el uso de la teoría estadística, calculando las probabilidades de que el plasma se encuentre en diversos estados en el nivel microscópico, determinados por las posiciones y las velocidades de todas las partículas. Las características macroscópicas (mensurables) del plasma, como su presión, temperatura, densidad y los campos electromagnéticos en su seno se derivan estadísticamente a partir de esta descripción microscópica. Esta descripción, aunque parte de primeros principios es irrealizable en la práctica en fenómenos que, como en el presente caso, se encuentran en el dominio de la termodinámica fuera del equilibrio.

Descripción macroscópica

En muchas ocasiones el comportamiento del plasma puede considerarse como el de un fluido y entonces se le aplican las leyes de la hidrodinámica. Así las características macroscópicas como la presión, temperatura y densidad, los coeficientes de ionización, captura, etc, se tratan de manera directa, sin ningún contexto microscópico estadístico de partículas en movimiento o de sus interacciones. Este planteamiento presupone que el sistema puede ser descrito por un conjunto reducido de parámetros macroscópicos como los coeficientes de ionización, captura, etc, y un grupo de ecuaciones diferenciales. Esta descripción nos provee una adecuada relación entre los procesos colisionales involucrados y la evolución temporal de la distribución de carga.

Es posible verificar la validez del modelo macroscópico mediante la comparación de sus predicciones con los transitorios medidos experimentalmente.

Este es el enfoque que se sigue en el presente trabajo. Antes de presentar las novedades y contribución original de este trabajo, es conveniente revisar los antecedentes de métodos analíticos que han sido presentados en el pasado por grupos involucrados en el estudio de plasmas débilmente ionizados. Una vez que presentemos estos antecedentes, y sus limitaciones, describiremos con detalle el modelo matemático propuesto.

Dichos trabajos teóricos, mediante una descripción macroscópica del fenómeno, dieron como resultado una serie de ecuaciones para el cálculo de la corriente originada por los transitorios electrónicos e iónicos. En éste tratamiento, el fenómeno se expresa teóricamente con ecuaciones de continuidad, en la que los procesos están caracterizados por coeficientes macroscópicos. En las siguientes subsecciones se presentan algunos de los resultados analíticos más generales que describen transitorios (electrónicos e iónicos) en el dispositivo pulsado de Townsend.

2.3.1. Transitorio electrónico

En presencia de difusión, ionización y captura, el comportamiento temporal de la corriente electrónica que fluye entre las placas es descrita por la siguiente expresión [1]

$$I_e(t) = \frac{n_0 q_0}{2T_e} \exp(\alpha_e v_e t) \left\{ \left[1 - \Phi \left(\frac{(v_e + \alpha_e D_L)t - d}{\sqrt{4D_L t}} \right) \right] + \exp \left(\frac{v_e + \alpha_e D_L}{D_L} d \right) \left(\Phi \left(\frac{(v_e + \alpha_e D_L)t + d}{\sqrt{4D_L t}} \right) - 1 \right) \right\} \quad (2.19)$$

donde n_0 es el número de fotoelectrones liberados del cátodo, q_0 es la carga del electrón, d es el espaciamiento entre placas, $T_e = \frac{d}{v_e}$ es el tiempo de tránsito electrónico, $\alpha_e = \alpha - \eta$ es el coeficiente efectivo de ionización, D_L es el coeficiente de difusión longitudinal de los electrones, y por último

$$\Phi(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^x \exp(-u^2) du$$

es la función error de argumento x . La Ec.2.20 fue obtenida bajo la suposición de una liberación simultánea de fotoelectrones al tiempo $t = 0$. A esta condición se le denominará "pulso delta de Dirac" en el resto del texto.

Cuando la difusión es tan pequeña que se puede despreciar, la Ec.2.20 se reduce a:

$$I_e(t) = \begin{cases} \frac{n_0 q_0}{T_e} \exp(\alpha_e v_e t) & 0 \leq t \leq T_e \\ 0 & t \geq T_e \end{cases} \quad (2.20)$$

2.3.2. Transitorio iónico positivo

Se puede probar que la corriente iónica positiva I_+ , está dada por la siguiente expresión [2].

$$I_+(t) = \frac{n_0 q_0}{2T_+} \frac{\alpha}{\alpha_e} \left\{ \exp(\alpha_e d) [\Phi(\mu_1) - \Phi(\mu_1 - \mu_2)] - \Phi(\mu_1 + \mu_2) + \Phi(\mu_1) - \left(1 + \frac{\alpha_e D_+}{v_+} \right) \exp(\alpha_e^2 D_+ t + \alpha_e v_+ t) \times \{ \exp(\alpha_e d) [\Phi(\mu_1 + \mu_3) - \Phi(\mu_1 + \mu_2 + \mu_3)] - \Phi(\mu_1 - \mu_2 + \mu_3) + \Phi(\mu_1 + \mu_3) \} \right\} \quad (2.21)$$

donde el coeficiente μ corresponde a:

$$\begin{aligned}\mu_1 &= \frac{v_+ t}{\sqrt{4D_+ t}} \\ \mu_2 &= \frac{d}{\sqrt{4D_+ t}} \\ \mu_3 &= \frac{2\alpha_e D_+ t}{\sqrt{4D_+ t}}\end{aligned}$$

2.3.3. Transitorio iónico negativo

Del mismo modo existe una expresión para la corriente iónica negativa I_- , la cual está dada por [2]

$$\begin{aligned}I_-(t) &= \frac{n_0 q_0}{2T_n} [\exp(\alpha_e d) [\Phi(\nu_1 + \nu_2) - \Phi(\nu_1)] + \Phi(\nu_1 - \nu_2) \\ &\quad - \Phi(\nu_1) + \left(1 - \frac{\alpha_e D_n}{v_n}\right) \exp(\alpha_e^2 D_n t - \alpha_e v_n t) \{ \exp(\alpha_e d) \\ &\quad \times [\Phi(\nu_1 - \nu_3) - \Phi(\nu_1 - \nu_2 - \nu_3)] + \Phi(\nu_1 - \nu_3) - \Phi(\nu_1 + \nu_2 - \nu_3) \}]\end{aligned}\quad (2.22)$$

donde

$$\begin{aligned}\nu_1 &= \frac{v_n t}{\sqrt{4D_n t}} \\ \nu_2 &= \frac{d}{\sqrt{4D_n t}} \\ \nu_3 &= \frac{2\alpha_e D_n t}{\sqrt{4D_n t}}\end{aligned}$$

2.3.4. Obtención experimental de los coeficientes de ionización y captura

Con el uso adecuado de los resultados analíticos (que describen el comportamiento espacio-temporal de la corriente originada por cada uno de los portadores de carga), es posible inferir las propiedades de transporte y los coeficientes de ionización y captura del gas que se este estudiando. Si hay algunos metodos analíticos que consideran el desprendimiento electrónico. En general, están limitados al primero o segundo tránsito electrónico, o bien, son terriblemente complejos para evaluar la densidad de los electrones durante la evolución del tránsito iónico. Peor aún, la densidad de los iones depende de los electrones, al menos como una integral, pero si hay desprendimiento, las ecuaciones están acopladas, y entonces la solución analítica se torna prácticamente imposible. Es importante mencionar esto, por que el nuevo modelo propuesto sí nos permite el cálculo de dichos coeficientes desprendimiento y estabilización electrónico.

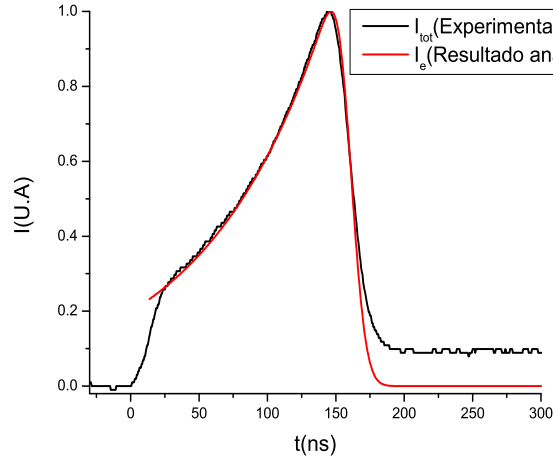


Figura 2.3: Un ejemplo de transitorio electrónico para CF_3I , y el ajuste analítico Ec.2.20. Para este caso $\frac{E}{N} = 445Td$, $p = 9,888\text{torr}$, y $d = 3,1\text{cm}$.

La velocidad de deriva de la nube electrónica v_e , se obtiene midiendo el tiempo transcurrido entre los extremos creciente y decreciente del pulso, ver Fig 2.3. Si se usa el ajuste de mínimos cuadrados en la parte creciente de la exponencial ($\alpha \geq \eta$) ó en la decreciente ($\alpha \leq \eta$), es posible calcular el coeficiente de ionización efectiva normalizado a la densidad $\frac{(\alpha-\eta)}{N}$. A partir de un mismo transitorio electrónico se obtienen simultáneamente v_e y $\frac{(\alpha-\eta)}{N}$. En la práctica se emplean programas de ajuste en los que el usuario modifica un parámetro para ajustar la curva experimental a la analítica. Estos programas han sido exitosos en casos donde el fenómeno de despojo se puede despreciar pero, desafortunadamente, en algunos casos este fenómeno sí está presente. La siguiente sección describe con mayor detalle las limitaciones de los métodos que precedieron a éste trabajo de tesis.

2.3.5. Limitaciones de los resultados analíticos

Si bien los desarrollos analíticos tienen muchos méritos y en ocasiones resultan de mucha utilidad (en nuestro caso estas expresiones nos ayudan a determinar los valores de los coeficientes de transporte, ionización y captura para un gas o mezcla de gases), estos no siempre dan una representación completa de la realidad. En nuestro caso particular, las Ecs 2.20, 2.22, 2.23 no describen la gama completa de fenómenos que ocurren en el plasma. Algunos de los principales inconvenientes de los resultados analíticos son:

- Las expresiones analíticas no son cómodas de manejar.

- Suponen una emisión tipo delta de Dirac de fotoelectrones y omiten el efecto real de un pulso láser con duración que, aunque es corta, es finita.
- No consideran la estabilización para iones negativos inestables.
- No consideran el desprendimiento electrónico.

Las ventajas del modelo propuesto, sus puntos fuertes, lo que le confiere mayor utilidad que los resultados analíticos, es que este es capaz de considerar:

- Una emisión más realista, como la producida por un pulso láser UV.
- Difusión de electrones e iones.
- Ionización por impacto electrónico.
- Estabilización para iones negativos.
- Conversión para iones negativos.
- Posibilidad de extender el modelo para incluir otros fenómenos como la ionización Penning y el fotodespojo.

Algunos de estos efectos resultan extremadamente difíciles de incluir en cálculos analíticos; y la consideración simultánea de dos o más de dichos efectos resulta prácticamente imposible. Nuestro método permite incluir dos o más fenómenos sin que esto represente un problema fundamental para los cálculos.

Capítulo 3

El modelo matemático

3.1. Las características del modelo

Con el propósito de obtener los parámetros que nos permitan caracterizar las avalanchas electrónicas e iónicas observadas, mediante la medición de la corriente originada por los portadores electrónicos e iónicos, es necesario desarrollar un modelo analítico, el cual describa adecuadamente los procesos esenciales. Empleando este modelo, es posible entonces ajustar transitorios experimentales y obtener los parámetros de enjambre incluidos en éste.

En la evolución espacio-temporal de la avalancha, el modelo considera cuatro especies de portadores de carga, además de las moléculas neutras; ver Fig. 3.1. Estas especies se identifican con los siguientes subíndices, para electrones (e), para iones positivos (p), para iones negativos estables (ns), y para los iones negativos inestables (nu). Cada una de estas especies puede ser producida mediante varios de los múltiples procesos que ocurren en el plasma.

Los procesos considerados en el presente trabajo son los siguientes:

- Emisión fotoeléctrica(en el cátodo)
- Ionización por impacto electrónico α
- Captura electrónica η
- Desprendimiento electrónico δ
- Estabilización de iones negativos formados originalmente en niveles excitados inestables σ
- Movilidad iónica y electrónica.

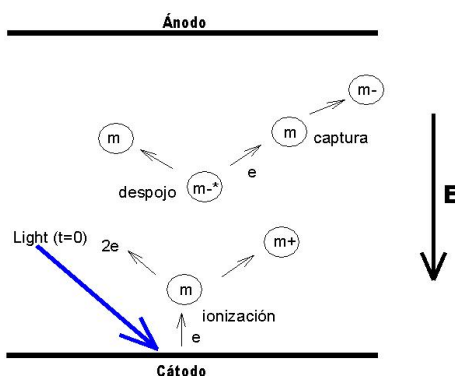


Figura 3.1: En esta figura se ilustran las cuatro especies de portadores de carga considerados en nuestro modelo

3.2. Las ecuaciones de continuidad para los portadores de carga

En este trabajo, nuestro modelo es representado por un grupo de ecuaciones diferenciales parciales (ecuaciones de continuidad, las cuales nos dan una descripción espacio-temporal de la densidad de carga electrónica e iónica en el gas), y las correspondientes condiciones iniciales y de frontera. Una vez que la solución a dichas ecuaciones ha sido obtenida, es posible llevar a cabo el cálculo de la avalancha.

Siendo N_k el número de portadores de carga del k -ésimo tipo contenidos en un volumen dado v , entonces podemos escribir la densidad de portadores de carga del k -ésimo portador ρ_k de la siguiente manera

$$\rho_k = \frac{N_k}{v}$$

La densidad de corriente para el i -ésimo portador de carga es representada por \vec{j}_i . Nuestro punto de partida es la ecuación de continuidad, la cual contiene el término $\Psi(x, y, z, t)$ que corresponde a una fuente o sumidero de partículas (esto es, la creación o aniquilación de portadores de carga debida a las interacciones que se originan en el plasma). En la Ec 3.1 están contemplados los cuatro tipos de portadores de carga ($i = e, nu, ns, p$).

Cuadro 3.1: Matriz de coeficientes $a_{i,k}$

$k \setminus i$	1	2	3	4
1	$\alpha - \eta$	η	0	α
2	δ	$-(\delta + \sigma)$	σ	0
3	0	0	0	0
4	0	0	0	0

$$\frac{\partial \rho_i}{\partial t} + \nabla \cdot \vec{j}_i = \Psi(x, y, z, t) \quad (3.1)$$

La ecuación general de continuidad para cada uno de los portadores de carga es

$$\frac{\partial \rho_i}{\partial t} + \nabla \cdot \vec{j}_i = \sum_{k=1}^{n_e} a_{i,k} \vec{j}_k \quad (3.2)$$

donde $n_e = 4$ es el número de especies consideradas, y $a_{i,k}$ representa el número de portadores de carga de la especie i -ésima, creadas o destruidas por efecto de la especie k -ésima por unidad de longitud en la dirección del campo eléctrico.

En la matriz de coeficientes $a_{i,k}$ de la Tabla 3.1, esta contenida la información sobre las interacciones entre los diferentes portadores de carga, que se identifican con números, para los electrones(1), iones negativos inestables(2), iones negativos estables(3), iones positivos(4).

Para los iones positivos, es posible simplificar la expresión si consideramos que la única contribución a la corriente de iones positivos se debe a la ionización; entonces de la Ec 3.2 tenemos que

$$\frac{\partial \rho_p}{\partial t} + \nabla \cdot \vec{j}_p = \alpha \vec{j}_e \quad (3.3)$$

Para modelar los fenómenos de transporte que ocurren en el experimento, es indispensable contemplar tanto la movilidad originada por el campo eléctrico E como la difusión. Usando la Ec 2.18 tenemos que la densidad de corriente originada por el portador de carga del i -ésimo tipo esta dada por

$$\vec{j}_i = v_i \rho_i - D_i \frac{\partial \rho_i}{\partial x} \quad (3.4)$$

donde D_i es el coeficiente de difusión, y ρ_i representa el número de portadores de carga de la especie i , por unidad de volumen.

De la ecuación 3.4 tenemos que

$$\text{div}(j_i) = v_i \frac{\partial \rho_i}{\partial x} - D_i \frac{\partial^2 \rho_i}{\partial x^2}$$

$$\frac{\partial \rho_i}{\partial t} + v_i \frac{\partial \rho_i}{\partial x} = D_i \frac{\partial^2 \rho_i}{\partial x^2} + \sum_{k=1}^{n_e} a_{i,k} \left(v_k \rho_k - D_k \frac{\partial \rho_k}{\partial x} \right) \quad (3.5)$$

De la ecuación 3.5, y de la Tabla 3.1 se hace la derivación de la ecuación de continuidad para cada uno de los portadores de carga.

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho_e}{\partial t} = D_e \frac{\partial^2 \rho_e}{\partial x^2} - [v_e - (\alpha - \eta) D_e] \frac{\partial \rho_e}{\partial x} + (\alpha - \eta) v_e \rho_e \\ + \delta \left(v_{nu} \rho_{nu} - D_{nu} \frac{\partial \rho_{nu}}{\partial x} \right) \end{aligned} \quad (3.6)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho_{nu}}{\partial t} = D_{nu} \frac{\partial^2 \rho_{nu}}{\partial x^2} - [v_{nu} - (\delta + \sigma) D_{nu}] \frac{\partial \rho_{nu}}{\partial x} - (\delta + \sigma) v_{nu} \rho_{nu} \\ + \eta \left(v_e \rho_e - D_e \frac{\partial \rho_e}{\partial x} \right) \end{aligned} \quad (3.7)$$

$$\frac{\partial \rho_{ns}}{\partial t} = D_{ns} \frac{\partial^2 \rho_{ns}}{\partial x^2} - v_{ns} \frac{\partial \rho_{ns}}{\partial x} + \sigma v_{nu} \rho_{nu} - \sigma D_{nu} \frac{\partial \rho_{nu}}{\partial x} \quad (3.8)$$

$$\frac{\partial \rho_p}{\partial t} = D_p \frac{\partial^2 \rho_p}{\partial x^2} + v_p \frac{\partial \rho_p}{\partial x} + \alpha \left(v_e \rho_e - D_e \frac{\partial \rho_e}{\partial x} \right) \quad (3.9)$$

3.3. Esquema para el método

3.3.1. Diagrama de partición de la brecha

El bosquejo que se muestra en la Fig 3.2 es de gran utilidad por mostrar el significado de algunas variables muy utilizadas en nuestro modelo, como se verá en el siguiente capítulo.

En el resto del siguiente párrafo, N representará el número de particiones espaciales.

A lo largo del espaciamiento entre las placas, existen N nodos, los cuales dividen la región en $N - 1$ discos de ancho h .

$$h = \frac{d}{N} \quad (3.10)$$

La distancia a lo largo del espaciamiento entre placas esta expresada por $x = ih$ ($i = 0, \dots, N + 1$)

El tiempo es dividido en intervalos temporales de duración τ , por lo cual tenemos que

$$t = j\tau \quad (j = 0, \dots, M)$$

La solución por medio del método de diferencias finitas empieza igualando j a 0, de modo que todos los valores de f en éste nivel temporal están dados

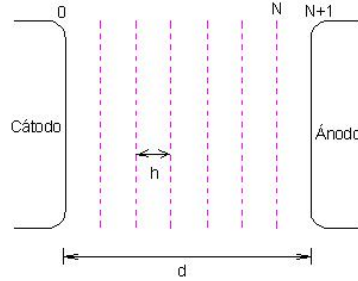


Figura 3.2: Diagrama de la brecha entre las placas metálicas

por las condiciones iniciales(CI). Posteriormente, en el siguiente paso temporal se buscan soluciones para f en los puntos $j = 1$ a $j = M - 1$; las soluciones en los puntos 0 y M están dadas por las condiciones de frontera(CF). En la Fig.3.3 se muestra un esquema de los pasos espaciales y temporales. La implementación de la solución numérica se discutirá con mayor detalle en el capítulo siguiente.

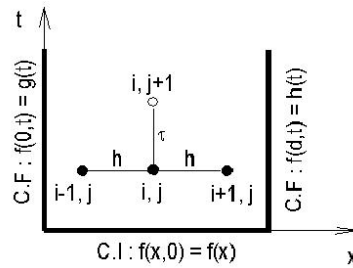


Figura 3.3: Esquema para el método de diferencias finitas

Capítulo 4

La solución numérica

4.1. La aproximación de diferencias finitas

Un método para abordar la diferenciación numérica, necesaria para resolver las ecuaciones presentadas en el capítulo anterior, es obtener una aproximación de una derivada directamente en términos de los valores de la función. La expresión resultante para la aproximación se denomina *fórmula de diferencia*. Tales formulas son especialmente útiles para resolver ecuaciones diferenciales y se pueden obtener directamente a partir de la serie de Taylor.

A continuación se usa el método de la serie de Taylor para obtener la diferenciación numérica [3]. Esto se hará con el fin de obtener las relaciones de recurrencia necesarias para implementar la solución numérica del modelo presentado en el capítulo anterior.

Consideremos la deducción de la aproximación de diferencias finitas para $f_{i+1} = f(x_{i+1})$ en términos de $f_i = f(x_i)$.

La expansión de Taylor para f_{i+1} alrededor de x_i es

$$f_{i+1} = f_i + hf_i^I + \frac{h^2}{2!}f_i^{II} + \dots + R_n \quad (4.1)$$

Resolviendo la ecuación anterior para la primera derivada, tenemos

$$f_i^I = \frac{f_{i+1} - f_i}{h} - \frac{h}{2}f_i^{II} - R_n(o^2) \quad (4.2)$$

Si ignoramos todos los términos con excepción del primero del miembro derecho de la Ec 4.2, tendremos la aproximación por diferencia *hacia adelante*.

Los términos que se ignoran constituyen el *error por truncamiento*, $-\frac{hf_i^{II}}{2} - R_n(o^2)$ al que suele representársele solo por el término inicial $-\frac{hf_i^{II}}{2}$.

La aproximación de diferencia hacia adelante, con el error de truncado incluido, se expresa como

$$f_i^I = \frac{f_{i+1} - f_i}{h} + E \quad (4.3)$$

donde $E = -\frac{hf_i^{II}}{2}$.

De la misma manera podemos expandir f_{i-1} al rededor de x_i en la forma

$$f_{i-1} = f_i - hf_i^I + \frac{h^2}{2!}f_i^{II} + \dots + R_n \quad (4.4)$$

y resolviendo para la primera derivada, tenemos

$$f_i^I = \frac{f_i - f_{i-1}}{h} + \frac{h}{2!}f_i^{II} - R_n(o^2) \quad (4.5)$$

y aquí, de la misma manera

$$f_i^I = \frac{f_i - f_{i-1}}{h} + E \quad (4.6)$$

donde $E = \frac{hf_i^{II}}{2}$. Esta aproximación se denomina *diferencia hacia atrás*.

Tomemos ahora ambas aproximaciones y restemos 4.1 de 4.4

$$f_{i+1} - f_{i-1} = 2hf_i^I + \frac{h^3}{3}f_i^{II} + R \quad (4.7)$$

Resolviendo para f_i^I , obtenemos

$$f_i^I = \frac{f_{i+1} - f_{i-1}}{2h} - \frac{h^2}{6}f_i^{II} + R \quad (4.8)$$

Con el término de error incluido, la *aproximación de diferencia central* se expresa como

$$f_i^I = \frac{f_{i+1} - f_{i-1}}{2h} + E \quad (4.9)$$

donde $E = -\frac{h^2}{6}f_i^{II}$.

Las aproximaciones de diferencia para la segunda derivada se deducen aplicando el mismo principio.

En términos de f_i, f_{i-1}, f_{i+1} , la aproximación de diferencia para f_i^{II} queda de la forma

$$f_i^{II} = \frac{f_{i+1} + f_{i-1} - 2f_i}{h^2} + E \quad (4.10)$$

donde $E = -\frac{h^2f_i^{IV}}{12}$.

Es posible deducir otra aproximación de diferencia para f_i^{II} en términos de f_i, f_{i-1}, f_{i-2} . La cual queda de la forma

$$f_i^{II} = \frac{f_{i-2} + f_i - 2f_{i-1}}{h^2} + E \quad (4.11)$$

donde $E = hf_i^{III}$.

Para los procedimientos subsecuentes es necesario un cambio de notación; ahora los superíndices hacen referencia al tipo de portador de carga $\rho_l \rightarrow f_{i,j}^l$,

los subíndices i hacen referencia a las particiones espaciales, y los subíndices j a las temporales.

Para dar solución al sistema de ecuaciones diferenciales, es necesario elaborar una aproximación a las derivadas espaciales y temporales. Usando la aproximación de diferencias finitas y con un cambio de notación, las derivadas parciales se formulan de la siguiente manera

$$\begin{aligned}\frac{\partial f}{\partial t} &\approx \frac{f_{i,j} - f_{i,j-1}}{\tau} \\ \frac{\partial f}{\partial x} &\approx \begin{cases} \frac{f_{i,j-1} - f_{i-1,j-1}}{h} \\ \frac{f_{i+1,j-1} - f_{i,j-1}}{h} \end{cases} \\ \frac{\partial f}{\partial x} &\approx \begin{cases} \frac{1}{h^2} [f_{i,j-1} - 2f_{i-1,j-1} + f_{i-2,j-1}] \\ \frac{1}{h^2} [f_{i+1,j-1} - 2f_{i,j-1} + f_{i-1,j-1}] \end{cases}\end{aligned}$$

Considérese la fórmula de diferencia hacia adelante Ec 4.3, en la cual se tiene

$$f_i^I = \frac{f_{i+1} - f_i}{h} + E$$

donde el error en la aproximación es $E = -\frac{hf_i^{II}}{2}$. Este tipo de error se denomina *error por truncamiento* porque es provocado por el truncamiento de la serie de Taylor.

La precisión finita de las máquinas produce otro error denominado *error por redondeo*. Este error aparece en el cálculo del término $[f_{i+1} - f_i]$ en el numerador de la aproximación.

Resulta evidente que el error por truncamiento E disminuye con h ; al mismo tiempo el error por redondeo aumenta. En general, los errores en la aproximación a df/dx son dominados por el error por truncamiento para valores grandes de h , y por el error por redondeo para valores pequeños de h .

En la siguiente sección, se aplicarán las expresiones obtenidas para la derivación numérica a la solución de la ecuación de continuidad para cada uno de los portadores de carga.

4.2. Derivación de la ecuación de recurrencia para electrones e iones negativos

Nuestra ecuación de partida es la ecuación general de continuidad para electrones e iones (Ec.3.2), a saber

$$\frac{\partial f^i}{\partial t} + \nabla \cdot \vec{j}_i = \sum_{k=1}^{n_e} a_{i,k} \vec{j}_k$$

Es necesario tomar en cuenta la dirección del movimiento de los portadores de carga; electrones e iones negativos se mueven en la dirección del campo eléctrico externo aplicado, mientras que los iones positivos se mueven en la dirección contraria. Es por esto que para electrones e iones negativos v_i es positivo.

$$\begin{aligned} j_i &= v_i f^i - D_i \frac{\partial f^i}{\partial x} \quad \text{para } i = e, ns, nu \\ j_p &= -v_p f^p - D_p \frac{\partial f^p}{\partial x} \quad \text{para } i = p \end{aligned}$$

Cuando se efectua la sustitución de lo anterior en la ecuación general de continuidad (Ec.3.2) obtenemos la siguiente expresión

$$\frac{\partial f^i}{\partial t} + v_i \frac{\partial f^i}{\partial x} = D_i \frac{\partial^2 f^i}{\partial x^2} + \sum_{k=1}^{n_e} a_{i,k} \left(v_k \rho_k - D_k \frac{\partial f^k}{\partial x} \right) \quad (4.12)$$

Al sustituir las parciales de la Ec.4.12 por su aproximación de diferencias finitas, se obtiene lo siguiente

$$\begin{aligned} \frac{f_{i,j}^l - f_{i,j-1}^l}{\tau} &= -\frac{v_l}{h} [f_{i,j-1}^l - f_{i-1,j-1}^l] \\ &+ \frac{D_l}{h^2} [f_{i,j-1}^l - 2f_{i-1,j-1}^l + f_{i-2,j-1}^l] \\ &+ \sum_{k=1}^{n_e} a_{l,k} \left[v_k f_{i-1,j-1}^k - \frac{D_k}{h} (f_{i,j-1}^k - f_{i-1,j-1}^k) \right] \end{aligned} \quad (4.13)$$

Resolviendo para $f_{i,j}^l$ obtenemos

$$\begin{aligned} f_{i,j}^l &= f_{i,j-1}^l - v_l \frac{\tau}{h} [f_{i,j-1}^l - f_{i-1,j-1}^l] \\ &+ \frac{D_l \tau}{h^2} [f_{i,j-1}^l - 2f_{i-1,j-1}^l + f_{i-2,j-1}^l] \\ &+ \sum_{k=1}^{n_e} a_{l,k} \left[v_k \tau f_{i-1,j-1}^k - D_k \frac{\tau}{h} (f_{i,j-1}^k - f_{i-1,j-1}^k) \right] \end{aligned} \quad (4.14)$$

Si ahora introducimos la siguiente definición $v_0^{-1} \equiv \frac{\tau}{h}$, obtenemos

$$\begin{aligned} f_{i,j}^l &= f_{i,j-1}^l - \frac{v_l}{v_0} [f_{i,j-1}^l - f_{i-1,j-1}^l] \\ &+ \frac{D_l}{h v_0} [f_{i,j-1}^l - 2f_{i-1,j-1}^l + f_{i-2,j-1}^l] \\ &+ \sum_{k=1}^{n_e} a_{l,k} \left[v_k \tau f_{i-1,j-1}^k - \frac{D_k}{v_0} (f_{i,j-1}^k - f_{i-1,j-1}^k) \right] \end{aligned} \quad (4.15)$$

Como ya se mencionó anteriormente, $a_{i,k}$ representa el número de portadores de carga (para cada una de las cuatro especies $k = e, nu, ns, p$) creados o destruidos por unidad de longitud, por unidad de tiempo en la dirección del campo eléctrico.

La solución para electrones e iones negativos se puede reducir reagrupando algunos términos.

$$f_{i,j}^l = \left(1 - \frac{v_l}{v_0} + \frac{D_l}{hv_0}\right) f_{i,j-1}^l + \left(\frac{v_l}{v_0} - 2\frac{D_l}{hv_0}\right) f_{i-1,j-1}^l + \frac{D_l}{hv_0} f_{i-2,j-1}^k \quad (4.16)$$

$$+ \sum_{k=1}^{n_e} a_{l,k} \left[\left(v_k \tau + \frac{D_k}{v_0}\right) f_{i-1,j-1}^k - \frac{D_k}{v_0} f_{i,j-1}^k \right]$$

Esta es la expresión de recurrencia, adecuada para realizar cálculos numéricos para los portadores de carga negativos.

4.3. Derivación de la ecuación de recurrencia para iones positivos

Para los iones positivos, podemos simplificar la expresión si consideramos que la única contribución a la densidad de los iones positivos se debe a la ionización. Nuestro punto de partida es la Ec.3.3, a saber

$$\frac{\partial f^p}{\partial t} + \nabla \cdot \vec{j}_p = \alpha \vec{j}_e$$

donde

$$j_p = -v_p f^p - D_p \frac{\partial f^p}{\partial x}$$

$$j_e = v_e f^e - D_e \frac{\partial f^e}{\partial x}$$

$$\frac{\partial f^p}{\partial t} = v_p \frac{\partial f^p}{\partial x} + D_p \frac{\partial^2 f^p}{\partial x^2} + \alpha \left[v_e f^e - D_e \frac{\partial f^e}{\partial x} \right] \quad (4.17)$$

donde el superíndice p identifica a los iones positivos, e a los electrones, y α es el coeficiente de ionización.

Con la aproximación de diferencias finitas a las derivadas espaciales y temporales, la Ec.4.17 queda de la siguiente forma

$$\frac{f_{i,j}^p - f_{i,j-1}^p}{\tau} = \frac{v_p}{h} [f_{i+1,j-1}^p - f_{i,j-1}^p]$$

$$+ \frac{D_p}{h^2} [f_{i+1,j-1}^p - 2f_{i,j-1}^p + f_{i-1,j-1}^p] \quad (4.18)$$

$$+ \alpha \left[v_e f_{i-1,j-1}^e - \frac{D_e}{h} (f_{i,j-1}^e - f_{i-1,j-1}^e) \right]$$

Resolviendo para $f_{i,j}^p$

$$\begin{aligned}
f_{i,j}^p &= f_{i,j-1}^p + \frac{\tau v_p}{h} [f_{i+1,j-1}^p - f_{i,j-1}^p] \\
&+ \frac{D_p \tau}{h^2} [f_{i+1,j-1}^p - 2f_{i,j-1}^p + f_{i-1,j-1}^p] \\
&+ \alpha \tau \left[v_e f_{i-1,j-1}^e - \frac{D_e}{h} (f_{i,j-1}^e - f_{i-1,j-1}^e) \right]
\end{aligned} \tag{4.19}$$

Con $v_0^{-1} \equiv \frac{\tau}{h}$, la expresión anterior se puede reescribir como

$$\begin{aligned}
f_{i,j}^p &= f_{i,j-1}^p + \frac{v_p}{v_0} [f_{i+1,j-1}^p - f_{i,j-1}^p] \\
&+ \frac{D_p}{h v_0} [f_{i+1,j-1}^p - 2f_{i,j-1}^p + f_{i-1,j-1}^p] \\
&+ \alpha \left[v_e \tau f_{i-1,j-1}^e - \frac{D_e}{v_0} (f_{i,j-1}^e - f_{i-1,j-1}^e) \right]
\end{aligned} \tag{4.20}$$

Reagrupando terminos para simplificar la expresión

$$\begin{aligned}
f_{i,j}^p &= \left(1 - \frac{v_p}{v_0} - 2 \frac{D_p}{h v_0} \right) f_{i,j-1}^p + \left(\frac{v_p}{v_0} + \frac{D_p}{h v_0} f_{i+1,j-1}^e \right) \\
&+ \frac{D_p}{h v_0} f_{i-1,j-1}^p + \tau \alpha \left[\left(v_e + \frac{D_e}{h} \right) f_{i-1,j-1}^e - \frac{D_e}{h} f_{i,j-1}^e \right]
\end{aligned} \tag{4.21}$$

Esta es la expresión de recurrencia que se emplea en la solución numérica con respecto a la contribución de los portadores de carga positivos.

4.4. Condiciones de frontera

En este trabajo, son dos los tipos de condiciones de frontera impuestas a la densidad de portadores de carga: el pulso de Dirac y un pulso más realista, que modela el pulso corto, pero de duración finita, producido por el láser que genera la laminilla inicial de electrones.

4.4.1. Pulso delta de Dirac

En este caso se supone una liberación simultánea de los fotoelectrones en el cátodo; esta suposición no es muy realista dado que los efectos del ancho del pulso inicial pueden tener un efecto apreciable en la medición de las velocidades de deriva, especialmente para pulsos de corta duración temporal. Esta condición de frontera que modela el pulso delta de Dirac, esta representada por la Ec 4.22. A pesar de no ser una descripción muy realista, produce resultados bastante aceptables y permite la comparación con soluciones analíticas. Sin embargo, si

uno requiere mayor precisión en la evaluación de velocidades, e necesario incluir un mejor modelo para el pulso inicial.

$$f(0, t) = \begin{cases} 1 & t \leq 1,0 \times 10^{-12} \text{s} \\ 0 & t \geq 1,0 \times 10^{-12} \text{s} \end{cases} \quad f(d, t) = 0$$

4.4.2. Pulso láser

En nuestro arreglo experimental, la fuente de luz es un pulso láser de corta duración (usualmente de 5ns) producido por un láser Nd:YAG, como se describió en la sección 2.2. La forma temporal de dicho pulso puede ser representada por una función semejante a la distribución de Maxwell para velocidades, por lo cual la densidad de fotoelectrones liberados del cátodo al tiempo cero, tendrá la misma forma.

$$f(0, t) = a \left(\frac{t}{T_0} \right)^2 e^{-\left(\frac{t}{T_0}\right)^2} \quad f(d, t) = 0 \quad (4.22)$$

donde a es un factor de normalización adimensional, y T_0 es el tiempo al cual la curva alcanza su máximo. Este tipo de distribución temporal se puede determinar experimentalmente empleando un osciloscopio rápido.

4.5. El cálculo numérico del transitorio

Una vez que $f^l(l = e, nu, ns, p)$ ha sido calculado para un determinado nodo temporal $t = j\tau$ ($j = 1, 2, \dots, M$), la corriente i_l originada por la especie l al tiempo $t = j\tau$ esta dada por la suma de la contribución de cada uno de los nodos espaciales.

$$i_j^l = \frac{e}{T_l} n_j^l$$

donde T_l es el tiempo de tránsito para la especie l , y n_j^l es el número total de portadores de carga del tipo l presentes en todo lo largo de la brecha entre placas al tiempo $t = j\tau$, y esta dado por

$$n_j^l = \sum_{i=0}^N f_{i,j}^l$$

con lo cual tenemos que

$$i_j^l = \frac{e}{T_l} \sum_{i=0}^N f_{i,j}^l \quad (4.23)$$

La corriente total, medida en el circuito de nuestro dispositivo experimental al tiempo $t = j\tau$, es la debida a la contribución de todos los portadores de carga.

$$I_j^{total} = \sum_{l=1}^4 I_j^l \quad (4.24)$$

Ésta es la expresión para la corriente que se calcula, finalmente, con nuestro modelo. La comparación entre la corriente calculada para los distintos portadores de carga, con respecto a las corrientes medidas es el tema del siguiente capítulo.

Capítulo 5

Resultados y comparaciones

En la siguiente sección se presentan algunos ejemplos del cálculo numérico, los cuales tienen como propósito mostrar su efecto sobre la corriente total los diferentes procesos colisionales que ocurren en el transitorio. Posteriormente se exponen algunos ejemplos de ajuste a los transitorios electrónicos experimentales. Lo anterior se hace con el fin de exhibir las fortalezas y debilidades de nuestro modelo matemático. Las conclusiones de dicha comparación además de una discusión final sobre el presente trabajo se expondrán en el siguiente capítulo.

5.1. Ejemplos del cálculo

5.1.1. Un transitorio completo

En este, nuestro primer ejemplo de cálculo, se presenta un transitorio completo en el cual se pueden apreciar: la corriente de electrones I_e , la corriente de iones negativos I_n (en la cual están contenidos los iones negativos estables e inestables), la corriente de iones positivos I_p , y la corriente total I_{tot} que es la resultante de todas las anteriores. En nuestras mediciones experimentales, es la corriente total I_{tot} la que es posible medir experimentalmente dado que el método pulsado de Townsend no nos permite diferenciar entre un portador de carga y otro.

Como se puede advertir en la Fig 5.1, la corriente de iones positivos I_p tiene un tiempo de tránsito mucho más grande que los demás portadores de carga; lo cual se debe a que los iones positivos son mucho más masivos que los otros portadores. Por ejemplo, la relación de masas entre el protón y el electrón es de 1836 a 1. La Fig 5.2 nos muestra un acercamiento para distinguir el comportamiento de la corriente originada por cada uno de los portadores de carga.

Algunos de los datos de entrada al programa son comunes en toda la serie de ejemplos de esta sección; estos datos son los siguientes: $d = 3,1cm$. $p = 10,00torr$. $h = 0,007750cm$. $\tau = 0,3875 \times 10^{-9}s$. y $N = 400$.

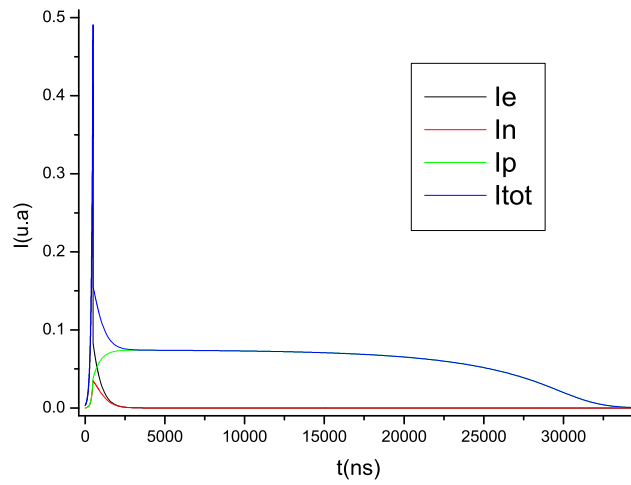


Figura 5.1: Transitorio completo, en el cual se muestran todos los potadores de carga. Los datos de entrada al programa son: $\frac{\alpha}{p}=0.92 \frac{1}{\text{cm torr}}$, $\frac{\eta}{p}=0.77 \frac{1}{\text{cm torr}}$, $\frac{\delta}{p}=0.103 \frac{1}{\text{cm torr}}$, $\frac{\sigma}{p}=2.00 \frac{1}{\text{cm torr}}$, y el pulso inicial esta modelado por un pulso delta.

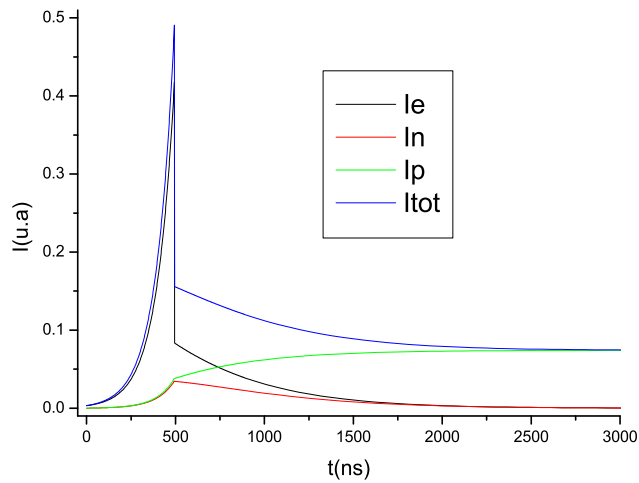


Figura 5.2: Un acercamiento a la Fig 5.1 para distinguir la evolución temporal de la corriente originada por cada uno de los portadores de carga.

5.1.2. El efecto del pulso láser

El efecto del pulso láser se manifiesta principalmente durante el primer transito electrónico. La nube de fotoelectrones no es instantáneamente liberada de cátodo dado que el pulso láser tiene una duración finita. La forma de dicho pulso es representada por una función semejante a la distribución de Maxwell para velocidades, con un tiempo T_0 en el cual la curva alcanza su máximo.

En la Fig 5.3 se muestra el efecto que tienen pulsos láser con diferente T_0 sobre un transitorio electrónico. El efecto de pulso láser puede ser fácilmente confundido con la difusión, por lo cual, en esta serie de cálculos $D_L=0.00\text{cm}^2/\text{s}$. En la Fig 5.3 se observa que para $T_0 = 1\text{ns}$ el pulso láser es semejante al pulso delta de Dirac.

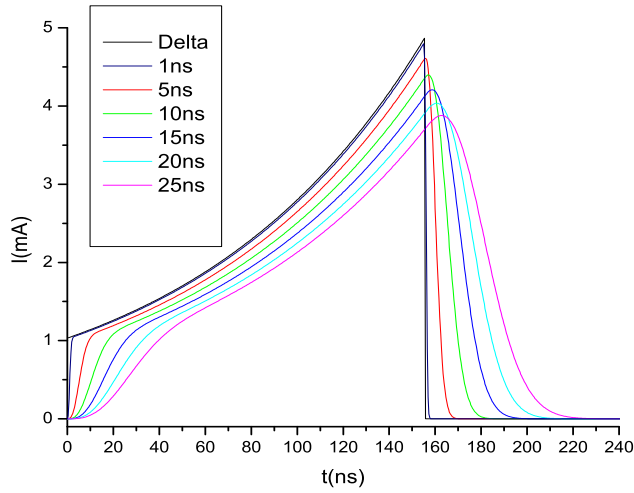


Figura 5.3: Con esta figura se ilustra el efecto que tiene sobre el transitorio electrónico un pulsos láser de diferente duración. En esta corrida, los datos que alimentan el programa son: $\frac{\alpha}{p}=3.00\frac{1}{\text{cm torr}}$, $\frac{\eta}{p}=2.95\frac{1}{\text{cm torr}}$, $D_L=0.00\text{cm}^2/\text{s}$.

5.1.3. El efecto de la difusión

A continuación se presenta el efecto de la difusión electrónica para tres situaciones diferentes, estas situaciones son las siguientes: $\frac{\alpha}{p} - \frac{\eta}{p}$ es menor que cero (ver Fig 5.4), $\frac{\alpha}{p} - \frac{\eta}{p}$ mayor que cero (ver Fig 5.6), y $\frac{\alpha}{p} - \frac{\eta}{p}$ igual a cero (ver Fig 5.7). En cada una de estas situaciones, el efecto de difusión se manifiesta como ese remanente de corriente después del tiempo de transito electrónico $T_e = \frac{d}{v_e}$. En cada uno de estos casos se usa un pulso delta de Dirac para evitar confundir la difusión con el efecto producido por el ancho finito de un pulso láser.

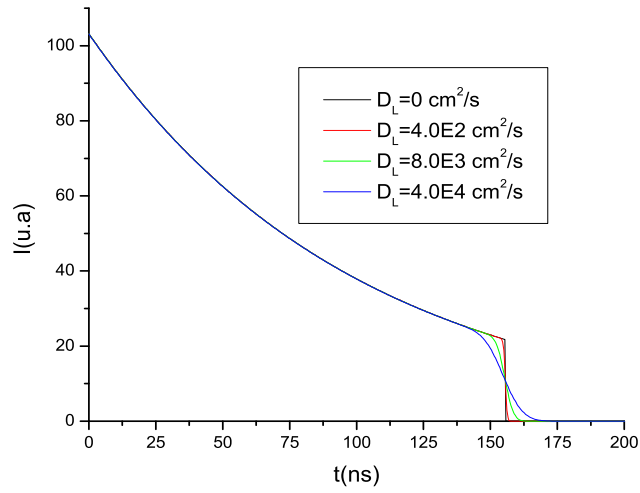


Figura 5.4: Transitorio electrónico que ilustra el efecto de diferentes valores de difusión cuando existen más procesos de captura que de ionización $\frac{\alpha}{p} - \frac{\eta}{p} = 0.1 \frac{1}{\text{cm torr}}$, el pulso láser es modelado por una delta de Dirac para hacer más claro el ejemplo.

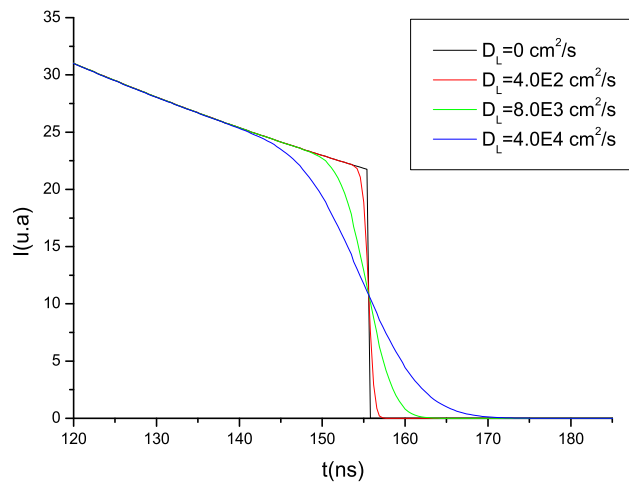


Figura 5.5: Un acercamiento a la Fig 5.4 para apreciar mejor el efecto de la difusión

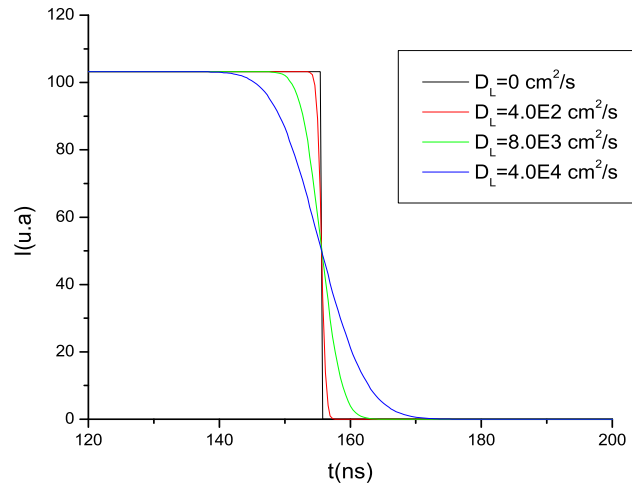


Figura 5.6: Transitorio electrónico que muestra el efecto de la difusión cuando existen igual número procesos de captura que de ionización $\frac{\alpha}{p} - \frac{\eta}{p} = 0.00 \frac{1}{cm \text{ torr}}$, el pulso láser es modelado por una delta de Dirac.

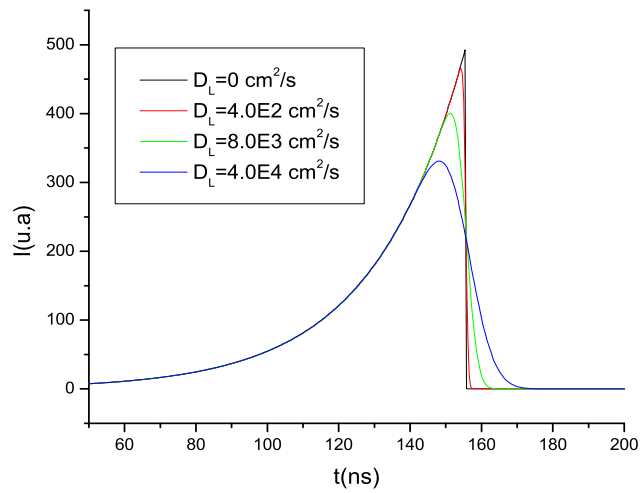


Figura 5.7: Transitorio electrónico que muestra el efecto de la difusión cuando existen un mayor número procesos de ionización que de captura $\frac{\alpha}{p} - \frac{\eta}{p} = 0.20 \frac{1}{cm \text{ torr}}$, el pulso láser es modelado por una delta de Dirac.

5.1.4. El efecto del auto despojo

Los iones negativos inestables, en su viaje a través de la brecha, pueden sufrir un proceso de estabilización ó, espontáneamente, liberar el electrón capturado. Si esto último es lo que sucede, entonces se tiene una contribución a la corriente electrónica. La tasa de procesos de despojo varía según la naturaleza del gas que se examine. Como se mencionó anteriormente existen varios tipos de procesos de despojo. Sin embargo en el presente trabajo sólo se considera el auto despojo. Para ilustrar la capacidad del modelo para simular efectos de autodespojo, se muestra a continuación una sucesión de corridas con diferentes tasas (valores de δ) de procesos de auto despojo.

En la Fig 5.8 se muestra el transitorio electrónico completo, en la Fig 5.9 se muestra el efecto del auto despojo para tiempos menores al primer transitorio electrónico T_e , y en la Fig 5.10 se muestra el efecto del auto despojo para tiempos mayores al primer tránsito electrónico.

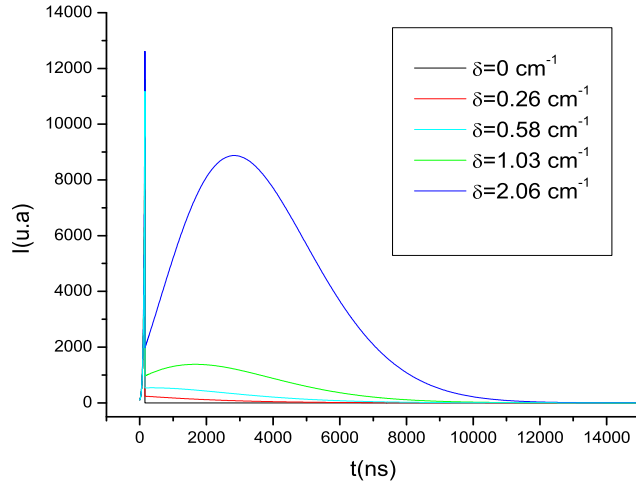


Figura 5.8: Transitorios electrónicos, en los cuales los diferentes valores de δ , nos muestran la contribución a la corriente electrónica debida al proceso de autodespojo de los iones negativos inestables. Los datos de entrada para este cómputo son: $\frac{\alpha}{p}=0.920 \frac{1}{\text{cm torr}}$, $\frac{\eta}{p}=0.770 \frac{1}{\text{cm torr}}$, $\frac{\sigma}{p}=0.282 \frac{1}{\text{cm torr}}$, y el pulso láser es modelado por una delta de Dirac

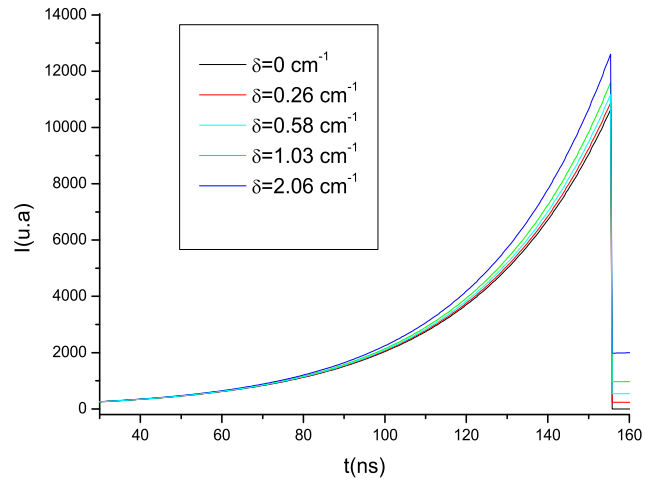


Figura 5.9: Un acercamiento a la Fig 5.8 para apreciar mejor el efecto del auto despojo en el intervalo del primer transitorio electrónico.

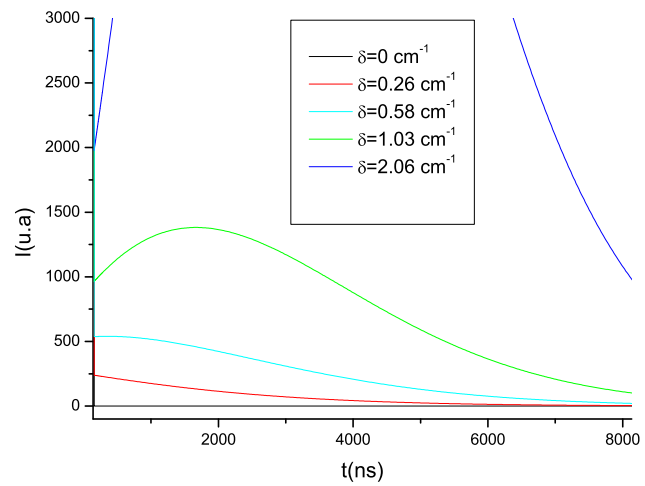


Figura 5.10: Un acercamiento a la Fig 5.8 para apreciar mejor el efecto del auto despojo para tiempos mayores al primer transito electrónico.

5.1.5. El efecto de la estabilización

Cuando los iones negativos inestables sufren un proceso de estabilización, se origina una inhibición de la corriente electrónica dado que se disminuye la población de iones negativos inestables que podrían dar una contribución a la corriente electrónica, y aquí una vez más la tasa de procesos de estabilización varía según la naturaleza del gas que se examine.

La Fig 5.11 nos muestra el transitorio completo, y en la Fig 5.12 (después del primer tránsito electrónico T_e) es posible apreciar más fácilmente la disminución de la corriente electrónica como consecuencia de incremento en la tasa de procesos de estabilización σ de los iones negativos inestables.

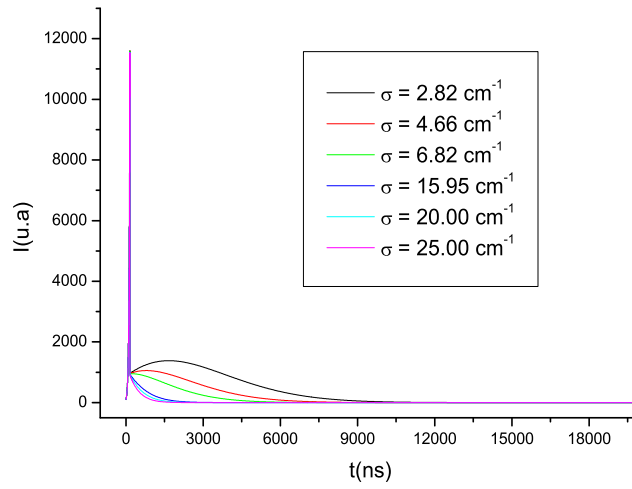


Figura 5.11: Transitorios electrónicos, en los cuales los diferentes valores de σ , nos muestran la inhibición a la corriente electrónica debida al proceso de conversión de los iones negativos inestables a iones negativos estables. Los datos de entrada para este cómputo son: $\frac{\alpha}{p} = 0.920 \frac{1}{\text{cm torr}}$, $\frac{\eta}{p} = 0.770 \frac{1}{\text{cm torr}}$, $\frac{\delta}{p} = 0.103 \frac{1}{\text{cm torr}}$, y el pulso láser es modelado por una delta de Dirac.

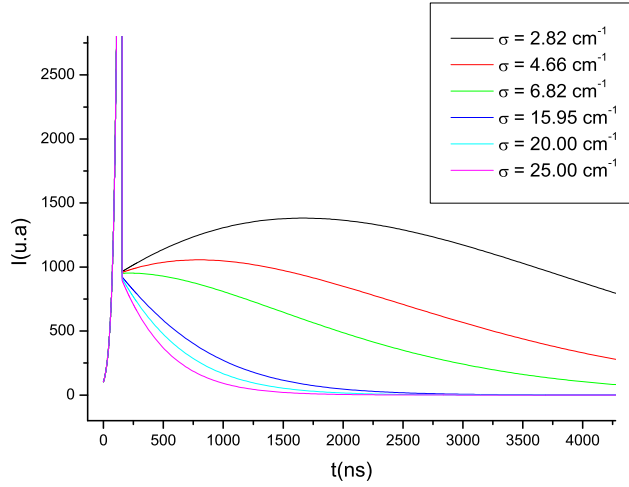


Figura 5.12: Un acercamiento a la Fig 5.11 para apreciar mejor el efecto de la conversión.

5.1.6. Comparación con transitorios experimentales

A continuación se presenta una comparación entre transitorios obtenidos experimentalmente y transitorios obtenidos con el cálculo numérico. Dado que experimentalmente solo es posible medir la corriente total I_{tot} , en ambos casos (tanto el numérico como el experimental), lo que se grafica es la corriente total originada por todos los portadores de carga. El gas con el que se obtubieron los transitorios experimentales es el CF_3I . Los coeficientes de transporte, ionización y captura que alimentan a nuestro modelo fueron obtenidos en forma experimental mediante el uso de Método Pulsado de Townsend, como se explica en la sección 2.2.

Es importante señalar que para los siguientes ejemplos, en el cálculo numérico no se consideran procesos de estabilización ni desprendimiento electrónico esto es por que se conoce que el ion negativo CF_3I^- es muy estable y no se desprende de su electrón extra durante todo el primer transito electrónico T_e . Esto es, se pierde una contribución a la corriente electrónica por parte de los iones negativos inestables. Por lo cual es de esperar que el cálculo numérico para la corriente total coincida con el resultado experimental.

El primero de nuestros ejemplos ilustra una situación en la cual el número de procesos de ionización es aproximadamente igual al de procesos de captura, y por lo tanto el coeficiente efectivo de ionización es aproximadamente igual a cero $\alpha_e = \alpha - \eta = -0.025 cm^{-1}$, ver Fig 5.13. En los siguientes dos ejemplos, se muestra el caso en el cual el coeficiente efectivo de ionización es negativo $\alpha_e = -0.878 cm^{-1}$

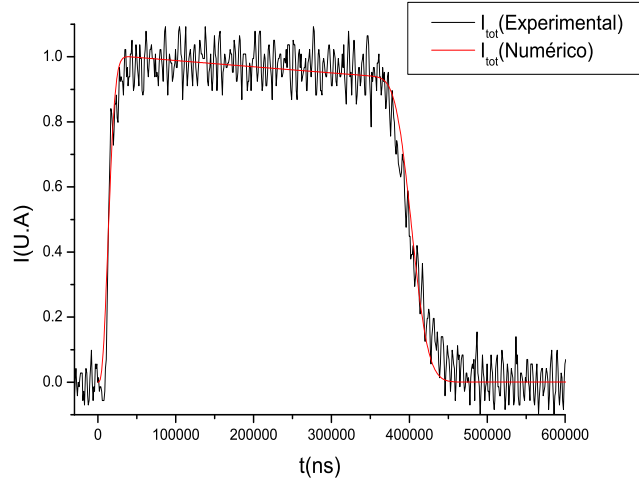


Figura 5.13: Transitorio electrónico para el cual el número de procesos de ionización es casi igual al de capturas, es por esto que $\frac{\alpha}{p} - \frac{\eta}{p} = -1,639 \times 10^{-3} \frac{1}{cm \ torr}$. Los otros datos de entrada para este cómputo son: $p=15.15\text{torr}$, $\frac{E}{N}=140\text{Td}$, $D_L = 1,9 \times 10^4 \frac{cm^2}{s}$, $v_e = 7,9 \times 10^3 \frac{cm}{s}$ y el pulso láser tiene un ancho de 15ns.

para la Fig 5.14, y $\alpha_e=-0.606\text{cm}^{-1}$ para la Fig 5.15. Por último se tiene la situación en la cual el coeficiente efectivo de ionización es positivo $\alpha_e=0.537\text{cm}^{-1}$ para la Fig 5.16 .

Es posible observar en las figura de esta sección el excelente acuerdo entre los transitorios medidos experimentalmente, y los calculados con el programa desarrollado como parte de esta tesis. Este acuerdo nos prueba de manera fehaciente, la capacidad del método para simular transitorios experimentales.

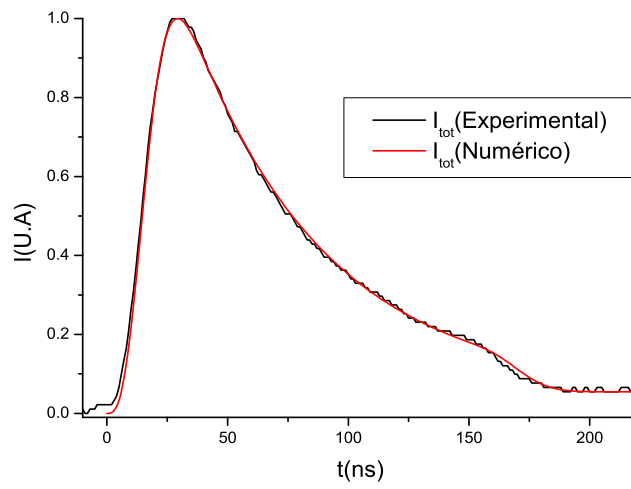


Figura 5.14: Transitorio electrónico para el cual el número de procesos de ionización es menor que el de capturas, es por esto que $\frac{\alpha}{p} - \frac{\eta}{p} = -8,877 \times 10^{-2} \frac{1}{\text{cm torr}}$. Los otros datos de entrada para este cómputo son: $p=9.888\text{torr}$, $\frac{E}{N}=430\text{Td}$, $D_L = 5,316 \times 10^4 \frac{\text{cm}^2}{\text{s}}$, $v_e = 1,993 \times 10^7 \frac{\text{cm}}{\text{s}}$ y el pulso láser tiene un ancho de 15ns.

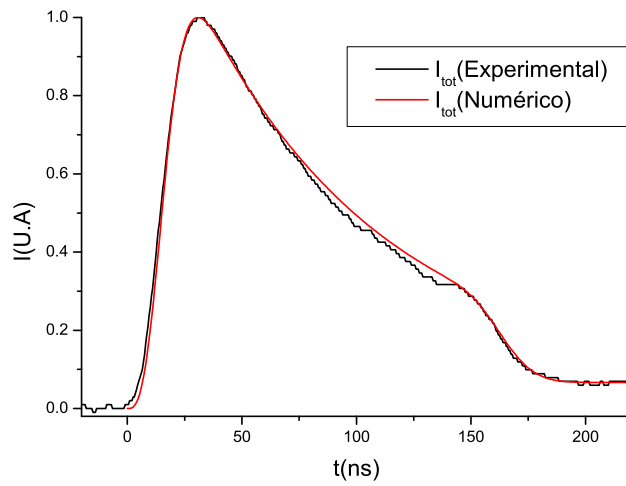


Figura 5.15: En este último caso, tenemos una situación en la cual el número de procesos de ionización es menor que el de capturas, por lo cual tenemos que $\frac{\alpha}{p} - \frac{\eta}{p} = -7,676 \times 10^{-2} \frac{1}{cm \text{ torr}}$. Los otros datos de entrada para este cómputo son: $p=9.888\text{torr}$, $\frac{E}{N}=430\text{Td}$, $D_L = 1,154 \times 10^5 \frac{cm^2}{s}$, $v_e = 2,092 \times 10^7 \frac{cm}{s}$ y el pulso láser tiene un ancho de 15ns.

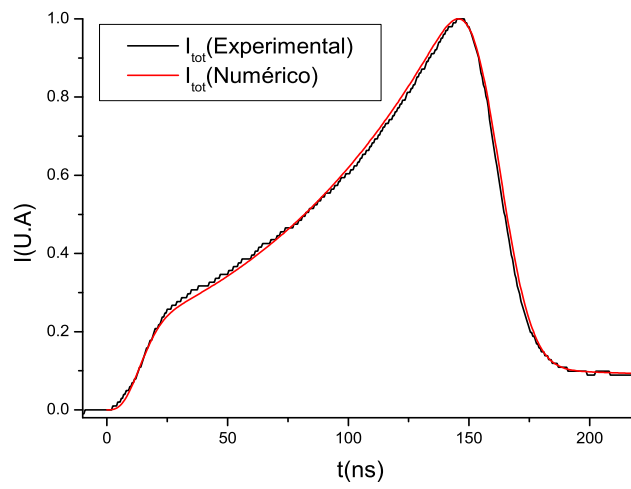


Figura 5.16: Transitorio electrónico para el cual el número de procesos de ionización es mayor que el de capturas, por lo cual tenemos que $\frac{\alpha}{p} - \frac{\eta}{p} = 5,430 \times 10^{-2} \frac{1}{cm \text{ torr}}$. Los otros datos de entrada para este cómputo son: $p=9.888\text{torr}$, $\frac{E}{N}=445\text{Td}$, $D_L = 1,555 \times 10^5 \frac{cm^2}{s}$, $v_e = 2,095 \times 10^7 \frac{cm}{s}$ y el pulso láser tiene un ancho de 15ns.

Capítulo 6

Discusión y conclusiones

Cuando se pretende describir un fenómeno físico, usualmente es a través de un modelo matemático. Si dicho modelo logra dar cuenta de los procesos esenciales observados experimentalmente en el fenómeno, entonces nuestro modelo es bueno, de lo contrario se hace necesario realizar un estudio más cuidadoso de los fundamentos físicos sustanciales del fenómeno, para de esta manera lograr que las correcciones a nuestro modelo estén afianzadas en sólidos argumentos físicos. Posteriormente, para constatar que nuestro modelo describe la realidad, es necesario cotejar los datos experimentales con las predicciones de nuestro modelo.

En este trabajo, se ha presentado un modelo para describir los procesos esenciales que ocurren en los plasmas débilmente ionizados en el Método Pulsado de Townsend. Dicho modelo está representado por un conjunto de ecuaciones de continuidad espacio-temporales acopladas, para la densidad de los portadores de carga, el cual además incluye condiciones de frontera e iniciales muy complejas, difícilmente solubles por métodos analíticos.

Para resolver el sistema de ecuaciones acopladas, se empleó el método de diferencias finitas para obtener aproximaciones de las derivadas espaciales y temporales del sistema de ecuaciones. Esto se hace con el fin de obtener las relaciones de recurrencia necesarias para implementar la solución numérica del modelo. Otra de las novedades del modelo es la consideración de dos tipos de condiciones de frontera impuestas a la densidad de portadores de carga: el pulso delta de Dirac, y un pulso más realista que modela un pulso láser de corta duración.

Se presentó también la implementación de dicho modelo en un programa de computadora escrito en FORTRAN 77. La validación del modelo se consigue mediante la comparación de las predicciones numéricas con los datos experimentales bajo diferentes condiciones del sistema, ver sección 5.1.6. Asimismo en el artículo [6] *A numerical simulation code for electronic and ionic transients from a time-resolved pulsed Townsend experiment*, del cual el alumno que presenta esta tesis fue coautor, se realiza una comparación entre las soluciones analíticas y nuestra solución numérica. El objetivo a futuro es automatizar el

programa en un ambiente visual para que ajuste los transitorios numéricos a los experimentales y de esta manera inferir coeficientes de desprendimiento y estabilización electrónica. Contribuir en este sentido, de proporcionar métodos de cálculo de coeficientes es uno de los objetivos del presente trabajo. El simulador queda incorporado al laboratorio de colisiones como una herramienta de valor extraordinario, que ha abierto la posibilidad de investigar más a fondo en procesos que antaño se ignoraban, no por su importancia relativa menor, sino por su dificultad relativa mayor.

Este trabajo de tesis se realizó con el apoyo del proyecto DGAPA PAPIIT
Número IN110907-3.

Bibliografía

- [1] A. N. Goyette, J. de Urquijo, Yicheng Wang, L. G Christophorou, and J. K. Olthoff *Journal of chemical Physics* volume 114, number 20.
- [2] J de Urquijo-Carmona, I Alvarez and Cisneros *J.Phys. D:Appl. Phys.*, 18(1985)29-40.
- [3] D.M. Etter *Fortran 77 with numerical methods for engineers and scientists*
- [4] Wen, Chuan: *Time-resolved swarm studies in gases with emphasis on electron detachment and ion conversion* ISBN 90-9003013-1.
- [5] Raether H. *Electron avalanches and breakdown in gases*, Butterworths, London, 1964.
- [6] J.de Urquijo, A.M. Juarez, J.C Rodríguez-Luna, and J.S. Ramos-Salas. *A numerical simulation code for electronic and ionic transients from a time-resolved pulsed Townsend experiment* IEEE Transactions on plasma science, vol.35, No. 5, October 2007.