

Nº de Ordem / /2009

TESE DE DOUTORAMENTO

Apresentada à Universidade da Madeira

Para obtenção do grau de Doutor Nelson Alexandre Pereira da Rocha Almeida

Modelização das camadas junto aos eléctrodos em descargas de arco de alta pressão

Júri:

Reitor da Universidade da Madeira Doutor Jorge Manuel Amaro Henriques Loureiro, Universidade Técnica de Lisboa Doutor Paulo Manuel de Araújo Sá, Universidade do Porto Doutor Yuri Fonseca da Silva Nunes, Universidade Nova de Lisboa Doutor Mikhail Benilov, Universidade da Madeira Doutor Mário Dionísio Cunha, Universidade da Madeira

Agradecimentos

Ao meu orientador, Prof. Dr. Mikhail Benilov, que me encorajou e acompanhou na realização deste trabalho com o seu saber e experiência, a minha profunda gratidão pelo prazer da discussão e pelos seus estímulos ao longo deste processo de tessitura das ideias.

Ao Prof. Dr. George Naidis do Instituto para Altas Temperaturas da Academia de Ciências da Rússia, Moscovo, pela colaboração frutuosa que estabeleceu comigo no decorrer deste trabalho e pelas sugestões que enriqueceram a minha reflexão.

Ao Prof. Dr. Ulrich Hechtfischer dos Laboratórios de Investigação da Philips em Aachen (Alemanha), por ter fornecido importantes dados experimentais.

Ao Prof. Dr. Mário Cunha, pela disponibilidade que sempre mostrou em discutir determinados pontos do meu trabalho.

Ao Dr. Pedro Almeida, por me ter facultado uma primeira versão do método de Petukhov.

A todos aqueles que, de algum modo, me acompanharam nesta aventura e que sempre me incentivaram, o meu muito obrigado!

Prefácio

O trabalho apresentado nesta dissertação foi desenvolvido no âmbito dos seguintes projectos:

- Projecto 32411/99, Teoria e modelização da interacção plasma-cátodo em descargas de arco de alta pressão, do programa POCTI da FCT;
- Project NumeLiTe of the 5th Framework programme ENERGIE of the EC;
- Projecto POCI/FIS/60526/2004 PPCDT/FIS/60526/2004, Modos de transferência de corrente aos cátodos da descarga de arco de alta pressão e sua estabilidade, do programa POCI da FCT.

A maioria dos resultados apresentados nesta dissertação encontram-se publicados nos seguintes artigos:

- N. A. Almeida, M. S. Benilov, R. N. Franklin and G. V. Naidis, *Transition from a fully ionized plasma to an absorbing surface*, J. Phys. D: Appl. Phys. 37, No. 22, pp. 3107-3116 (2004).
- N. A. Almeida, M. S. Benilov and G. V. Naidis, *Unified modelling of near-cathode plasma layers in high-pressure arc discharges*, J. Phys. D: Appl. Phys. 41, No. 24, 245201 (26pp) (2008).
- N. A. Almeida, M. S. Benilov, U. Hechtfischer and G. V. Naidis, Investigating nearanode plasma layers of very high-pressure arc discharges, J. Phys. D: Appl. Phys. 42 (provisionally scheduled for January 2009); ver http://fisica.uma.pt/public/proofs.pdf.

A divulgação do trabalho desenvolvido nesta dissertação foi feita igualmente em algumas conferências científicas, onde foram apresentados os seguintes trabalhos:

- N. A. Almeida, M. S. Benilov and G.V. Naidis, *Numerical Modelling of a Ionization Layer in a Fully Ionized Plasma*, Abstracts of Invited and Contributed Papers of 28th International Conference on Controlled Fusion and Plasma Physics (Funchal, Portugal, 18-22 June, 2001), p. 269 (2001).
- N. A. Almeida, M. S. Benilov and G.V. Naidis, *Change of Phases in the Problem of Ionization Layer in a Fully Ionized Plasma*, Proceedings of XXV International Conference on Phenomena in Ionized Gases (Nagoya, Japan, 17-22 July, 2001), Vol. I, pp. 71-72.

- N. A. Almeida and M. S. Benilov, *Theory of the ionization layer on vaporizing cathodes*, Proceedings of XXVI International Conference on Phenomena in Ionized Gases (Greifswald, Germany, 15-20 July, 2003), Vol II, pp 27-28.
- N. A. Almeida, M. S. Benilov, R. N. Franklin and G. V. Naidis, *Calculating ion flux from thermal plasma*, Abstracts of 7th APCPST & 17th SPSM (Fukuoka, Japan, June 29 July 2, 2004), p. 54.
- N. A. Almeida, M. S. Benilov, R. N. Franklin and G. V. Naidis, *Change of phases in the problem of ionization layer at the edge of a fully ionized plasma*, Proceedings of 57th Gaseous Electronics Conference (Bunratty, Ireland, September 26-29, 2004), Bulletin of the American Physical Society 49, No. 5, p. 48.
- N. A. Almeida, M.S. Benilov and G.V. Naidis, *Modelling of near-cathode layers in high-pressure arc discharges*, Proc. 28th ICPIG (July 15-20, 2007, Prague, Czech Republic), ed. by J. Schmidt, M. Šimek, S. Pekárek, and V. Prukner, Institute of Plasma Physics AS CR, ISBN 978-80-87026-01-4, pp. 1797-1800.
- Nelson A. Almeida and Mikhail S. Benilov, Unified modelling of near-electrode nonequilibrium layers in high-pressure arc discharges, Abstracts of 2008 IEEE International Conference on Plasma Science (June 15–19, 2008, Karlsruhe, Germany), ISBN 978-1-4244-1930-2, p. 446.
- N. A. Almeida, M. S. Benilov and G. V. Naidis, *Unified numerical modelling of near-cathode plasma layers in high-pressure arc discharges*, Abstracts of the 19th Europhysics Sectional Conference on the Atomic and Molecular Physics of Ionized Gases (ESCAMPIG) (July 15-19, 2008, Granada, Spain), p. 3-33.

Resumo

Nesta dissertação foi realizada a modelização numérica das camadas de não-equilíbrio junto aos cátodos e ânodos em descargas de arco de alta pressão. Ao contrário de trabalhos anteriores, a modelização é unificada, i.e., baseia-se num único conjunto de equações escritas sem suposições simplificativas tais como equilíbrio térmico, equilíbrio de ionização (Saha) e quaseneutralidade, e não utiliza uma divisão *a priori* do domínio de cálculo em subcamadas com propriedades físicas diferentes. Processos de transporte de iões e electrões são descritos no âmbito do modelo de difusão. Foi também desenvolvida uma teoria da camada de ionização junto ao cátodo no âmbito do modelo multifluido. Os resultados obtidos são comparados com dados experimentais.

Os resultados da tese elucidam a física de transferência de corrente através das camadas junto aos eléctrodos em descargas de arco de alta pressão, e servem para melhor compreender os fenómenos que ocorrem em vários dispositivos industriais, como as lâmpadas de descarga de muito alta pressão e as tochas de plasma.

Abstract

In this thesis, a numerical modelling is performed of non-equilibrium layers near cathodes and anodes of high-pressure arc discharges. In contrast to previous works, the modelling is unified, i.e., based on a single set of equations without simplifying assumptions such as thermal equilibrium, ionization (Saha) equilibrium, and quasi-neutrality, and does not employ an *a priori* division of the calculation domain into sub-layers with different physical properties. Transport of the ions and electrons is described in the framework of the diffusion model. A theory was also developed of the near-cathode ionization layer in the framework of the multifluid model. The obtained results are compared with experimental data.

The results of this thesis elucidate the physics of current transfer through near-electrode layers in high-pressure arc discharges, and contibute to better understanding of phenomena occurring in various industrial devices, such as the very high-pressure discharge lamps and plasma torches.

Conteúdo

1	Intr	odução	1
	1.1	Descargas DC em gases - descarga de arco e descarga luminescente	1
	1.2	Descargas de arco - Teoria e modelização	3
	1.3	Camadas junto aos eléctrodos em descargas de arco	5
		1.3.1 Estrutura da região de perturbação junto aos eléctrodos	5
		1.3.2 Camadas catódicas	11
		1.3.3 Camadas anódicas	16
	1.4	Enquadramento do trabalho	17
	1.5	Organização da tese	18
2	Mo	delização unificada de camadas de plasma junto ao cátodo em descar-	
	\mathbf{gas}	de arco de alta pressão	20
	$\overline{2.1}$	Introdução	20
	2.2	O modelo	22
		2.2.1 Sistema de equações	22
		2.2.2 Condições fronteira	26
	2.3	Método da solução numérica	30
	2.4	Resultados e discussão	31
		2.4.1 Distribuições dos parâmetros do plasma na região junto ao cátodo e	
		característica tensão-corrente	31
		2.4.2 Balanco de energia do plasma junto ao cátodo	43
		2.4.3 Limitações do modelo	50
		2.4.4 Validade dos modelos simplificados	57
	2.5	Comparação com dados experimentais	63
	2.6	Conclusões	66
3	Mo	delização multifluido da camada de ionização na região catódica dum	
	plas	sma totalmente ionizado em descargas de arco de alta pressão	69
	3.1	Introdução	69
	3.2	O modelo	72
		3.2.1 Sistema de equações e condições fronteira	72
		3.2.2 Transformando num problema com condição inicial	74
	3.3	Tratamento analítico e numérico	75
		3.3.1 Tratamento analítico	75
		3.3.2 Verificação numérica	78
	3.4	Discussão de resultados	82
	3.5	Comparação com dados experimentais	84

CONTE		٦
	· F() [] [] [] [,
COLLE		-

	3.6	Conclusões	86
4	Modelização unificada de camadas de plasma junto ao ânodo em descargas		
	de a	arco de muito alta pressão	88
	4.1	Introdução	88
	4.2	Modelo de transferência de corrente através de uma camada planar	89
	4.3	Resultados e discussão	93
		4.3.1 Resultados teóricos	93
		4.3.2 Comparação com dados experimentais	101
	4.4	Conclusões	104
5	Con	siderações finais	106
A	Coe	ficientes de transporte, cinéticos e de radiação	108
в	Trat	tamento analítico e numérico adicional referente ao capítulo 3	114
			TTT
	B .1	Comportamento assimptótico para distâncias grandes e pequenas desde a	
	B.1	Comportamento assimptótico para distâncias grandes e pequenas desde a margem da bainha de carga de espaço	114
	B.1 B.2	Comportamento assimptótico para distâncias grandes e pequenas desde a margem da bainha de carga de espaço	114 115
	B.1B.2B.3	Comportamento assimptótico para distâncias grandes e pequenas desde a margem da bainha de carga de espaço	114 115 117
	B.1B.2B.3B.4	Comportamento assimptótico para distâncias grandes e pequenas desde a margem da bainha de carga de espaço	114 115 117 118
	B.1B.2B.3B.4B.5	Comportamento assimptótico para distâncias grandes e pequenas desde a margem da bainha de carga de espaço	114 115 117 118 119
	 B.1 B.2 B.3 B.4 B.5 B.6 	Comportamento assimptótico para distâncias grandes e pequenas desde a margem da bainha de carga de espaço	114 115 117 118 119
	B.1B.2B.3B.4B.5B.6	Comportamento assimptótico para distâncias grandes e pequenas desde a margem da bainha de carga de espaço	114 115 117 118 119 122
	 B.1 B.2 B.3 B.4 B.5 B.6 B.7 	Comportamento assimptótico para distâncias grandes e pequenas desde a margem da bainha de carga de espaço	114 115 117 118 119 122 123
	 B.1 B.2 B.3 B.4 B.5 B.6 B.7 B.8 	Comportamento assimptótico para distâncias grandes e pequenas desde a margem da bainha de carga de espaço	114 115 117 118 119 122 123 127
	 B.1 B.2 B.3 B.4 B.5 B.6 B.7 B.8 B.9 	Comportamento assimptótico para distâncias grandes e pequenas desde a margem da bainha de carga de espaço	114 115 117 118 119 122 123 127 128

Lista de Figuras

2.1	Distribuições de parâmetros na região junto ao cátodo para mercúrio a $p_0 = -$	
	100 bar, $T_w = 3000 \mathrm{K}, j_c (\mathrm{A m^{-2}}) = 10^6 \mathrm{(a)}, 10^7 \mathrm{(b)}, 10^8 \mathrm{(c)}.$	33
2.2	Distribuições do campo eléctrico e do potencial electrostático na região junto	
	ao cátodo para mercúrio a $p_0 = 100$ bar, $T_w = 3000$ K. Linhas a cheio: campo	
	eléctrico. Linhas a tracejado: potencial. $a, b, c: j_c(Am^{-2}) = 10^6, 10^7, 10^8,$	
	respectivamente. Círculos: pontos onde a separação de cargas ating e 1% .	34
2.3	Distribuições de parâmetros na região junto ao cátodo para mercúrio a $p_0 = -$	
	100 bar, $T_w = 4000 \text{ K}, j_c (\text{A} \text{m}^{-2}) = 10^6 \text{ (a)}, 10^7 \text{ (b)}, 10^8 \text{ (c)}.$	35
2.4	Distribuições do campo eléctrico e do potencial electrostático na região junto	
	ao cátodo para mercúrio a $p_0 = 100$ bar, $T_w = 4000$ K. Linhas a cheio: campo	
	eléctrico. Linhas a tracejado: potencial. $a, b, c: j_c(A m^{-2}) = 10^6, 10^7, 10^8,$	
	respectivamente. Círculos: pontos onde a separação de cargas ating e $1\%.$	36
2.5	Distribuições de parâmetros na região junto ao cátodo para árgon a $p_0 =$	
	1 bar, $T_w = 3500 \mathrm{K}, j_c (\mathrm{A m^{-2}}) = 10^6 \mathrm{(a)}, 10^7 \mathrm{(b)}, 7.8 \times 10^7 \mathrm{(c)}.$	39
2.6	Distribuições do campo eléctrico e do potencial electrostático na região junto	
	ao cátodo para árgon a $p_0 = 1$ bar, $T_w = 3500$ K. Linhas a cheio: campo	
	eléctrico. Linhas a tracejado: potencial. $a, b, c: j_c(A m^{-2}) = 10^6, 10^7,$	
	7.8×10^7 , respectivamente. Círculos: pontos onde a separação de cargas	
	atinge 1%. Quadrados: pontos onde a função $\varphi(x)$ atinge um valor máximo.	40
2.7	Características tensão-corrente da camada junto ao cátodo para um valor fixo	
	da temperatura da superfície do cátodo para mercúrio a $p_0 = 100$ bar, $T_w =$	
	$3000 \text{ K} \text{ e} 4000 \text{ K}$, e árgon a $p_0 = 1 \text{ bar}$, $T_w = 3500 \text{ K}$. Linhas a cheio: o modelo	
	presente. Linhas a tracejado: o modelo [Benilov & Marotta 1995, Benilov &	
•	Cunha 2002, Benilov & Cunha $2003a$].	44
2.8	Balanço de energia do gás de electroes na regiao junto ao cátodo. Mercúrio,	
	$p_0 = 100 \text{ bar}, T_w = 3000 \text{ K}, j_c(\text{Am}^{-2}) = 10^{\circ} \text{ (a)}, 10^{\circ} \text{ (b)}; \text{ argon}, p_0 = 1 \text{ bar},$	477
2.0	$T_w = 3500 \text{ K}, \ j_c = 10^{\circ} \text{ Am}^{-2} \text{ (c)}.$	47
2.9	Componentes da densidade do fluxo de energia dos electroes na região junto	40
9.10	ao catodo. Plasma de mercurio, $p = 100$ bar, $I_w = 3000$ K, $J_c = 10^{\circ}$ A m ⁻¹ .	49
2.10	Baranço de energia do prasma junto ao catodo. Linnas a cheio: q_{pl}/q_c . Linnas	
	a tracejado: W_{rad}/q_c . Circuios, quadrados: margem da camada junto ao astodo. Morgánio $n = 100 \text{ hor } T = 2000 \text{ K}$ i $(\Lambda \text{ m}^{-2}) = 10^6 (1) + 10^8 (2)$.	
	catodo. Mercuno, $p_0 = 100$ bar, $T_w = 3000$ K, j_c (A m $j = 10^{\circ}$ (1), 10° (2); frequence = 1 have $T_{i} = 3500 K$ i (A m ⁻²) = 10^7 (2), 7.8×10^7 (4)	40
	argon, $p_0 = 1$ bar, $T_w = 3500$ K, j_c (A III $j = 10$ (3), $t.0 \times 10$ (4)	49

2.11	Livre percurso médio de colisões entre os iões e os átomos, comprimento de maxwellização dos electrões, e escalas locais de comprimento de variação de parâmetros dos iões e dos electrões. Mercúrio, $p_0 = 100$ bar, $T_w = 3000$ K, $j_c(A m^{-2}) = 10^6$ (a), 10^8 (b); árgon, $p_0 = 1$ bar, $T_w = 3500$ K, $j_c(A m^{-2}) = 10^6$ (a), 10^8 (b); árgon, $p_0 = 1$ bar, $T_w = 3500$ K, $j_c(A m^{-2}) = 10^6$ (b); árgon, $p_0 = 1$ bar, $T_w = 3500$ K, $j_c(A m^{-2}) = 10^6$ (b); árgon, $p_0 = 1$ bar, $T_w = 3500$ K, $j_c(A m^{-2}) = 10^6$ (c)	
2.12	10^{i} (c), 7.8×10^{i} (d). Densidade do fluxo de energia para a superfície do cátodo vs temperatura do cátodo para um valor fixo da queda de tensão junto ao cátodo. Linhas a cheio: o modelo presente. Linhas a tracejado: o modelo [Benilov & Marotta 1995, Benilov & Cunha 2002, Benilov & Cunha 2003 <i>a</i>]; (a) árgon, $p_0 = 1$ bar;	52
2.13	(b) mercúrio, $p_0 = 100$ bar	61
2.14	Temperatura média dos electrões na camada de ionização vs temperatura do cátodo para um valor fixo da queda de tensão junto ao cátodo. Árgon, $p_0 = 1$ bar. Linhas a cheio: o modelo presente. Linhas a tracejado: o modelo [Benilov & Marotta 1995] Benilov & Cunha 2002 Benilov & Cunha 2003 a	63
2.15	Linhas: distribuições calculadas da temperatura e densidade dos electrões na região junto ao cátodo. Árgon. Linhas: modelização, $p_0 = 2.6$ bar. A cheio: $T_w = 3000$ K, $j_c = 4.14 \times 10^5$ A m ⁻² . A tracejado: $T_w = 3140$ K, $j_c = 1.15 \times 10^6$ A m ⁻² . Pontos: dados experimentais de [Redwitz <i>et al.</i> 2005],	00
	$p = 2.6$ bar, $I = 4$ A. Circulos: T_e . Cruzes: n_e .	65
$3.1 \\ 3.2$	A densidade de corrente dos iões do plasma de árgon. $p = 1$ bar, $T_h = 4000$ K. Domínio de cálculo no plano (α, w) . Linhas a tracejado: fronteira Γ separando partes nas quais ocorrem diferentes fases da solução (para três valores	70
3.3	de β)	76
3.4	cheio: $f(w)$. Linhas a tracejado: $\nu(w)$. a: $\beta = 1$. b: $\beta = 50$ Densidades das partículas carregadas na camada de ionização para α entre $\alpha_{cr} \in 1$. $h = 10^{-3}$. Linhas a cheio: $f(w)$. Linhas a tracejado: $\nu(w)$. Pontos:	80
3.5	posições da linha Γ . a: $\alpha = 0.5 + 0.5\alpha_{cr}$. b: $\alpha = 0.1 + 0.9\alpha_{cr}$ Fluxo de iões adimensional da camada de ionização. Linha a cheio: cálculos por meio da abordagem descrita na secção 3.4. Linha a tracejado: fórmula de interpolação de [Benilov & Naidis 1998, Eq. (50)]. Linha a ponteado: fórmula de interpolação equação (B.59) do apêndice B.9. Pontos: o ponto	81
3.6	máximo, equação (3.27). a: $\beta = 1$. b: $\beta = 50$	85
4.1	$[Darshe c_{\ell} a_{\ell}, 19(0], p = 0, \dots, \dots,$	00
4.1	Linnas a cheio: Esquema de distribuições do potencial electrostático nas regiões junto ao cátodo e ânodo. Linhas a tracejado: distribuições do poten- cial electrostático no plasma não perturbado.	91

4.2	Distribuições de parâmetros na camada junto ao ânodo do plasma de Hg. $p_0 = 100 \text{ bar}, T_m = 2000 \text{ K}, i = 10^7 \text{ A m}^{-2}.$	93
4.3	Linhas a cheio: potencial electrostático na camada junto ao ânodo. Linhas a tracejado: perturbação do potencial electrostático devido à presenca da	
44	camada junto ao ânodo. $p_0 = 100$ bar, $T_w = 2000$ K. 1: plasma de Hg, $j = 10^7$ A m ⁻² . 2: plasma de Xe, $j = 10^7$ A m ⁻² . 3: plasma de Xe, $j = 10^8$ A m ⁻² . Distribuições de parâmetros na camada junto ao ânodo do plasma de Xe	95
1.1	$p_0 = 100 \text{ bar.}$ (a) $T_w = 2000 \text{ K}$, $j = 10^7 \text{ A m}^{-2}$. (b) $T_w = 3500 \text{ K}$, $j = 10^7 \text{ A m}^{-2}$. (c) $T_w = 2000 \text{ K}$, $j = 10^8 \text{ A m}^{-2}$. (d) $T_w = 3500 \text{ K}$, $j = 10^8 \text{ A m}^{-2}$.	
4.5	10 ⁸ A m ⁻²	97
4.6	localizações para amostragem dos dados da radiância do plasma do centro do arco apresentados na figura 4.6	102
	perdas de potência por radiação.	103
B.1	Resultados de cálculos numéricos directos do fluxo de iões adimensional da camada de ionização. Linhas: solução do problema (3.14), (3.15) com o passo $h = 10^{-2}$ (linha a cheio) e com $h = 10^{-3}$ (linha a tracejado). Pontos: solução do problema (B.6), (B.7) com $h = 10^{-3}$. a: $\beta = 1$. b: $\beta = 50$	116
B.2	Fluxo de iões adimensional da camada de ionização para $\alpha < \alpha_{cr}$. Linhas a cheio: 100 passos. Linhas a tracejado: 1000 passos. Linha a ponteado: o valor $\alpha = \alpha_{cr}$. 1: solução do problema (3.14), (3.15). 2: solução particular	
	da equação (3.14) que é infinitamente diferenciável em $w = 0.3$: solução do problema com condições fronteira. a: $\beta = 1$. b: $\beta = 50$.	124

Lista de Tabelas

2.1	Componentes da densidade de corrente eléctrica na superfície do cátodo, temperatura dos electrões no ponto do máximo posicionado dentro da bainha de carga de espaço, fracção da corrente dos iões criada fora da camada junto ao cátodo, e densidade de fluxo de energia para a superfície do cátodo	42
3.1	Fronteira superior do intervalo de w no qual o discriminante é negativo e valor mínimo do discriminante normalizado. $\alpha = 1, \ldots, \ldots, \ldots$	79
4.1	Parâmetros das camadas junto ao ânodo. Os números superiores e inferiores em cada célula na quarta e nas colunas seguintes referem-se a arcos de Hg e Xe, respectivamente.	99

Capítulo 1

Introdução

1.1 Descargas DC em gases - descarga de arco e descarga luminescente

A humanidade conhece a descarga eléctrica na forma de relâmpago desde tempos imemoriais. Uma descarga eléctrica resulta da criação num meio de um caminho condutor entre dois pontos, inseridos nesse meio, com potenciais eléctricos diferentes. Usualmente, o meio é um gás, frequentemente a atmosfera. Se os dois pontos se encontrarem separados por vácuo, a descarga não pode ocorrer¹.

Uma descarga de gás pode ser criada, dirigindo energia eléctrica através de um gás. Para que tal fosse possível foi, primeiro que tudo, necessário criar e armazenar quantidades consideráveis de carga eléctrica. Foi só no início do século XIX que foram desenvolvidas baterias eléctricas suficientemente potentes² para que se conseguisse obter laboratorialmente a descarga de arco. Segundo o resumo histórico [Anders 2003], foi V. V. Petrov na Rússia que publicou a descoberta em 1803. O arco por ele produzido foi obtido juntando dois eléctrodos de carbono ligados a terminais de uma bateria e depois separando-os. No entanto, o trabalho de Petrov, que fora publicado apenas em russo, permaneceu ignorado e esquecido durante muito tempo. Independentemente de Petrov, Humphrey Davy, crê-se que a partir de 1810, criou e estudou o arco eléctrico no ar [Anders 2003]. Este tipo de descarga tornou-se conhecida como *arco* porque a sua brilhante coluna entre os dois eléctrodos, se o arco operar na posição horizontal, tende a curvar-se e a arquear a parte central para cima devido à força de impulsão. A descarga de arco é caracterizada por uma pressão elevada

¹Nos chamados arcos de vácuo [Boxman *et al.* 1995] na verdade tem-se um arco de vapor metálico num ambiente de vácuo. Uma característica desse arco é que depois da ignição ele próprio produz vapor consumindo o cátodo e, por vezes, o ânodo, se a densidade de corrente for suficientemente alta. O vapor é parcialmente ionizado, aparecendo assim um meio condutor capaz de assegurar o transporte de corrente entre os eléctrodos.

 $^{^2}$ Foi com a invenção da bateria electroquímica por Volta [Anders 2003] em 1799 que se deram grandes avanços no campo das descargas de gás.

do gás, tipicamente a partir das centenas de torr, por correntes eléctricas altas $(1 - 10^5 \text{ A})$ e uma tensão eléctrica da ordem de algumas dezenas de volt.

Posteriormente, os desenvolvimentos progressivos nas fontes eléctricas e nas técnicas de vácuo resultaram num maior controlo das propriedades das descargas e na descoberta de diferentes tipos de descargas. Entre 1831 e 1835, Faraday descobriu e estudou a descarga luminescente [Raizer 1991]. Para isso, trabalhou com tubos de vidro preenchidos com gás a uma pressão baixa (~ 1 torr) e tensões aplicadas até cerca de 1 kV. Ao contrário da descarga de arco, a descarga luminescente pode, então, ser caracterizada por uma pressão do gás baixa, tipicamente com valores entre $10^{-2} - 10^2$ torr, por correntes eléctricas baixas $(10^{-4} - 10^{-1} \text{ A})$ e uma tensão eléctrica nos eléctrodos da ordem das centenas de volt $(10^2 - 10^3 \text{ V})$.

Outra característica que podemos referir prende-se com a temperatura da coluna positiva (ou seja, a parte da descarga longe dos eléctrodos; este conceito será explicado com maior detalhe mais adiante): no caso da descarga de arco, a coluna é quente, no que toca à descarga luminescente, a coluna é fria. (É por isso que podemos tocar numa lâmpada fluorescente quando ela se encontra em funcionamento, enquanto que numa lâmpada HID³ isso seria impossível, uma vez que as temperaturas do envelope são da ordem dos 500 K ou superiores).

Estudos posteriores mostraram que um gás no qual ocorre uma descarga eléctrica é ionizado, ou seja, contem, para além das partículas neutras (átomos e moléculas), ainda partículas carregadas positivas e negativas (iões e electrões).

Em condições nas quais as densidades das partículas carregadas não são muito baixas, o gás ionizado é electricamente neutro, pois qualquer desequilíbrio de carga irá resultar em campos eléctricos que tendem a mover as cargas de maneira a eliminar o desequilíbrio. Como resultado, a soma da densidade⁴ de electrões com a densidade de iões negativos será igual à densidade de iões carregados positivamente⁵. Esta propriedade das cargas negativas e positivas se contrabalançarem denomina-se *quaseneutralidade*.

Ao gás ionizado quaseneutro dá-se, de uma maneira geral, o nome $plasma^6$. É Langmuir [Langmuir 1928] quem introduz o termo⁷:

³Designação inglesa que significa "High Intensity Discharge". Refere-se a lâmpadas de descarga de alta intensidade, muito usadas em iluminação pública, projectores, faróis de carros, etc. Nestas lâmpadas, a luz é produzida por um arco muito intenso, criado pela passagem de corrente eléctrica através de um gás a alta pressão (podendo atingir as centenas de atmosferas).

⁴Por vezes, por uma questão de simplificação da escrita, em vez de *densidade numérica* iremos utilizar apenas *densidade*.

⁵Uma vez mais, para simplificação da escrita, por vezes, em vez de *iões carregados positivamente* iremos utilizar apenas *iões positivos* e em vez de *iões carregados negativamente* iremos empregar *iões negativos*.

⁶O termo plasma foi introduzido em 1928 por Irving Langmuir [Langmuir 1928], cientista norteamericano que deu enormes contributos à Física das descargas de gás, incluindo técnicas de sondas no diagnóstico de plasmas [Raizer 1991]. Em grego [Goldston & Rutherford 1998], $\pi\lambda\alpha\sigma\mu\alpha$ significa "substância moldável", ou "geleia".

⁷A tradução é da nossa responsabilidade.

1. Introdução

"Excepto perto dos eléctrodos, onde existem bainhas contendo muito poucos electrões, o gás ionizado contem iões e electrões em números aproximadamente iguais de modo que a carga de espaço resultante é muito pequena. Vamos utilizar o nome *plasma* para descrever esta região que contém cargas equilibradas de iões e electrões."

Uma vez que a mobilidade dos iões é muito menor do que a mobilidade dos electrões, para que a corrente numa descarga DC seja mantida perto do cátodo é necessário que haja um fornecimento adicional de portadores de carga, o qual se realiza através da emissão de electrões pelo cátodo. Os mecanismos de emissão nas descargas de arco e nas descargas luminescentes são diferentes. Na primeira, os cátodos emitem electrões principalmente em resultado de emissão termiónica (a emissão de campo e a emissão de campo termiónica são outros mecanismos teoricamente possíveis), na segunda, os electrões são ejectados da superfície do metal frio devido à emissão secundária, um efeito que é provocado maioritariamente pelo impacto dos iões positivos.

Este trabalho será dedicado ao estudo da interacção plasma-eléctrodos nas descargas de arco de alta pressão. As descargas de arco são amplamente utilizadas na indústria. A título de exemplo, podemos referir a sua aplicação na indústria metalúrgica (e.g., extracção e fundição), na soldadura e corte por arco, no tratamento de resíduos perigosos, e em interruptores de alta potência, entre muitas outras aplicações (para uma lista exaustiva de aplicações consultar [Boulos *et al.* 1994, Eliezer & Eliezer 2001, Roth 2001]. Vale a pena salientar, uma vez mais, por se tratar de um campo de aplicação mais próximo deste trabalho, a aplicação que as descargas de arco têm nas lâmpadas de descarga de alta intensidade.

1.2 Descargas de arco - Teoria e modelização

A teoria da coluna da descarga de arco tem vindo a evoluir com o decorrer dos anos. A variante mais simples é a seguinte (e.g., [Lowke 1970, Raizer 1991, Gleizes *et al.* 2005]). Considere-se a coluna de arco de um plasma que se encontra em repouso dentro de um tubo cilíndrico de raio R arrefecido externamente, com um campo eléctrico longitudinal E (o assim chamado arco estabilizado por paredes [Gleizes *et al.* 2005]). A distribuição da temperatura do plasma é suposta ser axialmente simétrica, T = T(r) (aqui r é a coordenada radial, ou seja, a distância até ao eixo da descarga), e é descrita pela equação

$$-\frac{1}{r}\frac{d}{dr}\left(r\left(-\lambda\frac{dT}{dr}\right)\right) - w_{\rm rad} + \sigma E^2 = 0, \qquad (1.1)$$

onde λ é a condutividade térmica, σ é a condutividade eléctrica e $w_{\rm rad}$ designa as perdas de energia do plasma através da radiação ou, por outras palavras, o coeficiente de emissão líquido (e.g., [Lowke 1970, Gleizes *et al.* 2005]) integrado sobre o ângulo sólido. As condutividades térmica e eléctrica e as perdas de energia do plasma através da radiação

são calculadas com base na suposição de LTE e são consideradas como funções dadas da temperatura. (Note-se que LTE é a designação inglesa para equilíbrio termodinâmico local. Uma discussão pormenorizada deste conceito na física dos plasmas térmicos é dada, por exemplo, no livro [Boulos *et al.* 1994].)

A equação (1.1) chama-se equação Elenbaas-Heller. Condições fronteira para esta equação são as seguintes:

$$r = 0: \qquad \frac{dT}{dr} = 0 \tag{1.2}$$

(uma consequência da simetria axial);

$$r = R: \quad T = T_w, \tag{1.3}$$

onde T_w é a temperatura da superfície interna do tubo, a qual é definida pelas condições de arrefecimento externo.

O problema com condições fronteira (1.1)-(1.3) é resolvido conjuntamente com a equação que relaciona a intensidade de corrente da descarga (um parâmetro de controlo) e o campo eléctrico

$$I = E \int_0^R \sigma 2\pi r dr.$$

A equação Elenbaas-Heller foi introduzida em 1934. Actualmente, há modelos muito mais sofisticados da coluna de arco; ver, e.g., o artigo de resumo [Gleizes *et al.* 2005]. Hoje em dia, a modelização é feita pelo menos em duas dimensões, existindo alguns modelos 3D. Também se toma em consideração a força de Lorentz devida à acção de campos magnéticos aplicados e/ou ao campo magnético induzido pelas correntes eléctricas. Outro efeito também tomado em conta é o movimento do plasma como um todo (movimento convectivo). Este movimento pode ter a sua origem em, essencialmente, três causas diferentes, são elas: o bombeamento de gás através do arco (como é o caso das tochas de arco), a convecção natural e o efeito de Maecker (em que a força de atracção das correntes inclinadas provoca um jacto na zona de constrição do arco).

A maioria dos autores considera que a coluna do arco está em LTE (ver artigo de resumo [Gleizes *et al.* 2005]) e modeliza a coluna com base nas seguintes equações: as equações de Navier-Stokes (tomando em conta a força de Lorentz), a equação de conservação da massa do plasma, a equação de conservação da energia do plasma, a equação de continuidade da corrente (suplementada com a lei de Ohm), a lei de Ampère (que relaciona o campo magnético induzido com as correntes eléctricas no plasma que o produz), a lei de Dalton, a condição de quaseneutralidade e a equação de Saha (que permite calcular a composição parcial do plasma em LTE).

Os desvios de LTE ocorrem quando a densidade de electrões é baixa e, por isso, as taxas de processos que asseguram o equilíbrio não são suficientemente altas (ou seja, não são muito maiores do que as taxas dos processos que perturbam o equilíbrio). Esta situação acontece na vizinhança de superfícies sólidas (eléctrodos, paredes laterais) ou nas margens frias do arco (quando se trata de um arco livre). Podem acontecer também na própria coluna de arco se a corrente for bastante baixa. Existem bastantes modelos que tomam em conta o desvio do equilíbrio térmico, ou seja, a divergência entre $T_e \in T_h$ (ver, e.g., o artigo de resumo [Gleizes *et al.* 2005] e [Li & Benilov 2007] como um exemplo mais recente). Há ainda trabalhos (e.g., [Amakawa *et al.* 1998, Haidar 1999]) onde é feita uma modelização a duas dimensões de plasmas de arco a alta pressão tomando em conta não só a divergência entre $T_e \in T_h$, mas também desvios de equilíbrio de ionização, ou seja, desvios da equação de Saha.

Apesar dos sucessos alcançados na modelização da coluna nas descargas de arco, não existe, hoje em dia, modelos que possam ser aplicados à descarga na sua totalidade. Portanto, as camadas junto aos eléctrodos nas descargas de arco são modelizadas separadamente da coluna. Estas camadas serão analisadas na secção seguinte.

1.3 Camadas junto aos eléctrodos em descargas de arco

1.3.1 Estrutura da região de perturbação junto aos eléctrodos

Os diferentes tipos de perturbações introduzidas pelos eléctrodos no plasma de arco manifestamse em escalas espaciais diferentes. Isto permite dividir a região de perturbação junto aos eléctrodos num número de sub-regiões com mecanismos físicos diferentes. Existem vários artigos onde isso é feito de maneira diversa [Baksht & Yur'ev 1979, Nemchinsky 2005, Benilov 2008].

Em [Nemchinsky 2005] foi estudada a estrutura da região de perturbação junto ao ânodo em arcos de alta corrente. Uma estrutura mais complexa havia sido proposta em [Baksht & Yur'ev 1979]. Em [Benilov 2008] foi estudada a estrutura da região de perturbação junto aos eléctrodos nas descargas de arco de alta pressão e de baixa corrente e verificou-se que é semelhante à estrutura da região de perturbação junto ao ânodo em arcos de alta corrente proposta em [Nemchinsky 2005].

A exposição desta secção baseia-se essencialmente na abordagem de [Benilov 2008].

Parâmetros do plasma em frente do eléctrodo

Vamos estimar valores típicos de parâmetros do plasma em frente do eléctrodo. Os coeficientes de transporte, cinéticos e de radiação usados para as estimativas são descritos no apêndice A.

Consideremos um plasma de mercúrio à pressão p = 100 bar (um exemplo representativo de plasmas em lâmpadas HID) e 5×10^6 A m⁻² como um valor característico da densidade de corrente eléctrica na superfície do eléctrodo. (Este último valor corresponde aproximadamente a um raio da ligação do arco ao eléctrodo $R_{lig} = 250 \,\mu\text{m}$ para a corrente do arco $I = 1 \,\text{A}$.) Vamos considerar uma região junto ao eléctrodo com uma espessura da ordem de R_{lig} .

Vamos assumir que o plasma em frente do eléctrodo está próximo de LTE. Vamos ainda supor que o seu balanço de energia é dominado pela radiação, i.e., que o aquecimento de Joule é localmente equilibrado pela energia perdida pelo plasma como resultado de processos radiativos. Nestas condições, encontramos os seguintes valores aproximados para a temperatura local do plasma, T_{pl} , densidade numérica dos electrões, n_e , e grau de ionização, respectivamente: 7721 K, $3.1 \times 10^{23} \text{ m}^{-3}$ e 0.33%.

Existência de balanço de energia entre o aquecimento de Joule e as perdas por radiação no plasma em frente do eléctrodo

A suposição do balanço de energia ser dominado pela radiação implica que o aquecimento de Joule e as perdas radiativas de energia dominam todos os outros mecanismos de transporte de energia, que são o transporte convectivo de energia, o transporte de entalpia pelos fluxos de difusão das espécies e o transporte de energia pela condutividade térmica. Vamos verificar esta suposição para as condições acima mencionadas, começando por analisar o transporte convectivo de energia.

O termo da equação da energia do plasma como um todo que descreve o transporte convectivo de energia é da ordem de pv/L, onde L é uma escala local de comprimento e vé uma velocidade do escoamento característica. Para as condições em estudo $L = R_{lig} =$ $250 \,\mu$ m. Os valores da velocidade máxima de um gás em lâmpadas HID calculados pela maioria dos autores são da ordem $0.1-0.2 \,\mathrm{m \, s^{-1}}$ (e.g., [Chang *et al.* 1990, Beks *et al.* 2006]), embora também tenham sido relatados valores substancialmente superiores (6 – 8 m s⁻¹ [Paul, Takemura, Hiramoto, Yoshioka & Igarashi 2006, Paul, Takemura, Hiramoto, Erraki, Dawson, Zissis, Gonzalez, Gleizes, Benilov & Lavers 2006]). Uma vez que a velocidade do gás na vizinhança imediata do eléctrodo é menor do que a velocidade máxima do gás na lâmpada, podemos pôr $v = 0.1 \,\mathrm{m \, s^{-1}}$. Utilizando estes valores vemos que a grandeza pv/Lacima indicada é igual a $4.0 \times 10^9 \,\mathrm{W \, m^{-3}}$.

O termo da equação da energia do plasma como um todo que descreve o transporte de entalpia por fluxos de difusão é da ordem de jkT_{pl}/eL , onde k é a constante de Boltzmann e e é a carga do electrão. Para as condições em estudo, esta grandeza é $1.3 \times 10^{10} \,\mathrm{W \, m^{-3}}$.

O termo da equação da energia do plasma como um todo que descreve o transporte de energia pela condutividade térmica é da ordem de $\kappa_{pl}T_{pl}/L^2$, onde κ_{pl} é uma condutividade térmica do plasma característica. Para as condições em estudo, a condutividade térmica $\kappa_{pl} = 0.112 \,\mathrm{W \, m^{-1} \, K^{-1}}$ e o termo do transporte de energia pela condutividade térmica é $1.4 \times 10^{10} \,\mathrm{W \, m^{-3}}$.

O termo da equação da energia do plasma como um todo que descreve as perdas radiativas, $w_{\rm rad}$, para as condições em estudo, é cerca de $1.3 \times 10^{11} \,\mathrm{W \, m^{-3}}$.

1. Introdução

Uma vez que o transporte convectivo de energia, o transporte de entalpia pelos fluxos de difusão das espécies e o transporte de energia pela condutividade térmica são efeitos com ordem de magnitude inferior às perdas radiativas, podemos concluir que é justificada a suposição do plasma junto aos eléctrodos ser dominado pelas perdas radiativas.

Existência de equilíbrio termodinâmico local no plasma em frente do eléctrodo

São três os tipos de desvios de LTE mais importantes na região junto aos eléctrodos: a violação de equilíbrio térmico, i.e., uma divergência entre as temperaturas dos electrões, T_e , e das partículas pesadas, T_h ; uma violação do equilíbrio de ionização, i.e., um desvio da densidade dos electrões, n_e , em relação à densidade dos electrões prevista pela equação de Saha, n_S ; e uma violação da quaseneutralidade, i.e., uma divergência entre as densidades dos electrões, n_e , e dos iões, n_i . Vamos analisar cada um destes desvios separadamente, começando pelos desvios de equilíbrio térmico.

A maneira através da qual são analisados os desvios de equilíbrio térmico depende da relação entre as condutividades térmicas do gás de partículas pesadas, κ_h , e do gás de electrões, κ_e .

Se o grau de ionização for suficientemente baixo de maneira a que $\kappa_h \gg \kappa_e$, então a equação da energia do plasma como um todo é dominada pela contribuição das partículas pesadas. T_h é desacoplado de T_e e pode ser determinado independentemente. Ou seja, precisamos de ver se a temperatura dos electrões, T_e , segue ou não a temperatura das partículas pesadas, T_h . Para isso, devemos analisar os termos da equação de energia dos electrões.

Se $\kappa_h \ll \kappa_e$, então T_e é desacoplado de T_h e a questão é se a temperatura das partículas pesadas, T_h , segue, ou não, a temperatura dos electrões, T_e ; os termos da equação da energia das partículas pesadas devem ser analisados. No caso intermédio onde κ_h e κ_e são comparáveis, qualquer uma das equações de energia serve para analisarmos os desvios de equilíbrio térmico. Para as condições em estudo, $\kappa_h = 0.075 \,\mathrm{W \,m^{-1} \,K^{-1}}$ e $\kappa_e = 0.037 \,\mathrm{W \,m^{-1} \,K^{-1}}$, i.e., são da mesma ordem, iremos optar por analisar os termos da equação de energia das partículas pesadas.

A taxa de troca de energia em colisões elásticas entre electrões e partículas pesadas por unidade de volume é $3n_e \frac{m_e}{m_i} \bar{\nu}_{eh} k \left(T_e - T_h\right)$ (e.g., [Mitchner & Kruger 1973], p. 388), onde $\bar{\nu}_{eh}$ é a frequência média de transferência de momento em colisões elásticas entre electrões e partículas pesadas, m_e é a massa do electrão e m_i é a massa do ião. Comparando o termo do transporte de energia pela condutividade térmica das partículas pesadas com o termo de troca de energia em colisões elásticas, chegamos à seguinte estimativa para o desvio relativo de T_h em relação a T_e no plasma em frente do eléctrodo: $\frac{\kappa_h m_i}{kn_e m_e \bar{\nu}_{eh} L^2}$. Nas condições em análise, este desvio é de cerca de 2.0×10^{-3} , i.e., é negligenciável.

Vamos passar a analisar a existência de equilíbrio de ionização no plasma em frente do eléctrodo. O equilíbrio de ionização é perturbado pelo transporte convectivo das partículas

carregadas e pela difusão ambipolar. O termo do transporte convectivo é da ordem de vn_c/L . Para as condições em questão, a última grandeza é $1.2 \times 10^{26} \,\mathrm{m}^{-3} \,\mathrm{s}^{-1}$. O termo de difusão ambipolar é da ordem de $D_a n_c/L^2$, onde D_a é o coeficiente de difusão ambipolar. Para as condições em estudo, a última grandeza é $1.4 \times 10^{25} \,\mathrm{m}^{-3} \,\mathrm{s}^{-1}$. O mecanismo dominante de ionização de átomos neutros em plasmas de arco é o de ionização por impacto de electrão e a sua taxa por unidade de volume é $k_i n_a n_e$, onde k_i é a constante de taxa de ionização de um átomo por impacto de electrão e n_a é a densidade dos átomos. Nas condições em análise, $k_i n_a n_e$ é aproximadamente igual a $3.5 \times 10^{32} \,\mathrm{m}^{-3} \,\mathrm{s}^{-1}$. Uma vez que o termo de taxa de ionização é muito maior do que os termos de difusão ambipolar e transporte convectivo, podemos concluir que existe equilíbrio de ionização, i.e., a ionização é equilibrada pela recombinação.

Para analisar os desvios de quaseneutralidade devemos utilizar a equação de Poisson:

$$\varepsilon_0 \nabla \cdot \mathbf{E} = e n_i - e n_e, \tag{1.4}$$

onde **E** é o campo eléctrico e ε_0 é a permitividade do vácuo. Assumindo que o campo eléctrico é da ordem do campo eléctrico ambipolar (e.g., [Raizer 1991] ou [Smirnov 1977]), chega-se à conclusão de que o lado esquerdo da equação de Poisson é da ordem de $\varepsilon_0 kT_e/eL^2$. Para as condições em análise, a última grandeza é $9.4 \times 10^{-5} \,\mathrm{C\,m^{-3}}$. Comparando com qualquer um dos termos do lado direito da equação (1.4) (uma estimativa para qualquer um dos termos do lado direito é $en_c = 5.0 \times 10^4 \,\mathrm{C\,m^{-3}}$), verificamos que os desvios de quaseneutralidade são muito pequenos na escala considerada.

Assim, chega-se à conclusão de que o plasma em frente do eléctrodo é, de facto, próximo de LTE para condições típicas de lâmpadas HID.

Camada de não-equilíbrio junto ao eléctrodo

Na parte mais próxima do eléctrodo da região do plasma em frente do eléctrodo, i.e., para distâncias inferiores a R_{lig} , a escala local de comprimento deixa de ser o raio de ligação e passa a ser a distância à superfície do eléctrodo: L = x, onde x é uma coordenada medida a partir da superfície do eléctrodo em direcção ao plasma.

Vamos agora analisar os termos da equação do balanço de energia do plasma como um todo para distâncias inferiores a R_{lig} . O termo do transporte convectivo de energia não altera a sua ordem de magnitude (já que é da ordem de $\rho vT/x$ e a velocidade diminui proporcionalmente a x à medida que nos acercamos da superfície do eléctrodo), o termo do transporte de entalpia por fluxos de difusão cresce proporcionalmente a 1/x, o termo do transporte de energia pela condutividade térmica cresce proporcionalmente a $1/x^2$, o termo que descreve as perdas radiativas, $w_{\rm rad}$, não sendo diferencial, não altera a sua ordem de magnitude. Assim, o equilíbrio entre o aquecimento de Joule e as perdas por radiação passa a ser perturbado pela condutividade térmica para x bastante pequenos. Seja L_{tp} uma escala de comprimento na qual o transporte de energia pela condutividade térmica é comparável às perdas radiativas, $w_{\rm rad}$. Esta definição traduz-se na seguinte equação para as ordens de magnitude: $\kappa_{pl}T_{pl}/L_{tp}^2 \sim w_{\rm rad}$. Assim, podemos pôr

$$L_{tp} = \sqrt{\frac{\kappa_{pl} T_{pl}}{w_{\rm rad}}}.$$
(1.5)

Numa escala de comprimento $L \gg L_{tp}$, o plasma é dominado pela radiação, enquanto que para escalas comparáveis ou inferiores a L_{tp} deixa de o ser. Para as condições em estudo, $L_{tp} = 83 \,\mu\text{m}.$

Vamos agora analisar os termos da equação de energia das partículas pesadas, novamente para distâncias inferiores a R_{lig} . O termo convectivo com a aproximação ao eléctrodo mantém a sua ordem de magnitude. O termo do transporte de energia pela condutividade térmica das partículas pesadas é proporcional a $1/x^2$. O termo $e\mathbf{J}_i \cdot \mathbf{E}$ cresce proporcionalmente a 1/x. O termo de troca de energia em colisões elásticas entre electrões e partículas pesadas por não ser diferencial mantém a sua ordem de magnitude. Assim, o equilíbrio térmico passa a ser perturbado pela condutividade térmica das partículas pesadas para x bastante pequenos. Seja L_{tn} uma escala de comprimento para a qual o transporte de energia pela condutividade térmica das partículas pesadas é comparável com a troca de energia em colisões elásticas. De um modo semelhante à equação (1.5), podemos escrever

$$L_{tn} = \sqrt{\frac{\kappa_h m_i}{k n_e m_e \bar{\nu}_{eh}}}.$$
(1.6)

Numa escala de comprimento $L \gg L_{tn}$, existe equilíbrio térmico, enquanto que para escalas comparáveis ou inferiores a L_{tn} já não existe. Para as condições em estudo, $L_{tn} = 11 \,\mu\text{m}$.

Vamos prosseguir com a análise dos termos da equação da conservação dos iões, para distâncias inferiores a R_{lig} , com vista a analisar o equilíbrio de ionização. O termo do transporte convectivo com a aproximação ao eléctrodo mantém a sua ordem de magnitude. O termo de difusão ambipolar é proporcional a $1/x^2$. Os termos de ionização e recombinação por não serem diferenciais mantêm a sua ordem de magnitude. Assim, o equilíbrio de ionização passa a ser perturbado pela difusão ambipolar para x bastante pequenos. A taxa de transporte de partículas carregadas devido à difusão ambipolar é comparável à taxa de ionização numa escala de comprimento da ordem do chamado comprimento de ionização:

$$d = \sqrt{\frac{D_a k T_h}{k_i p}}.$$
(1.7)

Numa escala de comprimento $L \gg d$, existe equilíbrio de ionização, enquanto que para escalas comparáveis ou inferiores a d surgem desvios deste equilíbrio. Para as condições em estudo, $d = 0.071 \,\mu\text{m}$.

Vamos agora ver em que medida é afectada a quaseneutralidade com a aproximação da superfície do eléctrodo, analisando a equação de Poisson. O lado esquerdo da equação de Poisson é proporcional a $1/x^2$. Com a aproximação à superfície do eléctrodo, este termo

cresce e torna-se comparável com qualquer um dos termos do lado direito da equação (que por não serem diferenciais não alteram a sua ordem de magnitude). Para distâncias muito pequenas da ordem do chamado comprimento de Debye:

$$\lambda_D = \sqrt{\frac{\varepsilon_0 k T_e}{n_e e^2}},\tag{1.8}$$

o termo do lado esquerdo da equação de Poisson torna-se comparável com os termos do lado direito. Numa escala de comprimento $L \gg \lambda_D$, prevalece a quaseneutralidade, enquanto que para escalas comparáveis ou inferiores a λ_D surgem desvios de quaseneutralidade. Para as condições em estudo, $\lambda_D = 0.01 \,\mu$ m.

Conclui-se que, existe uma fina camada adjacente ao eléctrodo onde o balanço de energia do plasma já não é dominado pela radiação e o plasma já não se encontra em LTE. Esta camada será designada por camada de não-equilíbrio junto ao eléctrodo.

De acordo com as estimativas anteriormente feitas, os valores típicos das escalas de comprimento L_{tp} , L_{tn} , d, e λ_D diferem significativamente, sendo que $\lambda_D \ll d \ll L_{tn} \ll$ L_{tp} . Por isso, podemos esperar que os desvios, tanto de LTE como do balanço da energia do plasma ser dominado pela radiação, surjam sequencialmente, e não simultaneamente. Portanto, a camada de não-equilíbrio junto ao eléctrodo pode ser dividida em sub-camadas com diferentes mecanismos físicos.

Na região do plasma em frente do eléctrodo, i.e., para x da ordem de R_{lig} , o plasma é quaseneutro, existe equilíbrio de ionização, equilíbrio térmico e o balanço da energia do plasma é dominado pela radiação: $n_i = n_e = n_S$, $T_e = T_h$, $jE = w_{rad}$. À medida que x decresce, i.e., quando nos movemos da região do plasma em frente do eléctrodo para a superfície do eléctrodo, o primeiro desvio a entrar em jogo é aquele que é caracterizado pela maior escala de comprimento, que é L_{tp} . Logo, podemos introduzir uma camada que é adjacente à região do plasma em frente do eléctrodo, que tem uma espessura da ordem de L_{tp} , e na qual é violado o balanço entre o aquecimento de Joule e a energia irradiada devido às perdas de energia causadas pelo fluxo de calor na direcção do eléctrodo. O plasma nesta camada ainda se encontra em LTE. Podemos dizer que esta é uma camada na qual entra em jogo o arrefecimento do plasma por parte do eléctrodo. Esta camada será designada por camada de perturbação térmica.

Quando nos aproximamos mais da superfície do eléctrodo, o próximo desvio a entrar em jogo é a violação do equilíbrio térmico. Assim, podemos introduzir uma camada que é adjacente à camada de perturbação térmica e na qual as temperaturas dos electrões e das partículas pesadas deixam de ser iguais. O plasma ainda está quaseneutro nesta camada e o equilíbrio de ionização ainda se mantém. A esta camada chamar-se-á camada de não-equilíbrio térmico. A escala da sua espessura pode ser avaliada em termos dos valores característicos dos parâmetros do plasma nesta camada através da equação (1.6) se $\kappa_h \lesssim \kappa_e$ nesta camada; caso contrário, a escala de espessura da camada de não-equilíbrio térmico deve ser deduzida a partir da equação de energia dos electrões.

1. Introdução

Ainda mais perto da superfície do eléctrodo, o equilíbrio de ionização deixa de se verificar, embora o plasma ainda seja quaseneutro: $n_i = n_e \neq n_S$. Esta camada será designada por camada de ionização. A escala da sua espessura pode ser avaliada em termos dos valores característicos dos parâmetros do plasma nesta camada, usando a equação (1.7).

Numa camada imediatamente adjacente à superfície do eléctrodo, deixa de existir quaseneutralidade; a esta região dá-se o nome de bainha de carga de espaço.

Assim, estabeleceu-se uma estrutura da região de perturbação junto aos eléctrodos em descargas de arco de alta pressão a baixa corrente.

1.3.2 Camadas catódicas

Esta subsecção e a próxima têm como objectivo descrever os modelos mais importantes das camadas catódicas e anódicas, respectivamente. Acabou de ser publicado um resumo exaustivo sobre este assunto [Benilov 2008], por isso, limitar-nos-emos a uma descrição mais abreviada, sugerindo a leitura do artigo supramencionado para mais pormenores.

Como vimos na subsecção anterior, a espessura da bainha de carga de espaço é muito menor do que a camada de ionização, assim a geração de partículas carregadas na bainha é negligenciável em comparação com os fluxos de partículas chegados à margem da bainha provenientes da camada de ionização. Portanto, as densidades de correntes eléctricas dos iões e dos electrões são determinadas pelos fluxos de partículas da camada de ionização para a margem da bainha.

A maior parte da corrente eléctrica no cátodo é transportada pelos electrões emitidos pela superfície do cátodo. A emissão termiónica com amplificação de Schottky é um mecanismo dominante de emissão de electrões nas condições das descargas de arco de alta pressão. Nesse caso, cada electrão arrancado ao cátodo leva consigo energia. Isto faz com que o cátodo arrefeça. Deve, portanto, existir um mecanismo que contrabalance este arrefecimento do cátodo de maneira a que este atinja temperaturas suficientes para a emissão termiónica. Tal aquecimento pode ser provocado pelos iões que, ao serem acelerados na bainha de carga de espaço, adquirem energia suficientemente grande. Os electrões devem ter energia suficiente para provocar ionização dos átomos na camada de ionização. Essa energia provém do campo eléctrico presente na bainha que é responsável pela aceleração dos electrões em direcção à camada de ionização.

Portanto, as regiões mais importantes que governam a interacção plasma-eléctrodo são a bainha de carga de espaço e a camada de ionização e qualquer modelo de interacção plasma-eléctrodo deve incluir descrições destas regiões. Tem ainda de incluir uma forma de ligar as soluções que descrevem estas duas regiões.

Um modelo simples pode ser obtido da seguinte forma. É considerada uma equação diferencial ordinária que governa a distribuição de densidade dos iões e electrões, n_c , na camada de ionização que toma em conta ionização, recombinação e difusão ambipolar. A

variável independente é a coordenada espacial x, sendo o eixo x dirigido ao longo da normal da superfície do cátodo que tem a sua origem na margem entre a camada de ionização e a bainha de carga de espaço e é dirigido para o plasma. O termo de difusão ambipolar é escrito usando a lei de Fick ou as equações de Stefan-Maxwell [Hirschfelder *et al.* 1964, Monchick *et al.* 1966, Zhdanov 2002, Zhdanov & Tirskii 2003], conforme o grau de ionização do plasma na camada de ionização seja pequeno ou de ordem um. São desprezadas as variações das temperaturas das partículas pesadas, T_h , e dos electrões, T_e , na camada de ionização é pequeno. Neste caso, a equação diferencial que governa n_c na camada de ionização assume a forma:

$$-D_a \frac{d^2 n_c}{dx^2} = k_i n_a n_c - k_r n_c^3, \tag{1.9}$$

onde k_r é a constante de taxa de recombinação. Note-se que, uma vez que as variações das temperaturas $T_h \in T_e$ na camada de ionização são desprezadas, k_i , $k_r \in n_a$ não variam com x. O coeficiente de difusão ambipolar, D_a , relaciona-se com o coeficiente de difusão dos iões no gás de átomos, D_{ia} , da seguinte forma: $D_a = (1 + T_e/T_h) D_{ia}$, e não depende da densidade das partículas carregadas e por isso também não varia com x.

A condição fronteira para a densidade de partículas carregadas, n_c , no lado do plasma da camada de ionização é obtida usando a equação de Saha. Uma vez que a densidade de partículas carregadas na bainha é muito menor do que no interior da camada de ionização, n_c é igualada a zero no lado do cátodo da camada de ionização. Assim, a equação diferencial, acima descrita, que governa n_c na camada de ionização está sujeita às seguintes condições fronteira:

$$\begin{cases} x = 0: \quad n_c = 0\\ x \to \infty: \quad n_c \to n_S \end{cases},$$
(1.10)

onde n_S é o valor da densidade obtido a partir da equação de Saha. Note-se que $n_S = \sqrt{k_i n_a/k_r}$.

A equação (1.9) não envolve a variável independente x nem a primeira derivada dn_c/dx , logo, pode ser resolvida em quadraturas. Com este fim, vamos multiplicar ambos os lados por dn_c/dx e integrar sobre x. O resultado é

$$-D_a \frac{1}{2} \left(\frac{dn_c}{dx}\right)^2 = k_i n_a \frac{n_c^2}{2} - k_r \frac{n_c^4}{4} + C_0, \qquad (1.11)$$

onde C_0 é uma constante de integração.

A segunda condição fronteira (1.10) indica que $n_c \rightarrow n_S \in dn_c/dx \rightarrow 0$ quando x tende para o infinito. Por conseguinte, o lado esquerdo da última equação torna-se nulo quando $n_c = n_S$, e obtém-se $C_0 = -k_r n_S^4/4$.

A equação (1.11) pode ser resolvida em ordem à derivada:

$$\frac{dn_c}{dx} = \pm \left[\frac{k_r \left(n_c^2 - n_S^2\right)^2}{2D_a}\right]^{\frac{1}{2}},$$
(1.12)

onde se deve reter o sinal positivo em virtude da densidade ser uma função crescente. Esta equação pode ser novamente integrada passando o termo $(n_c^2 - n_s^2)$ para o lado esquerdo e integrando a equação resultante sobre x. Resolvendo a equação resultante em ordem a n_c , obtém-se:

$$n_c = n_S \tanh\left[n_S \left(x + C_1\right) \left(\frac{k_r}{2D_a}\right)^{\frac{1}{2}}\right],\tag{1.13}$$

onde C_1 é uma constante que, fazendo uso da primeira condição fronteira, se verifica ser 0. A nossa solução para a densidade de partículas carregadas pode ser finalmente escrita como

$$n_c = n_S \tanh \frac{x}{\sqrt{2}d},\tag{1.14}$$

onde d é o comprimento de ionização, já definido pela equação (1.7). (Ou seja, $d = \left(\frac{D_a k T_h}{k_i p}\right)^{\frac{1}{2}}$).

A densidade de corrente iónica para a superfície do cátodo (que coincide com a densidade de corrente iónica que entra na bainha de carga de espaço proveniente da camada de ionização) pode agora ser determinada como

$$j_i = -eD_a \frac{n_S}{\sqrt{2}d}.$$

Note-se que, no caso de um plasma com um grau de ionização arbitrário, esta fórmula é válida desde que o factor $1/\sqrt{2}$ seja substituído por C_2 , onde C_2 é um coeficiente adimensional que é definido pela equação (14) de [Benilov 1999] e varia aproximadamente entre 0.67 e 1.

As temperaturas das partículas pesadas e dos electrões são determinadas da seguinte forma. Assume-se que T_h é igual à temperatura do cátodo e que T_e é governada pela equação de conservação da energia dos electrões na camada de ionização. Esta equação é escrita na forma integral. As fontes de energia nesta equação são: o fluxo de energia levado para a camada de ionização pelos electrões emitidos que são acelerados na bainha de carga de espaço e o trabalho do campo eléctrico sobre os electrões na camada de ionização. Os sumidouros são: o fluxo de energia levado pelos electrões saindo da camada de ionização para a bainha de carga de espaço, o fluxo de energia levado pelos electrões saindo da camada de ionização para o volume do plasma e as perdas de energia dos electrões devido à ionização na camada. Supõe-se que as perdas de energia em colisões elásticas são negligenciáveis.

A bainha de carga de espaço é descrita por um modelo de uma bainha livre de electrões formada por iões, que entram na bainha com uma velocidade desprezável e que a atravessam sem sofrer colisões; ou seja, o modelo de Child-Langmuir [Child 1911, Langmuir 1923].

Desta forma, o modelo mais simples está completo.

Vamos agora considerar algumas das modificações introduzidas por diferentes autores no modelo simples acima descrito. Vamos começar por considerar as alterações que foram feitas na bainha de carga de espaço. Existe na literatura uma elaborada teoria de bainhas de carga

1. Introdução

de espaço livres de colisões (ver, e.g., o artigo de resumo [Franklin 2003]), desenvolvida, sobretudo, em conexão com problemas de interacção plasma-superfície em descargas de gás de baixa pressão e em "plasma-edge" em aparelhos de fusão. É bem conhecido nesta teoria um modelo de uma bainha iónica livre de colisões, tomando em conta a presença de electrões do plasma com distribuição de Boltzmann. O critério de Bohm ([Bohm 1949]; ver também o artigo de resumo [Riemann 1991]) serve, neste modelo, como condição fronteira no lado do plasma da bainha. Este modelo foi introduzido na teoria de camadas junto ao cátodo em descargas de arco de alta pressão em [Benilov & Marotta 1995]. Um modelo com precisão elevada de uma bainha iónica dominada por colisões tomando em conta electrões do plasma com uma distribuição de Boltzmann foi desenvolvido em [Benilov & Coulombe 2001].

Vamos agora prosseguir com a análise de artigos que tratam diferentes aspectos da descrição da camada de ionização. Tratamentos numéricos da camada de ionização que tomaram em conta a variabilidade das temperaturas das partículas pesadas e dos electrões foram apresentados em [Hsu & Pfender 1983, Rethfeld *et al.* 1996].

Se o cátodo opera no modo mancha, a temperatura dos electrões T_e na camada de ionização pode atingir valores muito altos, vários electrão-volt. Para valores tão altos da temperatura dos electrões podem surgir iões multipositivos. O efeito da presença de iões multipositivos na camada de ionização foi estudado numericamente em [Almeida *et al.* 2000]. Nesse trabalho, verificou-se que a corrente iónica para o cátodo forma-se numa secção interior da camada onde os iões monopositivos são dominantes, logo, a corrente iónica pode ser calculada com uma exactidão suficiente desprezando a presença de iões multipositivos. Espera-se que esta conclusão não seja restringida a arcos de árgon à pressão atmosférica, tratados em [Almeida *et al.* 2000], já que ela é uma consequência do decréscimo sucessivo das constantes de taxa de ionização de cada ionização subsequente, que é uma tendência geral e não uma propriedade específica do árgon.

No contexto da análise de difusão acima descrita, uma escala da espessura da camada de ionização é representada pelo comprimento de ionização d. Para T_e não muito altos, dexcede consideravelmente o livre percurso médio dos iões λ_i . Segue da equação (1.7) que d varia de forma aproximada proporcionalmente a $\sqrt{(T_e + T_h)/k_i}$ com a variação de T_e para T_h e p fixos. À medida que T_e aumenta, k_i aumenta mais rapidamente do que T_e na região de interesse de T_e , incluindo para T_e altas. Logo, o comprimento de ionização d decresce com o aumento de T_e e a razão λ_i/d , que tem o significado de o número de Knudsen local, aumenta. Para T_e suficientemente altas, λ_i/d torna-se comparável ou maior do que a unidade. Isto significa que o acoplamento entre os iões e os átomos na camada de ionização não é suficientemente forte e uma descrição de difusão do movimento relativo ião-átomo na camada deixa de ser válida. Uma teoria apropriada para tais condições pode ser desenvolvida com base na chamada descrição multifluido do plasma, que se traduz em tratar os iões e os átomos como fluidos separados, coexistindo uns com os outros; e.g., [Frank-Kamenetskii 1969, Franklin 1976, Kim *et al.* 2005]. Nessa abordagem, as equações do movimento dos fluidos iónicos e atómicos envolvem termos que tomam em conta a inércia, o gradiente da pressão, a força do campo eléctrico que afecta os iões, a transferência de momento (força de fricção) entre os iões e os átomos devido às colisões elásticas, e a transferência de momento devido à ionização e recombinação no volume do plasma. A diferença em relação à teoria de difusão reside nos termos que representam a inércia e a transferência de momento devido à ionização e recombinação. As equações de Stefan-Maxwell contêm todos os termos acima mencionados excepto estes dois.

Uma teoria de multifluido da camada de ionização para descargas de arco de alta pressão foi considerada em [Benilov 1995, Benilov & Naidis 1998]. O resultado principal foi o seguinte. Considere-se a razão $\alpha = d/\lambda_i$, que tem o significado do inverso do número de Knudsen. A teoria de difusão fornece uma boa aproximação para T_e não muito altos, onde $\alpha \gg 1$. À medida que T_e aumenta e α se torna comparável e depois muito menor do que a unidade, o crescimento da corrente dos iões torna-se mais lento do que o previsto pela teoria de difusão e depois começa a decrescer. Assim, enquanto que a corrente iónica obtida na aproximação da difusão aumenta de uma forma monótona em toda a gama considerada de T_e , a teoria de multifluido prevê uma dependência não-monótona. Ao contrário do que se possa pensar, a limitação da corrente iónica não está ligada à ionização completa do plasma.

Em [Benilov 1995] obtiveram-se soluções no âmbito do modelo multifluido apenas para graus de ionização na fronteira exterior da camada de ionização inferiores a cerca de 0.6, pois para valores superiores surgiram dificuldades nos cálculos. A razão das dificuldades foi esclarecida em [Benilov & Naidis 1998]: deveu-se a ter-se considerado apenas um dos ramos de uma equação quadrática, quando na verdade ambos os ramos têm significado físico. A tarefa do estudo da troca de ramos é delicada e não foi tratada em [Benilov & Naidis 1998]. Uma teoria da camada de ionização para um plasma completamente ionizado tomando em conta a troca de ramos foi desenvolvida em [Almeida *et al.* 2004] e constitui o capítulo 3 desta dissertação. Posteriormente, os trabalhos [Scharf & Brinkmann 2006, Scharf *et al.* 2007] debruçaram-se sobre o mesmo problema. Em [Scharf & Brinkmann 2006] foram analisados e reproduzidos os resultados obtidos em [Almeida *et al.* 2004] e foram sugeridos possíveis melhoramentos. Em [Scharf *et al.* 2007] foram comparadas as suposições e aproximações usadas em [Almeida *et al.* 2004] e em [Lichtenberg *et al.* 2005].

Vamos agora considerar modelos recentes da camada junto ao cátodo como um todo. Existem três modelos com uma bainha de carga de espaço livre de colisões: o modelo formulado em [Benilov & Marotta 1995] e modificado em [Benilov & Cunha 2002, Benilov & Cunha 2003*a*] (um resumo das equações deste modelo pode ser encontrado em [Benilov *et al.* 2005]); o modelo [Schmitz & Riemann 2002]; e o modelo [Lichtenberg *et al.* 2005]. Existe ainda um modelo [Paul, Takemura, Hiramoto, Erraki, Dawson, Zissis, Gonzalez, Gleizes, Benilov & Lavers 2006], que é semelhante a [Benilov & Marotta 1995], exceptuando os factos de o movimento iónico através da bainha de carga de espaço ser tratado como dominado por colisões e a bainha ser descrita por meio da solução [Benilov & Coulombe 2001].

O modelo [Benilov & Marotta 1995, Benilov & Cunha 2002, Benilov & Cunha 2003*a*] baseia-se na solução multifluido da camada de ionização [Benilov & Naidis 1998], que toma em conta a inércia dos iões e dos átomos e a transferência de momento devido às reacções no volume do plasma e que por isso é suposto ser aplicável para todos os α . O modelo [Schmitz & Riemann 2002] foi formulado para o caso $d \gg \lambda_i$ e, consequentemente, emprega uma solução de difusão, que não toma em consideração nem inércia nem transferência de momento devido às reacções no volume. O modelo [Lichtenberg *et al.* 2005] foi também formulado para o caso $d \gg \lambda_i$. Neste trabalho, tentou-se expandir a região de aplicabilidade da solução para a camada de ionização tomando em conta a transferência de momento devido a reacções no volume, embora não se tenha considerado a inércia.

Existem modelos de camadas junto ao cátodo em descargas de arco de alta pressão nos quais a bainha de carga de espaço é descartada, e.g., [Fischer 1987, Haidar 1999, Sansonnens *et al.* 2000, Flesch & Neiger 2005, Flesch 2006] e as referências neles contidas. Estes modelos dificilmente conseguirão explicar o valor medido da queda de tensão junto ao cátodo, que pode atingir valores tão altos como 55 V [Mentel *et al.* 2000], e não são confirmados pela modelização unificada que irá ser apresentada no capítulo 2.

1.3.3 Camadas anódicas

Com o decorrer dos anos, assumiu-se que os fenómenos junto ao ânodo em descargas de arco de alta pressão têm um papel menor relativamente aos fenómenos junto ao cátodo, no que diz respeito ao desempenho de dispositivos de arco, e consequentemente atraíram consideravelmente menor atenção.

Modelização unidimensional (1D) das camadas junto ao ânodo em descargas de arco de alta pressão foi relatada em [Dinulescu & Pfender 1980, Nazarenko & Panevin 1989, Lenef *et al.* 2004]. Os modelos [Dinulescu & Pfender 1980, Nazarenko & Panevin 1989] continham uma equação de difusão (ambipolar) e equações de energia separadas para os electrões e para as partículas pesadas, i.e., estes modelos não assumiam equilíbrio de ionização e equilíbrio térmico. Por outro lado, foi empregue a suposição de quaseneutralidade, i.e., a bainha de carga de espaço junto ao ânodo foi descartada. Foram apresentados resultados dos cálculos para um arco de árgon à pressão atmosférica com uma densidade de corrente de 0.9×10^7 A m⁻². Em [Nazarenko & Panevin 1989], foi feita uma análise cuidadosa dos mecanismos físicos da camada junto ao ânodo através da comparação de diferentes termos das equações. Em [Lenef *et al.* 2004], foi levada em conta a bainha junto ao ânodo. Para além disso, em [Lenef *et al.* 2004], tentou-se ter uma ideia do efeito da difusão radial das partículas carregadas, do transporte radial da energia dos electrões e das partículas pesadas, e do campo eléctrico radial. Estes efeitos foram estimados com o uso de uma variação prescrita do raio do canal do arco; adicionalmente, a aproximação de quaseneutralidade foi empregue de maneira a estimar o campo eléctrico radial.

Em [Amakawa *et al.* 1998], foram estudados o efeito do escoamento do gás em arcos de alta intensidade na queda de potencial anódica negativa e o fluxo de calor para o ânodo. Isso foi feito através de uma modelização numérica 2D, que não se baseava em suposições de equilíbrio de ionização e equilíbrio térmico, mas que ainda usava a suposição de quaseneutralidade. Foram apresentados resultados dos cálculos para um plasma de árgon à pressão atmosférica com uma corrente de 200 A. Descobriu-se que a camada de fronteira anódica dependia fortemente da taxa de escoamento de massa no caso da ligação do arco ao eléctrodo ser difusa. Em contraste, a camada de fronteira anódica parecia não depender da taxa de escoamento de massa no caso da fixação ser constrita.

Em [Redwitz *et al.* 2006], foi relatada uma investigação experimental detalhada de fenómenos do ânodo numa lâmpada modelo cheia com gases inertes (Ar, Xe, Kr). A corrente do arco variou entre 0.5 e 10 A e a pressão do plasma entre 1 e 10 bar. A ligação do arco ao eléctrodo ocorreu no modo constrito, o qual é caracterizado por um escoamento do plasma do ânodo para o volume do plasma. Em frente do ânodo está presente uma queda de tensão negativa, à semelhança do que acontece em arcos de alta corrente.

Transições espectaculares entre modos, observadas nos cátodos a baixas correntes, não são normalmente observadas nos ânodos. Por outro lado, existem alguns fenómenos que são apenas observáveis nos ânodos, por exemplo, a constrição múltipla [Baksht *et al.* 1997, Yang & Heberlein 2007*a*, Yang & Heberlein 2007*b*].

1.4 Enquadramento do trabalho

A divisão da camada de plasma junto ao cátodo em sub-camadas com diferentes propriedades reflecte o facto de, em muitos casos, embora nem sempre, diferentes mecanismos físicos entrarem em jogo em escalas de comprimento diferentes. No entanto, o uso desta divisão como base para um modelo de cálculo envolve, inevitavelmente, considerações intuitivas e por isso não é uma maneira apropriada para desenvolver compreensão física comummente aceite e/ou modelos de simulação. De facto, nem existe um ponto de vista universalmente aceite no que se refere à questão básica de quais sub-camadas são as mais importantes e têm de ser incluídas necessariamente num modelo: enquanto que a maioria dos autores acredita que uma bainha de carga de espaço junto ao cátodo é de importância primária, existem modelos, alguns deles recentes, nos quais a bainha de carga de espaço é descartada; e.g., [Fischer 1987, Haidar 1999, Sansonnens *et al.* 2000, Flesch & Neiger 2005, Flesch 2006].

Uma alternativa a abordagens que se baseiam numa introdução *a priori* de diferentes sub-camadas é modelizar toda a camada de não-equilíbrio junto ao cátodo no âmbito de um conjunto único de equações sem suposições simplificativas tais como equilíbrio térmico,

1. Introdução

equilíbrio de ionização (Saha), e quaseneutralidade. Após ter sido completada essa modelização unificada, poderemos identificar mecanismos físicos que dominam as diferentes regiões e assim introduzir as sub-camadas apropriadas. Apesar de ser altamente desejável, uma modelização numérica unificada de camadas de não-equilíbrio junto ao cátodo em descargas de arco de alta pressão não foi realizada até ao momento por ser muito complexa computacionalmente. Uma modelização a duas dimensões (2D) de plasmas de arco de alta pressão sem a suposição de equilíbrio térmico ou de equilíbrio de ionização já foi relatada (e.g., [Amakawa et al. 1998, Haidar 1999]), no entanto, com a utilização da suposição de quaseneutralidade. Note-se que remover a suposição de quaseneutralidade implica resolver a equação de Poisson em regiões onde o grau de quaseneutralidade é bastante grande, nomeadamente no volume do plasma, o que introduz dificuldades numéricas acrescidas. Em [Benilov et al. 1995], foram modelizadas as camadas de fronteira de um plasma de combustão de alta pressão com um aditamento de uma quantidade pequena de um metal alcalino, no âmbito de uma abordagem unidimensional (1D) sem suposições de equilíbrio térmico ou de ionização nem mesmo de quaseneutralidade, no entanto, apenas para condições de densidades de corrente baixas e, consequentemente, baixo grau de ionização e baixo grau de quaseneutralidade.

Camadas de não-equilíbrio junto ao ânodo são descritas pelas mesmas equações que descrevem as camadas junto ao cátodo, e por isso podem ser simuladas através do mesmo código. Ou seja, um código ao ser desenvolvido e testado para o cátodo poderá também ser utilizado para o ânodo.

Surge, assim, a motivação principal do nosso trabalho: descrever através de uma modelização unificada com base num único conjunto de equações a camada de não-equilíbrio junto aos cátodos e ânodos em descargas de arco de alta pressão.

A acima descrita modelização unificada será realizada com base nas equações hidrodinâmicas, ou seja, com base numa descrição de difusão. No entanto, como já foi dito na secção 1.3.2, o modelo de difusão não é aplicável na camada de ionização junto ao cátodo no caso de temperaturas dos electrões altas. Para preencher esta lacuna, é desenvolvida no capítulo 3 uma teoria da camada de ionização com base num modelo multifluido.

1.5 Organização da tese

Para além do capítulo 1 (Introdução), esta dissertação está dividida em quatro capítulos e 2 apêndices. Cada capítulo começa com um breve sumário. O capítulo 2 é dedicado à modelização unificada das camadas de não-equilíbrio junto ao cátodo em descargas de arco de alta pressão. A estrutura deste capítulo é a seguinte. A secção 1 contém uma breve introdução. Na secção 2, são apresentadas as equações do modelo juntamente com as condições fronteira correspondentes. Na secção 3, é apresentado o método da solução numérica. Os resultados dos cálculos são apresentados e discutidos na secção 4. Na secção

1. Introdução

5, é apresentada uma comparação com dados experimentais. As conclusões deste capítulo são apresentadas na secção 6. O capítulo 2 tem um apêndice associado (apêndice A) que descreve o modo de cálculo dos coeficientes de transporte, cinéticos e de radiação.

No capítulo 3, uma teoria da camada de ionização para temperaturas dos electrões altas é desenvolvida com base num modelo multifluido. A estrutura deste capítulo é a que segue. A secção 1 contém uma breve introdução. Na secção 2, são apresentadas as equações do modelo juntamente com as condições fronteira correspondentes. Um tratamento analítico e numérico do problema é apresentado na secção 3. Os resultados obtidos são discutidos na secção 4 e comparados com dados experimentais na secção 5. As conclusões deste capítulo são apresentadas na secção 6. O capítulo 3 tem um apêndice associado constituído por nove sub-apêndices (sub-apêndices B.1-B.9).

O capítulo 4 é dedicado à modelização unificada das camadas de não-equilíbrio junto ao ânodo em descargas de arco de alta pressão. O modelo que foi desenvolvido no capítulo 2 é utilizado neste capítulo. A estrutura do capítulo 4 é a seguinte. A secção 1 contém uma breve introdução. Na secção 2, é identificado o objecto da modelização e as alterações introduzidas relativamente ao modelo apresentado no capítulo 2. Na secção 3, são apresentados e discutidos os resultados dos cálculos e é também apresentada uma comparação com dados experimentais. As conclusões deste capítulo são apresentadas na secção 4.

No capítulo 5, são tecidas considerações finais sobre os resultados obtidos nesta dissertação e são considerados melhoramentos passíveis de ser incluídos em futuros modelos.

Capítulo 2

Modelização unificada de camadas de plasma junto ao cátodo em descargas de arco de alta pressão

Neste capítulo é desenvolvido um modelo de uma região junto ao cátodo em descargas de arco de alta pressão no âmbito da aproximação hidrodinâmica (de difusão). As equações governantes são resolvidas numericamente em 1D no âmbito de um conjunto único de equações sem suposições simplificativas tais como equilíbrio térmico, equilíbrio de ionização (Saha), quaseneutralidade e sem dividir explicitamente a região junto ao cátodo numa bainha de carga de espaço e num plasma quaseneutro. São relatados os resultados da simulação numérica para um arco de mercúrio a muito alta pressão e para um arco de árgon à pressão atmosférica. São identificados os mecanismos físicos que dominam as diferentes secções da região junto ao cátodo, o que nos permite identificar as sub-camadas apropriadas. Mostra-se que a bainha de carga de espaço junto ao cátodo é de importância primária para condições de interesse prático. São analisadas as bases físicas dos modelos simplificados da região junto ao cátodo em descargas de arco de alta pressão. Uma comparação entre os resultados fornecidos pelo actual modelo e os resultados de um modelo simplificado revelou uma concordância qualitativa; para o caso de um plasma de árgon à pressão atmosférica para valores moderados da queda de tensão junto ao cátodo, a concordância para além de ser qualitativa é também quantitativa. Os resultados da modelização são comparados com resultados de medições espectroscópicas da temperatura e densidade dos electrões na região junto ao cátodo.

2.1 Introdução

Já há muito tempo se chegou à conclusão de que uma descrição adequada da camada de plasma junto ao cátodo é um elemento chave de uma teoria de interacção plasma-cátodo

2. Modelização unificada de camadas de plasma junto ao cátodo em descargas de arco de alta pressão

em descargas de arco de alta pressão. Existem muitos trabalhos que tratam as camadas de plasma junto ao cátodo (ver, e.g., [Zhou & Heberlein 1994, Benilov 1995, Benilov & Marotta 1995, Rethfeld *et al.* 1996, Benilov & Naidis 1998, Almeida *et al.* 2000, Schmitz & Riemann 2001, Benilov & Coulombe 2001, Schmitz & Riemann 2002, Lichtenberg *et al.* 2005, Scharf & Brinkmann 2006, Li & Benilov 2007, Scharf *et al.* 2007]; alguns destes artigos já foram discutidos na secção 1.3.2). No entanto, ainda não existe um entendimento universalmente aceite da física envolvida, nem existem modelos de simulação universalmente empregues. Em parte, o estado insatisfatório da teoria deve-se à diversidade dos mecanismos físicos envolvidos e à complexidade do panorama físico geral. Por outro lado, as camadas junto ao cátodo das descargas de arco de alta pressão representam um objecto extremamente difícil para investigação experimental devido às suas dimensões muito pequenas e às condições extremas típicas nas descargas de arco. Assim, a experiência não consegue fornecer muita orientação para a teoria.

Os trabalhos publicados tratam os diferentes aspectos das camadas de plasma junto ao cátodo e usam diferentes abordagens, no entanto todos eles têm um ponto em comum: a camada de plasma junto ao cátodo é dividida *a priori* num número de sub-camadas com propriedades diferentes (tais como uma camada de não-equilíbrio térmico, uma camada de ionização, uma bainha de carga de espaço junto ao cátodo, etc.), cada sub-camada é descrita pelo seu próprio conjunto de equações e as soluções nas sub-camadas adjacentes são ligadas de uma maneira ou de outra numa fronteira entre as sub-camadas.

Uma alternativa à abordagem acima descrita consiste em modelizar toda a região junto ao cátodo, no âmbito de um único conjunto de equações sem qualquer tipo de suposições simplificativas, ou seja, sem considerar equilíbrio térmico, equilíbrio de ionização (Saha), ou quaseneutralidade. Tal modelização numérica unificada de camadas de plasma junto ao cátodo em descargas de arco de alta pressão ainda não foi relatada.

Neste trabalho, é executada uma modelização 1D das camadas de plasma junto ao cátodo com densidades de corrente desde $10^6 \,\mathrm{A}\,\mathrm{m}^{-2}$ até $10^8 \,\mathrm{A}\,\mathrm{m}^{-2}$, que são valores típicos para cátodos de descargas de arco a alta pressão. São apresentados resultados detalhados dos cálculos para um arco de árgon à pressão atmosférica, que é uma espécie de arco de alta pressão estandardizado, e um arco de mercúrio à pressão de 100 bar, que é um caso típico para lâmpadas de descarga de alta intensidade (HID). São elucidados os mecanismos físicos dominantes e é analisada a validade das suposições nas quais se baseiam os modelos simplificados disponíveis.

As funções de distribuição dos iões e dos electrões no volume da região junto ao cátodo de uma descarga de arco de alta pressão são próximas da de Maxwell devido às colisões frequentes ião-ião, ião-átomo, e electrão-electrão. Consequentemente, o volume da região junto ao cátodo de uma descarga de arco de alta pressão pode ser descrito adequadamente por equações hidrodinâmicas convencionais (de difusão). A situação é diferente numa secção muito fina da região junto ao cátodo imediatamente adjacente à superfície do cátodo,

onde podem ocorrer desvios da distribuição de Maxwell. Logo, no caso geral, podem ser necessárias equações mais complexas do que as equações hidrodinâmicas convencionais de maneira a descrever uniformemente toda a região junto ao cátodo. No entanto, tais complicações são desaconselháveis num primeiro passo. Neste capítulo, é executada a modelização unificada das camadas de plasma junto ao cátodo em descargas de arco com base nas equações hidrodinâmicas convencionais.

Uma atenção especial é dedicada à análise da aplicabilidade da descrição hidrodinâmica. Esta análise mostra que a descrição hidrodinâmica é bem justificada no caso de arcos em lâmpadas de descarga de alta intensidade (plasma de mercúrio a muito alta pressão). No caso de arcos de árgon à pressão atmosférica verifica-se que a descrição hidrodinâmica deve fornecer resultados com precisão aceitável desde que a queda de tensão junto ao cátodo seja baixa ou moderada. Para valores altos da queda de tensão a descrição hidrodinâmica não é bem justificada, sendo necessária uma descrição mais adequada da camada de ionização. Nesta sequência, no capítulo 3 uma teoria para a camada de ionização é desenvolvida no âmbito do modelo multifluido.

2.2 O modelo

2.2.1 Sistema de equações

Vamos considerar a região junto ao cátodo de uma descarga de arco num gás atómico sujeito a uma alta pressão, da ordem da pressão atmosférica ou superior. Os efeitos convectivos na região junto ao cátodo são negligenciados. O plasma é composto por átomos neutros, iões, e electrões; a presença de iões multipositivos é negligenciada de acordo com a justificação dada em [Almeida *et al.* 2000]. Os átomos e iões têm a mesma temperatura T_h que é, no caso geral, diferente da temperatura dos electrões T_e .

O sistema de equações que governa as distribuições espaciais dos parâmetros do plasma na região junto ao cátodo é como se segue. As equações de conservação das espécies são

$$\nabla \cdot \mathbf{J}_{\alpha} = \omega_{\alpha}, \qquad \alpha = i, e, a. \tag{2.1}$$

Aqui \mathbf{J}_{α} é a densidade numérica do fluxo de transporte da espécie α ($\mathbf{J}_{\alpha} = n_{\alpha}\mathbf{v}_{\alpha}$, onde n_{α} e \mathbf{v}_{α} são, respectivamente, a densidade numérica e a velocidade média das partículas da espécie α), ω_{α} é a taxa de produção de partículas da espécie α em reacções no volume, e os índices i, e, a referem-se a iões, electrões e átomos, respectivamente. O mecanismo de ionização dominante em plasmas atómicos é o de ionização através de colisões com electrões e o mecanismo de recombinação dominante é o de recombinação com um electrão a actuar como terceiro corpo, então

$$\omega_i = \omega_e = -\omega_a = k_i n_a n_e - k_r n_i n_e^2, \qquad (2.2)$$

2. Modelização unificada de camadas de plasma junto ao cátodo em descargas de arco de alta pressão

onde k_i e k_r são, respectivamente, a constante de taxa de ionização e a constante de taxa de recombinação. A avaliação destas constantes e de todos os outros coeficientes de transporte, cinéticos e de radiação é descrita no apêndice A.

Adicionando as equações (2.1) para os iões e átomos, chegamos à equação de conservação dos núcleos

$$\nabla \cdot (\mathbf{J}_i + \mathbf{J}_a) = 0. \tag{2.3}$$

Subtraindo a equação (2.1) para os electrões à equação (2.1) para os iões, obtemos

$$\nabla \cdot (\mathbf{J}_i - \mathbf{J}_e) = 0. \tag{2.4}$$

Uma vez que $\mathbf{J}_i - \mathbf{J}_e = \mathbf{j}/e$, onde \mathbf{j} é a densidade de corrente eléctrica, a equação (2.4) tem o significado de equação de continuidade da corrente eléctrica. No que se segue, as equações (2.3) e (2.4) serão usadas em vez da equação (2.1) para os iões e átomos.

Se o grau de ionização de um plasma for suficientemente baixo, o transporte das espécies do plasma pode ser descrito por meio da lei de Fick, escrita para os iões e para os electrões; conhecida por aproximação de deriva-difusão (e.g., [Kim *et al.* 2005]). Como os plasmas nas descargas de arco estão com frequência fortemente ou até mesmo completamente ionizados, o uso da lei de Fick, neste contexto, seria inapropriado e teriam de ser usadas equações de transporte tomando em conta a difusão de componentes múltiplos. Tais equações são deduzidas na teoria cinética dos gases; e.g., [Hirschfelder *et al.* 1964, Monchick *et al.* 1966, Ferziger & Kaper 1972, Zhdanov 2002, Zhdanov & Tirskii 2003]. Quando resolvidas em relação às forças de difusão, são chamadas equações de Stefan-Maxwell (e.g., [Zhdanov 2002, Rat *et al.* 2008] e referências inclusas) e podem ser escritas como

$$-\nabla p_{\alpha} + n_{\alpha} e Z_{\alpha} \mathbf{E} + \frac{\rho_{\alpha}}{\rho} \left[\nabla p - e \left(n_i - n_e \right) \mathbf{E} \right] - \sum_{\beta} \frac{n_{\alpha} n_{\beta} k T_{\alpha\beta} C_{\alpha\beta}}{n D_{\alpha\beta}} \left(\mathbf{v}_{\alpha} - \mathbf{v}_{\beta} \right) - \mathbf{R}_{\alpha}^T = 0, \quad (2.5)$$

onde

$$m_{\alpha\beta} = \frac{m_{\alpha}m_{\beta}}{m_{\alpha} + m_{\beta}}, \quad T_{\alpha\beta} = \frac{m_{\alpha}T_{\beta} + m_{\beta}T_{\alpha}}{m_{\alpha} + m_{\beta}}.$$
 (2.6)

Aqui $\alpha, \beta = i, e, a; m_{\alpha}, T_{\alpha}, \rho_{\alpha} = n_{\alpha}m_{\alpha}$, e $p_{\alpha} = n_{\alpha}kT_{\alpha}$ são a massa, a temperatura, a massa volúmica, e a pressão parcial das partículas de espécie α (voltamos a lembrar que $T_i = T_a = T_h \neq T_e$); $n = \sum_{\beta} n_{\beta}, \rho = \sum_{\beta} \rho_{\beta}$, e $p = \sum_{\beta} p_{\beta}$ são a densidade numérica total, a densidade de massa e a pressão do plasma; $D_{\alpha\beta}$ são coeficientes de difusão binária, avaliados na primeira aproximação em expansão de polinómios de Sonine no método de Chapman– Enskog e $C_{\alpha\beta}$ são coeficientes de ordem unitária que introduzem correcções que surgem em aproximações mais elevadas (note-se que $D_{\beta\alpha} = D_{\alpha\beta}, C_{\beta\alpha} = C_{\alpha\beta}$); $m_{\alpha\beta}$ e $T_{\alpha\beta}$ são a massa e temperatura reduzidas; os termos \mathbf{R}_{α}^{T} representam a difusão térmica; \mathbf{E} é o campo eléctrico. Note-se que as equações (2.5) podem ser vistas de uma maneira simplificada como equações de conservação de momento das espécies escritas com base na suposição que as forças de inércia são desprezáveis, com o primeiro, segundo, e quarto termos no lado esquerdo das

2. Modelização unificada de camadas de plasma junto ao cátodo em descargas de arco de alta pressão

equações (2.5) tendo o significado de, respectivamente, o gradiente de pressão da espécie α , a força exercida sobre esta espécie pelo campo eléctrico e a força de fricção resultante entre esta espécie e as outras.

As forças de difusão térmica \mathbf{R}_{α}^{T} são dadas pelas fórmulas

$$\mathbf{R}_{\alpha}^{T} = C_{\alpha}^{(h)} n_{\alpha} k \nabla T_{h} + C_{\alpha}^{(e)} n_{\alpha} k \nabla T_{e}, \qquad \mathbf{R}_{e}^{T} = C_{e}^{(e)} n_{e} k \nabla T_{e}, \qquad (2.7)$$

para as partículas pesadas ($\alpha = i, a$) e para os electrões, respectivamente. (Saliente-se que a equação de transporte para os electrões não contém um termo com ∇T_h , uma vez que a força correspondente é insignificante devido à pequenez da razão entre as massas electrão-ião [Zhdanov 2002]). Os coeficientes de difusão térmica $C_{\alpha}^{(h)} \in C_{\alpha}^{(e)}$ satisfazem as igualdades

$$n_a C_a^{(h)} + n_i C_i^{(h)} = 0, \quad \sum_{\alpha} n_{\alpha} C_{\alpha}^{(e)} = 0.$$
 (2.8)

As equações (2.5) são dependentes (a soma destas equações sobre α dá um resultado trivial), consequentemente qualquer uma delas pode ser posta de parte. Vamos pôr de lado a equação para os átomos.

A suposição de convecção negligenciável requer que a força exercida pelo campo eléctrico sobre o plasma seja compensada pelo gradiente de pressão do plasma:

$$-\nabla p + e\left(n_i - n_e\right)\mathbf{E} = 0. \tag{2.9}$$

Segue daqui, em particular, que o terceiro termo no lado esquerdo das equações (2.5) desaparece.

As equações de energia para os electrões e para as partículas pesadas podem ser escritas como [Zhdanov 2002]

$$\nabla \cdot \left(\frac{5}{2}kT_e \mathbf{J}_e + \mathbf{h}_e\right) = -e\mathbf{J}_e \cdot \mathbf{E} - \frac{3n_e k^2 T_e}{m_i n} \left(T_e - T_h\right) \left(\frac{n_a}{D_{ea}} + \frac{n_i}{D_{ei}}\right) - w_e^{(e)}, \qquad (2.10)$$

$$\nabla \cdot \left(\frac{5}{2}kT_h \mathbf{J}_a + \frac{5}{2}kT_h \mathbf{J}_i + \mathbf{h}_{hp}\right) = e\mathbf{J}_i \cdot \mathbf{E} + \frac{3n_e k^2 T_e}{m_i n} \left(T_e - T_h\right) \left(\frac{n_a}{D_{ea}} + \frac{n_i}{D_{ei}}\right), \quad (2.11)$$

onde $\mathbf{h}_e \in \mathbf{h}_{hp}$ são as densidades dos fluxos de calor transportados pelos electrões e pelas partículas pesadas, respectivamente. Os termos com o factor 5/2 no lado esquerdo de cada uma destas equações representam o transporte de entalpia pelos fluxos de difusão. O primeiro termo no lado direito representa o aquecimento de Joule dos electrões ou, respectivamente, dos iões. O segundo termo representa a troca de energia entre os electrões e as partículas pesadas devido às colisões elásticas. O terceiro termo no lado direito da equação (2.10) representa as perdas de energia dos electrões devido às colisões inelásticas e pode ser escrito como [Mitchner & Kruger 1973]

$$w_e^{(e)} = A_i \omega_e + w_{\rm rad}, \qquad (2.12)$$
onde A_i é a energia de ionização de um átomo e $w_{\rm rad}$ designa as perdas de energia dos electrões através de radiação ou, por outras palavras, o coeficiente de emissão líquido (e.g., [Lowke 1970, Gleizes *et al.* 2005]) integrado sobre o ângulo sólido.

Somando as equações (2.10) e (2.11), obtemos uma equação de conservação da energia do plasma como um todo. Com o uso da equação (2.1) com $\alpha = e$ e da equação (2.12), esta equação pode ser escrita como

$$\nabla \cdot \left[\frac{5}{2}kT_h \mathbf{J}_a + \frac{5}{2}kT_h \mathbf{J}_i + \left(\frac{5}{2}kT_e + A_i\right)\mathbf{J}_e + \mathbf{h}_e + \mathbf{h}_{hp}\right] = \mathbf{E} \cdot \mathbf{j} - w_{\text{rad}}.$$
 (2.13)

Vamos multiplicar a equação (2.4) por $(A_i - A_f)$, onde A_f é a função de trabalho do material do cátodo. Somando a equação obtida com a equação (2.13), obtemos uma outra forma da equação de conservação da energia do plasma:

$$\nabla \cdot \left[\frac{5}{2}kT_h \mathbf{J}_a + \left(\frac{5}{2}kT_h + A_i - A_f\right)\mathbf{J}_i + \left(\frac{5}{2}kT_e + A_f\right)\mathbf{J}_e + \mathbf{h}_e + \mathbf{h}_{hp}\right] = \mathbf{E} \cdot \mathbf{j} - w_{\text{rad}}.$$
(2.14)

As equações (2.13) e (2.14) representam corolários úteis das equações (2.10) e (2.11). Os vectores dentro dos parêntesis rectos nos lados esquerdos das equações (2.13) e (2.14) representam a densidade do fluxo de energia do plasma; a não-unicidade desta quantidade decorre da dependência do fluxo de energia de uma mistura reactiva de componentes múltiplos na escolha dos zeros de entalpia dos elementos.

As densidades dos fluxos de calor dos electrões e das partículas pesadas representam uma combinação de fluxos de calor, causados pela condução de calor e pelo efeito inverso à difusão térmica, e são escritas como [Zhdanov 2002]

$$\mathbf{h}_{e} = -\kappa_{e} \nabla T_{e} + k T_{e} n_{e} \left[A_{i}^{(e)} \left(\mathbf{v}_{e} - \mathbf{v}_{i} \right) + A_{a}^{(e)} \left(\mathbf{v}_{e} - \mathbf{v}_{a} \right) \right], \qquad (2.15)$$

$$\mathbf{h}_{hp} = -\kappa_{hp} \nabla T_h + kT_h \left[n_i A_i^{(h)} \left(\mathbf{v}_i - \mathbf{v}_a \right) + n_a A_a^{(h)} \left(\mathbf{v}_a - \mathbf{v}_i \right) \right], \qquad (2.16)$$

onde $\kappa_e \in \kappa_{hp}$ são, respectivamente, as condutividades térmicas do gás de electrões e do gás de partículas pesadas e $A_i^{(e)}$, $A_a^{(e)}$, $A_i^{(h)}$, e $A_a^{(h)}$ são coeficientes cinéticos (ver apêndice A).

O conjunto de equações inclui também a equação de Poisson

$$\varepsilon_0 \nabla \cdot \mathbf{E} = e \left(n_i - n_e \right). \tag{2.17}$$

Usando esta equação, a equação (2.9) pode ser reescrita como

$$\nabla p = \varepsilon_0 \left(\nabla \cdot \mathbf{E} \right) \mathbf{E}. \tag{2.18}$$

O objectivo principal deste capítulo é estudar a secção da região junto ao cátodo onde é gerado o fluxo de energia para a superfície do cátodo. Como a espessura desta secção é muito menor do que as dimensões transversais do cátodo, a densidade de corrente eléctrica não

muda muito nesta secção e a transferência de corrente através desta secção da região junto ao cátodo pode ser tratada como localmente planar. Nessa situação, é natural considerar um modelo planar 1D, que descreve uma transferência de corrente entre planos-paralelos para um cátodo planar através de uma região junto ao cátodo planar. Por outro lado, podemos dar um passo mais à frente e considerar um modelo 1D esfericamente simétrico, que descreve uma transferência de corrente esfericamente simétrica para um cátodo hemisférico através de uma região junto ao cátodo esfericamente simétrica. No que diz respeito a uma camada fina junto ao cátodo, o modelo esfericamente simétrico dará uma solução perto da dada pelo modelo planar; adicionalmente, o modelo esfericamente simétrico pode fornecer informação útil relativamente aos mecanismos físicos da zona de constrição, que é uma parte exterior da região junto ao cátodo onde a densidade de corrente eléctrica varia entre valores típicos para a coluna de arco e valores consideravelmente maiores na superfície do cátodo. Neste capítulo, é empregue o modelo 1D esfericamente simétrico.

Vamos designar por r_c o raio do cátodo (hemisférico), por x a distância desde a superfície do cátodo, medida na direcção radial (de maneira que $r = r_c + x$ representa a distância desde o centro do cátodo), e por J_{α} , j, E etc as componentes radiais dos vectores correspondentes. As equações acima são escritas na forma 1D sob a suposição de simetria esférica, após o que as equações (2.3), (2.4), e (2.18) podem ser integradas dando lugar a:

$$J_i + J_a = 0, (2.19)$$

$$J_i - J_e = \frac{j}{e} = -\frac{j_c}{e} \frac{1}{B},$$
(2.20)

$$p = p_0 + \varepsilon_0 \left(\frac{E^2 - E_0^2}{2} - 2 \int_x^{r_0 - r_c} \frac{E^2}{r_c + x} \, dx \right).$$
(2.21)

Aqui j_c é uma constante que tem o significado da densidade de corrente eléctrica vinda do plasma para a superfície do cátodo (um parâmetro dado), $B = (1 + x/r_c)^2$, $r = r_0$ é um ponto de referência e E_0 e p_0 são, respectivamente, o campo eléctrico e a pressão do plasma nesse ponto. A equação (2.19) é escrita tomando em conta que os núcleos não se acumulam nem desaparecem na superfície do cátodo. Note-se que é conveniente escolher o ponto de referência longe do cátodo. Assim, o segundo termo no lado direito da equação (2.21), embora seja comparável para densidades de corrente altas com o primeiro termo na bainha de carga de espaço junto ao cátodo para um plasma de Hg de muito alta pressão e para um plasma de Ar à pressão atmosférica, é pequeno fora da bainha. Logo, p_0 pode ser interpretada como a pressão do plasma na câmara do arco. Neste capítulo, a pressão p_0 é tratada como um parâmetro dado.

2.2.2 Condições fronteira

O sistema de equações diferenciais ordinárias a ser resolvido contém a equação (2.1) com $\alpha = e$; a equação (2.5) com $\alpha = i, e$; as equações de energia (2.10) e (2.11) [qualquer uma destas equações pode ser substituída pela equação (2.13) ou pela equação (2.14)]; as equações (2.15), (2.16), e (2.17). Estas equações são resolvidas no domínio $0 \le x \le L$, onde a fronteira inferior x = 0 corresponde à superfície do cátodo e a fronteira superior x = L é colocada suficientemente longe do cátodo na zona de constrição.

Intuitivamente, poderíamos esperar que fosse necessário especificar onze condições fronteira: condições fronteira para a densidade de cada uma das espécies e para as temperaturas dos electrões e das partículas pesadas na superfície do cátodo; condições semelhantes em x = L; e uma condição a especificar a queda de tensão aplicada ao domínio do plasma em consideração. Esta última condição é especificada implicitamente em termos da densidade de corrente na superfície do cátodo j_c , que é tratada como um parâmetro dado. Já foi introduzida e usada uma condição fronteira para as densidades das partículas na superfície do cátodo: nesta, os núcleos não se acumulam nem desaparecem. Uma outra condição fronteira para a densidade de partículas é especificada em termos da pressão p_0 , que é tratada como um parâmetro dado. Assim, mais oito condições fronteira têm de ser especificadas, e esta contagem está de acordo com o tipo de sistema de equações diferenciais que irá ser resolvido, que contém oito equações diferenciais ordinárias de primeira ordem.

Vamos restringir-nos ao caso em que a superfície do cátodo absorve todos os electrões vindos do plasma e não reflecte nenhum. Uma condição fronteira para a densidade de electrões na superfície do cátodo escreve-se como (e.g., [Arslanbekov & Kolobov 2003])

$$\frac{j_{em}}{e} - \frac{n_e C_e}{4} = J_e,$$
 (2.22)

onde $C_e = (8kT_e/\pi m_e)^{1/2}$ é a velocidade média do movimento caótico dos electrões. O lado esquerdo desta condição fronteira representa a diferença entre o fluxo dos electrões emitidos, que se movem desde a superfície do cátodo e o fluxo de electrões do plasma que se movem para a superfície do cátodo devido ao movimento caótico. O lado direito representa o fluxo líquido de electrões avaliado na aproximação hidrodinâmica. A densidade de corrente de emissão de electrões, j_{em} , é avaliada através das fórmulas de Richardson ou de Richardson-Schottky dependendo se o campo eléctrico na superfície do cátodo é dirigido para o plasma ou, respectivamente, para o cátodo.

Vamos assumir que todos os iões vindos do plasma recombinam na superfície do cátodo (e que os átomos neutros vão de volta para o plasma). Em princípio, a condição fronteira para a densidade dos iões na superfície do cátodo pode ser escrita numa forma similar à equação (2.22) sem o primeiro termo no lado esquerdo. J_i na superfície do cátodo é da ordem de $D_{ia}n_i^{(pl)}/L_i$, onde $n_i^{(pl)}$ é um valor característico da densidade de iões no plasma adjacente e L_i é uma escala local de comprimento de variação de parâmetros da espécie iónica. Segue da condição fronteira acima mencionada que a razão entre a densidade de iões na superfície do cátodo e $n_i^{(pl)}$ é da ordem da razão entre o livre percurso médio dos iões e L_i . Esta última razão representa o número de Knudsen. Nas condições de aplicabilidade das equações hidrodinâmicas, o número de Knudsen tem de ser pequeno e termos da ordem do número de Knudsen nas equações hidrodinâmicas são negligenciados. De maneira a haver consistência, tais termos também devem ser desprezados nas condições fronteira. Donde se conclui que a condição fronteira para a densidade dos iões na superfície do cátodo é densidade nula:

$$n_i = 0. \tag{2.23}$$

Esta é a bem conhecida condição fronteira hidrodinâmica numa superfície absorvente; e.g., [Su & Lam 1963, Chung *et al.* 1975]. Uma discussão mais detalhada e referências adicionais podem ser encontradas em [Benilov 1988].

A temperatura das partículas pesadas na superfície do cátodo é igual a T_w , a temperatura da superfície, que é considerada um parâmetro dado:

$$T_h = T_w. (2.24)$$

A condição fronteira para a temperatura dos electrões na superfície do cátodo é escrita na forma

$$\frac{j_{em}}{e}2kT_w - \frac{n_eC_e}{4}2kT_e = J_e\frac{5}{2}kT_e + h_e.$$
(2.25)

O primeiro termo no lado esquerdo desta condição fronteira descreve o fluxo de energia transportado pelos electrões (emitidos) que se movem desde a superfície do cátodo, avaliado sob a aproximação convencional da distribuição de velocidade ser a função (semi)maxwelliana com a temperatura da superfície do cátodo T_w ; e.g., [Benilov & Marotta 1995]. (Lembramos que a energia média por um electrão é $2kT_w$ e não $3kT_w/2$, que é o que poderíamos estar, intuitivamente, à espera. Isto é uma consequência do valor médio de um produto não ser igual ao produto dos valores médios dos multiplicadores; ver o sítio da Internet [Benilov & et al. 2009] para mais detalhes.) O segundo termo no lado esquerdo da condição fronteira (2.25) descreve o fluxo de energia transportado pelos electrões do plasma que se movem para a superfície do cátodo, e o lado direito representa o fluxo líquido da energia dos electrões avaliado na aproximação hidrodinâmica.

A fronteira superior do domínio de cálculo, x = L, é posicionada na zona de constrição, onde a densidade de corrente eléctrica varia entre valores muito altos, típicos para a superfície do cátodo, e valores mais baixos, típicos para a coluna de arco. A maioria dos modelos de descargas de arco de alta pressão baseiam-se na suposição de que o plasma de arco se encontra num estado de equilíbrio termodinâmico local (LTE) excepto na vizinhança dos eléctrodos e nas margens do arco [Gleizes *et al.* 2005]. No que diz respeito à zona de constrição, esta suposição é suportada pelas estimativas [Benilov 2008], que foram realizadas para um plasma de mercúrio a 30 bar e com $j = 10^7 \text{ A m}^{-2}$. Para além disso, as estimativas

[Benilov 2008] mostraram que o balanço de energia do plasma nestas condições é, numa primeira aproximação, dominado pela radiação, significando que o aquecimento de Joule do plasma é equilibrado aproximadamente pelas perdas de energia do plasma por radiação. Portanto, neste capítulo, as condições fronteira em x = L são formuladas assumindo que o plasma em x = L está em LTE e o seu balanço de energia é dominado pela radiação. Esta suposição será verificada após ser calculada uma solução; ver a secção 2.4.3.

Do ponto de vista matemático, a maneira adequada de introduzir as condições fronteira acima descritas é assumir que em x = L os gradientes são negligenciáveis de maneira que o balanço de número de partículas, momento e energia é local. Por outras palavras, os parâmetros do plasma em x = L são encontrados resolvendo equações (não diferenciais) que decorrem da equação (2.1) com $\alpha = e$, da equação (2.5) com $\alpha = i, e$, e das equações (2.13), (2.11), e (2.17), quando os termos com gradiente são desprezados:

$$k_i n_a - k_r n_i n_e = 0, (2.26)$$

$$n_{\alpha}eZ_{\alpha}E - \sum_{\beta} \frac{n_{\alpha}n_{\beta}kT_{\alpha\beta}C_{\alpha\beta}}{nD_{\alpha\beta}} \left(v_{\alpha} - v_{\beta}\right) = 0 \quad (\alpha = i, e), \qquad (2.27)$$

$$jE = w_{\rm rad},\tag{2.28}$$

$$eJ_iE + \frac{3n_ek^2T_e}{m_in} \left(T_e - T_h\right) \left(\frac{n_a}{D_{ea}} + \frac{n_i}{D_{ei}}\right) = 0,$$
(2.29)

$$n_i = n_e. (2.30)$$

A equação (2.26) significa que a ionização é (localmente) equilibrada pela recombinação. As equações (2.27) podem ser interpretadas como a lei de Ohm para os iões e para os electrões. A equação (2.28) significa que o aquecimento de Joule do plasma é equilibrado pelas perdas de energia do plasma através de radiação, que são muito maiores do que as perdas devido à condução de calor e devido ao transporte de entalpia pelos fluxos de difusão; o caso limite do balanço da energia do plasma ser dominado pela radiação. A equação (2.29) significa que o aquecimento de Joule dos iões é equilibrado pela energia transferida em colisões elásticas para o gás de electrões. (De facto, o aquecimento de Joule dos iões é muito pequeno nas condições de interesse e a diferença $T_e - T_h$, prevista por esta equação, é negligenciável; ver mais abaixo.) A equação (2.30) significa neutralidade eléctrica do plasma.

Em termos estritos, a equação (2.26) não é equivalente à equação de Saha, uma vez que a constante de taxa de ionização k_i na equação (2.26) depende de n_e (devido ao decaimento de estados excitados provocado pelo escape de radiação; ver apêndice A). Para T_e , T_h , e pdados, a equação (2.26) sob a suposição $n_i = n_e$ pode ser escrita como uma equação cúbica para n_e . Esta equação tem três raízes reais, das quais apenas uma é positiva.

O ponto de referência $r = r_0$ na equação (2.21) é identificado naturalmente com o limite superior do domínio de cálculo, assim $p = p_0$ em x = L.

As equações (2.26)-(2.30) são resolvidas conjuntamente com as equações (2.19) e (2.20) para valores dados de $p = p_0$ e $j = j_L$ [aqui j_L é a densidade de corrente eléctrica local em x = L, a qual é relacionada com j_c : $j_L = -j_c r_c^2 / (r_c + L)^2$]. Os valores de n_i , n_e , T_e , e T_h , encontrados desta maneira, são usados como condições fronteira na fronteira superior do domínio de cálculo. Como mencionado acima, as densidades das partículas obtidas deste modo divergem das previstas pela equação de Saha; note-se que estes desvios são negligenciáveis para Hg, para todos os valores de j_c considerados, e para Ar, para valores altos e intermédios de j_c ; eles atingem cerca de 100% para Ar, para valores baixos de j_c . A discrepância entre T_h e T_e é negligenciável (da ordem de 10^{-6}) para todas as condições tratadas neste capítulo.

2.3 Método da solução numérica

As equações diferenciais que governam o nosso problema são transformadas num sistema de quatro equações diferenciais ordinárias de segunda ordem. Isso é feito da seguinte maneira. Eliminando J_a da equação (2.5) para iões e electrões por meio da equação (2.19) e J_i por meio da expressão $J_i = J_e + j/e$, obtém-se

$$[(n_a + n_i) R_{ia} + (n_e - n_i) R_{ei}] J_e - [(n_a + n_i) R_{ia} + n_e R_{ei}] \left(-\frac{j}{e}\right)$$

= $-(n_i k T_h)' + n_i e E - C_i^{(h)} n_i k T_h' - C_i^{(e)} n_i k T_e',$ (2.31)

$$\left[(n_a + n_e) R_{ea} + (n_i - n_e) R_{ei} \right] J_e - n_e \left(R_{ea} - R_{ei} \right) \left(-\frac{j}{e} \right) = -kT_e n'_e - n_e eE - \tilde{C}_e^{(e)} n_e kT'_e,$$
(2.32)

onde ' designa a derivação em ordem à variável independente x, $R_{\alpha\beta} = kT_{\alpha\beta}C_{\alpha\beta}/nD_{\alpha\beta}$, e $\tilde{C}_e^{(e)} = C_e^{(e)} + 1$. Resolvendo a equação (2.32) para J_e , substituindo o resultado na equação (2.1) para electrões, e eliminando n_i por meio da equação (2.17), obtém-se

$$\begin{bmatrix} B \frac{-kT_e n'_e - n_e eE - \tilde{C}_e^{(e)} n_e kT'_e + n_e \left(R_{ea} - R_{ei}\right) \left(-\frac{j}{e}\right)}{(n_a + n_e) R_{ea} + \frac{\varepsilon_0}{Be} \left(BE\right)' R_{ei}} \end{bmatrix}' = B\left(k_i n_a n_e - k_r n_e^3 - \frac{\varepsilon_0}{Be} k_r n_e^2 \left(BE\right)'\right).$$
(2.33)

A equação (2.33) representa uma equação diferencial de segunda ordem para n_e .

Combinando as equações (2.31) e (2.32) de forma a eliminar J_e e depois eliminando n_i

por meio da equação (2.17), obtém-se

$$\left[\frac{\varepsilon_{0}kT_{h}}{Be}(BE)' - \frac{\varepsilon_{0}}{B^{2}}\frac{(BE)^{2}}{2} + n_{e}kT_{h}\right]' = \frac{2\varepsilon_{0}E^{2}}{r_{c}\sqrt{B}} - \left(C_{i}^{(h)}kT_{h}' + C_{i}^{(e)}kT_{e}'\right)\frac{\varepsilon_{0}}{Be}(BE)' + \left[R_{ia}\frac{\varepsilon_{0}}{Be}(BE)' - n_{e}\left(X_{1}R_{ea} - R_{ia} - X_{2}R_{ei}\right) + n_{a}R_{ia}\right]\left(-\frac{j}{e}\right) + X_{1}kT_{e}n_{e}' + X_{2}n_{e}eE + X_{1}\tilde{C}_{e}^{(e)}n_{e}kT_{e}' - \left(C_{i}^{(h)}kT_{h}' + C_{i}^{(e)}kT_{e}'\right)n_{e}. (2.34)$$

onde

$$X_{1} = \frac{\left[\left(n_{a} + n_{e} + \frac{\varepsilon_{0}}{Be} \left(BE\right)'\right) R_{ia} - \frac{\varepsilon_{0}}{Be} \left(BE\right)' R_{ei}\right]}{\left[\left(n_{a} + n_{e}\right) R_{ea} + \frac{\varepsilon_{0}}{Be} \left(BE\right)' R_{ei}\right]}, \quad X_{2} = X_{1} + 1.$$
(2.35)

A equação (2.34) representa uma equação diferencial de segunda ordem para E. Note-se que os termos desta equação que envolvem E são pequenos na maior parte do plasma junto ao cátodo (fora da bainha de carga de espaço); a única excepção é o termo X_2n_eeE , e é este termo que torna a equação (2.34) apropriada para a determinação numérica do campo eléctrico num plasma com um alto grau de quaseneutralidade [Benilov & Tirskii 1979], em contraste com a equação de Poisson original (2.17).

Obtêm-se equações diferenciais de segunda ordem para $T_e \in T_h$, ao substituir as equações (2.15) e (2.16) nas equações (2.10) e (2.11).

É usado um algoritmo iterativo para resolver o sistema de equações formulado. As equações são linearizadas com o uso do método de Newton e, em cada passo do processo de iteração, são resolvidas conjuntamente através do método de Petukhov [Petukhov 1964] (que é um método de solução numérica de problemas com condições fronteira para equações diferenciais ordinárias lineares de segunda ou terceira ordem, ou para equações diferenciais parciais do tipo parabólico, baseado num esquema de diferenças finitas de quarta ordem), generalizado para o caso de um sistema de equações. Todas as regiões de variação rápida da solução têm de ser resolvidas de maneira a assegurar a convergência das iterações, o que requer uma rede numérica com passo variável.

2.4 Resultados e discussão

O problema com condições fronteira acima descrito (que é bastante rígido) é resolvido numericamente como descrito na secção 2.3. Os resultados dos cálculos da região junto ao cátodo para um arco de mercúrio a muito alta pressão e para um arco de árgon à pressão atmosférica, relatados neste capítulo, referem-se a um cátodo hemisférico de tungsténio cujo raio $r_c = 1$ mm.

2.4.1 Distribuições dos parâmetros do plasma na região junto ao cátodo e característica tensão-corrente

Nas figuras 2.1-2.6, são mostradas as distribuições dos parâmetros na região junto ao cátodo para diferentes valores da densidade de corrente eléctrica do plasma para a superfície do cátodo, j_c . Os parâmetros mostrados incluem: densidades dos iões n_i e dos electrões n_e , temperaturas dos electrões T_e e das partículas pesadas T_h , a densidade de corrente dos iões $j_i = eJ_i$ normalizada pela densidade de corrente eléctrica local j, o campo eléctrico E e o potencial electrostático φ . (O zero do potencial é escolhido na superfície do cátodo.) As setas na esquerda do primeiro eixo y nas figuras 2.1, 2.3 e 2.5 representam o valor da densidade dos electrões $n_{em} = 4j_{em}/eC_e$ que corresponderia ao equilíbrio entre a emissão de electrões da superfície do cátodo e o fluxo dos electrões que retornam ao cátodo vindos do plasma; cf. com a condição fronteira (2.22). Por forma a obter figuras informativas, tem de ser empregue uma escala logarítmica para a variável x. Assim as distribuições são mostradas até um valor bastante pequeno de x, mas não zero, que foi escolhido tomando em conta os livres percursos médios e que é igual a 10^{-8} m para Hg e 10^{-7} para Ar.

Outra distribuição mostrada nas figuras 2.1, 2.3 e 2.5 é a de n_S , a densidade de partículas carregadas avaliada em termos das temperaturas locais das partículas pesadas T_h e dos electrões $T_e \operatorname{com} p = p_0$ através da equação de Saha. Também é mostrada T_{eq} , a temperatura do plasma que ocorreria num plasma com a mesma densidade de corrente com um balanço local de números de partículas, momento e energia. [Mais precisamente, as equações (2.26)-(2.30), juntamente com as equações (2.19) e (2.20) e com a equação $p = p_0$, que é usada em vez da equação (2.21), são resolvidas para cada $x \operatorname{com} o$ valor local de j. A temperatura obtida para os electrões, que coincide virtualmente com a temperatura das partículas pesadas, como foi mencionado no fim da secção 2.2.2, é designada T_{eq} .] À medida que x decresce, T_{eq} cresce, o que é uma consequência do crescimento da densidade de corrente local na direcção do cátodo, decorrente da geometria esfericamente simétrica que é considerada. Para distâncias pequenas da superfície do cátodo, $x \ll r_c$, j torna-se virtualmente constante e o mesmo acontece a T_{eq} .

As figuras 2.1-2.4 referem-se a um plasma de mercúrio à pressão $p_0 = 100$ bar. As figuras 2.1 e 2.2 referem-se a $T_w = 3000$ K, as figuras 2.3 e 2.4 referem-se a $T_w = 4000$ K. Consideremos primeiro a região $x \gtrsim 100 \,\mu\text{m}$ no caso de uma densidade de corrente na superfície do cátodo baixa; figuras 2.1a e 2.3a. Podemos ver que, aqui, $n_e \approx n_i$, i.e., o plasma é quaseneutro; $n_e \approx n_S$, i.e., o plasma encontra-se em equilíbrio de ionização (Saha); $T_e \approx T_h$, i.e., o plasma encontra-se em equilíbrio da descrição do plasma empregue neste capítulo, que não envolve a população dos estados excitados, estes três tipos de equilíbrio traduzem-se conjuntamente no equilíbrio termodinâmico local (LTE) do plasma. Para além disso, $T_e \approx T_{eq}$ na região considerada, i.e., o balanço de energia do plasma é dominado pela radiação. No que se segue, esta região será referida

como região do plasma LTE dominado por radiação. Nesta região, a temperatura do plasma e a densidade das partículas carregadas crescem com o decréscimo de x; uma consequência do acima descrito aumento de T_{eq} , que decorre do aumento da densidade de corrente local provocado pela geometria.

Uma camada que separa do cátodo a região do plasma LTE dominado por radiação, na qual são localizados o equilíbrio entre o aquecimento de Joule e a radiação e, os desvios de LTE, será referida como camada de não equilíbrio junto ao cátodo. A espessura desta camada é cerca de $100 \,\mu\text{m}$ para baixas densidades de corrente na superfície do cátodo [figuras 2.1a e 2.3a] e um tanto menor para densidades de corrente mais elevadas [figuras 2.1b e 2.1c, 2.3b e 2.3c]. Este último caso é devido a uma temperatura mais alta na região do plasma LTE dominado por radiação.

À medida que x decresce e saímos da região do plasma LTE dominado por radiação e entramos na camada de não equilíbrio, o equilíbrio entre o aquecimento de Joule e as perdas por radiação é o primeiro a desfazer-se: enquanto que T_{eq} na camada de não equilíbrio aumenta fracamente na direcção do cátodo ou é virtualmente constante, $T_e \in T_h$, ainda sendo iguais, divergem de T_{eq} na direcção de valores mais baixos, i.e., passam por um máximo e depois começam a decrescer: o arrefecimento do plasma por parte do cátodo entra em jogo. Logo, podemos introduzir uma camada que é adjacente à região do plasma LTE dominado por radiação e na qual o balanço de energia do plasma deixa de ser dominado por radiação, embora o plasma ainda se encontre em LTE. Esta camada pode ser chamada camada de perturbação térmica.

À medida que x decresce ainda mais, T_h decresce rapidamente e aproxima-se da temperatura da superfície do cátodo. T_e decresce inicialmente (na camada de perturbação térmica) juntamente com T_h , mas muito cedo diverge de T_h e começa a decrescer muito mais lentamente do que T_h . Por outras palavras, o equilíbrio térmico deixa de se verificar, e o mesmo acontece ao LTE como um todo. O equilíbrio de ionização e a quaseneutralidade ainda prevalecem. Assim, podemos introduzir uma camada que é adjacente à camada de perturbação térmica e na qual as temperaturas dos electrões e das partículas pesadas deixam de ser iguais, embora o plasma ainda seja quaseneutro e o equilíbrio de ionização ainda se verifique; uma camada de não equilíbrio térmico.

Para valores ainda mais pequenos de x, $n_i \in n_e$ divergem de n_S na direcção de valores mais baixos: o equilíbrio de ionização deixa de se verificar. A quaseneutralidade deixa de se verificar logo após, i.e., os desvios entre $n_i \in n_e$ ocorrem e é formada uma bainha de carga de espaço. Na maior parte dos casos, a densidade dos iões n_i na bainha de carga de espaço excede a densidade dos electrões n_e , sendo excepções os casos do cátodo quente e uma densidade de corrente relativamente baixa, mostrado na figura 2.3a. Neste último caso, a bainha de carga de espaço contém duas zonas: a zona exterior $10^{-7} \text{ m} \leq x \leq 10^{-6} \text{ m}$, onde n_i excede ligeiramente n_e , e a zona interior $x \leq 10^{-7} \text{ m}$, onde n_e excede n_i e é aproximadamente igual a n_{em} .

2. Modelização unificada de camadas de plasma junto ao cátodo em descargas de arco de alta pressão



Figura 2.1: Distribuições de parâmetros na região junto ao cátodo para mercúrio a $p_0 = 100$ bar, $T_w = 3000$ K, j_c (Am⁻²) = 10⁶ (a), 10⁷ (b), 10⁸ (c).



Figura 2.1: (Cont.) Distribuições de parâmetros na região junto ao cátodo para mercúrio a $p_0 = 100$ bar, $T_w = 3000$ K, j_c (A m⁻²) = 10⁶ (a), 10⁷ (b), 10⁸ (c).



Figura 2.2: Distribuições do campo eléctrico e do potencial electrostático na região junto ao cátodo para mercúrio a $p_0 = 100$ bar, $T_w = 3000$ K. Linhas a cheio: campo eléctrico. Linhas a tracejado: potencial. $a, b, c: j_c$ (A m⁻²) = 10⁶, 10⁷, 10⁸, respectivamente. Círculos: pontos onde a separação de cargas atinge 1%.



Figura 2.3: Distribuições de parâmetros na região junto ao cátodo para mercúrio a $p_0 = 100$ bar, $T_w = 4000$ K, j_c (Am⁻²) = 10⁶ (a), 10⁷(b), 10⁸ (c).



Figura 2.3: (Cont.) Distribuições de parâmetros na região junto ao cátodo para mercúrio a $p_0 = 100$ bar, $T_w = 4000$ K, j_c (Am⁻²) = 10⁶ (a), 10⁷ (b), 10⁸ (c).



Figura 2.4: Distribuições do campo eléctrico e do potencial electrostático na região junto ao cátodo para mercúrio a $p_0 = 100$ bar, $T_w = 4000$ K. Linhas a cheio: campo eléctrico. Linhas a tracejado: potencial. $a, b, c: j_c$ (A m⁻²) = 10⁶, 10⁷, 10⁸, respectivamente. Círculos: pontos onde a separação de cargas atinge 1%.

Nos casos mostrados na figura 2.1, a densidade dos iões não muda muito na bainha de carga de espaço, excepto na vizinhança da margem da bainha. Pode parecer que este comportamento contradiz a condição fronteira (2.23). De facto, não existe contradição: as distribuições calculadas para $n_i(x)$ decrescem rapidamente até zero numa camada muito fina adjacente ao cátodo, a qual é posicionada na região $x < 10^{-8}$ m e não é mostrada nos gráficos. (Esta é a chamada camada de difusão dos iões [Su & Lam 1963, Benilov 1988], que é característica para a descrição hidrodinâmica de camadas junto ao cátodo.)

Podemos ver, pelas figuras 2.2 e 2.4, que existe um campo eléctrico muito forte dirigido para o cátodo na bainha de carga de espaço. O campo eléctrico fora da bainha, i.e., no plasma quaseneutro, é substancialmente mais baixo e não é visível no gráfico, excepto no caso do cátodo quente e densidade de corrente baixa representado pela linha a cheio *a* na figura 2.4. O campo eléctrico na bainha é não monótono no último caso, o que está de acordo com a acima descrita variação de sinal na bainha de carga de espaço que ocorre neste caso. De maneira a dar uma ideia da "margem" da bainha, são indicados pontos nas figuras 2.2 e 2.4 onde a separação de cargas atinge 1%. Podemos ver que um aumento da densidade de corrente resulta numa diminuição da espessura da bainha de carga de espaço.

Nas figuras 2.2 e 2.4, são também mostradas distribuições do potencial electrostático. Estas distribuições revelam uma queda de tensão junto ao cátodo mais ou menos pronunciada, a qual pode ser identificada com a diferença de potencial entre o ponto no plasma onde a separação de cargas atinge 1% e a superfície do cátodo. (Não é muito bem pronunciada no caso de T_w altas e j_c baixas, que é representado pela linha *a* na figura 2.4, no entanto se se usar uma escala linear para *x* torna-se bastante inequívoco.) Como seria de esperar, a queda de tensão junto ao cátodo decresce com o crescimento de T_w e cresce com o crescimento de j_c . O aumento de potencial na região $x \gtrsim 10^{-4}$ m deve-se à resistência do volume do plasma.

As figuras 2.5 e 2.6 referem-se ao plasma de Ar à pressão $p_0 = 1$ bar e $T_w = 3500$ K. No caso de uma densidade de corrente elevada mostrado na figura 2.5c, a região junto ao cátodo possui a mesma estrutura como no caso de Hg mostrado nas figuras 2.1 e 2.3: pode-se identificar a região do plasma LTE dominado por radiação, a camada de perturbação térmica, a camada de não equilíbrio térmico e a bainha de carga de espaço. Uma diferença é a quaseneutralidade do plasma nas condições da figura 2.5c deixar de existir para x consideravelmente menores do que x para os quais o equilíbrio de ionização deixa de se verificar, em vez de ocorrer para aproximadamente o mesmo x, como acontecia para o Hg. Como consequência, podemos identificar uma camada adicional: situada entre a camada de não equilíbrio térmico e a bainha de carga de espaço. Aqui, equilíbrios de todos os tipos, incluindo equilíbrio de ionização, já deixaram de existir, a única excepção é a quaseneutralidade que ainda existe. Esta camada é usualmente referida como camada de ionização. Note-se que tal estrutura da camada de não equilíbrio junto ao cátodo é semelhante à estrutura da região de perturbação junto ao ânodo em arcos de alta corrente proposta em [Nemchinsky 2005]. Outra diferença entre as distribuições mostradas na figura 2.5c e as mostradas nas figuras 2.1 e 2.3 é que $T_e \ e \ T_h$, na camada de perturbação térmica, divergem de T_{eq} na direcção de valores mais altos. Uma outra diferença é que a espessura da camada de não equilíbrio junto ao cátodo, neste caso, é consideravelmente maior do que nas condições das figuras 2.1-2.4.

No caso de uma densidade de corrente intermédia, mostrado na figura 2.5b, a região do plasma LTE dominado por radiação não é muito bem pronunciada: embora as temperaturas dos electrões e das partículas pesadas para $x \gtrsim 10^{-4}$ m sejam muito próximas de T_{eq} , ainda existe uma diferença visível. Enquanto que em todos os casos acima discutidos o equilíbrio térmico deixa de se verificar antes (ou seja para x maiores) do que o equilíbrio de ionização, sucede o contrário nas condições da figura 2.5b. Comparando as figuras 2.5c e 2.5b e também as linhas a cheio c e b na figura 2.6, podemos concluir que um aumento da densidade de corrente nestas condições resulta num aumento da espessura da bainha da carga de espaço, em contraste com o que acontece para as condições acima discutidas de um plasma de Hg a muito alta pressão.

O caso de uma densidade de corrente relativamente baixa é mostrado na figura 2.5a. Nesta figura, também está representada n_b , a densidade de partículas carregadas avaliada em termos dos valores locais de T_h e de T_e com $p = p_0$ sob a suposição de balanço local de ionização e recombinação e quaseneutralidade, i.e., com o uso das equações (2.26) e (2.30). Podemos ver que existe uma discrepância visível entre n_S e n_b neste caso; note-se que, em todos os outros casos, n_S e n_b são graficamente indistinguíveis. Uma região do plasma LTE dominado por radiação encontra-se ausente neste caso, a razão reside nos valores relativamente baixos de T_{eq} e, consequentemente, valores também baixos da densidade dos electrões. De facto, a quaseneutralidade é o único tipo de equilíbrio que se verifica neste caso: as igualdades $T_e = T_{eq}$, $T_h \approx T_e$, e $n_e = n_b$, ao serem impostas na fronteira superior do domínio de cálculo, $x = 10^{-2}$ m, pelas condições fronteira, são violadas muito perto desta fronteira. n_e na bainha de carga de espaço é muito maior do que n_i , de acordo com isto o campo eléctrico na bainha é dirigido desde o cátodo e a queda de tensão na bainha é negativa.

As distribuições do potencial electrostático para o plasma de Ar, mostradas na figura 2.6, não revelam um aumento, o que é visto nas figuras 2.2 e 2.4 devido à resistência do volume do plasma. De facto, no caso de uma densidade de corrente intermédia (linha b), vê-se um decréscimo do potencial na zona $x \gtrsim 3 \times 10^{-4}$ m. No caso de uma alta densidade de corrente (linha c), ocorre uma queda de potencial comparável na zona $x \gtrsim 3 \times 10^{-5}$ m. Em ambos os casos, o decréscimo de potencial começa aproximadamente na margem da camada de ionização. Por outro lado, a diferença de potencial na camada de ionização, no caso de uma densidade de corrente intermédia, é comparável à queda de tensão da bainha. Portanto, parece natural, no caso do plasma de árgon à pressão atmosférica, definir a queda de tensão junto ao cátodo como a diferença de potencial entre o ponto no plasma onde a



Figura 2.5: Distribuições de parâmetros na região junto ao cátodo para árgon a $p_0 = 1$ bar, $T_w = 3500 \,\mathrm{K}, \, j_c(\mathrm{A} \mathrm{m}^{-2}) = 10^6$ (a), 10^7 (b), 7.8×10^7 (c).



Figura 2.5: (Cont.) Distribuições de parâmetros na região junto ao cátodo para árgon a $p_0 = 1$ bar, $T_w = 3500$ K, j_c (Am⁻²) = 10⁶ (a), 10⁷ (b), 7.8 × 10⁷ (c).



Figura 2.6: Distribuições do campo eléctrico e do potencial electrostático na região junto ao cátodo para árgon a $p_0 = 1$ bar, $T_w = 3500$ K. Linhas a cheio: campo eléctrico. Linhas a tracejado: potencial. $a, b, c: j_c (A m^{-2}) = 10^6, 10^7, 7.8 \times 10^7$, respectivamente. Círculos: pontos onde a separação de cargas atinge 1%. Quadrados: pontos onde a função $\varphi(x)$ atinge um valor máximo.

função $\varphi(x)$ atinge um valor máximo (estes pontos estão marcados por quadrados na figura 2.6) e a superfície do cátodo.

Em quase todos os casos acima descritos, a fracção da corrente transportada pelos iões, j_i/j , na secção exterior da região junto ao cátodo é muito menor do que na secção interior, e a transição de valores baixos para altos acontece na região onde o equilíbrio de ionização deixa de se verificar. A única excepção a este padrão ocorre para as condições da figura 2.5a, onde não se verifica equilíbrio de ionização. Em alguns casos, a contribuição da corrente dos iões é apreciável na secção interior da região junto ao cátodo e negligenciável na secção exterior; figuras 2.1, 2.3c, 2.5b, e 2.5c. Em outros casos, também é negligenciável na secção interior da região junto ao cátodo; figuras 2.3a, 2.3b, e 2.5a. É interessante notar uma mudança de sinal da corrente dos iões, que no caso do plasma de Ar ocorre aproximadamente no mesmo ponto onde a densidade de partículas carregadas atinge um valor máximo.

Existem dois máximos da temperatura dos electrões para Hg com $T_w = 3000$ K [figura 2.1], um dentro da bainha de carga de espaço e outro na parte exterior da camada de não equilíbrio. O primeiro máximo excede consideravelmente T_{eq} , o segundo máximo é próximo do valor local de T_{eq} . Apenas ocorre o segundo máximo para Hg com $T_w = 4000$ K [figura 2.3] e para Ar para densidades de corrente baixas [figura 2.5a]. Apenas ocorre o primeiro máximo para Ar para densidades de corrente intermédias e altas [figuras 2.5b e 2.5c]. Os mecanismos físicos responsáveis pela existência do segundo máximo já foram discutidos: a temperatura do plasma na região do plasma LTE dominado por radiação aumenta na direcção para o cátodo devido ao aumento da densidade de corrente local provocado pela geometria, e começa a diminuir quando entra em jogo o arrefecimento do plasma pelo cátodo. Vamos agora discutir os mecanismos físicos responsáveis pela existência do pela existência do primeiro do plasma pelo cátodo.

Valores das componentes da densidade de corrente eléctrica no cátodo são dados na tabela 2.1. Aqui, $j_{iw} = -e J_i|_{x=0}$ e $j_{ew} = e J_e|_{x=0}$ são as densidades de corrente eléctrica transportadas do plasma para a superfície do cátodo pelos iões e, respectivamente, electrões; $j_e^{(cd)} = \frac{en_e C_e}{4}\Big|_{x=0}$ é a densidade de corrente eléctrica transportada pelos electrões do plasma, que se movem para a superfície do cátodo devido ao movimento caótico. (Obviamente, $j_c = j_{iw} + j_{ew}, j_{ew} = j_{em} - j_e^{(cd)}$.) Também se mostra na tabela 2.1 a temperatura dos electrões no primeiro máximo, $T_e^{(\max)}$, nos casos em que esse máximo existe.

Podemos ver que em todos os casos $j_{ew} > 0$, i.e., a emissão dos electrões é suficiente para assegurar que o fluxo de electrões seja dirigido da superfície do cátodo para o plasma e não ao contrário; cf. equação (2.22). Com o aumento de j_c mantendo T_w constante, a fracção da corrente dos iões aumenta e a fracção da corrente dos electrões do plasma decresce. Com o aumento de T_w mantendo j_c constante (para o plasma de mercúrio), a fracção da corrente dos iões decresce e a fracção da corrente dos electrões do plasma cresce.

É conveniente considerar a razão j_{em}/j_c por forma a compreender os resultados mostra-

Figura	j_{iw}/j_c	j_{ew}/j_c	j_{em}/j_c	$j_e^{(cd)}/j_c$	$T_e^{(\text{max})}$ (10 ³ K)	$j_{is}j_c/j_sj_{iw}$	$q_c \; ({\rm W}{ m m}^{-2})$
2.1a	0.374	0.626	1.313	0.687	16.9	-0.014	1.25×10^7
2.1b	0.640	0.360	0.491	0.131	45.0	0.020	2.32×10^8
2.1c	0.762	0.238	0.281	0.043	74.1	0.070	3.55×10^9
2.3a	0.004	0.996	46.43	45.43	_	0.668	9.22×10^5
2.3b	0.024	0.976	7.716	6.740	_	0.170	-1.18×10^{7}
2.3c	0.160	0.840	2.033	1.193	_	0.065	-1.07×10^{8}
2.5a	4×10^{-4}	1.000	4.898	3.898	—	-0.025	-3.67×10^{6}
2.5b	0.216	0.784	0.824	0.040	18.5	0.011	4.14×10^{7}
2.5c	0.760	0.240	0.242	0.002	430	0.022	1.29×10^{10}

2. Modelização unificada de camadas de plasma junto ao cátodo em descargas de arco de alta pressão

Tabela 2.1: Componentes da densidade de corrente eléctrica na superfície do cátodo, temperatura dos electrões no ponto do máximo posicionado dentro da bainha de carga de espaço, fracção da corrente dos iões criada fora da camada junto ao cátodo, e densidade de fluxo de energia para a superfície do cátodo.

dos na tabela 2.1. Vamos primeiro considerar os casos onde esta razão é inferior à unidade (casos mostrados nas figuras 2.1b, 2.1c, 2.5b, e 2.5c). A corrente dos electrões $j_{ew} = j_{em} - j_e^{(cd)}$ é insuficiente para assegurar a corrente pré-estabelecida j_c e existe uma corrente de iões apreciável. Logo, na região junto ao cátodo, existe um processo de ionização intensivo e um fornecimento substancial de energia para o gás de electrões que torna possível a ionização. Este fornecimento de energia ocorre através da aceleração na bainha de carga de espaço dos electrões emitidos pela superfície do cátodo. Assim, o campo eléctrico na bainha é alto e muito poucos electrões do plasma conseguem ultrapassá-lo e chegar à superfície do cátodo, por isso $j_e^{(cd)}/j_c \ll 1$.

Se j_{em}/j_c excede, mas é comparável à unidade (casos mostrados nas figuras 2.1a e 2.3c), a corrente líquida dos electrões ainda é menor do que j_c , devido à corrente dos electrões do plasma, e a corrente dos iões ainda é apreciável. Se $j_{em}/j_c \gg 1$ (casos mostrados nas figuras 2.3a, 2.3b, e 2.5a), a corrente dos iões é negligenciável, $j_{iw}/j_c \ll 1$, e existe uma corrente muito alta de electrões do plasma que compensa virtualmente j_{em} e assim reduz a corrente de electrões líquida para o valor pré-estabelecido j_c .

Agora está clara a razão do aparecimento do acima descrito máximo de T_e dentro da bainha de carga de espaço: é uma manifestação do forte fornecimento de energia ao gás de electrões na bainha de carga de espaço, que ocorre nos casos onde j_{em}/j_c é menor ou ligeiramente superior do que a unidade e torna possível a criação de uma corrente de iões necessária para compensar o défice da corrente de electrões; a altura deste máximo é tanto maior quanto menor for a razão j_{em}/j_c .

Na figura 2.7 são mostradas características tensão-corrente do plasma junto ao cátodo para uma temperatura da superfície do cátodo fixa; aqui U é a queda de tensão junto ao cátodo, definido conforme descrito acima. Todas as características tensão-corrente são crescentes de forma monótona. A saliência revelada pela característica tensão-corrente no

caso de árgon à pressão atmosférica está relacionada com a mudança de sinal do campo eléctrico na superfície do cátodo, que ocorre em $j_c = 2.4 \times 10^6 \,\mathrm{A\,m^{-2}}$, e que tem origem numa dependência não analítica da correcção de Schottky para o campo eléctrico. O declive dU/dj_c da característica tensão-corrente no caso do árgon começa a crescer rapidamente à medida que j_c excede aproximadamente $7 \times 10^7 \,\mathrm{A\,m^{-2}}$; podemos dizer que a característica tensão-corrente se aproxima da saturação dos iões. É por isso que a bainha de carga de espaço nas condições da figura 2.5c é mais espessa do que nas condições da figura 2.5b, e é também por isso que a modelização no caso de árgon à pressão atmosférica foi executada para uma gama de j_c ligeiramente mais estreita do que no caso do mercúrio (até $7.8 \times 10^7 \,\mathrm{A\,m^{-2}}$ em vez de $10^8 \,\mathrm{A\,m^{-2}}$).



Figura 2.7: Características tensão-corrente da camada junto ao cátodo para um valor fixo da temperatura da superfície do cátodo para mercúrio a $p_0 = 100$ bar, $T_w = 3000$ K e 4000 K, e árgon a $p_0 = 1$ bar, $T_w = 3500$ K. Linhas a cheio: o modelo presente. Linhas a tracejado: o modelo [Benilov & Marotta 1995, Benilov & Cunha 2002, Benilov & Cunha 2003 a].

2.4.2 Balanço de energia do plasma junto ao cátodo

A característica mais importante a ser prevista por um modelo da região do plasma junto ao cátodo é a densidade do fluxo de energia vindo do plasma para a superfície do cátodo. Uma fórmula que governa esta quantidade no âmbito da abordagem hidrodinâmica empregue neste capítulo é obtida com o uso da expressão para a densidade do fluxo de energia do plasma, representada pelo vector nos parêntesis rectos no lado esquerdo da equação (2.14) [note-se que o primeiro e segundo termos cancelam-se devido à equação (2.19)]:

$$q_{c} = \left[\left(\frac{5}{2} kT_{e} + A_{f} \right) (-J_{e}) - h_{e} + (A_{i} - A_{f}) (-J_{i}) - h_{hp} \right]_{x=0}.$$
 (2.36)

Usando as condições fronteira (2.25) e (2.22), esta expressão pode ser escrita como

$$q_{c} = -\frac{j_{em}}{e} \left(A_{f} + 2kT_{w}\right) + \left[\frac{n_{e}C_{e}}{4} \left(A_{f} + 2kT_{e}\right)\right]_{x=0} + \left(A_{i} - A_{f}\right) \left[-J_{i}\right]_{x=0} + \left[-h_{hp}\right]_{x=0}.$$
 (2.37)

O primeiro termo no lado direito descreve o arrefecimento da superfície do cátodo pela emissão termiónica; Saliente-se que A_f representa a energia necessária para extrair um electrão do cátodo e $2kT_w$ é a energia cinética média levada por um electrão emitido. O segundo termo no lado direito descreve o aquecimento da superfície do cátodo pelos electrões do plasma, avaliado tomando em conta a energia libertada na superfície do cátodo como resultado da absorção de electrões. O terceiro termo representa a energia libertada na superfície do cátodo como resultado da neutralização de iões. O quarto termo representa a energia transportada para a superfície do cátodo pela condução de calor das partículas pesadas e por um efeito inverso à difusão térmica. Note-se que a equação (2.37) apresenta algumas semelhanças com expressões para o fluxo de energia para o cátodo empregues em modelos simplificados com uma bainha de carga de espaço livre de colisões. Por exemplo, podemos comparar esta equação com a equação (13) de [Benilov & Marotta 1995] (Z na última equação deve ser posto igual à unidade e A_{eff} substituído por A_f): os termos que representam o arrefecimento termiónico e o aquecimento pelos electrões do plasma são idênticos; o termo da equação (2.37) que descreve a energia libertada na superfície do cátodo como resultado da neutralização de iões também está presente na equação (13) de [Benilov & Marotta 1995]; a diferença é que o termo que representa a condução de calor das partículas pesadas está ausente da equação (13) e em vez desse termo aparece um termo que representa a energia cinética dos iões incidentes.

Nas condições de interesse prático, o fluxo de energia de um plasma de arco para a superfície de um cátodo termiónico deve ser suficiente para aquecer a superfície até que esta atinja temperaturas necessárias para uma emissão termiónica suficientemente forte. Se o cátodo não é dopado e não existem aditivos no plasma que possam contribuir para uma redução da função de trabalho através da formação de monocamadas na superfície do cátodo, então a temperatura da extremidade do cátodo é à volta de 3000 K. Assumindo 1000 K para a temperatura da base do cátodo, 10 mm para a altura do cátodo, e 100 W m⁻¹ K⁻¹ para a condutividade térmica do material do cátodo (condutividade térmica do tungsténio a 2000 K), podemos estimar q_c como 2×10^7 W m⁻². Note-se que este valor refere-se ao modo difuso de transferência de corrente; q_c é consideravelmente maior no modo mancha.

Os valores de q_c calculados para as condições das figuras 2.1-2.6 são dados na tabela 2.1. Podemos ver que nos casos mostrados nas figuras 2.3b, 2.3c, e 2.5a q_c é negativo, i.e., a superfície do cátodo é demasiado quente para os valores dados da densidade de corrente e o arrefecimento provocado pela emissão termiónica prevalece sobre todos os mecanismos de aquecimento. Já foi provado que a superfície do cátodo não pode atingir temperaturas assim tão altas [Benilov & Cunha 2003*b*]. No caso mostrado na figura 2.3a q_c é positivo, no entanto, é menor por mais do que uma ordem de magnitude do que o valor acima

mencionado $(2 \times 10^7 \,\mathrm{W\,m^{-2}})$, logo, este caso também não é de interesse prático. Podemos concluir que são de interesse prático apenas os casos nos quais existe um forte fornecimento de energia ao gás de electrões na bainha de carga de espaço, nomeadamente, os casos mostrados nas figuras 2.1a-2.1c, 2.5b, e 2.5c. Apenas estes casos serão considerados no que se segue. Note-se que o caso mostrado na figura 2.5c dificilmente se realizará, uma vez que a queda de tensão junto ao cátodo é demasiado elevada neste caso, no entanto, este caso será mantido em consideração já que é conveniente para a investigação das tendências.

Vamos estudar o balanço de energia do gás de electrões na região junto ao cátodo nas condições de um forte fornecimento de energia. Integrando a equação (2.10) sobre o volume compreendido entre a superfície do cátodo e a superfície (esférica) x = const, obtemos uma equação de balanço integral da energia do gás de electrões na camada, que pode ser escrita na forma

$$W_c + W_{pl} = W_J - W_{el} - W_i - W_{rad}, (2.38)$$

$$W_{c} = -\left[\frac{5}{2}kT_{e}J_{e} + h_{e}\right]_{x=0}, \quad W_{pl} = B\left[\frac{5}{2}kT_{e}J_{e} + h_{e}\right], \quad W_{J} = \int_{0}^{x} (-eJ_{e})EB\,dx, \quad (2.39)$$

$$W_{el} = \int_{0}^{x} \frac{3n_{e}k^{2}T_{e}}{m_{i}n} \left(T_{e} - T_{h}\right) \left(\frac{n_{a}}{D_{ea}} + \frac{n_{i}}{D_{ei}}\right) B \, dx, \qquad (2.40)$$

$$W_i = A_i (BJ_e - J_e|_{x=0}), \quad W_{rad} = \int_0^\infty w_{rad} B \, dx.$$
 (2.41)

O sentido físico dos termos da equação (2.38) é claro: W_c é a densidade do fluxo de energia trazida pelos electrões para a superfície do cátodo; W_{pl} é o fluxo de energia transportada pelos electrões que saem da camada para o plasma exterior; W_J é a potência eléctrica fornecida ao gás de electrões dentro da camada; W_{el} , W_i , e W_{rad} são potências perdidas pelos electrões dentro da camada em colisões elásticas com as partículas pesadas, no processo de ionização de átomos e através de radiação, respectivamente.

Na figura 2.8, são mostrados os termos da equação (2.38) para mercúrio com $T_w = 3000 \text{ K}$ e $j_c = 10^6 \text{ e } 10^8 \text{ A m}^{-2}$, e para árgon a $j_c = 10^7 \text{ A m}^{-2}$ (i.e., para condições correspondendo às figuras 2.1a, 2.1c, e 2.5b). Podemos ver que em todos os casos $W_c < 0$, i.e., a emissão de electrões é suficiente para assegurar que o fluxo de energia dos electrões seja dirigido da superfície do cátodo para o plasma e não ao contrário; cf. a equação (2.25). Perto do cátodo, $W_{pl} \approx W_J$: os electrões emitidos transportam na direcção do plasma virtualmente toda a energia que receberam do campo eléctrico depois de terem deixado o cátodo. A energia transportada pelos electrões é acumulada, i.e., W_{pl} aumenta com x. Eventualmente, as perdas por ionização entram em jogo, então W_{pl} passa por um máximo e começa a decrescer.

2. Modelização unificada de camadas de plasma junto ao cátodo em descargas de arco de alta pressão



Figura 2.8: Balanço de energia do gás de electrões na região junto ao cátodo. Mercúrio, $p_0 = 100$ bar, $T_w = 3000$ K, j_c (Am⁻²) = 10⁶ (a), 10⁸ (b); árgon, $p_0 = 1$ bar, $T_w = 3500$ K, $j_c = 10^7$ Am⁻² (c).



Figura 2.8: (Cont.) Balanço de energia do gás de electrões na região junto ao cátodo. Mercúrio, $p_0 = 100$ bar, $T_w = 3000$ K, j_c (Am⁻²) = 10⁶ (a), 10⁸ (b); árgon, $p_0 = 1$ bar, $T_w = 3500$ K, $j_c = 10^7$ Am⁻² (c).

É interessante notar que o máximo da temperatura dos electrões T_e dentro da bainha de carga de espaço ocorre a uma distância mais pequena da superfície do cátodo do que o máximo da densidade W_{pl} do fluxo de energia transportado pelos electrões ou, por outras palavras, antes das perdas por ionização entrarem totalmente em jogo. A razão é ilustrada pela figura 2.9, onde as funções $T_e \in W_{pl}$ são mostradas juntamente com as componentes da função W_{pl} . Aqui, $h_{ee} = \frac{5}{2}kT_eJ_e$ é o fluxo de energia devido ao transporte de entalpia pela corrente dos electrões, $h_{eT} \in h_{ev}$ designam o primeiro e segundo termos do lado direito da equação (2.15) e descrevem fluxos de energia dos electrões devido, respectivamente, à condução de calor e ao efeito inverso à difusão térmica. Também é mostrada a fracção da corrente transportada pelos electrões. Se o transporte de entalpia fosse o mecanismo dominante do transporte de energia dos electrões, então os pontos dos máximos de $T_e \in W_{pl}$ deviam estar próximos um do outro (podemos ver pela figura 2.9 que as variações de J_e são pequenas nesta região). No entanto, na realidade, uma forte condução de calor está presente, provocando um arrefecimento do gás de electrões mesmo antes das perdas por ionização entrarem totalmente em jogo.

Vamos prosseguir com o balanço de energia do plasma como um todo. Integrando a equação (2.14) sobre o volume compreendido entre a superfície do cátodo e a superfície (esférica) x = const e tomando em conta a equação (2.19), obtemos uma equação de balanço integral da energia do plasma na camada, que pode ser escrita na forma

$$q_c + q_{pl} = q_J - W_{rad}, (2.42)$$



Figura 2.9: Componentes da densidade do fluxo de energia dos electrões na região junto ao cátodo. Plasma de mercúrio, p = 100 bar, $T_w = 3000$ K, $j_c = 10^6$ A m⁻².

onde

$$q_{pl} = B\left[\left(\frac{5}{2}kT_e + A_f\right)J_e + (A_i - A_f)J_i + h_e + h_{hp}\right], \quad q_J = j_c\varphi.$$
(2.43)

O sentido físico da equação (2.42) é claro: a soma dos fluxos de energia da camada para a superfície do cátodo e para o plasma exterior ($q_c \ e \ q_{pl}$, respectivamente) iguala a diferença entre q_J , a potência eléctrica fornecida à camada e W_{rad} a potência irradiada. Diferentes versões desta equação são bem conhecidas [Benilov 2008]. As magnitudes relativas dos termos da equação (2.42) são ilustradas na figura 2.10.

Os modelos simplificados da região junto ao cátodo em descargas de arco de alta pressão baseiam-se num conceito de uma camada junto ao cátodo, definida como uma região que dá contribuições dominantes à queda de tensão junto ao cátodo e à criação de corrente de iões dirigida para o cátodo. Parece natural no âmbito do presente modelo (unificado) identificar esta camada com a região limitada pelo ponto onde a separação de cargas atinge 1%, no caso de um plasma de mercúrio a muito alta pressão; e pelo ponto onde a distribuição de potencial atinge um valor máximo, no caso do plasma de árgon à pressão atmosférica. A fracção da densidade de corrente de iões avaliada no ponto definido dessa maneira, j_{is}/j_s , representa uma medida da corrente dos iões criada fora da camada junto ao cátodo, e devemos comparar este valor com o valor da fracção da corrente de iões na superfície do cátodo, j_{iw}/j_c . A razão entre estes dois valores é apresentada na tabela 2.1 para as condições das figuras 2.1, 2.3, e 2.5. (Uma vez que j é quase constante na região considerada, esta razão é, de facto, bastante próxima de j_{is}/j_{iw} .) Podemos ver que esta razão é muito pequena para todos os casos de interesse prático. Logo, a camada junto ao cátodo definida desta maneira, com efeito, dá uma contribuição dominante à criação da corrente dos iões.

Os círculos e os quadrados na figura 2.10 designam a posição da margem da camada



Figura 2.10: Balanço de energia do plasma junto ao cátodo. Linhas a cheio: q_{pl}/q_c . Linhas a tracejado: W_{rad}/q_c . Círculos, quadrados: margem da camada junto ao cátodo. Mercúrio, $p_0 = 100$ bar, $T_w = 3000$ K, j_c (A m⁻²) = 10⁶ (1), 10⁸ (2); árgon, $p_0 = 1$ bar, $T_w = 3500$ K, j_c (A m⁻²) = 10⁷ (3), 7.8 × 10⁷ (4).

junto ao cátodo definida desta maneira. Em todos os casos, as perdas por radiação dentro da camada junto ao cátodo têm um papel pequeno. q_{pl} na margem da camada é muito pequeno no caso do mercúrio com $T_w = 3000 \text{ K} \text{ e } j_c = 10^6 \text{ A m}^{-2}$ e manifestamente positivo nos outros casos. O que significa que é a camada junto ao cátodo que aquece o plasma adjacente na maioria dos casos e não o contrário. Este resultado vem confirmar uma conclusão semelhante, obtida em [Li & Benilov 2007] para um arco "free-burning" em árgon à pressão atmosférica, através de um modelo baseado num tratamento separado da camada junto ao cátodo e do volume do plasma de duas temperaturas em equilíbrio de ionização.

2.4.3 Limitações do modelo

A abordagem hidrodinâmica que vem sendo usada no presente capítulo é aplicável desde que um número de condições seja satisfeito. No que diz respeito aos iões, o livre percurso médio de colisões entre iões e átomos, λ_{ia} , deve ser muito menor do que a escala local de comprimento L_i de variação de parâmetros dos iões; o trabalho do campo eléctrico no livre percurso médio dos iões deve ser consideravelmente menor do que a energia térmica dos átomos neutros:

$$\lambda_{ia} \ll L_i, \quad e \left| E \right| \lambda_{ia} \ll kT_h. \tag{2.44}$$

No que diz respeito aos electrões, o comprimento de maxwellização dos electrões [definido pela equação (2.46)], λ_m , deve ser muito menor do que a escala local de comprimento L_e de variação de parâmetros dos electrões; a razão entre as frequências médias de transferência de momento em colisões electrão-electrão e electrão-átomo devem ser muito maiores do que a razão entre as massas das partículas:

$$\lambda_m \ll L_e, \quad \bar{\nu}_{ee}/\bar{\nu}_{ea} \gg m_e/m_a. \tag{2.45}$$

Note-se que $\bar{\nu}_{ee} = n_e C_e \bar{Q}_{ee}^{(1,1)}$ e $\bar{\nu}_{ea} = n_a C_e \bar{Q}_{ea}^{(1,1)}$; aqui e daqui para a frente $\bar{Q}_{\alpha\beta}^{(1,1)}$ designa as secções médias de transferência de momento em colisões entre partículas de espécies α e β avaliadas como se descreve no apêndice A.

O livre percurso médio para colisões entre iões e átomos é definido como $\lambda_{ia} = \frac{1}{(n_i + n_a)\bar{Q}_{ia}^{(1,1)}}$ (Para baixo grau de ionização λ_{ia} coincide com o livre percurso médio convencional de iões no gás de átomos, enquanto que para um plasma perto da ionização completa λ_{ia} representa o livre percurso médio de átomos no gás de iões.) O comprimento de maxwellização é definido como (ver apêndice C de [Benilov 2000]):

$$\lambda_m = \frac{1}{\sqrt{n_e \bar{Q}_{ee}^{(1,1)} \left(n_e \bar{Q}_{ee}^{(1,1)} + n_a \bar{Q}_{ea}^{(1,1)}\right)}}.$$
(2.46)

As escalas locais de comprimento de variação de parâmetros dos iões e dos electrões são definidas como

$$L_i = n_i \left| \frac{dn_i}{dx} \right|^{-1}, \quad L_e = n_e \left| \frac{dn_e}{dx} \right|^{-1}.$$
(2.47)

As distribuições destas escalas de comprimento na camada junto ao cátodo são mostradas na figura 2.11. As singularidades das dependências $L_i(x) \in L_e(x)$ nos pontos extremos das funções $n_i(x)$ e, respectivamente, $n_e(x)$ não são de interesse no contexto presente e devem ser abandonadas. A margem da bainha de carga de espaço na figura 2.11 é convenientemente indicada por uma fusão das curvas $L_i \in L_e$; a região onde a corrente de iões é criada pode ser identificada com o uso da razão j_i/j , que é adicionada a esta figura por uma questão de conveniência.

No caso de um plasma de mercúrio a muito alta pressão [figuras 2.11a e 2.11b], L_i excede λ_{ia} por pelo menos uma ordem de magnitude em toda a região junto ao cátodo. No caso de um plasma de árgon à pressão atmosférica com densidade de corrente intermédia [figura 2.11c], L_i excede ou excede consideravelmente λ_{ia} na maior parte da região junto ao cátodo, sendo excepção uma região estreita na vizinhança da margem da bainha onde os dois comprimentos são próximos. Para densidades de corrente altas [figura 2.11d], L_i é inferior a λ_{ia} na bainha de carga de espaço e na parte interior da camada de ionização.

As distribuições da razão $e |E| \lambda_{ia}/kT_h$ são as seguintes. No caso de um plasma de mercúrio a muito alta pressão, esta razão é da ordem de $10^{-4} - 10^{-2}$ no plasma quaseneutro e atinge valores de ordem unitária na bainha de carga de espaço. No caso de um plasma de árgon à pressão atmosférica com densidade de corrente intermédia, esta razão é da ordem de $10^{-3} - 10^{-1}$ no plasma quaseneutro e atinge valores de ordem 10 na bainha de carga de espaço. Conclui-se que a suposição da função distribuição dos iões ser próxima de



Figura 2.11: Livre percurso médio de colisões entre os iões e os átomos, comprimento de maxwellização dos electrões, e escalas locais de comprimento de variação de parâmetros dos iões e dos electrões. Mercúrio, $p_0 = 100$ bar, $T_w = 3000$ K, $j_c(A m^{-2}) = 10^6$ (a), 10^8 (b); árgon, $p_0 = 1$ bar, $T_w = 3500$ K, $j_c(A m^{-2}) = 10^7$ (c), 7.8×10^7 (d).



Figura 2.11: (Cont.) Livre percurso médio de colisões entre os iões e os átomos, comprimento de maxwellização dos electrões, e escalas locais de comprimento de variação de parâmetros dos iões e dos electrões. Mercúrio, $p_0 = 100$ bar, $T_w = 3000$ K, j_c (A m⁻²) = 10⁶ (a), 10⁸ (b); árgon, $p_0 = 1$ bar, $T_w = 3500$ K, j_c (A m⁻²) = 10⁷ (c), 7.8 × 10⁷ (d).

uma função maxwelliana com uma temperatura igual à dos átomos neutros é justificada no plasma quaseneutro mas não na bainha. Resultados dos cálculos mostram que o mecanismo dominante de transporte dos iões na bainha é o de deriva no campo eléctrico da bainha; a difusão é um efeito menor. Logo, a mobilidade dos iões é o único coeficiente de transporte relevante dos iões. Uma vez que a frequência de colisões dos iões (monopositivos) com átomos de um gás de origem depende da energia de colisão bastante fracamente, a dependência da mobilidade dos iões da forma da função de distribuição dos iões é também bastante fraca. Portanto, desvios da distribuição dos iões de uma função maxwelliana com temperatura igual à dos átomos neutros, que é natural que ocorram na bainha, não devem causar um erro apreciável nos casos acima descritos. Este raciocínio não se aplica no caso de um plasma de árgon à pressão atmosférica para altas densidades de corrente: $e |E| \lambda_{ia}/kT_h$, neste caso, é da ordem de $10^{-3} - 10^{-2}$ fora da camada de ionização, torna-se comparável à unidade na camada de ionização, e atinge valores da ordem de 10^2 dentro da bainha, logo, desvios da distribuição dos iões de uma função maxwelliana com temperatura igual à dos átomos neutros da ordem de 10^2 dentro da bainha, logo, desvios da distribuição dos iões de uma função maxwelliana com temperatura igual à dos iões de uma função maxwelliana com temperatura igual à dos iões de uma função maxwelliana com temperatura igual à dos iões de uma função maxwelliana com temperatura igual à dos iões de uma função maxwelliana com temperatura igual à dos iões de uma função maxwelliana com temperatura igual à dos iões de uma função maxwelliana com temperatura igual à dos iões de uma função maxwelliana com temperatura igual à dos iões de uma função maxwelliana com temperatura igual à dos iões de uma função maxwelliana com temperatura igual à dos iões de uma função maxwelliana com temperatura igual à dos iño maxwelliana com temperatura igual à dos iões de uma funç

Podemos concluir que, no caso de um plasma de mercúrio a alta pressão, a descrição hidrodinâmica (de difusão) dos iões, usada neste capítulo, é razoavelmente bem justificada em toda a região junto ao cátodo, incluindo a bainha de carga de espaço. Esta descrição mantém-se razoavelmente bem justificada no caso de um plasma de árgon à pressão atmosférica para a densidade de corrente intermédia, mas não para a densidade de corrente alta. Uma discussão adicional deste ponto é dada na secção seguinte.

No caso de um plasma de mercúrio a muito alta pressão figuras 2.11a e 2.11b, o comprimento de maxwellização dos electrões λ_m excede consideravelmente L_e no volume da bainha de carga de espaço. Segue daqui que, no volume da bainha, a função distribuição dos electrões pode desviar-se substancialmente da maxwelliana e a abordagem usada neste capítulo para o cálculo do transporte de electrões torna-se injustificada. Podemos, no entanto, esperar que isto não cause um erro apreciável já que o transporte de electrões no volume da bainha é uma aceleração trivial dos electrões emitidos pelo campo eléctrico da bainha, e este campo é induzido na sua maioria pelos iões já que no volume da camada $n_e \ll n_i.$ Este raciocínio não se aplica à vizinhança da margem da bainha e ao plasma quaseneutro, onde a ionização entra em jogo. No entanto, λ_m aqui é comparável com, ou consideravelmente menor do que, L_e , assim, podemos esperar que a abordagem utilizada esteja pelo menos qualitativamente correcta. A situação é semelhante no caso de um plasma de árgon à pressão atmosférica com densidade de corrente intermédia: $\lambda_m \gg L_e$ na bainha, no entanto, $\lambda_m \lesssim L_e$ na camada de ionização. Uma vez mais, a situação menos favorável ocorre no caso de um plasma de árgon à pressão atmosférica com densidade de corrente alta, onde $\lambda_m \gg L_e$ na bainha e numa parte substancial da camada de ionização, logo, a abordagem usada poderá ser, quando muito, qualitativamente correcta.

As distribuições da razão $\bar{\nu}_{ee}/\bar{\nu}_{ea}$ são as seguintes. No caso de um plasma de mercúrio

a muito alta pressão, $\bar{\nu}_{ee}/\bar{\nu}_{ea}$ é comparável com m_e/m_a na secção interior da bainha de carga de espaço e excede consideravelmente m_e/m_a na vizinhança da margem da bainha e no plasma quaseneutro. No caso de um plasma de árgon à pressão atmosférica, $\bar{\nu}_{ee}/\bar{\nu}_{ea}$ é muito maior do que m_e/m_a em toda a região junto ao cátodo para a densidade de corrente intermédia. Para a densidade de corrente alta, $\bar{\nu}_{ee}/\bar{\nu}_{ea}$ é muito menor do que m_e/m_a na secção interior da bainha de carga de espaço e muito maior do que m_e/m_a na vizinhança da margem da bainha e no plasma quaseneutro, incluindo na camada de ionização. Logo, a segunda desigualdade em (2.45) é menos restritiva do que a primeira e não afecta as conclusões obtidas acima acerca da validade da abordagem hidrodinâmica usada neste capítulo.

As condições fronteira impostas em x = L, equações (2.26)-(2.30), são aplicáveis desde que no plasma junto ao cátodo ocorram LTE e balanço local entre o aquecimento de Joule e as perdas por radiação, e ocorram a distâncias do cátodo suficientemente pequenas para que a transferência de corrente seja localmente 1D e os efeitos convectivos sejam negligenciáveis. É esse o caso para um plasma de mercúrio a muito alta pressão, onde a espessura da camada de não equilíbrio junto ao cátodo, que separa a região do plasma LTE dominado por radiação do cátodo, é cerca de 100 μ m ou até menor. A espessura da camada de não equilíbrio junto ao cátodo num plasma de árgon à pressão atmosférica para densidade de corrente alta é cerca de 3 mm; a aproximação de transferência de corrente local 1D num plasma quiescente usualmente perde a sua validade a distâncias da superfície do cátodo mais pequenas do que essas. Para a densidade de corrente intermédia, a região do plasma LTE dominado por radiação não é muito bem pronunciada. Não existe equilíbrio de qualquer tipo, excepto quaseneutralidade, na região junto ao cátodo para densidade de corrente baixa.

Assim, a suposição do plasma na fronteira superior do domínio de cálculo estar em LTE e o seu balanço de energia ser dominado pela radiação é justificada no caso de um plasma de mercúrio a muito alta pressão, mas não no caso de um plasma de árgon à pressão atmosférica. Por outro lado, a interacção plasma-cátodo na globalidade é governada pela camada junto ao cátodo acima mencionada, a qual dá contribuições dominantes à queda de tensão junto ao cátodo e à criação da corrente de iões para o cátodo. Esta camada tem uma espessura da ordem de 100 μ m no caso de um plasma de árgon à pressão atmosférica, e é essa mesma camada que aquece o plasma adjacente e não o contrário. Uma dependência desta camada relativamente ao que acontece em escalas da ordem de 1 mm ou superiores é fraca, logo, condições fronteira imprecisas na fronteira superior do domínio de cálculo dificilmente irão estragar a solução nesta camada. Portanto, podemos esperar que o modelo presente no caso de um plasma de árgon à pressão atmosférica representa uma aproximação razoável na camada junto ao cátodo, a qual governa a interacção plasma-cátodo na sua globalidade, embora não para escalas de comprimento maiores.

No modelo considerado, apenas se consideram iões monopositivos. Cálculos LTE da composição parcial de um plasma de mercúrio à pressão de 100 bar e de um plasma de árgon

à pressão de 1 bar numa gama de temperaturas até 20×10^3 K mostram que a fracção de iões dipositivos não excede aproximadamente 1%, assim, a presença de iões multipositivos pode ser negligenciada com segurança para T_e abaixo de 20×10^3 K. Nas simulações presentes, o valor máximo de T_e na região junto ao cátodo ocorre dentro da bainha de carga de espaço nas condições de interesse prático [figuras 2.1a-2.1c, 2.5b, e 2.5c]. No entanto, a formação de iões multipositivos não é governada por este valor (o valor local de n_e é muito pequeno), mas sim pelos valores de T_e na região onde é criado o fluxo de iões para o cátodo. Existe apenas um caso onde este último valor excede 20×10^3 K, que é o caso dum plasma de árgon à pressão atmosférica com uma alta densidade de corrente, mostrado na figura 2.5c: neste caso, T_e na camada de ionização é cerca de 70×10^3 K. Voltamos a lembrar que o caso mostrado na figura 2.5c dificilmente se realizará, uma vez que a queda de tensão junto ao cátodo é demasiado elevada, logo, este último valor provavelmente será exagerado. Ainda assim, não se pode excluir a possibilidade de T_e na camada de ionização de um plasma de árgon à pressão atmosférica exceder 20×10^3 K.

Esta última consideração não significa automaticamente que são formados iões multipositivos para condições não-LTE do presente capítulo: a segunda e terceira ionizações têm de ocorrer suficientemente rápido para que isto aconteça. A formação de iões dipositivos e tripositivos na camada de ionização num plasma de árgon à pressão atmosférica foi estudada numericamente em [Almeida *et al.* 2000], com a suposição da temperatura dos electrões ser constante na camada de ionização e para T_e até 50×10^3 K e densidade de corrente 10^8 A m⁻². Descobriu-se que a corrente dos iões para o cátodo é formada numa secção interior da camada de ionização onde os iões monopositivos são dominantes, sendo isto uma consequência do decréscimo sucessivo das constantes de taxa de cada ionização subsequente. Consequentemente, a corrente de iões pode ser calculada com exactidão suficiente negligenciando a presença de iões multipositivos, o que também justifica a negligência da formação de iões dipositivos ou tripositivos no capítulo presente.

Apenas iões atómicos são tomados em conta no modelo considerado. Na realidade, também iões moleculares podem estar presentes, sendo formados através da reacção de conversão

$$M^+ + 2M \to M_2^+ + M,$$
 (2.48)

onde M é um átomo de Ar ou Hg. A presença de iões moleculares muda ligeiramente a densidade de electrões de equilíbrio para p, T_e , e T_h dados. No entanto, muito mais essencial pode ser o efeito de iões moleculares sobre os parâmetros na região onde o fluxo de iões para o cátodo é criado, porque a taxa de recombinação destes iões com electrões pode exceder substancialmente a dos iões atómicos. Consideremos as seguintes reacções:

$$\begin{array}{rcl} \mathrm{M} + \mathrm{e} & \rightarrow & \mathrm{M}^{+} + \mathrm{e} + \mathrm{e} & \boxed{1} \\ \mathrm{M}^{+} + 2\mathrm{M} & \rightarrow & \mathrm{M}_{2}^{+} + \mathrm{M} & \boxed{2} \\ \mathrm{M}_{2}^{+} + \mathrm{e} & \rightarrow & \mathrm{M} + \mathrm{M} & \boxed{3} \end{array}$$

A neutralização dos iões atómicos pode ser feita através da reacção inversa à reacção 1que designaremos por 1^{-1} ou através da sequência de reacções 2 + 3 (nestas condições, diz-se que temos dois canais de reacção possíveis). Se a reacção 1^{-1} é mais eficaz do que a sequência de reacções 2 + 3, então podemos desprezar o efeito dos iões moleculares. Uma condição suficiente para que isto aconteça é que a taxa da reacção $2 \ll$ taxa da reacção 1. Ou seja, uma condição suficiente para que se negligencie o efeito de iões moleculares é dada por $k_c n_a^2 n_i \ll k_i n_a n_e$, onde k_c é a constante de taxa de conversão. Assumindo que as densidades dos electrões e dos iões são comparáveis, podemos reescrever a última desigualdade como

$$k_c n_a \ll k_i. \tag{2.49}$$

Usando os valores para baixas temperaturas das constantes de taxa de conversão para Ar [Liu & Conway 1975] e Hg [Biondi 1953] e assumindo que k_c varia com T_h proporcionalmente a $T_h^{-3/4}$ [Massey 1976], observamos que, para valores típicos de T_h à volta de 3000 K, a condição (2.49) é satisfeita se a temperatura dos electrões na região onde o fluxo de iões é criado exceder aproximadamente 7×10^3 K para Hg a 100 bar e 12×10^3 K para Ar a 1 bar. Podemos ver pelas figuras 2.1 e 2.5 que a desigualdade (2.49) é válida para mercúrio e árgon para densidades de corrente intermédias e altas. Para mercúrio a $j_c = 10^6$ A m⁻² esta desigualdade não se verifica e é exigido um estudo mais cuidadoso; lembramos que esta desigualdade não é uma condição necessária mas apenas suficiente.

2.4.4 Validade dos modelos simplificados

Análise das bases físicas dos modelos simplificados

Quando os mecanismos físicos dominantes forem identificados, poderemos analisar as bases físicas dos modelos simplificados da região junto ao cátodo em descargas de arco de alta pressão (que são muitos; ver artigo de revisão [Benilov 2008] e as referências nele contidas). A primeira conclusão diz respeito ao papel da bainha de carga de espaço junto ao cátodo. Os resultados numéricos acima descritos mostraram que existe um processo de ionização intensivo na camada junto ao cátodo e que o fornecimento de energia para o gás de electrões que torna possível a ionização ocorre através da aceleração dos electrões emitidos na bainha de carga de espaço. Regimes nos quais a bainha desempenha um papel menor são em princípio possíveis, no entanto não ocorrem nas condições das descargas de arco de alta pressão. Assim, a bainha de carga de espaço é de importância primária e modelos da interacção plasma-cátodo em descargas de arco de alta pressão que negligenciam a bainha não podem ser considerados fisicamente relevantes.

Os modelos simplificados usados na maioria dos trabalhos (por exemplo, [Benilov & Marotta 1995, Benilov & Cunha 2002, Benilov & Cunha 2003*a*], [Schmitz & Riemann 2002], e [Lichtenberg *et al.* 2005]) empregam a suposição dum movimento de iões livre de colisões através da bainha de carga de espaço. Se as colisões são raras, o número médio de colisões

sofridas por um ião ao percorrer uma distância $dx \in dx/\lambda_{ia}$. (Note-se que o maior valor do grau de ionização do plasma na bainha de carga de espaço nas condições das figuras 2.1, 2.3, 2.5 ocorre na margem da bainha nas condições da figura 2.5c e é cerca de 0.1. Por outras palavras, o grau de ionização do plasma dentro da bainha é pequeno em todos os casos e o comprimento λ_{ia} , definido na secção 2.4.3, representa o livre percurso médio dum ião num gás de átomos.) Se as colisões são frequentes e os iões executam um percurso aleatório em vez dum movimento rectilíneo, então o número médio de colisões é $\bar{\nu}_{ia} dx / |v_i|$, onde v_i é a velocidade local de difusão dos iões (de maneira que $dx / |v_i|$ representa o tempo de difusão de um ião na distância dx) e $\bar{\nu}_{ia} = n_a \left(\frac{8kT_h}{\pi m_{ia}}\right)^{1/2} \bar{Q}_{ia}^{(1,1)}$ é a frequência média local de transferência de momenta e vice de transferência de momenta e vice de transferência de tr de transferência de momento em colisões ião-átomo. Uma estimativa válida uniformemente pode ser obtida adicionando as duas expressões dadas acima. Assim, o número médio de colisões sofridas por um ião ao atravessar a bainha de carga de espaço é estimado integrando $\lambda_{ia}^{-1} + \bar{\nu}_{ia} |v_i|^{-1}$ sobre a camada. (Lembramos que a bainha é identificada com a região onde a separação de cargas excede 1% no âmbito do presente modelo.) Valores deste integral para as condições das figuras 2.1a-2.1c, 2.5b, e 2.5c são 1.4×10^4 , 4.7×10^3 , 4×10^2 , 4.5, e 0.97, respectivamente. Podemos concluir que, no caso de um plasma de mercúrio a muito alta pressão, a suposição de um movimento livre de colisões dos iões através da bainha de carga de espaço é definitivamente injustificado.

Estritamente falando, esta suposição também é injustificada no caso de um plasma de árgon à pressão atmosférica, uma vez que o número médio de colisões de iões é comparável à unidade e não menor. Por outro lado, o único parâmetro com que um modelo de uma bainha contribui para o esquema geral de cálculo nas abordagens Benilov & Marotta 1995, Benilov & Cunha 2002, Benilov & Cunha 2003a], [Schmitz & Riemann 2002], e [Lichtenberg et al. 2005] é o campo eléctrico na superfície do cátodo, que afecta a corrente de emissão de electrões através da correcção de Schottky, e pode-se mostrar de uma maneira similar a [Benilov 1992] que os campos eléctricos na superfície, calculados no âmbito de modelos de bainhas livres de colisões e dominadas por colisões, não são muito diferentes nas condições onde o número de colisões é da ordem unitária. Para além disso, a dependência da correcção de Schottky do campo eléctrico na superfície não é muito forte (raiz quadrada). Como consequência, a diferença entre os valores da correcção de Schottky obtidos com o uso dos dois modelos é tipicamente inferior a 0.1 eV. Por outras palavras, os modelos da bainha livre de colisões e dominada por colisões dão resultados similares no caso intermédio onde o número de colisões de iões na bainha é da ordem unitária, e isto permite assumir que ambos os resultados são realistas. Assim, tanto as abordagens simplificadas [Benilov & Marotta 1995, Benilov & Cunha 2002, Benilov & Cunha 2003a], [Schmitz & Riemann 2002], e [Lichtenberg et al. 2005] como o modelo do presente capítulo fornecem uma descrição realista da bainha de carga de espaço num plasma de árgon à pressão atmosférica.

Os modelos [Benilov & Marotta 1995, Benilov & Cunha 2002, Benilov & Cunha 2003a], [Schmitz & Riemann 2002], e [Lichtenberg *et al.* 2005] contêm tratamentos separados de

uma camada de ionização quaseneutra e de uma bainha de carga de espaço com ionização e recombinação congeladas. Os resultados do capítulo presente mostram que esta aproximação é razoável para um plasma de árgon à pressão atmosférica, mas não para um plasma de mercúrio a muito alta pressão: enquanto que as variações de j_i/j ocorrem para as condições da figura 2.5 claramente fora da bainha de carga de espaço, nas condições da figura 2.1 estas variações ocorrem praticamente de forma simultânea com a violação de quaseneutralidade.

A temperatura dos electrões na camada de ionização é tratada como constante em [Benilov & Marotta 1995, Benilov & Cunha 2002, Benilov & Cunha 2003*a*], [Schmitz & Riemann 2002], e [Lichtenberg *et al.* 2005] (e é governada por uma equação de balanço integral). Resultados do presente capítulo mostram que esta aproximação é razoável para um plasma de árgon à pressão atmosférica: T_e varia na camada de ionização desde 17.5 × 10^3 K até 15.4×10^3 K e desde 68.2×10^3 K até 67.6×10^3 K nas condições das figuras 2.5b e 2.5c, respectivamente, i.e., a variação é bastante reduzida. (No âmbito do presente modelo, a camada de ionização é identificada com uma região confinada pela margem da bainha, i.e., um ponto onde a separação de cargas excede 1%, e um ponto onde o desvio de n_e em relação a n_S atinge 50%.)

Foi mostrado na secção precedente que λ_{ia} excede L_i numa parte substancial da camada de ionização num plasma de árgon à pressão atmosférica com densidade de corrente alta ou, de forma equivalente, uma alta queda de tensão junto ao cátodo U. O acoplamento entre os iões e os átomos não é suficientemente forte nessas condições e a descrição convencional hidrodinâmica, ou de difusão, do movimento dos iões na camada de ionização perde a sua validade. Esta conclusão confirma o raciocínio do modelo [Benilov & Marotta 1995, Benilov & Cunha 2002, Benilov & Cunha 2003a], onde a camada de ionização é descrita pela teoria de multifluido [Benilov & Naidis 1998], que também toma em consideração, em adição aos efeitos contabilizados pela teoria de difusão, inércia dos iões e dos átomos e troca de momento entre os iões e os átomos devido às reacções no volume. Uma solução para a camada de ionização em arcos à pressão atmosférica em gases inertes, para quedas de tensão junto ao cátodo altas, obtida desta maneira, é razoável fisicamente e substancialmente diferente daquela dada pela teoria de difusão; ver discussão em [Benilov 2008]. O modelo [Lichtenberg et al. 2005] também emprega a teoria multifluido para a camada de ionização, embora numa forma um tanto reduzida; ver [Benilov 2008] para uma discussão adicional. Podemos, portanto, assumir que o modelo [Benilov & Marotta 1995, Benilov & Cunha 2002, Benilov & Cunha 2003a] e talvez até o modelo [Lichtenberg et al. 2005] sejam melhor justificados no caso de arcos de árgon à pressão atmosférica para U altas do que o presente modelo.

A conclusão é que os modelos simplificados [Benilov & Marotta 1995, Benilov & Cunha 2002, Benilov & Cunha 2003*a*], [Schmitz & Riemann 2002], e [Lichtenberg *et al.* 2005] são injustificados no caso de um plasma de mercúrio a muito alta pressão. Os modelos simplificados são razoavelmente bem justificados no caso de um plasma de árgon à pressão

atmosférica para U moderadas, e alguns deles até mesmo para U altas.

Comparação de resultados

Uma comparação das características tensão-corrente da camada junto ao cátodo para uma temperatura fixa da superfície do cátodo dadas pelo presente modelo com as dadas pelo modelo simplificado [Benilov & Marotta 1995, Benilov & Cunha 2002, Benilov & Cunha 2003a] é mostrada na figura 2.7. O modelo [Benilov & Marotta 1995, Benilov & Cunha 2002, Benilov & Cunha 2003a] assume U como um parâmetro de controlo (e não j_c como no presente modelo.) Sendo destinado para a camada junto ao cátodo, o modelo [Benilov & Marotta 1995, Benilov & Cunha 2002, Benilov & Cunha 2003a deixa de funcionar se U for demasiado baixo. No caso do mercúrio a $T_w = 4000$ K, a paragem ocorre a U = 4.0 V, o que limita a região de existência de solução a $j_c \ge 3.7 \times 10^7 \,\mathrm{A\,m^2}$. No caso do árgon, a paragem ocorre a U = 6.6 V, o que limita a região de existência de solução a $j_c \ge 2.3 \times 10^6 \text{ A m}^2$. No caso do mercúrio a $T_w = 3000 \,\mathrm{K}$, dificuldades relacionadas com a multiplicidade de raízes (ver [Benilov 2008]) aparecem a U > 99 V, o que limita a região de existência de solução a $j_c \leq 6.1 \times 10^7 \,\mathrm{A\,m^{-2}}$. No caso do árgon, a dependência $j_c(U)$ é não monótona, devido à inércia dos iões e dos átomos na camada de ionização e à troca de momento entre os iões e os átomos devido às reacções no volume. (Voltamos a lembrar que estes efeitos não são descritos pelas equações de difusão usadas no presente capítulo, mas são tomados em conta na teoria multifluido empregue no modelo [Benilov & Marotta 1995, Benilov & Cunha 2002, Benilov & Cunha 2003a].)

A figura 2.7 ilustra convenientemente a região de existência de solução no âmbito do modelo simplificado [Benilov & Marotta 1995, Benilov & Cunha 2002, Benilov & Cunha 2003a] e também as tendências gerais exibidas por essa solução, que são semelhantes às exibidas pelo modelo do presente capítulo, excepto a acima mencionada não monotonia da dependência $j_{c}(U)$. No entanto, o que é necessário para o cálculo da interacção plasmacátodo em descargas de arco não são características tensão-corrente para uma temperatura fixa da superfície do cátodo, mas em vez disso dependências das densidades do fluxo de energia e da corrente eléctrica para a superfície do cátodo em função da temperatura da superfície local para um valor fixo da queda de tensão junto ao cátodo; ver Benilov 2008 e as referências inclusas. Estas dependências previstas pelo modelo do presente capítulo e pelo modelo simplificado [Benilov & Marotta 1995, Benilov & Cunha 2002, Benilov & Cunha 2003a] são mostradas nas figuras 2.12 e 2.13. Mais uma vez, existe uma concordância qualitativa entre a solução do presente modelo e a do modelo simplificado [Benilov & Marotta 1995, Benilov & Cunha 2002, Benilov & Cunha 2003a]. Em particular, o modelo presente dá uma dependência não monótona para $q_c(T_w)$ no caso de árgon à pressão atmosférica [figura 2.12a], o que é bem conhecido dos modelos simplificados e representa a razão fundamental da existência de múltiplos modos de transferência de corrente para cátodos termiónicos (ver [Benilov 2008] e referências inclusas). No caso de um plasma de
árgon à pressão atmosférica para U moderadas, a concordância entre os dois modelos não é só qualitativa mas também quantitativa: a solução simplificada para U = 11 V é próxima da solução dada pelo presente modelo para U = 12 V em toda a gama de valores de T_w considerada.

As linhas a cheio na figura 2.14 representam o valor médio da temperatura dos electrões na camada de ionização, avaliada através dos resultados numéricos do presente capítulo como $\langle T_e \rangle = \left(T_e^{(1)} + T_e^{(2)}\right)/2$, onde $T_e^{(1)} \in T_e^{(2)}$ são, respectivamente, valores da temperatura dos electrões na margem da bainha de carga de espaço e na margem da camada de ionização. As linhas a tracejado na figura 2.14 representam valores da temperatura dos electrões na camada de ionização previstos pelo modelo [Benilov & Marotta 1995, Benilov & Cunha 2002, Benilov & Cunha 2003*a*]. Existe uma grande concordância entre os dois modelos para T_w moderadas, especialmente para U = 12 V.

Assim, os resultados do presente capítulo concordam qualitativamente com os resultados dados pelo modelo simplificado [Benilov & Marotta 1995, Benilov & Cunha 2002, Benilov & Cunha 2003*a*], e no caso de um plasma de árgon à pressão atmosférica para U moderadas, a concordância não é apenas qualitativa mas também quantitativa. Deve ser enfatizado que esta conclusão está de acordo com a discussão da justificação física dos dois modelos, dada nas secções precedentes: o caso de um plasma de árgon à pressão atmosférica para U moderadas é o único para o qual ambos os modelos são razoavelmente bem justificados.

2.5 Comparação com dados experimentais

Existe uma variedade de métodos de investigação experimental da interacção plasma-cátodo em descargas de arco de alta pressão, incluindo medições espectroscópicas de parâmetros do plasma na região junto ao cátodo, determinação da queda de tensão junto ao cátodo através de medições de sondas electrostáticas, e medições pirométricas da temperatura da superfície do cátodo. Uma comparação entre a teoria e a experiência foi realizada por diferentes autores; e.g., [Benilov 2008] e as referências inclusas. Em todos os casos, a comparação foi limitada a características integrais, tais como a queda de tensão junto ao cátodo ou perdas totais de calor.

Uma quantidade considerável de dados de distribuições de parâmetros do plasma na região junto ao cátodo, em particular, da temperatura dos electrões e/ou da densidade, foi obtida por medições espectroscópicas; e.g., [Haidar & Farmer 1993, Pellerin *et al.* 1994, Haidar & Farmer 1994, Haidar 1995, Zhou & Heberlein 1996, Pokrzywka *et al.* 1996, Bentley 1997, Dzierzega *et al.* 2004, Kühn & Kock 2006, Redwitz *et al.* 2005, Kühn & Kock 2007, Mitrofanov & Shkol'nik 2007] e as referências inclusas. Os valores máximos medidos da temperatura dos electrões na região junto ao cátodo variaram numa grande gama de valores, dependendo das condições experimentais e do modo de operação do cátodo; por exemplo, valores de 9×10^3 K e 3.6×10^4 K foram relatados em [Redwitz *et al.* 2005] e [Mitrofanov



Figura 2.12: Densidade do fluxo de energia para a superfície do cátodo vs temperatura do cátodo para um valor fixo da queda de tensão junto ao cátodo. Linhas a cheio: o modelo presente. Linhas a tracejado: o modelo [Benilov & Marotta 1995, Benilov & Cunha 2002, Benilov & Cunha 2003*a*]; (a) árgon, $p_0 = 1$ bar; (b) mercúrio, $p_0 = 100$ bar.

2. Modelização unificada de camadas de plasma junto ao cátodo em descargas de arco de alta pressão



Figura 2.13: Densidade de corrente eléctrica no cátodo vs temperatura do cátodo para um valor fixo da queda de tensão junto ao cátodo. Linhas a cheio: o modelo presente. Linhas a tracejado: o modelo [Benilov & Marotta 1995, Benilov & Cunha 2002, Benilov & Cunha 2003*a*]; (a) árgon, $p_0 = 1$ bar; (b) mercúrio, $p_0 = 100$ bar.





Figura 2.14: Temperatura média dos electrões na camada de ionização vs temperatura do cátodo para um valor fixo da queda de tensão junto ao cátodo. Árgon, $p_0 = 1$ bar. Linhas a cheio: o modelo presente. Linhas a tracejado: o modelo [Benilov & Marotta 1995, Benilov & Cunha 2002, Benilov & Cunha 2003*a*].

& Shkol'nik 2007], respectivamente. Uma comparação da experiência com a teoria foi virtualmente inexistente até agora: não faz muito sentido comparar resultados de medições resolvidas espacialmente com valores teóricos obtidos através de tratamentos separados das diferentes sub-camadas com uma temperatura dos electrões espacialmente uniforme, governada por uma equação de balanço integral. O presente modelo dá distribuições de parâmetros ao longo da camada junto ao cátodo e, portanto, representa um primeiro passo na direcção de tornar tal comparação com sentido. O segundo, e último, passo consistirá em combinar o presente modelo com o modelo de aquecimento não linear de superfície (e.g., [Benilov 2008] e referências inclusas), o que permitirá que se simule a interacção plasmacátodo na sua globalidade e, assim, encontrar-se a distribuição de parâmetros não só ao longo da camada junto ao cátodo, mas também ao longo da superfície do cátodo. Até que este segundo passo seja completado, as distribuições da densidade de corrente eléctrica e da temperatura ao longo da superfície do cátodo permanecerão desconhecidas e qualquer comparação será inconclusiva. Não obstante, alguma informação útil pode ser extraída mesmo no estágio actual.

Infelizmente, não existem dados para a descarga de mercúrio a muito alta pressão, para a qual a descrição hidrodinâmica deveria funcionar melhor. Vamos considerar as medições espectroscópicas [Redwitz *et al.* 2005], que foram realizadas com uma alta resolução espacial em árgon para pressões de 1-3 bar, e nas quais a temperatura dos electrões foi deduzida a partir de gráficos de Boltzmann de densidades de população e a densidade de electrões foi determinada a partir de medições de intensidades de radiação contínua. Não existem dados acerca da temperatura da superfície do cátodo ou da queda de tensão junto ao cátodo no artigo [Redwitz *et al.* 2005], no entanto, esses dados foram relatados em artigos precedentes do mesmo grupo. Por exemplo, a temperatura da extremidade do cátodo para a pressão p = 2.6 bar, altura do cátodo de 20 mm e raio de 0.5 mm, e a corrente do arco de 4 A pode ser retirada da figura 8(a) de [Dabringhausen *et al.* 2002] e é igual a 3000 K. A queda de tensão junto ao cátodo para estas condições pode ser retirada das figuras 2(a) ou 7 de [Nandelstädt *et al.* 2002] e é igual a 15 V.

As simulações realizadas para as condições acima mencionadas com $T_w = 3000 \,\mathrm{K}$ mostraram que U igual a 15 V corresponde a $j_c = 4.14 \times 10^5 \,\mathrm{A\,m^{-2}}$. Distribuições de n_e e de T_e obtidas para estes valores de T_w e j_c são mostradas na figura 2.15 pelas linhas a cheio. (Nestes cálculos, o parâmetro r_c foi fixado em 0.5 mm.) Note-se que a razão j_{em}/j_c para estas condições é 1.04, por isso, estas condições, apesar de j_c ser pequeno em termos absolutos, devem ser consideradas semelhantes às condições da figura 2.5b e não às da 2.5a. Na figura 2.15, também são mostrados dados experimentais referentes ao eixo da descarga, retirados da figura 11 de [Redwitz et al. 2005]. Nesta figura, a distância desde a superfície do cátodo está limitada pelo raio do cátodo (0.5 mm); de facto, a aproximação da transferência de corrente ser localmente 1D (ou, mais precisamente, esfericamente simétrica), que é usada na modelização, perde a sua validade para valores de x ainda menores. A discrepância para a temperatura dos electrões entre os valores teóricos e os valores experimentais é cerca de 20%. A discrepância para a densidade dos electrões é pequena para $x \gtrsim 100 \,\mu \text{m}$, no entanto, atinge um factor de cerca de 3 para distâncias mais pequenas. À medida que x decresce, a função calculada $n_e(x)$ atinge um valor máximo em $x \approx 100 \,\mu\text{m}$, enquanto que a função medida cresce de forma monótona para toda a gama de x investigada (até $25\,\mu{\rm m}$).

Um ponto fraco nesta comparação é que a exactidão na determinação experimental de T_w é insuficiente para justificar o uso desse valor como parâmetro de entrada. Nesta sequência, foi feito um outro conjunto de cálculos. Primeiro, foi calculado o modo difuso da interacção plasma-cátodo para as condições acima descritas para uma corrente de arco de 4 A, usando a ferramenta da Internet [Benilov & et al. 2009], que é um código em Fortran, baseado no modelo de aquecimento não linear de superfície combinado com o modelo [Benilov & Marotta 1995, Benilov & Cunha 2002, Benilov & Cunha 2003a] para a camada junto ao cátodo. (Encontrou-se o valor de 15.2 V para a queda de tensão junto ao cátodo, que é bastante próximo do valor experimental acima mencionado de 15 V.) Encontraram-se os seguintes valores no centro da superfície frontal do cátodo para a densidade de corrente e para a temperatura da superfície, respectivamente, $1.15 \times 10^6 \,\mathrm{A\,m^{-2}}$, 3190 K. Simulações realizadas através do modelo presente com estes valores de j_c e de T_w deram um valor de U = 8.9 V, i.e., muito baixo, mas um valor para T_w um pouco menor, $T_w = 3140 \text{ K}$, deu o valor certo U = 15 V. Distribuições de n_e e T_e , obtidas com estes valores de T_w e j_c , são mostradas na figura 2.15 pelas linhas a tracejado. A discrepância entre os valores teóricos e os valores experimentais para a temperatura dos electrões é agora cerca de 10%. No



Figura 2.15: Linhas: distribuições calculadas da temperatura e densidade dos electrões na região junto ao cátodo. Árgon. Linhas: modelização, $p_0 = 2.6$ bar. A cheio: $T_w = 3000$ K, $j_c = 4.14 \times 10^5$ A m⁻². A tracejado: $T_w = 3140$ K, $j_c = 1.15 \times 10^6$ A m⁻². Pontos: dados experimentais de [Redwitz *et al.* 2005], p = 2.6 bar, I = 4 A. Círculos: T_e . Cruzes: n_e .

entanto, os valores teóricos para n_e divergem dos valores experimentais mais fortemente do que os valores representados pelas linhas a cheio, embora a discrepância seja ainda um factor de cerca de 3. O máximo da função deslocou-se para valores mais pequenos de x, no entanto, este deslocamento é insuficiente. Por outras palavras, a distribuição $n_e(x)$ permanece problemática.

Obviamente, a comparação acima é inconclusiva e terá de ser revisitada após o presente modelo ser combinado com o modelo de aquecimento não linear de superfície. Se os desvios entre a teoria e a experiência da distribuição da densidade de electrões persistirem, será uma indicação da necessidade de reanalisar os coeficientes cinéticos e/ou de transporte dos electrões e/ou a importância dos iões moleculares, ou até mesmo o facto da abordagem de difusão ser insuficiente para descrever com suficiente exactidão a relaxação de um feixe de electrões emitido pelo cátodo a distâncias tão pequenas.

2.6 Conclusões

Foi desenvolvido um modelo 1D da região junto ao cátodo em descargas de arco de alta pressão. O modelo é baseado na abordagem hidrodinâmica (de difusão) e trata toda a região junto ao cátodo de uma maneira unificada, sem suposições de equilíbrio térmico ou de ionização ou quaseneutralidade. O transporte das espécies do plasma é descrito pelas equações de Stefan-Maxwell; uma descrição que é válida para graus de ionização do plasma arbitrários em contraste com a descrição baseada na lei de Fick para os iões e electrões, que é válida desde que o grau de ionização seja suficientemente baixo. Foram formuladas

condições fronteira que tomam em conta a emissão dos electrões pela superfície do cátodo. São avaliados coeficientes de transporte, cinéticos, e de radiação e é desenvolvido um método de solução numérica do problema não linear (que é bastante rígido) com condições fronteira. São relatados resultados numéricos para arcos de mercúrio a muito alta pressão, que são típicos para lâmpadas de descarga de alta intensidade (HID), e para um arco de árgon à pressão atmosférica, que é uma espécie de arco de alta pressão estandardizado, e incluem distribuições de parâmetros do plasma ao longo da região junto ao cátodo, características tensão-corrente e fluxo de energia do plasma para o cátodo.

A análise dos resultados numéricos permitiu-nos identificar mecanismos físicos que dominam as diferentes partes da região junto ao cátodo e, assim, assinalar as diferentes subcamadas. No caso de arcos de mercúrio a muito alta pressão, foram identificadas as seguintes sub-camadas: a região do plasma LTE dominado por radiação, a camada de perturbação térmica, a camada de não equilíbrio térmico e a bainha de carga de espaço. Estas sub-camadas também podem ser identificadas no caso de um arco de árgon à pressão atmosférica para densidades de corrente intermédias e altas (embora a região do plasma LTE dominado por radiação não seja muito bem pronunciada para a densidade de corrente intermédia); adicionalmente, neste caso podemos introduzir uma camada de ionização, chegando assim a uma estrutura semelhante à proposta previamente em [Nemchinsky 2005] para a região junto ao ânodo em arcos de alta corrente.

O fluxo de energia de um plasma de arco para a superfície de um cátodo termiónico deve ser suficiente para aquecer a superfície até temperaturas necessárias para emissão termiónica suficientemente forte. Valores tão altos do fluxo de energia são assegurados por um forte fornecimento de energia eléctrica ao gás de electrões, que ocorre na bainha de carga de espaço. Este fornecimento resulta num máximo da temperatura dos electrões na bainha. A energia recebida pelo gás de electrões é gasta na ionização; é assim criada a corrente de iões para o cátodo, que é necessária para manter a transferência de corrente. Estes resultados confirmam o ponto de vista segundo o qual a bainha de carga de espaço é de importância primária em camadas junto ao cátodo em descargas de arco de alta pressão. Enquanto que previamente este ponto de vista era suportado por argumentos baseados no tratamento de sub-camadas e envolvendo bombardeamento de iões como um mecanismo dominante de aquecimento do cátodo (e.g., [Benilov 2008] e referências inclusas), no presente capítulo, este ponto de vista é suportado por uma modelização numérica directa de uma região junto ao cátodo dominada por colisões.

Deve ser sublinhado que regimes nos quais a bainha desempenha um papel menor são, em princípio, possíveis, no entanto, não ocorrem nas condições de descargas de arco de alta pressão. Por outras palavras, os valores locais da temperatura e da densidade de corrente em cada ponto da ligação do arco ao cátodo auto-regulam-se de maneira a que haja uma bainha de carga de espaço com um fornecimento de potência suficientemente forte, e isto acontece, de acordo com os resultados numéricos presentes, quando a densidade de corrente

local excede a densidade de corrente de emissão de electrões ou é ligeiramente inferior a ela.

A descrição hidrodinâmica (de difusão) do movimento dos iões e dos electrões, empregue neste capítulo em toda a região junto ao cátodo, incluindo a bainha de carga de espaço, é justificada no caso de um plasma de mercúrio a muito alta pressão. No caso de um plasma de árgon à pressão atmosférica, esta descrição permanece razoavelmente bem justificada para a densidade de corrente intermédia, mas não para a densidade de corrente alta.

A análise presente confirmou a suposição de importância primária da bainha de carga de espaço, o que constitui uma base física da maioria dos modelos simplificados da região junto ao cátodo em descargas de arco de alta pressão (e.g., [Benilov & Marotta 1995, Benilov & Cunha 2002, Benilov & Cunha 2003a], [Schmitz & Riemann 2002], e [Lichtenberg et al. 2005), assim como um número de outras suposições empregues por estes modelos. Em resumo, estes modelos são razoavelmente bem justificados, no caso de um plasma de árgon à pressão atmosférica para valores moderados da queda de tensão junto ao cátodo, e alguns destes modelos permanecem justificados também para valores altos; no entanto, os modelos simplificados são injustificados, no caso de um plasma de mercúrio a muito alta pressão. Isto acontece devido a dois factores: (1) um número muito grande de colisões sofridas por um ião ao atravessar a bainha de carga de espaço num plasma de mercúrio a muito alta pressão invalida a suposição do movimento de iões na bainha ser livre de colisões, empregue pelos modelos simplificados acima mencionados; (2) um tratamento separado de uma camada de ionização quaseneutra e de uma bainha de carga de espaço com ionização e recombinação congeladas, empregue pelos modelos simplificados, é injustificada no caso de um plasma de mercúrio a muito alta pressão, uma vez que a corrente dos iões para o cátodo é, neste caso, criada, pelo menos parcialmente, dentro da bainha de carga de espaço.

Uma comparação dos resultados fornecidos pelo presente modelo com os do modelo simplificado [Benilov & Marotta 1995, Benilov & Cunha 2002, Benilov & Cunha 2003*a*] revelou uma concordância qualitativa. No caso de um plasma de árgon à pressão atmosférica para valores moderados da queda de tensão junto ao cátodo, a concordância para além de qualitativa é também quantitativa.

O modelo presente, sendo o primeiro a prever não só características integrais da interacção plasma cátodo, mas também distribuições de parâmetros do plasma ao longo da camada junto ao cátodo, representa um primeiro passo para uma análise teórica com significado dos resultados das medições espectroscópicas dos parâmetros do plasma na região junto ao cátodo. Infelizmente, não existem dados experimentais para descargas de mercúrio a muito alta pressão, para os quais a teoria hidrodinâmica deve funcionar melhor, e a comparação é limitada às medições em árgon [Redwitz *et al.* 2005]. Existe uma boa concordância, cerca de dez a vinte por cento, entre a modelização e a experiência no que diz respeito à temperatura dos electrões. No entanto, a distribuição de densidade de electrões calculada revela um máximo a cerca de $100 \,\mu$ m da superfície do cátodo que não é obser-

vado na experiência; como consequência, existe uma discrepância de cerca de um factor de 3 entre os valores da densidade dos electrões. Esta questão terá que ser revisitada após a incerteza das distribuições da densidade de corrente eléctrica e da temperatura ao longo da superfície do cátodo ser removida ao combinarmos o modelo presente com o modelo de aquecimento não linear de superfície.

Capítulo 3

Modelização multifluido da camada de ionização na região catódica dum plasma totalmente ionizado em descargas de arco de alta pressão

A teoria do capítulo 2, a qual se baseia na descrição de transporte de iões e átomos no âmbito de modelo de difusão, não é aplicável na camada de ionização junto ao cátodo (uma camada onde o plasma ainda é quaseneutro mas o equilíbrio de ionização já não se verifica) se a temperatura dos electrões é muito alta; ver a secção 2.4.4. Para colmatar esta lacuna, neste capítulo é desenvolvida uma teoria da camada de ionização com base no modelo multifluido. O carácter da solução é governado por α , a razão entre o comprimento de ionização e o livre percurso médio de colisões ião-átomo. Se $\alpha \geq 1$, a solução é determinada por condições fronteira fisicamente transparentes, nomeadamente, pelo critério de Bohm na margem da bainha e pela condição de ionização completa no lado do plasma da camada de ionização. Se $\alpha < 1$, esta última condição torna-se ineficaz. É encontrada uma condição fronteira alternativa para uma certa gama de valores de α inferiores à unidade, $\alpha_{cr} \leq \alpha < 1$. É sugerida uma abordagem aproximada que engloba toda a gama de α . Esta abordagem é suficiente para propósitos práticos e fornece resultados que estão em acordo com resultados experimentais.

3.1 Introdução

Como já foi visto na secção 2.4.4, o modelo de difusão não é aplicável na camada de ionização junto ao cátodo no caso de temperaturas dos electrões altas. Neste capítulo é desenvolvida uma teoria da camada de ionização com base no modelo multifluido. Uma vez que se trata do caso das temperaturas dos electrões altas, assume-se que o plasma nas condições de equilíbrio de ionização encontra-se próximo da ionização completa, ou seja, o plasma fora da camada de ionização é totalmente ionizado. Assim, trata-se de uma teoria de uma camada que separa um plasma completamente ionizado da bainha de carga de espaço adjacente a uma superfície sólida.

Como foi discutido no capítulo 1, a teoria da camada de ionização é de importância primária para entender a interacção plasma-cátodo em descargas de arco de alta pressão, uma vez que o fluxo de iões, que é a principal fonte de aquecimento da superfície do cátodo, é formado na camada de ionização. Uma teoria simples da camada de ionização pode ser desenvolvida com base nas equações hidrodinâmicas (de difusão); ver o exemplo na secção 1.3.2. No entanto, apesar de fornecer uma boa aproximação em determinadas condições, as equações de difusão podem ser manifestamente inexactas noutras condições, como já foi discutido em pormenor na secção 1.3.2. Vamos considerar outro exemplo que ilustra a inadequação da descrição de difusão da camada de ionização em descargas de arco de alta pressão a temperaturas altas de electrões: a corrente dos iões de um plasma de árgon à pressão atmosférica, calculada através da teoria de difusão [Benilov 1999, Eq. (12)], é mostrada na figura 3.1 vs T_e a temperatura dos electrões na região junto ao cátodo. [Nos cálculos, a temperatura das partículas pesadas (iões e átomos), T_h , foi fixada em 4000 K.] A linha a tracejado representa a corrente dos iões caótica avaliada nas condições de equilíbrio de ionização. Em $T_e \gtrsim 2 \,\mathrm{eV}$, a corrente dos iões prevista pela teoria de difusão excede a corrente dos iões caótica; um resultado fisicamente irrealista.



Figura 3.1: A densidade de corrente dos iões do plasma de árgon. p = 1 bar, $T_h = 4000$ K.

A necessidade de se tomar em conta um desvio do fluxo de iões para o cátodo em relação ao valor de difusão já foi percebida há muito tempo. Nos trabalhos mais antigos, a limitação do fluxo de iões era introduzida "à mão": supunha-se que o fluxo de iões não podia exceder o fluxo caótico avaliado nas condições de equilíbrio de ionização; ver, e.g., o livro [Neumann 1987]. Uma abordagem mais rigorosa consiste em recorrer à descrição multifluido, na qual cada espécie do plasma é tratada como um fluido separado, coexistindo com os fluidos constituídos pelas outras espécies. A equação de conservação de momento dos iões é escrita no âmbito desta descrição, tomando em conta inércia, gradiente de pressão, força do campo eléctrico, e troca de momento entre iões e átomos devido às colisões elásticas e devido à ionização e recombinação no volume. Note-se que é o tomar em conta a inércia e a troca de momento devido à ionização e recombinação no volume que distingue a descrição multifluido do modelo de difusão.

A abordagem multifluido foi pela primeira vez aplicada à teoria da camada de ionização no trabalho [Baksht et al. 1973]. A equação de conservação de momento dos iões foi escrita tomando em conta a inércia e a força do campo eléctrico, enquanto que o gradiente de pressão e a troca de momento devido a colisões elásticas e devido à ionização e recombinação no volume não foram consideradas. Em [Benilov 1995], foi desenvolvido um modelo envolvendo todos os termos acima mencionados da equação de conservação de momento dos iões e foi encontrada uma solução numérica para uma gama limitada de parâmetros. Em [Benilov & Naidis 1998], foi considerado o caso particular em que o volume do plasma é completamente ionizado. Foi encontrada uma solução assimptótica para o caso limite $\alpha \ll 1,$ onde α é a razão entre o comprimento de ionização e o livre percurso médio de colisões ião-átomo. Foi obtida uma fórmula aproximada para o fluxo de iões para todos os valores de α através de uma interpolação entre expressões assimptóticas para dois casos limite opostos, $\alpha \ll 1 \in \alpha \gg 1$. Note-se que os resultados [Benilov & Naidis 1998] não confirmaram as suposições acima mencionadas sobre as quais o modelo [Baksht et al. 1973] é baseado: não existe nenhum regime onde seja negligenciável a troca de momento entre os iões e os átomos devido a colisões elásticas e devido a reacções no volume (se a troca de momento devido às colisões elásticas é negligenciável, que é o caso para $\alpha \ll 1$, então a troca de momento devido à ionização do volume é de importância primária; a situação oposta ocorre para $\alpha \gg 1$).

Fórmulas aproximadas, obtidas em [Benilov 1995, Benilov & Naidis 1998], foram usadas para construir modelos de camadas junto ao cátodo em descargas de arco de alta pressão [Benilov & Marotta 1995, Wendelstorf 1999, Schmitz & Riemann 1999, Benilov & Cunha 2002]. Em particular, descobriu-se que o modelo multifluido descreve a limitação do fluxo de iões do plasma para a superfície do cátodo; ver [Benilov & Cunha 2002]. Infelizmente, não se sabe ao certo se estas fórmulas aproximadas são fiáveis, uma vez que não existem resultados exactos para uma gama alargada de α .

Em súmula, podemos dizer que o modelo multifluido de uma camada de ionização num plasma atómico, apesar de parecer simples (pode ser reduzido a um problema com condição inicial para uma equação diferencial ordinária de primeira ordem suplementado por uma equação quadrática), provou ser invulgarmente difícil matematicamente. As questões mais importantes a serem abordadas são: porque é que os cálculos numéricos são bem sucedidos em alguns casos e deixam de o ser noutros; será que estas diferenças de comportamento se devem a razões físicas ou a razões computacionais; como é que as dificuldades podem ser ultrapassadas?

Este capítulo refere-se ao tratamento do modelo multifluido de uma camada de ionização num gás atómico totalmente ionizado. Um dos objectivos é responder às questões acima colocadas; em particular, será mostrado que a razão da quebra da solução numérica é de natureza física.

3.2 O modelo

3.2.1 Sistema de equações e condições fronteira

Vamos considerar uma camada de ionização que separa um plasma térmico de baixa temperatura totalmente ionizado de uma bainha de carga de espaço que é adjacente a uma superfície sólida. O plasma na camada de ionização contém uma espécie de átomos neutros, iões monopositivos da mesma espécie e electrões. Os iões são acelerados na camada de ionização desde a velocidade zero no volume do plasma até atingirem a velocidade de Bohm na margem da bainha de carga de espaço.

Neste capítulo estamos interessados em modelizar a camada de ionização para o caso em que a temperatura dos electrões é alta. Como podemos ver pela figura 2.5c do capítulo 2, a temperatura dos electrões e das partículas pesadas na camada de ionização varia pouco. Assim, é legítimo considerarmos temperaturas uniformes (embora diferentes) para os electrões e para as partículas pesadas na modelização do presente capítulo.

Uma vez que a espessura da camada é muito menor do que as dimensões do plasma, e em particular muito menor do que as dimensões do plasma em direcções ao longo da superfície sólida, as equações governantes podem ser escritas numa forma unidimensional e plana. Chegamos ao seguinte sistema de equações ([Benilov 1995, Benilov & Naidis 1998]):

$$\frac{d}{dx}(n_i v_i) = k_i n_i n_a, \qquad n_i v_i + n_a v_a = 0, \qquad (3.1)$$

$$\frac{d}{dx}\left(n_{i}m_{i}v_{i}^{2}\right) = -k\left(T_{h} + T_{e}\right)\frac{dn_{i}}{dx} - \frac{n_{i}n_{a}kT_{h}}{nD_{ia}}\left(v_{i} - v_{a}\right) + k_{i}n_{i}n_{a}m_{i}v_{a}, \qquad (3.2)$$

$$m_i n_i v_i^2 + m_i n_a v_a^2 + n_i k \left(T_h + T_e \right) + n_a k T_h = p.$$
(3.3)

Aqui, o eixo x é dirigido ao longo da normal à superfície sólida, da "margem" da bainha de carga de espaço para o plasma. Todas as grandezas presentes nas equações têm o mesmo significado do que nos capítulos precedentes.

A primeira equação em (3.1) é a equação de conservação dos iões, ou seja, a equação 2.1 do capítulo 2, escrita para o caso onde o processo de ionização dominante é o de ionização por impacto de electrão. (A recombinação é negligenciada em virtude do volume do plasma

se encontrar totalmente ionizado; ver a discussão em [Benilov & Naidis 1998].) A segunda equação em (3.1) é uma consequência da conservação de núcleos, ou seja, a equação 2.19 do capítulo 2, e é válida desde que não exista um fluxo de núcleos da superfície para o plasma. A equação (3.2) é a equação de conservação de momento dos iões. O termo no lado esquerdo representa a inércia, os termos no lado direito representam, respectivamente, o gradiente de pressão dos iões combinado com a força do campo eléctrico ambipolar, a força de fricção devido às colisões elásticas entre iões e átomos, e transferência de momento dos átomos neutros para os iões devido à ionização. Esta equação é semelhante à equação 2.5 do capítulo 2, com excepção do termo no lado esquerdo e o último termo no lado direito da equação 3.2, que surgem no âmbito do modelo multifluido. A equação (3.3) provém da conservação de momento do plasma como um todo, os dois primeiros termos representam a pressão dinâmica dos iões e dos átomos.

A condição fronteira na margem da bainha de carga de espaço é dada pelo critério de Bohm

$$v_i = -v_s \equiv -\left[\frac{k\left(T_h + T_e\right)}{m_i}\right]^{1/2}.$$
(3.4)

No lado do volume do plasma da camada de ionização, o plasma está totalmente ionizado e a densidade dos iões tende para um valor constante

$$n_i \to n_{i\infty} \equiv \frac{p}{k\left(T_h + T_e\right)}.\tag{3.5}$$

O problema (3.1)-(3.5) pode ser escrito em variáveis adimensionais na forma:

$$\alpha \delta^2 \frac{d(fw^2)}{d\xi} = -\alpha \delta^2 \frac{df}{d\xi} + \alpha^2 fw \left(\nu + f\right) + f^2 w, \qquad (3.6)$$

$$\alpha \delta^2 \frac{d(fw)}{d\xi} = -f\nu, \qquad (3.7)$$

$$\nu^{2} + \nu\delta^{2} \left(w^{2}f + f - 1 \right) + (\delta w f)^{2} = 0, \qquad (3.8)$$

$$w(0) = 1, \qquad f(\infty) = 1,$$
 (3.9)

onde

$$\xi = \left(\frac{pk_i n_{i\infty}}{nkT_h D_{ia}}\right)^{1/2} x, \qquad f = \frac{n_i}{n_{i\infty}}, \qquad \delta = \left(\frac{T_h + T_e}{T_h}\right)^{1/2}, \qquad (3.10)$$

$$w = -\frac{v_i}{v_s}, \qquad \nu = \frac{n_a}{n_{i\infty}}, \qquad \alpha = \left(\frac{kT_h}{m_i k_i n \widetilde{D}_{ia}}\right)^{1/2}.$$
(3.11)

 $\left(\frac{nkT_hD_{ia}}{pk_in_{i\infty}}\right)^{1/2}$ pode ser interpretado como o comprimento de ionização, i.e., uma escala de espessura da camada de ionização num plasma totalmente ionizado avaliado no âmbito da

teoria de difusão. O parâmetro α é da ordem da razão entre o comprimento de ionização e o livre percurso médio de colisões ião-átomo, ou seja, tem o significado do inverso do número de Knudsen para as espécies iónicas e atómicas. No que se segue, será por vezes conveniente empregar juntamente com δ o parâmetro $\beta = T_e/T_h \equiv \delta^2 - 1$.

As equações diferenciais (3.6) e (3.7), suplementadas com a equação algébrica (3.8) e com as condições fronteira (3.9), representam um problema com condições fronteira de segunda ordem. Após o problema ser resolvido, podemos encontrar o fluxo de iões para a superfície: $J_i = n_{i\infty} v_s f_w$, onde $f_w = f|_{\xi=0} = f_w(\alpha, \delta)$.

O comportamento assimptótico da solução do problema acima mencionado para ξ grandes e pequenos é considerado no apêndice B.1.

3.2.2 Transformando num problema com condição inicial

O problema de segunda ordem com condições fronteira (3.6), (3.7), (3.9) pode ser transformado num problema de primeira ordem com condição inicial de diversas maneiras. Por exemplo, as equações (3.6) e (3.7) podem ser resolvidas em relação às derivadas:

$$\frac{df}{d\xi} = \frac{fw \left[\nu + (1 + \alpha^2) \left(\nu + f\right)\right]}{\alpha \delta^2 \left(1 - w^2\right)},\tag{3.12}$$

$$\frac{dw}{d\xi} = -\frac{\nu + w^2 \left(1 + \alpha^2\right) \left(\nu + f\right)}{\alpha \delta^2 \left(1 - w^2\right)}.$$
(3.13)

Dividindo a equação (3.12) pela equação (3.13), obtemos

$$\frac{df}{dw} = -\frac{wf\left[\nu + (1+\alpha^2)\left(\nu + f\right)\right]}{\nu + w^2\left(1+\alpha^2\right)\left(\nu + f\right)}.$$
(3.14)

A equação (3.14), suplementada pela equação algébrica (3.8), deve ser resolvida para a função f(w) no intervalo $0 \le w \le 1$. Uma condição inicial é fornecida pela segunda condição fronteira (3.9):

$$f_{w=0} = 1. (3.15)$$

Existe uma indeterminação no lado direito da equação (3.14) no ponto w = 0, onde tanto o numerador como o denominador são nulos (note-se que $\nu = 0$ em w = 0). Levantando esta indeterminação, encontramos

$$\frac{df}{dw}(0) = \pm \frac{1+\alpha^2}{\alpha\delta}, \qquad \frac{d\nu}{dw}(0) = \mp \alpha\delta.$$
(3.16)

Uma vez que a densidade dos átomos ν não pode ser negativa, deve ser escolhido o sinal de baixo. Note-se que estas fórmulas podem também ser obtidas através da equação (B.2) do apêndice B.1.

Ao resolver o problema com condição inicial (3.14), (3.15) numericamente, devemos usar a primeira equação em (3.16) (com o sinal menos) para avaliar o lado direito da equação (3.14) no ponto w = 0.

Antes de iniciarmos os cálculos numéricos é necessário resolver a equação quadrática (3.8) em relação a ν . Uma vez que o terceiro termo desta equação é não negativo, as soluções desta equação, se existirem, têm o mesmo sinal. De maneira a que estas soluções sejam não negativas, a quantidade dentro do parêntesis do segundo termo tem de ser não positiva,

$$(1+w^2) f - 1 \le 0. \tag{3.17}$$

O discriminante da equação quadrática (3.8) dividido por $4\delta^2$ é

$$D = \frac{\delta^2}{4} \left(1 - f - w^2 f \right)^2 - w^2 f^2.$$
(3.18)

Resolvendo a desigualdade $D \ge 0$ juntamente com a desigualdade (3.17), obtém-se que a equação (3.8) é resolúvel e possui soluções não negativas conquanto a função f(w) satisfaça a desigualdade

$$f(w) \le \frac{\delta}{\delta (1+w^2) + 2w}.$$
(3.19)

Assumindo que esta desigualdade é satisfeita, podemos escrever soluções da equação (3.8) como

$$\nu = \frac{\delta^2}{2} \left(1 - f - w^2 f \right) \pm \delta \sqrt{D}. \tag{3.20}$$

Surge a questão de qual será o sinal apropriado no lado direito desta expressão, i.e., qual dos dois ramos da solução tem significado físico. As tentativas para encontrar uma resposta simples para esta questão foram infrutíferas; ver apêndice B.2.

Alternativamente, o problema com condições fronteira de segunda ordem (3.6), (3.7), (3.9) pode ser transformado num problema de primeira ordem com condição inicial para a função $\nu(w)$; ver apêndice B.3. Esta equação é suplementada com a expressão para a densidade de partículas carregadas que é obtida resolvendo a equação (3.8) em relação a f. Existe apenas uma raiz positiva, não surge, assim, o problema de escolha entre diferentes ramos. Infelizmente, os resultados numéricos obtidos por esta abordagem também são insatisfatórios; ver apêndice B.2. Igualmente insatisfatórias são outras abordagens numéricas "directas", tais como recorrer a métodos implícitos; ver apêndice B.2.

3.3 Tratamento analítico e numérico

3.3.1 Tratamento analítico

Vamos considerar a questão de escolher o sinal apropriado na equação (3.20). Pode-se obter uma ilustração gráfica conveniente considerando o plano (α, w). O domínio de cálculo neste plano é representado pela faixa ($0 < \alpha < \infty$, $0 \le w \le 1$). Vamos designar por Γ uma fronteira que divide, para um δ dado, a faixa em partes nas quais os diferentes ramos de (3.20) são apropriados (i.e., onde ocorrem diferentes fases da solução); ver figura 3.2. Uma vez que se requer que a equação (3.20) esteja de acordo com a equação (3.16) para w pequenos, podemos supor que o sinal apropriado para w pequenos é mais no caso $\alpha > 1$ e menos no caso $\alpha < 1$. Logo, a linha Γ começa no eixo w = 0 no ponto (1,0). Pode obter-se informação adicional no que diz respeito à linha Γ a partir das soluções analíticas aproximadas nos casos limite de valores de α pequenos ou grandes; ver [Benilov & Naidis 1998]. No caso de α pequenos, resulta da última equação em [Benilov & Naidis 1998, Eq. (32)] que a equação (3.20) no limite (f fixo, $w \to 0$) deve reduzir-se a $\nu = w^2 f^2 / (1 - f)$; resulta da última equação em [Benilov & Naidis 1998, Eq. (43)] que no limite ($f \to 0, w$ fixo) a equação (3.20) deve reduzir-se a $\nu = w^2 f^2$. Podemos concluir que o sinal apropriado no caso de α pequenos é menos. De uma maneira similar, podemos concluir que o sinal apropriado no caso de α grandes é mais. Deve ser enfatizado que ambas as conclusões se aplicam a todos os pontos do intervalo $0 \le w \le 1$. Segue que a fronteira Γ , tendo começado no eixo w = 0no ponto (1,0), termina algures na linha w = 1, sendo o ramo com mais apropriado no lado direito da fronteira e o ramo com menos apropriado no lado esquerdo.



Figura 3.2: Domínio de cálculo no plano (α, w) . Linhas a tracejado: fronteira Γ separando partes nas quais ocorrem diferentes fases da solução (para três valores de β).

Logo, existe uma gama de valores de α para os quais é necessário trocar de uma fase para outra durante os cálculos. Uma troca contínua pode ocorrer apenas em pontos onde as fases coincidam, i.e., onde o discriminante da equação quadrática (3.8) desaparece. Assim, uma das equações que governa a fronteira Γ é D = 0, ou, de forma equivalente,

$$\delta \left(1 - f - f w^2 \right) - 2f w = 0. \tag{3.21}$$

Uma vez que o discriminante não se pode tornar negativo, ele atinge um valor mínimo neste ponto. Logo, outra equação que governa a fronteira $\Gamma \in dD/d\xi = 0$, ou, de forma equivalente,

$$\delta \frac{d}{d\xi} \left(f + fw^2 \right) + 2 \frac{d \left(fw \right)}{d\xi} = 0.$$
(3.22)

Eliminando desta equação as derivadas usando as equações (3.6) e (3.7), chegamos a

$$\alpha^2 \delta w \left(\nu + f\right) + \delta w f - 2\nu = 0. \tag{3.23}$$

A terceira equação é fornecida pela equação (3.20) com D = 0, ou, de forma equivalente,

$$\nu = \frac{\delta^2}{2} \left(1 - f - w^2 f \right).$$
 (3.24)

Assim, a fronteira Γ é governada pelas três equações (3.21), (3.23), (3.24). Resolvendo estas equações, obtemos

$$w = w_{\Gamma}(\alpha) \equiv \frac{1 - \alpha^2}{\delta \alpha^2}, \qquad (3.25)$$

$$f_{\Gamma} = f_{\Gamma}(\alpha) \equiv \frac{\delta^2 \alpha^4}{\alpha^4 \beta + 1}, \quad \nu_{\Gamma} = \nu_{\Gamma}(\alpha) \equiv \frac{\delta^2 \alpha^2 (1 - \alpha^2)}{\alpha^4 \beta + 1}.$$
 (3.26)

A fronteira Γ descrita pela equação (3.25) é representada na figura 3.2. Começa no eixo w = 0 no ponto $\alpha = 1$, entra na região $\alpha < 1$, e termina na linha w = 1 no ponto $\alpha = \alpha_{cr} \equiv (1 + \delta)^{-1/2}$.

Assim, no caso $\alpha \geq 1$ devemos escolher o ramo com mais na equação (3.20). No caso $\alpha \leq \alpha_{cr}$, deve ser escolhido o ramo com menos. No caso $\alpha_{cr} < \alpha < 1$, devemos considerar o ramo com menos quando $w < w_{\Gamma}$ e o ramo com mais quando $w > w_{\Gamma}$.

Esta escolha é uma condição necessária para uma mudança entre ramos contínua. No entanto, permanece a questão se esta escolha é suficiente para assegurar uma mudança contínua e suave, ou, por outras palavras, se uma troca suave é de todo possível. Para responder a esta questão, foi investigado o comportamento assimptótico da função f(w) na vizinhança da fronteira Γ ; ver apêndice B.4. A resposta a esta questão revelou-se afirmativa. É interessante notar que uma mudança de ramos suave, apesar de ser possível na região $\alpha_{cr} < \alpha < 1$, não é possível na região $\alpha < \alpha_{cr}$. Uma vez que a linha Γ é posicionada em $\alpha < \alpha_{cr}$ na região w > 1, i.e., para além da região de interesse físico $w \leq 1$, este resultado não é de importância directa, no entanto indica que o ponto w = 1 é de importância especial para o problema considerado. Esta última conclusão parece surpreendente, à primeira vista, já que w = 1, embora seja um ponto singular das equações (3.12) e (3.13), parece não ter nenhum significado especial para a equação (3.14). No entanto, o seu significado pode ser visto a partir da equação (B.6) do apêndice B.3: neste ponto $d\nu/dw = 0$.

Um outro resultado surpreendente é o de que as densidades das partículas no lado da bainha da camada de ionização podem ser obtidas em $\alpha = \alpha_{cr}$ sem encontrar a distribuição dentro da camada de ionização. De facto, pondo $\alpha = \alpha_{cr}$ na equação (3.26), obtemos

$$\alpha = \alpha_{cr}: \quad f_w = \frac{\delta}{2(1+\delta)}, \quad \nu_w = \frac{\delta^2}{2(1+\delta)}. \tag{3.27}$$

Este resultado, juntamente com a desigualdade (3.19), indica que a função $f_w(\alpha)$ atinge um valor máximo em $\alpha = \alpha_{cr}$.

Decorre do acima exposto que a função f(w) no caso $\alpha_{cr} < \alpha < 1$ tem de satisfazer, em adição à condição fronteira f(0) = 1, também a condição fronteira $f(w_{\Gamma}) = f_{\Gamma}$. Logo, uma destas condições é ineficaz, i.e., é satisfeita por qualquer solução da equação (3.14). Nesta

sequência, o comportamento assimptótico da função f(w) para w pequenos é analisado no apêndice B.5. Descobriu-se que o comportamento assimptótico de uma solução geral da equação (3.14) para w pequenos no caso $0 < \alpha < 1$ é

$$f = \left[\sum_{n=0}^{\infty} p_n w^n\right] + C_1 \left[w^{(1+\alpha^2)/(1-\alpha^2)} + \dots\right],$$
 (3.28)

onde p_0, p_1, p_2, \ldots são coeficientes conhecidos e C_1 é uma constante arbitrária. Podemos ver que a solução geral para a equação (3.14) no caso $0 < \alpha < 1$ representa uma família de soluções de um parâmetro, cada uma delas satisfazendo a condição fronteira f(0) = 1. Por outras palavras, no caso $0 < \alpha < 1$ esta condição fronteira não nos permite escolher de entre as diferentes soluções, i.e., é ineficaz, e o problema com condição inicial para a função f(w), constituído pelas equações (3.14), (3.8) e pela condição fronteira (3.15), possui múltiplas soluções (i.e., não é fechado).

É mostrado no apêndice B.1 que a condição fronteira $f|_{\xi\to\infty} = 1$ é eficaz no âmbito do problema com condições fronteira original: permite que se escolha de entre soluções exponencialmente crescentes e decrescentes. Esta conclusão pode parecer contradizer a conclusão da secção presente de que para $0 < \alpha < 1$ a condição fronteira f(0) = 1 é ineficaz e de que o problema com condição inicial para a função f(w) não é fechado. De facto, não existe qualquer contradição como se pode ver no apêndice B.6.

3.3.2 Verificação numérica

O objectivo desta secção é verificar através de cálculos numéricos as conclusões do tratamento analítico. Foi mostrado analiticamente que no caso $\alpha \geq 1$ é apropriado o ramo mais na equação (3.20). No entanto, surgem valores negativos do discriminante D para α igual ou ligeiramente superior à unidade na solução numérica do problema (3.14), (3.15), suplementado com a equação (3.20) com o ramo mais; ver apêndice B.2. Se o tratamento analítico acima descrito for correcto, então este deve ser um efeito numérico sem significado físico. Para verificar esta última conclusão, o mesmo problema foi resolvido "com tolerância": quando foram encontrados valores negativos do discriminante, eles foram substituídos por zero e os cálculos prosseguiram. Nestes cálculos ocorreram valores negativos de D num certo intervalo de valores de w começando logo no primeiro passo. Como exemplo, a fronteira superior deste intervalo, w_1 , é mostrada na tabela 3.1 para $\alpha = 1$. Aqui, h é o passo da rede numérica e os números dentro dos parêntesis representam o valor mínimo que é atingido neste intervalo pelo discriminante normalizado,

$$\Delta = \min_{w \le w_1} \frac{D}{\frac{\delta^2}{4} \left(1 - f - w^2 f\right)^2 + w^2 f^2}.$$
(3.29)

Podemos ver que em redes mais finas o módulo dos valores negativos do discriminante decresce e a região de w para a qual o discriminante é negativo encolhe. Cálculos com tolerância para $\alpha \ge 1$ deram resultados semelhantes.

3. Modelização multifluido da camada de ionização na região catódica dum plasma totalmente ionizado em descargas de arco de alta pressão

h^{β}	1	7	50
10^{-2}	$8.0\cdot 10^{-2} (-0.084)$	$5.0 \cdot 10^{-2} (-0.158)$	$3.0\cdot 10^{-2} (-0.286)$
10^{-3}	$2.3 \cdot 10^{-2} (-0.035)$	$1.6 \cdot 10^{-2} (-0.052)$	$1.0 \cdot 10^{-2} (-0.098)$
10^{-4}	$7.0 \cdot 10^{-3} (-0.020)$	$5.0 \cdot 10^{-3} (-0.017)$	$3.2 \cdot 10^{-3} (-0.032)$

Tabela 3.1: Fronteira superior do intervalo de w no qual o discriminante é negativo e valor mínimo do discriminante normalizado. $\alpha = 1$.

Isto confirma a conclusão de que valores negativos do discriminante que ocorrem para $\alpha \geq 1$ representam um efeito numérico e não físico.

Foi mostrado analiticamente que no caso $0 < \alpha < 1$ a condição fronteira f(0) = 1 é ineficaz, i.e., é satisfeita por qualquer solução da equação (3.14) [suplementada com a equação (3.20) com o sinal menos]. Os cálculos numéricos confirmaram esta conclusão. Como exemplo, são mostradas na figura 3.3 as funções $f(w) \in \nu(w)$ para $\alpha = \alpha_{cr}$, obtidas resolvendo estas equações com diferentes condições iniciais para a função f em w = 1. As linhas 1 foram calculadas com a condição inicial definida pela equação (3.27), $f(1) = \delta/2(1 + \delta)$, e assim representam a solução desejada, de acordo com o tratamento analítico. Foram tolerados valores negativos do discriminante e o menor valor detectado do discriminante normalizado nestes cálculos foi -1.1×10^{-6} . As linhas 2 e 3 foram calculadas (sem tolerância) com valores iniciais reduzidos por 20% ou, respectivamente, 50%. Podemos ver que todas as soluções atingem o ponto w = 0 com f = 1 (e $\nu = 0$), o que confirma a ineficácia da condição fronteira f(0) = 1.

Foi mostrado analiticamente que no caso $\alpha_{cr} \leq \alpha < 1$ a solução satisfaz a condição adicional $f(w_{\Gamma}) = f_{\Gamma}$, onde w_{Γ} e f_{Γ} são dados pelas equações (3.25) e (3.26), respectivamente, e que o ramo com mais é apropriado na equação (3.20) quando $w > w_{\Gamma}$, enquanto que o ramo com menos é apropriado quando $w < w_{\Gamma}$. De acordo com isto, foram realizados cálculos numéricos nos quais a equação (3.14) foi resolvida com a condição inicial $f(w_{\Gamma}) = f_{\Gamma}$ primeiramente no intervalo $w_{\Gamma} \geq w \geq 0$ com o uso da equação (3.20) com o ramo com menos, e em seguida no intervalo $w_{\Gamma} \leq w \leq 1$ com o uso da equação (3.20) com o ramo com mais. Como exemplo, são mostrados na figura 3.4 os resultados desses cálculos para dois valores de α entre 1 e α_{cr} . Foram tolerados valores negativos do discriminante e o menor valor do discriminante normalizado detectado nestes cálculos foi -6.1×10^{-6} . Podemos ver que as soluções para f(w) e para $\nu(w)$ são suaves, i.e., não apresentam descontinuidades na primeira derivada em todo o intervalo $0 \leq w \leq 1$ incluindo o ponto w_{Γ} , o que confirma as conclusões acima mencionadas do tratamento analítico. As soluções para f(w) satisfazem a condição fronteira f(0) = 1, confirmando, uma vez mais, a conclusão de ineficácia desta condição fronteira para $0 < \alpha < 1$.

Podem ser encontrados no apêndice B.7 resultados numéricos adicionais que validam o tratamento analítico.



Figura 3.3: Densidades das partículas carregadas na camada de ionização para $\alpha = \alpha_{cr}$, calculadas com diferentes condições iniciais em w = 1. $h = 10^{-3}$. Linhas a cheio: f(w). Linhas a tracejado: $\nu(w)$. a: $\beta = 1$. b: $\beta = 50$.



Figura 3.4: Densidades das partículas carregadas na camada de ionização para α entre α_{cr} e 1. $h = 10^{-3}$. Linhas a cheio: f(w). Linhas a tracejado: $\nu(w)$. Pontos: posições da linha Γ . a: $\alpha = 0.5 + 0.5\alpha_{cr}$. b: $\alpha = 0.1 + 0.9\alpha_{cr}$.

3.4 Discussão de resultados

A análise acima mostra que o carácter das soluções que descrevem o modelo multifluido da camada de ionização que separa um plasma completamente ionizado da bainha de carga de espaço adjacente a uma superfície sólida é governado por α , a razão entre o comprimento de ionização e o livre percurso médio de colisões ião-átomo. Portanto, é conveniente considerar o plano (α, w), no qual o domínio de cálculo é representado pela faixa ($0 < \alpha < \infty, 0 \le w \le 1$); ver figura 3.2. Diferentes fases (i.e., diferentes ramos da solução da equação quadrática para a densidade atómica) são apropriadas em diferentes partes da faixa, sendo a fronteira Γ entre estas partes descrita pelas equações (3.25) e (3.26). Surge a questão de saber qual é o significado físico destas fases.

Pode-se obter uma resposta recorrendo a uma abordagem baseada no tratamento da equação diferencial para a densidade atómica, equação (B.5) do apêndice B.3, suplementada pela expressão para a densidade de partículas carregadas obtida ao resolver a equação (3.8) em relação a f. (Lembramos que não existe troca entre diferentes ramos no âmbito de tal abordagem.) Mostra-se no apêndice B.8 que as equações (3.25) e (3.26) aparecem no âmbito desta abordagem como condições de uma transição suave do escoamento atómico através da barreira de som. Por outras palavras, a linha Γ representa no âmbito desta abordagem a linha de Mach para o escoamento atómico, i.e., uma fronteira que divide o domínio de cálculo em partes nas quais o escoamento atómico é sub- ou super-sónico. Mais especificamente, o escoamento atómico é sub-sónico nas condições em que o ramo com mais da solução da equação quadrática para ν é apropriado, e é super-sónico onde o ramo com menos é apropriado.

Pode ser obtida uma outra interpretação física das duas fases recorrendo a soluções assimptóticas nos casos limite de valores pequenos ou grandes de α , [Benilov & Naidis 1998]. Uma vez que α é da ordem do inverso do número de Knudsen, o caso limite de α grande corresponde ao regime de difusão convencional. O caso limite oposto, $\alpha \ll 1$, foi designado em [Benilov & Naidis 1998] por regime de pseudodifusão. A inércia dos iões e a pressão dinâmica dos iões são insignificantes em ambos os regimes. O gradiente de pressão e o campo eléctrico ambipolar são equilibrados no caso de pseudodifusão pela transferência de momento dos átomos neutros para os iões devido à ionização, em vez de devido às colisões elásticas como no caso do regime de difusão; uma variação da pressão estática das partículas carregadas é equilibrada no regime de pseudodifusão por uma variação da pressão dinâmica dos átomos, em vez de uma variação da pressão estática dos átomos como no regime de difusão; bela transferência de difusão. Enquanto que o regime de difusão é descrito pelo ramo com o com menos.

No caso $\alpha \geq 1$, a solução é unicamente determinada por condições fronteira fisicamente transparentes, nomeadamente pelo critério de Bohm na margem da bainha e a condição de ionização total no lado do plasma da camada de ionização. No caso $\alpha < 1$, a última condição deixa de ser eficaz, i.e., é satisfeita por qualquer solução da equação (3.14). É encontrada uma condição fronteira alternativa, descrita pelas equações (3.25) e (3.26), para uma determinada gama de valores de α inferiores à unidade, $\alpha_{cr} \leq \alpha < 1$. Novamente, este resultado pode ser convenientemente ilustrado pela figura 3.2: existe uma condição fronteira efectiva na secção $\alpha \geq 1$ do eixo w = 0; no ponto ($\alpha = 1, w = 0$) a condição fronteira efectiva é transferida para a linha Γ .

Pode ser formulada a seguinte abordagem para a solução do problema, com base no tratamento acima descrito. No caso $\alpha \geq 1$, a solução da equação (3.14) deve começar no eixo w = 0 com a condição inicial f(0) = 1, o ramo apropriado na equação (3.20) é o ramo com o sinal mais. Devem ser tolerados valores negativos do discriminante D. No caso $\alpha_{cr} \leq \alpha < 1$, a solução deve começar na linha Γ com a condição inicial $f(w_{\Gamma}) = f_{\Gamma}$, sendo o ramo com o sinal mais da equação (3.20) apropriado em $w > w_{\Gamma}$ e o ramo com menos em $w < w_{\Gamma}$. Mais uma vez, deve usar-se tolerância.

No caso $\alpha < \alpha_{cr}$ deve usar-se o ramo com menos da equação (3.20). Existe, no entanto, para este caso uma dificuldade no que diz respeito à condição inicial: a condição f(0) = 1 é ineficaz enquanto que a condição $f(w_{\Gamma}) = f_{\Gamma}$ não é aplicável. Assim, as condições fronteira conhecidas são insuficientes para escolher uma solução única no caso $\alpha < \alpha_{cr}$ e é necessária uma relação adicional. Por outras palavras, podemos esperar que no ponto ($\alpha = \alpha_{cr}, w = 1$) a condição fronteira eficaz seja transferida da linha Γ para a secção $\alpha < \alpha_{cr}$ da linha w = 1, no entanto não é claro qual será esta nova condição fronteira.

Deixando de fora do âmbito deste capítulo a questão de saber qual será esta condição fronteira adicional, pode notar-se o seguinte. Podemos esperar que se as soluções obtidas pelos diferentes métodos são próximas entre si, então estas soluções são também razoavelmente próximas da solução desejada. Como foi discutido no fim do apêndice B.7, as soluções são próximas entre si em toda a região $\alpha < \alpha_{cr}$ para β grandes e na região $\alpha \leq 0.4$ para $\beta = 1$. Logo, podemos dessa maneira obter uma estimativa da solução desejada em todos os casos, excepto numa região estreita de α adjacente a α_{cr} para β da ordem unitária.

A dependência $f_w(\alpha)$ calculada dessa forma é representada pelas linhas a cheio na figura 3.5. [Por uma questão de clareza, note-se que os resultados mostrados para $\alpha < \alpha_{cr}$ foram obtidos resolvendo, sem tolerância, o problema (3.14), (3.15), suplementado pela equação (3.20) com o ramo com sinal menos, com $h = 10^{-3}$.] Podemos ver que a dependência calculada $f_w(\alpha)$ é contínua em um dos dois pontos nos quais o procedimento de cálculos é trocado, nomeadamente no ponto $\alpha = 1$. No outro ponto de troca, $\alpha = \alpha_{cr}$, a dependência calculada é contínua à direita: à medida que α tende para α_{cr} por cima, $f_w(\alpha)$ tende, com derivada zero, para o valor $\delta/2(1 + \delta)$ dado pela equação (3.27), confirmando assim a conclusão do tratamento analítico de que $f_w(\alpha)$ atinge em $\alpha = \alpha_{cr}$ o valor máximo igual a $\delta/2(1 + \delta)$. No entanto, a dependência é descontínua à esquerda em $\alpha = \alpha_{cr}$: existe uma lacuna $0.4 < \alpha < \alpha_{cr}$ no caso $\beta = 1$; no caso $\beta = 50$ não existe nenhuma lacuna, mas existe uma descontinuidade entre os resultados numéricos para $\alpha < \alpha_{cr}$ e o ponto máximo. Esta última descontinuidade provém do falhanço em escolher a solução desejada em $\alpha < \alpha_{cr}$ e deve ser considerada como um erro inerente à aproximação acima descrita. No entanto, deve ser salientado que esta descontinuidade é relativamente pequena (cerca de 10%).

Em [Benilov & Naidis 1998], a não-monotonia da dependência $f_w(\alpha)$ foi prevista com base no facto de que esta dependência é crescente no regime de pseudodifusão e decrescente no regime de difusão. Os resultados presentes confirmam esta previsão: de facto, $f_w(\alpha)$ cresce na região $\alpha < \alpha_{cr}$ e decresce na região $\alpha > \alpha_{cr}$. Note-se que a não-monotonia da dependência $f_w(\alpha)$ pode ser entendida da seguinte maneira. Para α de ordem unitária, a força de fricção ião-átomo não é forte e não consegue impedir uma aceleração do fluido iónico pelo gradiente de pressão e pelo campo eléctrico ambipolar para velocidades da ordem da velocidade de Bohm, logo $f_w = O(1)$. Para α grandes ou pequenos, o fluido iónico é sujeito a uma forte força de fricção devido a colisões elásticas ou, respectivamente, a transferência de momento dos átomos-neutros para os iões devido à ionização, logo a velocidade dos iões é muito menor do que a velocidade de Bohm e $f_w \ll 1$.

Na figura 3.5, também é mostrada a dependência $f_w(\alpha)$ descrita pela fórmula de interpolação [Benilov & Naidis 1998, Eq. (50)]. Podemos ver que esta fórmula é qualitativamente correcta. Podemos deduzir uma fórmula aproximada mais precisa usando o facto que $\alpha = \alpha_{cr}$ é um ponto de máximo de $f_w(\alpha)$; ver a equação (B.59) do apêndice B.9. A função $f_w(\alpha)$ descrita por esta última fórmula também é mostrada na figura 3.5. Por comparação gráfica podemos constatar que a precisão desta interpolação é bastante alta.

3.5 Comparação com dados experimentais

Em [Baksht *et al.* 1973] (ver também [Baksht & Yur'ev 1979]), são relatados resultados experimentais que podem ser comparados com os presentes resultados teóricos. Os resultados referem-se a um plasma de Cs fortemente ionizado a uma pressão da ordem de 1 torr e com a temperatura dos electrões a variar entre 2500 - 4500 K.

Uma comparação com dados experimentais é especialmente útil no caso em que a teoria de difusão apresenta resultados significativamente diferentes dos fornecidos pela teoria multifluido. Esse caso ocorre para $\alpha \leq 1$, correspondendo nas condições da experiência a uma temperatura dos electrões superior a aproximadamente 4000 K.

A comparação é apresentada na figura 3.6. Assume-se que a temperatura das partículas pesadas é igual à temperatura da superfície da sonda que, nas condições da experiência, foi cerca de 700 – 750 K. Por isso, os dados teóricos foram calculados para $\beta = 6$. Vê-se que enquanto que os valores obtidos pela teoria de difusão são consideravelmente maiores do que os valores experimentais, a teoria do presente capítulo apresenta um acordo razoável com a experiência.



Figura 3.5: Fluxo de iões adimensional da camada de ionização. Linha a cheio: cálculos por meio da abordagem descrita na secção 3.4. Linha a tracejado: fórmula de interpolação de [Benilov & Naidis 1998, Eq. (50)]. Linha a ponteado: fórmula de interpolação equação (B.59) do apêndice B.9. Pontos: o ponto máximo, equação (3.27). a: $\beta = 1$. b: $\beta = 50$.



Figura 3.6: Fluxo de iões adimensional da camada de ionização. Linha a cheio: cálculos por meio da abordagem descrita na secção 3.4. Linha a tracejado: solução de difusão, equação (B.59) do apêndice B.9. Pontos: dados experimentais [Baksht *et al.* 1973]. $\beta = 6$.

3.6 Conclusões

Foi estudado um modelo multifluido da camada de ionização na margem de um plasma completamente ionizado. Descobriu-se que o carácter da solução é governado por α , a razão entre o comprimento de ionização e o livre percurso médio de colisões ião-átomo. A quebra dos cálculos numéricos para α iguais ou ligeiramente superiores à unidade representa um efeito numérico que pode ser ultrapassado. A quebra dos cálculos numéricos para $\alpha < 1$ é causada pelo facto de que a condição de ionização completa no lado do plasma da camada de ionização se torna ineficaz para $\alpha < 1$, i.e., é satisfeita por qualquer solução da equação diferencial.

São encontradas condições que asseguram uma troca contínua entre diferentes ramos da solução da equação quadrática para a densidade atómica ou, de forma equivalente, uma passagem suave do escoamento atómico através da barreira do som. Esta descoberta permite que se escolha uma solução única na região $\alpha_{cr} \leq \alpha < 1$.

No caso $\alpha = \alpha_{cr}$, as densidades das partículas na camada de ionização no lado da bainha podem ser encontradas sem ser necessário encontrar a distribuição dentro da camada de ionização e são dadas pela equação (3.27).

Na região $\alpha < \alpha_{cr}$, as condições fronteira conhecidas são insuficientes para escolher uma solução única e é necessária uma relação adicional. No entanto, as soluções obtidas nesta região pelos diferentes métodos não diferem muito entre si, o que nos permite esperar que estas soluções não sejam também muito diferentes da solução desejada. Tal abordagem, apesar de ser teoricamente incompleta, fornece informação suficiente para propósitos práticos. Por outro lado, a questão acima mencionada de qual é essa relação adicional é muito

interessante e importante, merecendo ser revisitada no futuro.

Foi deduzida uma fórmula aproximada com um bom grau de precisão para o fluxo de iões gerado na camada de ionização; equação (B.59) do apêndice B.9. Esta fórmula pode ser integrada em modelos de camadas junto ao cátodo em descargas de arco de arco de alta pressão.

Os resultados obtidos estão de acordo com os dados experimentais disponíveis.

Posteriormente ao trabalho apresentado neste capítulo (publicado em [Almeida *et al.* 2004]), foram publicados os trabalhos [Scharf & Brinkmann 2006, Scharf *et al.* 2007] que se debruçaram sobre o modelo usado neste capítulo. Em [Scharf & Brinkmann 2006] usaramse métodos analíticos e gráficos para analisar e reproduzir os nossos resultados. Apesar de o método utilizado nesse trabalho ter sido diferente do nosso, os resultados deste capítulo foram confirmados por completo. Foram sugeridos possíveis melhoramentos, em particular, afirmou-se que os problemas nos nossos cálculos surgiram por termos negligenciado a recombinação e por termos escolhido uma descrição de fluido em vez de uma descrição cinética. Este assunto terá de ser abordado em trabalhos futuros. Em [Scharf *et al.* 2007] foram comparadas as suposições e aproximações usadas em [Almeida *et al.* 2004] e em [Lichtenberg *et al.* 2005], e os respectivos resultados.

Capítulo 4

Modelização unificada de camadas de plasma junto ao ânodo em descargas de arco de muito alta pressão

Neste capítulo é relatada a investigação numérica de camadas junto ao ânodo de arcos de muito alta pressão em mercúrio e em xénon. A simulação é realizada através do modelo numérico desenvolvido no capítulo 2, onde havia sido usado para simular as camadas de plasma junto ao cátodo. Esse modelo permite simular a totalidade de uma camada junto ao eléctrodo no âmbito de um conjunto único de equações sem suposições simplificativas tais como equilíbrio térmico, equilíbrio de ionização, e quaseneutralidade. Os resultados da simulação apoiam o entendimento geral de similaridades e diferenças entre a interacção plasma-cátodo e plasma-ânodo nas descargas de arco de alta pressão estabelecido em trabalhos precedentes. Em particular, o fluxo de energia do plasma para o ânodo é principalmente governado pela corrente do arco e é aproximadamente proporcional à corrente. Os resultados das simulações do fluxo de energia do plasma para o ânodo e da distribuição de perdas de energia pela radiação, realizadas para as condições de uma lâmpada experimental de xénon a muito alta pressão, estão em bom acordo com os dados experimentais.

4.1 Introdução

A abordagem de modelização unificada que foi desenvolvida no capítulo 2, na qual a totalidade da camada junto ao eléctrodo é simulada no âmbito de um conjunto único de equações tomando em conta todos os efeitos não-LTE, tem uma característica que é muito importante tanto do ponto de vista prático como metódico: é independente da polaridade e permite que se modelize tanto a camada junto ao cátodo como a camada junto ao ânodo através do mesmo código, mudando simplesmente o sinal da densidade de corrente. Note-se que esta característica é importante também para modelizar camadas junto aos eléctrodos em arcos AC.

Neste capítulo, o modelo do capítulo 2 é empregue na investigação de camadas junto ao ânodo de descargas de arco de muito alta pressão em mercúrio e xénon. Note-se que foi o uso de descargas de arco com pressões de 100 bar e superiores que possibilitou o desenvolvimento de fontes de luz excepcionalmente compactas e brilhantes que são necessárias para, e.g., projecção digital. Os mecanismos físicos das descargas de arco de muito alta pressão são diversos e complexos e nem todos os seus aspectos são bem entendidos. Em particular, existem questões em aberto relacionadas com a interacção arco-eléctrodo. Existe uma variedade de métodos de investigação experimental de interacção de arcos de alta pressão com eléctrodos; ver, e.g., os artigos de resumo [Mentel et al. 2000, Adler 2000] e as referências neles contidas. Infelizmente, a maioria destes métodos não pode ser aplicada nas condições de arcos de muito alta pressão e o único meio de diagnóstico viável na maioria dos casos é a análise da radiação emitida pelos eléctrodos (pirometria) e pelas regiões do arco junto aos eléctrodos (espectroscopia do plasma). Nesta situação a modelização numérica é de enorme importância. Note-se que simulações de camadas junto ao ânodo em descargas de arco de alta pressão relatadas previamente [Dinulescu & Pfender 1980, Nazarenko & Panevin 1989, Lenef et al. 2004] referem-se a condições fortemente diferentes (arcos de árgon à pressão de 1 bar [Dinulescu & Pfender 1980, Nazarenko & Panevin 1989] e 2.6 bar [Lenef et al. 2004]); para além disso, as simulações [Dinulescu & Pfender 1980, Nazarenko & Panevin 1989] foram realizadas com a aproximação de quaseneutralidade, i.e., negligenciando a separação de cargas.

Os resultados da modelização foram comparados com dados de experiências, realizadas na Philips Aachen (Alemanha) em paralelo com este trabalho. Verificou-se que o fluxo de energia do plasma para o ânodo e a distribuição de radiância do plasma junto ao ânodo estão em bom acordo com as previsões do modelo teórico.

4.2 Modelo de transferência de corrente através de uma camada planar

As simulações foram realizadas através do modelo apresentado no capítulo 2 desta dissertação. Os resultados da modelização relatados neste capítulo referem-se ao caso de transferência de corrente para um eléctrodo planar através de uma região junto ao eléctrodo planar; um caso diferente do caso de transferência de corrente para um eléctrodo hemisférico através de uma região junto ao eléctrodo esfericamente simétrica, tratado no capítulo 2. O sistema de equações diferenciais ordinárias governantes para o caso planar é obtido a partir do sistema formulado no capítulo 2 desta dissertação pondo B = 1 e substituindo a equação (2.21) por

$$p = p_0 + \varepsilon_0 \frac{E^2 - E_0^2}{2}, \tag{4.1}$$

onde $p \in E$ são a pressão do plasma e o campo eléctrico locais e $p_0 \in E_0$ são a pressão do plasma e o campo eléctrico num ponto de referência. Vale a pena salientar que o segundo termo no lado direito desta equação é insignificante em camadas junto ao ânodo, no entanto, é comparável com o primeiro termo na bainha de carga de espaço junto ao cátodo para densidades de corrente altas e, portanto, deve ser retido. A variável independente é x, a distância a partir da superfície do eléctrodo. No caso planar, a densidade de corrente j é a mesma em todos os pontos do plasma e é considerada um parâmetro de entrada. Note-se que o sentido positivo para o campo eléctrico e para a densidade de corrente é o dirigido do eléctrodo para o plasma; i.e., $E \in j$ representam projecções dos vectores correspondentes sobre o eixo dos x.

As condições fronteira na superfície do eléctrodo, x = 0, são as mesmas que foram usadas no capítulo 2 e tomam em consideração a emissão de electrões pela superfície. Uma vez que a densidade de corrente é constante na geometria planar, todos os parâmetros do plasma (excepto o potencial electrostático) são constantes a distâncias grandes do eléctrodo, onde o plasma se encontra próximo do estado de equilíbrio termodinâmico local, ou LTE, e o seu balanço de energia é dominado pela radiação. Podemos dizer que o plasma longe do eléctrodo não é perturbado pelo eléctrodo. A fronteira superior do domínio de cálculo, x = L, no caso planar, é posicionada no plasma não perturbado e as condições nesta fronteira são as de derivadas nulas:

$$\frac{\mathrm{d}n_e}{\mathrm{d}x} = \frac{\mathrm{d}E}{\mathrm{d}x} = \frac{\mathrm{d}T_e}{\mathrm{d}x} = \frac{\mathrm{d}T_h}{\mathrm{d}x} = 0.$$
(4.2)

Aqui n_e é a densidade numérica de electrões. Note-se que estas condições fronteira, sendo aplicadas num plasma uniforme, são equivalentes às condições fronteira que foram usadas no capítulo 2 e traduzem-se na suposição de que o plasma em x = L se encontra próximo de LTE e o seu balanço de energia é dominado pela radiação.

O ponto de referência na equação (4.1) é identificado naturalmente com a fronteira superior do domínio de cálculo, assim p_0 representa a pressão do plasma em x = L, i.e., no plasma não perturbado.

Um dos parâmetros mais importantes que caracterizam a interacção plasma-eléctrodo é a queda de tensão na região de perturbação junto ao eléctrodo, que também se irá designar por queda de tensão junto ao eléctrodo. Este parâmetro pode ser avaliado usando os resultados da modelização após o problema ser resolvido, desde que seja adoptada uma definição apropriada para a queda de tensão junto ao eléctrodo. No caso planar, a queda de tensão na região de perturbação junto ao eléctrodo pode ser definida de uma forma natural e não ambígua do seguinte modo. A distribuição do potencial electrostático no plasma não perturbado é linear. Vamos extrapolar esta distribuição até à superfície do eléctrodo. O desvio entre este valor extrapolado e o valor real do potencial na superfície do eléctrodo, como é mostrado na figura 4.1, caracteriza a perturbação introduzida pelo eléctrodo e pode ser chamada a queda de tensão junto ao eléctrodo. Deve ser salientado

que esta definição não depende do conceito da margem da camada junto ao eléctrodo, que não pode ser escolhida de uma forma não ambígua, e está de acordo com a forma como são determinadas as quedas de tensão junto aos eléctrodos em descargas de arco de alta pressão a partir de medições com sondas electrostáticas [Luhmann *et al.* 2002]. O sinal na definição da queda de tensão, mostrada na figura 4.1, depende da polaridade, de acordo com a convenção de sinal usual para a queda de tensão junto ao eléctrodo: se o campo eléctrico na camada junto ao eléctrodo é mais alto do que o campo eléctrico no plasma não perturbado e tem o mesmo sentido, então a queda de tensão junto ao eléctrodo é positiva. A camada junto ao eléctrodo consome mais potência eléctrica do que uma camada "com a mesma espessura" no plasma não perturbado no caso U > 0 e menos potência no caso U < 0.



Figura 4.1: Linhas a cheio: Esquema de distribuições do potencial electrostático nas regiões junto ao cátodo e ânodo. Linhas a tracejado: distribuições do potencial electrostático no plasma não perturbado.

Uma fórmula que expressa a definição de U mostrada na figura 4.1 pode ser obtida da seguinte forma. A distribuição do potencial no plasma não perturbado é descrita pela função linear $C - E_{\infty}x$, onde $C = \lim_{x\to\infty} [\varphi(x) + E_{\infty}x]$. (O índice ∞ é atribuído a valores das quantidades correspondentes no plasma não perturbado.) Assim a definição acima introduzida pode ser expressa como

$$U = \pm \left\{ \lim_{x \to \infty} \left[\varphi \left(x \right) + E_{\infty} x \right] - \varphi \left(0 \right) \right\}$$
(4.3)

ou, de forma equivalente,

$$U = \pm \int_0^\infty (E_\infty - E) \, \mathrm{d}x. \tag{4.4}$$

Aqui e no que segue, os sinais superior e inferior referem-se, respectivamente, ao cátodo e ao ânodo.

Será conveniente para a análise dos resultados numéricos introduzir a diferença entre o potencial na camada junto ao ânodo, $\varphi(x)$, e a função $\varphi(0) - E_{\infty}x$:

$$u(x) = \varphi(x) - \varphi(0) + E_{\infty}x.$$
(4.5)

A função $\varphi(0) - E_{\infty}x$ pode ser vista como a distribuição de potencial que prevaleceria se a camada junto ao eléctrodo estivesse ausente. Portanto, a função u(x) representa a perturbação do potencial electrostático causada pela presença da camada junto ao eléctrodo. Esta função relaciona-se com a queda de tensão junto ao eléctrodo pela fórmula $U = \pm \lim_{x \to \infty} u(x)$. Nos cálculos numéricos, U é avaliada como

$$U = \pm \left[\varphi\left(L\right) - \varphi\left(0\right) + E_{\infty}L\right]. \tag{4.6}$$

O balanço de energia da camada junto ao eléctrodo pode ser expresso em termos de U da maneira seguinte. Aplicando as equações (2.42) e (2.43) do capítulo 2 à camada junto ao eléctrodo limitada por uma coordenada x posicionada no plasma não perturbado, podemos obter a equação de conservação de energia da camada junto ao eléctrodo na seguinte forma:

$$q_w = \frac{j}{e} \left[\left(\frac{5}{2} + \xi_{e\infty} \right) kT_{e\infty} + A_f \right] + j \left[\varphi \left(0 \right) - \varphi \left(x \right) \right] - \int_0^x w_{\text{rad}} \, \mathrm{d}x. \tag{4.7}$$

Aqui q_w é a densidade do fluxo de energia da camada junto ao eléctrodo para a superfície do eléctrodo; $\xi_{e\infty}$ é o valor no plasma não perturbado de um coeficiente cinético ξ_e que descreve o efeito inverso à difusão térmica dos electrões e é expresso como $\xi_e = A_i^{(e)} + A_a^{(e)}$, onde $A_i^{(e)}$ e $A_a^{(e)}$ são coeficientes cinéticos que foram introduzidos no capítulo 2 e são descritos em pormenor no apêndice A; A_f é a função de trabalho do material do eléctrodo; e $w_{\rm rad}$ é a densidade de perdas de energia do plasma dentro da camada através de radiação. Note-se que os termos no lado direito representam, respectivamente, a densidade do fluxo de energia transportada pela corrente dos electrões, do plasma não perturbado (com a corrente iónica a ser negligenciada) até à camada junto ao eléctrodo; a potência eléctrica fornecida à camada; e a potência radiada. Uma vez que esta equações aplica-se a uma camada junto ao eléctrodo fina, ela é escrita em uma dimensão e não leva em consideração as perdas de energia nas direcções ao longo do eléctrodo.

Rearranjando os segundo e terceiro termos no lado direito da equação (4.7) usando a igualdade $jE_{\infty} = w_{\rm rad\infty}$, pondo $x \to \infty$, e usando a equação (4.3), podemos reescrever a equação (4.7) como

$$q_w = \frac{j}{e} \left[\left(\frac{5}{2} + \xi_{e\infty} \right) k T_{e\infty} + A_f \right] \mp j U - \Delta W_{\text{rad}}, \tag{4.8}$$

onde $\Delta W_{\rm rad}$ representa a diferença entre a potência radiada pela camada junto ao eléctrodo e a potência radiada por uma camada "com a mesma espessura" no plasma não perturbado,

$$\Delta W_{\rm rad} = \int_{0}^{\infty} \left(w_{\rm rad} - w_{\rm rad\infty} \right) \, \mathrm{d}x. \tag{4.9}$$

Note-se que equações de balanço integral de energia de camadas junto aos eléctrodos, similares à equação (4.8), são bem conhecidas [Benilov 2008].

Introduzindo a assim chamada tensão de aquecimento do eléctrodo $U_h = q_w / |j|$, podemos reescrever a equação (4.8) como

$$U_h = \mp \left[\left(\frac{5}{2} + \xi_{e\infty} \right) k T_{e\infty} + A_f \right] \frac{1}{e} + U - \Delta U_{\text{rad}}, \tag{4.10}$$

onde $\Delta U_{\rm rad} = \Delta W_{\rm rad} / |j|$.

A avaliação de todos os outros coeficientes de transporte, cinéticos e de radiação é descrita no apêndice A.

4.3 Resultados e discussão

4.3.1 Resultados teóricos

Na figura 4.2 é mostrada uma distribuição calculada típica das densidades de partículas carregadas, temperaturas dos electrões e das partículas pesadas, e campo eléctrico na camada junto ao ânodo. Esta distribuição refere-se ao plasma de Hg, a pressão no plasma não perturbado $p_0 = 100$ bar, a temperatura da superfície do ânodo $T_w = 2000$ K, e a densidade de corrente $j = 10^7$ A m⁻². O eléctrodo nesta e em todas as simulações seguintes supõe-se ser feito de tungsténio puro, n_i é a densidade numérica de iões, n_S é a densidade de partículas carregadas avaliada através da equação de Saha em termos das temperaturas locais das partículas pesadas T_h e dos electrões T_e e com a pressão local do plasma igual à pressão do plasma não perturbado, $p = p_0$.

Existe uma região de plasma não perturbado com parâmetros constantes na figura 4.2 para $x \gtrsim 100 \,\mu$ m. Esta região representa um análogo da zona denominada nas simulações junto ao cátodo por região de plasma LTE dominado por radiação, denominação que foi introduzida na secção 2.4; a diferença é que parâmetros no plasma LTE dominado por radiação nas condições da modelização do capítulo 2 não são uniformes devido a uma densidade de corrente variável que tem a sua origem na geometria esférica. A camada que separa o plasma não perturbado do ânodo, na qual são localizados os desvios de LTE e os desvios de equilíbrio entre o aquecimento de Joule e o arrefecimento por radiação será designada por camada de não equilíbrio junto ao ânodo. Esta camada pode ser dividida em quatro zonas. Numa zona (exterior) que faz fronteira com o plasma não perturbado, o balanço entre o aquecimento de Joule e o arrefecimento por radiação é perturbado pelo efeito de arrefecimento do ânodo, assim, os parâmetros do plasma já não são uniformes espacialmente. Nesta zona, verifica-se a quaseneutralidade, $n_e \approx n_i$; o equilíbrio de ionização



Figura 4.2: Distribuições de parâmetros na camada junto ao ânodo do plasma de Hg. $p_0 = 100$ bar, $T_w = 2000$ K, $j = 10^7$ A m⁻².

(Saha), $n_e \approx n_S$; e o equilíbrio térmico, $T_e \approx T_h$. Uma vez que a descrição do plasma empregue no capítulo 2 e no presente capítulo não envolve a população dos estados excitados, estes três tipos de equilíbrio traduzem-se conjuntamente no equilíbrio termodinâmico local do plasma. Esta é a mesma zona que foi denominada camada de perturbação térmica no capítulo 2. Note-se que esta camada representa uma parte da camada de não equilíbrio junto ao ânodo e, nesse sentido, seria natural chamá-la "sub-camada", no entanto, para simplificar, vamos utilizar o termo "camada". Mais próximo da superfície do ânodo, T_e diverge de T_h e começa a decrescer mais lentamente do que T_h : o equilíbrio térmico deixa de se verificar e o mesmo acontece ao LTE como um todo. O equilíbrio de ionização e a quaseneutralidade ainda prevalecem. Esta zona foi denominada, no capítulo 2, camada de não-equilíbrio de ionização deixa de existir, embora ainda prevaleça a quaseneutralidade. Esta zona foi denominada, no capítulo 2, camada de não equilíbrio de ionização deixa de existir. Esta é a bainha de carga de espaço.

A estrutura, acima descrita, da região de perturbação junto ao ânodo é semelhante à estrutura da região junto ao ânodo em arcos de alta corrente proposta em [Nemchinsky 2005] e à estrutura da região junto ao cátodo encontrada na modelização unificada de camadas junto ao cátodo do capítulo 2.

Podemos ver que a quaseneutralidade nas condições da figura 4.2 deixa de existir logo a seguir à violação do equilíbrio de ionização, i.e., a camada de ionização é fina e não é muito bem pronunciada. A mesma característica foi encontrada, no capítulo 2, para a camada junto ao cátodo de um plasma de mercúrio a muito alta pressão. A bainha de carga de espaço junto ao ânodo para as condições da figura 4.2 também é bastante fracamente

pronunciada: as densidades das partículas carregadas diferem por não mais do que um factor de 2. Isto é contrário ao que acontece na camada junto ao cátodo para condições de interesse prático. A densidade dos iões n_i na bainha excede a densidade dos electrões n_e e o campo eléctrico na bainha e na camada de ionização é negativo, i.e., dirigido para a superfície do eléctrodo. Esta situação é típica para camadas junto ao cátodo, mas também ocorre frequentemente em camadas junto ao ânodo, nomeadamente, nos casos em que a densidade de electrões junto ao ânodo é maior do que a que é necessária para fornecer o transporte da corrente do arco para o ânodo e uma parte de electrões do plasma tem de ser impedida de entrar na bainha; ver, e.g., a discussão e referências em [Redwitz *et al.* 2006] e as estimativas em [Benilov 2008].

O potencial electrostático $\varphi(x)$ para as condições da figura 4.2 é representado pela linha a cheio 1 na figura 4.3. (O zero do potencial é escolhido na superfície do eléctrodo.) As linhas a tracejado nesta figura descrevem a função u(x), que representa a perturbação do potencial electrostático devido à presença da camada junto ao ânodo (ver secção 4.2). A queda de tensão ao longo da bainha de carga de espaço e da camada de ionização é negativa (voltamos a lembrar a convenção de sinal da queda de tensão junto ao eléctrodo mencionada na secção 4.2), o que está de acordo com o sinal do campo eléctrico local e totaliza aproximadamente -0.4 V. No entanto, a bainha e a camada de ionização são bastante finas, enquanto que o campo eléctrico nas camadas de não equilíbrio e de perturbação térmica é positivo e excede E_{∞} , que é o motivo pelo qual a tensão total junto ao ânodo é positiva (1.49 V).



Figura 4.3: Linhas a cheio: potencial electrostático na camada junto ao ânodo. Linhas a tracejado: perturbação do potencial electrostático devido à presença da camada junto ao ânodo. $p_0 = 100$ bar, $T_w = 2000$ K. 1: plasma de Hg, $j = 10^7$ A m⁻². 2: plasma de Xe, $j = 10^7$ A m⁻². 3: plasma de Xe, $j = 10^8$ A m⁻².

Na figura 4.4, são mostradas distribuições das densidades de partículas carregadas, das
4. Modelização unificada de camadas de plasma junto ao ânodo em descargas de arco de muito alta pressão

temperaturas dos electrões e das partículas pesadas, e do campo eléctrico calculadas para o plasma de Xe, p_0 = 100 bar, para dois valores da temperatura da superfície do ânodo, $T_w = 2000 \,\mathrm{K} \,\mathrm{e} \,T_w = 3500 \,\mathrm{K}$, e para dois valores da densidade de corrente, $j = 10^7 \,\mathrm{A} \,\mathrm{m}^{-2}$ e $j = 10^8 \,\mathrm{A}\,\mathrm{m}^{-2}$. Na figura 4.3, estão representadas, pelas linhas 2 e 3, distribuições do potencial electrostático e da perturbação do potencial electrostático devido à presença da camada junto ao ânodo para duas das variantes. Comparando as distribuições para condições similares para os plasmas de xénon e de mercúrio [figuras 4.2 e 4.4a, linhas 1 e 2 na figura 4.3, podemos notar as seguintes diferenças. A espessura da camada de não equilíbrio junto ao ânodo é maior no xénon do que no mercúrio. A camada de ionização no xénon também é um pouco mais larga do que no mercúrio. A bainha de carga de espaço no xénon é também mais larga e é muito melhor pronunciada, n_e na bainha excede n_i e o campo eléctrico na bainha é positivo. No entanto, valores absolutos do campo eléctrico na camada junto ao ânodo no xénon são menores do que no mercúrio, motivo pelo qual a variação de potencial na região $x \lesssim 10^{-4}$ m, compreendendo a bainha e as camadas de ionização e de equilíbrio térmico, é bastante pequena e a contribuição dominante para a tensão total junto ao ânodo é dada pela camada de perturbação térmica. Uma vez que o campo eléctrico na camada de perturbação térmica no xénon é inferior a E_{∞} , a tensão junto ao ânodo é negativa (-1.00 V). Por outras palavras, a camada junto ao ânodo consome mais potência eléctrica do que uma camada "com a mesma espessura" no plasma não perturbado no caso do mercúrio, e menos potência no caso do xénon.

Comparando as distribuições mostradas nas figuras 4.4a-4.4d, conclui-se que o efeito da temperatura da superfície do ânodo nas distribuições de parâmetros na camada junto ao ânodo é bastante fraca. O aumento da densidade de corrente produz um efeito mais pronunciado, especialmente nas densidades das partículas carregadas.

A medida que a distância x à superfície do ânodo decresce, a temperatura dos electrões T_e mostrada nas figuras 4.2 e 4.4 decresce na parte exterior da camada de não equilíbrio junto ao ânodo e exibe um comportamento não monótono dentro da bainha de carga de espaço e na sua proximidade. No entanto, variações de T_e na bainha são muito pequenas. Isto é contrário a um máximo pronunciado de T_e que ocorre para condições de interesse prático dentro da bainha de carga de espaço junto ao cátodo (ver capítulo 2) e que é uma manifestação de um forte fornecimento de energia ao gás de electrões na bainha de carga de espaço que torna possível a criação de uma corrente de iões necessária para compensar o défice da corrente de electrões.

Parâmetros das camadas de não equilíbrio junto ao ânodo estão sumariados na tabela 4.1: a temperatura dos electrões na superfície do ânodo e no plasma não perturbado, T_{ew} e $T_{e\infty}$; o valor $\xi_{e\infty}$ no plasma não perturbado do coeficiente cinético que descreve o efeito inverso à difusão térmica dos electrões; a queda de tensão U na camada de não equilíbrio junto ao ânodo; a tensão de aquecimento do ânodo $U_h = q_w/j$; e $\Delta U_{\rm rad}$ o equivalente da diferença entre a potência radiada pela camada de não equilíbrio junto ao ânodo e uma

4. Modelização unificada de camadas de plasma junto ao ânodo em descargas de arco de muito alta pressão



Figura 4.4: Distribuições de parâmetros na camada junto ao ânodo do plasma de Xe. $p_0 = 100 \text{ bar.}$ (a) $T_w = 2000 \text{ K}$, $j = 10^7 \text{ A m}^{-2}$. (b) $T_w = 3500 \text{ K}$, $j = 10^7 \text{ A m}^{-2}$. (c) $T_w = 2000 \text{ K}$, $j = 10^8 \text{ A m}^{-2}$. (d) $T_w = 3500 \text{ K}$, $j = 10^8 \text{ A m}^{-2}$.

4. Modelização unificada de camadas de plasma junto ao ânodo em descargas de arco de muito alta pressão



Figura 4.4: (Cont.) Distribuições de parâmetros na camada junto ao ânodo do plasma de Xe. $p_0 = 100$ bar. (a) $T_w = 2000$ K, $j = 10^7$ A m⁻². (b) $T_w = 3500$ K, $j = 10^7$ A m⁻². (c) $T_w = 2000$ K, $j = 10^8$ A m⁻². (d) $T_w = 3500$ K, $j = 10^8$ A m⁻².

4. Modelização unificada de camadas de plasma junto ao ânodo em descargas de arco de muito alta pressão

T_w	j	p_0	T_{ew}	$T_{e\infty}$	<i>,</i>	U	U_h	$\Delta U_{\rm rad}$
(K)	(Am^{-2})	(bar)	(K)	(K)	$\xi_{e\infty}$	(V)	(V)	(V)
2000	107	100	6464	8380	0.57	1.49	8.94	-0.73
			4750	8676	-0.49	-1.00	5.75	-0.75
2500	107	100	6445	8380	0.57	1.18	8.62	-0.72
			4947	8676	-0.49	-1.02	5.74	-0.75
3000	107	100	6325	8380	0.57	0.89	8.32	-0.71
			5104	8676	-0.49	-1.02	5.73	-0.75
3500	10^{7}	100	5480	8380	0.57	0.65	8.06	-0.70
			5042	8676	-0.49	-0.96	5.80	-0.75
2000	10^{8}	100	7264	11998	0.74	-1.52	6.89	-0.56
			5136	12893	0.26	-2.97	5.58	-0.98
2500	10^{8}	100	7259	11998	0.74	-1.61	6.80	-0.56
			5363	12893	0.26	-2.95	5.60	-0.99
3000	108	100	7247	11998	0.74	-1.69	6.72	-0.56
			5571	12893	0.26	-2.94	5.62	-0.99
3500	10^{8}	100	7089	11998	0.74	-1.76	6.66	-0.56
			5735	12893	0.26	-2.91	5.65	-1.00
3000	10^{7}	50	6289	8591	0.60	0.10	7.52	-0.62
			5377	9094	0.16	-1.46	5.69	-0.82
3000	10^{7}	200	6376	8192	0.55	1.95	9.44	-0.84
			4817	8331	-0.77	-0.63	5.82	-0.71

Tabela 4.1: Parâmetros das camadas junto ao ânodo. Os números superiores e inferiores em cada célula na quarta e nas colunas seguintes referem-se a arcos de Hg e Xe, respectivamente.

camada "da mesma espessura" no plasma não perturbado expresso em volts, avaliado em termos de U_h , $\xi_{e\infty}$, $T_{e\infty}$, e U através da equação (4.10).

Para todos os cálculos, a temperatura dos electrões na superfície do ânodo, T_{ew} , no plasma de xénon varia numa gama bastante estreita, entre 4750 K e 5735 K. As variações de T_{ew} no plasma de mercúrio, de 5480 K até 7264 K, são mais significativas embora não sejam dramáticas. Em ambos os casos, a gama de variação de T_{ew} é marcadamente mais estreita do que a gama de variação da temperatura dos electrões no plasma não perturbado, que é cerca de 4600 K para o plasma de xénon e cerca de 3800 K para o plasma de mercúrio. Podemos dizer que o acoplamento da temperatura dos electrões na vizinhança da superfície do ânodo às condições de operação é bastante fraco, especialmente no caso do Xe, em contraste com o que acontece no cátodo (ver discussão em [Benilov 2008] e também no capítulo 2).

O coeficiente $\xi_{e\infty}$ varia entre -0.77 e 0.74, i.e., é comparável à unidade em vez de ser pequeno. Logo, o efeito inverso à difusão térmica pode desempenhar um papel apreciável, em contraste com aquilo que é frequentemente assumido.

A queda de tensão U na camada de não equilíbrio junto ao ânodo no plasma de mercúrio

4. Modelização unificada de camadas de plasma junto ao ânodo em descargas de arco de muito alta pressão

é positiva para $j = 10^7 \,\mathrm{A}\,\mathrm{m}^{-2}$ e negativa para $j = 10^8 \,\mathrm{A}\,\mathrm{m}^{-2}$, a queda de tensão no plasma de xénon é negativa em todos os casos. Com o aumento da temperatura da superfície do ânodo, a queda de tensão junto ao ânodo no plasma de mercúrio em $j = 10^7 \,\mathrm{A}\,\mathrm{m}^{-2}$ diminui bastante, desde 1.49 V até 0.65 V. Em todos os outros casos, onde U é negativa, a sua variação com T_w é consideravelmente menor. O aumento da densidade de corrente desde $10^7 \,\mathrm{A}\,\mathrm{m}^{-2}$ até $10^8 \,\mathrm{A}\,\mathrm{m}^{-2}$ com a mesma temperatura da superfície causa um decréscimo de Uentre 2.4 V e 3 V no plasma de mercúrio e de cerca de 2 V no plasma de xénon. Por outras palavras, a característica tensão-corrente da camada de não equilíbrio junto ao ânodo é decrescente, em contraste com a característica da camada junto ao cátodo, que é crescente (ver o capítulo 2).

Com o aumento da pressão do plasma com $j \in T_w$ fixas, a tensão junto ao ânodo aumenta, o que é facilmente compreensível: pressões mais altas reduzem as velocidades de difusão das partículas carregadas, logo, é necessária uma potência maior para manter a mesma densidade de corrente a uma pressão mais elevada.

A tensão de aquecimento do ânodo U_h no plasma de xénon é virtualmente independente de T_w , decresce fracamente com o aumento da densidade de corrente, e aumenta fracamente com o aumento da pressão do plasma. No entanto, estas variações são bastante pequenas: em todos os casos mostrados na tabela 4.1 U_h situa-se entre aproximadamente 5.6 V e 5.8 V, i.e., é virtualmente constante. Por outras palavras, o fluxo de energia do plasma para o ânodo é regido principalmente pela corrente do arco I e varia de forma aproximada proporcionalmente a I, praticamente sem ser influenciado pela geometria do ânodo, pela densidade de corrente e distribuições de temperatura sobre a superfície do ânodo, e pela pressão do plasma. U_h no plasma de mercúrio varia entre aproximadamente 6.7 V e 9.4 V, i.e., as suas variações são mais apreciáveis embora não sejam dramáticas.

 $\Delta U_{\rm rad}$ é negativo em todos os casos. Por outras palavras, a potência radiada pela camada de não equilíbrio junto ao ânodo é menor do que a potência radiada por uma camada "com a mesma espessura" no plasma não perturbado, que é uma consequência de valores menores de T_e na camada junto ao ânodo. $\Delta U_{\rm rad}$ é virtualmente independente de T_w e varia desde -0.56 até -0.84 V no plasma de mercúrio e desde -0.71 até -1.00 V no plasma de xénon.

De acordo com a equação (4.10), a tensão de aquecimento do ânodo U_h é uma soma de três termos: o equivalente da potência transportada pela corrente dos electrões do plasma não perturbado para a camada junto ao ânodo expresso em volts, a queda de tensão na camada de não equilíbrio junto ao ânodo e $-\Delta U_{\rm rad}$, o equivalente do decréscimo das perdas por radiação expresso em volts. O primeiro termo, avaliado usando os dados da tabela 4.1, está dentro da gama de valores 7.25 ± 0.6 V para mercúrio e 6.65 ± 0.9 V para xénon. O segundo termo varia aproximadamente entre -3 V e 2V. O terceiro termo varia entre 0.56 V e 1.00 V. Conclui-se que a contribuição principal para a tensão de aquecimento do ânodo é dada pela potência transportada pela corrente dos electrões do plasma não perturbado para a camada junto ao ânodo, as contribuições da queda de tensão na camada de não equilíbrio junto ao ânodo e do decréscimo das perdas por radiação são menores. Isto difere do que acontece em cátodos de arcos a alta pressão, onde a queda de tensão junto ao cátodo no modo difuso, embora não no modo mancha, representa a componente principal da tensão de aquecimento e pode ser obtida a partir dos valores medidos das perdas de calor do cátodo (ver discussão em [Benilov 2008]).

Uma das conclusões desta secção é que os resultados da modelização apoiam o entendimento geral das semelhanças e diferenças entre as interacções plasma-cátodo e plasmaânodo em descargas de arco de alta pressão (e.g., [Benilov 2008]).

4.3.2 Comparação com dados experimentais

Sempre que uma comparação é possível, os resultados da modelização acima descritos estão de acordo com as tendências observadas na experiência. Por exemplo, uma investigação experimental detalhada de ânodos de varas de tungsténio em árgon e em outros gases nobres a pressões de 1 - 10 bar [Redwitz *et al.* 2006] indicou que o fluxo de energia do plasma para o ânodo aumenta quase proporcionalmente à corrente do arco; a constante de proporcionalidade (a tensão de aquecimento do ânodo) é independente da queda de tensão do ânodo medida electricamente e fracamente dependente das dimensões do eléctrodo; para um exemplo representativo dum plasma de árgon a uma pressão de 2.6 bar, ao qual a tabela 1 de [Redwitz et al. 2006] se refere, a tensão de aquecimento do ânodo varia entre 8.4 V e 6.9 V enquanto que a corrente do arco aumenta desde I = 1 A até I = 5 A. Claramente, estes resultados são qualitativamente semelhantes aos resultados da modelização para U_h descritos na secção precedente. Infelizmente, uma comparação quantitativa dos resultados da modelização do presente capítulo com os dados experimentais [Redwitz et al. 2006] é dificilmente possível, e não apenas por causa das gamas de pressão serem essencialmente diferentes. Importa ter presente, nomeadamente, que a queda de tensão no ânodo determinada em [Redwitz et al. 2006] através de medições com sonda electrostática envolve não apenas a queda de tensão na camada de não equilíbrio junto ao ânodo, mas também a queda de tensão na zona de constrição, que não é descrita pela teoria presente (1D) e é da mesma ordem de magnitude do que a queda de tensão na camada de não equilíbrio junto ao ânodo.

No entanto, os resultados da modelização podem ser comparados com novos dados experimentais, resultantes de experiências realizadas numa lâmpada de xénon de muito alta pressão. Como já foi referido, estas experiências foram realizadas em paralelo com este trabalho, tendo sido aceite para publicação no *Journal of Physics D: Applied Physics* um artigo conjunto. Segue-se uma breve descrição da configuração experimental. Nessas experiências foi usada uma lâmpada de farol de carro de xénon a muito alta pressão (modelo XenEco da Philips) com uma potência nominal de 35 W, mas cheia apenas com Xe. A

4. Modelização unificada de camadas de plasma junto ao ânodo em descargas de arco de muito alta pressão

câmara de descarga de quartzo tinha de diâmetro interior e volume $2.4 \text{ mm} \text{ e } 20 \text{ mm}^3$, respectivamente. A distância entre eléctrodos foi cerca de 3.6 mm. Os eléctrodos (ver figura 4.5 como um exemplo) foram varas de tungsténio puro com um diâmetro de 0.34 mm na parte frontal (que tem de comprimento 1.10 mm) e 0.30 mm na parte de trás. Perto da extremidade, a parte frontal cilíndrica tinha sido fundida numa esfera com um diâmetro de 0.39 mm. O comprimento total do eléctrodo desde a parede de quartzo até à extremidade do eléctrodo foi aproximadamente 2.0 mm.



Figura 4.5: Imagem CCD típica de um eléctrodo na lâmpada experimental de Xe a muito alta pressão, quando operado como ânodo a 0.5 A. A linha curva indica as localizações para amostragem dos dados da radiância do plasma do centro do arco apresentados na figura 4.6.

O fluxo de energia do plasma para o ânodo foi deduzido a partir dos dados experimentais sobre a distribuição da temperatura da superfície do ânodo. Estes dados indicam uma tensão de aquecimento do ânodo U_h de cerca de 5.5 - 6.0 V para ânodos num plasma de xénon a muito alta pressão (cerca de 100 bar). Isto está em bom acordo com a gama de $U_h = 5.6 - 5.8$ V, prevista pela modelização para o plasma de xénon (tabela 4.1).

Uma outra comparação possível entre a teoria e a experiência refere-se às distribuições da radiância do plasma junto ao eléctrodo que, tal como as temperaturas do eléctrodo, foram extraídas a partir da mesma imagem CCD [figura 4.5]. As radiâncias junto ao ânodo para diferentes configurações são mostradas na figura 4.6. Os pontos foram obtidos medindo a radiância espectral w_{sr} (para 850 nm) no centro do arco, com o aumento da distância da superfície do ânodo (linha curva na figura 4.5). Existem quatro conjuntos de dados experimentais na figura 4.6. Três conjuntos de dados referem-se à mesma corrente de arco I = 0.5 A e três valores diferentes da temperatura do eléctrodo, $T_w = 2300$ K, 2400 K, 2900 K. O quarto conjunto refere-se a $T_w = 2400$ K e I = 1 A. As linhas representam w_{rad} , as perdas calculadas de energia dos electrões através de radiação; note-se que as linhas a cheio e a tracejado são sobrepostas. Os valores da densidade de corrente j usados nas simulações foram obtidos dividindo a corrente do arco (0.5 A ou 1.0 A) pela área de ligação que foi estimada a partir do diâmetro aparente da mancha visto nas imagens de cerca de 150 μ m. A pressão do plasma nas simulações assumiu-se como sendo igual a 100 bar. Os dados são representados para distâncias da superfície do ânodo superiores a 50 μ m, já que



é provável que os dados experimentais não sejam muito fiáveis para distâncias menores.

Figura 4.6: Pontos: Valores medidos da radiância espectral na camada junto ao ânodo de um arco de xénon a muito alta pressão. Linhas: Valores calculados das perdas de potência por radiação.

Os dados teóricos, sendo obtidos a partir de um modelo 1D que não toma em conta a expansão do arco desde o ânodo para o plasma mostrada na figura 4.5, são aplicáveis até distâncias da superfície do ânodo que não excedam, digamos, $150 \,\mu$ m, que é o diâmetro de ligação do ânodo acima mencionado. Portanto, espera-se que a modelização seja capaz de descrever correctamente os desvios de LTE, já que eles estão localizados a distâncias da superfície do ânodo inferiores a $100 \,\mu$ m como se pode ver na figura 4.4. Por outro lado, não é surpreendente que as curvas teóricas sejam monótonas enquanto que os dados experimentais indiquem um máximo da radiância a uma distância da superfície do ânodo por volta de 200 a $300 \,\mu$ m, originando presumivelmente na expansão, acima mencionada, do arco para o plasma.

Os dados experimentais e a modelização referem-se a diferentes quantidades: a radiância espectral w_{sr} representa a energia radiada por unidade de área da imagem do arco num intervalo espectral unitário por unidade de tempo e por esterradiano, enquanto que w_{rad} representa as perdas de energia dos electrões através de radiação por unidade de tempo e de volume, i.e., o coeficiente de emissão líquido do plasma (e.g., [Lowke 1970, Gleizes *et al.* 2005]) integrado sobre o ângulo sólido. Portanto, a mesma ordem de magnitude da modelização e dos dados experimentais não tem muito significado e devemo-nos focar em factores qualitativos, tais como efeitos da temperatura da superfície do ânodo e da corrente do arco.

De acordo com a experiência, o efeito da temperatura do ânodo sobre a emissão de radiação é fraco. A mesma tendência é observada na modelização. A experiência mostra que um aumento da corrente do arco por um factor de dois (de 0.5 A para 1.0 A) traduz-se num aumento da radiância do centro do arco por um factor de cerca de três. Parece que a única explicação plausível para este aumento é um aumento da densidade de corrente e, de facto, duplicando a densidade de corrente na modelização, de $2.8 \times 10^7 \text{ A/m}^2$ para $5.6 \times 10^7 \text{ A/m}^2$, a radiação aumenta fortemente, por um factor de cerca de quatro. Isto sugere que uma mudança da corrente total na experiência significa realmente uma mudança da densidade de corrente no ânodo, e não tanto da área de ligação do arco ao ânodo, porque a radiância neste último caso não mudaria assim tanto.

Esta secção pode ser sumariada do seguinte modo. A informação experimental sobre a interacção plasma-ânodo em descargas de muito alta pressão é pouca. Mas aquilo que é conhecido apresenta uma boa concordância com a modelização.

4.4 Conclusões

O modelo numérico que foi utilizado no capítulo 2 na simulação de camadas de plasma junto ao cátodo, é empregue na investigação de camadas junto ao ânodo de arcos de muito alta pressão em mercúrio e xénon. Os resultados da simulação apoiam o entendimento geral de similaridades e diferenças entre a interacção plasma-cátodo e plasma-ânodo nas descargas de arco de alta pressão (e.g., [Benilov 2008]).

Descobriu-se que a potência injectada pelo plasma na extremidade do ânodo é principalmente governada pela corrente do arco e varia de forma aproximada proporcionalmente com a corrente, sendo menores os efeitos da geometria do ânodo, da forma da ligação do arco, das condições de arrefecimento do ânodo, e da pressão do plasma. A tensão de aquecimento do ânodo U_h pode ser representada como uma soma de três termos: o equivalente da potência transportada pela corrente dos electrões do plasma não perturbado para a camada junto ao ânodo expresso em volts, a queda de tensão na camada de não equilíbrio junto ao ânodo, e o equivalente do decréscimo das perdas por radiação expresso em volts. O primeiro termo está dentro da gama de valores 7.25 ± 0.6 V para mercúrio e 6.65 ± 0.9 V para xénon. O segundo termo varia aproximadamente entre -3 V e 2 V. O terceiro termo varia entre 0.56 V e 1.00 V. Conclui-se que a contribuição principal para o aquecimento do ânodo é dada pela potência transportada pela corrente dos electrões do plasma não perturbado para a camada junto ao ânodo.

Os resultados das simulações estão em bom acordo com o fluxo de energia do plasma para o ânodo e a radiação do plasma junto ao ânodo determinados experimentalmente. A conclusão de que o fluxo de energia do plasma para a extremidade do ânodo é governado principalmente pela corrente do arco e varia de forma aproximada proporcionalmente a I, e de que a tensão de aquecimento do ânodo não está relacionada com a tensão junto ao ânodo está de acordo com resultados de experiências [Redwitz *et al.* 2006], realizadas em gases nobres a pressões de 1 - 10 bar.

De acordo com a modelização e a experiência, o efeito da temperatura do ânodo na

4. Modelização unificada de camadas de plasma junto ao ânodo em descargas de arco de muito alta pressão

emissão de radiação do plasma junto ao ânodo é fraco. A observação experimental de que um aumento na corrente do arco por um factor de dois (de 0.5 A a 1.0 A) leva a um aumento da radiância do centro do arco por um factor de cerca de três pode ser explicada, assumindo que uma mudança na corrente do arco na experiência significa realmente uma mudança da densidade de corrente no ânodo, e não tanto da área de ligação do arco ao ânodo.

Capítulo 5

Considerações finais

Podemos concluir este trabalho afirmando que os objectivos propostos foram atingidos: conseguiu-se descrever através de uma modelização unificada com base num único conjunto de equações as camadas de não-equilíbrio junto aos cátodos e ânodos em descargas de arco de alta pressão sem dividir a região de cálculos em sub-camadas com propriedades físicas diferentes. Esta modelização unificada foi realizada com base nas equações hidrodinâmicas, ou seja com base numa descrição de difusão. No entanto, em virtude do modelo de difusão não ser aplicável na camada de ionização junto ao cátodo no caso de temperaturas dos electrões altas, foi também desenvolvida uma teoria da camada de ionização com base num modelo multifluido.

Passa-se a descrever em maior detalhe as principais conclusões desta dissertação.

No capítulo 2 foi desenvolvido um modelo de uma região junto ao cátodo em descargas de arco de alta pressão no âmbito da aproximação hidrodinâmica (de difusão). As equações governantes foram resolvidas numericamente em 1D no âmbito de um conjunto único de equações sem suposições simplificativas tais como equilíbrio térmico, equilíbrio de ionização (Saha), quaseneutralidade e sem dividir explicitamente a região junto ao cátodo numa bainha de carga de espaço e num plasma quaseneutro. Foram relatados os resultados da simulação numérica para um arco de mercúrio a muito alta pressão e para um arco de árgon à pressão atmosférica. Foram identificados os mecanismos físicos que dominam as diferentes secções da região junto ao cátodo, o que nos permitiu identificar as sub-camadas apropriadas. Mostrou-se que a bainha de carga de espaço junto ao cátodo é de importância primária para condições de interesse prático. Foram analisadas as bases físicas dos modelos simplificados da região junto ao cátodo em descargas de arco de alta pressão. Uma comparação entre os resultados fornecidos pelo actual modelo e os resultados de um modelo simplificado revelou uma concordância qualitativa; para o caso de um plasma de árgon à pressão atmosférica para valores moderados da queda de tensão junto ao cátodo a concordância para além de ser qualitativa é também quantitativa. Os resultados da modelização foram comparados com resultados de medições espectroscópicas da temperatura e

densidade dos electrões na região junto ao cátodo.

Em virtude da teoria de difusão para o caso de temperaturas dos electrões altas não ser aplicável na camada de ionização junto ao cátodo, foi desenvolvida no capítulo 3 uma teoria da camada de ionização com base num modelo multifluido. Descobriu-se que o carácter da solução é governado por α a razão entre o comprimento de ionização e o livre percurso médio de colisões ião-átomo. A quebra dos cálculos numéricos para α iguais ou ligeiramente superiores à unidade representa um efeito numérico que pode ser facilmente ultrapassável. A quebra dos cálculos numéricos para $\alpha < 1$ é causada pelo facto de que a condição de ionização completa no lado do plasma da camada de ionização torna-se ineficaz para $\alpha < 1$, i.e., é satisfeita por qualquer solução da equação diferencial. É encontrada uma condição fronteira alternativa para uma certa gama de valores de α inferiores à unidade, $\alpha_{cr} \leq \alpha < 1$. É sugerida uma abordagem aproximada que engloba toda a gama de α . Esta abordagem é suficiente para propósitos práticos e fornece resultados que estão em acordo com resultados experimentais.

No capítulo 4 foi utilizado, na modelização das camadas de não-equilíbrio junto ao ânodo, o mesmo código que havia sido desenvolvido no capítulo 2 para a modelização das camadas de não-equilíbrio junto ao cátodo. Os resultados da simulação apoiam o entendimento geral de similaridades e diferenças entre a interacção plasma-cátodo e plasmaânodo nas descargas de arco de alta pressão estabelecido trabalhos anteriores. Descobriu-se que a potência injectada pelo plasma na extremidade do ânodo é principalmente governada pela corrente do arco e varia de forma aproximada proporcionalmente com a corrente, sendo menores os efeitos da geometria do ânodo, da forma da ligação do arco, das condições de arrefecimento do ânodo, e da pressão do plasma. Este resultado está de acordo com a experiência. Concluiu-se que a contribuição principal para o aquecimento do ânodo é dada pela potência transportada pela corrente dos electrões do plasma não perturbado para a camada junto ao ânodo.

Como linhas de futuro desenvolvimento deste trabalho podemos referir o seguinte:

- Incluir no código utilizado nos capítulos 2 e 4, à semelhança do que foi feito no capítulo 3, os termos que representam a inércia e a transferência de momento devido à ionização e recombinação;
- Combinar o modelo do capítulo 2 com o modelo de aquecimento não linear de superfície, o que permitirá que se simule a interacção plasma-cátodo na sua globalidade e assim encontrar-se a distribuição de parâmetros não só ao longo da camada junto ao cátodo mas também ao longo da superfície do cátodo;
- Incluir na modelização todo o volume ocupado pelo plasma (uma camada junto ao cátodo, uma camada junto ao ânodo, a coluna do arco) e passar a considerar pelo menos duas dimensões.

Apêndice A

Coeficientes de transporte, cinéticos e de radiação

O conteúdo deste apêndice foi elaborado em larga medida pelo Prof. Dr. George Naidis do Instituto para Altas Temperaturas da Academia de Ciências da Rússia, Moscovo. Optou-se pela sua inclusão nesta tese, de forma a que ela seja auto-suficiente.

Vamos começar por avaliar os coeficientes de transporte que aparecem no conjunto de equações formuladas na secção 2.2.1. Os coeficientes de difusão binária são expressos por

$$D_{\alpha\beta} = \frac{3\pi}{32} \left(\frac{8kT_{\alpha\beta}}{\pi m_{\alpha\beta}}\right)^{1/2} \frac{1}{n\bar{Q}_{\alpha\beta}^{(1,1)}},\tag{A.1}$$

onde $\bar{Q}_{\alpha\beta}^{(1,1)}$ são as secções médias de transferência de momento em colisões entre partículas de espécies $\alpha \in \beta$, que são relacionadas com as secções de transferência de momento dependentes da energia, $Q_{\alpha\beta}^{(1)}(\varepsilon)$, pela fórmula

$$\bar{Q}_{\alpha\beta}^{(1,1)} = \frac{1}{2\left(kT_{\alpha\beta}\right)^3} \int_0^\infty \varepsilon^2 \exp\left(-\frac{\varepsilon}{kT_{\alpha\beta}}\right) Q_{\alpha\beta}^{(1)}(\varepsilon) \ d\varepsilon. \tag{A.2}$$

Note-se que a quantidade $(8kT_{\alpha\beta}/\pi m_{\alpha\beta})^{1/2}$ representa a velocidade média relativa de partículas de espécies $\alpha \in \beta$.

A secção média de transferência $\bar{Q}_{ia}^{(1,1)}$ de colisões ião-átomo é uma função de T_h e é avaliada através de uma fórmula analítica retirada de [Benilov & Naidis 1998] (para mercúrio) ou obtida ajustando os dados [Devoto 1973] estendidos para temperaturas mais altas através dos resultados [Benilov & Naidis 1998] (para árgon) ou através da fórmula analítica [Benilov & Naidis 1998] com coeficientes obtidos por uma aproximação da secção de troca de carga ressonante de [Smirnov 2001] (para xénon). É assumido que a função distribuição dos iões é uma função maxwelliana com uma temperatura igual à dos átomos neutros, o que implica que o trabalho do campo eléctrico sobre o livre percurso médio dos iões é consideravelmente menor do que a energia térmica dos átomos neutros.

A. Coeficientes de transporte, cinéticos e de radiação

A secção média de transferência electrão-átomo $\bar{Q}_{ea}^{(1,1)}$ é uma função de T_e que é tabulada, avaliando numericamente o integral (A.2). A secção de transferência de momento dependente da energia em colisões electrão-átomo, $Q_{ea}^{(1)}(\varepsilon)$, é retirada de [Itikawa 2000, Phelps 2008], para colisões de electrões com átomos de árgon ou de xénon, e de [McEachran & Elford 2003] para colisões de electrões com átomos de mercúrio.

As colisões electrão-ião são governadas pela interacção de Coulomb. Obtendo o valor médio da secção de transferência de momento dependente da energia (e.g., [Mitchner & Kruger 1973]) através da equação (A.2) obtém-se

$$\bar{Q}_{ei}^{(1,1)} = \frac{e^4 \ln \Lambda}{32\pi\varepsilon_0^2 (kT_e)^2}.$$
(A.3)

Aqui $\ln \Lambda$ é o logaritmo de Coulomb ($\Lambda = 1.24 \times 10^7 T_e^{3/2} n_e^{-1/2}$, onde T_e está em K e n_e em m⁻³ [Mitchner & Kruger 1973]).

Vê-se, do acima exposto, que os coeficientes de difusão binária podem ser introduzidos nas simulações numéricas de uma maneira simples e prática, o que é uma consequência do facto de $nD_{\alpha\beta}$ ser uma função de apenas uma variável $T_{\alpha\beta}$. $(nD_{ei}$ representa uma excepção: para além da dependência de T_e , depende fracamente de n_e através do logaritmo de Coulomb. No entanto, pode ser avaliada através de fórmulas analíticas simples (A.1) e (A.3)). Procedimentos gerais de cálculo da maioria dos outros coeficientes de transporte (e.g., [Mitchner & Kruger 1973]) são consideravelmente mais complexos e o seu uso para os propósitos desta dissertação não é garantido. Assim, nesta dissertação, tais coeficientes são substituídos pelos seus valores limite, correspondendo a casos limite de plasmas fracamente ou completamente ionizados, ou são interpolados entre estes valores. Note-se que os casos limite de plasmas fracamente ou completamente ionizados são aqui definidos pelas desigualdades $\bar{\nu}_{ea} \gg \bar{\nu}_{ei}$ ou por, respectivamente, $\bar{\nu}_{ea} \ll \bar{\nu}_{ei}$, onde $\bar{\nu}_{ea} = n_a C_e \bar{Q}_{ea}^{(1,1)}$ e $\bar{\nu}_{ei} = n_i C_e \bar{Q}_{ei}^{(1,1)}$ são as frequências médias de transferência de momento em colisões electrãoátomo e, respectivamente, electrão-ião. A interpolação é feita por funções racionais com o argumento P definido como $P = \bar{\nu}_{ea}/\bar{\nu}_{ei} = n_a D_{ei}/n_i D_{ea}$. O transporte de electrões em plasmas fracamente ionizados é descrito pelas fórmulas lorentzianas (e.g., [Mitchner & Kruger 1973, Zhdanov 2002). Nesta dissertação, estas fórmulas são usadas com a suposição da distribuição de energia de electrões ser maxwelliana, o que é justificado rigorosamente se $\bar{\nu}_{ee}$ a frequência média de transferência de momento em colisões electrão-electrão exceder consideravelmente $\bar{\nu}_{ea}m_e/m_a$ e se o comprimento de maxwellização dos electrões for muito menor do que uma escala característica de variação de parâmetros do gás de electrões. O transporte de electrões em plasmas fortemente ionizados é descrito pelas fórmulas Spitzer e Härm (e.g., [Mitchner & Kruger 1973]).

Vamos prosseguir com a avaliação dos coeficientes de correcção $C_{\alpha\beta}$. O coeficiente C_{ia} é governado pela interacção ião-átomo. Uma vez que a frequência de colisões de iões monopositivos com átomos de um gás de origem depende bastante fracamente da energia

de colisão, este coeficiente pode ser igualado a um. Para os coeficientes de correcção C_{ea} e C_{ei} são assumidos valores que correspondem aos casos limite de um plasma fracamente ou, respectivamente, fortemente ionizado. Esta escolha é baseada no seguinte. A equação (2.5) para os electrões (com $\alpha = e$) contém um termo que envolve C_{ea} e é proporcional a ($\mathbf{v}_e - \mathbf{v}_a$) e um termo que envolve C_{ei} e é proporcional a ($\mathbf{v}_e - \mathbf{v}_i$). Tomando em consideração que as quantidades C_{ea} , C_{ei} , e $|\mathbf{v}_e - \mathbf{v}_a| / |\mathbf{v}_e - \mathbf{v}_i|$ são de ordem unitária, chegamos à conclusão que a razão entre os dois termos acima mencionados é da ordem de P. A escolha acima descrita assegura que o valor assumido para o coeficiente C_{ea} é exacto no caso particular onde o termo que envolve este coeficiente é dominante, que é o caso $P \gg 1$, i.e., o caso de um plasma fracamente ionizado. De uma forma semelhante, o coeficiente C_{ei} é exacto no caso particular de um plasma fortemente ionizado, $P \ll 1$, onde o termo que envolve este coeficiente e ionizado, $P \ll 1$, onde o termo que envolve este coeficiente se palavras, a escolha acima descrita dos coeficientes C_{ea} e C_{ei} assegura valores correctos do termo da força de fricção da equação de transporte para os electrões nos casos limite de um plasmas fracamente e completamente ionizados.

De acordo com o exposto acima, C_{ea} é obtido como a razão entre o coeficiente de difusão D_{ea} , avaliado na primeira aproximação no método de Chapman-Enskog e o avaliado através da fórmula lorentziana com a distribuição de energia dos electrões maxwelliana:

$$C_{ea} = \frac{9\pi (kT_e)^2}{32\bar{Q}_{ea}^{(1,1)} \int_0^\infty \varepsilon \left[Q_{ea}^{(1)}(\varepsilon)\right]^{-1} \exp(-\varepsilon/kT_e) d\varepsilon}.$$

O factor de correcção C_{ei} para um plasma fortemente ionizado com iões monopositivos pode ser encontrado como a razão entre o coeficiente de difusão D_{ea} , avaliado na primeira aproximação no método de Chapman-Enskog, e o obtido a partir da fórmula de Spitzer e Härm, e é igual a 0.506.

Os coeficientes de difusão térmica $C_i^{(h)} \in C_a^{(h)}$ são governados pelas colisões ião-átomo. Uma vez mais, levando em conta que a frequência de colisões de iões monopositivos com átomos de um gás de origem depende da energia de colisão fracamente, pomos $C_i^{(h)} = C_a^{(h)} = 0$, i.e., assumimos que as equações de transporte (2.5) para as partículas pesadas não contêm termos proporcionais a ∇T_h . Os coeficientes $C_{\alpha}^{(e)}$ são avaliados através da expressão de interpolação

$$C_{e}^{(e)} = \frac{1}{1+P}C_{tdei} + \frac{P}{1+P}C_{tdea}, \ C_{i}^{(e)} = -\frac{n_{e}}{n_{i}}\frac{1}{1+P}C_{tdei}, \ C_{a}^{(e)} = -\frac{n_{e}}{n_{a}}\frac{P}{1+P}C_{tdea}, \ (A.4)$$

onde C_{tdei} e C_{tdea} são os valores dos coeficientes de difusão térmica para electrões, $C_e^{(e)}$, nos casos limite de plasmas fracamente e fortemente ionizados, respectivamente. O coeficiente C_{tdea} é avaliado através da expressão

$$C_{tdea} = \frac{\int_0^\infty \varepsilon \left[Q_{ea}^{(1)}(\varepsilon)\right]^{-1} (\varepsilon/kT_e - 5/2) \exp(-\varepsilon/kT_e) d\varepsilon}{\int_0^\infty \varepsilon \left[Q_{ea}^{(1)}(\varepsilon)\right]^{-1} \exp(-\varepsilon/kT_e) d\varepsilon}$$

que segue das fórmulas lorentzianas com a distribuição de energia dos electrões maxwelliana. O coeficiente C_{tdei} para plasmas com iões monopositivos pode ser obtido através das fórmulas Spitzer e Härm e é igual a 0.703.

A parte de difusão térmica, da densidade do fluxo de energia transportada pelos electrões, \mathbf{h}_e , é avaliada em termos dos mesmos coeficientes que governam a força de difusão térmica para os electrões

$$A_i^{(e)} = \frac{1}{1+P} C_{tdei}, \quad A_a^{(e)} = \frac{P}{1+P} C_{tdea}.$$
 (A.5)

A condutividade térmica dos electrões é dada pela expressão de interpolação

$$\kappa_e^{-1} = \kappa_{ea}^{-1} + \kappa_{ei}^{-1}. \tag{A.6}$$

A condutividade térmica κ_{ea} dos electrões no caso limite dum plasma fracamente ionizado é obtida a partir da fórmula lorentziana com a distribuição de energia dos electrões maxwelliana e pode ser escrita como

$$\kappa_{ea} = C_{therm} k n_e \frac{n D_{ea}}{C_{ea} n_a},\tag{A.7}$$

onde o coeficiente C_{therm} é

$$C_{therm} = \frac{\int_0^\infty \varepsilon \left[Q_{ea}^{(1)}(\varepsilon)\right]^{-1} (\varepsilon/kT_e - 5/2)^2 \exp(-\varepsilon/kT_e) d\varepsilon}{\int_0^\infty \varepsilon \left[Q_{ea}^{(1)}(\varepsilon)\right]^{-1} \exp(-\varepsilon/kT_e) d\varepsilon} - C_{tdea}^2.$$
(A.8)

A condutividade térmica κ_{ei} dos electrões no caso limite dum plasma fortemente ionizado com iões monopositivos pode ser encontrada através das fórmulas de Spitzer e Härm:

$$\kappa_{ei} = \frac{3.20 \, k n_e n D_{ei}}{n_i}.\tag{A.9}$$

Os coeficientes $A_a^{(h)}$ e $A_i^{(h)}$ que determinam a parte de difusão térmica do fluxo de calor transportado pelas partículas pesadas, sendo proporcionais a, respectivamente, $C_a^{(h)}$ e $C_i^{(h)}$, são postos igual a zero. Por outras palavras, assume-se que o fluxo de calor \mathbf{h}_{hp} é inteiramente devido à condução de calor.

A condutividade térmica κ_{hp} das partículas pesadas é dada pela soma das contribuições devido aos átomos e iões

$$\kappa_{hp} = \kappa_a + \kappa_i, \tag{A.10}$$

sendo cada contribuição avaliada usando expressões de interpolação análogas à equação (A.6) (e.g., [Liu *et al.* 1978]):

$$\kappa_a = \frac{75k}{64\bar{Q}_{aa}^{(2,2)}} \left(\frac{\pi kT_h}{m_a}\right)^{1/2} \left(1 + \frac{n_i \bar{Q}_{ia}^{(2,2)}}{n_a \bar{Q}_{aa}^{(2,2)}}\right)^{-1},\tag{A.11}$$

$$\kappa_i = \frac{75kn_i}{64\bar{Q}_{ia}^{(2,2)}n_a} \left(\frac{\pi kT_h}{m_a}\right)^{1/2} \left(1 + \frac{n_i\bar{Q}_{ii}^{(2,2)}}{n_a\bar{Q}_{ia}^{(2,2)}}\right)^{-1}.$$
(A.12)

As secções médias de transferência $\bar{Q}_{aa}^{(2,2)}$ e $\bar{Q}_{ia}^{(2,2)}$ para árgon são avaliadas através de fórmulas obtidas ajustando os dados [Devoto 1973]: $\bar{Q}_{aa}^{(2,2)} = 1.12 \times 10^{-18} T_h^{-0.2}, \ \bar{Q}_{ia}^{(2,2)} = 1.12 \times 10^{-18} T_h^{-0.2}$ $3.6 \times 10^{-18} T_h^{-0.3}$ (T_h está em K e $\bar{Q}_{ia}^{(2,2)}$ em m²). As secções médias de transferência $\bar{Q}_{aa}^{(2,2)}$ e $\bar{Q}_{ia}^{(2,2)}$ para o xénon foram avaliadas através das fórmulas $\bar{Q}_{aa}^{(2,2)} = 1.85 \times 10^{-18} T_h^{-0.2}$, $\bar{Q}_{ia}^{(2,2)} = 6.1 \times 10^{-18} T_h^{-0.3}$ (novamente com T_h em K e $\bar{Q}_{ia}^{(2,2)}$ em m²), que foram obtidas ajustando os dados de [Vargaftik & Vasilevskaya 1980] e, respectivamente, [Smirnov 2001]. A secção média de transferência $\bar{Q}_{aa}^{(2,2)}$ para o mercúrio é estimada com base nos dados da condutividade térmica de um plasma de mercúrio LTE em [Zollweg 1978]. Na gama de temperaturas $3000 - 5000 \,\mathrm{K}$, onde $\kappa_e, \kappa_i \ll \kappa_a \in n_i \bar{Q}_{ia}^{(2,2)} \ll n_a \bar{Q}_{aa}^{(2,2)}$, estes dados foram analisados através da equação (A.11) sem o terceiro multiplicador no lado direito e verificou-se que $\bar{Q}_{aa}^{(2,2)}$ para mercúrio excede a secção de transferência correspondente para árgon por um factor que é aproximadamente constante e igual a 1.15, i.e., $\bar{Q}_{aa}^{(2,2)} = 1.29 \times 10^{-18} T_h^{-0.2}$ para mercúrio. A última fórmula é usada nesta dissertação também fora da acima mencionada gama de temperaturas. A razão entre as secções de transferência de troca de carga ressonante [Benilov & Naidis 1998] para mercúrio e árgon é praticamente independente da energia de colisão e é aproximadamente igual a 2.9. Assume-se portanto que $\bar{Q}_{ia}^{(2,2)}$ para mercúrio excede a secção correspondente para árgon por um factor de 2.9, i.e., $\bar{Q}_{ia}^{(2,2)} = 1.04 \times 10^{-17} T_h^{-0.3}$ para mercúrio. A secção média de transferência $\bar{Q}_{ii}^{(2,2)}$ é avaliada através da expressão [Liu et al. 1978]:

$$\bar{Q}_{ii}^{(2,2)} = \frac{e^4 \ln \Lambda}{36\pi\varepsilon_0^2 (kT_h)^2}.$$
(A.13)

A constante de taxa de ionização k_i é definida como a soma das constantes de taxa de ionização directa e incremental ("stepwise"): $k_i = k_{\rm dir} + k_{\rm step}\beta$. As expressões para $k_{\rm dir}$ e $k_{\rm step}$ são retiradas de [Benilov & Naidis 1998]. A constante de taxa de ionização directa dos átomos de xénon é avaliada com o uso da função de distribuição maxwelliana de energia dos electrões e com a derivada da secção de ionização em relação à energia do electrão avaliada no limiar, tirada de [Tawara & Kato 1987]. O factor $\beta = n_e / \left(n_e + n_e^{(0)}\right)$ toma, aproximadamente, em conta o decréscimo da taxa de ionização incremental devido ao escape de radiação. Este último entra em jogo para valores de n_e da ordem de $n_e^{(0)}$ ou menores, onde $n_e^{(0)}$ é estimado da seguinte maneira: para $n_e = n_e^{(0)}$ a taxa de desexcitação deste estado por impacto de electrão iguala a taxa de desexcitação devida ao escape de radiação avaliado num plasma com um raio de cerca de 1 mm. $n_e^{(0)}$ estimado desta maneira é igual a: $10^{21} \,\mathrm{m}^{-3}$ para árgon, $3 \times 10^{20} \,\mathrm{m}^{-3}$ para xénon, e $10^{19} \,\mathrm{m}^{-3}$ para mercúrio. A constante de taxa de recombinação é avaliada através da fórmula $k_r = (k_{\rm dir} + k_{\rm step}) (n_e^2/n_a)_S$, onde $(n_e^2/n_a)_S$ é a razão n_e^2/n_a , avaliada com a suposição de equilíbrio de ionização, i.e., através da equação de Saha, e representa uma função de T_e .

A. Coeficientes de transporte, cinéticos e de radiação

Para n_e suficientemente elevadas, as perdas de energia por radiação, $w_{\rm rad}$, são próximas do seu valor num plasma em LTE. As perdas de energia por radiação para um plasma à pressão atmosférica em LTE foram calculadas para uma vasta gama de temperaturas tomando em conta radiação contínua e por linhas em [Kovitya & Lowke 1985, Benoy *et al.* 1993, Gleizes *et al.* 1993] para Ar, em [Zollweg 1978, Paul *et al.* 2004] para Hg, e em [Radtke & Kettlitz 1992] para Xe. Estes dados são ajustados através das seguintes fórmulas, que tomam em consideração o facto do coeficiente de emissão líquido ser aproximadamente proporcional à pressão do plasma p (e.g., [Zollweg 1978, Gleizes *et al.* 1993, Gleizes *et al.* 2005]) e aplicam-se, respectivamente, a plasmas de árgon, de mercúrio e de xénon com um raio de cerca de 1 mm:

$$w_{\rm rad} = 2.6 \times 10^{25} \frac{p}{T_e^{2.52}} \exp\left(-\frac{1.69 \times 10^5}{T_e}\right),$$
 (A.14)

$$w_{\rm rad} = 6.3 \times 10^{22} \frac{p}{T_e^{2.32}} \exp\left(-\frac{8.32 \times 10^4}{T_e}\right),$$
 (A.15)

$$w_{\rm rad} = 1.8 \times 10^{24} \frac{p}{T_e^{2.5}} \exp\left(-\frac{1.19 \times 10^5}{T_e}\right).$$
 (A.16)

Aqui p está em bar, T_e em K, e $w_{\rm rad}$ em W m⁻³.

Uma vez que as perdas por radiação entram em jogo numa secção exterior da região junto ao cátodo onde n_e é alta, as fórmulas acima são, em princípio, suficientes para os propósitos desta dissertação. No entanto, estas fórmulas dariam resultados irrealistas se aplicadas a uma secção interior da região junto ao cátodo, onde T_e pode ser muito alta e n_e baixa. Para n_e baixa as perdas por radiação são devidas à radiação dos estados atómicos excitados. Pode-se obter uma estimativa simples assumindo que a desexcitação de estado atómico radiante devido ao escape de radiação prevalece sobre a desexcitação em colisões com electrões. Assim, as perdas por radiação são governadas pela taxa de excitação destes estados pelo impacto de electrão e podem ser escritas aproximadamente como

$$w_{\rm rad} = k_1 n_a n_e \,\Delta E,\tag{A.17}$$

onde ΔE é a energia de excitação do primeiro estado atómico excitado e k_1 é a constante de taxa efectiva de excitação deste estado, que é avaliada como se descreve em [Benilov & Naidis 1998]. Note-se que esta expressão é exacta se $n_e \ll n_e^{(0)}$, caso contrário representa uma estimativa por excesso. Um procedimento aproximado de avaliação de $w_{\rm rad}$ para um valor de n_e arbitrário consiste numa interpolação por funções racionais com o argumento $\left(n_e/n_e^{(0)}\right)^2$ usando a equação (A.17) e uma das equações (A.14), (A.15), (A.16).

Apêndice B

Tratamento analítico e numérico adicional referente ao capítulo 3

B.1 Comportamento assimptótico para distâncias grandes e pequenas desde a margem da bainha de carga de espaço

Vamos primeiramente considerar o comportamento assimptótico da solução do problema (3.6)-(3.9) para ξ grandes. Seguindo [Benilov & Naidis 1998], expandimos 1 - f, w, e ν equação (3.6), equação (3.7), e equação (3.8) divididas por $\delta^2 \nu$. Retendo termos da primeira ordem, obtemos as equações

$$-\alpha \delta^2 \frac{df}{d\xi} + (1 + \alpha^2) w = 0, \qquad \alpha \delta^2 \frac{dw}{d\xi} = -\nu, \qquad \frac{\nu}{\delta^2} + f - 1 + \frac{w^2}{\nu} = 0.$$
(B.1)

Procurando uma solução para estas equações na forma exponencial, encontramos duas famílias de soluções de um parâmetro que podem ser escritas como

$$\begin{cases} 1-f\\ w\\ \nu \end{cases} = C_{\pm} \begin{cases} 1\\ \mp \frac{\alpha\delta}{1+\alpha^2}\\ \frac{\alpha^2\delta^2}{1+\alpha^2} \end{cases} \exp\left(\pm\frac{\xi}{\delta}\right),$$
 (B.2)

onde C_+ e C_- são constantes arbitrárias. Deve ser enfatizado que uma combinação linear das duas famílias não é uma solução; por outras palavras, se $C_+ \neq 0$, então $C_- = 0$ e vice versa. Esta situação, que não é típica para o comportamento assimptótico de soluções de problemas com condições fronteira, provém da não-linearidade da última equação em (B.1).

As soluções da família que envolvem o expoente com menos são compatíveis com a segunda condição fronteira (3.9), as soluções da outra família não são. Logo, devemos pôr $C_{+} = 0$.

O comportamento assimptótico da solução do problema (3.6)-(3.9) para ξ pequenos, i.e., na vizinhança da margem da bainha de carga de espaço, pode mostrar que é

$$w\left(\xi\right) = 1 + O\left(\sqrt{\xi}\right), \quad f\left(\xi\right) = f_w + O\left(\sqrt{\xi}\right), \quad (B.3)$$

$$\nu\left(\xi\right) = \nu_w + O\left(\xi\right).\tag{B.4}$$

Enquanto que a velocidade dos iões e a densidade numérica mostram o comportamento de raiz quadrada perto da margem da bainha o que é característico para problemas que envolvem o critério de Bohm, esse não é o caso para a densidade numérica dos átomos.

B.2 Abordagens numéricas directas

Uma resposta simples à questão de qual sinal do lado direito da equação (3.20) é apropriado pode ser obtida do seguinte modo: já que se requer que a equação (3.20) esteja de acordo com a equação (3.16) para w pequenos, podemos assumir que o sinal apropriado para wpequenos é mais no caso $\alpha > 1$ e menos no caso $\alpha < 1$. Vamos considerar resultados de cálculos numéricos realizados sob esta suposição. Os cálculos foram realizados por meio do método de Runge-Kutta estandardizado de quarta ordem (bem como em todos os cálculos numéricos realizados no capítulo 3, a menos que seja indicado de outra forma). A rede numérica foi uniforme (assim como em todos os cálculos numéricos descritos no capítulo 3) e conteve 100 ou 1000 passos, i.e., o passo h foi 10^{-2} ou 10^{-3} . Os cálculos realizados na região $\alpha \ge 1$ usaram o ramo de ν com mais, os cálculos realizados na região $\alpha \le 1$ usaram o ramo de ν com menos.

Descobriu-se que ocorrem valores negativos do discriminante D e os cálculos falham num certo intervalo de valores de α à volta de $\alpha = 1$. No caso $\beta = 1$, este intervalo inclui apenas valores superiores à unidade; note-se que para $\alpha = 1$ é possível obter uma solução com o uso do ramo com menos mas não com o ramo com mais. Com um aumento de β o intervalo expande-se e inclui valores tanto superiores como inferiores à unidade, bem como a própria unidade. As fronteiras deste intervalo dependem de h: o intervalo é mais estreito para cálculos numa rede mais fina.

Os resultados dos cálculos bem sucedidos são mostrados na figura B.1. Podemos ver que os resultados são dependentes do passo na região de α imediatamente inferior ao intervalo acima mencionado. Isto é invulgar, dado que foi usado o método de Runge-Kutta estandardizado de quarta ordem.

No caso geral, os resultados acima descritos não fornecem um panorama completo; em particular não descrevem a região de α à volta do ponto do máximo da dependência $f_w(\alpha)$, que é de muito interesse. Note-se que recorrer a rotinas com passo adaptativo não ajudou.

Podemos pensar que as dificuldades surgem devido à necessidade de escolher entre diferentes ramos da solução da equação quadrática para a densidade atómica ν . Por outro



Figura B.1: Resultados de cálculos numéricos directos do fluxo de iões adimensional da camada de ionização. Linhas: solução do problema (3.14), (3.15) com o passo $h = 10^{-2}$ (linha a cheio) e com $h = 10^{-3}$ (linha a tracejado). Pontos: solução do problema (B.6), (B.7) com $h = 10^{-3}$. a: $\beta = 1$. b: $\beta = 50$.

lado, se a equação (3.8) for resolvida em relação à densidade de partículas carregadas f(e não em relação à densidade atómica ν), então existe apenas uma solução positiva e o problema de escolher entre ramos diferentes não surge. De maneira a fazer uso deste facto, devemos transformar o problema com condições fronteira de segunda ordem (3.6), (3.7), (3.9) num problema de primeira ordem com condição inicial para a função $\nu(w)$; ver apêndice B.3 mais abaixo. Foram obtidos os seguintes resultados numéricos. Para determinados valores de α , os cálculos falharam já que surgiram valores negativos ou da densidade dos átomos ν ou da densidade de partículas carregadas f. Em contraste com os cálculos realizados com base na equação (3.14), os valores de α para os quais os cálculos falharam não constituem uma gama contínua de valores (por exemplo, para $\beta = 1$ com $h = 10^{-3}$ os cálculos falharam para $\alpha = 0.688$ e $\alpha = 0.698$, mas foram bem sucedidos para α = 0.689). Os resultados dos cálculos bem sucedidos são representados por pontos na figura B.1 para alguns valores de α e para $h = 10^{-3}$. No caso $\beta = 1$, os resultados dos cálculos são bastante irregulares para α em torno da unidade. Para qualquer β , a solução é dependente do passo para α em torno da unidade. Assim, esta abordagem também é insatisfatória.

Podemos pensar que as dificuldades acima descritas surgem devido a uma falha do método de Runge-Kutta, que é um método explícito; é sabido que os métodos explícitos falham em determinadas situações (por exemplo, em problemas rígidos, ver, e.g., [Press *et al.* 1992]). Nesta sequência, foram realizados cálculos usando um método implícito de segunda ordem. Em cada ponto da rede numérica, foi resolvida uma equação implícita de diferenças finitas que aproximou a equação (3.14), juntamente com a equação (3.8) através do método de Newton. Os resultados revelaram-se similares aos descritos acima e igualmente insatisfatórios. Igualmente mal sucedidos foram os cálculos onde um método implícito de segunda ordem foi aplicado à equação (B.6) e não à equação (3.14) [i.e., onde uma equação implícita de diferenças finitas que aproximou a equação (3.8) através do método da rede numérica juntamente com a equação (3.8) através do método de Newton].

B.3 Obtendo o problema com condição inicial para a função $\nu(w)$

De maneira a transformar o problema de segunda ordem com condições fronteira (3.6), (3.7), (3.9) num problema de primeira ordem com condição inicial para a função $\nu(w)$, podemos diferenciar a equação (3.8) em relação a ξ e depois eliminar as derivadas $df/d\xi$ e $dw/d\xi$ através das equações (3.12) e (3.13). A equação resultante é

$$\frac{d\nu}{d\xi} = -\frac{wf\nu \left[\alpha^2 \nu + (\alpha^2 - 1) f\right]}{\alpha \left[2\nu - \delta^2 \left(1 - f - w^2 f\right)\right]}.$$
(B.5)

B. Tratamento analítico e numérico adicional referente ao capítulo 3

Dividindo esta equação pela equação (3.13), obtemos

$$\frac{d\nu}{dw} = \frac{\delta^2 w f \nu \left(1 - w^2\right) \left[\alpha^2 \nu + \left(\alpha^2 - 1\right) f\right]}{\left[\nu + w^2 \left(1 + \alpha^2\right) \left(\nu + f\right)\right] \left[2\nu - \delta^2 \left(1 - fw^2 - f\right)\right]}.$$
(B.6)

Esta equação é suplementada pela expressão para a densidade de partículas carregadas, obtida ao resolver a equação (3.8) em relação a f. Existe apenas uma solução positiva e não surge o problema de escolher entre ramos diferentes.

A equação (B.6) deve ser resolvida em relação à função $\nu(w)$ no intervalo $0 \le w \le 1$ com a condição inicial

$$\nu\left(0\right) = 0.\tag{B.7}$$

O lado direito da equação (B.6) em w = 0 deve ser avaliado através da segunda de (3.16) com o sinal inferior de maneira a evitar a indeterminação.

B.4 Comportamento assimptótico da função f(w) na vizinhança da linha Γ

Este comportamento é procurado na forma de uma expansão

$$f(w) = f_{\Gamma} + C_3 \varepsilon + C_4 \varepsilon^2 + \dots, \qquad (B.8)$$

onde $\varepsilon = w - w_{\Gamma}$. Substituindo esta expansão na equação (3.14), expandindo em ε e retendo termos de ordem unitária, encontramos

$$C_{3} = -\frac{2\delta^{3}\alpha^{6}}{(\alpha^{4}\beta + 1)^{2}}.$$
(B.9)

Para determinar C_4 devemos obter o comportamento assimptótico da função $\nu(w)$ na vizinhança da fronteira. Com este fim, vamos expandir a equação (3.18) e o primeiro termo no lado direito da equação (3.20):

$$D = \frac{1 - \alpha^2}{\alpha^2} \left(R_1 - C_4 \right) \varepsilon^2 + O\left(\varepsilon^3\right), \qquad (B.10)$$

$$\frac{\delta^2}{2} \left(1 - f - w^2 f \right) = \nu_{\Gamma} + \frac{\delta^3 \alpha^4 \left(\alpha^4 \beta + 2\alpha^2 - 1 \right)}{\left(\alpha^4 \beta + 1 \right)^2} \varepsilon + O\left(\varepsilon^2 \right), \tag{B.11}$$

onde

$$R_1 = \frac{\delta^4 \alpha^8 \left(3 - \alpha^4 \beta\right)}{\left(\alpha^4 \beta + 1\right)^3}.$$
(B.12)

Substituindo as equações (B.10) e (B.11) na equação (3.20), encontramos

$$\nu = \nu_{\Gamma} + \frac{\delta^3 \alpha^4 \left(\alpha^4 \beta + 2\alpha^2 - 1\right)}{\left(\alpha^4 \beta + 1\right)^2} \varepsilon + \frac{\delta \left(1 - \alpha^2\right)^{1/2} \left(R_1 - C_4\right)^{1/2}}{\alpha} \varepsilon + O\left(\varepsilon^2\right).$$
(B.13)

Note-se que o terceiro termo no lado direito desta equação foi escrito tomando em conta que a gama de valores para α em consideração é inferior à unidade e que o ramo com menos deve ser escolhido na equação (3.20) em $w < w_{\Gamma}$ e o ramo com mais em $w > w_{\Gamma}$.

Substituindo as equações (B.8) e (B.13) na equação (3.14), expandindo em ε e igualando termos de ordem ε , chegamos à seguinte equação que governa a constante C_4 :

$$2C_4 = -R_2 + R_3 \left(R_1 - C_4\right)^{1/2}, \qquad (B.14)$$

onde

$$R_{2} = \frac{\delta^{4} \alpha^{8} \left(\alpha^{6} \beta + 2\alpha^{4} \delta^{2} - \alpha^{2} - 6\right)}{\left(\alpha^{4} \beta + 1\right)^{3}},$$
(B.15)

$$R_{3} = \frac{\delta^{2} (\delta + 1) \alpha^{5} (\alpha^{2} + 1) (\alpha^{2} \delta - \alpha^{2} + 1) (\alpha^{2} - \alpha_{cr}^{2})}{(\alpha^{4} \beta + 1)^{2} (1 - \alpha^{2})^{1/2}}.$$
 (B.16)

É conveniente reescrever a equação (B.14) como uma equação quadrática para $(R_1 - C_4)^{1/2}$

$$2(R_1 - C_4) + R_3(R_1 - C_4)^{1/2} - (2R_1 + R_2) = 0.$$
 (B.17)

Note-se que

$$2R_1 + R_2 = \frac{\delta^4 (\delta + 1) \alpha^{10} (\alpha^2 \delta - \alpha^2 + 1) (\alpha^2 - \alpha_{cr}^2)}{(\alpha^4 \beta + 1)^3}.$$
 (B.18)

O discriminante da equação (B.17), $R_4 = R_3^2 + 16R_1 + 8R_2$, pode ser avaliado como sendo

$$R_{4} = \alpha^{10} \delta^{4} \left(\delta + 1\right) \left(\alpha^{2} \delta - \alpha^{2} + 1\right) \left(\alpha^{2} - \alpha_{cr}^{2}\right) \\ \times \frac{\left(3 - \alpha^{2}\right)^{2} \alpha^{4} \delta^{2} + \left(7 - \alpha^{2}\right) \left(\alpha^{2} + 1\right) \left(1 - \alpha^{2}\right)^{2}}{\left(\alpha^{4} \beta + 1\right)^{4} \left(1 - \alpha^{2}\right)}.$$
(B.19)

Podemos ver que $R_4 > 0$ na região $\alpha_{cr} < \alpha < 1$ e a equação (B.17) é resolúvel. Uma vez que nesta região $2R_1 + R_2 > 0$ uma das raízes desta equação é positiva e a outra é negativa, a raiz positiva é

$$(R_1 - C_4)^{1/2} = \frac{\sqrt{R_4} - R_3}{4}.$$
 (B.20)

Assim, é possível uma troca suave entre os dois ramos da solução. É interessante notar que, apesar de ser possível na região $\alpha_{cr} < \alpha < 1$, não o é na região $\alpha < \alpha_{cr}$, onde $R_4 < 0$ e a equação (B.17) deixa de ser resolúvel.

B.5 Comportamento assimptótico da função f(w) para w pequenos

Vamos primeiro considerar uma solução particular do problema (3.14), (3.15), (3.8) com o comportamento assimptótico para w pequenos representado por uma série de potências,

$$f = \sum_{n=0}^{\infty} p_n w^n. \tag{B.21}$$

Precisamos encontrar os coeficientes p_0, p_1, p_2, \dots Segue da equação (3.15) e da primeira equação em (3.16) que

$$p_0 = 1, \quad p_1 = -\frac{1+\alpha^2}{\alpha\delta}.$$
 (B.22)

Os coeficientes seguintes podem ser obtidos substituindo a expansão (B.21) nas equações (3.14), (3.8) e expandindo. Em particular,

$$p_2 = \left(\frac{1+\alpha^2}{\alpha\delta}\right)^2 - \frac{\alpha^4 + 2\alpha^2 - 1}{3\alpha^2 - 1},$$
 (B.23)

$$p_{3} = -\left(\frac{1+\alpha^{2}}{\alpha\delta}\right)^{3} - \frac{(1+\alpha^{2})\left[\alpha^{8}\delta^{2} - (9\alpha^{6} + 10\alpha^{4} - 15\alpha^{2} + 4)(3\alpha^{2} - 1)\right]}{2\alpha\delta(3\alpha^{2} - 1)^{2}(2\alpha^{2} - 1)}.$$
 (B.24)

Expressões para os coeficientes seguintes são complexas; vamos escrever apenas o denominador da parte fraccionária da expressão para p_4 :

$$(\alpha\delta)^4 (3\alpha^2 - 1)^3 (2\alpha^2 - 1) (5\alpha^2 - 3).$$
 (B.25)

Note-se que os coeficientes p_2 , p_3 , p_4 e, presumivelmente, todos os seguintes têm singularidades em $\alpha^2 = 1/3$; os coeficientes p_3 , p_4 e, presumivelmente, todos os seguintes têm singularidades em $\alpha^2 = 1/2$; o coeficiente p_4 e, presumivelmente, todos os seguintes têm singularidades em $\alpha^2 = 3/5$; etc. Podemos, portanto, esperar que a equação (3.14) não tenha em $\alpha^2 = \frac{1}{3}, \frac{1}{2}, \frac{3}{5}, \ldots$ soluções com comportamento assimptótico para w pequenos na forma de uma série de potências (B.21).

Vamos prosseguir com a obtenção do comportamento assimptótico duma solução geral da equação (3.14). Este comportamento é procurado na forma

$$f = 1 + p_1 w + \gamma, \tag{B.26}$$

onde $\gamma = \gamma(w)$ é uma função desconhecida que tende em $w \to 0$ para zero mais rapidamente do que w mas mais lentamente do que w^2 .

O comportamento assimptótico da função $\nu(w)$ pode ser encontrado substituindo a equação (B.26) na equação (3.8). Obtém-se

$$\nu = \alpha \delta w - \frac{\alpha^2 \delta^2}{\alpha^2 - 1} \gamma + \dots$$
 (B.27)

Substituindo as equações (B.26) e (B.27) na equação (3.14) e expandindo, chegamos a uma equação para a função γ

$$w\frac{d\gamma}{dw} = \frac{1+\alpha^2}{1-\alpha^2}\gamma.$$
(B.28)

Uma solução (geral) desta equação é

$$\gamma = C_1 w^{(1+\alpha^2)/(1-\alpha^2)},$$
 (B.29)

onde C_1 é uma constante arbitrária. Podemos ver que a suposição de que γ tende em $w \to 0$ para zero mais rapidamente do que w mas mais lentamente do que w^2 verifica-se na região $0 < \alpha^2 < 1/3$. Assim, a dedução aplica-se à região $0 < \alpha^2 < 1/3$ e o comportamento assimptótico de uma solução geral da equação (3.14) para w pequenos para esses α é

$$f = 1 + p_1 w + C_1 w^{(1+\alpha^2)/(1-\alpha^2)} + \dots$$
 (B.30)

O comportamento assimptótico de uma solução geral da equação (3.14) na vizinhança do ponto w = 0, aplicável para valores mais altos de α , é procurada na forma

$$f = 1 + p_1 w + p_2 w^2 + \gamma, \tag{B.31}$$

onde $\gamma = \gamma(w)$ é uma função desconhecida que tende em $w \to 0$ para zero mais rapidamente do que w^2 mais mais lentamente do que w^3 . A equação (B.27) é substituída por

$$\nu = \alpha \delta w + \frac{\alpha^4 \delta^2 - 3\alpha^4 - 2\alpha^2 + 1}{3\alpha^2 - 1} w^2 - \frac{\alpha^2 \delta^2}{\alpha^2 - 1} \gamma + \dots,$$
(B.32)

As equações (B.28) e (B.29) permanecem aplicáveis. Podemos concluir que a suposição de que γ tende em $w \to 0$ para zero mais rapidamente do que w^2 mas mais lentamente do que w^3 verifica-se na região $1/3 < \alpha^2 < 1/2$ e o comportamento assimptótico de uma solução geral para a equação (3.14) para w pequenos para tais α é

$$f = 1 + p_1 w + p_2 w^2 + C_1 w^{(1+\alpha^2)/(1-\alpha^2)} + \dots$$
(B.33)

É legítimo assumir que o comportamento assimptótico aplicável para qualquer α positivo inferior à unidade possa ser escrito na forma da equação (3.28). Por simplicidade, não consideraremos os casos $\alpha^2 = (m-1)/(m+1)$ (m = 2, 3, 4, ...), onde o coeficiente p_m e todos os seguintes se tornam infinitos [e, por sua vez, $(1 + \alpha^2)/(1 - \alpha^2)$ torna-se igual a m, i.e., toma um valor natural].

Podemos ver a partir da equação (3.28) que no caso $0 < \alpha < 1$ a solução geral da equação (3.14) representa uma família de soluções de um parâmetro, cada uma delas satisfazendo a condição fronteira f(0) = 1. Por outras palavras, no caso $0 < \alpha < 1$, esta condição fronteira não nos permite escolher de entre as diferentes soluções, i.e., é ineficaz, e o problema com condição inicial para a função f(w), constituído pelas equações (3.14), (3.8) e pela condição fronteira (3.15), possui múltiplas soluções (i.e., não é fechado).

A análise presente não revelou multiplicidade de soluções no caso $\alpha = 0$. (Note-se que esta conclusão está de acordo com a análise de [Benilov & Naidis 1998], onde se encontrou uma solução assimptótica única no caso limite $\alpha \to 0$.) Portanto, devemos assumir que $C_1 \to 0$ quando $\alpha \to 0$ ou, por outras palavras, as diferentes soluções do problema com condição inicial tendem para uma solução única à medida que α tende para zero.

B.6 Comportamento assimptótico de soluções exponencialmente decrescentes para o problema com condições fronteira

A escolha entre os sinais superiores e inferiores na equação (3.16) representa no âmbito do problema com condição inicial um análogo da escolha entre soluções exponencialmente crescentes e exponencialmente decrescentes no problema com condições fronteira. A escolha do sinal inferior na equação (3.16), que resultou num p_1 negativo no tratamento do apêndice B.5, corresponde à escolha de soluções exponencialmente decrescentes no âmbito do problema com condições fronteira. Uma vez que existe para a equação (3.14) uma família de soluções de um parâmetro com p_1 negativo no caso $0 < \alpha < 1$ (e não uma solução única), devemos esperar que as soluções exponencialmente decrescentes para o problema com condições fronteira representem no caso $0 < \alpha < 1$ uma família de dois parâmetros (em vez de uma família de um parâmetro).

Vamos provar que é, de facto, isso que acontece. Vamos procurar o comportamento assimptótico das soluções exponencialmente decrescentes para o problema com condições fronteira na forma

$$\begin{cases} 1-f\\ w\\ \nu \end{cases} = C_{-} \begin{cases} 1\\ \frac{\alpha\delta}{1+\alpha^{2}}\\ \frac{\alpha^{2}\delta^{2}}{1+\alpha^{2}} \end{cases} \exp\left(-\frac{\xi}{\delta}\right) + \begin{cases} C_{5}\\ \frac{\alpha\delta}{1+\alpha^{2}}C_{6}\\ \frac{\alpha^{2}\delta^{2}}{1+\alpha^{2}}C_{7} \end{cases} \exp\left(-s\frac{\xi}{\delta}\right),$$
(B.34)

onde C_{-} é uma constante arbitrária e C_5 , C_6 , C_7 , e *s* são constantes que, em princípio, precisam ser determinadas, 1 < s < 2. Substituindo estas expressões na equação (3.6), na equação (3.7), e na equação (3.8) dividida por $\delta^2 \nu$, expandindo e retendo termos da ordem de exp $(-s\xi/\delta)$, obtém-se

$$C_5 = \frac{C_6}{s}, \quad C_7 = C_6 s, \quad s = \frac{1+\alpha^2}{1-\alpha^2}.$$
 (B.35)

Podemos ver que a suposição de que 1 < s < 2 verifica-se na região $0 < \alpha^2 < 1/3$. Assim, a dedução é válida na região $0 < \alpha^2 < 1/3$ bem como o comportamento assimptótico (B.34). É legítimo supor que o comportamento assimptótico para qualquer α positivo inferior à unidade possa ser escrito numa forma semelhante à equação (3.28):

$$\begin{cases} 1-f\\ w\\ \nu \end{cases} = C_{-} \begin{cases} 1\\ \frac{\alpha\delta}{1+\alpha^{2}}\\ \frac{\alpha^{2}\delta^{2}}{1+\alpha^{2}} \end{cases} \sum_{n=1}^{\infty} q_{n} \exp\left(-n\frac{\xi}{\delta}\right) + C_{6} \begin{cases} \frac{1-\alpha^{2}}{1+\alpha^{2}}\\ \frac{\alpha\delta}{1+\alpha^{2}}\\ \frac{\alpha^{2}\delta^{2}}{1-\alpha^{2}} \end{cases} \left[\exp\left(-\frac{1+\alpha^{2}}{1-\alpha^{2}}\frac{\xi}{\delta}\right) + \dots \right], \tag{B.36}$$

onde $q_1 = 1$ e q_n (n = 2, 3, ...) são coeficientes que dependem de $\alpha \in \delta$.

Resulta da equação (B.36) que a família de soluções exponencialmente decrescentes do problema com condições fronteira no caso $0 < \alpha < 1$ é governada por dois parâmetros, C_{-} e C_{6} . Já que uma condição fronteira, a primeira equação em (3.9), é no caso geral insuficiente para determinar dois parâmetros livres, isto significa que o problema com condições fronteira no caso $0 < \alpha < 1$ não é fechado.

Por outras palavras, mostrámos que embora a condição fronteira $f|_{\xi\to\infty} = 1$ permita eliminar soluções exponencialmente crescentes do problema com condições fronteira original, as soluções exponencialmente decrescentes no caso $0 < \alpha < 1$ são governadas por duas (em vez de uma) constantes arbitrárias e o problema com condições fronteira não é fechado, tal como o problema com condição inicial para a função f(w).

B.7 Verificação numérica adicional dos resultados analíticos

A equação (3.28) mostra que no caso $0 < \alpha < 1$ o comportamento assimptótico para w pequenos das soluções da equação (3.14) [suplementada com a equação (3.20) com menos] inclui, para além de potências naturais de w [o primeiro termo no lado direito da equação (3.28)], também potências fraccionárias (o segundo termo). Por outras palavras, as soluções não são infinitamente diferenciáveis em w = 0. Isto pode causar um decréscimo de precisão do método de Runge-Kutta (estandardizado de quarta ordem) e tornar os resultados dependentes do passo. Tal facto é confirmado pelos resultados da solução numérica da equação (3.14) [suplementada com a equação (3.20) com menos] com a condição inicial (3.15) mostrados na figura B.1. (Parte destes resultados são reproduzidos numa escala ampliada na figura B.2; linhas 1).

Foi mostrado no apêndice E que $C_1 \to 0$ à medida que $\alpha \to 0$, o que significa que o segundo termo no lado direito da equação (3.28), que contém potências fraccionárias, desaparece para α pequenos. Logo, os resultados numéricos para a função f(w) devem tornar-se independentes do passo à medida que α decresce. Podemos ver pelas figuras B.1 e B.2 que é, de facto, esse o caso.

Conclui-se do tratamento analítico que a equação (3.14) no caso $0 < \alpha < 1$ possui uma solução particular que é infinitamente diferenciável em w = 0, nomeadamente a solução descrita pela equação (3.28) com $C_1 = 0$. Esta conclusão pode ser verificada numericamente do seguinte modo (por simplicidade, vamos considerar apenas a região $\alpha \leq \alpha_{cr}$). Em $\alpha = \alpha_{cr}$, o segundo termo no lado direito da equação (3.28) é em $w \to 0$ da ordem de $w^{1+2/\delta}$. Conclui-se que este termo é em $\alpha \leq \alpha_{cr}$ maior ou igual a w^3 . Portanto, a condição

$$f = 1 + p_1 w + p_2 w^2 + p_3 w^3 + o(w^3)$$
(B.37)



Figura B.2: Fluxo de iões adimensional da camada de ionização para $\alpha < \alpha_{cr}$. Linhas a cheio: 100 passos. Linhas a tracejado: 1000 passos. Linha a ponteado: o valor $\alpha = \alpha_{cr}$. 1: solução do problema (3.14), (3.15). 2: solução particular da equação (3.14) que é infinitamente diferenciável em w = 0. 3: solução do problema com condições fronteira. a: $\beta = 1$. b: $\beta = 50$.

assegura que o segundo termo no lado direito da equação (3.28) em $\alpha \leq \alpha_{cr}$ é eliminado e a função f(w) é infinitamente diferenciável em w = 0. A condição (B.37) pode ser implementada por transformação do problema para a nova função incógnita

$$z(w) = \frac{f - (1 + p_1 w + p_2 w^2)}{w^3},$$
(B.38)

para a qual a condição (B.37) assume a forma simples $z(0) = p_3$. Os resultados dos cálculos realizados com o uso desta abordagem são representados pelas linhas 2 na figura B.2. Os resultados da solução com $h = 10^{-2}$ e $h = 10^{-3}$ dificilmente conseguem ser distinguidos, como era de esperar.

Foi mostrado no apêndice B.6 que o problema com condições fronteira original, representado pelas equações (3.6), (3.7), (3.9), em $0 < \alpha < 1$ não é fechado, i.e., possui múltiplas soluções, assim como o problema com condição inicial para a função f(w). No entanto, estas soluções são infinitamente diferenciáveis, em contraste com as soluções do problema com condição inicial (que não são infinitamente diferenciáveis em w = 0). Logo, os resultados obtidos ao resolver o problema com condições fronteira original devem ser independentes do passo. De modo a verificar esta conclusão, o problema com condições fronteira (3.6), (3.7), (3.9) foi resolvido numericamente como se descreve em seguida. A equação (3.12) pode ser reescrita como

$$w = \frac{\alpha \delta^2 (1 - w^2)}{f \left[\nu + (1 + \alpha^2) (\nu + f)\right]} \frac{df}{d\xi}.$$
 (B.39)

Substituindo esta expressão na equação (3.7), chegamos a uma equação de segunda ordem para a função f:

$$\alpha^2 \delta^4 \frac{d}{d\xi} \left[\frac{1 - w^2}{\nu + (1 + \alpha^2) \left(\nu + f\right)} \frac{df}{d\xi} \right] = -f\nu, \qquad (B.40)$$

Esta equação possui uma singularidade em $\xi = 0$, que é relacionada com os comportamentos raiz quadrada da velocidade dos iões e da densidade numérica junto à margem da bainha, descritos pela equação (B.3). De forma a remover a singularidade, podemos introduzir uma nova variável independente

$$\eta = \int_0^{\xi} \frac{d\xi}{1 - w^2}.$$
 (B.41)

Obtemos o problema com condições fronteira

$$\alpha^2 \delta^4 \frac{d}{d\eta} \left[\frac{1}{\nu + (1 + \alpha^2) \left(\nu + f\right)} \frac{df}{d\eta} \right] = -\nu \left(1 - w^2 \right) f, \tag{B.42}$$

$$\eta = 0: \qquad \alpha \delta^2 \frac{df}{d\eta} - f\left[\nu + \left(1 + \alpha^2\right)\left(\nu + f\right)\right] = 0, \tag{B.43}$$

$$f\left(\infty\right) = 1,\tag{B.44}$$

onde w se relaciona com f através da equação

$$w = \frac{\alpha \delta^2}{f \left[\nu + (1 + \alpha^2) \left(\nu + f\right)\right]} \frac{df}{d\eta}.$$
 (B.45)

Uma vez que estamos interessados em resolver este problema principalmente na região $\alpha < \alpha_{cr}$, devemos escolher o ramo com menos da função ν e podemos escrever

$$\nu = \frac{\delta}{F_1} f w, \tag{B.46}$$

onde

$$F_1 = \frac{\delta}{2} \left(\frac{1-f}{wf} - w \right) + \left[\frac{\delta^2}{4} \left(\frac{1-f}{wf} - w \right)^2 - 1 \right]^{1/2}.$$
 (B.47)

Usando a equação (B.45), podemos reescrever a equação (B.42) como

$$\alpha^2 \delta^4 \frac{d}{d\eta} \left(F_2 \frac{df}{d\eta} \right) = F_3 f \frac{df}{d\eta}, \tag{B.48}$$

onde

$$F_2 = \frac{1}{\nu + (1 + \alpha^2)(\nu + f)}, \quad F_3 = -\frac{\alpha \delta^3 (1 - w^2)}{F_1 \left[\nu + (1 + \alpha^2)(\nu + f)\right]}, \tag{B.49}$$

e a densidade atómica ν é dada pela equação (B.46).

Nos cálculos, a condição fronteira (B.44) é aplicada em $\eta = \eta_{\text{max}}$, onde η_{max} é um determinado valor de η que é finito mas suficientemente grande. É conveniente substituir esta condição pela seguinte condição fronteira em $\eta = \eta_{\text{max}}$, que provém do tratamento assimptótico (B.2):

$$\delta \frac{df}{d\eta} + f - 1 = 0. \tag{B.50}$$

A condição (B.50) é aplicável para η_{max} inferiores aos da condição (B.44), o que nos permite reduzir o intervalo de cálculos numéricos.

O problema com condições fronteira (B.48), (B.43), (B.50) é resolvido numericamente por iterações. Os coeficientes $F_2 e F_3 e a$ quantidade dentro dos parêntesis rectos na equação (B.43) são calculados com base na iteração prévia, o produto $f df/d\eta$ é linearizado usando o método de Newton. O problema linearizado é resolvido usando o método de Petukhov [Petukhov 1964] (ver capítulo 2 desta dissertação para uma descrição mais detalhada sobre este método). Para cada δ , os cálculos começaram por um pequeno valor de α , sendo a aproximação inicial:

$$f = \frac{f_w}{f_w + (1 - f_w) e^{-\eta/\delta}}, \quad f_w = \frac{\alpha \delta}{\alpha \delta + 1}, \tag{B.51}$$

$$\nu = \left(\alpha\delta\right)^2 \left(1 - f\right). \tag{B.52}$$

(Estas fórmulas podem ser deduzidas a partir da solução assimptótica para α pequenos [Benilov & Naidis 1998].) Os cálculos prosseguiram com um aumento gradual de α , sendo a solução obtida para um valor corrente de α usada como aproximação inicial para o valor subsequente. Verificou-se que as iterações deixam de convergir quando α se aproxima de α_{cr} .

Os resultados dos cálculos realizados com o uso desta abordagem são representados na figura B.2 pelas linhas 3. Os resultados obtidos com 100 e com 1000 passos (para o mesmo intervalo de integração numérica) não se conseguem distinguir no gráfico, tal como era de esperar.

As várias soluções mostradas na figura B.2a manifestam uma diferença apreciável apenas na região $0.4 \leq \alpha \leq \alpha_{cr}$. Este resultado pode ser entendido à luz da conclusão do apêndice B.5 de que as diferentes soluções à medida que α tende para zero se tornam próximas entre si. Com o crescimento de β , α_{cr} decresce e a diferença entre as várias soluções na região $\alpha < \alpha_{cr}$ deve decrescer. Esta tendência está, de facto, presente nos resultados numéricos: as soluções mostradas na figura B.2b diferem entre si na região $\alpha < \alpha_{cr}$ não mais do que alguns por cento.

B.8 Transição do escoamento dos átomos através da barreira de som

A linha Γ apareceu na análise da secção 3.3.1, que é baseada na resolução de um problema para a função f suplementada com a equação quadrática para ν , como uma fronteira separando o domínio de cálculo em partes, nas quais os diferentes ramos da solução para ν são apropriados. Surge a questão: será que esta linha aparece no âmbito de uma abordagem baseada na resolução do problema para a função ν suplementada com a equação quadrática para f?; lembramos que não existem trocas entre ramos no âmbito desta abordagem. Esta questão é aqui considerada.

Vamos introduzir a velocidade do som do fluido atómico, $u_a = \sqrt{kT_h/m_i}$, e a velocidade normalizada (o número de Mach) do escoamento do fluido atómico, $w_a = v_a/u_a$. Segue da segunda equação em (3.1) que $w_a = \delta f w / \nu$. Usando a equação (B.2), encontramos $w_a|_{\xi\to\infty} = 1/\alpha$. Logo, os átomos saem da camada de ionização para o volume do plasma com uma velocidade sub-sónica se α for superior à unidade e com uma velocidade supersónica se α for inferior à unidade.

Transformando o denominador da equação (B.5) com o uso da equação (3.8), podemos escrever

$$\frac{d\nu}{d\xi} = -\frac{wf\left[\alpha^2\nu + \left(\alpha^2 - 1\right)f\right]}{\alpha\left(1 - w_a^2\right)}.$$
(B.53)

O denominador no lado direito desta equação é proporcional a $(1 - w_a^2)$ tal como era de esperar; cf. equação (3.12). Logo, o denominador do lado direito da equação (B.53) desaparece na barreira de som. Se a transição do escoamento atómico através da barreira de som ocorre dentro da camada de ionização, o numerador do lado direito da equação (B.53) deve desaparecer na barreira, caso contrário a derivada seria infinita e a transição não seria suave. Deve ser enfatizado que o numerador no lado direito da equação (B.53) pode, em princípio, desaparecer, em contraste com o numerador para a equação correspondente para o fluido iónico, equação (3.12), que é sempre positivo e, como consequência, o escoamento de iões atinge a barreira de som na margem da bainha, i.e., na fronteira da camada de ionização em vez de no seu interior.

Escrevendo a condição $w_a = 1$ na forma

$$\nu = \delta f w \tag{B.54}$$

e resolvendo a última equação juntamente com a condição de numerador nulo do lado direito da equação (B.53),

$$\alpha^2 \nu = \left(1 - \alpha^2\right) f,\tag{B.55}$$

e com a equação (3.8), chegamos às equações (3.25) e (3.26), que descrevem a linha Γ . Assim, o escoamento atómico atravessa a barreira de som dentro da camada de ionização no caso $\alpha_{cr} < \alpha < 1$ e esta transição ocorre na linha Γ . Tomando em conta que $w_a|_{\xi\to\infty} =$ $1/\alpha > 1$ em $\alpha < 1$, devemos assumir que o fluxo atómico é sub-sónico antes da barreira (em $w > w_{\Gamma}$) e super-sónico após a barreira (em $w < w_{\Gamma}$). No caso $\alpha \ge 1$, o escoamento atómico não atravessa a barreira de som e permanece sub-sónico ao longo da camada de ionização. No caso $\alpha \le \alpha_{cr}$, o escoamento atómico é super-sónico ao longo da camada.

Podemos concluir que se o escoamento atómico é sub-sónico (super-sónico) num ponto dado do espaço e para valores dados de α e de δ , então o ramo apropriado da expressão para ν , a equação (3.20), é o ramo com mais (menos). Pode-se ver que esta conclusão está correcta a partir da equação (3.8): o produto das duas raízes desta equação é igual a $(\delta w f)^2$, logo a raiz maior (a raiz com mais) excede $\delta w f$ (o que se traduz em $w_a < 1$) enquanto que a raiz mais pequena é inferior a $\delta w f$ (o que se traduz em $w_a > 1$).

Assim, a resposta à questão formulada no início deste apêndice é afirmativa: a linha Γ aparece de uma maneira natural, não só quando é considerado o problema para f, mas também quando é considerado o problema para ν . Neste último contexto, Γ pode ser considerada como a linha de Mach, i.e., uma fronteira que divide a faixa ($0 < \alpha < \infty$, $0 \le w \le 1$) em partes nas quais o escoamento atómico dentro da camada de ionização é sub- ou supersónico.

B.9 Fórmula de interpolação para o fluxo de iões

O comportamento assimptótico da função $f_w(\alpha, \delta)$ nos casos limite $\alpha \to 0$ e $\alpha \to \infty$ foi calculado em [Benilov & Naidis 1998] e é, respectivamente,

$$f_w(\alpha, \delta) \approx \delta \alpha - 2\delta^2 \alpha^2,$$
 (B.56)

onde

$$f_w(\alpha, \delta) \approx \frac{C_2}{\alpha},$$
 (B.57)

$$C_{2} = \frac{\delta \left(\delta^{4} - 1 - 4\delta^{2} \ln \delta\right)^{1/2}}{\left(\delta^{2} - 1\right)^{3/2}}.$$
 (B.58)

A equação (50) de [Benilov & Naidis 1998] representa uma fracção racional para α com coeficientes determinados com uso das equações (B.56) e (B.57). Podemos tentar obter uma melhor aproximação fazendo uso, para além dos comportamentos assimptóticos para α pequenos e grandes, também do facto que $\alpha = \alpha_{cr}$ é um ponto de máximo de $f_w(\alpha)$. A fórmula mais simples deste género é

$$f_w = \frac{\delta C_2 \sqrt{1+\delta}\alpha}{C_2 \sqrt{\delta+1} + \left[C_2 \left(2\sqrt{\delta+1}-1\right) \left(\delta+1\right) - \delta\right]\alpha + \delta\sqrt{1+\delta}\alpha^2}.$$
 (B.59)

Esta fórmula satisfaz a condição $f_w(\alpha_{cr}) = \delta/2(1+\delta)$ e está de acordo para os casos limite $\alpha \to 0$ e $\alpha \to \infty$ com a primeira aproximação da equação (B.56) e com a equação (B.57), respectivamente.

Vale a pena salientar que podemos ser tentados a deduzir uma fórmula ainda melhor tomando em conta a segunda aproximação na equação (B.56) e a igualdade $df_w/d\alpha (\alpha_{cr}) =$ 0. No entanto, esta tentativa revela-se infrutífera: tal fórmula possui uma singularidade (para um certo valor de α inferior à unidade) para alguns valores de β .

Referências bibliográficas

- Adler H G [2000]. Diagnostics in lamp research to evaluate HID-electrode and ballast performance, *Industry Applications Conference*, 2000, Rome. Conference Record of the 2000 IEEE 5, 3309–3313.
- Almeida N A, Benilov M S, Franklin R N & Naidis G V [2004]. Transition from a fully ionized plasma to an absorbing surface, J. Phys. D: Appl. Phys. 37(22), 3107–3116.
- Almeida R M S, Benilov M S & Naidis G V [2000]. Simulation of the Layer of Non-Equilibrium Ionization in a High-Pressure Argon Plasma with Multiply Charged Ions, J. Phys. D: Appl. Phys. 33(8), 960–967.
- Amakawa T, Jenista J, Heberlein J V R & Pfender E [1998]. Anode-Boundary-Layer Behaviour in a Transferred, High-Intensity Arc, J. Phys. D: Appl. Phys. 31(20), 2826– 2834.
- Anders A [2003]. Tracking down the origin of arc plasma Science-II. Early continuous discharges, *IEEE Transactions on Plasma Science* **31**(4), 1060–1069.
- Arslanbekov R R & Kolobov V I [2003]. Two-dimensional simulations of the transition from Townsend to glow discharge and subnormal oscillations, J. Phys. D: Appl. Phys. 36(23), 2986–2994.
- Baksht F G, Dyuzhev G A, Mitrofanov N K & Shkol'nik S M [1997]. Experimental Investigation of the Anode Region of a Free-Burning Atmospheric-Pressure Inert-Gas Arc II. Intermediate Current Regime - Multiple Anode Constriction, *Tech. Phys.* 42(1), 35– 38.
- Baksht F G, Dyuzhev G A, Mitrofanov N K, Shkol'nik S M & Yur'ev V G [1973]. Probe Measurements in a Cold, Dense Highly-Ionized Plasma, Sov. Phys. Tech. Phys. 18(12), 1617–1622.
- Baksht F G & Yur'ev V G [1979]. Electrode Phenomena in a Low-Temperature Plasma (Review), Sov. Phys. Tech. Phys. **24**(5), 535–557.

- Beks M L, Hartgers A & van der Mullen J J A M [2006]. Demixing in a metal halide lamp, results from modelling, J. Phys. D: Appl. Phys. 39(20), 4407–4416. URL: http://stacks.iop.org/0022-3727/39/4407
- Benilov M S [1988]. Theory of Electrical Probes in Flows of High-Pressure Weakly Ionized Plasma (Review), *High Temp.* 26(5), 780–793.
- Benilov M S [1992]. The High-Current-Density Phase of the Discharge in Low-Pressure High-Power Switches as a Mode of the Vacuum Discharge, *IEEE Trans. Plasma Sci.* 20(6), 1047–1052.
- Benilov M S [1995]. The Ion Flux from a Thermal Plasma to a Surface, J. Phys. D: Appl. Phys. 28(2), 286–294.
- Benilov M S [1999]. Analysis of Ionization Non-Equilibrium in the Near-Cathode Region Of Atmospheric-Pressure Arcs, J. Phys. D: Appl. Phys. **32**(3), 257–262.
- Benilov M S [2000]. Can Temperature of Electrons in a High-Pressure Plasma Be Determined by Means of an Electrostatic Probe?, J. Phys. D: Appl. Phys. 33(14), 1683– 1696.
- Benilov M S [2008]. Understanding and Modelling Plasma-Electrode Interaction in High-Pressure Arc Discharges: A Review, J. Phys. D: Appl. Phys. 41(14), 144001 (30pp). URL: http://stacks.iop.org/0022-3727/41/144001
- Benilov M S, Bochkarev G G & Rogov B V [1995]. Modeling of Diffuse Current Transfer in a Near-Electrode Layer of the High-Pressure Molecular Plasma, *IEEE Trans. Plasma Sci.* 23(4), 742–749.
- Benilov M S & Coulombe S [2001]. Modelling a Collision-Dominated Space-Charge Sheath in High-Pressure Arc Discharges, *Phys. Plasmas* 8(9), 4227–4233.
- Benilov M S & Cunha M D [2002]. Heating of refractory cathodes by high-pressure arc plasmas: I, J. Phys. D: Appl. Phys. **35**(14), 1736–1750.
- Benilov M S & Cunha M D [2003*a*]. Bifurcation points in the theory of axially symmetric arc cathodes, *Phys. Rev. E* **68**(5), 56407.
- Benilov M S & Cunha M D [2003b]. Heating of Refractory Cathodes by High-Pressure Arc Plasmas: II, J. Phys. D: Appl. Phys. **36**(6), 603–614.
- Benilov M S, Cunha M D & Naidis G V [2005]. Modelling Interaction of Multispecies Plasmas with Thermionic Cathodes, *Plasma Sources Sci. Technol.* **14**(3), 517–524.
- Benilov M S & Marotta A [1995]. A Model of the Cathode Region of Atmospheric Pressure Arcs, J. Phys. D: Appl. Phys. 28(9), 1869–1882.
- Benilov M S & Naidis G V [1998]. Ionization Layer at the Edge of a Fully Ionized Plasma, *Phys. Rev. E* **57**(2), 2230–2241.
- Benilov M S & et al. [2009]. http://www.arc_cathode.uma.pt.
- Benilov M S & Tirskii G A [1979]. On the Analysis of Electric Effects in an Ionized Multicomponent Gas Around Conducting Bodies. The Separation Technique, J. Appl. Math. Mech. 43(2), 309–326.
- Benoy D A, van der Mullen J A M & Schram D C [1993]. Radiative Energy Loss in a Non-Equilibrium Argon Plasma, J. Phys. D: Appl. Phys. 26(9), 1408–1413.
- Bentley R E [1997]. A Departure from Local Thermodynamic Equilibrium Within a Freely Burning Arc and Asymmetrical Thomson Electron Features, J. Phys. D: Appl. Phys. 30(20), 2880–2886.
- Biondi M A [1953]. Phys. Rev. 90, 730–737.
- Bohm D [1949]. Minimum Ionic Kinetic Theory for a Stable Sheath, in A Guthrie & R K Wakerling, eds, The Characteristics of Electrical Discharges in Magnetic Fields, McGraw-Hill, New York, pp. 77–86.
- Boulos M I, Fauchais P & Pfender E [1994]. Thermal Plasmas: Fundamentals and Applications, Vol. 1, Plenum Press, New York.
- Boxman R L, Sanders D M & Martin P J, eds [1995]. Handbook of Vacuum Arc Science and Technology: Fundamentals and Applications, Noyes Publications, Park Ridge, N.J., U.S.A.
- Chang P Y, Shyy W & Dakin J T [1990]. A Study of Three-Dimensional Natural Convection in High Pressure Mercury Lamps, Part I: Parametric Variations with Horizontal Mounting, Int. J. Heat Mass Transfer 33(3), 483–493.
- Child C D [1911]. Discharge from Hot CaO, Phys. Rev. (Series I) 32(5), 492–511.
- Chung P M, Talbot L & Touryan K J [1975]. *Electric Probes in Stationary and Flowing Plasmas: Theory and Application*, Springer-Verlag, New York.
- Dabringhausen L, Nandelstädt D, Luhmann J & Mentel J [2002]. Determination of HID electrode falls in a model lamp I: Pyrometric measurements, J. Phys. D: Appl. Phys. 35(14), 1621–1630.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

Devoto R S [1973]. Transport Coefficients of Ionized Argon, Phys. Fluids 16(5), 616–623.

- Dinulescu H A & Pfender E [1980]. Analysis of the Anode Boundary Layer of High Intensity Arcs, J. Appl. Phys. **51**(6), 3149–3157.
- Dzierzega K, Pokrzywka B & Pellerin S [2004]. Investigations of the cathode region of an argon arc plasma by degenerate four-wave mixing laser spectroscopy and optical emission spectroscopy, J. Phys. D: Appl. Phys. 37(13), 1742–1749. URL: http://stacks.iop.org/0022-3727/37/1742
- Eliezer S & Eliezer Y [2001]. The Fourth State of Matter: An Introduction to Plasma Science, second edn, Institute of Physics Publishing, Dirac House, Temple Back, Bristol BS1 6BE, UK.
- Ferziger J H & Kaper H G [1972]. *Mathematical Theory of Transport Processes in Gases*, North-Holland, Amsterdam.
- Fischer E [1987]. Modelling of Low-Power High-Pressure Discharge Lamps, *Philips J. Res* **42**(1), 58–85.
- Flesch P [2006]. Light and Light Sources: High-Intensity Discharge Lamps, Springer.
- Flesch P & Neiger M [2005]. Understanding anode and cathode behaviour in high-pressure discharge lamps, J. Phys. D: Appl. Phys. 38(17), 3098–3111. URL: http://stacks.iop.org/0022-3727/38/3098
- Frank-Kamenetskii D A [1969]. Diffusion and Heat Transfer in Chemical Kinetics, Plenum, New York.
- Franklin R N [1976]. Plasma Phenomena in Gas Discharges, Clarendon Press, Oxford.
- Franklin R N [2003]. The plasma-sheath boundary region, J. Phys. D: Appl. Phys. **36**(22), R309–R320.
- Gleizes A, Gonzalez J J & Freton P [2005]. Thermal plasma modelling, J. Phys. D: Appl. Phys. 38(9), R153–R183. URL: http://stacks.iop.org/0022-3727/38/R153
- Gleizes A, Gonzalez J J, Liani B & Raynal G [1993]. Calculation of Net Emission Coefficient of Thermal Plasmas in Mixtures of Gas with Metallic Vapour, J. Phys. D: Appl. Phys. 26(11), 1921–1927.
- Goldston R J & Rutherford P H [1998]. Introduction to Plasma Physics, Institute of Physics Publishing, Dirac House, Temple Back, Bristol BS1 6BE, UK.

- Haidar J [1995]. Local thermodynamic equilibrium in the cathode region of a free burning arc in argon, J. Phys. D: Appl. Phys. 28(12), 2494–2504.
- Haidar J [1999]. Non-Equilibrium Modelling of Transferred Arcs, J. Phys. D: Appl. Phys. 32(3), 263–272.
- Haidar J & Farmer A J D [1993]. Temperature measurements for high-current free-burning arcs in nitrogen, J. Phys. D: Appl. Phys. 26(7), 1224–1229.
- Haidar J & Farmer A J D [1994]. Large effect of cathode shape on plasma temperature in high-current free-burning arcs, J. Phys. D: Appl. Phys. 27(3), 555–560.
- Hirschfelder J O, Curtiss C F & Bird R B [1964]. Molecular Theory of Gases and Liquids, Wiley, New York.
- Hsu K C & Pfender E [1983]. Analysis of the cathode region of a free-burning high intensity argon arc, J. Appl. Phys. 54(7), 3818–3824.
- Itikawa Y, ed. [2000]. Photon and Electron Interactions with Atoms, Molecules and Ions. Subvolume A Interactions of Photons and Electrons with Atoms, Vol. 17A of Numerical Data and Functional Relationships in Science and Technology, Springer-Verlag, Berlin etc.
- Kim H C, Iza F, Yang S S, Radmilovic-Radjenovic M & Lee J K [2005]. Particle and fluid simulations of low-temperature plasma discharges: benchmarks and kinetic effects, J. Phys. D: Appl. Phys. 38(19), R283–R301.
 URL: http://stacks.iop.org/0022-3727/38/R283
- Kovitya P & Lowke J J [1985]. Two-Dimensional Analysis of Free Burning Arcs in Argon, J. Phys. D: Appl. Phys. 18(1), 53–70.
- Kühn G & Kock M [2006]. A spatially resolved relaxation method for pLTE plasma diagnostics in free-burning arcs, J. Phys. D: Appl. Phys. 39(11), 2401–2414. URL: http://stacks.iop.org/0022-3727/39/2401
- Kühn G & Kock M [2007]. Nonequilibrium phenomena and determination of plasma parameters in the hot core of the cathode region in free-burning arc discharges, *Phys. Rev.* E 75(1), 016406.
 URL: http://link.aps.org/abstract/PRE/v75/e016406
- Langmuir I [1923]. Positive Ion Currents in the Positive Column of the Mercury Arc, General Electric Review **XXVI**(11), 731–735.
- Langmuir I [1928]. Oscillations in Ionized Gases, Proc. Nat. Acad. Sci. 14, 627–637.

- Lenef A, Dabringhausen L & Redwitz M [2004]. Comparison of 1D Anode Calculations and Measurements in Model Lamp, in G Zissis, ed., Proceedings of the 10th International Symposium on the Science and Technology of Light Sources, Toulouse, July 2004, Institute of Physics, Bristol, pp. 429–430.
- Li H P & Benilov M S [2007]. Effect of a near-cathode sheath on heat transfer in highpressure arc plasmas, J. Phys. D: Appl. Phys. 40(7), 2010–2017. URL: http://stacks.iop.org/0022-3727/40/2010
- Lichtenberg S, Dabringhausen L, Langenscheidt O & Mentel J [2005]. The plasma boundary layer of HID-cathodes: modelling and numerical results, J. Phys. D: Appl. Phys. 38(17), 3112–3127.
 URL: http://stacks.iop.org/0022-3727/38/3112
- Liu W F & Conway D C [1975]. J. Chem. Phys. 62, 3070–3073.
- Liu W S, Whitten B T & Glass I I [1978]. Ionizing Argon Boundary Layers. Part 1. Quasi-Steady Flat-Plate Laminar Boundary-Layer Flows, J. Fluid Mech. 87(Issue 4), 609– 640.
- Lowke J J [1970]. Characteristics of Radiation-Dominated Electric Arcs, J. Appl. Phys. 41(6), 2588–2600. URL: http://link.aip.org/link/?JAP/41/2588/1
- Luhmann J, Lichtenberg S, Langenscheidt O, Benilov M S & Mentel J [2002]. Determination of HID electrode falls in a model lamp II: Langmuir-probe measurements, J. Phys. D: Appl. Phys. 35(14), 1631–1638.
- Massey H [1976]. Negative Ions, Cambridge University Press, Cambridge.
- McEachran R P & Elford M T [2003]. The momentum transfer cross section and transport coefficients for low energy electrons in mercury, J. Phys. B: Atom. Mol. Opt. Phys. 36(3), 427–441.
 URL: http://stacks.iop.org/0953-4075/36/427
- Mentel J, Luhmann J & Nandelstädt D [2000]. Experimental investigation of electrodes for high pressure discharge lamps, *Industry Applications Conference*, 2000, Rome. Conference Record of the 2000 IEEE 5, 3293–3300.
- Mitchner M & Kruger C H [1973]. Partially Ionized Gases, Wiley, New York.
- Mitrofanov N K & Shkol'nik S M [2007]. Two Forms of Attachment of an Atmospheric-Pressure Direct-Current Arc in Argon to a Thermionic Cathode, *Tech. Phys.* 52(6), 711–720.

- Monchick L, Munn R J & Mason E A [1966]. Thermal Diffusion in Polyatomic Gases: A Generalized Stefan-Maxwell Diffusion Equation, J. Chem. Phys. 45(8), 3051–3058.
 See also Erratum, J. Chem. Phys. 48(7) p. 3344 (1968).
 URL: http://link.aip.org/link/?JCP/45/3051/1
- Nandelstädt D, Redwitz M, Dabringhausen L, Luhmann J, Lichtenberg S & Mentel J [2002]. Determination of HID electrode falls in a model lamp III: Results and comparison with theory, J. Phys. D: Appl. Phys. 35(14), 1639–1647.
- Nazarenko I P & Panevin I G [1989]. Analysis of the Near-Anode Processes Characters in Argon Arc Discharges of High Pressure, *Contrib. Plasma Phys.* **29**, 251–261.
- Nemchinsky V A [2005]. Anode layer in a high-current arc in atmospheric pressure nitrogen,
 J. Phys. D: Appl. Phys. 38(22), 4082–4089.
 URL: http://stacks.iop.org/0022-3727/38/4082
- Neumann W [1987]. The Mechanism of the Thermoemitting Arc Cathode, Akademie-Verlag, Berlin.
- Paul K C, Takemura T, Hiramoto T, Erraki A, Dawson F, Zissis G, Gonzalez J J, Gleizes A, Benilov M S & Lavers J D [2006]. Self-Consistent Model of HID Lamp for Design Applications, *IEEE Trans. Plasma Sci.* 34(4), 1536–1547.
- Paul K C, Takemura T, Hiramoto T, Yoshioka M & Igarashi T [2006]. Three-Dimensional Modeling of a Direct Current Operated Hg-Ar Lamp, *IEEE Trans. Plasma Sci.* 34(2), 254–262.
- Paul K C, Takemura T, Matsuno H, Hiramoto T, Dawson F, Gonzalez J J, Gleizes A, Zissis G, Erraki A & Lavers J D [2004]. Predicted Results of a HID DC Current Lamp Considering a P-1 Radiation Model, *IEEE Trans. Plasma Sci.* 32(1), 118–126.
- Pellerin S, Musio K, Pokrzywka B & Chapelle J [1994]. Investigation of a cathode region of an electric arc, J. Phys. D: Appl. Phys 27, 522–528.
- Petukhov I V [1964]. Nauka, Moscow, pp. 304–325.

Phelps A V [2008].

http://jilawww.colorado.edu/~avp/collision_data/electronneutral/ELECTRON.TXT, Last modified 24-Jun-2008.

Pokrzywka B, Musiol K, Pellerin S, Pawelec E & Chapelle J [1996]. Spectroscopic Investigation of the Equilibrium State in the Electric Arc Cathode Region, J. Phys. D: Appl. Phys. 29(10), 2644–2649.

- Press W H, Teukolsky S A, Vetterling W T & Flannery B P [1992]. Numerical Recipes in FORTRAN, 2nd edn, Cambridge University Press, Cambridge.
- Radtke R & Kettlitz M [1992]. On the energy balance of isothermal wall-stabilized xenon arcs, Plasma Sources Sci. Technol. 1(4), 274–279. URL: http://stacks.iop.org/0963-0252/1/274
- Raizer Y P [1991]. Gas Discharge Physics, Springer, Berlin.
- Rat V, Murphy A B, Aubreton J, Elchinger M F & Fauchais P [2008]. Treatment of non-equilibrium phenomena in thermal plasma flows, J. Phys. D: Appl. Phys. 41(18), 183001 (28pp).
 URL: http://stacks.iop.org/0022-3727/41/183001
- Redwitz M, Dabringhausen L, Lichtenberg S, Langenscheidt O, Heberlein J & Mentel J [2006]. Arc attachment at HID anodes: measurements and interpretation, J. Phys. D: Appl. Phys. 39(10), 2160–2179.
 URL: http://stacks.iop.org/0022-3727/39/2160
- Redwitz M, Langenscheidt O & Mentel J [2005]. Spectroscopic investigation of the plasma boundary layer in front of HID-electrodes, J. Phys. D: Appl. Phys. 38(17), 3143–3154. URL: http://stacks.iop.org/0022-3727/38/3143
- Rethfeld B, Wendelstorf J, Klein T & Simon G [1996]. A self-consistent model for the cathode fall region of an electric arc, J. Phys. D: Appl. Phys. **29**(1), 121–128.
- Riemann K U [1991]. The Bohm Criterion and Sheath Formation, J. Phys. D: Appl. Phys. **24**(4), 493–518.
- Roth J R [2001]. Industrial Plasma Engineering: Applications to Nonthermal Plasma Processing, Vol. 2, Institute of Physics Publishing.
- Sansonnens L, Haidar J & Lowke J J [2000]. Prediction of Properties of Free Burning Arcs Including Effects of Ambipolar Diffusion, J. Phys. D: Appl. Phys. 33(2), 148–157.
- Scharf F H & Brinkmann R P [2006]. Analysis of a Multi-Fluid Plasma Model for the Near-Cathode Region in Thermal Plasmas, J. Phys. D: Appl. Phys. 39(13), 2738–2746. URL: http://stacks.iop.org/JPhysD/39/2738
- Scharf F H, Oberrath J, Merthmann P & Brinkmann R P [2007]. Investigation of Various Approximations for Multi-Fluid Plasma Models of the Near-Cathode Region in Thermal Plasmas, in M Q Liu & R Devonshire, eds, Proc. 11th Int. Symp. Sci. Technol. Light Sources (LS:11) (Shanghai, May 2007), FAST-LS, ISBN 978-0-9555445-0-7, Sheffield, UK, pp. 261–262.

- Schmitz H & Riemann K U [1999]. Consistent Analysis of the Boundary Layer of a Saha Plasma, in P Pisarczyk, T Pisarczyk & J Wolowski, eds, Proceedings, Contributed Papers, XXIV International Conference on Phenomena in Ionized Gases, Warsaw, 1999, Vol. 1, Institute of Plasma Physics and Laser Microfusion, Warsaw, pp. 5–6. (ISBN 83-902319-5-6. Available from the British Library.).
- Schmitz H & Riemann K U [2001]. Consistent analysis of the boundary layer of a Saha plasma, J. Phys. D: Appl. Phys. 34(8), 1193–1202.
- Schmitz H & Riemann K U [2002]. Analysis of the cathodic region of atmospheric pressure discharges, J. Phys. D: Appl. Phys. 35(14), 1727–1735.
- Smirnov B M [1977]. Introduction to Plasma Physics, Mir Publishers.
- Smirnov B M [2001]. Atomic Structure and the Resonant Charge Exchange Process, *Physics Uspekhi* 44(3), 221–254.
- Su C H & Lam S H [1963]. Continuum Theory of Spherical Electrostatic Probes, *Phys. Fluids* 6(10), 1479–1491.
- Tawara H & Kato T [1987]. Atom. Data Nucl. Data Tabl. 36, 167.
- Vargaftik N B & Vasilevskaya Y D [1980]. Thermal Conductivity of Krypton and Xenon at Temperatures Up to 5000 K, J. Eng. Phys. Thermophys. 39(5), 1217–1222.
- Wendelstorf J [1999]. Two-Temperature, Two-Dimensional Modelling of Cathode-Plasma Interaction in Electric Arcs, in P Pisarczyk, T Pisarczyk & J Wolowski, eds, Contributed Papers of XXIV International Conference on Phenomena in Ionized Gases, Warsaw, 1999, Vol. 2, Institute of Plasma Physics and Laser Microfusion, Warsaw, pp. 227–228. (ISBN 83-902319-5-6. Available from the British Library.).
- Yang G & Heberlein J [2007a]. Anode attachment modes and their formation in a high intensity argon arc, *Plasma Sources Sci. Technol.* 16(3), 529–542. URL: http://stacks.iop.org/0963-0252/16/529
- Yang G & Heberlein J [2007b]. Instabilities in the anode region of atmospheric pressure arc plasmas, *Plasma Sources Sci. Technol.* 16(4), 765–773. URL: http://stacks.iop.org/0963-0252/16/765
- Zhdanov V M [2002]. Transport Phenomena in Multicomponent Plasma, Taylor and Francis, London and New York.
- Zhdanov V M & Tirskii G A [2003]. The Use of the Moment Method to Derive the Gas and Plasma Transport Equations with Transport Coefficients in Higher-Order Approximations, J. Appl. Maths Mechs 67(3), 365–388.

- Zhou X & Heberlein J [1994]. Analysis of the arc-cathode interaction of free-burning arcs, Plasma Sources Sci. Technol. **3**, 564–574.
- Zhou X & Heberlein J [1996]. Characterization of the arc cathode attachment by emission spectroscopy and comparison to theoretical predictions, *Plasma Chemistry and Plasma Processing* 16(1), 229s–244s.
- Zollweg R J [1978]. Convection in Vertical High-Pressure Mercury Arcs, J. Appl. Phys. **49**(3), 1077–1091.