UNIVERSITÀ DEGLI STUDI DI BOLOGNA

Scuola di Ingegneria e Architettura Corso di Laurea in Ingegneria Meccanica

Dipartimento di Ingegneria delle Costruzioni Meccaniche, Nucleari, Aeronautiche e di Metallurgia

Tesi di Laurea in Fluido
dinamica dei Motori a Combustione Interna $${\rm M}$$

IMPLEMENTAZIONE E VALIDAZIONE DI UN MODELLO DI ACCENSIONE PER MOTORI A COMBUSTIONE INTERNA

Candidato: Enzo CAMPOFREDANO

> Relatore: Ill.mo Prof. Gian Marco Bianchi

> > Correlatori: Chiar.mo Prof. Michele Bianchi Ill.mo Prof. Nicolò Cavina

ANNO ACCADEMICO 2015-2016, III sessione

Ai miei genitori Michele e Silvia

Gli ingegneri non vivono. Funzionano! [F. BELLUCCI]

Sommario

Il presente lavoro si concentra sull'implementazione e la validazione di un modello di accensione per motori SI in ambito di simulazioni fluidodinamiche di tipo RANS. Il modello non si occupa del processo di combustione, ma riguarda solo ed esclusivamente i primi istanti dell'accensione cioè la formazione, in seguito alla scintilla, del kernel e le sue prime fasi di sviluppo: questo verrà poi utilizzato per inizializzare il processo di combustione, simulato tramite il modello ECFM, al quale dovrà fornire un certo valore sorgente che, nel caso specifico, è rappresentato dalla densità superfi*ciale di fiamma*. Alla descrizione dei fenomeni fisici che portano alla formazione della scintilla è dedicata buona parte della trattazione, mettendo in evidenza le caratteristiche dei diversi fenomeni che hanno luogo (ionizzazione, breakdown e scarica): in questo modo è stato possibile comprendere le difficoltà intrinseche che si incontrano nel simulare tale fenomeno e la necessità di ricorrere ad opportuni modelli semplificati. A questa parte teorica segue poi la descrizione e l'implementazione del modello di accensione sviluppato presso il DIN della Facoltà di Ingegneria di Bologna dal Prof. Bianchi e dell'Ing. Falfari. Il modello è quindi stato implementato mediante il nuovo software CFD CONVERGE® e validato riproducendo un caso test ben noto in letteratura: i risultati ottenuti con il software sono stati quindi confrontati con quelli sperimentali a disposizione, che si sono dimostrati compatibili tra loro. L'attività ha inoltre permesso di valutare le caratteristiche del codice, evidenziandone sia i pregi che i difetti: a tal proposito si anticipa fin da ora che alcuni aspetti non sono stati del tutto chiariti o ben compresi, il che lascia spazio a futuri sviluppi e miglioramenti.

Ringraziamenti

Ci tengo a ringraziare il mio relatore, Prof. Gian Marco Bianchi, per la grande disponibilità e pazienza dimostrata nel supportarmi durante questo percorso di tesi, nonché per la competenza con cui ha saputo indirizzarmi nelle situazioni di dubbio.

Allo stesso modo ringrazio i suoi collaboratori, in particolare l'Ing. Giulio Cazzoli per il supporto e i consigli forniti per "venire a capo" di non pochi problemi ed imprevisti.

Al termine di questo percorso formativo lungo e complesso, ma assolutamente ricco di soddisfazioni, la mia più profonda gratitudine va a miei genitori Michele e Silvia, per il sostegno intellettuale e materiale (soprattutto!) che mi hanno sempre assicurato in tutti questi anni. Senza di loro nulla di tutto ciò sarebbe stato possibile.

Infine desidero ringraziare parenti, amici e colleghi che mi hanno aiutato a superare indenne questi anni di studio, nel bene e nel male. Grazie!

Indice

Sc	Sommario i			
Ri	ingra	ziame	nti	iii
1	Intr	oduzio	one generale	1
	1.1	Breve	richiamo sui motori SI	2
	1.2	Strutt	ura della tesi	5
2	Ric	hiami	di gasdinamica	7
	2.1	Leggi	fondamentali della gas dinamica classica $\ . \ . \ . \ . \ . \ .$.	7
	2.2	Richia	ami sulla teoria cinetica dei gas	9
		2.2.1	Distribuzione di velocità delle molecole	12
		2.2.2	Cammino libero medio $\overline{\lambda}$	16
		2.2.3	Urti e scambi di energia	20
	2.3	Riepil	ogo	22
3	Pro	cessi d	li ionizzazione dei gas	23
	3.1	Ionizz	azione primaria	23
		3.1.1	Ionizzazione elettronica – Il processo α	26
		3.1.2	Fotoionizzazione	32
		3.1.3	Ionizzazione termica	34
		3.1.4	Processi secondari	35
	3.2	Ionizz	azione secondaria	40
		3.2.1	Richiami di fisica dello stato solido	40
		3.2.2	Effetto fotoelettrico	45
		3.2.3	Emissione termoionica	46
		3.2.4	Emissione di campo ed effetto tunnel	47
		3.2.5	Emissione elettronica secondaria - Il processo γ	49
	3.3	Riepil	ogo	55

4	Sca	riche elettriche all'interno di un gas	57
	4.1	Regimi di scarica in presenza di un campo elettrico costante \ldots .	. 57
	4.2	Breakdown	. 61
		4.2.1 Meccanismo di Townsend	. 61
		4.2.2 Tensione di breakdown - Legge di Paschen	. 63
		4.2.3 Intensità di campo E_{bd}	. 67
		4.2.4 Tempo di ritardo t	. 68
		4.2.5 Considerazioni aggiuntive sul breakdown	. 69
	4.3	Glow discharge	. 71
		4.3.1 Caratteristica tensione-corrente	. 74
		4.3.2 Cathode layer	. 75
		4.3.3 Zona di transizione	. 79
		4.3.4 Positive column	. 80
		4.3.5 Anode layer	. 80
	4.4	Arc discharge	. 80
		4.4.1 Inizializzazione dell'arco	. 82
		4.4.2 Struttura e caratteristiche del fenomeno	. 82
	4.5	Spark discharge	. 88
		4.5.1 Inapplicabilità del criterio di Townsend	. 89
		4.5.2 Streamer theory \ldots \ldots \ldots \ldots \ldots \ldots \ldots	. 89
	4.6	Riepilogo	. 95
5	Mo	dellazione del processo di accensione	97
	5.1	Fisica dell'accensione	. 97
		5.1.1 Caratteristiche elettriche del circuito di accensione	. 98
		5.1.2 Fasi di scarica nel processo di accensione	. 100
		5.1.3 Efficienza dei processi di scarica	. 105
		5.1.4 Sviluppo della fiamma e sua propagazione	. 106
	5.2	Il modello di accensione	. 109
		5.2.1 Sotto-modello del circuito elettrico	. 110
		5.2.2 Sotto-modello di espansione del kernel	. 111
		5.2.3 Disaccoppiamento modello	. 115
	5.3	Riepilogo	. 115
6	Imp	lementazione del modello di accensione	117
	6.1	Il software CONVERGE	. 117
		6.1.1 Equazioni risolte	. 119
		6.1.2 Turbolenza - Modello $k - \epsilon$. 120
		6.1.3 Combustione - Modello ECFM	. 121
	6.2	Implementazione modello	. 122
		6.2.1 Funzione principale	. 122

		6.2.2	Raccolta valori medi	. 124
		6.2.3	Inizializzazione	. 124
		6.2.4	Velocità laminare	. 125
		6.2.5	Calcolo fattore di wrinkling	. 125
		6.2.6	Accoppiamento modello-solutore principale	. 127
7	Vali	dazion	e del modello di accensione	129
	7.1	Caso t	est di riferimento \ldots	. 130
	7.2	Case s	et-up	. 132
		7.2.1	Preparazione geometria	. 132
		7.2.2	Condizioni iniziali e al contorno	. 134
		7.2.3	Settaggio parametri di combustione	. 136
		7.2.4	UDF	. 137
	7.3	Risulta	ati in assenza di combustione	. 138
	7.4	Risulta	ati modello di accensione	. 142
	7.5	Osserv	azioni e conclusioni	. 148
A	Par	ticelle	cariche all'interno d un campo elettrico costante	151
В	Ade	guame	ento delle UDF	157
Bi	bliog	grafia		159

Elenco delle tabelle

Valori di ϕ e della costante termoionica per diversi materiali policri-
stallini. Tratto da [27]
Valori di $pd_{min} \in V_{bd,min}$ per diversi gas. Tratto da [37]
Perdite energetiche associate ai diversi regimi di scarica in condizioni
ideali e per elettrodi di piccole dimensioni
Caratteristiche geometriche del motore sperimentale, usate anche per
la simulazione
Condizioni operative per il caso test
Frazioni in massa di combustibile, ossigeno e azoto per diversi valori
di λ
Valori di turbolenza in corrispondenza della candela all'istante di
accensione confrontati con i valori riportati in [10]
Condizioni operative di simulazione relative a [10]142
Frazioni in massa di combustibile, ossigeno e azoto per diversi valori
di λ

Elenco delle figure

1.1	Riproduzione schematica di un sistema TCI (a sinistra) e CDI (a	
	destra) di uso comune	3
2.1	Diagramma di Clapeyron per una trasformazione isoterma di un gas	
	rarefatto	8
2.2	Modello elementare per il calcolo delle forze molecolari	10
2.3	Distribuzione di Maxwell-Boltzmann per la velocità delle particelle.	14
2.4	Distribuzione di Maxwell-Boltzmann per la velocità delle particelle al	15
25	Distribuzione di Maxwell-Boltzmann per l'energia cinetica al variare	10
2.0	della temperatura: gli andamenti si riferiscono alle distribuzioni di	
	velocità riportate in 2.4.	16
2.6	Rappresentazione schematica del cammino libero medio $\overline{\lambda}$.	17
2.7	Modello balistico semplificato per il calcolo del cammino libero medio	
	$\overline{\lambda}$	17
2.8	Distribuzione di $\overline{\lambda}$.	20
2.9	Urto elastico tra particelle di massa diversa.	20
3.1	Reazioni di base tra un elettrone e un atomo neutro a fronte di una	
	collisione.	24
3.2	Rappresentazione schematica dei livelli energetici di un atomo neutro.	25
3.3	Caratteristica tensione-corrente rilevata sperimentalmente da Town- send nel caso di elettrodi piani e paralleli soggetti ad una differenza	
	di potenziale crescente.	26
3.4	Andamento di σ_{ion} al variare dell'energia cinetica degli elettroni e	
	relativa probabilità di ionizzazione da impatto	28
3.5	Rappresentazione schematica di un circuito DC e relativo volume di	
	controllo per la determinazione della cascata di elettroni	29
3.6	Andamento qualitativo della corrente i per diversi valori costanti del	
	rapporto E/p	31
3.7	Coefficienti di ionizzazione al variare del rapporto E/p , per gas mole-	
	coları (a sınistra) e inerti (a destra). Tratto da [27]	31

3.8	Costanti $A \in B$ per il calcolo del coefficiente di ionizzazione e relativo	
	campo di applicazione. Tratto da [27]	33
3.9	Distribuzione di Fermi-Dirac a diverse temperature per $\epsilon_F = 5 \mathrm{eV}$	43
3.10	Rappresentazione schematica del numero di elettroni con energia suf-	
	ficiente per essere emessi dal materiale	44
3.11	Schema illustrativo dell'effetto fotoelettrico.	46
3.12	Riduzione del lavoro di estrazione da parte di un campo elettrico	
	esterno applicato al materiale	48
3.13	Rappresentazione schematica del processo di scambio di energia po- tenziale sulla superficie di un metallo conduttore: neutralizzazione (a	-
~ · ·	sinistra) ed effetto Auger (a destra)	52
3.14	Andamento di γ per catodo in rame in presenza di gas nobili. Tratto	
	da [27]	54
3.15	Valori di γ per catodi di diversi materiali per pressioni medio-alte.	_ .
	Tratto da $[27]$	54
4.1	Rappresentazione semplificata di un <i>discharge tube</i> riempito di gas.	58
4.2	Caratteristica $V - i$ ottenuta applicando tensioni via via maggiori a	
	due elettrodi piani e paralleli all'interno di un tubo contenente gas ad	-
	una data pressione	59
4.3	Caratteristica $V - i$ in regime di corrente non autosufficiente per	
	elettrodi piani e paralleli	62
4.4	Andamento della tensione di breakdown al variare del prodotto pd (a	
	sinistra); relazione tra il criterio di Townsend $\alpha d = K$ e la funzione	<u> </u>
	$a'_p = f(a'_p)$ (a destra)	64
4.5	Relazione tra il coefficiente di ionizzazione α e l'intensità del cam-	
	po E_{bd} al variare di pd (a sinistra); andamento del rapporto E_{bd}/p al	0 7
1.0	variare di pd (a destra)	67
4.6	Tempo di ritardo caratteristico del breakdown per sovratensione co-	<u> </u>
4 🗁	stante, scomposto nel due contributi $t_s \in t_f$	69
4.7	Scarica a bagliore ottenuta mediante l'apparato di figura 4.1 e relative	71
1.0		(1
4.8	Distribuzione spaziale, per una tipica scarica a bagliore, di: intensita	
	della scarica J , potenziale ϕ , campo elettrico E , densita di corrente	
	per electroni j_e e foni j_+ , densita di caricie negative n_e e positive n_+ ,	79
4.0	regione di carica spaziale ρ . Tratto da [27]	15
4.9	Caratteristica $V - i$ e retta di carico: AB regime non autosostenu- to RC regime di Terregond (derly discharge) DE scenice e hagliere	
	to, <i>DC</i> regime di Townsend (dark discharge), <i>DE</i> scarica a bagilore	71
1 10	Distribuzione delle comparti i a i a relative derettà di a inconstructore delle comparti di constructore derettà di constructore delle comparti di constructore derettà di constructore della comparti di constructore della constructore della comparti di constructore della constructore del	14
4.10	Distribuzione dene correnti j_+ e j_e , e relative densita di carica nel	77
	case un campo non distorto. Tratto da $\lfloor 21 \rfloor$	11

Tratto da [27]		
4.12 Distribuzione di temperaura, potenziale e campo elettrico per	• • • • • •	78
che si estende da catodo ad anodo. Tratto da $[27]$	$\begin{array}{c} \text{un arco} \\ \cdot \cdot \cdot \cdot \end{array}$	83
4.13 Distribuzione di densità di cariche, corrente e campo elettric regione del catodo. Tratto da [27]	co nella	84
4.14 Distribuzione di temperatura e conduttività nel canale di Tratto da [27]	plasma.	87
4.15 Distribuzione delle cariche e forma della valanga elettronica p in due istanti successivi.	orimaria	91
4.16 Campi elettrici in presenza di una valanga primaria produun singolo elettrone: linee di forza del campo esterno e del considerate separatamente (a sinistra) e del campo risultante elettrone del campo risultante e	otta da l dipolo (a destra).	92
4.17 Campo elettrico complessivo dopo che la valanga ha raggiunto e tutti gli elettroni sono stati catturati dall'elettrodo: linee di f campo E' dovuto alle cariche positive nella coda e dalla sua im	l'anodo orza del imagine	
riflessa nell'anodo (a sinistra) e del campo risultante (a destr	a)	93
$4.18\;$ Propagazione di un o $streamer$ dall'anodo al catodo e relative	linee di	
forza del campo in testa		93
4.19 Propagazione di uno <i>streamer</i> dal catodo all'anodo e relative forza del campo in testa.	linee di	95
5.1 Circuito elettrico equivalente di un sistema di accensione, su in meccanismo di accensione (in <i>rosso</i>) e candela con relativ gamento di alta tensione (<i>blu</i>). $v_{hv}(t)$ segnale di alta tensione e C_c induttanza, resistenza e capacità della bobina rispettiva Z_c impedenza cavo alta tensione; R_r resistenza smorzament ferenze radio; $L_p C_p$ impedenza e capacità della candela; d c elettrodi; R_s derivatore di corrente (solo per misurazioni); v	addiviso vo colle- $E; L_c, R_c$ amente; so inter- listanza (t) i (t)	
tensione e corrente di accensione.		98
5.2 Caratteristiche temporali di tensione-corrente per un sistema TCI	a CDI e	99
5.3 Energia e potenza per il sistema TCI di figura 5.2b		99
5.4 Caratteristiche del canale di plasma per un breakdown in aria con $d = 1 \text{ mm e } p = 1 \text{ bar. } E_{el}$ energia agli elettrodi; T_e temp elettroni; T_g temperatura gas; n_e densità di elettroni; p, d pre diametro canale di plasma	a 300 K peratura ssione e	101
5.5 Ripartizione dell'energia fornita in fase di accensione tra ener tenziale alle molecole e termica.	rgia po-	102

5.6	Danneggiamento superficiale del catodo causato da un arco elettrico (200 V, 225 mJ) applicato per 100 µs in aria a condizioni ambiente con
	d = 1 mm. Tratto da [18]
5.7	Profilo radiale di temperatura per le fasi di breakdown T_B , arc T_A e glow T_G
5.8	Energia complessivamente trasferita dalle fasi di arc-glow e di break-
	down
$5.9 \\ 5.10$	Efficienza delle fasi di arc e glow all'aumentare della velocità del fluido. 106 Evoluzione della temperatura per diversi regimi di scarica per una
5.11	miscela stechiometrica di CH_4 -aria a 300 K. Tratto da [18] 107 Influenza del grado di omogeneità della miscela al variare del regime
	di scarica. Tratto da [18]
5.12	Effetto del wrinkling sulla superficie del kernel: superficie media A_k (in nero) e corrugata (in rosso)
6.1	Worflow per la preparazione e l'esecuzione di una simulazione 118
6.2	Andamento della funzione Γ_K al variare di r_1 e per valori crescenti di
	r_2
6.3	Rappresentazione schematica dell'interazione tra modello di accensio-
	ne, diviso nelle sue parti fondamentali, e solutore principale. \ldots . 127
7.1	Dettaglio della sezione del motore monocilindrico riportato in [13] e
	[14]: si mettono in evidenza le zone relative al cilindro (blu) e alla
	camera laterale ($rosso$)
7.2	Geometria del motore riprodotta al CAD
7.3	Superficie divisa in boundary: piston, liner, head e side chamber 134
7.4	Pannello di configurazione delle condizioni iniziali per le singole regio-
	ni: pressione e temperatura (in <i>rosso</i>), turbolenza (in <i>verde</i>), specie
	chimiche (in blu) e passivi (in <i>arancione</i>)
7.5	Curva di pressione (a) e temperatura (b) in fase di compressione: pro- va condotta senza combustione per determinare le condizioni iniziali
	di accensione
7.6	Configurazione della sorgente di Σ
7.7	Profili di velocità all'interno della camera laterale per diversi angoli
	di manovella
7.8	Profilo radiale di velocità adimensionale
7.9	Profilo angolare di velocità, adimensionalizzata rispetto alla velo- cità media del pistone, in corrispondenza del punto di accensione
	(posizione periferica): confronto tra dati sperimentali (indicatori) e simulazioni (tratto continuo)
7.10	Intensità di turbolenza normalizzata rispetto alla velocità media del pistone sul piano medio della camera a 350 CAD

7.11	Intensità di turbolenza a 350 CAD sul piano passante per il centro
	della camera e la posizione della candela: dettaglio della sezione (a
	sinistra) e relativa messa in pianta (a destra)
7.12	Raggio del kernel al variare del regime di rotazione
7.13	Andamento della velocità del kernel a pari rapporto aria-combustibile
	per diversi regimi
7.14	Andamento della temperatura del kernel a pari rapporto aria-combustibile
	per diversi regimi
7.15	Fattore di wrinkling a diversi regimi di rotazione
7.16	Volume combusto per diversi regimi al variare del tempo 145
7.17	Volume combusto per diversi regimi al variare dell'angolo. \ldots . 145
7.18	Raggio del kernel al variare del rapporto aria-combustibile 146
7.19	Andamento della velocità del kernel a pari regime e diverso rapporto
	aria-combustibile
7.20	Andamento della temperatura del kernel al variare del rapporto aria-
	combustibile
7.21	Volume combusto per diversi λ al variare del tempo
7.22	Volume combusto per diversi λ al variare dell'angolo . $\ .\ .\ .\ .$. 148

Capitolo 1 Introduzione generale

La combustione rappresenta ad oggi il sistema più utilizzato per la produzione di energia elettrica e nel campo dei trasporti. Il successo lo si deve sicuramente alla disponibilità di combustibili fossili a bassi costi, alla possibilità di controllare agevolmente il processo e ai ridotti costi di installazione. Di contro, però, l'uso di combustibili fossili ha ripercussioni negative sulla salute e sull'ambiente in termini di emissioni nocive; tra queste spiccano anidride carbonica CO_2 , ossidi di azoto NO_x e monossido di carbonio CO: mentre queste ultime, data la loro pericolosità per l'uomo, possono essere abbattute agevolmente adottando specifiche soluzioni tecniche (catalizzatori, filtri, ecc.), per quanto riguarda l'anidride carbonica questa è inevitabile e rappresenta la principale fonte del surriscaldamento globale.

Per quanto riguarda strettamente il campo dei trasporti, il motore a combustione interna è la soluzione più largamente diffusa, anche se negli ultimi anni hanno iniziato a farsi strada soluzioni alternative come motori elettrici o ibridi. I motori oggi impiegati si suddividono essenzialmente in due categorie secondo il processo di combustione adottato: da un lato si trovano i Diesel, caratterizzati da una combustione non premiscelata e, dall'altro, quelli Otto o ad accensione comandata, caratterizzati da una combustione in fase premiscelata. Negli ultimi vent'anni si è spinto molto nella direzione di aumentare l'efficienza dei motori, specialmente per quelli Diesel, visto la grande quantità di gasolio disponibile sul mercato; di recente, comunque, anche i motori SI hanno ricominciato ad attirare l'attenzione per una serie di motivi:

- la quantità di gasolio e di benzina estraibili dalla raffinazione del petrolio è praticamente la stessa, quindi un numero simile di veicoli permetterebbe di consumarli entrambi in modo bilanciato;
- I motori Diesel hanno raggiunto un livello di sviluppo tale che ulteriori progressi sono difficili da ottenere, se non con soluzioni complicate ed estremamente complesse (e costose);

• i motori *SI* sono flessibili in termini di combustibili impiegabili e, visto il ridotto rapporto peso/potenza, sono ideali per le soluzioni ibride (motore termico accoppiato con motore elettrico).

Alcune delle possibili soluzioni per l'incremento delle prestazioni dei motori ad accensione comandata riguardano l'impiego dell'iniezione diretta per formare miscele stratificate e bypassare la farfalla ai carichi parziali, utilizzando miscele molto magre o diluite con i gas di scarico: entrambe le soluzioni non sono tuttavia sfruttabili appieno a causa di una serie di fenomeni che portano instabilità nel funzionamento (cioè la variabilità ciclica). Per superare tali difficoltà, un passo fondamentale è una migliore comprensione del processo di accensione e della propagazione del fronte di fiamma: considerando infine che i metodi di indagine sperimentali per studiare la combustione sono limitati e costosi, l'impiego delle simulazioni fluidodinamiche (CFD) come strumento di supporto alla progettazione è sempre più di uso comune.

1.1 Breve richiamo sui motori SI

L'attenzione in questo lavoro è rivolta principalmente al motore ad accensione comandata e, in particolare, ai processi che avvengono durante la fase di accensione, pertanto si ritiene opportuno fare qualche breve richiamo su questi due argomenti.

Il motore ad accensione comandata (*spark ignited*) utilizza una miscela di aria e combustibile premiscelata (generalmente in rapporto stechiometrico, ma che può variare in condizioni particolari) che viene accesa sfruttando la scintilla generata tra gli elettrodi di una candela: la combustione procede poi in modo graduale tramite l'avanzamento di un *fronte di fiamma* che consuma progressivamente la miscela fresca, lasciandosi alla spalle i prodotti della combustione. Molto semplicemente, un processo di combustione normale avviene secondo tre fasi:

- 1. fase di incubazione, durante la quale il primo nucleo di miscela viene acceso dalla scintilla determinando una combustione lenta e graduale;
- 2. fase di combustione turbolenta, durante la quale il fronte di fiamma si espande velocemente, agevolato dalla turbolenza in camera, attraverso l'intera camera;
- 3. fase di completamento della combustione, quando la fiamma raggiunge la parte più lontana della camera arrestandosi.

Questo accade normalmente nel caso in cui le condizioni termodinamiche nella zona di accensione, le caratteristiche della miscela e quelli di accensione siano adeguati; in particolari condizioni, infatti, la combustione può avvenire in maniera anomala generando non pochi problemi: un caso per tutti è rappresentato dalla detonazione o, ancora più grave, dall'autoaccensione (molto rara). Si tratta di forme di combustione anomala che determinano un peggioramento delle prestazioni del motore e che possono portarlo rapidamente alla rottura.

Per quanto detto è evidente il ruolo fondamentale svolto dal *sistema di accensione*: questo deve infatti occuparsi della corretta accensione della miscela, sia in termini di energia necessaria ad avviare la combustione che in termini di fasatura, ossia dell'istante opportuno in cui far avvenire la scintilla.

In generale i sistemi di accensione di possono classificare sulla base della sorgente di alimentazione (alternata, continua o magnetica), del tipo di scarica (TCI o CDI) e infine sulla base del sistema adottato (meccanico o elettronico). Senza entrare troppo nei dettagli, si richiamano giusto le proprietà relative ai due sistemi di accensione più comuni che si incontrano in campo *automotive*, cioè quelli *CDI* e *TCI*.¹



Figura 1.1: Riproduzione schematica di un sistema TCI (a sinistra) e CDI (a destra) di uso comune.

Sistema TCI

I sistemi a scarica induttiva presentano le seguenti caratteristiche:

- elevata induttanza della bobina d'accensione (elevato innalzamento della tensione, questo perché si ha un ingresso a 12 V);
- ridotta velocità di scarica per via dell'induttanza elevata;
- scintilla sugli elettrodi di elevata durata (circa 1000 µs;
- la tensione in ingresso essendo bassa, richiede l'uso di cavi più corti e spessi.

¹Altri dettagli saranno forniti nel capitolo dedicato all'accensione.

Queste caratteristiche rendono questi sistemi di scarica preferibili per i motori che richiedono scariche prolungate e lente, indicate quindi per motori con regimi di rotazione non superiori agli 8000 rpm. Il sistema funziona come un risonatore RLC in serie: facendo passare corrente attraverso una induttanza (avvolgimento primario della bobina d'accensione), questa raggiunge la saturazione del campo magnetico nell'arco di circa 15 ms, pertanto la tensione inizialmente indotta scompare, mentre la corrente elettrica raggiunge il valore di regime a riposo di circa 4 A (il processo si ripete ogni volta che la bobina primaria viene messa in parallelo con la batteria, cioè alla chiusura del ruttore o del transistor). Quando viene richiesta la scintilla la bobina primaria viene scollegata dalla batteria tramite il ruttore e il campo magnetico precedentemente formato si annulla: questo provoca la formazione di tensione sia all'avvolgimento primario sia all'avvolgimento secondario, che è tanto maggiore quanto maggiore è la velocità con la quale il campo magnetico si annulla (per tale motivo viene utilizzato un condensatore in parallelo al ruttore). La tensione ai capi dell'induttanza primaria raggiunge un valore di circa 300 V, mentre l'annullamento del campo magnetico e la mutua induttanza con l'avvolgimento secondario (dimensionato con un rapporto spire $N_2/N_1 \simeq 100$) provoca una tensione sul circuito secondario 100 volte superiore, pari circa a 30 kV: questa risulta quindi sufficiente a generare la scintilla in camera di combustione.

Sistema CDI

Nei sistemi a scarica capacitiva, invece, si hanno:

- bassa induttanza della bobina d'accensione (ridotto innalzamento della tensione, questo perché si ha un ingresso a $400 \div 600$ V);
- elevata velocità di scarica;
- scintilla sugli elettrodi di breve durata (circa 500 µs);
- la tensione in ingresso essendo alta, può consentire l'uso di cavi più lunghi e sottili;
- rapido aumento della tensione sull'avvolgimento secondario della bobina e insensibilità alla resistenza dispersiva (*shunt*) durante la scarica, il che porta ad avere una maggiore precisione e a maggiori scariche al secondo.

Le caratteristiche elencate rendono questi sistemi di scarica preferibili per i motori che richiedono scariche brevi e rapide per via dell'elevato numero di giri, di norma oltre i 10000 rpm. Il sistema può essere visto come un risonatore RLC in parallelo: prima della fase di generazione della scintilla si carica il condensatore e, caricato completamente, si chiude il ruttore, determinando il passaggio di corrente lungo l'induttanza (avvolgimento primario della bobina d'accensione). In queste condizioni si genera immediatamente un picco di tensione ai capi dell'induttanza, che andrà velocemente a stabilizzarsi tramite il fenomeno della sovra-elongazione alla tensione d'alimentazione.

1.2 Struttura della tesi

Essendo concentrata sul fenomeno dell'accensione, la tesi si sviluppa prima in una parte teorica nella quale vengono richiamati alcuni concetti fondamentali e poi introdotti gli aspetti salienti della fisica del fenomeno; la seconda parte è invece dedicata alla presentazione del modello di accensione, alla sua implementazione in un ambiente di simulazione e alla sua validazione tramite la riproduzione di un caso test. Più nel dettaglio, la tesi è così articolata:

- nel capitolo 2 vengono richiamati alcuni concetti e definizioni fondamentali della gasdinamica e della teoria cinetica dei gas, che saranno più volte ripresi nel corso della trattazione, per finire con una breve descrizione delle proprietà relative a particelle elettricamente cariche che si vengono a trovare all'interno di un campo elettrico;
- nel capitolo 3 sono presentati i processi di ionizzazione più comuni e che costituiscono il punto di partenza per la comprensione dei fenomeni inerenti il passaggio di corrente elettrica all'interno di un gas;
- nel capitolo 4 si procede ad un'analisi fisica dettagliata dei diversi fenomeni che vedono la trasformazione di un isolante gassoso in un materiale conduttore: verrà analizzata in dettaglio la fase di *breakdown*, per poi passare alla descrizione dei diversi fenomeni che avvengono in seguito come *arc discharge*, *glow discharge* e *spark discharge*;
- il capitolo 5 è dedicato interamente alla descrizione del processo di accensione. Ad una prima parte teorica, segue la descrizione del modello di accensione utilizzato per le simulazioni;
- nel capitolo 6 viene si fornisce una descrizione generale del software utilizzato per le simulazioni a cui segue la parte centrare riguardante l'implementazione del modello di accensione;
- il capitolo 7 riguarda invece la validazione del modello: dopo aver presentato il caso test di riferimento, verranno riportati i risultati ottenuti e le relative conclusioni.

 $1-Introduzione\ generale$

Capitolo 2 Richiami di gasdinamica

Per comprendere i fenomeni di ionizzazione e quelli che vedono un gas attraversato da corrente, è necessario richiamare alcuni degli aspetti fondamentali della gasdinamica, della teoria cinetica dei gas e delle proprietà delle particelle elettricamente cariche (elettroni e ioni) immerse in un campo elettrico. La descrizione rigorosa di queste ultime, in particolare, richiederebbe l'uso di concetti di meccanica quantistica e statistica, nonché la soluzione dell'equazione cinetica dei gas: dal momento che questo esula dagli scopi di questa tesi, verranno presentate solo le definizioni principali di alcune grandezze che saranno utili più avanti, senza fornire ulteriori approfondimenti.

2.1 Leggi fondamentali della gasdinamica classica

In assenza di campi elettrici o magnetici, le particelle elettricamente cariche presenti in un gas debolmente ionizzato sono soggette ad urti e collisioni: il loro movimento è regolato dalle leggi della teoria cinetica dei gas.

Lo studio del comportamento dei gas venne avviato su basi sperimentali a partire dal XVII secolo. La più antica relazione sui gas, nota come *legge di Boyle e Mariot*te, afferma che per un gas (abbastanza rarefatto) posto a temperatura costante, il prodotto tra pressione p e volume V si mantiene costante:

$$p \cdot V = COST \tag{2.1}$$

Se, invece, sono la pressione o il volume ad essere mantenuti costanti, per il medesimo gas valgono allora le *leggi di Volta e Gay-Lussac*:

$$V_t = V_0 \left(1 + \alpha_0 \cdot t \right) \tag{2.2a}$$

$$p_t = p_0 \left(1 + \beta_0 \cdot t \right) \tag{2.2b}$$

dove t è la temperatura in gradi centigradi, $V_0 e p_0$ sono i valori del volume e della pressione alla temperatura di 0 °C, mentre $V_t e p_t$ quelli corrispondenti alla generica temperatura t. I parametri $\alpha_0 e \beta_0$, approssimativamente uguali per tutti i gas (nell'ipotesi di gas rarefatto), rappresentano rispettivamente i coefficienti di dilatazione ed espansione termica, per i quali vale la relazione:

$$\alpha_0 = \beta_0 = \frac{1}{273.15 \,^{\circ}\text{C}} \tag{2.3}$$

Le relazioni 2.1, 2.2a e 2.2b correlano due a due i parametri di stato p, V e t; tuttavia è facile dimostrare che queste non sono tra loro indipendenti, quindi è possibile esprimerle mediante un'unica relazione nella forma f(p, V, t) = 0, che prende il nome di equazione di stato.



Figura 2.1: Diagramma di Clapeyron per una trasformazione isoterma di un gas rarefatto.

A tal proposito, se si considera lo stato generico C nella trasformazione isoterma AB rappresentata in figura 2.1, applicando la 2.1 al tratto AC si ha:

$$p \cdot V = p_0 \cdot V_0$$

e, tenendo conto della 2.2a, risulta:

$$p \cdot V = p_0 \cdot V_0 \left(1 + \alpha_0 \cdot t \right) \tag{2.4}$$

relazione che correla effettivamente tutte e tre le variabili di stato; riscrivendo ora la 2.4 dopo aver introdotto il volume molare v, definito come il rapporto tra il volume V e la quantità di sostanza n (espresso in mole), cioè $v = \frac{V}{n}$, si ottiene:

$$p \cdot V = p_0 \cdot nv_0 \alpha_0 \left(t + \frac{1}{\alpha_0} \right) \tag{2.5}$$

Dalla legge di Avogadro (volumi uguali di gas nelle stesse condizioni termodinamiche di temperatura e pressione contengono lo stesso numero di molecole) si ha poi che alla temperatura $t_0 = 0$ °C e alla pressione $p_0 = 1$ bar, una mole di qualsiasi gas occupa lo stesso volume, pertanto:

$$v_0 = 22.414 \frac{\mathrm{l}}{\mathrm{mol}} \qquad \Rightarrow \qquad p_0 \cdot v_0 = 22.414 \frac{\mathrm{l}\,\mathrm{bar}}{\mathrm{mol}}$$

Il prodotto $p_0 \alpha_0 v_0$ che compare nella 2.5 si definisce *costante universale dei gas* e vale:

$$R = p_0 \alpha_0 v_0 = 8.314 \frac{\mathrm{J\,K}}{\mathrm{mol}} \tag{2.6}$$

Sostituendo la 2.6 nella 2.5 e ricordando che tra °C e K sussiste la relazione T = t + 273.15, si ottiene infine l'equazione di stato dei gas perfetti:

$$p \cdot V = nRT \tag{2.7}$$

Introducendo il numero di molecole presenti nel gas $N = n \cdot N_A$ con $N_A = 6.02 \times 10^{23} \text{ mol}^{-1}$ numero di Avogadro, la 2.7 può essere espressa in maniera alternativa come:

$$p \cdot V = N K_B T \tag{2.8}$$

dove K_B rappresenta la costante di Boltzmann:

$$K_B = 1.380\,66 \times 10^{-23} \,\frac{\mathrm{J}}{\mathrm{K}} = 8.617\,385 \times 10^{-5} \,\frac{\mathrm{eV}}{\mathrm{K}} \tag{2.9}$$

2.2 Richiami sulla teoria cinetica dei gas

Le relazioni precedenti possono essere ricavate direttamente dalla *teoria cinetica dei* gas, sviluppata da Maxwell e Boltzmann a metà del diciannovesimo secolo. Senza entrare troppo nei dettagli, se ne riportano alcuni aspetti e risultati fondamentali che saranno utili per la comprensione dei concetti che saranno espressi nelle sezioni successive.

Secondo la teoria cinetica, un gas è costituito da un gran numero di particelle microscopiche (atomi o molecole) che si muovono continuamente in modo casuale, casualità derivante dalle collisioni che avvengono tra loro e con le pareti del contenitore che contiene il gas. La teoria cinetica dei gas permette di definire le proprietà macroscopiche del gas (pressione, temperatura, volume, viscosità e conducibilità termica) considerandone la composizione molecolare e il relativo movimento: l'aspetto più rilevante della teoria è che la pressione esercitata da un gas è dovuta all'urto delle particelle contro le pareti e non dalla repulsione statica delle molecole (come ipotizzato da Newton). Le ipotesi fondamentali su cui si basa tale teoria sono:

- 1. il gas è costituito da molecole aventi stessa massa e forma sferica (sono considerate come punti materiali): le dimensioni delle particelle sono trascurabili rispetto al volume del recipiente;
- 2. il numero di molecole è tale da poter applicare metodi statistici;
- 3. le molecole si trovano in uno stato di moto continuo e casuale;
- 4. la distanza tra le molecole è molto maggiore rispetto al loro diametro, pertanto l'interazione tra particelle è trascurabile (eccetto durante un urto);
- 5. le collisioni tra molecole e con le pareti del recipiente si considerano perfettamente elastiche.



Figura 2.2: Modello elementare per il calcolo delle forze molecolari.

Si consideri un cubo di volume $V = L^3$ contenente un gas costituito da N molecole, ciascuna di massa m e con velocità u, come riportato in figura 2.2. Se si indicano con u_x , u_y , u_z le componenti della velocità tali che $u^2 = u_x^2 + u_y^2 + u_z^2$, in seguito ad un impatto tra una molecola che si muove in direzione dell'asse x con la parete YZ, questa rimbalzerà all'indietro con velocità $-u_x$; la variazione di quantità di moto vale allora:

$$\Delta \mathbf{q} = \mathbf{q}_{i,x} - \mathbf{q}_{f,x} = mu_x - (-mu_x) = 2mu_x$$

dove si è indicato con q la quantità di moto della particella e con i e f lo stato prima e dopo la collisione rispettivamente. Se L è la distanza tra due pareti opposte, allora la particella impatterà su ciascuna di esse ogni:

$$\Delta \mathbf{t} = \frac{2L}{u_x}$$

pertanto la forza esercita da tale particella si esprime come:

la 2.10 diventa:

$$F_x = \frac{\Delta \mathbf{q}}{\Delta \mathbf{t}} = \frac{mu_x^2}{L}$$

Considerando ora le N particelle, la forza complessivamente esercitata sulla parete si può esprimere come:

$$\mathbf{F}_{x} = \frac{m}{L} \sum_{i=1}^{N} u_{x,i}^{2}$$
(2.10)

Introducendo il valore quadratico medio della velocità lungo x per tutte le molecole:

$$\overline{u_x^2} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N u_{x,i}^2$$
$$\mathbf{F}_x = \frac{mN}{L} \overline{u_x^2}$$
(2.11)

La 2.11 mette in evidenza come la forza esercitata in una data direzione dipenda esclusivamente dalla componente di velocità in quella stessa direzione, tuttavia è possibile esprimerla in termini di velocità quadratica media totale ricordando l'ipotesi di moto casuale delle particelle; da quest'ultima segue che non esiste una direzione preferenziale, pertanto il valore quadratico medio della velocità è lo stesso in ogni direzione, cioè $\overline{u_x^2} = \overline{u_y^2} = \overline{u_z^2}$, quindi applicando il teorema di Pitagora si trova:

$$\overline{u^2} = \overline{u_x^2} + \overline{u_y^2} + \overline{u_z^2}$$

da cui segue:

$$\overline{u^2} = 3\overline{u_x^2} \tag{2.12}$$

Sostituendo la 2.12 nella 2.11 si risale infine alla generica formulazione della forza esercitata da un gas sulle pareti:

$$\mathbf{F} = \frac{mN}{3L}\overline{u^2} \tag{2.13}$$

Dalla 2.13, ricordando che la pressione esercitata dal gas è data dal rapporto F_A con $A = L^2$, si ha:

$$p = \frac{mN}{3V}\overline{u^2} \tag{2.14}$$

o in termini di energia cinetica media $\overline{\epsilon} = \frac{1}{2}m\overline{u^2}$:

$$p = \frac{2}{3} \frac{N}{V} \overline{\epsilon} \tag{2.15}$$

Confrontando la 2.14 con la 2.8 si ricava:

$$K_B T = \frac{m\overline{u^2}}{3}$$

che permette di esprimere l'energia cinetica media di una molecola come:

$$\overline{\epsilon} = \frac{1}{2}m\overline{u^2} = \frac{3}{2}K_BT \tag{2.16}$$

L'energia cinetica del sistema sarà allora data dal prodotto $\overline{\epsilon} \cdot N$:

$$\epsilon = N \cdot \overline{\epsilon} = \frac{1}{2} N m \overline{u^2}$$

che permette di definire la temperatura cinetica come:

$$T = \frac{2}{3} \frac{\epsilon}{NK_B} = \frac{2}{3} \frac{\overline{\epsilon}}{K_B}$$
(2.17)

2.2.1 Distribuzione di velocità delle molecole

Secondo la teoria cinetica dei gas, tutte le particelle che costituiscono il gas si trovano in uno stato di moto continuo e casuale (questo è vero per temperature superiori allo zero assoluto: se, infatti, nella 2.16 si pone T = 0 K risulta $\bar{\epsilon} = 0$ o, anche, $\overline{u^2} = 0$). Le particelle si muovono secondo traiettorie rettilinee, interrotte però dalle collisioni che avvengono tra le particelle stesse o con un confine fisico: durante ogni collisione si ha un trasferimento di energia cinetica e, di conseguenza, una variazione della direzione del moto.

Misurando la velocità delle particelle in un dato istante, si otterrebbe un ampia gamma di risultati; in ogni momento, infatti, potrebbero esserci particelle che si muovono molto velocemente e altre molto lentamente: dal momento che queste si muovono in ogni direzione, la velocità risultante (che è una quantità vettoriale) potrebbe risultare nulla. Una stima della velocità media delle particelle può essere ricavata a partire dalla 2.16:

$$u_{rms} = \sqrt{\frac{3K_BT}{m}} = \sqrt{\frac{3RT}{M}} \tag{2.18}$$

La 2.18 rappresenta il valore efficace (dall'inglese rms = root mean square) della velocità, dove con $m \in M$ si sono indicate rispettivamente la massa (molecolare) e la massa molare. Attraverso considerazioni di natura statistica è possibile dimostrare che la distribuzione di velocità delle particelle dipende sia dalla temperatura assoluta del sistema che dalla massa delle particelle.

Si consideri a tal proposito un sistema chiuso, costituito da un certo numero di particelle, caratterizzato da un valore prefissato di energia. Se non agiscono forze esterne (cioè non si verificano cambi di temperatura), l'energia complessiva del sistema si deve conservare; d'altro canto, però, questa energia si può distribuire in modo diverso tra le particelle e tale distribuzione cambia costantemente a seguito di ogni collisione che si verifica: se si conoscesse il moto delle particelle, allora sarebbe possibile prevedere la probabilità che queste abbiano una certa velocità ad una data temperatura. Ricordando poi che l'energia cinetica può essere trasferita solo in maniera discreta, si può concludere che in ogni istante ciascuna particella sarà caratterizzata da un valore ben definito di quest'ultima. Ogni trasferimento (discreto) di energia può avvenire secondo qualunque direzione e questo, di fatto, determina la velocità della specifica particella: maggiore sarà l'energia cinetica e maggiore sarà la velocità. Ritenendo allora ugualmente probabili tutti gli stati di velocità, quelli caratterizzati da una maggiore energia cinetica risulterebbero più probabili perché più numerosi. Sebbene stati superiori di velocità siano statisticamente favoriti, quelli a minore velocità hanno tuttavia maggiori probabilità di essere occupati a causa della limitata quantità di energia resa disponibile ad una particella: non si deve trascurare il fatto che in ogni collisione ci sarà una particella che incrementerà la propria energia cinetica e, al contempo, un'altra che la vedrà diminuire.

In quest'ottica, la distribuzione di velocità delle particelle può essere determinata identificando il numero di molecole le cui velocità rientrano in un certo intervallo; tale andamento prende il nome di *distribuzione di Maxwell-Boltzmann* e può essere espressa secondo la seguente:

$$f(u)du = \frac{dN_u}{N} = \frac{4}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{u}{u_P}\right)^2 \left[\exp\left(\frac{u}{u_P}\right)^2\right] \frac{du}{u_P}$$
(2.19)

dove u_P è la velocità più probabile e ${}^{dN_u}/{}_N$ il relativo numero di particelle la cui velocità istantanea cade nell'intervallo ${}^{u}/{}_{u_P}$ e ${}^{u+du}/{}_{u_P}$. Definendo le quantità adimensionali:

$$f\left(\frac{u}{u_P}\right) = \frac{\mathrm{d}N_u}{N}\frac{\mathrm{d}u}{u_P} \qquad u_r = \frac{u}{u_P}$$

ed introducendole nella 2.19 si ottiene la distribuzione di velocità:

$$f(u_r) = \frac{4}{\sqrt{\pi}} u_r^2 \exp\left(-u_r^2\right) \qquad \text{con} \quad \frac{\mathrm{d}N_u}{N} = f(u_r) \,\mathrm{d}u_r \tag{2.20}$$

L'andamento della 2.20 è riportato in figura 2.3; si nota come questa risulti asimmetrica rispetto al valore più probabile di velocità u_P e come un gran numero di particelle abbiano velocità maggiore.



Figura 2.3: Distribuzione di Maxwell-Boltzmann per la velocità delle particelle.

La velocità media \overline{u} può essere ottenuta integrando la 2.20 tra 0 e ∞ :

$$\overline{u_r} = \int_0^\infty u_r f(u_r) \, \mathrm{d}u_r = \frac{4}{\sqrt{\pi}} \underbrace{\int_0^\infty u_r^3 \exp\left(-u_r^2\right) \mathrm{d}u_r}_{\frac{1}{2}} = \frac{2}{\sqrt{\pi}}$$

ottenendo:

$$\overline{u} = \overline{u_r} \cdot u_P = \frac{2}{\sqrt{\pi}} u_P \tag{2.21}$$

Analogamente per il valore efficace:

$$u_{r,rms}^{2} = \int_{0}^{\infty} u_{r}^{2} f(u_{r}) \, \mathrm{d}u_{r} = \frac{4}{\sqrt{\pi}} \underbrace{\int_{0}^{\infty} u_{r}^{4} \exp\left(-u_{r}^{2}\right) \mathrm{d}u_{r}}_{\frac{3}{8}\sqrt{\pi}} = \frac{3}{2}$$

si ricava:

$$u_{rms} = u_{r,rms} \cdot u_P = \sqrt{\frac{3}{2}} u_P \tag{2.22}$$

Confrontando la 2.22 con la 2.18 si ricava infine u_P :

$$u_P = \sqrt{\frac{2K_BT}{m}} = \sqrt{\frac{2RT}{M}} \tag{2.23}$$

che permette di riscrivere la 2.21come:

$$\overline{u} = \sqrt{\frac{8K_BT}{\pi m}} = \sqrt{\frac{8RT}{\pi M}}$$
(2.24)

Utilizzando la 2.23, la 2.19 può essere riscritta come:

$$f(u) = \frac{4}{\sqrt{\pi}} \sqrt{\left(\frac{M}{2RT}\right)^3} u^2 \exp\left(-\frac{Mu^2}{2RT}\right)$$
(2.25)

La relazione 2.25 evidenzia come la velocità dipenda dalla temperatura e dalla massa delle particelle; in particolare si osserva che:



Figura 2.4: Distribuzione di Maxwell-Boltzmann per la velocità delle particelle al variare della temperatura.
- all'aumentare della temperatura, aumenta l'energia cinetica: la distribuzione f(u) tende ad espandersi, spostandone il valore massimo verso destra, come mostrato in figura 2.4;
- un aumento della massa molecolare tende a restringere la distribuzione di velocità, perché le particelle, a parità di temperatura, possiedono la stessa energia cinetica.

Ricordando infine il legame tra velocità ed energia cinetica ($\epsilon = 1/2mu^2$), dalla 2.25 si può ricavare la distribuzione di Maxwell-Boltzmann per ϵ :



Figura 2.5: Distribuzione di Maxwell-Boltzmann per l'energia cinetica al variare della temperatura: gli andamenti si riferiscono alle distribuzioni di velocità riportate in 2.4.

Osservando l'andamento della 2.26 riportato in figura 2.5, si nota immediatamente che questa presenta una lunga coda, cioè si ha che la probabilità di trovare particelle con elevata energia cinetica è sempre più bassa all'aumentare di quest'ultima: l'importanza di questo aspetto sarà messa in evidenza quando verranno introdotti i processi di ionizzazione.

2.2.2 Cammino libero medio $\overline{\lambda}$

Si definisce *cammino libero medio*, indicato generalmente con la lettera $\overline{\lambda}$, la distanza media percorsa da una particella tra due collisioni consecutive, come riportato schematicamente in figura 2.6. In via del tutto generale $\overline{\lambda}$ può essere espresso come:

$$\overline{\lambda} = \frac{\overline{u}}{\nu} \tag{2.27}$$

dove \overline{u} è la velocità media e ν la frequenza di collisione (l'importanza di questo parametro apparirà più chiara nel seguito, quando saranno introdotti i processi di ionizzazione). Per una interpretazione rigorosa della 2.27 sarebbe necessario ricorrere alla meccanica statistica, tuttavia applicando un modello balistico semplificato al caso di un gas perfetto, costituito da particelle omogenee con distribuzione di velocità maxwelliana, si può ricavare una formulazione alternativa alla precedente relazione.

$$\lambda_{1} \qquad \lambda_{2} \qquad \lambda_{i} \qquad \lambda_{i$$

Figura 2.6: Rappresentazione schematica del cammino libero medio λ .

Per rendere la trattazione il più generale possibile, si considera un insieme di molecole (gassose) stazionarie di raggio r_1 e uno strato di particelle più piccole, di raggio r_2 , in movimento, come riportato in figura 2.7.



Figura 2.7: Modello balistico semplificato per il calcolo del cammino libero medio λ .

Come le particelle più piccole si muovono, la loro densità va a diminuire a causa della dispersione subita in seguito alla collisione con le molecole più grandi di gas: se si considerano entrambe come sfere rigide (ipotesi della teoria cinetica dei gas), la collisione avviene ogni volta che i rispettivi centri vengono a trovarsi entro la distanza $r_1 + r_2$. Ogni molecola presenta allora una superficie di collisione pari a $\pi (r_1 + r_2)^2$, pertanto si può definire l'area effettiva di impatto come:

$$A_{eff} = N\pi \left(r_1 + r_2 \right)^2$$

con N il numero di particelle per unità di volume. Considerando uno spessore infinitesimo dx alla distanza x dall'origine ed indicando con n(x) il numero di particelle che hanno percorso la distanza x, si può esprimere la diminuzione di movimento delle particelle più piccole come:

$$dn = -n(x) \cdot N\pi (r_1 + r_2)^2 dx$$
 (2.28)

Se le particelle in ingresso (x = 0) sono n_0 , allora integrando la 2.28 si ottiene:

$$n(x) = n_0 \exp\left[-N\pi \left(r_1 + r_2\right)^2 x\right]$$
 (2.29)

La probabilità quindi che il cammino libero sia pari a x, è uguale alla probabilità che le collisioni avvengano tra $x \in x + dx$; differenziando la 2.29:

$$f(x) = \frac{\mathrm{d}n}{n_0} = N\pi (r_1 + r_2)^2 \exp\left[-N\pi (r_1 + r_2)^2 x\right] \mathrm{d}x$$

il cammino libero medio si può allora esprimere come:

$$\overline{\lambda} = \int_0^\infty x f(x) \, \mathrm{d}x =$$

$$= N\pi (r_1 + r_2)^2 \int_0^\infty x \exp\left[-N\pi (r_1 + r_2)^2 x\right] \mathrm{d}x =$$

$$= \frac{1}{N\pi (r_1 + r_2)^2}$$
(2.30)

Il denominatore che compare nella 2.30 ha le dimensioni di un'area e il termine $\pi (r_1 + r_2)^2$ viene solitamente definito *sezione trasversale di collisione* ed indicato con il simbolo σ , pertanto la precedente si riduce nella:

$$\overline{\lambda} = \frac{1}{N\sigma} \tag{2.31}$$

Alcune osservazioni sulla 2.31 sono d'obbligo:

- per prima cosa si fa notare che il prodotto al denominatore rappresenta l'effettiva sezione trasversale di collisione offerta dalle molecole o dalle particelle, per numero di molecole N nell'unità di volume: se allora si indica con P_i la probabilità che un determinato fenomeno avvenga (ad esempio la ionizzazione), allora la quantità $Q_i = P_i \cdot \sigma N$ rappresenta proprio l'area effettiva (o sezione trasversale) resa disponibile per il dato evento;
- la relazione in questione è stata ricavata facendo l'ipotesi (forte) che le molecole di gas fossero ferme, ma questo nella realtà non è plausibile. Si può dimostrare (tenendo conto della velocità relativa tra le molecole) che il denominatore della 2.31 deve essere moltiplicato per un fattore:

$$\eta = \sqrt{1 + \frac{m_1}{m_2}}$$

dove m_1 e m_2 sono le masse delle particelle coinvolte nella collisione; se nel gas sono presenti *i* molecole diverse, allora la relazione definitiva di λ si esprime come:

$$\overline{\lambda} = \frac{1}{\pi \sum_{i=1}^{n} N_i \left(r_1 + r_i\right)^2 \sqrt{1 + \frac{m_1}{m_i}}}$$
(2.32)

che nel caso di gas ideale omogeneo $(r_1 = r_2 = r, m_1 = m_2)$ si riduce a:

$$\overline{\lambda} = \frac{1}{4\sqrt{2}\pi r^2 N} \tag{2.33}$$

Dalla 2.7 e ricordando che $N = {}^{nN_A}\!/_V$, la 2.33 può essere messa in relazione con temperatura e pressione del gas:

$$\overline{\lambda} = \frac{RT}{4\sqrt{2}\pi r^2 p N_A} \tag{2.34}$$

dalla quale risulta evidente che il cammino libero medio è direttamente proporzionale alla temperatura e inversamente alla pressione.

Come poi sottolineato più volte, $\overline{\lambda}$ dipende dal numero di urti e collisioni che si verificano ma, dal momento che questi costituiscono un fenomeno statistico, ne consegue che $\overline{\lambda}$ avrà una certa distribuzione intorno ad un valore medio. Per il sistema di figura 2.7, il cammino libero medio è definito dalla 2.30 e la distribuzione di $\overline{\lambda}$ si può ottenere a partire dall'integrazione della 2.29:

$$n(x) = \int_{n_0}^{n} \mathrm{d}n = -\int_{0}^{x} \ln \frac{1}{\overline{\lambda}} \mathrm{d}x$$

dalla quale si ottiene:

$$n(x) = n_0 \cdot \exp\left(-\frac{x}{\overline{\lambda}}\right) = n_0 \cdot \exp\left(-N\sigma x\right)$$
(2.35)

dove n(x) corrisponde al numero di particelle che raggiungono la generica coordinata $x \in dn$ è il numero di particelle che collidono da quel punto fino alla distanza dx. L'andamento della distribuzione di $\overline{\lambda}$ è riportato in 2.8: da questa si vede che solo il 37% [16] delle particelle raggiunge la distanza x senza collidere.



Figura 2.8: Distribuzione di $\overline{\lambda}$.

2.2.3 Urti e scambi di energia

Gli urti tra due particelle di massa diversa possono essere di due tipi:

- *elastico*, nei quali si ha solo scambio di energia cinetica;
- *anelastico*, quando una parte dell'energia cinetica posseduta dalla particella incidente viene convertita in energia potenziale della particella ferma o viceversa.



Figura 2.9: Urto elastico tra particelle di massa diversa.

Si consideri il caso di un urto elastico tra una particella di massa m con velocità iniziale u_0 e una di massa M inizialmente ferma, come riportato in figura 3.1. Dopo la collisione le velocità delle due particelle saranno u_1 per quella incidente e v per quella colpita, mentre $\theta \in \psi$ indicano rispettivamente l'angolo di impatto e di dispersione; la perdita di energia (relativa) subita dalla particella incidente si può esprimere come:

$$\Delta\left(\theta\right) = \left(\frac{u_o^2 - u_1^2}{u_0^2}\right) \tag{2.36}$$

Dalla conservazione della quantità di moto e dell'energia risulta:

$$\begin{cases} mu_0 - mu_1 \cdot \cos \psi = Mv \cdot \cos \theta \\ mu_1 \cdot \sin \psi = Mv \cdot \sin \theta \\ \frac{1}{2}mu_0^2 - \frac{1}{2}mu_1^2 = \frac{1}{2}Mv^2 \end{cases} \Rightarrow \qquad V = \frac{2mu_0 \cdot \cos \theta}{M+m}$$
(2.37)

e combinando la 2.37 con la 2.36 si ricava:

$$\Delta\left(\theta\right) = \frac{4mM \cdot \cos\theta}{M+m} \tag{2.38}$$

Se ora si indica con $P(\theta)$ la probabilità che una collisione avvenga in un angolo compreso tra $\theta \in \theta + d\theta$, questa si può esprimere come il rapporto tra la proiezione della sezione trasversale di collisione (area tratteggiata in figura 3.1) e la sezione complessiva, cioè:

$$P(\theta) d\theta = \frac{2\pi (r_1 + r_2)^2 \cdot \sin \theta \cos \theta}{(r_1 + r_2)^2} d\theta = \sin 2\theta d\theta$$

Mediamente, la riduzione di energia subita da una particella ad ogni collisione per ogni valore di θ vale:

$$\overline{\Delta\left(\theta\right)} = \frac{\int_{0}^{\pi/2} P\left(\theta\right) \Delta\left(\theta\right) \,\mathrm{d}\theta}{\int_{0}^{\pi/2} P\left(\theta\right) \,\mathrm{d}\theta} = \frac{2mM}{\left(m+M\right)^{2}}$$
(2.39)

Se si considera un urto tra molecole con massa analoga (ad esempio nel caso di urto ione-atomo neutro), la 2.39 restituisce $\overline{\Delta(\theta)} = 1/2$, che corrisponde ad una notevole perdita di energia; se, invece, la massa della particella incidente è molto più piccola (urto elettrone-atomo neutro), essendo $m \ll M$ risulterà $\overline{\Delta(\theta)} = \frac{2m}{M}$: in questa situazione la perdita di energia è molto contenuta.

Se si considera infine il caso di urto anelastico, dalla conservazione dell'energia e della quantità di moto:

$$\begin{cases} mu_0 = mu_1 + Mv \\ \frac{1}{2}mu_0^2 = \frac{1}{2}mu_1^2 + \frac{1}{2}Mv^2 + U_p \end{cases}$$

è possibile ricavare l'incremento di energia potenziale U_p associato alla particella di massa M:

$$U_p = \frac{1}{2} \left[m \left(u_0^2 - u_1^2 \right) - \frac{m^2}{M} \left(u_0 - u_1 \right)^2 \right]$$
(2.40)

Differenziando rispetto ad u_1 , il massimo trasferimento di energia si ha per:

$$u_1 = \frac{m}{m+M} u_0 \tag{2.41}$$

che sostituita nella 2.40 fornisce l'incremento massimo di U_p nel caso in cui la molecola bersaglio sia inizialmente ferma:

$$U_{p,max} = \frac{M}{m+M} \frac{mu_0^2}{2}$$
(2.42)

Se si considera il caso $m \ll M$, dalla 2.41 risulta che $u_1/u_0 = m/M$, quindi la nuova velocità risulta essere solo una piccola frazione di quella iniziale; sostituendola all'interno della 2.42 si ha:

$$U_{p,max} \simeq \frac{1}{2} \frac{m u_0^2}{2} \qquad \text{con} \qquad u_1 = \frac{m}{M} u_0$$
 (2.43)

cioè l'energia cinetica è quasi interamente convertita in energia potenziale. Questo aspetto sarà di fondamentale importanza per i processi di ionizzazione: se si considera allora che le molecole bersaglio siano costituite da atomi neutri di gas e che le particelle in movimento siano elettroni (con massa pari $m_e = 9.109\,382\,6 \times 10^{-31}\,\text{kg}$), dalla 2.43 si può concludere che quest'ultimi sono i principali responsabili della ionizzazione di un gas, potendo infatti trasferire in modo efficace la propria energia cinetica alla molecola bersaglio.

2.3 Riepilogo

In questo capitolo si è richiamata l'attenzione su alcuni concetti generali riguardanti la gasdinamica. Come detto all'inizio, non si tratta di una trattazione completa dell'argomento, ma fornisce quelle nozioni di base che saranno utili parlando dei processi di ionizzazione. A corredo della trattazione, in appendice A sono poi riportate alcune proprietà e definizioni relative al comportamento di particelle cariche (ioni ed elettroni) che si muovono in un campo elettrico costante: alcune di queste saranno riprese più volte nei capitoli successivi, pertanto si è ritenuto opportuno farne almeno un accenno.

Capitolo 3 Processi di ionizzazione dei gas

Con il termine *ionizzazione* ci si riferisce in generale alla generazione di uno o più ioni in seguito alla rimozione o all'addizione di elettroni da una entità molecolare neutra (cioè atomi o molecole), fenomeno che può essere causato da collisioni tra particelle o per assorbimento di radiazioni. Nel caso specifico di un gas, si parla di ionizzazione quando questo passa dallo stato di isolante a quello di conduttore. I processi di ionizzazione si possono classificare in:

- primari, nei quali gli ioni sono originati a partire dalla stesse molecole di gas;
- *secondari*, nei quali gli ioni sono rilasciati dall'elettrodo caricato negativamente (catodo) e quindi immessi all'interno del gas.

Lo studio dei processi di ionizzazione è fondamentale per la comprensione di quei fenomeni che coinvolgono il passaggio di corrente all'interno di un gas e che saranno trattati approfonditamente nel capitolo successivo.

3.1 Ionizzazione primaria

In condizioni normali di pressione e temperatura, i gas sono degli ottimi isolanti; nel caso dell'aria, ad esempio, la conduzione elettrica è dell'ordine di $10^{-16} \div 10^{-17}$ A m⁻²: questa corrente è dovuta alla presenza di elettroni liberi, prodotti dall'azione della radiazione cosmica e dalla presenza di elementi radioattivi che si trovano sulla Terra o in atmosfera. Se però al gas si applica una certa differenza di potenziale, allora gli elettroni liberi vengono accelerati dal campo elettrico risultante, aumentandone l'energia cinetica: questo comporta un incremento della mobilità degli elettroni che, pertanto, possono collidere con ioni o altre molecole neutre presenti nel gas.

Queste collisioni possono essere espresse secondo specifiche razioni chimiche e si possono classificare secondo tre categorie, come riportato in figura 3.1:

$$\begin{cases} e^- + M \to e^- + M \\ e^- + M \to e^- + M^* & \text{se } \epsilon_e \ge E_{M^*} = eV_{M^*} \\ e^- + M \to 2e^- + M^+ & \text{se } \epsilon_e \ge E_{ion} = eV_{ion} \end{cases}$$
(3.1)

Le 3.1 si riferiscono rispettivamente al caso di urto elastico, di reazione di eccitazione o di ionizzazione: queste ultime, in particolare, rappresentano degli urti anelastici, perché parte dell'energia cinetica dell'elettrone viene ceduta all'atomo neutro per causarne l'eccitazione/ionizzazione.



Figura 3.1: Reazioni di base tra un elettrone e un atomo neutro a fronte di una collisione.

Entrando più nel dettaglio e tenendo presente quanto introdotto nel capitolo precedente a proposito del tipo di collisioni e delle loro proprietà, si può dire che:

- *urti elastici*: sono i più semplici da comprendere e rappresentano la forma più comune di urto che si possa verificare per ogni valore di energia cinetica dell'elettrone incidente. Come già detto in precedenza, durante un simile urto l'elettrone e l'atomo neutro si comportano essenzialmente come delle sfere rigide: data l'elevata velocità dell'elettrone e vista la sua ridotta massa, esso subisce semplicemente una variazione di traiettoria, con un minimo scambio di energia (figura 3.1a);
- collisioni eccitanti: rappresentano un tipo di collisione anelastico durante la quale parte dell'energia posseduta dall'elettrone viene trasferita alla molecola neutra, portandola ad uno stato energetico più elevato (figura 3.1b). Per comprendere questo concetto, che sarà più volte richiamato, si può pensare all'atomo come ad un nucleo compatto costituito da neutroni e protoni, circondato da una serie di gusci (più correttamente definiti orbitali) contenenti un certo numero di elettroni; l'energia di questi ultimi è quantizzata, cioè può assumere solo valori discreti ed esistere quindi in un ben preciso livello energetico: tutti gli stati energetici al di sopra dello stato di base si considerano come stati di eccitazione (figura 3.2).



Figura 3.2: Rappresentazione schematica dei livelli energetici di un atomo neutro.

In seguito alla collisione, se l'energia dell'elettrone ϵ_e è superiore a quella di eccitazione $E_{M^*} = eV_{M^*}$ dell'atomo (con V_{M^*} il *potenziale di eccitazione*), questo viene eccitato e portato ad un livello energetico superiore. Gli atomi possono conservare questo stato di eccitazione solo per un certo tempo, trascorso il quale ritornano al livello energetico di base, liberando l'energia in eccesso sotto forma di radiazione luminosa (fotone) e che costituisce la forma visibile della scarica (se la lunghezza d'onda è chiaramente nel campo del visibile): questo aspetto, come si vedrà, sarà di fondamentale importanza perché i fotoni emessi parteciperanno ai processi di ionizzazione. Esistono infine elementi che conservano il loro stato eccitato per tempi superiori (anche di secondi), definiti *metastabili*: indicati in generale con M^m , sono di fondamentale importanza perché risultano essere estremamente reattivi e partecipano attivamente ai processi che portano alla formazione della scarica.

• collisioni ionizzanti: si tratta di collisioni nelle quali l'atomo neutro colpito viene trasformato in un ione positivo con conseguente liberazione di un secondo elettrone (figura 3.1c). Le reazioni di ionizzazione avvengono solo per elevati valori di energia cinetica e tali che $\epsilon_e \geq E_{ion} = eV_{ion}$, con V_{ion} il potenziale di ionizzazione; ricordando poi che un elettrone accelerato da un campo elettrico esterno subisce una variazione di energia cinetica che dipende da E e dal cammino medio, si può scrivere:

$$\Delta \epsilon_e = eE\overline{\lambda_e} \propto \frac{E}{p} \ge E_{ion} = eV_{ion} \tag{3.2}$$

Se la 3.2 è verificata, si assiste ad una moltiplicazione del numero di elettroni liberati che possono partecipare ad ulteriori collisioni, portando rapidamente alla ionizzazione del gas.

In generale queste collisioni sono di natura probabilistica, dipendono dall'effettiva sezione trasversale di collisione e avvengono solo per determinati valori di energia cinetica: maggiore è il suo valore e maggiore risulta essere la probabilità che le collisioni portino alla ionizzazione delle particelle neutre.

3.1.1 Ionizzazione elettronica – Il processo α

Il contributo principale alla comprensione del fenomeno della ionizzazione si deve al lavoro svolto da Townsend tra fine '800 e i primi del '900, che per primo misurò l'andamento della corrente circolante tra due elettrodi, con in interposto un gas, quando a questi veniva applicata una certa differenza di potenziale [38].



Figura 3.3: Caratteristica tensione-corrente rilevata sperimentalmente da Townsend nel caso di elettrodi piani e paralleli soggetti ad una differenza di potenziale crescente.

Townsend osservò come, inizialmente, la corrente aumentasse in maniera proporzionale con la differenza di potenziale applicata, fino ad assumere un valore costante pari alla corrente di saturazione i_0 , quella cioè prodotta dalla circolazione degli elettroni liberi presenti nel gas (o la corrente prodotta per effetto fotoelettrico, nel caso in cui il catodo fosse irradiato da luce ultravioletta); superato un verto valore di tensione V_2 , la corrente cresceva con andamento esponenziale, come riportato schematicamente in figura 3.3. Townsend concluse che l'aumento delle corrente era dovuto alla ionizzazione subita dal gas a seguito degli urti tra gli elettroni, liberati dal catodo ed accelerati dal campo elettrico, e gli atomi neutri presenti in quest'ultimo. Per descrivere in modo accurato il fenomeno, occorre introdurre il concetto di *frequenza di collisione* ν , cioè il numero di collisioni per unità di tempo a cui è soggetto un elettrone;¹ formalmente questa è esprimibile mediante la seguente relazione:

$$\nu = \frac{N \int f(\epsilon_e) \,\sigma(\epsilon_e) \,v \,\mathrm{d}\epsilon_e}{\int f(\epsilon_e) \,\mathrm{d}\epsilon_e} \tag{3.3}$$

dove si è indicato con $f(\epsilon_e)$ la funzione di distribuzione dell'energia (2.26), con $\sigma(\epsilon_e)$ la sezione trasversale di collisione, con v la velocità degli elettroni e con N il numero di elettroni per unità di volume. La 3.3 ha valenza generale, in quanto considera ogni tipo di collisione; considerando allora solo quelle associate alla ionizzazione, si deve sostituire a $\sigma(\epsilon_e)$ la sezione trasversale di ionizzazione effettiva $\sigma_{ion}(\epsilon_e) = P_{ion} \cdot \sigma(\epsilon_e)$, che permette di riscrivere la 3.3 in termini di frequenza di ionizzazione ν_{ion} :

$$\nu_{ion} = N \cdot \frac{\int f(\epsilon_e) \,\sigma_{ion}(\epsilon_e) \,v \,\mathrm{d}\epsilon_e}{\int f(\epsilon_e) \,\mathrm{d}\epsilon_e} \tag{3.4}$$

La 3.4 corrisponde al numero di elettroni prodotti dall'azione di un singolo elettrone libero nell'unità di tempo. Tuttavia, come è stato evidenziato più volte, la ionizzazione è un fenomeno del tutto casuale, pertanto la probabilità che questa avvenga dipende dal valore effettivo della sezione trasversale di ionizzazione che, a sua volta, è funzione dell'energia cinetica degli elettroni: σ_{ion} viene misurato sperimentalmente e presenta un andamento del tipo riportato in figura 3.4.

Osservando infine che il rapporto tra i due integrali che compaiono nella 3.4 non è altro che il valore medio del prodotto $\sigma_{ion}v$, quest'ultima si può scrivere come:

$$\nu_{ion} = N \cdot \langle \sigma_{ion} v \rangle = N \cdot k_{ion} \tag{3.5}$$

con k_{ion} la costante di velocità di ionizzazione (m³ s⁻¹). Avendo introdotto la frequenza di ionizzazione, la velocità con cui si formano nuovi elettroni liberi si può esprimere come prodotto di questa per il numero di elettroni liberi:

$$\frac{\mathrm{d}n_e}{\mathrm{d}t} = \nu_{ion} \cdot n_e \tag{3.6}$$

Nell'ipotesi che n_e cresca costantemente, in quanto ogni collisione ionizzante genera un nuovo elettrone libero, e assumendo ν_{ion} costante, l'integrazione della 3.6 permette di ottenere l'andamento temporale di n_e :

$$n_e(t) = n_{e,0} \cdot \exp\left(\nu_{ion}t\right) \tag{3.7}$$

La 3.7 descrive una crescita del numero di elettroni liberi nel tempo (e indirettamente della corrente) di tipo esponenziale, fenomeno che prende il nome di *electron avalanche* (letteralmente cascata di elettroni).

¹Da qui in avanti con il pedice $_e$ si indicheranno le grandezze fisiche relative ai soli elettroni.



Figura 3.4: Andamento di σ_{ion} al variare dell'energia cinetica degli elettroni e relativa probabilità di ionizzazione da impatto.

Questa proliferazione non avviene solo nel tempo, ma anche nello spazio; più precisamente si osserva una propagazione lungo la direzione di deriva (drift) degli elettroni liberi prodotti in seguito ad una collisione. Risulta allora conveniente descrivere il fenomeno non in termini di frequenza, ma attraverso un *coefficiente di ionizzazione* α , espresso dalla seguente relazione:

$$\alpha = \frac{\nu_{ion}}{v_d} \tag{3.8}$$

dove v_d è la velocità di deriva (*drift velocity*). La costante α prende il nome di *primo* coefficiente di ionizzazione di Townsend e rappresenta, formalmente, il numero di elettroni prodotti per unità di lunghezza $(1 \text{ cm})^2$ da un elettrone libero che si muove lungo la direzione del campo E.³

Si consideri, a tal proposito, un volume di controllo dx tra due elettrodi posti alla distanza d e separati da un gas, come riportato in figura 3.5; indicando con $n_{e,x}$ e con $n_{e,x+dx}$ rispettivamente gli elettroni in ingresso e in uscita dal volume, per continuità deve risultare:

$$n_{e,x+\mathrm{d}x} - n_{e,x} = n_{e,gen} \tag{3.9}$$

²L'uso dei cm è una convenzione standard, ma del tutto arbitraria: α può essere espresso in qualunque scala di lunghezza.

³Si fa notare che le caratteristiche del processo di ionizzazione sono descritte in modo completo e preciso dalla frequenza ν_{ion} , direttamente collegata alla distribuzione di energia e alla velocità di deriva; α è, invece, una grandezza derivata utile per descrivere il fenomeno, in quanto più facilmente misurabile sperimentalmente.



Figura 3.5: Rappresentazione schematica di un circuito DC e relativo volume di controllo per la determinazione della cascata di elettroni.

dove $n_{e,gen}$ è il numero di elettroni creati o distrutti. Dalla definizione di α segue che nel tratto dx un singolo elettrone genera α nuovi elettroni, pertanto si ha:

$$n_{e,qen} = \alpha \cdot n_{e,x} \mathrm{d}x \tag{3.10}$$

Sviluppando in serie di Taylor il termine $n_{e,x+dx}$:

$$n_{e,x+\mathrm{d}x} \simeq n_{e,x} + \frac{\partial n_{e,x}}{\partial x}\mathrm{d}x$$

e sostituendolo nella 3.9 insieme alla 3.10 si ricava:

$$n_{e,x} + \frac{\partial n_{e,x}}{\partial x} dx - n_{e,x} = \alpha \cdot n_{e,x} dx \qquad \Rightarrow \qquad \frac{dn_{e,x}}{dx} = \alpha n_{e,x}$$
(3.11)

La 3.11 può essere facilmente integrata, ottenendo:

$$n_e(x) = n_e(0) \cdot \exp(\alpha x) \tag{3.12}$$

che è formalmente identica alla 3.6 e descrive ugualmente la cascata di elettroni, ma in termini spaziali. In termini di corrente la precedente diventa:

$$i_e(x) = i_e(0) \cdot \exp(\alpha x) \tag{3.13}$$

dove si è indicato con $i_e(0) = e \cdot n_e(0)$ la corrente in uscita dal catodo. Integrando la 3.13 sulla distanza d si ricava infine la corrente all'anodo, che vale pertanto:

$$i_{anodo} = i_e \left(0 \right) \cdot \exp\left(\alpha d \right) \tag{3.14}$$

Il termine $\exp(\alpha d)$ rappresenta il fattore moltiplicativo della cascata, cioè il numero di elettroni prodotti a partire da un solo elettrone libero che si muove dal catodo all'anodo sotto l'influenza del campo E. Il coefficiente α può essere ricavato sperimentalmente osservando che, in condizioni stazionarie, il numero di ioni positivi che raggiungono il catodo è lo stesso di quello degli elettroni che raggiungono l'anodo, pertanto si può assumere che la corrente in tutto il circuito sia circa la stessa,⁴ cioè $i \simeq i_{catodo} \simeq i_{anodo}$ con i_{anodo} data dalla 3.13. Se quindi si misura *i* al variare di *d*, riportando l'andamento di ln (*i*) in funzione di *d* per valori costanti del campo *E*, il coefficiente α è dato dalla pendenza della retta:

$$\ln\left(i\right) = \alpha \cdot d + C \tag{3.15}$$

dove C è una generica costante. Richiamando l'attenzione su quanto messo in evidenza nelle sezioni precedenti, e cioè che:

- per un dato gas a temperatura costante, l'aumento di energia cinetica $\Delta \epsilon_e$ dipende esclusivamente dal rapporto $^{E}/_{p}$, come riportato dalla 3.2;
- per data distribuzione di energia $f(\epsilon)$, la probabilità che la ionizzazione abbia luogo dipende dalla pressione del gas.

si può concludere che la probabilità di ionizzazione dipende da quanto gli elettroni risultino accelerati (cioè dall'intensità del campo elettrico E) e dalla disponibilità di molecole neutre nel gas (che dipende dalla densità ρ e, quindi, dalla pressione p); dal momento che la distribuzione di energia, la velocità di deriva e l'energia cinetica media degli elettroni sono funzioni del rapporto E/p, allora per come è stato definito α , si può assumere una legge simile a quella per ν_{ion} , cioè:

$$\frac{\alpha}{p} = f\left(\frac{E}{p}\right) \tag{3.16}$$

Tenendo in considerazione quest'ultima, è possibile ricavare una formulazione alternativa per la 3.15, che diventa pertanto:

$$\ln\left(i\right) = \left(\frac{\alpha}{p}\right)p \cdot d + C \tag{3.17}$$

In questo modo α può essere ricavato attraverso variazioni di p (invece che d), mantenendo costante il rapporto E/p, come riportato in figura 3.6.

I valori di α per alcuni gas, ottenuti secondo la procedura ora descritta, sono riportati nella figura 3.7.

⁴Questo non è del tutto esatto; gli ioni che si formano durante il processo di ionizzazione, essendo più pesanti, si muovono più lentamente degli elettroni pertanto tendono ad accumularsi e ad alterare la differenza di potenziale tra gli elettrodi: ciò provoca una lieve distorsione del campo elettrico, specialmente per bassi valori di corrente, dal momento che E = V/d.



Figura 3.6: Andamento qualitativo della corrente i per diversi valori costanti del rapporto E/p.



Figura 3.7: Coefficienti di ionizzazione al variare del rapporto E/p, per gas molecolari (a sinistra) e inerti (a destra). Tratto da [27].

Per una formulazione rigorosa del coefficiente di ionizzazione si dovrebbe conoscere la relazione tra $\alpha \in \sigma_{ion}$ (il cui andamento, riportato in figura 3.4, è ottenuto sperimentalmente utilizzando dei fasci di elettroni monoenergetici), ma questo richiede che la funzione di distribuzione dell'energia degli elettroni all'interno del gas sia nota; ritenendo valida l'ipotesi di sciame per il gas, allora questa si può esprimere mediante la relazione proposta da Raether [25]:

$$\frac{\alpha}{N} = \frac{1}{v_d} \int_0^\infty u \sigma_{ion} \left(u \right) f\left(u \right) \, \mathrm{d}u$$

dove N, v_d e f(u) hanno il consueto significato. Considerando valida la relazione 2.35 per la distribuzione del cammino medio $\overline{\lambda}$ degli elettroni, se si assume che tutti gli elettroni con energia $\Delta \epsilon \geq E_{ion}$ provochino la ionizzazione delle molecole di gas e che la distribuzione di $\overline{\lambda}$ non venga alterata dalla componente aggiuntiva di velocità dei nuovi elettroni prodotti, si può scrivere (tralasciando la dimostrazione):

$$\frac{\alpha}{p} = \frac{\sigma_{ion}}{K_B T} \exp\left(-\frac{\sigma_{ion}}{K_B T} \frac{V_{ion} p}{E}\right) = A_{(T)} \exp\left[-\frac{pB_{(T)}}{E}\right]$$
(3.18)

dove i coefficienti $A_{(T)}$ e $B_{(T)}$ dipendono dal tipo di gas e dalle condizioni in cui questo si trova. In generale per lo studio dei fenomeni legati alla ionizzazione, al posto della 3.18, si utilizza la relazione di natura empirica suggerita da Townsend:

$$\alpha = Ap \exp\left(-\frac{pB}{E}\right) \tag{3.19}$$

in cui $A \in B$ sono delle costanti specifiche per ogni gas ricavabili in letteratura, come riportato in figura 3.8. Questi non permettono di definire la dipendenza tra $\alpha/_p \in E/_p$ in tutto il suo range in quanto per la loro determinazione non sono stati considerati alcuni fenomeni che, altrimenti, influenzerebbero il processo di ionizzazione. Infine occorre osservare che raramente i valori delle due costanti corrispondono ai reali valori misurati sperimentalmente: questa discrepanza la si deve all'ipotesi che tutti gli elettroni con $\epsilon_e \geq E_{ion} = eV_{ion}$ causino automaticamente la ionizzazione del gas. Questo nella realtà non accade perché, come si è visto, il fenomeno dipende dall'effettiva sezione trasversale di ionizzazione σ_{ion} che, a sua volta dipende dall'energia associata agli elettroni (come riportato in figura 3.4): questa presenta un andamento crescente fino ad un massimo, e poi decrescente all'aumentare dell'energia.

3.1.2 Fotoionizzazione

Gli elettroni con energia inferiore a quella di ionizzazione, possono comunque eccitare una molecola di gas portandola ad un livello energetico superiore, come messo in evidenza dalla seconda delle 3.1; questa può essere convenientemente riscritta come:

$$M + e^- + \epsilon \to M^* + e^- \tag{3.20}$$

dove ϵ rappresenta la quantità di energia cinetica trasferita e M^* lo stato eccitato della molecola di gas. In generale un atomo può conservare questo stato di eccitazione per periodi estremamente brevi (dell'ordine dei $10^{-7} \div 10^{-10}$ s) prima di tornare nel proprio stato iniziale: quando ciò accade, l'energia in eccesso viene espulsa sotto

Gas	Α	В	E/p	C	D	E/p <
	cm ⁻¹ Torr ⁻¹	V/(cm · Torr)	V/(cm · Torr)	cm ⁻¹ Torr ⁻¹	$V/(cm \cdot Torr)^{1/2}$	V/(cm · Torr)
He	3	34	20-150	4.4	14	100
Ne	4	100	100-400	8.2	17	250
Аг	12	180	100-600	29.2	26.6	700
Kr	17	240	100-1000	35.7	28.2	900
Xe	26	350	200-800	65.3	36.1	1200
Hg	20	370	150-600			
H ₂	5	130	150-600			
N ₂	12	342	100-600			
N ₂	8.8	275	27-200			
Air	15	365	100-800			
CO_2	20	466	500-1000			
H ₂ O	13	290	150-1000			

3.1 – Ionizzazione primaria

Figura 3.8: Costanti $A \in B$ per il calcolo del coefficiente di ionizzazione e relativo campo di applicazione. Tratto da [27].

forma di radiazione luminosa. Ricordando che l'energia associata ad un fotone è data dalla seguente:

$$E_{fot} = h\nu = \frac{hc_0}{\lambda}$$

dove si è indicato con $h = 4.135667 \times 10^{-15} \,\mathrm{eV \, s^{-1}}$ la costante di Planck, con ν la frequenza della luce espressa in Hz, con $c_0 = 299792458 \,\mathrm{m \, s^{-1}}$ la velocità della luce e con λ la sua lunghezza d'onda; la precedente reazione si può allora esprimere secondo la relazione:

$$M^* \to M + E_{fot} \tag{3.21}$$

A questo punto il fotone liberato può ionizzare un secondo atomo neutro in accordo con la:

$$M + h\nu \to M^+ + e^- \quad \text{se } h\nu \ge E_{ion}$$

$$(3.22)$$

che definisce il processo di ionizzazione per mezzo di un fotone, pertanto il fenomeno è noto come *fotoionizzazione*.

Rimane da stabilire se questa sia effettivamente rilevante oppure no. Dalla precedente relazione risulta che la ionizzazione avviene solo per lunghezze d'onda molto corte, infatti si ha:

$$h\nu \ge eV_{ion} \quad \Rightarrow \qquad \lambda \le \frac{hc_0}{eV_{ion}}$$
(3.23)

Se si considera, ad esempio, la luce emessa da una lampada QTH (lampada alogena quarzo-tungsteno), questa presenta una lunghezza d'onda di 145 nm, a cui corrisponde un'energia di ionizzazione di $eV_{ion} = 8.5 \,\text{eV}$, più bassa di quella della maggior parte dei gas: in generale la probabilità che la fotoionizzazione avvenga è molto bassa e risulta massima quando $h\nu - eV_{ion} \simeq (0.1 \div 1) \,\text{eV}$.

Occorre tuttavia osservare che la ionizzazione può non avvenire direttamente, ma procedere per *step*:

- in una prima fase, un atomo neutro può assorbire l'energia E_{fot} , raggiungendo così uno stato energetico più elevato: in questi casi si parla in generale di fotoeccitazione;
- in seguito ad una seconda collisione si ha un ulteriore scambio di energia che porta alla ionizzazione, che risulta possibile in quanto E_{ion} risulta notevolmente ridotta a seguito della prima fase.

Si può pertanto concludere che, nelle giuste condizioni, la fotoionizzazione può giocare un ruolo importante: come si vedrà, così sarà quando si introdurranno i processi di ionizzazione secondari e i fenomeni di *breakdown*.

3.1.3 Ionizzazione termica

Con il termine *ionizzazione termica* si fa riferimento a quei fenomeni ionizzanti che coinvolgono collisioni molecolari, radiazioni e collisioni elettroniche all'interno di un gas ad elevata temperatura. Se un gas viene infatti scaldato fino a temperature sufficientemente elevate, la sua energia cinetica aumenta in accordo con la 2.16: questo comporta un aumento della velocità delle molecole che possono entrare in collisione con altri atomi o molecole neutre e provocarne la ionizzazione.

Nello studio della ionizzazione ad elevata temperatura si devono tenere in considerazione i fenomeni di *ricombinazione* che hanno luogo tra elettroni e ioni, pertanto si riportano alcuni dei concetti fondamentali senza, tuttavia, entrare nel dettaglio dell'argomento. In generale, l'energia potenziale e cinetica derivanti dalla ricombinazione sono rilasciate sotto forma di radiazione luminosa, secondo le relazioni:

$$\begin{cases} M^+ + e^- \to M + h\nu \\ M^+ + e^- \to M^m + h\nu \end{cases}$$
(3.24)

che definiscono un processo noto come ricombinazione radiante. Può verificarsi anche il caso in cui sia coinvolto un terzo elemento X che assorbe l'energia in eccesso; in tal caso la precedente può essere espressa secondo le:

$$\begin{cases} M^{+} + X + e^{-} \to M^{*} + X \to M + X + h\nu \\ M^{+} + e^{-} + e^{-} \to M^{*} + e^{-} \to M + e^{-} + h\nu \end{cases}$$
(3.25)

valide rispettivamente nel caso in cui il terzo elemento sia una molecola o un elettrone. Ad elevata pressione (e temperatura) hanno inoltre luogo processi di ricombinazione che coinvolgono ioni di carica opposta: si parla, pertanto, di *ricombinazione ionica*. Se la concentrazione di ioni positivi e negativi è la stessa, allora la velocità di ricombinazione può esprimersi come:

$$\frac{\mathrm{d}n_+}{\mathrm{d}t} = \frac{\mathrm{d}n_-}{\mathrm{d}t} = -\beta n_+ n_- \tag{3.26}$$

dove β rappresenta il *coefficiente di ricombinazione*, che può essere determinato sperimentalmente; assumendo che $n_+ \simeq n_- = n_i$, integrando la 3.26 si può ricavare la variazione di concentrazione degli ioni nel tempo:

$$n_i(t) = \frac{n_i(0)}{1 + n_i(0)\,\beta t} \tag{3.27}$$

In condizioni di equilibrio termodinamico la velocità di formazione dei nuovi ioni deve uguagliare quella di ricombinazione; ritenendo valida tale ipotesi, una relazione tra il grado di ionizzazione θ , definito come il rapporto tra il numero di particelle ionizzate n_i e il numero complessivo $n = n_i + n_n$ (dove n_n rappresenta il numero le particelle neutre), è stata fornita da Saba [30]:

$$\frac{\theta^2}{1-\theta^2} = \frac{1}{p} \frac{(2\pi m_e)^{3/2}}{h} \left(K_B T\right)^{5/2} \exp\left(-\frac{eV_{ion}}{K_B T}\right)$$
(3.28)

dove p è la pressione espressa in Torr. La 3.28 mette in evidenza come il grado di ionizzazione sia trascurabile alle basse temperature: sostituendo alle relative variabili i corrispondenti valori numerici, si ricava che θ assume rilevanza per temperature dell'ordine dei $10^3 \div 10^4$ K. La ionizzazione termica risulta predominante nei processi di combustione o nel caso di archi elettrici in condizioni di elevata pressione (cioè in presenza di plasmi di tipo *thermal*).

3.1.4 Processi secondari

Esistono ulteriori processi di ionizzazione che possono essere più o meno rilevanti a seconda delle condizioni in cui si trova il gas, pertanto se ne fornisce solo un breve accenno.

Interazione tra particelle metastabili e atomi neutri

Gli atomi metastabili, introdotti all'inizio del capitolo, possono conservare il loro stato eccitato più a lungo, inoltre possedendo un'energia potenziale relativamente elevata possono portare a ionizzazione altri atomi neutri a fronte di un impatto, a patto che l'energia del metastabile E_M sia maggiore dell'energia di ionizzazione dell'atomo neutro; in questo caso la reazione si può esprimere mediante la:

$$M^m + X \to M^+ + X + e^-$$

mentre, in caso contrario, si avrebbe la semplice eccitazione del secondo atomo secondo la $M^m + X \rightarrow M + X^*$. L'interazione può anche coinvolgere due atomi metastabili, portando alla reazione:

$$M^m + M^m \to M^+ + M + e^- + \epsilon$$

che però risulta rilevante solo quando la loro concentrazione è elevata; infine un'ulteriore reazione può seguire la seguente:

$$\begin{cases} M^m + 2M \to M_2^* + M \\ M_2^* \to M + M + h\nu \end{cases}$$

nella quale il fotone emesso non possiede sufficiente energia da produrre ulteriori ionizzazioni, ma può contribuire all'emissione secondaria di elettroni da parte del catodo. In generale la ionizzazione da metastabili può essere trascurata in quanto avviene con tempi molto superiori alla normale durata di una scarica elettrica, mentre può assumere un ruolo importante nel caso di miscele di gas.

Ionizzazione di Penning

Per alcune particolare miscele di gas, generalmente composte da due elementi, la ionizzazione può avvenire tramite l'interazione di atomi neutri. Si parla di *ionizza-zione di Penning* e prevede la collisione tra un atomo eccitato di una specie con uno neutro di un'altra, secondo la relazione:

$$M + X^* \to M^+ + X + e^-$$

la quale può avvenire esclusivamente nel caso in cui risultino verificate entrambe le condizioni $E_{ion,X} > E_{ion,M}$ e $E_{ion,X}^* \ge E_{ion,M}$, cioè che l'energia di ionizzazione associata sia allo stato neutro della specie X e allo stato metastabile X^{*} si mantenga superiore a quella della specie M. La ionizzazione di Penning è assolutamente trascurabile in normali condizioni, mentre non lo è in caso di campi elettrici deboli applicati a particolari miscele, note come gas di Penning, che comprendono Ne, Ar, Kr, Xe o He.

Attachment/detachment elettronico

Alcuni atomi e molecole allo stato gassoso, possono facilmente acquisire un elettrone libero e formare uno ione negativo stabile. I gas, atomici o molecolari, che mostrano questa tendenza sono quelli che presentano una vacanza di uno o due elettroni nell'orbitale più esterno: tali gas sono convenzionalmente indicati come *elettronegativi* e tra questi si trovano ad esempio O, O_2, H, H_2O, Hg, Cs e gli alogeni.

Affinché uno ione negativo possa rimanere nella sua forma stabile per un certo tempo, occorre che l'energia complessiva sia inferiore a quella che l'atomo possederebbe allo stato fondamentale. L'ammontare di energia scambiata, rilasciata o assorbita, quando un elettrone è aggiunto ad un atomo neutro isolato in fase gassosa per formare uno ione gassoso si definisce *affinità elettronica* e viene misurata in kJ mol⁻¹. L'energia in questione viene quindi rilasciata sotto forma di radiazione luminosa (fotone) o energia cinetica.

Gli ioni negativi si possono formare in diversi modi:

• il meccanismo più semplice prevede che in seguito alla cattura di un elettrone si abbia l'emissione di un fotone, cioè:

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

• un altro prevede che l'energia in eccesso sia trasferita ad un terzo elemento sotto forma di energia cinetica, ovvero:

$$M + X + e^- \rightarrow M^- + (X + \epsilon)$$

• un terzo, comune nei gas molecolari, in cui l'energia rilasciata è utilizzata per separare una molecola in un atomo neutro e in uno ione negativo:

$$MX + e^- \leftrightarrow (MX^-)^* \leftrightarrow M^- + X$$

• la molecola intermedia $(MX^{-})^{*}$ nella relazione precedente si trova ad un livello energetico più elevato, pertanto in seguito ad una collisione con un altra particella questa energia può essere trasferita come energia cinetica e/o potenziale, secondo la:

$$(MX^{-})^{*} + M \leftrightarrow (MX^{-})^{-} + M + \epsilon + U_{p}$$

• si hanno infine processi che prevedono la separazione di una molecola in due ioni, con rilascio di un elettrone:

$$MX + e^- \leftrightarrow M^+ + X^- + e^-$$

e la formazione di una coppia di ioni in seguito al trasferimento di carica per l'impatto tra due atomi, secondo la:

$$M + X \to M^+ + X^-$$

L'aspetto fondamentale da tenere in considerazione è che tutte le reazioni precedenti sono reversibili, pertanto possono portare al processo inverso di *detachment elettronico* con conseguente rilascio di elettroni all'interno del gas.

Questi fenomeni possono essere descritti analogamente a quanto visto per i processi di ionizzazione elettronica, introducendo cioè una sezione trasversale σ_A per valutare la probabilità di formazione di ioni negativi. Complessivamente la rimozione elettronica può essere espressa tramite una relazione simile alla 3.14; definendo il coefficiente di attachment η come fatto per α , la riduzione di corrente a causa di questi fenomeni vale pertanto:

$$i_A = i_e \left(0 \right) \cdot \exp\left(-\eta d \right) \tag{3.29}$$

Combinando tra loro la 3.29 e la 3.14 si ottiene infine l'espressione complessiva della corrente all'anodo:

$$i_{anodo} = i_e(0) \cdot \left[\frac{\alpha}{\alpha - \eta} \exp\left[\left(\alpha - \eta\right)d\right] - \frac{\eta}{\alpha - \eta}\right]$$
(3.30)

che si riduce alla 3.14 per $\eta \to 0;$ se invece η è rilevante, allora la corrente risulta ridotta in intensità.

Diffusione

In presenza di una non uniforme distribuzione di ioni, si assiste ad una loro progressiva migrazione da zone a maggior concentrazione verso zone dove questa è inferiore: il processo, che conduce all'equilibrio, è noto come *diffusione* ed è responsabile dei fenomeni di deionizzazione che avvengono dove le concentrazioni sono maggiori e di ionizzazione dove sono minori. Il moto delle particelle per effetto di un gradiente di concentrazione è simile a quello di drift all'interno di un campo elettrico, e si può esprimere secondo la seguente relazione:

$$\Gamma = -D\frac{\mathrm{d}n}{\mathrm{d}x} \tag{3.31}$$

dove D rappresenta il coefficiente di diffusione e che può essere espresso come $D = \overline{\lambda} \cdot \overline{u}/_3$; la variazione della concentrazione di particelle è quindi esprimibile dall'equazione di diffusione:

$$\frac{\mathrm{d}n}{\mathrm{d}t} = D\frac{\mathrm{d}^2n}{\mathrm{d}x^2} \tag{3.32}$$

Nella maggioranza dei fenomeni di trasporto sia la mobilità che la diffusione agiscono contemporaneamente, pertanto è importante stabilire una relazione tra questi due parametri. Considerando allora un insieme di particelle cariche che diffondono all'interno di un gas nella sola direzione x, la velocità degli ioni si può esprimere come:

$$u_{+} = \frac{\Gamma}{n_{+}} = -\frac{D}{n_{+}} \frac{\mathrm{d}n_{+}}{\mathrm{d}x} = -\frac{D}{p_{+}} \frac{\mathrm{d}p_{+}}{\mathrm{d}x} = -\frac{D}{p_{+}} \frac{\mathrm{d}p_{+}}{f_{-+}}$$

avendo indicato con f_+ la forza agente sugli ioni presenti nel volume; ricordando poi che il numero di ioni per unità di volume è dato da N, si ottiene infine:

$$f_+ = -\frac{p_+}{DN}u_+$$

Se è poi presente un campo elettrico, la forza esercitata sullo ione nella direzione opposta al moto di drift vale:

$$f_{+,E} = eE = \frac{ev_d}{\mu}$$

Affinché il flusso in direzione x sia nullo, deve essere $f_+ = -f_{+,E}$ da cui si ricava infine la relazione cercata:

$$\frac{D}{\mu} = \frac{K_B T}{e} \tag{3.33}$$

In generale la mobilità delle cariche negative è maggiore di quella delle cariche positive, pertanto le prime diffonderanno più rapidamente. Se poi le concentrazioni sono rilevanti, il fenomeno è più evidente e provoca la formazione di una certa distribuzione di cariche nello spazio la quale, a sua volta, genera un campo elettrico: questo agisce pertanto aumentando la velocità di drift delle particelle positive e riducendo quella delle negative, fino al raggiungimento di una situazione di equilibrio in cui le due velocità coincidono, secondo un processo noto come diffusione ambipolare. Le velocità delle cariche positive e negative, considerando l'effetto del campo indotto E^* , sono esprimibili secondo le:

$$u_{+} = -\frac{D_{+} \mathrm{d}n_{+}}{n_{+} \mathrm{d}x} + \mu_{+} E^{*}$$
(3.34)

$$u_e = -\frac{D_e \mathrm{d}n_e}{n_e \mathrm{d}x} - \mu_e E^* \tag{3.35}$$

Eliminando E^* dalle precedenti, assumendo che $n_+ = n_e = n$ e quindi $u_+ = u_e = u$, la velocità media degli ioni si può esprimere come:

$$\overline{u} = -\frac{D_+\mu_e + D_e\mu_+}{n\left(\mu_+\mu_e\right)}\frac{\mathrm{d}n}{\mathrm{d}x} = D_a\frac{1}{n}\frac{\mathrm{d}n}{\mathrm{d}x}$$
(3.36)

dove D_a rappresenta il *coefficiente di diffusione ambipolare*; nel caso in cui la temperatura degli elettroni sia molto superiore a quella del gas, tenendo conto della 3.33, si ha che:

$$D_a \simeq \frac{K_B T_e}{e} \tag{3.37}$$

mentre nel caso di equilibrio termodinamico (si può porre $D_e\mu_+ = D_+\mu_e$) risulta:

$$D_a \simeq 2D_+ \tag{3.38}$$

La presenza di un gradiente di concentrazione determina pertanto un campo elettrico indotto che distorce il campo esterno; in definitiva il campo complessivo si può esprimere come somma di due contributi:

$$E = \frac{j}{e(\mu_e + \mu_+)n} - \frac{D_e - D_+}{\mu_e \mu_+} \frac{1}{n} \frac{\mathrm{d}n}{\mathrm{d}x}$$
(3.39)

Il fenomeno della diffusione assumeranno una certa rilevanza quando si introdurranno le scariche a bagliore, ad arco e a scintilla.

3.2 Ionizzazione secondaria

I fenomeni di ionizzazione secondaria riguardano principalmente l'emissione di elettroni dalla superficie del catodo. In determinate condizioni, infatti, gli elettroni possono essere emessi da una superficie metallica (o di materiale semi-conduttore) all'interno del gas, contribuendo attivamente al processo di ionizzazione: si parla in questi casi di *emissione elettronica*. I fenomeni di emissione che coinvolgono il catodo sono di fondamentale importanza per la formazione della scarica elettrica, specialmente nei casi in corrente continua: gli elettroni così prodotti vanno infatti ad aggiungersi a quelli prodotti attraverso il processo α , contribuendo ad incrementare la corrente circolante tra gli elettrodi.

3.2.1 Richiami di fisica dello stato solido

Prima di introdurre i principali fenomeni che portano alla produzione di elettroni da una superficie solida, si richiamano alcuni concetti fondamentali della fisica dello stato solido,⁵ cioè lo studio dei materiali solidi dal punto di vista atomico/molecolare.

A livello elementare, l'energia può essere trasportata attraverso quattro tipi di vettori energetici. I più semplici da comprendere sono gli elettroni e gli atomi/molecole; sia gli elettroni, che si possono muovere all'interno di solidi, liquidi e gas,

 $^{^5 {\}rm Questa}$ si differenzia dalla meccanica dei solidi che, invece, considera lo stato solido come un continuo.

sia gli atomi/molecole, che possono spostarsi in liquidi e aeriformi, possiedono una certa energia cinetica che, di fatto, quantifica lo spostamento di energia all'interno del mezzo. L'energia può essere infine trasportata attraverso le onde elettromagnetiche o, più precisamente, attraverso i fotoni: questi sono privi di massa, presentano caratteristiche sia particellari che ondulatorie, e possono spostarsi liberamente in solidi, liquidi e gas trasportando energia cinetica.

All'interno di un solido, la cui struttura atomica/molecolare risulta rigida, i vettori energetici sono costituiti appunto da fotoni: questi possono essere pensati come dei pacchetti d'onda che si muovono lungo i legami tra gli atomi. I solidi presentano in generale una struttura cristallina, più o meno complessa, in cui gli atomi occupano posizioni bene precise; concettualmente questo può essere assimilato ad un complesso sistema massa-molla in cui le molle rappresentano i legami intermolecolari tra gli atomi che, invece, costituiscono le masse del sistema. Quando un atomo vibra, esso trasmette la propria energia a quelli circostanti per mezzo di oscillazioni che si propagano attraverso i legami intermolecolari: il moto ondulatorio di tali oscillazioni può essere caratterizzato come un fotone.

Se si considera ora il singolo atomo, si può dire che:

- ogni elettrone ad esso associato possiede una certa energia potenziale dovuta all'attrazione esercitata dai protoni presenti nel nucleo,;
- gli elettroni occupano degli stati energetici discreti e quantizzati, detti orbitali.

Gli *elettroni di valenza*, cioè quelli che occupano gli orbitali più esterni, risultano debolmente legati al nucleo per via della maggiore distanza da questo, pertanto risultano liberi di muoversi. Nei materiali metallici gli orbitali più esterni risultano parzialmente occupati, quindi possono ricevere gli elettroni di valenza provenienti da un altro atomo: in effetti la struttura cristallina dei solidi è compatta al punto che gli orbitali esterni risultano ibridizzati e gli elettroni risultano effettivamente condivisi dai diversi atomi.⁶ Applicando allora una forza esterna agli elettroni, come un campo elettrico o magnetico, quelli liberi di muoversi vengono accelerati nella direzione del campo, generando una corrente elettrica.

Nei metalli, gli elettroni più esterni si considerano tutti liberi e vengono trattati come particelle indipendenti, comunemente note con l'appellativo gas di Fermi. Questi elettroni occupano livelli energetici discreti e il loro comportamento è governato dalle leggi della meccanica quantistica. Senza assolutamente entrare nel dettaglio, si riportano solo alcuni concetti e definizioni che saranno utili per comprendere i fenomeni che si descriveranno nel seguito.

 $^{^6 \}rm Nei$ gas gli orbitali di valenza sono tutti occupati pertanto gli elettroni non possono muoversi: per questo motivo i gas sono degli ottimi isolanti.

Densità degli stati

L'energia e la quantità di moto di un elettrone libero può essere descritto mediante l'equazione di Schrodinger:

$$-\frac{\hbar^2}{2m_e}\nabla^2\Psi\left(\vec{r}\right) = E\Psi\left(\vec{r}\right) \tag{3.40}$$

dove \hbar è la costante di Plank ridotta, E l'energia, m_e la massa dell'elettrone e Ψ la sua funzione d'onda. Una generica soluzione della 3.40 è:

$$\Psi\left(\vec{r}\right) = \frac{1}{\sqrt{V}} \exp\left(i\vec{k}\cdot\vec{r}\right)$$

dove V rappresenta un volume e \vec{k} è un vettore d'onda; da questa si ricava che l'energia dell'elettrone è data dall'autofunzione dell'equazione di Schrodinger:

$$\epsilon\left(k\right) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_e}$$

mentre la quantità di moto vale:

$$\vec{q} = \hbar \vec{k}$$

Trattandosi di una equazione differenziale alle derivate parziali, le soluzioni sono infinite e associate ai propri autovalori che, tuttavia, devono assumere valori discreti; questo permette di ricavare dei valori discreti per il vettore d'onda che, in una dimensione, valgono:

$$k_x = \frac{2\pi n}{L_x}$$
 con $n = 1, 2, 3, ...$ (3.41)

dove L_x è la lunghezza del reticolo cristallino in direzione x. Noto il vettore d'onda, si può ora definire la *densità degli stati* come il numero di stati N potenzialmente disponibili ad un dato sistema quantistico ad una data energia; matematicamente questa è definita dalla relazione:

$$D\left(\epsilon\right) = \frac{1}{V} \frac{\mathrm{d}N}{\mathrm{d}\epsilon}$$

che nel caso dimensionale diventa:

$$D(\epsilon) = \frac{1}{2\pi^2} \left(\frac{2m_e}{\hbar}\right)^{3/2} \sqrt{\epsilon}$$
(3.42)

La 3.42 rappresenta esclusivamente il numero di stati energetici disponibili: per conoscere quanti elettroni effettivamente occupano ciascuno stato è necessario conoscerne la distribuzione statistica.

Distribuzione di Fermi-Dirac e definizione del lavoro di estrazione

La distribuzione degli elettroni liberi può essere definita mediante la *distribuzione di Fermi-Dirac*:

$$f(\epsilon_e) = \frac{1}{\exp\left(\frac{\epsilon_e - \epsilon_F}{K_B T}\right) + 1}$$
(3.43)

dove ϵ_e rappresenta l'energia degli elettroni, ϵ_F l'energia di Fermi⁷ del materiale e T la sua temperatura. La funzione $f(\epsilon)$ può assumere valori compresi tra 0 e 1, dove 1 indica che tutti gli stati con energia ϵ sono occupati e 0 che non lo sono: i valori compresi rappresentano, quindi, la probabilità che un elettrone si trovi a quello specifico livello energetico. L'andamento a 0K è riportato in figura 3.9a: ogni livello fino all'energia $\epsilon_F = 5 \text{ eV}$ presenta una probabilità pari a 1, quindi risultano tutti occupati, mentre per quelli superiori risulta $f(\epsilon) = 0$ e cioè vuoti. All'aumentare della temperatura, l'energia degli elettroni aumenta di conseguenza e quelli più vicini al livello di Fermi vengono energizzati ad un livello superiore: i livelli energetici inferiori risultano ancora tutti occupati ($f(\epsilon) = 1$), mentre la probabilità di occupazione dei livelli superiori risulta ora superiore a 0, come mostrato in figura 3.9b.



Figura 3.9: Distribuzione di Fermi-Dirac a diverse temperature per $\epsilon_F = 5 \,\mathrm{eV}$.

Superata una certa soglia energetica, gli elettroni che occupano i livelli energetici più elevati possono arrivare ad avere un'energia sufficiente per abbandonare la superficie del materiale: tale valore limite prende il nome di *lavoro di estrazione* (o

⁷L'energia di Fermi corrisponde all'energia del più alto livello occupato da un elettrone alla temperatura dello zero assoluto.

work function ϕ). Riassumendo, un elettrone è capace di lasciare la superficie di un solido quanto la sua energia è superiore al lavoro di estrazione: questa situazione è riportata in figura 3.10.



Figura 3.10: Rappresentazione schematica del numero di elettroni con energia sufficiente per essere emessi dal materiale.

L'asse verticale rappresenta l'energia degli elettroni e separa il solido (a sinistra) dal vuoto (a destra): il lavoro di estrazione si comporta come barriera di potenziale, nel senso che solo gli elettroni che superano tale gradino possono effettivamente abbandonare la superficie. Gli elettroni possono essere energizzati in modi diversi, in particolare:

- assorbendo energia luminosa dai fotoni \rightarrow effetto fotoelettrico;
- aggiungendo calore \rightarrow emissione termoionica;
- sfruttando la presenza di un campo elettrico intenso \rightarrow emissione di campo;
- dall'impatto di ioni o atomi eccitati con la superficie del solido \rightarrow emissione secondaria.

Queste quattro modalità saranno ora analizzate più in dettaglio, in particolare l'ultima che, come si vedrà, avrà un ruolo fondamentale per la formazione della scarica elettrica.

3.2.2 Effetto fotoelettrico

Quando un materiale, solitamente metallico, viene colpito da una radiazione elettromagnetica, i fotoni trasferiscono una certa quantità di energia al materiale, aumentando il livello energetico degli elettroni in esso presenti: se questo supera il valore del lavoro di estrazione ϕ , allora l'elettrone viene liberato dalla superficie, come schematicamente riportato in figura 3.11.

Affinché l'elettrone possa lasciare la superficie, è necessario che l'energia del fotone sia almeno pari a ϕ ; questo può essere espresso mediante la relazione di Einstein:

$$E_{fot} = h\nu = h\frac{c_0}{\lambda} \ge \phi \tag{3.44}$$

pertanto l'elettrone emesso avrà un'energia cinetica pari a:

$$\epsilon_e = h\nu - \phi \tag{3.45}$$

dalla quale è possibile ricavare la distribuzione di energia degli elettroni e la relativa corrente. A tal proposito si fa notare che questa dipende da intensità e frequenza dei fotoni incidenti, in particolare:

- l'intensità della luce si può interpretare come il numero di fotoni al secondo che colpiscono la superficie; considerando una luce monocromatica (quindi con un'unica frequenza), i fotoni hanno tutti la stessa energia e stessa probabilità di causare l'emissione di un elettrone: la corrente fotoelettrica è, pertanto, proporzionale (linearmente) all'intensità;
- la corrente è proporzionale alla frequenza (o inversamente alla lunghezza d'onda) in quanto maggiore è l'energia associata al singolo fotone e maggiore è la probabilità che un elettrone sia emesso.

La frequenza di soglia del materiale può essere ricavata osservando che il lavoro di estrazione soddisfa la relazione $\phi = h\nu_0$, pertanto risulta:

$$\nu_0 = \frac{\phi}{h} \tag{3.46}$$

Sostituendo dei valori comuni nella 3.46 si ottengono frequenze dell'ordine dei 10×10^5 Hz che corrispondono a lunghezze d'onda di circa 100 nm, cioè nel campo dell'ultravioletto, ma prossimo allo spettro visibile. Fotoni con queste lunghezze d'onda sono emessi molto di frequente (quando un atomo eccitato ritorna al suo stato fondamentale emette radiazione luminosa) nei fenomeni che coinvolgono scariche elettriche attraverso dei gas: a seconda quindi del materiale del catodo (e quindi di ϕ) e dell'intensità della scarica, l'effetto fotoelettrico può rappresentare una sorgente importante di elettroni.



Figura 3.11: Schema illustrativo dell'effetto fotoelettrico.

3.2.3 Emissione termoionica

In un metallo a temperatura ambiente, gli elettroni di valenza non hanno sufficiente energia per abbandonare la superficie, infatti applicando la 2.16 si otterrebbe un'energia media pari a $\bar{\epsilon} = 3.8 \times 10^{-2} \,\mathrm{eV}$, molto inferiore ai valori della funzione ϕ riportati in tabella 3.1.

Elemento	ϕ	A_1
	eV	$A \mathrm{cm}^{-2} \mathrm{K}^{-2}$
С	4.7	30-170
Al	4.25	
Fe	4.31	60-700
Ni	4.5	30-50
Cu	4.4	60-100
Mo	4.3	60-150
Ba	2.49	60
W	4.54	40-100
Pt	5.32	10-170

Tabella 3.1: Valori di ϕ e della costante termoionica per diversi materiali policristallini. Tratto da [27].

Portando il materiale a temperature di $(1500 \div 2500)$ K, le vibrazioni del reticolo cristallino possono trasferire sufficiente energia agli elettroni da permettergli di abbandonare il materiale. La densità di corrente di emissione si può esprimere in funzione della temperatura del catodo (espressa in K) mediante la relazione di Richardson-Dushman [29]:

$$j = AT^2 \exp\left(-\frac{\phi}{K_B T}\right) \tag{3.47}$$

dove $A = \lambda_R A_0$ è una costante data dal prodotto tra un coefficiente correttivo λ_R , specifico per ogni materiale, e la costante universale A_0 definita come:

$$A_0 = \frac{4\pi m_e K_B e^-}{h^3} = 1.201\,73 \times 10^6 \,\frac{\text{A}}{\text{m}^2 \,\text{K}^2} \tag{3.48}$$

Dalla 3.48 si vede che valori apprezzabili di corrente si ottengono per valori decrescenti del lavoro di estrazione ϕ e la dipendenza da -T dimostra chiaramente che le temperature devono raggiungere valori considerevoli. L'effetto termoionico è significativo infatti solo in presenza di plasmi ad elevata temperatura (di tipo *thermal*), come accade nelle scariche ad arco elettrico.

Si fa notare che i valori misurati sperimentalmente si discostano da quelli ricavabili applicando la 3.48 in quanto non è stato considerato l'effetto di riflessione che gli elettroni possono subire; la precedente viene allora corretta introducendo il *coefficiente di riflessione* R che permette di scrivere infine:

$$j = A_1 T^2 \exp\left(-\frac{\phi}{K_B T}\right) \qquad \text{con } A_1 = \lambda_R (1-R) A_0 \qquad (3.49)$$

Per concludere si fa osservare che l'effetto termoionico è molto sensibile agli effetti prodotti dalla presenza di un intenso campo elettrico: l'azione di quest'ultimo causa infatti una riduzione del lavoro di estrazione, noto come *effetto Schottky* (di cui si parlerà nella sezione successiva), favorendo quindi l'emissione di elettroni.

3.2.4 Emissione di campo ed effetto tunnel

Come anticipato in conclusione alla sezione precedente, la presenza di un intenso campo elettrico può favorire l'emissione di elettroni dalla superficie di un solido metallico, definita appunto *emissione di campo*; entrando nello specifico, si può dire che il campo elettrico va a modificare la barriera di potenziale del materiale in modo tale che gli elettroni più prossimi al livello di Fermi possano attraversarla: si parla, in questo caso, di *effetto tunnel*.

Per determinare il valore della corrente di emissione e meglio comprendere il fenomeno, si consideri la figura 3.12. Considerando un elettrone che lascia la superficie secondo la direzione x, applicando la legge di Coulomb la forza che agisce su questo vale:

$$F\left(x\right) = -\frac{e^2}{16\pi\epsilon_0 x^2}$$



Figura 3.12: Riduzione del lavoro di estrazione da parte di un campo elettrico esterno applicato al materiale.

dove si è indicato con ϵ_0 la costante dielettrica del vuoto; integrando la precedente da ∞ alla generica coordinata x, si ricava l'andamento dell'energia potenziale:

$$\epsilon_1 = \frac{e^2}{16\pi\epsilon_0 x} \tag{3.50}$$

rappresentata in figura 3.12 da una parabola; l'effetto del campo elettrico in termini di energia potenziale è invece esprimibile mediante la:

$$\epsilon_2 = eEx \tag{3.51}$$

che corrisponde ad una retta, come riportato in figura 3.12.

Sommando i due contributi si ottiene l'energia potenziale complessiva che vale:

$$\epsilon_3 = \epsilon_1 + \epsilon_2 = \frac{e^2}{16\pi\epsilon_0 x} + eEx \tag{3.52}$$

Differenziando la 3.52 rispetto ad x ed uguagliando a zero:

$$\frac{\mathrm{d}\epsilon_3}{\mathrm{d}x} = \frac{e^2}{16\pi\epsilon_0 x^2} - eE = 0 \qquad \Rightarrow \qquad x_{max} = \sqrt{\frac{e}{16\pi\epsilon_0 E}}$$

e sostituendo nella 3.52 si ricava la riduzione del lavoro di estrazione per effetto del campo E:

$$\Delta\phi = \sqrt{\frac{e^3 E}{4\pi\epsilon_0}} \tag{3.53}$$

Indicando infine la barriera di potenziale effettiva come $\phi_{eff} = \phi - \Delta \phi$, la densità di corrente di emissione si può esprimere in maniera analoga alla 3.49, con quella che è nota come equazione di Schottky:

$$j = A_1 T^2 \exp\left(-\frac{\phi - \Delta\phi}{K_B T}\right) = A_1 T^2 \exp\left(-\frac{\phi_{eff}}{K_B T}\right)$$
(3.54)

Secondo la 3.54, per ottenere valori apprezzabili di corrente, sarebbero necessari campi elettrici dell'ordine di 1000 V μ m⁻¹ o superiori, tuttavia nella pratica risultano essere sufficienti campi di intensità decisamente inferiore, con valori compresi tra $10 \div 100 \text{ V }\mu$ m⁻¹. Una spiegazione è stata fornita da Fowler-Nordheim [36],[12] che hanno attribuito tale comportamento alle irregolarità presenti nella superficie degli elettrodi (rugosità superficiale e micro-asperità), in corrispondenza delle quali le linee di campo tendono ad addensarsi incrementando il campo elettrico locale; la corrente di emissione è allora definita secondo l'equazione di Fowler-Nordheim:

$$j = C\beta^2 E^2 \exp\left(-\frac{D}{\beta E}\right) \tag{3.55}$$

in cui C e D sono costanti ricavabili risolvendo l'equazione di Schrodinger 3.40, mentre β è un coefficiente correttivo specifico per il tipo di materiale.

In generale l'emissione di campo è trascurabile per valori considerevoli di pressione, perché la tensione necessaria risulterebbe troppo elevata e altri fenomeni avrebbero luogo prima che questa venisse raggiunta: nei casi in cui invece la distanza degli elettrodi è molto piccola (5 µm) e le pressioni sono basse, l'emissione di campo risulta il fenomeno di ionizzazione principale. Non va infine trascurato il caso in cui l'elettrodo risulti sottoposto ad un campo intenso ($E > 0.8 \times 10^7 \,\mathrm{V \, cm^{-1}}$) e si trovi anche ad elevata temperatura ($T \simeq 3000 \,\mathrm{K}$); in queste condizioni sia l'emissione di campo che quella termoionica hanno luogo contemporaneamente: si parla pertanto di *emissione di campo termoionica*, fenomeno che risulta predominante nel caso di scariche ad arco elettrico.

3.2.5 Emissione elettronica secondaria - Il processo γ

In accordo con la 3.14, l'andamento di ln (i) al variare della distanza tra gli elettrodi (per E e p costanti) assume andamento lineare con pendenza pari al coefficiente α ; tuttavia Townsend, durante le sue prime misurazioni, osservò che per i valori più alti di tensione, la corrente cresceva molto più rapidamente di quanto previsto dalla 3.14 o dalla 3.30, come riportato in figura 3.6. Per spiegare questa deviazione dalla linearità, Townsend suppose che un secondo fenomeno di ionizzazione dovesse influenzare l'andamento della corrente e, inizialmente, venne attribuito all'impatto tra gli ioni positivi, accelerati dal campo elettrico, e gli atomi neutri presenti nel gas: per tale motivo si parla di *ionizzazione da impatto ionico* o processo β . Utilizzando un approccio simile a quello già visto per descrivere il processo α , la velocità di formazione di ioni positivi può essere definita secondo la seguente relazione:

$$\frac{\mathrm{d}n_i}{\mathrm{d}x} = \alpha \left[n_e \left(0 \right) + n_i \right] + \beta n_i \left(0 \right) \tag{3.56}$$

dove $n_e(0) e n_i(0)$ sono rispettivamente il numero iniziale di elettroni e ioni presenti nel gas, mentre β rappresenta il *secondo coefficiente di ionizzazione di Townsend*, cioè il numero di ioni prodotti per unità di lunghezza a partire da un singolo ione. Considerando che il numero complessivo di elettroni sia pari a $n_e = n_e(0) + n_i(0) + n_i$, dalla precedente si può ricavare una relazione analoga alla 3.12:

$$n_e(x) = n_e(0) \cdot \frac{(\alpha - \beta) \exp\left[(\alpha - \beta) x\right]}{\alpha - \beta \exp\left[(\alpha - \beta) x\right]}$$
(3.57)

o in termini di corrente:

$$i_e(x) = i_e(0) \cdot \frac{(\alpha - \beta) \exp\left[(\alpha - \beta) x\right]}{\alpha - \beta \exp\left[(\alpha - \beta) x\right]}$$
(3.58)

che costituisce la relazione originariamente proposta da Townsend per spiegare la ionizzazione secondaria subita dal gas. Osservazioni e misurazioni condotte successivamente hanno però mostrato come la 3.58 non sia corretta, in quanto basata sull'errata ipotesi che i due fenomeni abbiano la stessa rilevanza ai fini della produzione della scarica elettrica. Per quanto detto nei capitoli precedenti, affinché un elettrone possa ionizzare un atomo neutro è necessario che la sua energia sia almeno pari a quella di ionizzazione; nel caso di uno ione questa dovrebbe risultare, invece, almeno $> 2eV_{ion}$ perché il suo campo elettrico risulta sufficientemente elevato da polarizzare la molecola neutra e attutire così la collisione. Si deve inoltre considerare che gli ioni si muovono molto più lentamente degli elettroni e che perdono più rapidamente la propria energia cinetica in seguito ad una collisione, in accordo con la 2.39.

La ionizzazione da impatto ionico non spiega pertanto l'aumento esponenziale di corrente all'aumentare della tensione; questo comportamento è da attribuirsi infatti alla liberazione (emissione) di elettroni dalla superficie del catodo in seguito al bombardamento subito da questo da parte di altre particelle (ioni, molecole neutre, metastabili ed elettroni). Si parla in questi casi di *emissione elettronica secondaria* o di *processo* γ , in quanto l'emissione di elettroni può essere descritta in termini del *coefficiente di ionizzazione secondaria* γ :

$$\gamma = \frac{n_{e,emessi}}{n_{p,indicenti}} \tag{3.59}$$

cioè come rapporto tra numero di elettroni emessi e numero di particelle incidenti sulla superficie. In generale il processo predominante è dovuto all'impatto di ioni positivi accelerati dal campo elettrico verso il catodo, mentre risultano di norma meno rilevanti quelli relativi a metastabili ed elettroni, pertanto ci si limiterà solo alla emissione da impatto ione-catodo.

Intuitivamente si potrebbe pensare che l'emissione secondaria avvenga in seguito ad uno scambio di energia cinetica tra la particella incidente e la superficie metallica del catodo: sebbene questo avvenga in particolari condizioni, l'emissione secondaria risulta essere più complicata. In generale si possono distinguere due diverse modalità tramite le quali un elettrone può essere emesso: uno che prevede scambio di energia cinetica e un altro nel quale si ha scambio di energia potenziale.

Nel primo caso la particella incidente trasferisce la propria energia cinetica ad un elettrone e, se questa è sufficiente da vincere il lavoro di estrazione ϕ , quest'ultimo abbandona la superficie e viene emesso. Se si considera un elettrone con energia di Fermi pari a ϵ_F , questa si può facilmente convertire in una velocità $v_F = \sqrt{\frac{2m_e}{\epsilon_F}}$; la massima energia trasferibile da uno ione che si muove con velocità v_i può essere ricavata ricordando le 2.39, 2.40, 2.41 e 2.42, dalle quali si ricava:

$$\Delta \epsilon = 2m_e v_i \left(v_i + v_F \right) \tag{3.60}$$

Se $\Delta \epsilon = \phi$ è l'energia minima necessaria affinché un elettrone sia emesso, allora la velocità di collisione minima della particella incidente si può ricavare dalla 3.60 e vale:

$$v_{i,min} = \frac{1}{2} \left[-v_F + \sqrt{\left(v_F^2 + \frac{2\phi}{m_e}\right)} \right]$$
(3.61)

Sostituendo nella 3.61 dei valori comuni nel caso dei gas, si ottengono valori di $v_{i,min} \simeq 10^{55} \,\mathrm{m \, s^{-1}}$ a cui corrispondono energie dell'ordine dei $10^4 \,\mathrm{eV}$ e temperature di circa $10^8 \,\mathrm{K}$, valori che non si raggiungono mai in casi convenzionali.

Si consideri ora l'altro tipo di processo, cioè quello di natura potenziale; in questo caso il campo elettrico dello ione positivo, avvicinandosi alla superficie, si comporta come un pozzo per l'energia potenziale, riducendo di fatto la barriera di potenziale: un elettrone con sufficiente energia può allora attraversare la barriera (come avviene nell'emissione di campo), sfuggire al materiale ed interagire con lo ione. Questa interazione può avvenire secondo due modalità:

• la prima prevede un processo di *neutralizzazione*, secondo quanto riportato in figura 3.13a. L'elettrone viene catturato dallo ione positivo ad un livello energetico pari a E_3 (stato energetico eccitato), andando a formare una molecola neutra metastabile M^* secondo la relazione:


Figura 3.13: Rappresentazione schematica del processo di scambio di energia potenziale sulla superficie di un metallo conduttore: neutralizzazione (a sinistra) ed effetto Auger (a destra).

$$M^+ + e^-_{catodo} \to M^*$$

con un'energia pari alla differenza $E_{M^*} = E_{ion} - \epsilon_{e,catodo}$, dove E_{ion} e $\epsilon_{e,catodo}$ sono rispettivamente l'energia di ionizzazione e quella acquisita dall'elettrone nell'attraversamento della barriera. Ricordando quindi la 3.21, la molecola metastabile ritorna al suo stato energetico originario rilasciando l'energia in eccesso come radiazione luminosa $h\nu = E_3 - E_M$, dove E_M rappresenta l'energia della molecola allo stato rilassato.

• nel secondo caso la cattura dell'elettrone avviene al livello energetico di base E_M , creando così uno sbilancio energetico tra l'elettrone e lo stato neutro pari a $\Delta \epsilon = \epsilon_{e1,catodo} - E_M$; questo eccesso di energia può essere assorbito da un secondo elettrone a energia $\epsilon_{e2,catodo}$, portandolo ad un livello superiore: se questo risulta maggiore al lavoro di estrazione, allora si ha l'emissione di un elettrone. Il fenomeno è riportato schematicamente in figura 3.13b e prende il nome di *emissione o effetto Auger*; da un punto di vista formale questo si può esprimere attraverso la relazione:

$$e^-_{1,catodo} + e^-_{2,catodo} + M^+ \to e^- + M$$

Affinché l'emissione avvenga deve risultare $\Delta \epsilon > \epsilon_{e2,catodo}$, ma assumendo come riferimento l'energia di ionizzazione e il lavoro di estrazione, la condizione si può riscrivere come:

$$E_{ion} - \epsilon_{e1,catodo} > \epsilon_{e2,catodo}$$

da cui si ricava che l'energia associata all'elettrone emesso vale:

$$\epsilon_e = \Delta \epsilon - \epsilon_{e2,catodo} = E_{ion} - \epsilon_{e1,catodo} - \epsilon_{e2,catodo}$$

Da queste considerazioni è possibile ricavare allora l'equazione della corrente circolante tra gli elettrodi, comprensiva del fenomeno dell'emissione secondaria, che descrive correttamente l'andamento di figura 3.6. Indicando con n_+ il numero di elettroni emessi dal catodo a causa del bombardamento di ioni, il numero complessivo di elettroni che raggiunge l'anodo si può esprimere come:

$$n_e = (n_{e,0} + n_+) \exp(\alpha d) \tag{3.62}$$

Ora il numero complessivo di elettroni emessi dal catodo coincide con $(n_{e,0} + n_+)$, pertanto il numero di elettroni prodotti per ionizzazione primaria sarà pari a $n - (n_{e,0} + n_+) = (n_{e,0} + n_+) \cdot [\exp(\alpha d) - 1]$; ma per ogni elettrone prodotto, si formerà anche uno ione positivo il quale, arrivando al catodo, emetterà γ elettroni cioè:

$$n_{+} = \gamma \left[n - (n_{e,0} + n_{+}) \right] \qquad \Rightarrow \qquad n_{+} = \frac{\gamma \left(n - n_{e,0} \right)}{1 + \gamma}$$
(3.63)

Sostituendo la 3.63 nella 3.62 si ricava:

$$n = \left[n_{e,0} + \frac{\gamma \left(n - n_{e,0} \right)}{1 + \gamma} \right] \cdot \exp\left(\alpha d\right) =$$

= $\frac{n_{e,0} + \gamma n}{1 + \gamma} \cdot \exp\left(\alpha d\right) =$
= $\frac{n_{e,0} \cdot \exp\left(\alpha d\right)}{1 - \gamma \left[\exp\left(\alpha d\right) - 1\right]}$ (3.64)

che espressa in termini di corrente permette di scrivere infine la corrente circolante come:

$$i_{anodo} = i_e \left(0\right) \cdot \frac{\exp\left(\alpha d\right)}{1 - \gamma \left[\exp\left(\alpha d\right) - 1\right]}$$
(3.65)

che permetterà di determinare la condizione corrispondente al breakdown.



Figura 3.14: Andamento di γ per catodo in rame in presenza di gas nobili. Tratto da [27].

Ci si tiene a precisare infine che tutti i fenomeni finora descritti partecipano all'emissione secondaria: non potendo distinguere precisamente tra i diversi effetti, nella 3.65 si utilizza un unico termine γ detto *coefficiente effettivo di emissione secondaria* (si vedano le figure 3.14 e 3.15).

Gas	Cathode	State of surface	Conditions in gas E/p V/(cm·Torr)	n the pd ст.Тол	r na na na na	Mechanism
Air	Ni	cleaned	39-45		$8.0 \cdot 10^{-6} - 1.5 \cdot 10^{-4}$	
N ₂	Ni	cleaned	39-45		$1.3\cdot 10^{-4} - 3.7\cdot 10^{-4}$	
N ₂	Cu	cleaned		50	$1.5 \cdot 10^{-6}$	ions
N ₂	Cu	oxidized		50	> 10 ⁻³	ions
O ₂	Ni		35.4		$4.5 \cdot 10^{-2}$	
02	Cu	cleaned		50	$\sim 10^{-7}$	
02	Cu	oxidized		50	10 ⁻⁶	ions, photons
H ₂	Ni	cleaned	20.3-25.1	<i>d</i> = 2	$1.0 \cdot 10^{-3} - 2.4 \cdot 10^{-3}$	
H ₂	Cu	cleaned		50	10 ⁻⁶	photons
H ₂ orga	Cu nics: alcoho	oxidized I, methane,	methylal	50	$5.0 \cdot 10^{-5}$ ~ 10^{-9}	photons

Figura 3.15: Valori di γ per catodi di diversi materiali per pressioni medio-alte. Tratto da [27].

3.3 Riepilogo

Lo scopo di questo capitolo era quello di fornire un quadro sufficientemente approfondito sui fenomeni fisici che avvengono durante la ionizzazione di un gas, distinguendo tra processi primari e secondari. Sono state messe in evidenza le caratteristiche principali dei diversi fenomeni, evidenziando più volte come questi abbiano tutti una natura di tipo probabilistico (secondo quanto introdotto nel capitolo precedente). L'attenzione maggiore è stata tuttavia riservata alla *ionizzazione elettronica* e all'*emissione secondaria*, i due fenomeni principalmente responsabili del breakdown e che sarà oggetto del prossimo capitolo. $3 - \underline{Processi \ di \ ionizzazione \ dei \ gas}$

Capitolo 4 Scariche elettriche all'interno di un gas

Originariamente, il termine gas discharge era associato al processo di scarica di un condensatore all'interno di un circuito che comprendesse un gas interposto tra gli elettrodi; se la differenza di potenziale applicata risulta sufficientemente alta, si assiste alla rottura (*breakdown*) del dielettrico e alla formazione un canale di gas ionizzato (plasma) tra i due elettrodi: questo, diventando conduttore, chiude il circuito permettendo il passaggio di corrente elettrica. In seguito il termine *discharge* venne applicato ad ogni tipo di fenomeno che coinvolgesse il passaggio di corrente attraverso un gas, includendo inoltre tutti i processi di ionizzazione dei quali si è parlato nel capitolo precedente. Trattandosi di un campo estremamente vasto e complesso, non si pretende di coprire ogni aspetto ad esso collegato: si cercherà comunque di fornirne un quadro il più completo possibile, dedicando particolare attenzione a quelli che si ritengono essere gli aspetti di maggiore interesse per lo studio del processo di accensione.

4.1 Regimi di scarica in presenza di un campo elettrico costante

Per comprendere il concetto di scarica in un gas, si può considerare un semplice apparato sperimentale, riportato schematicamente in figura 4.1: due elettrodi metallici paralleli sono collegati ai capi di un generatore di tensione continua ed inseriti all'interno di un tubo di vetro, all'interno del quale è possibile introdurre gas diversi a varie pressioni. Lo strumento, utilizzato per oltre 150 anni, permette di determinare gli andamenti di tensione e corrente, evidenziando nel contempo i diversi regimi di scarica.



Figura 4.1: Rappresentazione semplificata di un *discharge tube* riempito di gas.

In presenza di un debole campo elettrico, con differenze di potenziale applicate di circa 10 V), non si rilevano effetti visibili; tuttavia attraverso misurazioni estremamente sensibili, si può misurare una debole corrente dell'ordine dei 10^{-15} A: questa è dovuta alla presenza di particelle cariche, prodotte dalla radiazione cosmica e dalla naturale radioattività dell'ambiente circostante, che raggiungono gli elettrodi sotto l'influenza del campo elettrico. Se si irradiasse intenzionalmente il gas per mezzo di raggi X o ultravioletti, la corrente risulterebbe si maggiore (circa 10^{-6} A), ma non capace di sostenersi se la sorgente ionizzante esterna venisse rimossa: si parla pertanto di *regime di corrente non autosostenuta*. Aumentando la tensione si assiste ad un iniziale incremento della corrente dovuto alla migrazione delle particelle cariche prodotte dalla ionizzazione, che va poi a saturasi essendo limitata dalla velocità di ionizzazione.¹

Un ulteriore aumento di tensione causa una repentina crescita della corrente circolante a causa dei processi di ionizzazione che avvengono all'interno del gas, fino a raggiungere un valore di tensione che provoca l'emissione di luce: questo sta ad indicare che è avvenuta la rottura del dielettrico, in quello che comunemente è indicato come *breakdown*. Si tratta di un fenomeno di estrema importanza in tutti i processi che coinvolgono le scariche elettriche, perché sancisce il passaggio ad un *regime di corrente autosostenuta*: gli elettroni prodotti vengono accelerati dal campo elettrico, acquisiscono sufficiente energia da ionizzare altre molecole e produrre nuovi elettroni che, pertanto, si moltiplicano in maniera esponenziale dando origine ad un fenomeno di proliferazione a valanga.

Una volta che il breakdown ha avuto luogo, l'evoluzione successiva della corrente dipende fortemente dalle condizioni di applicazioni della tensione. Per basse pressioni ed elevate resistenze del circuito esterno si sviluppa quella che è nota come glow discharge o scarica a bagliore. Per bassi valori di corrente $(10^{-6} \div 10^{-1} \text{ A})$ ed elevate tensioni $(10^2 \div 10^3 \text{ V})$ si assiste alla formazione di una colonna luminosa tra i due

¹Si tratta della corrente di saturazione i_0 di cui si è già parlato nel capitolo precedente, quando si è introdotto il fenomeno della ionizzazione elettronica.

elettrodi, dovuta all'emissione di fotoni con specifica lunghezza d'onda. Il gas tra gli elettrodi è globalmente neutro, salvo nelle regioni prossime agli elettrodi: si tratta pertanto di plasma, tuttavia debolmente ionizzato e non in equilibrio termodinamico (la temperatura degli elettroni accelerati dal campo è dell'ordine dei 10^4 K, mentre quella del gas non si discosta di molto da quella ambiente di 300 K).

Per valori elevati di pressione e bassi valori di resistenza del circuito, al breakdown segue generalmente un arco elettrico o *arc discharge*. Gli archi elettrici sono caratterizzati da valori elevati di corrente (superiori ad 1 A e limitati solo dal circuito esterno) e basse differenze di tensione, cosa che porta alla formazione di gas ionizzato in equilibrio termodinamico.

La sostanziale differenza tra i due regimi di scarica appena descritti, risiede nel meccanismo di emissione degli elettroni da parte del catodo: nel caso delle scariche ad arco questa è dovuta all'emissione termoionica per via dell'elevata temperatura raggiunta dal catodo, mentre nelle scariche a bagliore l'emissione è dovuta al bombardamento del catodo da parte di ioni positivi.

Nel caso di prodotti pd elevati si assiste generalmente ad una scarica a scintilla o *spark discharge*, caratterizzata da una violenta espansione della colonna di gas ionizzato;² nel caso di campi fortemente disomogenei si assiste ad un breakdown parziale che genera una scarica luminosa circolare nota come *corona discharge*. Una visione più chiara dei diversi regimi di scarica la si può ottenere osservando la caratteristica tensione-corrente ottenuta dall'apparato precedente, rilevando sperimentalmente le due grandezze.



Figura 4.2: Caratteristica V - i ottenuta applicando tensioni via via maggiori a due elettrodi piani e paralleli all'interno di un tubo contenente gas ad una data pressione.

Un tipico andamento è riportato in 4.2, nel quale sono evidenziate le zone corrispondenti ai differenti regimi:

 $^{^2\}mathrm{II}$ fulmine costituisce un esempio di scarica a scintilla su grande scala.

- 1. dark discharge o regime di Townsend: il passaggio di corrente non è visibile ad occhio nudo, salvo in corrispondenza del breakdown o della scarica a corona.
 - *A-B*: il campo elettrico accelera gli elettroni prodotti dalla radiazione di fondo o già presenti nel gas e gli ioni, portandoli verso gli elettrodi: ne risulta una debole corrente crescente con la tensione;
 - *B-C*: per valori crescenti di tensione, tutti gli ioni e gli elettroni vengono spazzati via verso i rispettivi elettrodi, portando a saturazione la corrente: questa non cresce poiché limitata dall'intensità della radiazione/sorgente ionizzante;
 - *C-D*: superato un certo valore di tensione la produzione di elettroni viene intensificata a causa dei processi di ionizzazione, provocando un aumento esponenziale della corrente in quello che costituisce il *regime di Townsend*;
 - *D-E*: la corrente aumenta ulteriormente fino a raggiungere un valore di tensione tale da rompere il dielettrico: in queste condizioni avviene il breakdown, con conseguente passaggio ad un regime di corrente autosostenuto.
- 2. glow discharge: costituisce una prima forma di scarica autosostenuta, caratterizzata dall'emissione di luce a causa della presenza di fenomeni fotoelettrici:
 - *F*-*G*: dopo il breakdown la tensione si mantiene costante mentre la corrente aumenta, pertanto si può concludere che il plasma occupa inizialmente solo una piccola regione in prossimità del catodo: all'aumentare della corrente, la frazione di plasma presente aumenta fino a ricoprire l'intera regione del catodo;
 - *G-H*: la tensione subisce una crescita considerevole con l'aumentare della corrente, forzando la densità di corrente al catodo oltre il suo normale valore;

arc discharge: la colonna di plasma risulta completamente sviluppata tra i due elettrodi, permettendo passaggi di elevate correnti con bassi valori di tensione:

- *H-I*: il catodo risulta scaldato a temperature tali da promuovere l'emissione termoionica di elettroni, portando alla transizione al regime di arco elettrico;
- *I-K*: la corrente continua ad aumentare, mentre la tensione si riduce di diversi ordini di grandezza: si ha la formazione di un canale di plasma stabile ad elevata temperatura.

Avendo introdotto sommariamente i diversi regimi di scarica, si passa ad analizzarli nel dettaglio da un punto di vista fisico-matematico, cercando di metterne in evidenza gli aspetti salienti.

4.2 Breakdown

Nel senso lato del termine, per *breakdown elettrico* si intende il processo di trasformazione di un materiale da non conduttore a conduttore in seguito all'applicazione di un campo elettrico sufficientemente elevato. Indicativamente parlando, il fenomeno può avere una durata che varia da 10^{-9} fino a svariati secondi, durante la quale si assiste ad un considerevole aumento del grado di ionizzazione del gas: questo porta all'emissione di una scarica luminosa visibile ad occhio nudo, comunemente come *scintilla*. Se poi il campo elettrico viene applicato per un tempo sufficientemente lungo, allora il breakdown può dare inizio ad un regime di *scarica* che perdura fintanto che il campo è attivo: questo accade con ogni tipo di campo elettrico, che sia costante, impulsivo o periodico, mentre il regime di scarica che segue dipende sostanzialmente dalle condizioni del gas e dal grado di ionizzazione raggiunto. Molto sinteticamente, il breakdown prevede:

- una prima fase durante la quale il campo elettrico applicato accelera gli elettroni liberi presenti nel gas che, a loro volta, urtano con atomi e molecole neutre ionizzandole: ad ogni collisione si ha la produzione di nuovi elettroni secondo un processo a *valanga* che aumenta progressivamente la conducibilità del gas;
- raggiunto un certo valore soglia di tensione, la ionizzazione all'interno del gas raggiunge valori critici da permettere il passaggio di corrente: a questa transizione è associato il fenomeno della scintilla.

Il breakdown è un fenomeno alquanto complesso, che coinvolge numerosi processi di formazione e rimozione di elettroni: questi, unite alle condizioni specifiche del gas, ne determinano il valore soglia di tensione e la sua evoluzione nel tempo.

4.2.1 Meccanismo di Townsend

Considerando sempre il caso di conduttori piani e paralleli, applicando una differenza di potenziale V gradualmente crescente si instaura un campo elettrico E/d che si può considerare omogeneo e costante. In questa situazione gli elettroni liberi presenti inizialmente nel gas vengono accelerati dal campo e portati dal catodo verso l'anodo, generando una corrente crescente con la tensione applicata. Raggiunto il valore V_{sat} , la corrente assume un valore pari a $i_{sat} = i_0$ che si mantiene costante all'aumentare

della tensione: è stata quindi raggiunta una condizione di saturazione, in cui cioè tutte le particelle cariche (ioni ed elettroni) hanno raggiunto gli elettrodi, e il valore della corrente dipende esclusivamente dalla ionizzazione di sottofondo. Si tratta di un regime di corrente non autosufficiente, il quale cesserebbe immediatamente se il campo esterno venisse a mancare: la situazione è ben rappresentata in figura 4.3, dove, in corrispondenza di V_{sat} , la corrente assume valore costante.



Figura 4.3: Caratteristica V-i in regime di corrente non autosufficiente per elettrodi piani e paralleli.

Incrementando ulteriormente la tensione la corrente inizia ad aumentare esponenzialmente, amplificata dal fattore $e^{\alpha d}$, a causa dei fenomeni di ionizzazione primaria; la corrente all'anodo e al catodo assumono lo stesso valore: quella all'anodo è data dalla 3.13, mentre quella al catodo la si può considerare come la somma della corrente i_0 e di quella prodotta dagli ioni positivi, cioè $i_0 \cdot [\exp(\alpha d) - 1]$. Per valori ancora più elevati di tensione, entrano in gioco anche i fenomeni di ionizzazione secondaria, in particolare quelli di emissione di elettroni dal catodo; per quanto visto nel capitolo precedente, gli elettroni così prodotti enfatizzano il processo di ionizzazione e aumentano il valore della corrente che può essere espressa mediante la 3.65, qui riportata per comodità:

$$i = i_0 \cdot \frac{\exp(\alpha d)}{1 - \gamma \left[\exp(\alpha d) - 1\right]}$$

Osservando la precedente si può concludere che fintanto che il denominatore si mantiene positivo, la corrente non può autosostenersi; aumentando V, aumenta di conseguenza la corrente e quindi il denominatore decresce fino a raggiungere il valore unitario per un certo valore di tensione di soglia V_{bd} , a cui corrispondono piccoli valori del fattore di amplificazione αd . Per valori $V > V_{db}$ tali che $\gamma [\exp(\alpha d) - 1] > 1$, il denominatore risulterebbe negativo, rendendo l'espressione priva di significato: in altre parole la corrente non si può mantenere stabile per tale valore di tensione. Questa osservazione permette di definire un criterio per stabilire il passaggio ad un regime di corrente autosostenuto; la condizione di transizione si ha quando il denominatore assume il valore unitario, cioè:

$$\gamma \left[\exp\left(\alpha d\right) - 1\right] = 1 \qquad \Rightarrow \qquad \alpha d = \ln\left(\frac{1}{\gamma} + 1\right)$$

$$(4.1)$$

La 4.1 definisce il criterio di Townsend per il breakdown e rappresenta un regime di corrente (stabile) autosufficiente soggetto al campo elettrico omogeneo $E_{bd} = \frac{V_{bd}}{d}$: la corrente scorre quindi in assenza di una sorgente di elettroni esterna, perché i fenomeni di ionizzazione che avvengono all'interno del gas rimpiazzano autonomamente gli elettroni rimossi dal campo elettrico. Il valore di soglia V_{bd} si definisce tensione di breakdown e può essere determinato a partire dalla 4.1.

4.2.2 Tensione di breakdown - Legge di Paschen

Una espressione analitica per il calcolo della tensione di breakdown si può ricavare sostituendo la relazione $\alpha/p = f\left(\frac{E}{p}\right)$ (3.16) nella 4.1:

$$\exp\left[f\left(\frac{E_{bd}}{p}\right)pd\right] = \frac{1}{\gamma} + 1 \qquad \Rightarrow \qquad f\left(\frac{E_{bd}}{p}\right)pd = \ln\left(\frac{1}{\gamma} + 1\right) = K$$

per un campo costante si ha poi che $V_{bd} = E_{bd} \cdot d$, quindi dalla precedente si può ricavare:

$$f\left(\frac{V_{bd}}{pd}\right) = \frac{K}{pd} \qquad \Rightarrow \qquad V_{bd} = \mathcal{F}\left(pd\right)$$

$$\tag{4.2}$$

La 4.2 è nota come legge di Paschen³ ed esprime chiaramente come la tensione di breakdown in presenza di un campo elettrico omogeneo, per dato gas e materiale degli elettrodi, dipenda esclusivamente dal prodotto pd; la relazione precedente può essere riportata graficamente, ottenendo le *curve di Paschen*, come mostrato in figura 4.4a. È immediato osservare che la tensione V_{bd} presenta un minimo per un certo valore pd_{min} . A tal proposito, si riporta la relazione tra $\alpha \in E$ ottenendo la curva 1 di figura 4.4b; riarrangiando poi la 4.1 si ottiene:

$$\frac{\alpha}{p} = \frac{K}{V_{bd}} \frac{E_{bd}}{p} \qquad \Rightarrow \qquad \tan \theta = \frac{\frac{\alpha}{p}}{\frac{E_{bd}}{p}} = \frac{K}{V_{bd}}$$
(4.3)

 α

 $^{^{3}\}mathrm{La}$ 4.2 non implica che la dipendenza sia lineare, anche se sperimentalmente questa è osservabile per un certo range di valori

a cui corrispondono delle rette con inclinazione $\tan \theta$ a seconda del valore di tensione applicato, indicate con 2, 3 e 4 in figura 4.4b.



Figura 4.4: Andamento della tensione di breakdown al variare del prodotto pd (a sinistra); relazione tra il criterio di Townsend $\alpha d = K$ e la funzione $\alpha/p = f\left(\frac{E}{p}\right)$ (a destra).

Per bassi valori di tensione la pendenza aumenta al punto che la retta (4) non interseca la curva 1 in nessun punto, pertanto non si ha breakdown; ai valori più elevati di tensione, la retta (2) incontra la curva 1 in due punti $W \in N$, corrispondenti rispettivamente alle lunghezze $d_W \in d_N$: riportando tali valori in figura 4.4a si ottengono i due valori $pd_W > pd_N$ a cui corrisponde lo stesso valore di tensione $V_{bd,NW}$. Per quanto detto esisterà allora un valore di tensione tale per cui la retta (3) risulta tangente alla curva 1: questa condizione permette di stabilire il valore minimo di tensione affinché il breakdown abbia luogo. Assumendo che γ si mantenga costante, sostituendo la 3.19 nella 4.1 si può scrivere:

$$Apd \exp\left(-\frac{Bpd}{V_{bd}}\right) = \ln\left(\frac{1}{\gamma} + 1\right) \qquad \Rightarrow \qquad \exp\left(\frac{Bpd}{V_{bd}}\right) = \frac{Apd}{\ln\left(\frac{1}{\gamma} + 1\right)}$$

passando ai logaritmi e risolvendo per V_{bd} si ottiene infine:

$$V_{bd} = \frac{Bpd}{\ln\left[\frac{Apd}{\ln\left(\frac{1}{\gamma} + 1\right)}\right]}$$
(4.4)

Differenziando la 4.4 rispetto a pd ed uguagliando a zero risulta:

$$\frac{\mathrm{d}V_{bd}}{\mathrm{d}(pd)} = \frac{B\ln\left(\frac{Apd}{K}\right) - Bpd\frac{K}{Apd}\frac{A}{K}}{\left[\ln\left(\frac{Apd}{K}\right)\right]^2} =$$
$$= \frac{B\ln\left(\frac{Apd}{K}\right)}{\left[\ln\left(\frac{Apd}{K}\right)\right]^2} - \frac{B}{\left[\ln\left(\frac{Apd}{K}\right)\right]^2} = 0 \qquad \Rightarrow \qquad \frac{1}{\ln\left(\frac{Apd}{K}\right)} = \frac{1}{\left[\ln\left(\frac{Apd}{K}\right)\right]^2}$$

da cui:

$$pd_{min} = \frac{\overline{e}}{A} \ln\left(\frac{1}{\gamma} + 1\right) \qquad \Rightarrow \qquad V_{bd,min} = \overline{e}\frac{B}{A} \ln\left(\frac{1}{\gamma} + 1\right) \tag{4.5}$$

nella quale le costanti che compaiono hanno il significato già visto, mentre con \overline{e} si è indicato il numero di Nepero: il valore di $\left(\frac{E}{p}\right)_{min}$ che deriva dalla 4.5 è noto come *punto di Stoletov* e corrisponde alla condizione in cui l'efficienza di ionizzazione degli elettroni risulta massima. Noti i valori delle costanti $A \in B$ è possibile determinare il valore minimo della tensione di breakdown, come riportato in tabella 4.1, ricordando che questi sono molto sensibili al materiale e alle condizioni del catodo, in accordo con la 4.5.

Per campi elettrici uniformi in aria, la 4.4 può essere sostituita dalla relazione proposta da Schumann [32], valida per un ampio ma limitato range di valori di E/p e α/p :

$$\frac{\alpha}{p} = C \left[\left(\frac{E}{p} \right) - \left(\frac{E}{p} \right)_c \right]^2 \tag{4.6}$$

dove C è una costante, E rappresenta l'intensità del campo elettrico ed E_c il suo valore limite per il quale ha luogo l'effettiva ionizzazione; dividendo la 4.1 per pd e combinandola con la 4.6 si ottiene:

$$V_{bd} = \left(\frac{E}{p}\right)_c pd + \sqrt{\frac{K}{C}}\sqrt{pd}$$
(4.7)

Gas	pd_{min}	$V_{bd,min}$
	$\operatorname{Torr}\operatorname{cm}$	V
Aria	0.55	352
Azoto	0.65	240
Idrogeno	1.05	230
Ossigeno	0.7	450
Esafluoruro di zolfo	0.26	507
Anidride carbonica	0.57	420
Neon	4.0	245
Elio	4.0	155

4 – Scariche elettriche all'interno di un gas

Tabella 4.1: Valori di $pd_{min} \in V_{bd,min}$ per diversi gas. Tratto da [37].

dove i valori di $E_c \in K/C$ possono essere trovati in letteratura ([34], [31]): i valori calcolati con la precedente trovano riscontro con i valori sperimentali, salvo per i più bassi valori del prodotto pd che, tuttavia, sono di scarso interesse.

Per concludere, si fa osservare che solitamente può essere conveniente esprimere la legge di Paschen 4.2 in termini di densità del gas δ , piuttosto che di pressione: in questo modo si può tenere conto dell'effetto della temperatura sul cammino medio $\overline{\lambda}$, dal momento che il numero di collisioni dipende dal prodotto δd e da γ . Considerando poi che le grandezze caratteristiche del breakdown risentono delle condizioni di pressione e temperatura, è possibile definire un coefficiente correttivo per riferirle alle condizioni standard (p = 760 Torr = 1.01 bar, t = 20 °C = 293 K); introducendo la densità relativa δ :

$$\delta = \frac{p}{760} \frac{293}{273 + t}$$

la tensione di breakdown nelle generiche condizioni può essere calcolata come:

$$V_{bd}\left(\delta\right) = \delta \cdot V_{bd}\left(\delta_{0}\right) \tag{4.8}$$

La legge di Paschen può essere efficacemente applicata ad un ampio range della variabile pd fino a valori di 1000 ÷ 2000 Torr cm; per valori o troppo bassi o troppo elevati si ha tuttavia una mancata corrispondenza con quanto osservato sperimentalmente: questo è dovuto, nel primo caso, al fatto che il breakdown dipende essenzialmente dai processi che coinvolgono il catodo e non dalle collisioni molecolari, mentre, nel secondo, il meccanismo di Townsend viene rimpiazzato da un altro fenomeno noto come streamers mechanism (se ne parlerà più approfonditamente nel seguito quando verrà introdotto il concetto di spark discharge).

4.2.3 Intensità di campo E_{bd}

L'intensità del campo elettrico E_{bd} si può determinare a partire dalla 4.4 dividendo ambo i membri per pd, ottenendo così:

$$\frac{V_{bd}}{pd} = \frac{E_{bd}}{p} = \frac{B}{\ln\left[\frac{Apd}{\ln\left(1+\frac{1}{\gamma}\right)}\right]}$$
(4.9)

Per valori costanti di pressione, E_{bd} diminuisce proporzionalmente con la distanza d, mentre il rapporto E_{bd}/p risente esclusivamente del prodotto pd; per valori costanti di d, invece, l'intensità del campo diminuisce con la pressione, ma con un andamento leggermente inferiore a quello direttamente proporzionale.



Figura 4.5: Relazione tra il coefficiente di ionizzazione α e l'intensità del campo E_{bd} al variare di pd (a sinistra); andamento del rapporto E_{bd}/p al variare di pd (a destra).

Applicando il criterio di Townsend per il breakdown espresso dalla 4.1 alla 3.16, riscritta come:

$$\frac{\alpha}{p}\left(pd\right) = K$$

risulta che questa è verificata per diversi valori del prodotto pd, come riportato in figura 4.5a. Assumendo che l'equazione sia inizialmente soddisfatta per il valore pd_A a cui corrisponde il rapporto $\binom{E_{bd}}{p}_A$, incrementando il prodotto pd fino a pd_B il

criterio risulta nuovamente soddisfatto per il valore inferiore di tensione $\binom{E_{bd}}{p}_B$: ripetendo lo stesso ragionamento per altri valori di pd si ottiene la relazione riportata in figura 4.5b. Mediante la 4.9 si ottengono valori di tensione in buon accordo con le osservazioni sperimentali, ma per un limitato range di valori pd; dividendo infine la 4.7 per pd si ha:

$$\frac{V_{bd}}{pd} = \frac{E_{bd}}{p} = \left(\frac{E}{p}\right)_c + \sqrt{\frac{K}{C}}\frac{1}{\sqrt{pd}}$$
(4.10)

che permette di ottenere risultati più precisi e per un range di valori più ampio.

4.2.4 Tempo di ritardo t

Nella sezione precedente si è definita la tensione di breakdown come quel valore soglia superato il quale si instaura un regime di corrente autosufficiente. Da un punto di vista più rigoroso, questo non può avvenire se il valore di tensione applicato agli elettrodi è esattamente V_{bd} ; in tal caso, infatti, si assisterebbe esclusivamente ad una moltiplicazione di elettroni dovuta ai successivi processi di ionizzazione: si avrebbe quindi $\mu = 1$, avendo indicato con $\mu = \gamma [\exp(\alpha d) - 1]$.

Per parlare di regime autosostenuto è necessario che la corrente cresca fino a valori considerevoli: ciò può accadere solo se agli elettrodi viene applicato una certa sovratensione $\Delta V = V_p - V_{bd} > 0$, per un periodo sufficiente a garantire una rapida produzione di nuovi elettroni, cioè tale che $\mu > 1$. In questo senso si può dire che se all'istante iniziale un solo elettrone lascia il catodo, all'istante successivo questi saranno pari a μ e in quello dopo μ^2 e così via. Il tasso di ionizzazione e la corrente aumentano fintanto che fenomeni di ricombinazione e resistenza esterna del circuito non ne arrestano la crescita: all'aumentare della corrente, infatti, la resistenza del circuito assorbe una tensione sempre maggiore, facendo diminuire quella applicata agli elettrodi. Nel momento in cui la tensione scende nuovamente al valore V_{bd} la corrente cessa di crescere e si stabilisce un regime stabile ed autosufficiente.

Nell'ipotesi di poter considerare la sovratensione costante ed assumendo che l'emissione secondaria di elettroni sia dovuta al bombardamento ionico, la crescita della corrente può essere espressa mediante la relazione proposta da Schade:

$$i(t) = i_0 \cdot \left[\frac{\mu}{\mu - 1} \exp\left(\frac{\mu - 1}{\mu}\frac{t}{\tau}\right) - \frac{1}{\mu - 1}\right] \exp\left(\alpha d\right)$$
(4.11)

dove si è indicato con τ il tempo necessario affinché uno ione copra la distanza anodocatodo e con t un istante generico (si tenga presente che l'emissione secondaria di elettroni al tempo t è dovuta agli ioni prodotti dagli elettroni emessi al tempo $t-\tau$). Dalla 4.11 si vede che la corrente cresce esponenzialmente con il tempo, tanto più rapidamente quanto maggiori risultano la sovratensione e $\mu - 1$.



Figura 4.6: Tempo di ritardo caratteristico del breakdown per sovratensione costante, scomposto nei due contributi $t_s \in t_f$.

Il tempo effettivo perché il breakdown avvenga dopo aver applicato una tensione sufficiente si definisce tempo di ritardo $t = t_s + t_f$ e si compone di due termini, come riportato in figura 4.6. Il primo, indicato con t_s , costituisce il tempo statistico affinché un elettrone sia disponibile per avviare il processo; il secondo, indicato con t_f è il tempo necessario perché il breakdown si sviluppi una volta innescato, e rappresenta il tempo di formazione.

Il tempo statistico dipende dall'entità della preionizzazione del gas e dalla distanza tra gli elettrodi, e può essere fortemente ridotto aumentando la sovratensione $V_p - V_{bd}$, dove V_p rappresenta la tensione di picco. Il tempo di formazione dipende invece dal meccanismo con cui si sviluppa il fenomeno, cioè da μ^{τ}/μ_{-1} : questo aumenta con la distanza d e con la disuniformità del campo, ma diminuisce all'aumentare della sovratensione. In generale il tempo di ritardo caratteristico perché il breakdown avvenga secondo il meccanismo di Townsend è dell'ordine dei $(10^{-5} \div 10^{-3})$ sec.

4.2.5 Considerazioni aggiuntive sul breakdown

Si citano, infine, alcuni aspetti legati al breakdown che però non saranno approfonditi ulteriormente, qui riportati solo per maggiore completezza.

Effetto dell'attachment elettronico sul breakdown

Nel capitolo precedente, parlando dei processi di ionizzazione primaria, si è accennato al fenomeno dell'attachment (detachment) elettronico: in particolari gas (elettronegativi), gli elettroni liberi vengono catturati dagli atomi neutri di gas e vi rimangono incollati, formando così degli ioni negativi. Il fenomeno si traduce in una maggiore resistenza al breakdown da parte del gas, infatti gli ioni, a parità di tensione applicata, sono troppo massicci per promuovere la ionizzazione rispetto agli elettroni: ne consegue che in questi gas il breakdown avviene comunque, ma per valori di tensione decisamente superiori.

Ricordando la 3.30 ed assumendo che i due coefficienti $\alpha \in \eta$ siano esclusivamente funzioni di E/p, in presenza di ionizzazione secondaria la corrente si può esprimere mediante la:

$$i = i_0 \cdot \frac{\frac{\alpha}{\alpha - \eta} \exp\left[(\alpha - \eta) d\right] - \frac{\eta}{\alpha - \eta}}{1 - \gamma \frac{\alpha}{\alpha - \eta} \left[\exp\left[(\alpha - \eta) d\right] - 1\right]}$$
(4.12)

Come fatto in precedenza, si può stabilire un criterio per il breakdown annullando il denominatore della precedente relazione, ottenendo:

$$(\alpha - \eta) d = \ln \left[\frac{\alpha - \eta}{\alpha \gamma} + 1 \right]$$
(4.13)

Osservando la 4.13 si può concludere che per $\alpha > \eta$ risulta sempre verificata, quindi il breakdown avviene indipendentemente dai valori assunti da α , $\eta \in \gamma$. Nel caso in cui, invece, risulti $\alpha < \eta$, per valori crescenti di d la precedente tende al valore asintotico $\alpha = \eta/_{1-\gamma}$; considerando che γ assume generalmente valori molto piccoli, la precedente diventa:

$$\alpha = \frac{\eta}{1 - \gamma} \qquad \Rightarrow \qquad \alpha = \eta$$

esiste pertanto un valore critico del rapporto E/p al di sotto del quale non può avvenire il breakdown.

Breakdown in presenza di un campo non uniforme

In presenza di campi elettrici fortemente non uniformi, ad esempio nel caso di elettrodi punto-piano, sfera-sfera o cilindro-cilindro, per il calcolo della tensione di breakdown occorre tenere in considerazione il fatto che α varia al variare della distanza tra gli elettrodi: un esempio per tutti è costituito da scariche per effetto corona, osservabile in presenza di campi estremamente non omogenei. Sebbene esistano molteplici applicazioni in cui questo tipo di scarica sia rilevate, per i fenomeni generalmente associati all'accensione risulta trascurabile, pertanto non si approfondirà ulteriormente questo aspetto: per le considerazioni future infatti, il campo elettrico tra gli elettrodi della candela sarà considerato omogeneo.

4.3 Glow discharge

La scarica a bagliore, o *glow discharge*, costituisce un primo esempio di regime di corrente autosostenuto: è caratterizzato dalla presenza di un catodo freddo, responsabile della produzione di elettroni per bombardamento ionico, e da una luminosità diffusa prodotta dal gas ionizzato che si viene a formare tra gli elettrodi (da qui il nome di scarica a bagliore).

La caratteristica distintiva di tale fenomeno è la presenza di una porzione di spazio posta in prossimità del catodo caratterizzata da una elevata densità di particelle cariche positivamente: la regione, indicata con il termine *cathode layer*, è soggetta ad un intenso campo elettrico e ad una notevole caduta di tensione $(100 \div 400$ V), generalmente indicata con il termine *cathode fall*, e presenta una estensione inversamente proporzionale alla pressione del gas. Se la distanza tra gli elettrodi è sufficientemente grande, tra la zona del catodo e l'anodo viene a crearsi una regione di plasma elettricamente neutro, indicata con il termine *positive column*, caratterizzata da un campo elettrico poco intenso e da un basso grado di ionizzazione: questo è responsabile della luminosità uniforme tipica del fenomeno e della condizione di non equilibrio termodinamico (*non thermal plasma*) che lo contraddistingue dal caso dell'arco elettrico. La zona centrale è infine separata dall'anodo da quella che si definisce *anode layer*, caratterizzata da un campo più intenso e dalla presenza di cariche negative. Quanto appena descritto è riportato in modo semplificato in figura 4.7, nella quale sono state riportate anche le diverse regioni di transizione:



Figura 4.7: Scarica a bagliore ottenuta mediante l'apparato di figura 4.1 e relative zone caratteristiche.

• Aston dark space: è una regione di spazio molto sottile che si trova immediatamente a ridosso del catodo, caratterizzata da un intenso campo elettrico responsabile dell'accelerazione degli elettroni. Questi risultano poi essere in numero maggiore rispetto agli ioni, pertanto la regione risulta caricata negativamente: tuttavia sia la densità che l'energia degli elettroni non è sufficiente da eccitare le molecole di gas, quindi la zona appare scura;

- *cathode glow*: si trova immediatamente dopo la precedente zona ed è caratterizzata da una maggiore presenza di ioni positivi. Gli elettroni presenti hanno energia sufficiente da eccitare gli atomi neutri durante una collisione, generando una debole emissione la cui estensione assiale dipende da pressione, temperatura e tipo di gas;
- cathode dark space: costituisce una zona scura della scarica caratterizzata da un campo elettrico intenso e da una concentrazione elevata di cariche positive. In questa regione si ha la maggiore produzione di elettroni secondari, pertanto è fondamentale per l'intero processo: gli ioni sono accelerati dal campo elettrico e spinti verso il catodo provocando l'emissione di nuovi elettroni che, a loro volta accelerati verso l'anodo, promuovono la formazione di nuovi ioni durante l'urto con le molecole neutre di gas;
- negative glow: costituisce la zona più luminosa di tutta la scarica in quanto è quella con la maggiore concentrazione di cariche sia positive che negative. Gli elettroni accelerati in prossimità del catodo che raggiungono le maggiori velocità portano alla ionizzazione del gas secondo il meccanismo di Townsend, mentre quelli più lenti ne promuovono l'eccitazione: in questa regione la corrente è quasi interamente trasportata dagli elettroni;
- *Faraday dark space*: è caratterizzata da una bassa concentrazione di cariche elettriche e, soprattutto, da elettroni debolmente energizzati a causa dei fenomeni di ricombinazione e diffusione che avvengono;
- *positive column*: rappresenta l'estensione della zona *NG* e costituisce la regione luminosa della scarica, caratterizzata da un campo elettrico con intensità sufficiente a garantire il solo mantenimento del grado di ionizzazione nel gas;
- *anode glow*: si presenta come una regione leggermente più luminosa e soggetta ad un campo elettrico più intenso rispetto alla precedente: l'anodo respinge infatti gli ioni positivi e attira a se gli elettroni accelerandoli il che causa una maggiore eccitazione e relativa emissione luminosa;
- *anode dark space*: si trova a ridosso dell'anodo e, per via della maggiore presenza di elettroni che si muovo verso quest'ultimo, risulta caricata negativamente e si presenta come una zona scura dal momento che non ci sono molecole sufficienti da eccitare.



Gli andamenti delle grandezze elettriche in una normale scarica a bagliore sono riportati in figura 4.8.

Figura 4.8: Distribuzione spaziale, per una tipica scarica a bagliore, di: intensità della scarica \mathcal{J} , potenziale ϕ , campo elettrico E, densità di corrente per elettroni j_e e ioni j_+ , densità di cariche negative n_e e positive n_+ , regione di carica spaziale ρ . Tratto da [27].

Per concludere si fa notare che sebbene questa sia la struttura tipica del fenomeno, a seconda delle condizioni in cui questo si sviluppa essa può più o meno variare: in generale la regione PC può essere presente o meno, mentre la presenza del *cathode layer* è necessaria affinché la scarica possa formarsi e sostenersi. La stratificazione luminosa che contraddistingue il fenomeno varia infatti al variare della distanza tra gli elettrodi e, soprattutto, dalla pressione del gas: all'aumentare di questa le diverse regioni tendono ad assottigliarsi e a spostarsi verso il catodo, tanto che per pressioni dell'ordine dei 100 Torr la regione di Faraday si espande, mentre la colonna di plasma luminosa tende a concentrarsi sull'asse; riducendo invece la distanza la zona PC si contrae mentre quelle comprese tra questa e il catodo rimangono sostanzialmente inalterate.

4.3.1 Caratteristica tensione-corrente

Si è visto nella sezione relativa al breakdown che una volta raggiunta la tensione V_{bd} , si instaura un regime autosostenuto nel quale la corrente scorre liberamente tra i due elettrodi: teoricamente parlando, il valore di soglia tenderebbe ad infinito, tuttavia qualunque circuito che comprende un gap di scarica presenta una certa caduta ohmica Ω che impone un limite al valore massimo di corrente circolante a fronte di una forza elettromotrice ξ fornita dalla sorgente di alimentazione. Molte delle caratteristiche della scarica che si instaura in seguito al breakdown sono determinate dal valore della corrente circolante, pertanto la resistenza del circuito gioca un ruolo fondamentale.

A tal proposito si considera nuovamente la caratteristica tensione-corrente nel caso di elettrodi piani e paralleli già vista ad inizio capitolo; con le notazioni appena introdotte, si definisce la *retta di carico*⁴ come:

$$\xi = V + i\Omega \tag{4.14}$$

che corrisponde appunto ad una retta sul piano (V, i), come riportato in figura 4.9: la corrente del circuito assumerà quei valori di tensione e corrente corrispondenti all'intersezione tra la 4.14 e la curva V - i.



Figura 4.9: Caratteristica V - i e retta di carico: AB regime non autosostenuto, BC regime di Townsend (dark discharge), DE scarica a bagliore normale e anormale EF, FG transizione glow-arc, GH arco elettrico.

Variando i parametri di f.e.m. o resistenza della 4.14 si possono interpretare agevolmente i vari regimi di scarica che si incontrano. Fintanto che la tensione non raggiunge valori sufficientemente elevati, la resistenza del circuito risulta talmente elevata da permettere solo il passaggio di una debole corrente; la densità di cariche,

 $^{^4\}mathrm{La}$ retta di carico ha une pendenza tanto maggiore quanto maggiore è il valore della resistenza $\Omega.$

sia positive che negative, è pertanto trascurabile quindi il campo elettrico si può considerare costante tra i due elettrodi e pari a E = V/d: la situazione è rappresentata dal tratto AB. Raggiunta la condizione $V = V_{bd}$, la corrente si può autosostenere grazie ai fenomeni di ionizzazione e di emissione secondaria dal catodo; fintanto che il campo risulta indipendente dalla densità di cariche, la tensione si mantiene costante e la corrente si assesta a valori di $(10^{-10} \div 10^{-5})$ V: questa modalità è nota come scarica oscura di Townsend (tratto BC) in quanto non si ha nessuna apprezzabile emissione luminosa.

Avvenuto il breakdown, la resistenza del circuito si riduce drasticamente, determinando un apprezzabile calo di tensione (tratto CD) che, infine, si assesta e rimane pressoché costante per un ampio range di valori di corrente; la situazione corrisponde alla zona DE e rappresenta una scarica a bagliore definita *normale*: all'aumentare della corrente, la densità al catodo si mantiene costante perché a variare è la superficie attraverso cui scorre la corrente stessa. Una volta che tutta la superficie degli elettrodi risulta occupata, per incrementare la corrente è necessario aumentare la tensione: questo si traduce in una maggiore richiesta di elettroni, a cui corrisponde un aumento della densità di corrente al catodo e il passaggio ad un regime detto *anormale*. Questa è rappresentata dal tratto EF: dopo aver esaurito ogni superficie disponibile, la scarica si espande e si fa più intensa, determinando valori maggiori di corrente fintanto che, per $i \simeq 1$ A, non si ha la transizione (FG) e il passaggio al regime di arco elettrico (GH).

4.3.2 Cathode layer

L'importanza di questa zona è legata principalmente al ruolo che essa svolge nel determinare la transizione dal regime di Townsend a quello di glow e alla conseguente elevata caduta di tensione, tipica del fenomeno. Osservando gli andamenti di figura 4.8, si osserva immediatamente come la differenza di potenziale non sia uniforme tra i due elettrodi: in corrispondenza del catodo la caduta di potenziale (negativa) risulta molto maggiore di quella che si registra all'anodo, differenza che si deve alla presenza di una distribuzione non omogenea delle cariche elettriche lungo x, che provoca pertanto una distorsione nel campo elettrico E.

Importanza della distribuzione di densità di carica

In condizioni di *dark discharge*, trascurando gli effetti di diffusione e ricombinazione, le sorgenti principali di carica sono associate ai soli fenomeni di ionizzazione, cioè $q = \alpha n_e v_{e,d}$;⁵ in termini di densità di corrente di elettroni $j_e = -en_e v_{e,d}$ e ioni $j_+ = en_+ v_{+,d}$, in condizioni stazionarie si ha:

⁵Si ricorda che v_d corrisponde alla velocità di drift.

$$\begin{cases} \frac{\mathrm{d}j_e}{\mathrm{d}x} = \alpha j_e \\ \frac{\mathrm{d}j_+}{\mathrm{d}x} = -\alpha j_+ \end{cases} \Rightarrow \quad j_e + j_+ = j = COST \qquad (4.15)$$

Per poter proceder all'integrazione delle precedenti è necessario determinare le condizioni al contorno; queste corrispondono alla condizione di emissione secondaria al catodo (x = 0) e assenza di emissione all'anodo (x = L), cioè:

$$\begin{cases} j_{e,C} = \frac{\gamma}{1+\gamma}j\\ j_{+,A} = 0\\ j_{e,A} = j \end{cases}$$
(4.16)

Integrando allora le 4.15 tenendo conto delle 4.16 e assumendo che $\alpha [E(x)] = COST$, si ottiene:

$$\begin{cases} j_e = \frac{\gamma}{1+\gamma} j \exp(\alpha x) \\ j_+ = j \left[1 - \frac{\gamma}{1+\gamma} \exp(\alpha x) \right] \end{cases}$$
(4.17)

Osservando poi che la condizione all'anodo, espressa dalla 4.16, può essere soddisfatta solo se è verificata la condizione di Townsend per il breakdown data dalla 4.1, le 4.17 possono essere riformulate come:

$$\begin{cases} \frac{j_e}{j} = \exp\left[-\alpha \left(L - x\right)\right] \\ \frac{j_+}{j} = 1 - \exp\left[-\alpha \left(L - x\right)\right] \end{cases} \Rightarrow \qquad \frac{j_+}{j_e} = \exp\left[\alpha \left(L - x\right)\right] - 1 \qquad (4.18)$$

Dalla 4.18 segue che la corrente dovuta alle cariche positive è di gran lunga superiore a quella trasportata dagli elettroni per buona parte della distanza L: la situazione è mostrata chiaramente in figura 4.10, dalla quale si vede inoltre che la differenza di densità di carica è ancora più marcata.

Questa non uniforme distribuzione di cariche elettriche è responsabile della distorsione subita dal campo elettrico E in prossimità del catodo; ritenendo valide le ipotesi precedentemente fatte per la determinazione delle densità di corrente, la distribuzione spaziale del campo elettrico in direzione x può essere espressa mediante la:

$$\frac{\mathrm{d}E}{\mathrm{d}x} = 4\pi e \left(n_{+} - n_{e}\right) \tag{4.19}$$



Figura 4.10: Distribuzione delle correnti j_+ e j_e , e relative densità di carica nel caso di campo non distorto. Tratto da [27]

assumendo poi che $n_+ \gg n_e$, $||j_+|| \gg ||j_e||$, $n_+ \simeq {}^{j}/{}_{ev_{+,d}} \simeq {}^{j}/{}_{e\mu_+E}$, ed indicando con E_C il valore del campo in corrispondenza del catodo si ricava:

$$E = E_C \sqrt{1 - \frac{x}{d}}$$
 con $d = \frac{\mu_+ E_C^2}{8\pi j}$ (4.20)

Il campo decresce avvicinandosi all'anodo e aumenta vicino al catodo tanto maggiore risulta essere la densità di corrente, come riportato in figura 4.11. Da questa si osserva che in assenza di corrente, il campo è costante e pari al valore E_{bd} (curva 1), mentre che bassi valori (curva 2) questo si annulla per una distanza $d_2 > L$, cioè ad una distanza superiore a quella massima della scarica. Aumentando ulteriormente j, il campo arriva ad annullarsi in corrispondenza dell'anodo (curva 3) cioè per:

$$j_L = \frac{\mu_+ E_C^2}{8\pi L}$$

Per valori di corrente ancora più elevati, il campo espresso dalla 4.20 tende ad annullarsi ad una distanza d dal catodo via via minore: tuttavia per 0 < d < L, la 4.20 perde di significato perché vengono a cadere le ipotesi di partenza, pertanto la distribuzione di n_e , n_+ e E assume l'andamento riportato in figura 4.8.

Per valori di corrente tali da non causare eccessiva distorsione del campo, il valore in corrispondenza del catodo E_C può essere assunto pari a quello di soglia E_{bd} ; tenendo conto di ciò, la densità di corrente in corrispondenza della quale si ha il passaggio al regime di glow può esser stimata attraverso la seguente:

$$\frac{j_L}{p^2} \simeq \frac{(\mu_+ \cdot p) \, V_{bd}^2}{8\pi \, (pL)^3} \tag{4.21}$$

Tendendo conto delle considerazioni ora esposte, la condizione per il passaggio ad un regime autosostenuto non è più espressa dalla 4.1, ma dalla più generica:



Figura 4.11: Distorsione del campo elettrico per effetto della distribuzione di densità di carica: le curve si riferiscono a densità di correnti crescenti. Tratto da [27].

$$\int_{0}^{L} \alpha \left[E\left(x\right) \right] \, \mathrm{d}x = \ln \left(1 + \frac{1}{\gamma} \right) \tag{4.22}$$

dove l'integrale a primo membro è esattamente pari a $\alpha(E_{db}) L$ (si tenga conto che $||E_C|| > E_{bd}$ e $||E_A|| < E_{bd}$ perché $\alpha(E)$ è una funzione crescente di E, mentre ||E(x)|| è decrescente con x se il campo E risulta distorto).

Caduta di tensione al catodo

La teoria della caduta di potenziale all'anodo (*cathode fall*), sviluppata da VonEngel e Steenbeck [9] nel 1934, è di fondamentale importanza per quanto riguarda la fisica della scarica a bagliore: l'elevato campo elettrico in corrispondenza del catodo permette agli elettroni di acquisire sufficiente velocità ed energia per portare a ionizzazione le molecole di gas.

Si considera a tal proposito che la caduta di tensione al catodo sia costante; assumendo poi che pressione e corrente non siano eccessivamente basse, la superficie attraversata da corrente è sufficientemente ampia da poter considerare il *cathode layer* piano e monodimensionale, con uno spessore $d \ll L$. Il campo elettrico all'anodo risulta poi molto inferiore rispetto quello al catodo, pertanto lo si può considerare circa nullo; inoltre si può trascurare l'eventuale corrente prodotta da ioni positivi proveniente dall'anodo. Sula base di queste ipotesi, la zona adiacente al catodo soddisfa la condizione 4.22; sostituendo ad L lo spessore d, la *tensione al catodo* vale:

$$V_C = \int_0^d E \,\mathrm{d}x \qquad \text{con} \qquad E \equiv \|E\| \tag{4.23}$$

VonEngel e Steenbeck hanno risolto le 4.22, 4.23 e 4.19; assumendo valida per $\alpha(E)$ la 3.19 e considerando una distribuzione lineare del campo elettrico nell'intervallo $0 \le x \le d$ del tipo:

$$E(x) = E_C\left(1 - \frac{x}{d}\right) \tag{4.24}$$

risultano valide le relazioni 4.4 e 4.9, pertanto risulta:

$$V_C = \frac{Bpd}{C + \ln(pd)}, \quad \frac{E_C}{p} = \frac{B}{C + \ln(pd)} \qquad \text{con} \qquad C = \ln\frac{A}{\ln\left(1 + \frac{1}{\gamma}\right)} \qquad (4.25)$$

Ricordando poi quanto messo in evidenza nella sezione precedente, e cioè che la zona del catodo è interessata da una maggiore densità di cariche positive, in virtù della 4.19, questa si può approssimare come:

$$n_+ \simeq \frac{E_C}{4\pi ea}$$

che permette di esprimere da densità di corrente come:

$$j = (1+\gamma)\,\mu_+ \frac{V_C^2}{4\pi d^3} \tag{4.26}$$

Le 4.25 e 4.26 mettono in evidenza come V_C dipenda da *j* secondo il parametro *d* e come la funzione $V_C(pd)$ descriva una curva di Paschen: essa presenta allora un valore minimo pari al valore di tensione $V_{bd,min}$ per il gap considerato.

4.3.3 Zona di transizione

La zona di transizione comprende le regioni NG e FS indicate in figura 4.7. Gli elettroni accelerati dall'intenso campo elettrico al catodo, dissipano la propria energia eccitando e ionizzando le molecole neutre di gas, causando un'elevata emissione luminosa: questa è emessa principalmente in seguito ai fenomeni di ricombinazione che avvengono tra gli ioni. Allo stesso tempo, però, questo provoca una diminuzione dell'intensità del campo in quanto la densità di corrente rimane costante: considerando costante la mobilità degli elettroni μ_e , risulta $n_e E = COST$ pertanto il campo in corrispondenza della massima densità di elettroni risulta inferiore di quello che si registra nella zona PC.

Nella regione FS il campo elettrico è nuovamente controllato dalla distribuzione di carica e la cammino libero medio degli elettroni, che trasportano la maggior parte della corrente: dalla 4.19 risulta allora che il campo elettrico aumenta spostandosi all'interno della zona di Faraday fino a raggiungere un valore tale da fornire l'energia cinetica agli elettroni sufficiente a promuovere la ionizzazione delle molecole neutre, con conseguente emissione luminosa.

4.3.4 Positive column

Si tratta di una colonna di plasma la cui unica funzione è quella di chiudere il circuito. Il suo stato, inoltre, è pressoché indipendente da quanto accade in prossimità degli elettrodi, mentre risente dal valore della corrente e da fenomeni locali: questi riguardano in particolare la perdita di elettroni, che devono essere rimpiazzati da nuove reazioni di ionizzazione. Il campo E assume quindi un valore costante poiché il tasso di ionizzazione dipende dalla distribuzione di energia degli elettroni: questo determina l'andamento della caduta di tensione lungo una colonna di plasma di lunghezza data. Assumendo una distribuzione maxwelliana, la relazione tra questi due parametri permette di stabilire il valore di temperatura T_e necessario per compensare le perdite tramite ionizzazione e il campo necessario per fornire la sufficiente energia agli elettroni: in generale si osserva che la temperatura degli elettroni è molto superiore a quella del gas circostante ($T_e \gg T$), pertanto il plasma viene a trovarsi in una condizione di non equilibrio termodinamico.

4.3.5 Anode layer

In corrispondenza dell'anodo non si hanno ioni positivi, poiché questi non vengono prodotti dalla superficie e, inoltre, ne vengono respinti. L'anodo è separato dal plasma della zona PC da uno zona caricata negativamente, con un'intensità di campo decrescente muovendosi verso la colonna di plasma. La densità di corrente elettronica è molto limitata, mentre quella ionica aumenta da zero a $\mu_{+}/\mu_{e}j$ in seguito ad un esiguo numero di fenomeni ionizzanti, per poi fluire all'interno della regione di plasma: visto che il numero di elettroni prodotti è molto inferiore rispetto alla regione del catodo, la relativa caduta di potenziale lo è altrettanto e, in generale, si assesta intorno ai $10 \div 20$ volt.

4.4 Arc discharge

Con il termine *arco elettrico* si fa generalmente riferimento ad un tipo di scarica caratterizzata da elevati valori di corrente e basse cadute di potenziale al catodo,⁶ caratteristiche che la distinguono nettamente dalla scarica a bagliore. Da un punto di vista fisico, queste differenze sono dovute ai diversi meccanismi di emissione relativi al catodo che, in questo caso, risultano più efficienti e permettono di estrarre un numero maggiore di elettroni, assicurando correnti maggiori con una modesta caduta di tensione: in generale i fenomeni più rilevanti sono l'emissione termoionica e quella di campo, o una loro combinazione. A causa poi delle elevate correnti in gioco il

⁶In generale si osservano valori di corrente compresi tra $(1 \div 10^5)$ A con cadute di tensione dell'ordine dei $20 \div 30$ V.

catodo raggiunge temperature molto elevate, sull'intera superficie o solo localmente, il che ne provoca la vaporizzazione del materiale, determinando una considerevole usura dell'elettrodo.⁷

In generale tutte le scariche elettriche che avvengono in regime di corrente continua possono essere considerate archi, ad eccezione della scarica a bagliore di cui si è parlato in precedenza. Per questo motivo si possono distinguere diversi tipi di arco a seconda dei fenomeni che coinvolgono il catodo, dello stato del plasma nella zona luminosa della scarica (*positive column*) o delle caratteristiche del gas in cui questo avviene; qui sono riportati quelli più comuni:

- arco a catodo caldo: è caratterizzato da un catodo che raggiunge temperature superiori anche ai 3000 K e quindi caratterizzato esclusivamente dall'emissione termoionica. Le correnti risultano estremamente alte e interessano un'ampia superficie del catodo: in generale colo materiali refrattari con punti di ebollizione e fusione molto alti;
- arco con catodo riscaldato esternamente: si tratta di una caso particolare del precedente, dove il catodo non riceve calore dall'arco, ma da una sorgente esterna;
- arco a catodo freddo con hot spots: in questo caso il catodo ha una temperatura media inferiore rispetto ai casi precedenti, ma presenta delle zone localizzate in cui questa è molto alta. In corrispondenza di questi punti, che si formano e scompaiono dalla superficie in maniera casuale, le densità di corrente risultano molto elevate e determinano la vaporizzazione del materiale e l'emissione di elettroni per via termoionica;
- *arco sotto vuoto*: come per il precedente, il catodo presenta dei punti caldi da cui ha origine la scarica che, però, non si propaga all'interno di un gas, ma attraverso il metallo evaporato dagli elettrodi;
- *arco ad alta pressione*: per valori di pressione fino a quella ambiente, l'arco che si forma è caratterizzato dalla presenza di plasma in equilibrio termodinamico, con temperature solitamente comprese tra ($6000 \div 12000$) K che possono anche arrivare a $50\,000$ K in particolari condizioni;
- *arco ad elevatissima pressione*: si tratta di un caso particolare che corrisponde a valori di pressione superiore a 10 bar. A causa dell'elevata densità del plasma, quasi tutto il calore prodotto viene convertito in energia radiante alla colonna di plasma;

 $^{^{7}}$ Si deve comunque tenere presente che la presenza di *hot spots* e la conseguente vaporizzazione che ne consegue sono elementi fondamentali per sostenere l'arco.

• *arco a bassa pressione*: in queste condizioni il plasma che si forma si trova in condizioni di non equilibrio non tanto differenti da quelle osservate per le scariche a bagliore, ad eccezione del grado di ionizzazione che è comunque più elevato.

Per quello che riguarda i comuni processi di accensione all'interno di un motore, le modalità che normalmente si incontrano comprendono archi ad alta pressione con catodo ad elevata temperatura: nelle sezioni seguenti si concentrerà maggiormente l'attenzione su questi ultimi, fornendo tuttavia indicazioni valide anche negli altri casi.

4.4.1 Inizializzazione dell'arco

Il modo più semplice per generare un arco elettrico consiste nel mettere in contatto tra loro gli elettrodi e applicarvi una adeguata differenza di potenziale che induca delle correnti elevate: separando gli elettrodi, nella zona di contatto si registrano elevate temperature che promuovono l'emissione di elettroni e la vaporizzazione del materiale, in questo modo l'arco si può immediatamente propagare attraverso i vapori liberati.

Alternativamente è possibile applicare una tensione sufficientemente elevata ai due elettrodi in modo che il breakdown abbia luogo: così facendo l'evoluzione dell'arco segue la caratteristica tensione-corrente di figura 4.9. La transizione dal regime di glow corrisponde al tratto FG ed è causato dal progressivo riscaldamento del catodo per via delle correnti sempre maggiori che si riscontrano: la comparsa di pozze di materiale fuso sull'elettrodo innesca i fenomeni di emissione termoionica, permettendo all'arco di instaurasi in maniera stabile. L'arco prosegue quindi nel tratto GH, raggiungendo valori sempre più elevati di corrente, ma con valori di tensione molto più bassi di quelli che si registrano per le scariche a bagliore. A differenza di quanto visto per la scarica a bagliore, l'arco elettrico non presenta una struttura altrettanto articolata: in generale questa prevede tre regioni principali che sono la colonna di plasma che collega tra loro anodo e catodo e le due zone di transizione in corrispondenza degli elettrodi, dove avvengono i fenomeni di emissione termoionica

4.4.2 Struttura e caratteristiche del fenomeno

La struttura generale di un arco elettrico prevede tre zone, ovvero:

- 1. *cathode layer*: costituisce la zona prossima al catodo ed è caratterizzata da una caduta di tensione modesta;
- 2. positive column: collega tra loro i due elettrodi, chiudendo il circuito;

3. *anode layer*: è la zona adiacente all'anodo, soggetta ad una caduta di tensione simile a quella di una scarica a bagliore.

Cathode layer

La funzione svolta dal *cathode layer* è essenzialmente la stessa già vista nel regime di glow e, cioè, quella di emettere gli elettroni necessari per la ionizzazione del gas: in questo caso però il processo è profondamente diverso in quanto coinvolge fenomeni di emissione termoionica, che risultano molto più efficienti dei precedenti. Da osservazioni sperimentali, si vede che il contributo alla corrente complessiva dato dagli elettroni emessi dal catodo è pari a $S \simeq 0.7 \div 0.9$, mentre quella dovuta agli ioni vale $1 - S \simeq 0.1 \div 0.3$: ne consegue che il numero di elettroni emessi per ione vale $S/_{1-S} \simeq 2 \div 9$, efficienza che può essere garantita solo per elevati valori di corrente che aumentino la temperatura del catodo. La maggiore efficienza dell'emissione termoionica determina inoltre una minore caduta di tensione al catodo, influenzata anche dal rapporto tra corrente elettronica e ionica che, nel caso dell'arco elettrico, è interamente dovuta agli elettroni: da questo segue che la caduta al catodo si assesta intorno ai valori della tensione di ionizzazione. Gli andamenti qualitativi di temperatura, tensione e campo elettrico sono riportati in figura 4.12.



Figura 4.12: Distribuzione di temperaura, potenziale e campo elettrico per un arco che si estende da catodo ad anodo. Tratto da [27].

Si nota come la temperatura al catodo sia circa la metà di quella che si registra

nella colonna di plasma, pertanto la produzione di particelle cariche non è imputabile solo ad effetti termici: in generale la presenza di un intenso campo elettrico contribuisce a ridurre il lavoro di estrazione ϕ del materiale per effetto Schottky e la produzione di elettroni per effetto tunnel. Al catodo si registrano inoltre alte densità di correnti e un'elevata presenza di cariche positive, che determinano una caduta repentina dell'intensità del campo elettrico e della tensione: questo avviene in una regione di spessore inferiore al cammino libero λ , caratterizzato da una totale assenza di collisioni e in cui gli elettroni acquisiscono buona parte dell'energia necessaria per la ionizzazione. La frazione mancante viene acquisita in una zona intermedia che separa la precedente dalla colonna di plasma, dove gli atomi di gas vengono ionizzati in seguito all'impatto con gli elettroni: in questa zona, caratterizzata da un campo nettamente inferiore, si ha la maggiore produzione di ioni che trasportano corrente al catodo. La situazione è riportata, per maggior chiarezza, in figura 4.13.



Figura 4.13: Distribuzione di densità di cariche, corrente e campo elettrico nella regione del catodo. Tratto da [27].

Considerando la zona 1, in cui non si hanno collisioni, le densità di corrente relativamente ad elettroni e ioni valgono:

$$j_e = Sj = en_e v_e, \quad j_+ = (1 - S)j = en_+ v_+$$

ed assumendo poi che tutta la caduta di tensione si concentri in questa zona e che il campo in corrispondenza della colonna di plasma sia molto inferiore rispetto a

quello al catodo, le velocità delle cariche dipendono esclusivamente dalla caduta di potenziale a cui sono soggette:

$$v_e = \sqrt{\frac{2eV}{m}}, \quad v_+ = \sqrt{2e\frac{V_C - V}{M}}$$

Il campo elettrico al catodo può allora espresso secondo la relazione proposta da McKeown:

$$E_{C}^{2} = \frac{16\pi j}{\sqrt{2e}} \left[(1-S)\sqrt{M} - S\sqrt{m} \right] \sqrt{V_{C}}$$
(4.27)

Si pone infine l'attenzione su un altro fenomeno che riveste particolare importanza, ossia la formazione di zone di materiale fuso sulla superficie del catodo, o *cathode spots*, sui quali si concentrano correnti localizzate molto elevate: questi permettono infatti di garantire il flusso di correnti elevate anche nel caso in cui l'intera superficie del catodo possa essere portato alla temperatura necessaria. La formazione di queste pozze, infatti, fa in modo che parte del materiale vaporizzi: in questo modo un certo numero di atomi di materiale viene immesso all'interno del gas, il che fa aumentare il flusso di ioni per sostenere l'emissione di elettroni dal catodo. La formazione di questi *hot spots* non è del tutto chiara; sperimentalmente è stato osservato che:

- durante le prime fasi dell'arco vengono a formarsi un numero casuale di *spots* sulla superficie del catodo, con una dimensione di circa 10^{-3} mm: questi provocano un'erosione del catodo trascurabile, dovuta principalmente a microscopiche esplosioni di irregolarità superficiali. Con l'avanzare del tempo, le zone interessate si fanno più grandi e si vedono interessate da una maggiore erosione causata da calore e vaporizzazione.
- la corrente che può attraversare uno di questi punti presenta un certo valore minimo, al di sotto del quale l'arco non si può sostenere. Per correnti via via maggiori, il numero si *spots* aumenta in seguito a moltiplicazione per scissione;
- le zone interessate da un maggiore flusso di energia trasportata dagli ioni emettono getti di materiale vaporizzato ad elevata temperatura: questo determina una densità di particelle e un grado di ionizzazione piuttosto elevato;
- l'emissione di nuovi elettroni è dovuto al fenomeno dell'emissione di campo termoionica, l'unica a poter fornire le densità di correnti necessarie.

Positive column

Per quanto riguarda la colonna di plasma, questa si comporta in modo molto diverso a seconda che la scarica avvenga a bassa o ad alta pressione: nel primo caso si registrano temperature degli elettroni anche di 40 000 K contro i circa 300 K del gas, pertanto il plasma possiede le stesse caratteristiche viste per le scariche a bagliore; ad alta pressione le due temperature sono uguali e pari a (6000 ÷ 12000) K, pertanto il plasma si può considerare in equilibrio termodinamico. In quest'ultimo caso la ionizzazione avviene principalmente per via termica e dipende dall'energia che gli elettroni scambiano con altre particelle e non dal campo elettrico. Per determinare le caratteristiche del plasma, in particolare la sua temperatura, si può considerare che questo abbia forma cilindrica, che sia soggetto ad un campo E uniformemente distribuito lungo la sua lunghezza e si sviluppi all'interno di un tubo di raggio Rcon gas in quiete; sotto queste ipotesi, si può scrivere il seguente bilancio:

$$-\frac{1}{r}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}rJ + \sigma\left(T\right)E^{2} = 0 \qquad \mathrm{con} \qquad J = -\lambda\frac{\mathrm{d}T}{\mathrm{d}r} \qquad (4.28)$$

dove λ rappresenta la conducibilità termica e σ la conductività, mentre per la corrente si ha invece:

$$i = E \int_0^R \sigma 2\pi r \,\mathrm{r}r \tag{4.29}$$

Il sistema costituito dalle precedenti equazioni permette di determinare il campo E(i) una volta note le quantità $\sigma(T) \in \lambda(T)$, tenendo presente le condizioni al contorno di temperatura nulla per r = R e comportamento simmetrico rispetto all'asse del cilindro. Introducendo il potenziale del flusso di calore, definito come:

$$\Theta = \int_0^T \lambda \,\mathrm{d}T \tag{4.30}$$

il sistema si può studiare tramite la sola funzione $\sigma(\Theta)$, la cui non linearità non permette tuttavia di trovare una soluzione analitica generale. Tra le diverse soluzioni proposte per risolvere il problema, quella che fornisce la descrizione più appropriata è stato proposto da Steenbeck e prende il nome di *arc channel model*, di cui è riportata una rappresentazione semplificata in figura 4.14; questo sostanzialmente prevede che:

- per $T \simeq 6000 \text{ K}$ la conduttività è rilevante e cresce con la temperatura, mentre si esaurisce velocemente per temperature inferiori;
- la corrente si annulla molto velocemente allontanandosi dall'asse del canale.

Introducendo il raggio effettivo r_0 , la conduttività all'esterno risulta nulla, mentre per $r < r_0$ è prossima al valore massimo corrispondente alla temperatura massima sull'asse $\sigma_{max} \equiv \sigma [T(0)]$. Sulla base di queste ipotesi, la 4.29 può essere approssimata come:



Figura 4.14: Distribuzione di temperatura e conduttività nel canale di plasma. Tratto da [27].

$$i = \sigma_{max} E \pi r_0^2 \tag{4.31}$$

che permette di integrare la 4.28 ottenendo:

$$\Theta_{max} = \int_0^{T_{max}} \lambda \, \mathrm{d}T = \frac{W}{2\pi} \ln\left(\frac{R}{r_0}\right) \qquad W = \frac{i^2}{\pi r_0^2 \sigma_{max}} = i \cdot E \tag{4.32}$$

Dal momento che *i* e *R* sono parametri noti, nella 4.32 compaiono tre variabili; applicando tuttavia il principio dell'energia minima è possibile determinare l'andamento della temperatura e, quindi, il suo massimo: questa dovrà avere una distribuzione tale che il rapporto $E = {}^{W}/_{i}$ sia minimo. Tenendo infine in considerazione anche la conduzione termica attraverso la superficie cilindrica $2\pi r_{0}$ che si ha per effetto della differenza di temperatura tra il plasma e il gas esterno, la chiusura del sistema di equazioni precedenti è espressa dalla generica relazione integrale [27]:

$$\int_{0}^{M_{max}} \sigma \lambda \, \mathrm{d}T = W \frac{\sigma_{max}}{4\pi} \tag{4.33}$$

La temperatura T_{max} assumerà quindi un valore tale per cui la caduta di temperatura nella regione di rilascio di energia, associata al trasporto di calore, garantisca una condizione di equilibrio con la zona esterna al canale; questa viene espressa mediante la seguente:
$$T_{max} = \sqrt{\frac{E_{ion}}{8\pi\lambda_{max}K_B}W} \tag{4.34}$$

Noto pertanto W, tramite le precedenti si possono determinare le caratteristiche del canale di plasma in termini di raggio e temperatura.

Anode layer

Anche la regione dell'anodo è interessata da fenomeni particolarmente complessi, in quanto l'arco può svilupparsi in modi diversi coinvolgendo cioè tutta la superficie o solo specifici punti. Per quanto riguarda la caduta di tensione che si registra sull'anodo, questa assume valori simili a quelli visti per il regime di glow; più nel dettaglio la differenza di potenziale in questo caso è data da due contributi:

- il primo dipende dalla presenza di una regione caricata negativamente che deve compensare l'assenza di corrente dovuta a ioni, e corrisponde circa alla tensione di ionizzazione o eccitazione del gas;
- il secondo è legato sostanzialmente alla geometria dell'elettrodo: se questo presenta una superficie inferiore alla sezione trasversale dell'arco, allora la caduta di tensione deve essere maggiore per garantire un campo più intenso che aumenti il numero di elettroni in modo da compensare la riduzione di area.

In generale il secondo contributo è modesto e, ad ogni modo, la caduta di tensione più rilevante rimane quella sul catodo.

4.5 Spark discharge

In presenza di gas ad elevata pressione o per elettrodi posti a distanze superiori ad 1 cm o in presenza di elevate sovratensioni, si assiste ad un tipo di scarica molto diversa dalle precedenti, estremamente rapida e fortemente non stazionaria: si parla pertanto di *spark discharge*. In questi casi, raggiunta la tensione di breakdown, il dielettrico viene attraversato da una scintilla che si propaga molto rapidamente tra i due elettrodi in modo alquanto irregolare: a questa si accompagna poi uno scricchiolio, tipico del fenomeno, dovuto alla formazione e alla propagazione di un'onda d'urto in seguito all'elevato rilascio di energia termica che provoca un repentino aumento di pressione all'interno del gas. La colonna di gas ionizzato che si viene così a formare è capace di trasportare elevate correnti a fronte di ridotte tensioni applicate agli elettrodi: se poi la sorgente di alimentazione è sufficientemente potente a sostenere elevati valori di corrente per tempi considerevoli, allora si può instaurare un regime di arco elettrico, secondo le modalità viste nella sezione precedente. Questo fenomeno risulta molto più complicato di quelli visti finora, a partire dal processo di innesco che, a differenza di quanto visto per gas a bassa pressione o in generale per valori modesti del prodotto pd, avviene secondo quello è noto come streamer breakdown, del quale si cercherà di fornire un quadro il più completo possibile senza, tuttavia, entrare troppo nel dettaglio; una volta avvenuto il breakdown e formatosi il canale di gas conduttore, la scarica avviene: la corrente può quindi fluire tra i due elettrodi, chiudendo così il circuito.

4.5.1 Inapplicabilità del criterio di Townsend

Il processo di breakdown basato sulla teoria di Townsend, cioè sulla crescita esponenziale di elettroni in seguito all'emissione secondaria, spiega correttamente la maggior parte dei fenomeni che avvengono per bassi valori di pressione p e distanze d; permette inoltre di stabilire un legame, attraverso la legge di Paschen, tra la tensione di breakdown e il prodotto pd, che ben approssima i risultati sperimentali e, tenendo anche conto dei fenomeni di accumulo di carica, permette di individuare il passaggio al regime di glow.

Se però pressione e distanza sono tali che pd = 300 kPa, allora il meccanismo di scarica proposto da Townsend non è in grado di spiegare i fenomeni che si osservano sperimentalmente, ovvero:

- il tempo della scarica risulta essere dell'ordine dei 10⁻⁸ s, quindi molto inferiore a quello previsto dalla teoria classica: la durata è troppo breve e non permette agli ioni di raggiungere il catodo per promuovere l'emissione di nuovi elettroni;
- la scarica tra i due elettrodi assume una forma filamentosa e molto irregolare, contrariamente a quella diffusiva prevista dal processo a valanga: lo sviluppo avviene attraverso dei canali di scarica sottili e ramificati;
- la tensione di breakdown non dipende più dal materiale del catodo.

Per spiegare questo diverso comportamento venne proposta una nuova teoria, sviluppata negli anni '40 da Raether [26], Loeb [17] e Meek [20], e nota come streamer theory.

4.5.2 Streamer theory

Questa presuppone che lo sviluppo della scarica completa avvenga a partire da una singola valanga elettronica che, e che la distorsione del campo elettrico prodotta a causa della distribuzione delle cariche,

Valanga primaria prodotta da un singolo elettrone

Con l'espressione valanga primaria si fa riferimento al processo di moltiplicazione elettronica a cascata innescata a partire da un singolo elettrone prodotto dal catodo: questo fenomeno è fondamentale per ogni tipo di breakdown, che non potrebbe altrimenti avvenire. A tal proposito si consideri che un singolo elettrone abbandoni la superficie del catodo al tempo t = 0: sotto l'effetto di un campo elettrico esterno E_0 costante, questo si muove verso l'anodo lungo la direzione x, ed entrando in collisione con le molecole del gas provoca un aumento del numero di ioni ed elettroni. Il numero complessivo di elettroni e ioni, mentre la valanga procede, è dato dalle seguenti relazioni:

$$\begin{cases} \frac{\mathrm{d}N_e}{\mathrm{d}x} = (\alpha - a) N_e \\ \frac{\mathrm{d}N_+}{\mathrm{d}x} = \alpha N_e \\ \frac{\mathrm{d}N_-}{\mathrm{d}x} = \eta N_e \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} N_e = \exp\left[(\alpha - \eta) x\right] \\ N_+ = \frac{\alpha}{\alpha - \eta} \left(N_e - 1\right) \\ N_- = \frac{\eta}{\alpha - \eta} \left(N_e - 1\right) \end{cases}$$
(4.35)

dove $\alpha \in \eta$ rappresentano rispettivamente i coefficienti di Townsend e di attachment. Tutti i nuovi elettroni prodotti si spostano in gruppo verso l'anodo alla velocità $v_d = \mu_e E_0$,⁸ ma a causa dei fenomeni di diffusione questi tendono a spargersi intorno al punto centrale $P_0(x_0, r_0) = (v_d t, 0)$, dove con r si è indicata la distanza radiale dall'asse x. La distribuzione della densità di elettroni all'interno della nuvola si può allora esprimere come:

$$n_e(x, r, t) = \frac{1}{\sqrt{(4\pi D_e t)^3}} \exp\left[-\frac{(x - v_d t)^2 + r^2}{4D_e t} + (\alpha - \eta) v_d t\right]$$
(4.36)

con D_e il coefficiente di diffusione degli elettroni; la densità n_e diminuisce all'aumentare della distanza dal centro secondo una gaussiana e il raggio per il quale questa è esattamente \overline{e} volte inferiore rispetto a quella al centro vale:

$$r_D = \sqrt{3D_e t} = \sqrt{3\frac{D_e}{\mu_e}\frac{x_0}{E_0}}$$
(4.37)

e risulta crescente con il tempo, cioè all'avanzare della valanga. Gli ioni, con massa molto superiore agli elettroni, rimangono praticamente fermi quando questi raggiungono l'anodo, quindi tendono ad accumularsi; la loro distribuzione di densità è data dalla seguente:

⁸Il termine mu_e corrisponde alla *mobilità* dell'elettrone.

$$n_{+}(x,r,t) = \int_{0}^{t} \alpha v_{d} n_{e}(x,r,t) \, \mathrm{d}t$$
(4.38)

Sostituendo la 4.36 nella precedente, trascurando i fenomeni di attachment per $t \to \infty$ e limitandosi a zone prossime all'asse, si ottiene:

$$n_{+}(x,r) = \frac{\alpha}{r_{D}^{2}} \exp\left(\alpha x - \frac{r^{2}}{r_{D}^{2}}\right)$$
(4.39)

La 4.39 mette in evidenza come la densità di cariche positive nella coda della valanga tenda ad aumentare esponenzialmente con la distanza x dal catodo. Per ogni sezione trasversale a data x, la densità diminuisce rispetto all'asse secondo la stessa legge gaussiana che regola la diffusione degli elettroni nel momento in cui il centro della nuvola di elettroni supera la sezione considerata: la situazione è riporta in figura 4.15.



Figura 4.15: Distribuzione delle cariche e forma della valanga elettronica primaria in due istanti successivi.

Distorsione del campo per effetto della distribuzione di carica

Per comprendere come a partire dalla valanga prodotta da un singolo elettrone si passi alla formazione di uno *streamer* di plasma conduttore, bisogna considerare la distorsione del campo elettrico prodotta dalla distribuzione delle cariche elettriche all'interno della valanga stessa quando il fattore di amplificazione $e^{\alpha x}$ assume valori elevati. Queste generano infatti un loro campo elettrico E' che si somma vettorialmente a quello esterno E_0 , distorcendolo: l'effetto si fa sempre più intenso man mano che la valanga avanza e nuovi processi di ionizzazione avvengono. Dal momento che gli elettroni si muovono molto più velocemente, questi andranno ad occupare la testa della valanga mentre gli ioni, più lenti, rimangono indietro a formarne la coda: in definitiva si viene a creare un dipolo elettrico di lunghezza caratteristica $1/\alpha$, come riportato in figura 4.16a. Il campo elettrico risultante in testa alla valanga e in corrispondenza della coda risultano quindi amplificati, mentre quello compreso tra le due zone di segno opposto appare indebolito, come si vede dalla figura 4.16b. Il campo E' si sviluppa radialmente rispetto al dipolo; assumendo che le cariche si trovino all'interno di una sfera di raggio $R \simeq r_D$, la sua intensità in testa alla valanga vale:

$$E' = \frac{e \cdot \exp\left(\alpha x\right)}{4\pi\epsilon_0 r_D^2} \tag{4.40}$$



Figura 4.16: Campi elettrici in presenza di una valanga primaria prodotta da un singolo elettrone: linee di forza del campo esterno e del dipolo considerate separatamente (a sinistra) e del campo risultante (a destra).

Quando la valanga raggiunge l'anodo, gli elettroni vengono catturati dall'elettrodo pertanto la distanza d è occupata dalle sole cariche positive: il campo elettrico E' lo si deve alle cariche positive nella coda della valanga e alla sua immagine riflessa nell'anodo (figura 4.17a), mentre il campo complessivo risente anche del campo esterno (figura 4.17b). Il campo in prossimità dell'anodo risulta inferiore rispetto ad E_0 , mentre il suo massimo si trova in corrispondenza di una distanza assiale pari a $1/\alpha$: l'amplificazione del campo elettrico prodotto da una valanga primaria è responsabile della formazione di un sottile canale di gas ionizzato, ossia di uno streamer.

Meccanismo di formazione degli streamers

Affinché la valanga elettronica si trasformi in uno *streamr*, è necessario che il fattore di amplificazione $e^{\alpha x}$ raggiunga valori sufficientemente elevati tali che il campo



Figura 4.17: Campo elettrico complessivo dopo che la valanga ha raggiunto l'anodo e tutti gli elettroni sono stati catturati dall'elettrodo: linee di forza del campo E' dovuto alle cariche positive nella coda e dalla sua immagine riflessa nell'anodo (a sinistra) e del campo risultante (a destra).

indotto dalla distribuzione di carica sia paragonabile a quello esterno, cioè $E' \simeq E_0$; se ciò si verifica, nel momento in cui la valanga raggiunge l'anodo, in prossimità di questo si forma un sottile canale di gas ionizzato che si propaga velocemente verso il catodo: in si parla in questi casi di *streamer positivi*, cioè diretti verso il catodo.



Figura 4.18: Propagazione di uno *streamer* dall'anodo al catodo e relative linee di forza del campo in testa.

La situazione è riportata schematicamente in figura 4.18. In questo tipo di fenomeno, i fotoni emessi dagli atomi eccitati durante la valanga primaria giocano un ruolo fondamentale in quanto producono nuovi elettroni per fotoionizzazione: questi danno il via a valanghe secondarie che si muovono verso lo *streamer*, attirati dal campo elettrico risultante. Gli elettroni secondari interagiscono poi con altri atomi, favorendo l'emissione di nuovi fotoni, mentre gli ioni positivi vanno ad aumentare la carica complessiva in testa al canale: questa attrae quindi gli elettroni prodotti da valanghe successive e così via, determinando la crescita dello *sreamer* fino al catodo.

Un criterio per stabilire quando avviene la transizione da valanga a *streamer* è stato fornito da Raether, il quale ha proposto la seguente relazione empirica (basata sulle sue osservazioni sperimentali):

$$\alpha x_c = 17.7 + \ln x_c + \ln \frac{E'}{E_0} \tag{4.41}$$

dove x_c è la distanza critica della testa della valanga dal catodo, in corrispondenza della quale si ha $\alpha x_c = 18 \div 20$ o, in termini di densità di carica, $N_e = \exp(\alpha x_c) = 10^8$. La transizione avviene poi quando $E' \simeq E_0$, quindi la precedente diventa:

$$\alpha x_c = 17.7 + \ln x_c \tag{4.42}$$

Nel caso in cui il gap tra gli elettrodi sia uniforme, la transizione avviene non appena la valanga raggiunge l'anodo, pertanto la 4.43 diventa:

$$\alpha d = 17.7 + \ln d \tag{4.43}$$

e permette di valutare il valore minimo di α affinché avvenga il breakdown. La 4.43 permette inoltre di stabilire il valore di tensione da applicare agli elettrodi perché il breakdown non avvenga più secondo il meccanismo di Townsend, ma secondo quello degli *streamers*; il valore della tensione di breakdown, in questo caso, può essere determinato tramite la seguente relazione empirica [23]:

$$V_{bd} = 4.3 + 136\frac{p}{T} + 324\frac{p}{T}d\tag{4.44}$$

dove $p \in T$ sono rispettivamente la pressione in bar e la temperatura in K del gas e d la distanza tra gli elettrodi espressa in mm.

Nel caso in cui il campo esterno sia tale che le condizioni $E' \simeq E_0$, $\alpha x_c = 18 \div 20$ e $N_e = \exp(\alpha x_c) = 10^8$ risultino soddisfatte per una distanza x < d, la transizione valanga-streamer avviene a metà strada dall'anodo. In questo caso gli elettroni si muovono nella stessa direzione del canale di plasma, pertanto le valanghe secondarie si formano tra la testa (caricata negativamente) e l'anodo: gli elettroni in testa al canale raggiungono velocemente gli ioni secondari che vengono quindi inglobati, come riportato in maniera semplificata in figura 4.19.



Figura 4.19: Propagazione di uno *streamer* dal catodo all'anodo e relative linee di forza del campo in testa.

4.6 Riepilogo

Il capitolo è stato dedicato interamente all'analisi dettagliata, dal punto di vista fisico, dei diversi fenomeni che avvengono in un gas quando questo è sottoposto ad una intensa differenza di potenziale: non si tratta certamente di una descrizione completa di tutti gli aspetti che riguardano questi fenomeni, tuttavia fornisce delle solide basi per affrontare il capitolo seguente, dedicato all'accensione vera e propria, ai quali si farà spesso riferimento. 4-Scariche elettriche all'interno di un gas

Capitolo 5

Modellazione del processo di accensione

Nei motori ad accensione comandata, l'accensione rappresenta una fase importante e particolarmente delicata, in quanto una buona parte della durata complessiva della combustione è spesa per lo sviluppo della fiamma (o, più precisamente, di un fronte di fiamma). Anche la scelta dell'istante corretto di accensione gioca un ruolo fondamentale: un anticipo o un ritardo nel rilascio di calore, anche di pochi gradi, determina variazioni considerevoli nell'andamento della pressione in camera e, di conseguenza, nel lavoro raccolto dal pistone. Il processo di accensione è inoltre influenzato da alcuni fenomeni di natura casuale come la composizione locale della miscela, che può variare per la presenza di EGR in camera, l'innesco della scintilla, che è caratterizzato da alcune proprietà di natura statistica, e dalle condizioni locali di moto del fluido, che possono accelerare la combustione o portare allo spegnimento della fiamma: tutti questi fenomeni sono la causa di quel fenomeno noto come variabilità ciclica. Una migliore comprensione dell'accensione e dello sviluppo del fronte di fiamma durante i primi istanti dopo la scintilla, può portare ad una riduzione della variabilità ciclica ed ad un conseguente aumento delle prestazioni del motore. Qui verranno analizzate le diverse fasi dell'accensione, richiamando molti dei concetti visti nel capitolo precedente, nonché le principali caratteristiche del fenomeno; a questo seguirà la presentazione del modello di accensione successivamente implementato nel codice CFD: di questo saranno messi in evidenza gli aspetti fondamentali sia dal punto di vista teorico che matematico.

5.1 Fisica dell'accensione

Il termine *accensione* fa riferimento alla sequenza di operazioni che, partendo dall'applicazione di una determinata tensione, portano allo scocco di una scintilla tra gli elettrodi della candela: questa determina la trasformazione del gas in plasma ad elevata temperatura innescando, di fatto, la combustione. Una descrizione accurata delle fasi che portano alla trasformazione del gas in plasma è stata ampiamente discussa nel capitolo 4: qui saranno ripresi solo alcuni aspetti, concentrandosi maggiormente sugli aspetti più propriamente connessi all'accensione di una miscela aria-combustibile all'interno di un motore.

5.1.1 Caratteristiche elettriche del circuito di accensione

Come introdotto sommariamente nel primo capitolo, i sistemi di accensione più comuni si possono classificare in due macrocategorie: sistemi a scarica capacitiva o CDI, nei quali l'energia viene immagazzinata in un condensatore posto sul primario del trasformatore, e a scarica induttiva o TCI dove, invece, questa è immagazzinata in una bobina. Senza entrare nei dettagli costruttivi e di funzionamento specifici dei due sistemi, è sufficiente dire che le loro caratteristiche elettriche possono esser opportunamente descritte mediante il circuito equivalente riportato in figura 5.1.



Figura 5.1: Circuito elettrico equivalente di un sistema di accensione, suddiviso in meccanismo di accensione (in *rosso*) e candela con relativo collegamento di alta tensione (*blu*). $v_{hv}(t)$ segnale di alta tensione; L_c , R_c e C_c induttanza, resistenza e capacità della bobina rispettivamente; Z_c impedenza cavo alta tensione; R_r resistenza smorzamento interferenze radio; $L_p C_p$ impedenza e capacità della candela; ddistanza elettrodi; R_s derivatore di corrente (solo per misurazioni); v(t) i(t) tensione e corrente di accensione.

Per comprendere le capacità dello specifico sistema di accensione, è sufficiente conoscere l'andamento i tensione e corrente nel tempo, che sono determinate dalle caratteristiche dei componenti presenti nel circuito: a titolo di esempio, si riportano in figura 5.2 le caratteristiche V - i di un sistema CDI e TCI e i corrispondenti diagrammi di energia e potenza in figura 5.3.

Si nota immediatamente una prima fase di durata molto breve (nanosecondi) corrispondente al breakdown, durante la quale la corrente raggiunge il suo valore



Figura 5.2: Caratteristiche temporali di tensione-corrente per un sistema CDI e TCI.

massimo, anche di centinaia di ampere: questa infatti è determinata esclusivamente dalla tensione di accensione (decine di kV) e dall'impedenza della candela (decine di Ω). Successivamente la tensione scende a valori molto più bassi e il processo viene regolato dalle caratteristiche capacitive e induttive della candela.



Figura 5.3: Energia e potenza per il sistema TCI di figura 5.2b.

A questa segue la fase dell'arco elettrico, con una durata di circa 1 µs; in questo lasso di tempo C_c e L_c scaricano la propria energia attraverso R_r e Z_c , determinando correnti con picchi di qualche ampere. Si ha infine la scarica a bagliore, durante la quale l'energia accumulata nell'apposito sistema di immagazzinamento $(C_p \circ L_p)$ viene rilasciata al secondario del circuito.

In ogni sistema di accensione è possibile riconosce questi tre regimi di scarica secondo diverse combinazioni, ciascuna delle quali caratterizzata dalla propria funzione di rilascio della potenza: in generale, al breakdown sono associate le potenze maggiori (fino a qualche MW) anche per bassi valori di energia (fino a 1 mJ); si raggiungono valori di potenza via via minori passando per la fase ad arco e, infine, per quella a bagliore, alla quale sono associati invece i più elevati valori di energia (anche di 100 mJ).

5.1.2 Fasi di scarica nel processo di accensione

Le caratteristiche dei diversi regimi di scarica sono state ampiamente discusse nel capitolo precedente, soprattutto dal punto di vista fisico, mettendo in evidenza i diversi fenomeni che avvengono. In questa sede verranno richiamati solo alcuni concetti, concentrandosi maggiormente sugli aspetti più propriamente legati al processo di accensione vero e proprio.

Pre-breakdown

Il gas inizialmente presente tra gli elettrodi si comporta come un perfetto isolante, fintanto che non viene fornito l'impulso di accensione: questo fa aumentare progressivamente la tensione applicata ($\simeq 10 \,\mathrm{kV}\,\mathrm{ms}^{-1}$ per i TDI e $\simeq 100 \,\mathrm{kV}\,\mathrm{ms}^{-1}$ per i CDI) inducendo un intenso campo elettrico che tende ad accelerare gli elettroni liberi presenti nel gas. Per valori del campo dell'ordine dei ($50 \div 100$) kV cm⁻¹ gli elettroni acquistano sufficiente velocità da promuovere la ionizzazione delle molecole neutre, promuovendo la formazione di nuovi elettroni secondo il meccanismo di Townsend (*electron avalanche*). Tuttavia, come è stato evidenziato in precedenza, gli elettroni prodotti vengono catturati dall'anodo quindi affinché il processo continui è necessaria la presenza di una sorgente esterna che produca un numero iniziale sufficiente di elettroni: questa è garantita dalla radiazione luminosa emessa dagli atomi eccitati, secondo i meccanismi della fotoionizzazione.¹

Dal momento poi che la distanza tra gli elettrodi è generalmente piccola, i fotoni emessi possono collidere con la superficie del catodo, liberando ulteriori elettroni per effetto fotoelettrico. In questa fase i processi di ionizzazione si moltiplicano rapidamente, portando ad un aumento esponenziale della corrente, secondo la 3.65 (considerando anche l'intervento dei fenomeni di emissione secondaria); tuttavia il numero di elettroni prodotti non è ancora sufficiente da sostenere un regime di scarica stabile e autosufficiente: si parla pertanto di *fase di pre-breakdown* o, come è stata introdotta in precedenza, di *dark discharge*. La durata di questa fase può durare diversi secondi, o addirittura minuti, a seconda della pressione del gas, della sua composizione e delle caratteristiche del campo applicato: in generale si può affermare che tanto più rapidamente viene innalzata la tensione e tanto più breve sarà questa fase, considerato che l'eventuale sovratensione accelera ulteriormente il processo di ionizzazione.

 $^{^{1}}$ Si ricorda infatti che un atomo, tornando al suo livello energetico di base, emette un fotone con energia proporzionale alla propria lunghezza d'onda.

Breakdown

Raggiunto un valore soglia di tensione, gli elettroni prodotti sono sufficienti a sostenere autonomamente ulteriori processi di ionizzazione; la corrente cresce in maniera esponenziale, raggiungendo valori di centinaia o migliaia di ampere² in pochi nanosecondi: a questa fase è associato il fenomeno del *breakdown*, che porta la tensione da valori di diverse decine di kV a circa un centinaio.

Durante la fase di breakdown, tra i due elettrodi si forma un sottile canale di plasma con conducibilità elettrica che trasporta gradualmente sempre più corrente: la densità di particelle aumenta fino a valori di circa $10^{19} e \text{ cm}^{-3}$, tanto che lo scambio di energia tra elettroni e ioni da parte delle forze di Coulomb diventa il processo predominante. Ogni nuova collisione permette di scambiare grandi quantità di energia, che viene quindi efficacemente trasferita dal campo elettrico ad elettroni e ioni: si assiste ad un inteso processo di ionizzazione che porta ad un estremo aumento nella temperatura del gas, fino a 60 000 K [18], come riportato in 5.4.



Figura 5.4: Caratteristiche del canale di plasma per un breakdown in aria a 300 K con $d = 1 \text{ mm e } p = 1 \text{ bar. } E_{el}$ energia agli elettrodi; T_e temperatura elettroni; T_g temperatura gas; n_e densità di elettroni; p, d pressione e diametro canale di plasma.

Questi processi avvengono all'interno di sottili canali di plasma (*streamers*) formatisi durante al termine della fase precedente, che presentano un diametro iniziale di circa 40 µm. Molecole e particelle all'interno risultano essere completamente ionizzate, con un'energia interna superiore ai 20 eV (enorme se paragonata ai 5 eV di energia termica associati a temperature di $60\,000\,\text{K}$): la capacità del breakdown di trasferire enormi potenze la si deve a questa caratteristica, come si può vedere dalla figura 5.5.

 $^{^2\}mathrm{La}$ corrente è limitata dall'impedenza del circuito elettrico esterno e dalla resistenza della candela.



Figura 5.5: Ripartizione dell'energia fornita in fase di accensione tra energia potenziale alle molecole e termica.

A causa del rapido incremento di temperatura, la pressione all'interno del canale di plasma raggiunge valori di diverse centinaia di bar quasi istantaneamente, generando un'intesa onda d'urto: il canale si espande pertanto a velocità supersonica. In seguito all'espansione, il canale subisce un certo raffreddamento durante il quale l'energia potenziale immagazzinata viene gradualmente convertita in energia termica e ceduta alle molecole di gas: in questo modo la frazione di energia persa durante l'onda d'urto viene rapidamente recuperata. Il fenomeno risulta estremamente rapido, tanto che le perdite per irraggiamento e conduzione verso gli elettrodi risultano trascurabili (come riportato in tabella 5.1), di conseguenza il catodo non subisce alcun incremento considerevole di temperatura da parte del canale di plasma: gli elevati valori di corrente trasportabili sono pertanto resi possibili dall'emissione secondaria associata a fenomeni fotoelettrici e di emissione di campo.

	Breakdown	Arco elettrico	Scarica a bagliore
Perdite per irraggiamento	< 5%	$\simeq 5\%$	< 1%
Perdite per conduzione	$\simeq 5\%$	$\simeq 45\%$	70%
Perdite complessive	$\simeq 6\%$	$\simeq 50\%$	$\simeq 70\%$
Frazione di plasma	$\simeq 94\%$	$\simeq 50\%$	$\simeq 30\%$

Tabella 5.1: Perdite energetiche associate ai diversi regimi di scarica in condizioni ideali e per elettrodi di piccole dimensioni.

Arco elettrico

Un arco elettrico deve essere sempre preceduto dalla fase di breakdown, necessaria per creare un'elevata conducibilità elettrica tale da sostenere l'arco. Indicativamente si può assumere che il passaggio tra il regime di breakdown e quello ad arco avvenga quando la tensione scende sotto il 10% [18] del valore iniziale o, da un punto di vista fisico, quando a causa dell'intensa corrente si vengono a formare degli *hot spot* (punti caldi) sulla superficie del catodo, cosa che innesca il meccanismo dell'emissione termoionica.

A questa fase sono generalmente associati valori di corrente superiori ai 500 mA fino a diversi kA, limitata esclusivamente dall'impedenza del circuito esterno, mentre la tensione necessaria per sostenere l'arco è molto bassa, indicativamente inferiore ai 100 V, dovuta principalmente alle cadute di tensione che si hanno su anodo e catodo. Quest'ultima, in particolare, assicura la presenta di punti costituiti da materiale fuso sulla superficie dell'elettrodo, necessari per sostenere la scarica elettrica: questo comporta un'elevata usura del catodo in seguito all'evaporazione del materiale dalla superficie, come visibile dalle immagini riportate in figura 5.6. La velocità di usura aumenta sostanzialmente con l'aumentare della distanza tra gli elettrodi: i maggiori valori di tensione richiesti per l'accensione si convertono in una maggiore energia immagazzinata all'interno di bobina e condensatore i quali andranno a scaricarne buona parte sotto forma di arco elettrico. Il contrario accade invece per il breakdown: una maggiore distanza tra gli elettrodi tende ad allungarne la durata, riducendo di conseguenza l'energia disponibile per l'instaurarsi di un arco elettrico stabile.



Figura 5.6: Danneggiamento superficiale del catodo causato da un arco elettrico (200 V, 225 mJ) applicato per 100 µs in aria a condizioni ambiente con d = 1 mm. Tratto da [18]

Indicativamente, densità di carica e temperatura durante la fase ad arco valgono rispettivamente $10^{17} e \text{ cm}^{-3}$ e 6000 K: si può concludere che in questa fase gli scambi energetici sono esclusivamente di natura termica, determinati da fenomeni di conduzione e diffusione, e risultano tanto più inefficienti tanto più grandi diventano le dimensioni radiali del kernel dal momento che aumentano le perdite verso gli elettrodi e quella per irraggiamento.

Scarica a bagliore

La differenza sostanziale tra la scarica a bagliore e quella ad arco risiede nella presenza di un catodo a bassa temperatura: come già ampiamente discusso, in questo caso l'emissione elettronica secondaria è dovuta a bombardamento ionico, processo decisamente meno efficiente dell'emissione termoionica. Questo è inoltre responsabile del fenomeno della polverizzazione catodica (*sputtering*), cioè dell'emissione di particelle o frammenti molecolari dalla superficie del catodo: questo ha entità limitata e dipende sostanzialmente dal valore medio del prodotto Vi e non dai valori istantanei. La fase di glow è poi caratterizzata da bassi valori di corrente ed elevate cadute di tensione, concentrate principalmente in corrispondenza del catodo per emettere un numero sufficiente di elettroni e accelerarli sufficientemente da promuovere la ionizzazione del gas. Come è stato messo in evidenza nel capitolo precedente, la caduta di tensione al catodo si attesta intorno ai valori minimi di V_{bd} , tanto che la si può esprimere tramite la seguente relazione:

$$V_C = 3V_{ion}\ln\left(1+\frac{1}{\gamma}\right)$$

dalla quale si vede come questa dipenda dal tipo di gas e dalle caratteristiche del catodo; ricordano poi che il *cathode layer* si trova a ridosso della superficie del catodo, buona parte dell'energia immessa viene dissipata per conduzione attraverso l'elettrodo (circa il 50%). Come per la fase ad arco, le densità di ioni e le temperature sono inferiori a quelle di breakdown ($10^{14} e \text{ cm}^{-3}$ e 3000 K), pertanto gli scambi energetici avvengono sostanzialmente attraverso gli stessi meccanismi.



Figura 5.7: Profilo radiale di temperatura per le fasi di breakdown T_B , arc T_A e glow T_G .

A titolo di esempio, in figura 5.7 si riporta infine un andamento radiale di temperatura per le tre fasi di scarica nelle stesse condizioni: si vede chiaramente come i profili $T_A \ e \ T_G$ abbiano un profilo gaussiano, molto diversi da quello T_B^3 . Si vede inoltre che la dimensione radiale del canale di plasma raggiunta alla temperatura di 2000 K è maggiore nel caso del *breakdown* rispetto ad arc e glow: questo comportamento è relativo alle diverse velocità associate ai vari fenomeni, che evidenzia come le scariche ad arco e a bagliore richiedano tempi maggiori.

5.1.3 Efficienza dei processi di scarica

Le caratteristiche fisiche dei processi ora descritti permettono di concludere che non tutta l'energia fornita dal sistema di accensione può essere effettivamente sfruttata per accendere la miscela. Si può parlare pertanto di *efficienza* dei processi di scarica, intesa come rapporto tra energia effettivamente resa disponibile per l'accensione della miscela e complessivamente fornita: in via del tutto generale si può affermare che le fasi di arc e glow, soggette a maggiori perdite per irraggiamento e conduzione, presentano efficienze decisamente inferiori rispetto al breakdown che, invece, permette di raggiungere efficienze prossime all'80% [18], come riportato in figura 5.9.



Figura 5.8: Energia complessivamente trasferita dalle fasi di arc-glow e di breakdown.

Non va poi dimenticato che le condizioni di moto all'interno del motore possono influenzare profondamente il trasferimento di energia, specialmente quando le

³Il profilo T_B riportato è relativo ad un istante per cui la fase di espansione dovuta alla sovrappressione si è conclusa.

velocità del fluido raggiungono valori elevati. Mentre il breakdown, visto i tempi estremamente brevi in cui si conclude, non risente delle condizioni di moto, le fasi di arc e glow ne sono invece profondamente influenzate: in questi casi infatti la scarica viene trasporta dal flusso, allungandosi di conseguenza e originando nuove riaccensioni nella zona degli elettrodi. La situazione è riportata in figura 5.9: la massima efficienza (30% per glow e 50% per arc) si raggiunge per velocità di circa 15 m s^{-1} , oltre la quale si verificano nuove riaccensioni che causano la distribuzione dell'energia complessiva tra scariche indipendenti. Una curva di correlazione per i risultati sperimentali osservati è riportata in [14].



Figura 5.9: Efficienza delle fasi di arc e glow all'aumentare della velocità del fluido.

5.1.4 Sviluppo della fiamma e sua propagazione

Le prime reazioni chimiche sono osservabili già dopo pochi nanosecondi dallo scocco della scintilla: queste avvengono a causa dell'elevata densità di radicali (N, H, C e O) ad elevata energia presenti nel plasma che si forma in seguito al breakdown. Dal momento che le temperatura del kernel sono troppo elevate da permettere alle specie chimiche presenti nei prodotti di combustione di esistere, le reazioni avvengono esclusivamente sulla superficie esterna del nucleo di plasma: qui le temperature sono dell'ordine di qualche migliaio di K, quindi ideali per far avvenire delle rapide reazioni chimiche. Un contributo significativo all'espansione del kernel dal parte dell'energia rilasciata dalle reazioni chimiche diventa evidente solo quando la velocità di espansione del plasma è scesa al di sotto dei 100 m s^{-1} , cioè quando le velocità delle reazioni chimiche diventano paragonabili a quelle di espansione: in queste condizioni, infatti, la parte centrale del kernel è costituita da gas completamente ionizzato la cui energia si trova principalmente sotto forma di energia potenziale immagazzinata dalle particelle. Considerando poi che radicali diversi presentano velocità di diffusione diverse, il gas non può considerarsi in equilibrio: nella regione ad elevata temperatura i radicali presenti trasferiscono buona parte della propria energia potenziale al gas entro qualche collisione, mentre nella zona a bassa temperatura si registrano concentrazioni di radicali superiori alle condizioni di equilibrio. A tutto questo si deve poi aggiungere il contributo dato dal trasferimento di calore per conduzione dal kernel: questo permette alle reazioni di avvenire a velocità superiori, liberando energia più rapidamente.

Dopo circa 10 µs dalla scintilla la temperatura del plasma ha raggiunto quella della fiamma, pertanto l'espansione del volume non è più dominato dal contributo termico di quest'ultimo. La comparsa poi di molecole come $OH, CH, C_2 \in CO$ indica che la combustione sta procedendo per avanzamento della fiamma: questo è un punto delicato per l'intero processo perché le reazioni nella zona di combustione devono essere sufficientemente sviluppate e veloci da autosostenersi e contrastare gli effetti delle perdite di calore per diffusione e conduzione con le pareti. I processi descritti per la fase iniziale di accensione non dipendono dal tipo di processo di scarica perché la scintilla è sempre preceduta dal breakdown: tuttavia, a seconda delle caratteristiche del sistema di accensione e dalle proprietà della miscela, l'energia liberata dal solo breakdown può non esser sufficiente a rendere la fiamma autosostenuta. In questi casi la velocità di reazione iniziale tende a calare rapidamente a fronte dell'aumento delle perdite di calore: la zona di reazione tende allora a concentrasi lungo l'asse della scarica dove le temperature sono maggiori (specialmente nel caso del regime di arco elettrico). Questo è visibile in figura 5.10: per miscele stechiometriche, l'energia fornita dal breakdown risulta essere sufficiente l'accensione, mentre il contributo in termini di temperatura da parte delle fasi di arc e glow è molto limitato.



Figura 5.10: Evoluzione della temperatura per diversi regimi di scarica per una miscela stechiometrica di CH_4 -aria a 300 K. Tratto da [18].

Per miscele più magre, le velocità di reazione tendono a ridursi tanto da richiedere un'energia maggiore all'accensione: l'energia fornita allora dal breakdown può non essere sufficiente per sostenere la fiamma, pertanto le reazioni risultano ritardate fintanto che l'energia associata alla fase di arc (o glow) non diventa disponibile, incrementando le temperature.

Ricapitolando, l'energia di accensione viene trasferita dal plasma alla miscela di combustibile, da un lato, tramite le collisioni che avvengono tra i radicali e le molecole circostanti e, dall'altro, tramite diffusione e conduzione termica: entrambe contribuiscono pertanto a raggiungere una condizione di autosostenibilità delle reazioni. Ricordano poi che la propagazione della fiamma è inversamente proporzionale al proprio spessore, temperature maggiori all'accensione sono preferibili: i gradienti di temperatura normalmente associati alle fasi di arc e glow determinano fronti di fiamma più spessi e caratterizzati da minori velocità. Da questo segue che una maggiore quantità di energia introdotta nella fase di breakdown determina una velocità maggiore della fiamma, pertanto la velocità di combustione risente anche del meccanismo di accensione (e non solo quindi delle proprietà della miscela).

La caratteristiche della miscela sono poi fondamentali per la propagazione del fronte di fiamma, tanto che la presenza di disomogeneità nella miscela può influire negativamente sullo sviluppo della combustione. Nell'ipotesi di rappresentare tale disuniformità mediante una serie di sfere di diametro diverso e distribuite statisticamente, se il diametro del canale di plasma, prodotto all'accensione, risulta essere minore allora le proprietà locali della miscela influenzano pesantemente il processo di espansione; al contrario l'effetto tende a scomparire se il volume inizialmente attivato risulta essere maggiore, come riportato in figura 5.11.



Figura 5.11: Influenza del grado di omogeneità della miscela al variare del regime di scarica. Tratto da [18].

In ultima analisi non deve essere dimenticato il fattore turbolenza: questa è

essenziale nelle fasi di combustione, soprattutto alle più alte velocità di rotazione. I vortici di maggiori dimensioni sono in grado di trasportare il volume di plasma e il fronte di fiamma all'interno della camera di combustione, permettendogli di raggiungere zone diverse: a questo effetto benefico si contrappone il rischio che la fiamma venga a contatto con le pareti, nel qual caso si registrerebbero perdite elevate di calore col rischio di spegnimento. La presenza di micro-vortici, invece, favorisce i fenomeni di trasporto di specie da una parte all'altra del fronte di fiamma: in questo modo le specie a maggiore energia si muovono verso le zone in cui le reazioni non sono ancora avvenute e viceversa, incrementando lo scambio di calore. Anche in questa situazione occorre osservare che livelli eccessivi di turbolenza localizzati nella zona di accensione possono portare ad un abbassamento delle temperature che, in casi estremi, può portare allo spegnimento della fiamma stessa.

5.2 Il modello di accensione

Nelle sezioni precedenti sono stati introdotti diversi aspetti che rivestono un ruolo fondamentale nella fase di accensione e allo sviluppo del fronte di fiamma; non si tratta certamente di un'analisi completa di tutti gli aspetti coinvolti, ma fornisce un quadro abbastanza completo del fenomeno in questione.

Per quanto visto fin'ora, il processo di accensione coinvolge processi molto complicati che si svolgono in tempi estremamente brevi; in particolare si è visto che:

- la scintilla è sempre preceduta dal breakdown, che è fondamentale per il futuro sviluppo della scarica: questo coinvolge fenomeni di diversa natura che si concludono in tempi estremamente brevi come: trasformazioni di energia, collisioni tra atomi ed elettroni, ionizzazione, reazioni chimiche, formazione di plasma ad alta temperatura, incrementi notevoli di pressione e propagazione di onde d'urto e così via;
- alla fase precedente segue solitamente una scarica ad arco, a cui sono generalmente associati plasmi in equilibrio termodinamico (*thermal plasma*): questa è caratterizzata da basse tensioni ed elevate correnti, ed è regolata principalmente da fenomeni di emissione termoionica;
- segue poi la scarica a bagliore, caratterizzati dalla presenza di plasmi non in equilibrio (*non-thermal plasma*) e che devono essere trattati in maniera particolare dal momento che la distribuzione di energia non si può considerare uniforme;
- la formazione e lo sviluppo del fronte di fiamma sono profondamente influenzati dalle caratteristiche della miscela e dalle proprietà turbolente in camera, nonché dai livelli di energia forniti dal sistema di accensione.

Appare evidente, quindi, che simulare in modo preciso e rigoroso il fenomeno dell'accensione, descrivendone correttamente l'evoluzione fisica, incontra tutt'oggi notevoli ostacoli di natura pratica: i fenomeni che avvengono sono caratterizzati da durate e lunghezze caratteristiche di gran lunga inferiori alle consuete dimensioni delle griglie (mesh) di calcolo impiegate nella CFD. Anche disponendo di elevata potenza di calcolo e codici estremamente precisi, il costo in termini di tempo computazionale sarebbe inaffrontabile. In generale il processo di accensione viene studiato impiegando degli opportuni modelli matematici: questi introducono inevitabilmente delle notevoli semplificazioni, pertanto non sono in grado di catturare ogni aspetto del fenomeno, tuttavia permettono di ottenerne una descrizione macroscopica adeguata a fronte di tempi di calcolo ridotti.

Nello specifico, il modello proposto in questa tesi è stato sviluppato presso il DIN della Facoltà di Ingegneria di Bologna ed è riportato in [10]: molto brevemente, lo si può considerare come un sotto-modello per inizializzare la combustione e determinare il raggio del kernel durante i primi istanti di formazione del fronte di fiamma. Sommariamente il modello di accensione prevede due sotto-modelli principali, uno per il circuito elettrico e l'altro per la formazione e lo sviluppo del kernel: il risultato finale consiste nella determinazione del parametro Σ , definito come *flame surface density* (densità superficiale di fiamma), che sarà successivamente utilizzato come sorgente dal modello ECFM⁴ per simulare la combustione premiscelata.

5.2.1 Sotto-modello del circuito elettrico

Il sotto-modello del circuito di accensione fornisce i valori di tensione V_{bd} ed energia E_{bd} di breakdown, che saranno usati successivamente come parametri di input dal modello di espansione del kernel per calcolarne i valori iniziali di raggio e temperatura. Per le motivazioni elencate in precedenza, il sotto-modello del circuito elettrico non considera nel dettaglio la fase di breakdown e la successiva formazione del canale di plasma, infatti per quanto detto in precedenza e, come riportato anche in [10], risulta che:

- i due fenomeni presentano tempi caratteristici dell'ordine dei nanosecondi (ns), trascurabili quindi se paragonati alla durata della fase di espansione/sviluppo del kernel che, invece, è dell'ordine dei microsecondi (µs);
- l'aumento di temperatura associato al breakdown provoca un aumento della pressione di diverse centinaia di bar, generando quindi un'onda d'urto: questa

⁴Una descrizione qualitativa del modello sarà fornita nel capitolo successivo quando verrà introdotto il software usato per le simulazione; per una descrizione dettagliata si rimanda a [3] e [4]

dovrebbe essere risolta considerando una fase di espansione a velocità supersonica che coinvolge anche reazioni altamente instabili di formazione/distruzione di specie chimiche ionizzate;

• le caratteristiche della candela e del circuito di accensione, necessarie per descrivere accuratamente il fenomeno, non sono sempre rese disponibili dai costruttori.

L'energia di breakdown resa disponibile agli elettrodi è valutata sulla base della relazione empirica fornita in [8]:

$$E_{bd} = \frac{V_{bd}^2}{C_{bd}^2 \cdot d_{gap}} \tag{5.1}$$

mentre per la tensione V_{bd} si utilizza la 4.44, qui riportata per chiarezza:

$$V_{bd} = 4.3 + 136 \frac{p}{T_{unb}} + 324 \frac{p}{T_{unb}} d_{gap}$$

dove alla generica temperatura T del gas si è sostituita quella della miscela fresca T_{unb} (unburned). Per quanto riguarda il valore della costante C_{bd} , nessuna indicazione è riportata in [8], quindi si è scelto il valore di 245 kV J^{-0.5} mm^{-0.5} come riportato in [10].

5.2.2 Sotto-modello di espansione del kernel

La fase del breakdown si conclude con il rilascio dell'energia E_{bd} precedentemente calcolata e con il deposito di un kernel sferico di raggio r_i alla temperatura T_i tra gli elettrodi della candela: modello di espansione si occupa di determinare lo stato iniziale del kernel e di valutarne lo sviluppo sulla base della conservazione di massa ed energia per un sistema aperto.

Condizioni iniziali

Per determinare i valori iniziali di raggio e temperatura del kernel, si segue l'approccio proposto in [28], [33]; si assume che il fenomeno del breakdown si sviluppi in due fasi:

1. fase a volume costante, durante la quale l'energia viene trasferita dal circuito elettrico esterno al kernel in tempi rapidissimi ($< 1 \,\mu s$): nonostante questo si espanda a velocità supersonica, si può considerare che le sue dimensioni non varino nel tempo dato la breve durata della fase in questione;

2. fase di espansione rapida del kernel, durante la quale si ha la propagazione di un'onda d'urto che riduce la pressione iniziale del kernel fino a quella effettiva p_0 della miscela fresca.

Al termine della prima fase, l'arco elettrico tra i due elettrodi risulta completamente formato; inoltre, per quanto detto in precedenza e come riportato in [18] e [19], la differenza tra la temperatura degli elettroni e quella del gas è trascurabile, tanto da poter considerare il kernel in equilibrio termodinamico. Sulla base di queste considerazioni, assumendo che l'energia E_{bd} sia introdotta nel canale di plasma durante la prima fase, in questo breve tempo non si ha nessuna reazione chimica, e considerando che l'onda d'urto che ne scaturisce determini l'espansione del kernel con una conseguente riduzione della pressione fino al valore p_0 e una certa dissipazione dell'energia iniziale, si può scrivere il seguente bilancio energetico tra inizio e fine espansione:

$$E_b - E_i = p_0 \cdot (V_i - V_b)$$
 (5.2)

dove E_b e V_b indicano rispettivamente l'energia e il volume del kernel al termine della fase di breakdown, mentre E_i e V_i sono i corrispondenti valori di fine espansione. Come poi riportato in [18] e [19], al termine della prima fase l'arco elettrico è completamente formato e la differenza tra la temperatura degli elettroni e quella del gas risulta trascurabile, tanto da poter considerare il kernel in equilibrio termodinamico; nell'ipotesi di considerare il gas come ideale, l'energia si può esprimere in generale come:

$$E = \frac{pV}{k-1} \left(1 - \frac{T_0}{T} \right) \tag{5.3}$$

mentre dalla condizione di continuità si ha che:

$$\frac{p_0 V_b}{T_0} = \frac{p_b V_b}{T_b} = \frac{p_0 V_i}{T_i}$$
(5.4)

Assumendo che le condizioni di riferimento si riferiscano alla miscela fresca e che $E_b = E_{bd}$, risolvendo per per T_i e r_i si ricava:

$$T_i = \left[\frac{1}{k} \left(\frac{T_b}{T_{unb}} - 1\right) + 1\right] T_{unb}$$
(5.5)

$$r_{i} = \left[\frac{k-1}{k} \frac{E_{bd}}{p_{unb}\pi \left(1 - \frac{T_{unb}}{T_{i}}\right) d_{gap}}\right]^{1/2}$$
(5.6)

per le quali si può assumere $T_b = 60\,000\,\text{K}$, con k la capacità termica della miscela fresca (assunta costante).

Velocità di espansione del kernel

Sulla base di quanto riportato in [14], la velocità di espansione del kernel può essere valutata applicando in principio di conservazione della massa:



Figura 5.12: Effetto del wrinkling sulla superficie del kernel: superficie media A_k (in nero) e corrugata (in rosso).

$$\frac{\mathrm{d}m_k}{\mathrm{d}t} = \rho_{unb} \cdot s_{lam,k} \cdot (A_k \cdot \Xi) \tag{5.7}$$

dove ρ_{unb} è la densità della miscela fresca, A_k la superficie media del kernel, Ξ il coefficiente di wrinkling, col quale si tiene conto dell'influenza della turbolenza⁵ (figura 5.12) e $s_{lam,k}$ la velocità laminare di fiamma, calcolata secondo la relazione proposta da Metghalchi e Keck [22], tenendo conto dello stato della miscela fresca in corrispondenza della candela:

$$s_{lam,k} = s_0 \left(\frac{T_{unb}}{T_0}\right)^{\gamma} \left(\frac{p_{unb}}{p_0}\right)^{\beta}$$
(5.8)

dove s_0 è la velocità laminare calcolata alle condizioni di riferimento $p_0 = 1$ bar e $T_0 = 298$ K, mentre $\gamma \in \beta$ sono dei coefficienti specifici del combustibile considerato.

Ricordando che $m_k = \rho_k \cdot V_k = \rho_k \cdot A_k r_k$ e che $p/\rho_k = RT_k$, differenziando la 5.7 si ottiene la velocità di espansione del kernel:

$$\frac{\mathrm{d}r_k}{\mathrm{d}t} = \frac{\rho_{unb}}{\rho_k} s_{lam,k} \cdot \Xi - \frac{V_k}{A_k} \left(\frac{1}{T_k} \frac{\mathrm{d}T_k}{\mathrm{d}t} - \frac{1}{p} \frac{\mathrm{d}p}{\mathrm{d}t} \right)$$
(5.9)

⁵La turbolenza determina un corrugamento del fronte di fiamma che si traduce in un aumento della superficie effettiva del kernel.

La 5.9 richiede la conoscenza di temperatura e pressione del kernel: quest'ultima si considera uniforme nella miscela fresca e nei gas combusti, mentre la temperatura deve essere determinata tramite un bilancio energetico. Considerando il sistema in equilibrio termodinamico e trascurando le perdite di calore, la variazione dell'entalpia nel tempo si può esprimere come:

$$\frac{\mathrm{d}h_k}{\mathrm{d}t} = \frac{1}{m_k} \left[\frac{\mathrm{d}Q_{ch}}{\mathrm{d}t} + \frac{\mathrm{d}E_{ele}}{\mathrm{d}t} - \frac{\mathrm{d}Q_{wv}}{\mathrm{d}t} + V_k \frac{\mathrm{d}p}{\mathrm{d}t} \right] - \frac{h_k}{m_k} \frac{\mathrm{d}m_k}{\mathrm{d}t}$$
(5.10)

dove E_{ele} , Q_{ch} e Q_{wv} sono rispettivamente l'energia fornita dalla candela, l'energia derivante dalle reazioni chimiche e le perdite a parete: conoscendo la variazione di entalpia di può infine risalire alla temperatura del kernel.

Seguendo un approccio più rigoroso, si sarebbe dovuta considerare anche una fase iniziale in cui l'espansione del kernel, avvenendo ad elevata temperatura, è regolata da fenomeni di conduzione tra gas combusti e miscela fresca. In questo caso, per $T_k \geq 3T_{ad}$,⁶ l'andamento della temperatura è risolto mediante la:

$$\frac{\partial T_{pl}}{\partial t} = \alpha_{cond} \left(\frac{\partial^2 T_{pl}}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial T_{pl}}{\partial r} \right) + \frac{P - \dot{Q_w}}{\rho c_p V_k}$$
(5.11)

che considera una dissipazione uniforme in tutte le direzioni. L'energia P corrisponde a quella fornita dalla candela, mentre le perdite sugli elettrodi possono essere valutate secondo la [39]:

$$\dot{Q}_w = h_c A_c \left(T_k - T_{wall} \right) \tag{5.12}$$

Per la soluzione della 5.11 sono necessarie le condizioni iniziali e al contorno, come riportato in [10]: la temperatura del kernel viene assunta infine pari a quella media del plasma T_{pl} compresa tra r = 0 e $r = r_k$ in un dato istante. Ci si tiene a precisare che questa fase si conclude nell'arco di pochi microsecondi, pertanto non si commette un grosso errore nel trascurarla: nel modello implementato si terrà conto solo della 5.9.

Coefficiente di wrinkling

Per tenere in considerazione l'influenza della turbolenza, è stato introdotto il *coefficiente di wrinkling*; questo è calcolato sulla base della relazione proposta in [4]:

$$\frac{\mathrm{d}\Xi}{\mathrm{d}t} = P_1 \cdot \Xi - D_k \qquad \text{con} \qquad D_k = \left[\frac{s_{lam,k}}{2} \left(\Xi - 1\right)^3 \nu_t^{-0.5} P_1^{1.5}\right]^{1/2} \tag{5.13}$$

 $^{^6}T_{ad}$ corrisponde alla temperatura adiabatica, cioè la massima temperatura raggiunta quando un combustibile viene bruciato completamente in un sistema in cui non avviene nessuno scambio di calore o lavoro con l'esterno.

dove P_1 corrisponde al coefficiente di produzione di Σ calcolato come nel modello ECFM [4], [8].

Calcolo di Σ

Conoscendo la velocità di espansione del kernel, noti gli andamenti di pressione e temperatura, il modello può determinare l'evoluzione del raggio del kernel; in questo modo risultano univocamente definiti sia la superficie che il volume del kernel in ogni istante, pertanto è possibile determinare il valore della densità superficiale di fiamma Σ secondo la seguente:

$$\Sigma = \frac{A_k \cdot \Xi}{V_k} \tag{5.14}$$

La 5.14 viene aggiornata progressivamente, man mano cioè che il kernel avanza: questo parametro dovrà quindi essere passato al modello principale di combustione per essere inizializzato.

5.2.3 Disaccoppiamento modello

Come anticipato, il modello di accensione deve fornire il valore di Σ per inizializzare il modello ECFM e avviare la combustione vera e propria. Occorre pertanto stabilire un criterio che determini il termine della fase di accensione e il passaggio al modello principale; come riportato in [10] si assume che questo avvenga quando il raggio del kernel raggiunge un valore soglia di 2 mm: soddisfatta questa condizione, l'ultimo valore disponibile di Σ viene passato al modello ECFM come termine sorgente iniziale per la combustione.

5.3 Riepilogo

In questo capitolo sono stati presentati gli aspetti fondamentali del processo di accensione, richiamando molti dei concetti visti nei capitoli precedenti. Si è cercato di fornire un'indicazione qualitativa degli aspetti che maggiormente influenzano il processo, in modo da comprendere il motivo che porta all'adozione di modelli di accensione: a tale proposito è stato presentato uno tra i tanti modelli, descrivendone in dettaglio le varie caratteristiche e che sarà l'oggetto principale del capitolo successivo. – Modellazione del processo di accensione

Capitolo 6

Implementazione del modello di accensione

Il modello di accensione, introdotto nel capitolo precedente, è stato implementato e validato utilizzando un nuovo software CFD: CONVERGE[®], della Convergent Science. Nel seguito verranno fornite alcune informazioni di massima sul software, per poi passare all'implementazione vera e propria del codice sorgente relativo al modello. Altri dettagli sull'impostazione di una simulazione saranno forniti nel capito dedicato alla validazione.

6.1 Il software CONVERGE

Il software si presenta come un CFD basato sul metodo dei volumi finiti, con la possibilità di eseguire simulazioni sia di tipo RANS che LES. Gran parte delle sue caratteristiche sono riscontrabili in altri software dello stesso tipo, tuttavia CON-VERGE presenta alcuni aspetti che lo rendono piuttosto unico: uno di questi riguarda la generazione della mesh di calcolo che è del tutto automatica. All'utente non è quindi richiesta alcuna operazione di *meshatura*, ma solo una attenta definizione della geometria che si vuole studiare; la mesh viene generata e aggiornata in modo dinamico nel corso della simulazione stessa: questo permette, da un lato, di ridurre i tempi necessari per la preparazione della griglia e, dall'altro, di ottimizzare i tempi di calcolo. A questo si affianca poi la disponibilità di numerosi modelli fisici già implementati e dedicati specificatamente allo studio dei motori a combustione interna come modelli di combustione, turbolenza e di gestione della fase di iniezione.

Le operazioni per la preparazione di una simulazione prevedono una prima fase di *pre-processing*, durante la quale vengono impostati i parametri numerici ed operativi della simulazione, e una di *post-processing* in cui si analizzano i risultati ottenuti. La prima fase viene quasi interamente gestita tramite la *GUI* di CONVERGE Studio: il



Figura 6.1: Worflow per la preparazione e l'esecuzione di una simulazione.

software permette all'utente di personalizzare la simulazione, facendolo scegliere tra diverse opzioni e generando quindi l'interfaccia di configurazione della simulazione. Tutti i parametri possono essere agevolmente inseriti per via grafica, anche se per alcune operazioni sarà richiesto di intervenire direttamente sui file specifici, come nel caso del settaggio dei parametri di combustione. Per quanto riguarda la fase di pre-processing, le operazioni principali prevedono:

- importazione della geometria ed eliminazione di eventuali errori: i modelli importati dai CAD possono a volte presentare dei difetti che pregiudicherebbero l'esito della simulazione. CONVERGE mette a disposizione numerosi strumenti di diagnostica e riparazione con i quali correggerli;
- impostazione dei parametri di simulazione o *case set-up*: sebbene anche la precedente rientri in questa fase del lavoro, l'impostazione del case riguarda specificatamente la scelta e la configurazione dei modelli fisici che verranno utilizzati.

Una volta configurata correttamente, la simulazione viene passata al solver principale che provvede a generare la mesh (ortogonale e strutturata) e a risolvere il problema, utilizzando una versione modificata del metodo PISO: a soluzione avvenuta, i risultati verranno forniti sotto forma di file di testo, divisi per categorie, analizzabili direttamente con gli strumenti grafici messi a disposizione da CONVERGE o tramite software di analisi dati specifici.

Infine, per una maggiore flessibilità, vengono messe a disposizione delle funzioni modificabili direttamente dall'utente, le UDF (*User Defined Function*), con le quali è possibile personalizzare a piacere la simulazione: queste sono compilate in linguaggio C e sono disponibili nelle librerie di default del programma. Come si vedrà nel seguito, per l'implementazione del modello di accensione e la gestione della combustione si è fatto largo uso di tali funzioni. Per fornire un quadro più completo, si riportano alcuni aspetti relativi al codice che saranno utili nel seguito e che verranno più volte ripresi: questi verranno presentati in maniera semplificata, senza approfondimenti ulteriori, dal momento che maggiori dettagli possono essere reperiti in [7], [5] e [6].

6.1.1 Equazioni risolte

La descrizione del moto di un fluido viene descritto mediante le leggi di conservazione di massa, quantità di moto ed energia, note come equazioni di Navier-Stokes. CONVERGE[®] permette di scegliere quali equazioni risolvere e se queste debbano essere considerate indipendenti l'una dalla altre oppure no: in questa sede si propone una breve descrizione delle equazioni risolte, anche se per una descrizione più accurata si rimanda all'apposita documentazione [5].

Le equazioni di conservazione della massa e della quantità di moto, che devono essere risolte contemporaneamente per determinare in modo appropriato il gradiente di pressione, sono date dalle:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_i}{\partial x_i} = S \tag{6.1}$$

$$\frac{\partial \rho u_i}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_i u_j}{\partial x_i} = -\frac{\partial P}{\partial x_i} + \frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial x_i} + S_i \tag{6.2}$$

dove $u, \rho, P \in S$ sono rispettivamente la velocità, la densità, la pressione e il termine sorgente; il termine σ_{ij} rappresenta il tensore degli sforzi viscosi, cioè:

$$\sigma_{ij} = \mu \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) + \left(\mu' - \frac{2}{3} \mu \right) \left(\frac{\partial u_k}{\partial x_k} \delta_{ij} \right)$$
(6.3)

in cui $\mu \in \mu'$ sono rispettivamente la viscosità dinamica e quella di volume.

Alle precedenti si aggiunge poi l'equazione della conservazione dell'energia, che per un fluido comprimibile è espressa dalla:

$$\frac{\partial \rho e}{\partial t} + \frac{\partial u_j \rho e}{\partial x_j} = -P \frac{\partial u_j}{\partial x_j} + \sigma_{ij} \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left(K \frac{\partial T}{\partial x_j} \right) + \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\rho D \sum_m h_m \frac{\partial \Upsilon_m}{\partial x_j} \right) + S \quad (6.4)$$

in cui *e* rappresenta l'energia interna specifica, *K* la conducibilità termica, *D* il coefficiente di diffusione e $\Upsilon_m = \frac{\rho_m}{\rho}$ la frazione in massa della specie *m*. Per ciascuna di queste, CONVERGE risolve poi la corrispondente equazione di trasporto data dalla:

$$\frac{\partial \rho_m}{\partial t} + \frac{\partial \rho_m u_j}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\rho D \frac{\partial \Upsilon_m}{\partial x_j} \right) + S_m \tag{6.5}$$

in cui i simboli hanno il significato già visto.

Per concludere, visto che nel seguito si farà riferimento più volte al concetto di *passivo* (cioè uno scalare che non influenza le altre equazioni di trasporto), si riporta l'equazione di trasporto relativa:

$$\frac{\partial \rho \phi}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_i \phi}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\rho D \frac{\partial \phi}{\partial x_i} \right) + S \tag{6.6}$$

in cui ϕ è il passivo trasportato (parlando del modello ECFM, si introdurrà il termine densità superficiale di fiamma Σ che costituisce, appunto, un passivo).

6.1.2 Turbolenza - Modello $k - \epsilon$

Per quello che riguarda le applicazioni relative ai motori a combustione interna, il fenomeno della turbolenza riveste un ruolo fondamentale, che domina molti aspetti soprattutto della fase di combustione: trascurare tali effetti porterebbe a risultati assolutamente non affidabili. La turbolenza è associata alla comparsa di vortici all'interno del campo di moto, con dimensioni variabili, che determinano un processo di mescolamento di natura convettiva che coinvolge quantità di moto, energia e specie chimiche. In ambito CFD, la soluzione più adottata per tener conto della turbolenza consiste nello scomporre le componenti di velocità in un termine medio \overline{u} e in uno oscillante u'_i , cioè:

$$u_i = \overline{u}_i + u'_i \tag{6.7}$$

pertanto un moto turbolento viene definito attraverso le caratteristiche del moto medio a cui si vanno ad aggiungere quelle statistiche associate alle fluttuazioni. Mediando le grandezze rispetto ad un tempo sufficientemente piccolo rispetto ai fenomeni che si vogliono studiare, ma grande abbastanza rispetto ai disturbi introdotti dalla turbolenza, sostituendo la 6.7 nelle equazioni di conservazione si ottengono le cosiddette equazioni RANS (*Reynold Averaged Navie Stokes*):

$$\frac{\partial \overline{\rho}}{\partial t} + \frac{\partial \overline{\rho} \tilde{u}_j}{\partial x_j} = 0 \tag{6.8}$$

$$\frac{\partial \overline{\rho} \tilde{u}_i}{\partial t} + \frac{\partial \overline{\rho} \tilde{u}_i \tilde{u}_j}{\partial x_j} = -\frac{\partial \overline{P}}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\mu \left(\frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) - \frac{2}{3} \mu \frac{\partial \tilde{u}_k}{\partial x_k} \delta_{ij} \right] + \frac{\partial}{\partial x_j} \left(-\overline{\rho} \tilde{u}_i' \tilde{u}_j' \right)$$
(6.9)

dove con il simbolo "~" si è indicata la media di Favre per flussi reattivi che, nel caso della velocità, è espressa come:

$$\tilde{u_i} = \frac{\overline{\rho u_i}}{\overline{\rho}}$$

Nella 6.9 compaiono sei nuove incognite che definisco le tensioni di Reynolds:

$$\tau_{ij} = -\overline{\rho} \tilde{u'_i} \tilde{u'_j} \tag{6.10}$$

e che devono essere modellate in modo da rendere il sistema di equazioni risolvibile. In CONVERGE è possibile scegliere tra diversi modelli, dei quali è fornita una descrizione più accurata in [5]: qui si riportano brevemente le caratteristiche del modello $k - \epsilon$, dal momento che è quello utilizzato nelle simulazioni. Il modello si basa sulla definizione di due variabili, k ed ϵ appunto, che definiscono rispettivamente l'energia cinetica turbolenta e il termine turbolento di dissipazione; senza entrare nel dettaglio della dimostrazione, la 6.10 si può esprimere come:

$$\tau_{ij} = 2\mu_t S_{ij} - \frac{2}{3}\delta_{ij} \left(\rho k + \mu_t \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_i}\right)$$
(6.11)

dove k è definito come:

$$k = \frac{1}{2}\tilde{u'_i}\tilde{u'_i}$$

mentre la viscosità turbolenta μ_t e il tensore medio degli sforzi S_{ij} sono espressi dalle:

$$\mu_t = C_\mu \rho \frac{k^2}{\epsilon}, \quad S_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_i} \right)$$

6.1.3 Combustione - Modello ECFM

Per la simulazione della combustione in fase premiscelata è stato usato il modello ECFM, il quale prevede che le reazioni chimiche avvengano all'interno di un sottile zona che separa i gas combusti dalla miscela fresca, cioè il fronte di fiamma. Il modello prevede che il combustibile bruciato per unità di volume nell'unità di tempo sia dato dal prodotto tra la densità superficiale di fiamma Σ e la velocità locale con cui questa consuma il combustibile. Per calcolare Σ , il modello utilizza il rapporto di equivalenza della miscela fresca, la sua composizione e la temperatura in prossimità della fiamma, servendosi della seguente equazione di trasporto:

$$\frac{\partial \Sigma}{\partial t} + \frac{\partial u_i \Sigma}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left[\frac{\mu}{Sc} \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{\Sigma}{\overline{\rho}} \right) \right] + \left(P_1 + P_2 + P_3 \right) \Sigma - D + P_k \tag{6.12}$$

dove P_k è il termine sorgente, D il termine di distruzione dato dalla seguente:

$$D = \beta \overline{s}_{lam} \frac{\Sigma^2}{1 - \overline{c}}$$

mentre i termini di produzione sono:

$$P_1 = \alpha K_t, \quad P_2 = \frac{2}{3} \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_i}, \quad P_3 = \frac{2}{3} \overline{s}_{lam} \frac{1 - \tilde{c}}{\tilde{c}} \Sigma$$

e rappresentano rispettivamente il contributo dovuto alla turbolenza, al moto medio e alla curvatura della fiamma. $\alpha \in \beta$ sono delle costanti specifiche del modello, mentre $\tilde{c} \in \overline{c}$ rappresentano rispettivamente le variabili di progresso di massa e volume, secondo le seguenti:

$$\tilde{c} = 1 - \frac{\tilde{Y}_F}{\tilde{Y}_{FT}}, \quad \bar{c} = \frac{\bar{\rho}}{\rho_b}\tilde{c}$$

dove si è indicato con \tilde{Y}_F la frazione in massa di gas bruciati, con \tilde{Y}_{FT} quella prima della combustione (indicato di solito come *tracciatore*) e con ρ_b la densità dei gas combusti. Per quanto riguarda infine il termine K_t , questo tiene conto dell'effetto prodotto dalla turbolenza sul corrugamento del fronte di fiamma, secondo quanto riportato dal modello ITNFS [21]; il suo valore viene determinato mediante interpolazione, secondo una relazione del tipo:

$$\frac{k \cdot K_t}{\epsilon} = ITNFS_{factor} \cdot f\left(\frac{u'}{s_L}, \frac{L}{l_F}\right)$$
(6.13)

dove $k \in \epsilon$ rappresentano l'energia cinetica turbolenta e la relativa dissipazione, s_L la velocità laminare, L la scala di lunghezza turbolenta, l_F lo spessore del fronte di fiamma, $u' = \sqrt{2/3k}$ il valore efficace della velocità turbolenta e $ITNFS_{factor}$ una costante del modello.

6.2 Implementazione modello

Il codice sorgente del modello di accensione è stato implementato sviluppando una serie di subroutine, scritte in linguaggio C, a partire dalla UDF messe a disposizione dal software: queste sono state organizzate secondo uno schema gerarchico, con al primo posto la funzione principale di accensione, seguita da una serie di sotto-funzioni dedicate al calcolo di specifici parametri.

6.2.1 Funzione principale

La funzione *ts_user_spark.c* rappresenta il corpo principale del codice che mette in comunicazione tra loro il modello con il solutore CFD principale; questa si occupa inoltre di richiamare in modo opportuno le subroutine necessarie per calcolare i parametri del kernel, determinandone l'evoluzione. Infine la funzione fornisce il valore

sorgente di Σ da fornire al codice principale per inizializzare la combustione, una volta soddisfatto un criterio di uscita.

Indicativamente la funzione *main* chiama una serie di subroutine secondo il seguente ordine:

- *ts_user_avk.c*: raccolta valori medi;
- *ts_user_initk.c*: inizializzazione parametri kernel;
- *ts_user_slam.c*: calcolo velocità laminare;
- *ts_user_flamestretch.c*: calcolo fattore di wrinkling.

ciascuna delle quali si occupa di un parametro specifico e che verranno analizzate più in dettaglio nel seguito. A questo punto è possibile determinare le proprietà termodinamiche del kernel, sulla base della 5.10; non considerando le perdite a parete e nell'ipotesi di trascurare il gradiente di pressione, l'entalpia specifica del kernel viene aggiornata ad ogni step di calcolo secondo la seguente relazione:

$$h_{k,i} = h_{k,i-1} + \frac{dq_{ch}}{m_k} + \frac{e_{spark}}{m_k} - \frac{h_{k,i-1}}{m_k} m_{k,b}$$
(6.14)

dove gli indici $i \in i - 1$ si riferiscono rispettivamente allo step di calcolo attuale e precedente, mentre con m_k si è indicata la massa complessiva del kernel, con $m_{k,b}$ la frazione bruciata e con dq_{ch} la relativa energia liberata, infine con e_{spark} l'energia rilasciata dalla candela. Conoscendo poi il valore medio del calore specifico c_p del kernel, si risale alla temperatura ricordando che $h = c_p \cdot T$.

Nota la temperatura in ogni istante, il codice passa al calcolo del relativo gradiente, grazie al quale può determinare la velocità di espansione secondo la 5.9; il raggio del kernel viene quindi aggiornato ad ogni step temporale Δt secondo la:

$$r_{k,i} = r_{k,i-1} + v_{k,i} \cdot \Delta t \tag{6.15}$$

Conoscendo istante per istante il valore del raggio, si determinano area e volume del kernel, grazie ai quali si ricava infine la densità superficiale di fiamma:

$$\begin{cases} A_k = 4\pi r_k^2 \cdot \Xi \\ V_k = \frac{4}{3}\pi r_k^3 \end{cases} \implies \Sigma = ts_{K,\Sigma} \frac{A_k}{V_k} \tag{6.16}$$

in cui $t_{S_{K,\Sigma}}$ è una costante definita secondo quanto riportato in B. Il calcolo si ripete ad ogni step e continua fintanto che il raggio non raggiunge il valore limite di 2 mm: a questo punto il modello viene disattivato e l'ultimo valore di Σ viene passato al solutore principale che lo utilizzerà come valore sorgente per il modello di combustione.
6.2.2 Raccolta valori medi

Le grandezze fisiche di interesse vengono passate al modello di accensione tramite la funzione $ts_user_avk.c$, la quale si occupa di raccoglierne i valori medi rispetto ad un volume di controllo V_c noto. Definito quindi un certo raggio a partire dalla posizione della candela, si possono identificare due zone:

- la prima, caratterizzata da $r_{cella} \leq r_{V_c}$, definisce le celle che appartengono al kernel;
- la seconda, con $r_{cella} > r_{V_c}$, si riferisce alle celle della camera di combustione che contengono miscela fresca.

pertanto le grandezze mediate relative alle due zone costituiranno rispettivamente i valori di *burned* e di *unburned*. In linea di massima il raggio del volume di controllo deve essere tale da contenere il kernel alla sua massima espansione e anche sufficientemente grande da comprendere un numero elevato di celle per avere una stima migliore dei valori medi delle diverse grandezze: nelle simulazioni si è utilizzato un volume di controllo di raggio 5 mm.

6.2.3 Inizializzazione

La subroutine $ts_user_initk.c$ si occupa del calcolo dei parametri elettrici del sistema di accensione, determinando i valori della tensione di breakdown e dell'energia resa disponibile agli elettrodi, secondo le relazioni 4.44 e 5.1:

$$V_{bd} = 4.3 + 136 \frac{p}{T_{unb}} + 324 \frac{p}{T_{unb}} d_{gap} \qquad \Rightarrow \qquad E_{bd} = \frac{V_{bd}^2}{C_{bd}^2 \cdot d_{gap}}$$

dove i valori di pressione e temperatura della miscela fresca sono quelli forniti dalla $ts_user_avk.c.$ I valori iniziali di temperatura e raggio del kernel sono quindi calcolati immediatamente utilizzando le relazioni 5.5 e 5.6 già introdotte:

$$T_i = \left[\frac{1}{k}\left(\frac{T_b}{T_{unb}} - 1\right) + 1\right] T_{unb} \quad r_i = \left[\frac{k-1}{k}\frac{E_{bd}}{p_{unb}\pi\left(1 - \frac{T_{unb}}{T_i}\right)}\right]^{1/2}$$

che saranno quindi passati alla funzione principale la quale li utilizzerà come valori di partenza, aggiornandoli ad ogni step successivo.

6.2.4 Velocità laminare

La funzione *ts_user_slam.c* si occupa del calcolo della velocità laminare di fiamma secondo il modello di Metghalchi. Affinché non si verificassero discrepanze con il valore calcolato dal modello di combustione principale, la velocità laminare è implementata nello stesso modo, cioè:

$$s_{lam,k} = s_0 \left(\frac{T_{unb}}{T_0}\right)^{\gamma} \left(\frac{p_{unb}}{p_0}\right)^{\beta} \left(1 - 2.1Y_{dil}\right)$$
(6.17)

con il significato dei simboli già visto; il coefficiente di diluizione delle specie Y_{dil} è posto uguale a zero, mentre la velocità di riferimento è calcolata come:

$$s_0 = B_1 + B_2 \left(\phi - \phi_m\right) \tag{6.18}$$

in cui B_1 , $B_2 \in \phi_m$ sono le costanti del modello che saranno definite direttamente al momento della configurazione dei parametri di combustione.

6.2.5 Calcolo fattore di wrinkling

Con la funzione $ts_user_flamestretch.c$ viene eseguito il calcolo del fattore di wrinkling, sulla base di quanto riportato nel modello ITNFS (*Intermittent Turbulence Net Flame Stretch*) proposto da Meneveau e Poinsot [21]: esso considera gli effetti prodotti dalla turbolenza sul fronte di fiamma in termini di allungamento (*stretching*) e spegnimento (*quenching*) che questo subisce a causa della presenza di vortici che distorcono la fiamma. Come riportato dalla 5.13, il termine Ξ è calcolato sulla base di un termine di produzione $P_1 = \alpha K_t$ e uno di distruzione D_k ; ricordando poi la 6.13, il termine K_t può essere espresso secondo una funzione di $u'/_{s_L}$ e $L/_{l_F}$ definita *net stretch ratio*, espresso dalla seguente:

$$\Gamma_{nfs} = \Gamma_K - \frac{3}{2} \left(\frac{r_1}{r_2} \right) \ln \left(\frac{1}{1-q} \right)$$
(6.19)

in cui $r_1 \in r_2$ valgono rispettivamente:

$$r_1 = \frac{L}{l_F}, \quad r_2 = \frac{u'}{s_L}$$

Lo stretch ratio Γ_K , il cui andamento è riportato in figura 6.2, è definito mediante interpolazione da una legge esponenziale del tipo:

$$\log_{10}(\Gamma_K) = -\frac{1}{s+0.4} \exp\left[-(s+0.4)\right] + \left\{1 - \exp\left[-(s+0.4)\right]\right\} \cdot [\sigma_1 s - 0.11]$$
(6.20)

con:

$$s = \log_{10}(r_1), \quad \sigma_1 = \frac{2}{3} \left[1 - \frac{1}{2} \exp\left(r_2^{1/3}\right) \right]$$



Figura 6.2: Andamento della funzione Γ_K al variare di r_1 e per valori crescenti di r_2 .

L'effetto del quenching prodotto da vortici con velocità eccessiva, viene considerato attraverso il parametro q, definito come:

$$q = \frac{1}{2} \left[1 + \tanh\left(|x| x^2 \right) \right]$$
 (6.21)

dove x è data dalla seguente:

$$x = \frac{\log_{10}(r_2) - g}{0.04 \cdot s} \qquad \text{con} \qquad g = \left(0.7 + \frac{1}{s}\right) \exp\left(-s\right) + \left[1 - \exp\left(-s\right)\right] \left(1 + 0.36s\right)$$

Il termine sorgente P_1 si può quindi in definitiva esprimere come:

$$P_1 = \alpha_\Xi \cdot \Gamma_{nfs} \cdot \frac{\epsilon}{k} \tag{6.22}$$

in cui k è l'energia cinetica turbolenta; in definitiva la variazione di Ξ può essere espressa come:

$$\Delta \Xi_i = (P_1 \cdot \Xi_{i-1} - D_K) \,\Delta t \qquad \Rightarrow \qquad \Xi_i = \Xi_{i-1} + \Delta \Xi_i \tag{6.23}$$

Il valore così calcolato viene passato quindi alla funzione principale per determinare l'influenza della turbolenza sull'espansione del kernel.

6.2.6 Accoppiamento modello-solutore principale

Durante la simulazione, il modello di accensione e il solutore principale si scambiano un certo numero di informazioni: i valori medi delle grandezze fisiche necessarie per il calcolo delle caratteristiche del kernel vengono raccolte dall'apposita funzione ad ogni time step. Questi sono quindi passati alla funzione principale di accensione che, usando un proprio intervallo di calcolo, esegue le singole operazioni e calcola lo stato attuale del kernel. Ad ogni ciclo avviene la verifica sulla dimensione del kernel: se questo non ha raggiunto il valore di soglia impostato, il ciclo ricomincia, utilizzando come nuovi valori iniziali quelli del ciclo precedente; in caso contrario, l'algoritmo si interrompe e l'ultimo valore utilizzabile di Σ viene ceduto al solutore principale per inizializzare la combustione. La situazione descritta è riportata schematicamente in figura 6.3.



Figura 6.3: Rappresentazione schematica dell'interazione tra modello di accensione, diviso nelle sue parti fondamentali, e solutore principale.

6 – Implementazione del modello di accensione

Capitolo 7 Validazione del modello di accensione

In questo capitolo vengono riportati i risultati del modello di accensione implementato e comparati con i dati sperimentali ottenuti da un caso test: questo è ben noto in letteratura ed è riportato in [13] e [14]. Si è scelta una tale configurazione per i seguenti motivi:

- il motore utilizzato è uno dei pochi espressamente concepito per lo studio della combustione: indagini sperimentali su motori reali forniscono, generalmente, meno informazioni sul processo di combustione;
- la geometria è relativamente semplice e descritta in modo sufficientemente dettagliato da essere riprodotto con software CAD e CFD;
- le condizioni di moto all'istante di accensione sono poco influenzate dalle condizioni iniziali, mentre in un motore reale è necessario tenere conto di tutta la fase di ricambio di fluido;
- molti parametri, generalmente vincolati in un motore reale, possono essere modificati in questa configurazione: composizione della miscela, posizione candela, tipologia del sistema di accensione e regime;
- la possibilità di accesso ottico alla camera di combustione permette di ottenere informazioni anche di tipo visivo (metodo Schlieren) sullo sviluppo del fronte di fiamma e sulla progressione del volume bruciato (questo, in particolare, sarà utilizzato come principale mezzo di confronto tra modello e dati sperimentali);
- il volume della camera di combustione è sufficientemente grande e le variazioni di pressione risultano contenute: questo semplifica in parte il problema, in

quanto parametri come velocità e spessore laminari di fiamma non variano in maniera significativa durante la combustione.

Di contro, però, questo apparato sperimentale presenta alcuni limiti:

- i dati sperimentali per le varie prove sono relativamente scarsi, inoltre i risultati ottenuti con la tecnica Schlieren presentano un'elevata incertezza;
- la geometria della fiamma risulta particolarmente complicata, pertanto gli autori hanno dovuto fare delle notevoli semplificazioni al fine di determinare il volume combusto;
- in [13] e [14] non sono riportati gli andamenti di pressione e temperatura in camera, il che impedisce di verificare correttamente le condizioni di accensione;
- le velocità di rotazione testate sono basse e, di conseguenza, lo è anche il numero di Reynolds: questo si riflette negativamente sull'affidabilità dei modelli di combustione e turbolenza che, di contro, sono pensati per descrivere correttamente flussi ad elevato numero di Reynolds.

Nel seguito verrà prima presentato l'apparto sperimentale e descritto nelle sue caratteristiche principali; in seguito sarà analizzato in dettaglio il settaggio del *case* all'interno dell'ambiente di simulazione, con particolare attenzione alla preparazione della geometria e alla scelta dei parametri di simulazione (condizioni iniziali, di combustione e di turbolenza). Infine saranno presentati i risultati delle simulazioni con e senza combustione e quindi confrontati con i dati sperimentali a disposizione.

7.1 Caso test di riferimento

Il motore utilizzato da Herweg e Maly nelle loro indagini è riportato in figura 7.1 ed è progettato appositamente per indurre un intenso moto di *swirl* all'interno della camera cilindrica laterale nella quale avviene la combustione: questo risultato è ottenuto collegando quest'ultima alla zona del cilindro mediante un condotto opportunamente inclinato. Variando il regime di rotazione e la collocazione degli elettrodi, che possono essere disposti in posizione centrale o periferica, è possibile poi studiare separatamente gli effetti del moto medio (candela centrale) e della turbolenza (candela periferica) sullo sviluppo del nucleo di fiamma. Le caratteristiche geometriche fondamentali sono riportate in tabella 7.1.

Gli accessi ottici presenti, forniti da due finestre di quarzo poste alle estremità della camera e da due aperture circolari ai lati, permettono di effettuare delle misurazioni LDV (*laser doppler velocimetry*) di velocità e intensità di turbolenza, ed utilizzare tecniche di ripresa ad alta velocità (Schlieren) per filmare l'evolversi del





Figura 7.1: Dettaglio della sezione del motore monocilindrico riportato in [13] e [14]: si mettono in evidenza le zone relative al cilindro (blu) e alla camera laterale (rosso).

fenomeno: grazie a queste Herweg e al. hanno potuto determinare l'evoluzione del volume combusto, nell'ipotesi che la sezione trasversale della fiamma si mantenesse ellittica. Le prove sperimentali condotte prevedono variazioni di regime, rapporto aria-combustibile, posizione degli elettrodi e tipo di sistema di accensione: l'elenco completo delle condizioni operative dei test è riportato in tabella 7.2.

Parametro	Valore
Alesaggio	$73\mathrm{mm}$
Corsa	$67\mathrm{mm}$
Lunghezza di biella	$112\mathrm{mm}$
Altezza di squish	$1\mathrm{mm}$
Rapporto di compressione	7.3:1
Diametro camera laterale	$45\mathrm{mm}$
Larghezza camera laterale	$19\mathrm{mm}$
Diametro condotto di collegamento	$12\mathrm{mm}$
Dimensione elettrodi	$1\mathrm{mm}$
Distanza elettrodi	$1\mathrm{mm}$

Tabella 7.1: Caratteristiche geometriche del motore sperimentale, usate anche per la simulazione.

7 – Validazione del modello di accensione

Fasatura di accensione	350 CAD
IVC	192 CAD
Temperatura miscela in ingresso	$298\mathrm{K}$
Pressione all'accensione	$5\mathrm{bar}$
Combustibile	propano
Regime	300, 500, 750, 1000, 1250 rpm
Rapporto di miscela λ	1.0, 1.3, 1.5
Posizione candela	centrale, periferica
Sistema di accensione	TCI, CDI

Tabella 7.2: Condizioni operative per il caso test.

7.2 Case set-up

Il case set-up riguarda la configurazione di tutti i parametri di simulazione, a partire dalla preparazione della geometria fino ad arrivare ai parametri di combustione e di post-elaborazione. Dal momento che una descrizione completa di tutte le fasi richiederebbe troppo tempo, nel seguito vengono riportate solo alcuni aspetti specifici per il caso in esame. Dal momento che questo lavoro di tesi è stato preceduto da un'attività di tirocinio svolta specificatamente all'apprendimento del software, per maggiori dettagli si rimanda a quanto riportato in [2]; ad ogni modo le procedure dettagliate sono reperibili dai manuali di CONVERGE [7], [5] e [6] riportati in bibliografia.

7.2.1 Preparazione geometria

Per prima cosa il motore è stato riprodotto attraverso un software CAD, facendo attenzione che il modello soddisfacesse i seguenti requisiti:

- l'asse del cilindro deve coincidere con l'asse verticale del sistema di riferimento;
- il cielo del pistone, ad inizio simulazione, deve trovarsi in corrispondenza del punto morto inferiore.

necessari al software per determinare in modo corretto la legge di moto del pistone (note le dimensioni geometriche quali alesaggio, corsa e lunghezza di biella) e di determinare il rapporto di compressione effettivo del motore. Il risultato è riportato in figura 7.2.

Si procede ora con l'importazione in ambiente CFD. La geometria deve essere importata come una superficie chiusa discretizzata in triangoli, che può essere ottenuta agevolmente a partire da un file *.stl* generato direttamente in ambiente CAD:



Figura 7.2: Geometria del motore riprodotta al CAD.

con questa operazione risulta definita la superficie completa del dominio di calcolo. La superficie deve poi essere verificata per la presenza di eventuali errori che possano compromettere il buon esito della simulazione: questa operazione viene eseguita direttamente da CONVERGE Studio utilizzando gli strumenti di diagnostica e riparazione presenti (si rimanda a [5] e [7] per maggiori informazioni).

Il passo successivo consiste nel definire le specifiche sezioni di interesse che andranno a costituire le *boundary* del sistema. Sebbene non vi siano indicazioni riguardo al loro numero, CONVERGE richiede che almeno tre siano sempre presenti e che vengano definite in un modo ben preciso; queste saranno infatti utilizzate per determinare il corretto movimento del pistone durante la simulazione e sono:

- *piston*: definisce la superficie relativa al cielo del pistone;
- *liner*: rappresenta la superficie laterale del cilindro che, durante la simulazione, si deformerà a seconda della legge di moto;
- *head*: testa del cilindro che delimita la camera di combustione.

Per un motore convenzionale sarebbe necessario definire numerose altre boundary, come le valvole di aspirazione e scarico, i relativi condotti e le regioni di ingresso e uscita del fluido; in [14] non è riportato alcun tipo di indicazione sull'architettura del sistema di aspirazione e scarico pertanto per la geometria in questione, oltre a quelle già viste, si aggiunge esclusivamente la boundary che definisce la camera di combustione laterale e il relativo condotto di collegamento. La superficie definitiva, divisa nelle specifiche boundary, è riportata in figura 7.3. La definizione delle boundary permette di identificare regioni specifiche del dominio per le quali dovranno essere definite le condizioni iniziali e al contorno. 7 - Validazione del modello di accensione



Figura 7.3: Superficie divisa in boundary: piston, liner, head e side chamber.

7.2.2 Condizioni iniziali e al contorno

Per eseguire una simulazione devono essere specificate le condizioni iniziali di ogni regione definita nella sezione precedente quali pressione, temperatura, velocità, turbolenza e specie chimiche, come riportato in figura 7.4.

Per quanto riguarda le condizioni termodinamiche iniziali, queste sono state determinate a partire dalle indicazioni fornite in [14] e [10]. I valori iniziali di pressione e temperatura nel cilindro e nella camera sono stati calcolati in modo da garantire quelli all'accensione, cioè 5 bar e 660 K. In prima approssimazione, si è ipotizzata una compressione politropica, di esponente n = 1.39, dal PMI al PMS: conoscendo il rapporto di compressione, le condizioni termodinamiche all'accensione e la temperatura a IVC, il valore di pressione iniziale è facilmente determinabile. Per una conferma è stata poi eseguita una simulazione in trascinato dall'istante di accensione fino a fine espansione: i valori di fine espansione sono stati confrontati con quelli precedentemente calcolati, mettendo in evidenza una certa discrepanza. Utilizzando i valori così calcolati come condizioni di inizio compressione ed eseguendo nuovamente la simulazione si ottengono gli andamenti di pressione e temperatura riportati in figura 7.5: le condizioni all'accensione coincidono perfettamente con quelle riportate in [10]. Per quanto riguarda le condizioni al contorno, sono state imposte condizioni adiabatiche di scambio nullo in tutto il dominio.

La velocità iniziale è stata posta nulla in tutto il dominio. Per quanto riguarda le proprietà turbolente, si fa presente che le consuete relazioni tra scala turbolenta e

 $7.2 - Case \ set-up$

Connect all regions Check for region interfaces Automatically assign streams D Region Name Conception	Stream ID: Velocity: Temperature: Pressure:	0 \$ Solid 0 0.0 0.0 r 340.0
Check for region interfaces Check for region interfaces Automatically assign streams D Region Name Comb_chamb	Velocity: Temperature: Pressure:	10.0 0.0 0.0 r 340.0 1
Check for region interfaces Automatically assign streams D Region Name Comb_chamb	Temperature: Pressure:	340.0
Automatically assign streams ID × Region Name 0 comb_chamb	Pressure:	340.0
ID Y Region Name 0 comb_chamb	Pressure:	
0 comb_chamb		38000.0 F
	Turbulence in	itialization
1 cylinder		alue O Viscosity ratio/Length scale
	Turbulent Kir	ietic Energy: 10.0 m ² /s
	Turbulent Di	ssipation: 20000.0 m²/s
	Species	+Air Pull from boundar
	Species Nat	ne Mass Fraction Sum = 1.0000
	IC8H18	0.059988
	02	0.216203
	N2	0.723809
		Normalize
	Passive	+ECFM3Z Tracers Pull from boundar
	Passive Nar	ne Value d
	T_02	0.216203
	T_CO	0
🗋 Copy 🕴 Add 🗙 Delete	T_FUEL	0.059988
Assign all boundaries into		
legion count: 2		

Figura 7.4: Pannello di configurazione delle condizioni iniziali per le singole regioni: pressione e temperatura (in rosso), turbolenza (in verde), specie chimiche (in blu) e passivi (in arancione).



Figura 7.5: Curva di pressione (a) e temperatura (b) in fase di compressione: prova condotta senza combustione per determinare le condizioni iniziali di accensione.

alesaggio, livello di turbolenza e velocità di rotazione, non sono del tutto applicabili in questo caso, in quanto la geometria è troppo diversa da quella di un motore convenzionale: questa incide profondamente sull'evoluzione del moto all'interno della camera laterale, tanto che diverse condizioni iniziali non alterano in maniera significativa il risultato. A tal proposito sono state condotte alcune simulazioni per diversi valori di turbolenza iniziale, sia con il modello $k - \epsilon$ che con quello $RNGk - \epsilon$,

le quali però non hanno mostrato differenze sostanziali: altre informazioni sono riportate nella sezione successiva, quando saranno analizzati i risultati in assenza di combustione.

Infine, si devono fornire le frazioni in massa delle specie chimiche presenti in ciascuna regione; per il caso in esame, non è stata considerata la presenza di gas combusti residui in camera: come riportato in [14], ogni ciclo di combustione è seguito da quindici di lavaggio, pertanto l'ipotesi di trascurare la presenza di eventuale EGR è del tutto lecita. Il calcolo delle frazioni in massa è quindi immediato, infatti si ha:

$$\begin{cases} \lambda = \frac{A/F}{\lambda_s} & \Rightarrow \\ m_M = m_A + m_F & \end{cases} \qquad \Rightarrow \qquad \begin{cases} X_F = \frac{m_F}{m_M} \\ X_A = X_{O_2} + X_{N_2} = \frac{m_A}{m_M} \end{cases}$$

e ricordando che $\lambda_s = 15.67$, $X_{O_2} = 0.23X_A$ e $X_{N_2} = (1 - 0.23)X_A$, si ricavano le frazioni in massa cercate, riportate in tabella B.1. Per le simulazioni si è considerata la condizione di miscela uniformemente distribuita in tutto il dominio, in modo da non alterare il valore di λ nella regione della camera.

	$\lambda = 1.0$	$\lambda = 1.3$	$\lambda = 1.5$
X_F	0.059988	0.046792	0.040808
X_{O_2}	0.216203	0.219238	0.220614
X_{N_2}	0.723809	0.733970	0.738578

Tabella 7.3: Frazioni in massa di combustibile, ossigeno e azoto per diversi valori di λ .

7.2.3 Settaggio parametri di combustione

Per prima cosa vengono definite le specie chimiche principali che partecipano alla combustione: queste sono riportate in appositi file (*therm.dat* e gas.dat) contenuti nella libreria principale di CONVERGE. A seconda del tipo di combustione che si vuole simulare e del modello utilizzato, questi file andranno modificati di volta in volta. Per quanto riguarda specificatamente il modello ECFM, questo richiede che nei file di configurazione siano presenti delle specie chimiche apposite e i relativi tracciatori (ancora una volta si rimanda a [7] per ulteriori dettagli). Questi vengono creati automaticamente dal software, tuttavia è richiesto che alcuni file di configurazione vengano modificati manualmente, in particolare:

• nel file *therm.dat*, che riporta le proprietà delle specie chimiche coinvolte nelle reazioni, devono essere aggiunte le voci *bfuel*, *unmixfuel* e *unmix02*: a queste devono poi essere associate le stesse caratteristiche rispettivamente del combustibile e dell'ossigeno;

• nel file relativo alle condizioni iniziali, devono essere aggiunti i tracciatori *t*fuel, *t*-*CO* e *t*-*O*2: questi devono essere inizializzati allo stesso valore della specie chimica corrispondente, come riportato in figura 7.4.

Come già fatto notare, il modello ECFM ha bisogno di essere inizializzato perché la combustione avvenga: il valore iniziale, che corrisponde in questo caso alla densità superficiale di fiamma rilasciata dalla candela e identificato come *flmtden*, viene fornito sotto forma di sorgente esterna. Usando l'apposita interfaccia di configurazione, riportata in figura 7.6, vengono configurati i parametri della sorgente: per quanto riguarda il *valore sorgente*, questo viene settato a zero dal momento che sarà calcolato tramite il modello di accensione che lo fornirà in output. Gli angoli di inizio e fine sorgente definiscono semplicemente la durata della finestra angolare durante la quale la sorgente risulta attiva: il valore iniziale è scelto a seconda della simulazione in modo che il rilascio avvenga a 350 CAD, mentre quello finale è impostato arbitrariamente a zero (cioè a 360 CAD) dal momento che la durata effettiva viene determinata dal modello di accensione.

✓	Source/sink	modeling	↑ □ ×
Show all	General Sha	pe Motion	
Sources	Source: P	assive 🛛	
Spark location	Source un	its: Passive 🗸	
	Value:	0.0 - 🗌 Use file	
	Max. pass	ve: 1.0	- I
	Mode:	SEQUENTIAL	· ·
	Start time:	-12.0	deg.
	End time:	0.0	deg.
	Period:	0.0	deg.
Add X Delete	Source time-	step multiplier 1.0	units
		🧭 ОК 🔍 Val	idate

Figura 7.6: Configurazione della sorgente di Σ .

7.2.4 UDF

Le subroutine del modello di accensione implementate sono state inserite all'interno della funzione *user_source_driver_passive*, presente nelle librerie di CONVERGE, grazie alla quale è stato possibile personalizzare il rilascio della sorgente. Alcune operazioni si sono rese necessarie affinché i due modelli comunicassero in maniera opportuna (ulteriori dettagli sono riportati in B):

- la durata di rilascio è stata determinata sulla base dei dati forniti in [14]: il valore, in microsecondi, viene convertito in una durata angolare determinando, di fatto, l'ampiezza dell'intervallo in cui la sorgente deve essere attiva. L'istante di inizio rilascio (ts_sim_time) è calcolato invece sulla base del tempo di simulazione attuale e coincide con l'istante in cui il kernel raggiunge un valore limite di raggio: sommando a questo l'ampiezza dell'intervallo viene stabilito il termine della fase di rilascio (ts_end_time);
- l'inizio della fase di rilascio ha luogo quando il raggio del kernel raggiunge un certo valore limite, pertanto nel codice è previsto un controllo, istante per istante, di tale parametro. Superato tale valore, il modello di accensione viene disattivato, il controllo ritorna al codice principale che da inizio al rilascio di Σ: il valore della sorgente sarà quindi pari al valore di Σ calcolato fintanto che la sorgente è attiva, per diventare nuovamente nullo superato il ts_end_time.

Infine, per monitorare poi l'evoluzione dei parametri del kernel, si è impiegata una UDF per la gestione dei file di output: il file *user_output* raccoglie infatti tutti i dati relativi al kernel fintanto che il modello di accensione risulta attivo. Da questa sono stati poi estratti i valori per la validazione.

7.3 Risultati in assenza di combustione

Vengono qui riportati alcuni risultati ottenuti da simulazioni condotte in assenza di combustione, al fine di evidenziare le caratteristiche del campo di moto all'interno della camera prima che questa avvenga.¹

Durante la fase di compressione, il pistone spinge il fluido all'interno del condotto che, essendo collegato tangenzialmente alla camera laterale, induce un intenso moto di swirl all'interno di quest'ultima. Durante le prime fasi della compressione, il flusso uscente dal condotto risulta molto accelerato, mentre il fluido presente nella camera è quasi fermo: l'interazione tra i due genera un moto circolare complessivo assialsimmetrico. Man mano che il pistone si avvicina al punto morto superiore, la velocità del flusso all'interno del condotto diminuisce; nel momento in cui questo entra in contatto con il flusso presente nella camera, subisce una deviazione: il moto risultante appare pertanto più simmetrico, ma comunque non centrato rispetto alla camera. La situazione descritta è visibile in figura 7.7, dove sono riportati due diversi andamenti di velocità, al momento dell'accensione (7.7b) e 5 CAD prima (7.7a).

¹Alcune delle immagini riportate fanno riferimento esclusivamente alla prova condotta per n = 1250 rpm, dal momento che i risultati variano linearmente con il regime di rotazione.



Figura 7.7: Profili di velocità all'interno della camera laterale per diversi angoli di manovella.

In figura 7.8 è riportato il profilo radiale della velocità, normalizzata rispetto alla velocità media del pistone ($\overline{u_p} = 2s \cdot n$), per diversi regimi di rotazione: l'andamento è relativo ai valori calcolati lungo la retta congiungente il centro della camera e la posizione periferica della candela, adimensionalizzati rispetto al raggio complessivo della camera.



Figura 7.8: Profilo radiale di velocità adimensionale.

Si nota immediatamente che la velocità al centro della camera non è nulla e che la zona più vicina al centro del vortice si trova circa a 2 mm (corrispondente al punto 0.1 sul grafico). La direzione tangenziale del flusso è poi confermata osservando

l'andamento della velocità: questa infatti aumenta all'aumentare della distanza del centro prima di decrescere rapidamente in prossimità della parete della camera.²

La figura 7.9 riporta invece l'andamento della velocità media in corrispondenza del punto periferico di accensione al variare dell'angolo: gli andamenti sono in linea con i valori sperimentali riportati in [13] e [14], nonostante le condizioni iniziali di simulazione non siano affatto quelle reali.



Figura 7.9: Profilo angolare di velocità, adimensionalizzata rispetto alla velocità media del pistone, in corrispondenza del punto di accensione (posizione periferica): confronto tra dati sperimentali (indicatori) e simulazioni (tratto continuo).

Si riportano infine gli andamenti della turbolenza in camera, espressa in termini di intensità relativa come riportato in [13]:

$$\frac{1}{\overline{u_p}}\sqrt{\frac{2}{3}TKE}$$

in corrispondenza del piano di mezzeria della camera all'istante di accensione (figura 7.10) e sul piano passante per il centro della camera e la candela e perpendicolare al precedente (figura 7.11).

Gli andamenti dell'intensità di turbolenza sono in linea con quelli riportati in [13], tuttavia in corrispondenza della candela, al momento dell'accensione, si registrano valori di energia cinetica turbolenta inferiori rispetto a quelli misurati sperimentalmente. In tabella 7.4 sono riportati i valori ottenuti dalle simulazioni, confrontati

²Il punto finale del grafico, corrispondente a $^{r}\!/_{r_{sc}}=1,$ non coincide esattamente con la parete, ma è preso ad una distanza di 0.5 mm da questa.



Figura 7.10: Intensità di turbolenza normalizzata rispetto alla velocità media del pistone sul piano medio della camera a 350 CAD.



Figura 7.11: Intensità di turbolenza a 350 CAD sul piano passante per il centro della camera e la posizione della candela: dettaglio della sezione (a sinistra) e relativa messa in pianta (a destra).

cone quelli disponibili in bibliografia: si vede che l'errore commesso aumenta al diminuire del regime di rotazione.

Regime	TKE_{sim}	TKE_{exp}	Errore
	$\left[\mathrm{m}^{2}\mathrm{s}^{-2}\right]$	$[m^2 s^{-2}]$	
300	0.56	1	44%
750	2.76	3.5	21%
1250	8.35	9.5	11.5%

Tabella 7.4: Valori di turbolenza in corrispondenza della candela all'istante di accensione confrontati con i valori riportati in [10].

7.4 Risultati modello di accensione

Per la validazione del modello sono state condotte simulazioni a diverso regime di rotazione e diverso valore di rapporto aria-combustibile, riassunte in tabella 7.5. Le simulazioni sono state eseguite solo in condizioni di candela periferica perché queste sono più rappresentative per quanto riguarda l'influenza delle condizioni di moto sullo sviluppo del kernel: in posizione centrale, per quanto osservato in precedenza, le velocità sono molto basse.

Prova	n	λ	Candela
	[rpm]		
1	300	1.0	periferica
2	750	1.0	periferica
3	1250	1.0	periferica
4	1250	1.3	periferica
5	1250	1.5	periferica

Tabella 7.5: Condizioni operative di simulazione relative a [10].

L'evoluzione del kernel al variare del regime è riportato in figura 7.12.



Figura 7.12: Raggio del kernel al variare del regime di rotazione.

I valori iniziali sono gli stessi in tutte e tre le configurazioni, in quanto questo dipende principalmente dalle condizioni di temperatura e pressione della miscela fresca e dall'energia di breakdown, che si mantengono praticamente costanti. Durante i primi 50 µs si registra un'espansione molto rapida del kernel, con andamenti quasi sovrapposti: questo può essere spiegato osservando l'andamento della velocità di espansione riportato in figura 7.13.



Figura 7.13: Andamento della velocità del kernel a pari rapporto aria-combustibile per diversi regimi.

Da questa si vede che la velocità nelle tre configurazioni presenta un andamento simile fino a 50 µs dal momento che il suo andamento è determinato dal gradiente di temperatura, che si può dedurre osservando la figura 7.14: la temperatura passa molto rapidamente dai circa 45 000 K, della fase di post-breakdown, a valori di circa 5000 K, pertanto il gradiente assume valori molto alti che sovrastano gli effetti legati alla turbolenza. Trascorsi i primi 50 µs, la temperatura tende a regimarsi intorno a valori di circa $(2500 \div 3000)$ K, quindi il gradiente diventa trascurabile; osservando però figura 7.12, si vede che i tre andamenti iniziano a discostarsi gli uni dagli altri: a velocità di rotazione più elevata, il kernel raggiunge i 2 mm più velocemente rispetto alle altre configurazioni. Considerando nuovamente figura 7.13 si può infatti osservare una maggiore velocità, seppur contenuta, della velocità di espansione nel caso di n = 1250 rpm: in questa situazione gioca un ruolo fondamentale la turbolenza, il cui effetto può essere osservato dalla figura 7.15 che riporta l'andamento del fattore di wrinkling. Si vede chiaramente che i valori Ξ aumentano progressivamente all'avanzare del tempo e sono tanto maggiori quanto maggiore è il regime di rotazione: l'espansione del kernel non è più di tipo termico, ma dipende principalmente dalle caratteristiche del campo di moto.

La validazione del modello è stata fatta confrontando il tempo impiegato per bruciare un dato volume. Questo è riportato in figura 7.16 per un volume di 1 cm^3 : i risultati delle simulazioni sono coerenti con i dati sperimentali proposti in [14], ed evidenziano come al diminuire del regime il tempo impiegato per consumare



Figura 7.14: Andamento della temperatura del kernel a pari rapporto aria-combustibile per diversi regimi.



Figura 7.15: Fattore di wrinkling a diversi regimi di rotazione.

uno stesso volume aumenti, diminuendo la turbolenza. Per completezza vengono poi riportati in figura 7.17 gli stessi andamenti rispetto all'angolo motore: da questi si vede che la combustione, a regimi più elevati, ha una durata angolare maggiore (si ricorda che vale la $\Delta \theta = \omega \Delta t$).

Gli effetti di una variazione del titolo della miscela sull'espansione del kernel sono osservabili in figura 7.18: all'aumentare di λ , si osserva immediatamente che il kernel



Figura 7.16: Volume combusto per diversi regimi al variare del tempo.



Figura 7.17: Volume combusto per diversi regimi al variare dell'angolo.

impiega tempi sempre maggiori per raggiungere il valore limite di 2 mm. La maggiore lentezza è dovuta al crollo della velocità laminare che si ha allontanandosi dalle condizioni stechiometriche e che diventa sempre più evidente per valori superiori del titolo: osservando infatti l'andamento della velocità riportato in figura 7.19 si osserva una marcata differenza tra le velocità fin dai primi istanti dopo l'accensione. Questa è aggravata ulteriormente da un minore gradiente di temperatura che si registra per miscele via via più magre, come riportato in figura 7.20: le temperature maggiori dipendono dal fatto che il kernel si espande più lentamente, quindi i fenomeni di scambio termico interessano una superficie minore. Come è stato inoltre messo in evidenza nei capitoli precedenti, gradienti minori determinano fronti di fiamma più spessi ai cui sono associate velocità normalmente minori.



Figura 7.18: Raggio del kernel al variare del rapporto aria-combustibile.



Figura 7.19: Andamento della velocità del kernel a pari regime e diverso rapporto aria-combustibile.

I valori di Σ calcolati dal modello sono stati utilizzati come in precedenza per determinare l'evoluzione del volume combusto, come riportato nelle figure 7.21 e



Figura 7.20: Andamento della temperatura del kernel al variare del rapporto ariacombustibile.



Figura 7.21: Volume combusto per diversi λ al variare del tempo.

7.22. Come prevedibile, la combustione procede molto più lentamente rispetto al caso stechiometrico per via delle ridotte velocità: l'effetto della turbolenza risulta trascurabile e non riesce a recuperare il calo, in termini di velocità laminare, provocati dallo smagrimento della miscela. Si fa poi osservare che la prova condotta con $\lambda = 1.3$ risulta essere in linea con i risultati sperimentali; tuttavia permangono alcune perplessità per quanto riguarda la prova con $\lambda = 1.5$: gli andamenti ottenuti



Figura 7.22: Volume combusto per diversi λ al variare dell'angolo.

mediante simulazione si discostano notevolemente da quelli sperimentali riportati in [14], pertanto sorge qualche interrogativo riguardo l'affidabilità del modello in condizioni di miscela molto magra.

7.5 Osservazioni e conclusioni

L'attività svolta ha permesso di approfondire notevolmente un argomento di grande interesse in campo ingegneristico, tuttavia poco trattato in ambito accademico. Grande spazio è stato dedicato alla descrizione dei processi fisici che avvengono durante le fasi dell'accensione: questo ha permesso di comprendere le difficoltà connesse alla simulazione di questo fenomeno in ambiente CFD. Questo ha anche fornito la base di partenza per comprendere la necessità di ricorrere a modelli notevolmente semplificati che garantiscano buona precisione a fronte di tempi di calcolo ridotti: il modello proposto soddisfa entrambi i requisiti, come evidenziato dai risultati ottenuti.

A tal proposito, è possibile concludere che:

- il software CONVERGE ha permesso di implementare agevolmente il modello di accensione e di utilizzarlo insieme ai modelli di accensione predefiniti all'interno;
- i risultati ottenuti tramite il modello di accensione sono in linea con quelli relativi a prove condotte con codici diversi, dimostrando una corretta implementazione delle equazioni;

- i dati ottenuti dalle simulazioni sono coerenti con quelli sperimentali, pertanto il modello permette di riprodurre correttamente le proprietà del caso di riferimento;
- le simulazioni hanno permesso di stabilire l'influenza di alcuni parametri fondamentali in campo motoristico, come regime e rapporto aria-combustibile. A tal proposito si osserva che le simulazioni condotte a parità di λ sono in ottimo accordo con i risultati sperimentali, evidenziando tuttavia un calo di accuratezza nel caso di miscele magre, soprattutto per il caso limite con $\lambda = 1.5$: questo è probabilmente dovuto all'errata stima della velocità laminare da parte del modello di Metchalghi che non si dimostra particolarmente accurato nel caso di λ lontani dal valore stechiometrico.

Dal momento che il lavoro è stato condotto partendo da zero ed utilizzando un software CFD del tutto nuovo, ulteriori sviluppi sono sicuramente richiesti; in particolare si richiama l'attenzione sui seguenti aspetti:

- il calcolo della temperatura del kernel potrebbe essere migliorato tenendo in considerazione la fase iniziale di espansione in cui prevalgono gli effetti della conduzione termica: questa modifica potrebbe portare ad avere una stima più precisa dei gradienti durante le prime fasi di espansione;
- per la fase di espansione si è ipotizzato che non avvenissero reazioni chimiche all'interno del volume del kernel, il che ha permesso di semplificare notevolmente l'implementazione: tenere conto di questo aspetto, mediante un aggiornamento delle specie chimiche, permetterebbe di valutare le variazioni di temperatura nell'intorno della candela;
- per adattare il modello di accensione a quello di combustione è stato necessario utilizzare una serie di costanti numeriche che, in prima battuta, sono state scelte manualmente: per rendere il modello applicabile ad un caso generico, le variabili dovrebbero essere calcolate in maniera automatica o del tutto eliminate;
- una migliore comprensione del modello di combustione è sicuramente richiesta, specialmente per quello che riguarda la gestione dei termini sorgenti e dei passivi da parte di CONVERGE, così come il settaggio accurato dei diversi parametri del modello ECFM.

7 – Validazione del modello di accensione

Appendice A

Particelle cariche all'interno d un campo elettrico costante

Si riportano in questa sezione alcuni concetti relativi alle particelle cariche che si muovono in un campo elettrico costante. Visto che per una descrizione accurata sarebbe necessario risolvere l'equazione cinetica per gli elettroni, vengono fornite solo le definizioni di quelle grandezze che compariranno nel corso della trattazione, senza fornire particolari dimostrazioni.

Velocità di drift e mobilità

Nell'intervallo tra due collisioni consecutive, un elettrone viene accelerato nella direzione delle linee di forza del campo elettrico E: in seguito ad un urto, la sua direzione viene modificata in modo casuale per poi essere nuovamente accelerato. Il movimento nella direzione del campo esterno è noto come *drift*, per distinguerlo da quello casuale di fondo.

Considerando la durata di un urto, questo si può ritenere trascurabile rispetto al tempo medio che intercorre tra due collisioni consecutive τ_c , pertanto l'equazione della velocità reale di un elettrone si può scrivere come:

$$m\dot{v}_{e} = -eE + \sum_{i} m\Delta v_{i}\delta\left(t - t_{i}\right), \quad \Delta v_{i} = v_{e}^{'} - v_{e}$$
(A.1)

dove Δv_i è la variazioni di velocità in seguito alla collisione i-esima al tempo t_i , δ è la funzione di Dirac e v'_e la velocità in seguito all'urto. Dal momento che seguire un singolo elettrone sarebbe inutile, la precedente relazione deve essere mediata nel tempo, pertanto la velocità \dot{v}_e sarà sostituita da quella media \dot{v} ; anche la sommatoria risulta mediata rispetto agli istanti t_i e ai valori degli angoli θ tra i vettori v'_e e v_e : in questo modo la si può considerare come la variazione di quantità di moto nell'unità di tempo $m\langle\Delta v\rangle/\tau_c$. Decomponendo poi Δv nelle due componenti normale e tangenziale alla velocità media v prima della collisione risulta che $\langle \Delta v_{\perp} \rangle = \langle v'_{\perp} \rangle = 0$ ed osservando che la velocità di un elettrone, in seguito ad urto elastico con una particella di massa superiore, rimane praticamente la stessa, si può scrivere:

$$\langle v_{\parallel} \rangle = \langle v'_{\parallel} \rangle - v = v \langle \cos \theta \rangle - v \equiv -v \left(1 - \overline{\cos \theta} \right)$$

con $\overline{\cos \theta}$ il valore medio dei coseni degli angoli θ . Da queste considerazioni, la A.1 può essere scritta in termini di velocità media come:

$$m\dot{v} = -eE - mv\nu_m \qquad \text{con} \qquad \nu_m = \nu_c \left(1 - \overline{\cos\theta}\right)$$
(A.2)

dove si è indicato con $\nu_c = \tau_c^{-1} = N v \sigma_c$ la frequenza di collisione dell'elettrone (le altre grandezze hanno il significato già visto). Integrando la A.2 si ottiene:

$$v(t) = -\frac{eE}{m\nu_m} \left[1 - \exp(-\nu_m t)\right] + v(0) \exp(-\nu_m t)$$
(A.3)

ed osservano che la velocità iniziale, essendo casuale, sparisce dopo poche collisioni, la velocità media si può esprimere come:

$$v_d = -\frac{eE}{m\nu_m} \tag{A.4}$$

che si definisce velocità di drift. Grazie alla A.4 si può definire il coefficiente di proporzionalità tra v_d e il campo elettrico, cioè la mobilità dell'elettrone, come:

$$\mu_e = \frac{e}{m\nu_m} \qquad \Rightarrow \qquad v_d = \mu_e E \tag{A.5}$$

Le definizioni di velocità di drift e mobilità possono essere applicate anche al caso degli ioni; in questo caso però bisogna considerare che la massa M_i degli ioni è paragonabile con quella M delle molecole di gas, pertanto gli scambi di quantità di moto ed energia dipende dalla massa ridotta M' definita come:

$$M' = \frac{M_i M}{M + M_i}$$

Si ottiene pertanto:

$$v_{d,i} = \frac{eE}{M'\nu_m}, \quad \mu_i = \frac{e}{M'\nu_m} \tag{A.6}$$

Conducibilità di un gas ionizzato

Osservando che la mobilità degli ioni è di gran lunga inferiore a quella degli elettroni, il contributo che i primi danno in termini di corrente elettrica complessiva è modesto (salvo nel caso in cui $n_+, n_- \gg n_e$); la densità di corrente e la *conduttività* in un gas ionizzato, nell'ipotesi che $n_+ \simeq n_e$, valgono rispettivamente:

$$j = -en_e v_d = en_e \mu_e E = \sigma E \tag{A.7}$$

$$\sigma = e\mu_e n_e = \frac{e^2 n_e}{m\nu_m} \tag{A.8}$$

Energia associata all'elettrone

Considerando ora un elettrone che si muove a velocità v_e in un campo elettrico E, il lavoro fatto da questo nell'unità di tempo si può esprimere come $-eE \cdot v_e$; scomponendo la velocità nelle sue componenti casuale e di drift $v_e = v + v_d$, e mediando su un gran numero di elettroni risulta che $\langle v \rangle = 0$, cioè $\langle v_e \rangle = v_d$: il lavoro medio fatto dal campo vale quindi eEv_d . L'energia rilasciata per unità di tempo e volume dalla corrente vale $jE = eEn_ev_d$ e corrisponde al calore per effetto Joule dissipato a causa della resistenza offerta dal gas.

E quindi possibile esprimere l'energia media acquisita da un elettrone in seguito ad una collisione come:

$$\Delta \epsilon_e = \frac{eEv_d}{\nu_m} = \frac{e^2 E^2}{m\nu_m^2} = mv_d^2 \tag{A.9}$$

e coincide, come ordine di grandezza, con l'energia cinetica associata alla velocità di drift, ricordando infatti che l'energia cinetica media complessiva di un elettrone si può considerare formata da due contributi:

$$\langle \frac{mv_e^2}{2} \rangle = \langle \frac{mv^2}{2} \rangle + \frac{mv_d^2}{2} = \overline{\epsilon} + \frac{mv_d^2}{2}$$

La A.9 può essere interpretata qualitativamente nel seguente modo. La velocità di un elettrone dopo una collisione è del tutto casuale, quindi il suo vettore è mediamente nullo; in seguito ad una nuova collisione, l'elettrone acquisisce una velocità pari a v_d e l'energia cinetica corrispondente: l'urto trasferisce questa nuova porzione di energia alla componente casuale e il processo ricomincia. Alla A.9 ci si poteva arrivare considerando che in seguito ad un urto, un elettrone può essere accelerato e decelerato dal campo elettrico, acquisendo o perdendo energia rispettivamente, a seconda che il moto di drift avvenga lungo le linee di campo o in direzione opposta. Considerando due elettroni che si muovono alla stessa velocità, ma in direzioni opposte, l'energia cinetica ad essi associata è la stessa e vale $\frac{mv^2}{2}$; l'elettrone che si muove nella direzione del campo raggiunge, prima della collisione successiva, la velocità $v + v_d$ e acquisisce un'energia pari a:

$$\Delta \epsilon_{+} = \frac{m\left(v + v_{d}\right)^{2}}{2} - \frac{mv^{2}}{2} = mvv_{d} + \frac{mv_{d}^{2}}{2}$$

mentre per quello che arriva da direzione opposta si ha $-v + v_d$ e un guadagno energetico pari a:

$$\Delta \epsilon_{-} = \frac{m \left(-v + v_{d}\right)^{2}}{2} - \frac{m v^{2}}{2} = -m v v_{d} + \frac{m v_{d}^{2}}{2}$$

che risulta negativo (l'elettrone perde energia) se $v > v_d/2$. Mediamente l'energia complessivamente acquisita vale quindi:

$$\frac{\Delta\epsilon_+ + \Delta\epsilon_-}{2} = mv_d^2$$

che coincide con la A.9, non dipende da v ed è sempre positiva.¹

L'energia media dell'elettrone può essere definita a partire dal bilancio energetico nel caso di urto elastico, nell'ipotesi che lo scambio di energia si unidirezionale dall'elettrone alla particella colpita:

$$\frac{\mathrm{d}\epsilon}{\mathrm{d}t} = \left(\frac{e^2 E^2}{m\nu_m^2 - \delta\epsilon}\right)\nu_m \qquad \text{con} \qquad \delta = \frac{2m}{M} \tag{A.10}$$

In condizioni normali, gli scambi di energia avvengono principalmente in seguito ad urti elastici; per promuovere la ionizzazione occorre che l'energia associata agli elettroni sia molto alta e, da quanto visto nel capitolo 2, il numero di tali elettroni diminuisce all'aumentare dell'energia: nei processi ionizzanti gli elettroni dissipano la propria energia andando ad eccitare gli stati vibrazionali delle molecole. Assumendo allora che δ e la sezione trasversale di collisione σ non dipendono dall'energia, allora anche il cammino medio $\overline{\lambda}$ lo è; considerando una distribuzione di tipo maxwelliano, dalla A.10 si ha:

$$\overline{\epsilon} = \frac{\sqrt{30\pi}}{4} \frac{eE\overline{\lambda}}{\sqrt{\delta}} \simeq \frac{e}{\sigma\sqrt{\overline{\lambda}}} \frac{E}{N}$$
(A.11)

cioè l'energia media è proporzionale a E/N ed è incrementata di un fattore $1/\sqrt{\delta}$ rispetto all'energia $eE\overline{\lambda}$ che l'elettrone acquisisce muovendosi nella direzione del campo. La precedente relazione assume che il cammino libero medio sia costante e che, pertanto, la velocità di drift dipenda dalla radice quadrata del campo elettrico. D'altra parte assumendo che la frequenza di collisione sia costante, si ha che la mobilità lo è altrettanto e che la velocità di drift dipende dal rapporto tra $E \in N$, quindi risulterebbe:

¹Considerando un elettrone con velocità disposta arbitrariamente rispetto ad E, il concetto non cambia perché è sempre possibile trovare un secondo elettrone con velocità opposta.

$$\overline{\epsilon} = \frac{e^2 E^2 N^2}{\delta m \nu_m^2} \left(\frac{E}{N}\right)^2 \tag{A.12}$$

La scelta tra una delle precedenti dipende essenzialmente dal tipo di analisi che si vuole intraprendere: se l'effetto che interessa dipende dalla velocità di drift o dalla corrente, è conveniente utilizzare la A.12 nell'ipotesi di mobilità costante; se interessano invece gli aspetti energetici è meglio l'ipotesi di cammino medio costante e, quindi, la A.11.

Nel caso di ioni con massa confrontabile con quella delle molecole di gas, nell'ipotesi di frequenza di collisione costante, si perviene alla seguente relazione per l'energia media:

$$\bar{\epsilon}_i = \frac{3}{2}K_BT + \frac{\left(1 + \frac{M_i}{M}\right)^3}{2\left(\frac{M_i}{M}\right)} \frac{e^2 E^2}{M_i \nu_m^2} \tag{A.13}$$

dalla quale si nota che il contributo dovuto al campo è considerevole solo se la sua intensità è molto elevata, che tuttavia viene persa immediatamente in ogni collisione.

 ${\cal A}$ – Particelle cariche all'interno d un campo elettrico costante

Appendice B Adeguamento delle UDF

L'utilizzo del modello ECFM ha presentato non poche problematiche, in particolare per quello che riguarda la gestione del termine sorgente. Una prima difficoltà riguarda il valore effettivo da utilizzare: si è riscontrato, infatti, che con i consueti valori di Σ (calcolati con il modello o dedotti da simulazioni condotte con altri codici) il calcolo della combustione non riusciva ad essere eseguito, determinando un crollo dello step di calcolo. Una prima modifica riguarda pertanto il calcolo del valore sorgente all'interno dell'UDF per i passivi: mentre nella versione originale questa è calcolata come rapporto tra il valore (adimensionale) di Σ e il prodotto $\Delta t \cdot volume$, in cui il volume è quello della sorgente definito in CONVERGE e Δt la sua durata, per le simulazioni utilizzate la divisione per il volume è stata eliminata. Osservando infatti la funzione relativa al metodo di risoluzione dell'equazione di trasporto per i passivi, ci si è accorti che tale divisione era già prevista: le problematiche riscontrate dipendevano probabilmente da questa doppia divisione che determinava valori di sorgente estremamente elevati.

Una seconda osservazione deve essere poi fatta per quanto riguarda le condizioni di inizializzazione del modello ECFM: in prossimità della zona in cui avviene il rilascio di Σ deve essere presente una certa quantità di CO_2 . Il problema è stato osservato confrontando le simulazioni fatte tra il motore in questione e un altro nel quale era previsto dell'EGR in camera: risultato, nel secondo caso la combustione avveniva correttamente, mentre nel primo no. Questo ha portato alla necessità di introdurre una sorgente di CO_2 nella zona di candela a ridosso dell'istante di accensione, con un valore pari a 1 mg e una concentrazione in massa massima pari allo 0.3%, e una durata di 1 CAD: tale valore è stato scelto procedendo per tentativi in modo da determinarne il valore minimo per avviare la combustione e tale da non alterare il rapporto λ nella zona di candela. Questo è sicuramente un punto delicato che dovrebbe essere approfondito.

Per quanto riguarda poi il modello di accensione, si fa presente che sono state introdotte un certo numero di variabili numeriche per adattarlo alle diverse simulazioni, che qui si riportano in dettaglio:

- *ts_DELTA_THETA_SIGMA*: esprime la durata angolare di rilascio calcolata sulla base dei tempi di scarica riportati in [14]. Questi sono stati calcolati manualmente tenendo conto del regime di rotazione di ogni prova;
- ts_K_SIGMA: permette di regolare la frazione di Σ da rilasciare in modo da controllare la velocità di combustione e la stabilità di calcolo. Su questo punto permangono alcune perplessità, in quanto non è ben chiaro come CONVERGE gestisca i passivi e il modello ECFM: in linea di massima, si è osservato che i valori calcolati con il modello di accensione devono essere ridotti notevolmente, pertanto questo coefficiente assume valori normalmente minori di uno;
- *ts_ALPHAWR*: permette di modificare il valore del coefficiente di wrinkling. Le simulazioni condotte hanno mostrato un livello di turbolenza inferiore di quello riportato in [14], cosa che incide negativamente sul wrinkling: modificando tale parametro è stato possibile ottenere i valori corretti riportati in [10];

Si riportano i valori numerici impiegati nelle diverse prove:

parametro	1250 rpm	750 rpm	300 rpm
ts_K_{Σ}	0.25	0.28	0.3
$ts_\Delta\theta$	5 CAD	4 CAD	2 CAD
α_{Ξ}	3.5	2.6	2

Tabella B.1: Frazioni in massa di combustibile, ossigeno e azoto per diversi valori di λ .

Bibliografia

- Antonio Bertin, Mario Poli, e Antonio Vitale. Fondamenti di TERMODINA-MICA. Esculapio, 1998.
- [2] Enzo Campofredano. Apprendimento di strumenti CFD per simulazioni fluidodinamiche in ambito motoristico, 2016.
- [3] O Colin e A Benkenida. The 3-zones extended coherent flame model (ecfm3z) for computing premixed/diffusion combustion. Oil & Gas Science and Technology, 59(6):593-609, 2004.
- [4] O Colin, A Benkenida, e C Angelberger. 3d modeling of mixing, ignition and combustion phenomena in highly stratified gasoline engines. Oil & gas science and technology, 58(1):47–62, 2003.
- [5] Convergent Science. CONVERGE 2.3 MANUAL, 2016.
- [6] Convergent Science. CONVERGE 2.3 UDF MANUAL, 2016.
- [7] Convergent Science. CONVERGE STUDIO 2.3 MANUAL, 2016.
- [8] JM Duclos e O Colin. Arc and kernel tracking ignition model for 3d sparkignition engine calculations. In *Fifth Int. Symp. on Diagnostics, Modelling of Combustion in Internal Combustion Engines (COMODIA)*, pp. 343–350, 2001.
- [9] A.. Von Engel e Max Steenbeck. Elektrische gasentladungen: ihre Physik und Technik. J. Springer, 1934.
- [10] S Falfari e GM Bianchi. Development of an ignition model for si engines simulation. Relazione tecnica, SAE Technical Paper, 2007.
- [11] Giancarlo Ferrari. Motori a combustione interna. Società Editrice Esculapio, 2016.
- [12] Ralph Howard Fowler e L Nordheim. Electron emission in intense electric fields. In Proceedings of the Royal Society of London A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences, volume 119, pp. 173–181. The Royal Society, 1928.
- [13] R Herweg, Ph Begleris, A Zettlitz, e GFW Ziegler. Flow field effects on flame kernel formation in a spark-ignition engine. Relazione tecnica, SAE Technical Paper, 1988.
- [14] Ruediger Herweg e RR Maly. A fundamental model for flame kernel formation in si engines. Relazione tecnica, SAE Technical Paper, 1992.
- [15] John Heywood. Internal combustion engine fundamentals. McGraw-Hill Education, 1988.
- [16] John Kuffel e Peter Kuffel. *High voltage engineering fundamentals*. Newnes, 2000.
- [17] Leonard Benedict Loeb. Basic processes of gaseous electronics. Univ of California Press, 1955.
- [18] Rudolf Maly. Spark ignition: its physics and effect on the internal combustion engine. In *Fuel economy*, pp. 91–148. Springer, 1984.
- [19] Rudolf Maly e Manfred Vogel. Initiation and propagation of flame fronts in lean ch4-air mixtures by the three modes of the ignition spark. In Symposium (International) on Combustion, volume 17, pp. 821–831. Elsevier, 1979.
- [20] John M Meek e John Drummond Craggs. Electrical breakdown of gases. 1978.
- [21] C Meneveau e T Poinsot. Stretching and quenching of flamelets in premixed turbulent combustion. *Combustion and Flame*, 86(4):311–332, 1991.
- [22] MAKJ Metghalchi e JC Keck. Laminar burning velocity of propane-air mixtures at high temperature and pressure. *Combustion and flame*, 38:143–154, 1980.
- [23] Nick Pashley, Richard Stone, e Graham Roberts. Ignition system measurement techniques and correlations for breakdown and arc voltages and currents. Relazione tecnica, SAE Technical Paper, 2000.
- [24] Stefan Pischinger e John B Heywood. A model for flame kernel development in a spark-ignition engine. In Symposium (international) on Combustion, volume 23, pp. 1033–1040. Elsevier, 1991.
- [25] H Raether. Uber den aufbau von gasentladungen. i. Zeitschrift für Physik, 117(5-6):375–398, 1941.
- [26] Heinz Raether. Electron avalanches and breakdown in gases. 1964.
- [27] Yuri P Raizer e John E Allen. Gas discharge physics, volume 2. Springer Berlin, 1997.
- [28] S Refael e E Sher. A theoretical study of the ignition of a reactive medium by means of an electrical discharge. *Combustion and flame*, 59(1):17–30, 1985.
- [29] Owen Willans Richardson. The emission of electricity from hot bodies. Longmans, Green and Company, 1921.
- [30] M.H. Saba. Lii. ionization in the solar chromosphere. The London, Edinburgh, and Dublin Philosophical Magazine and Journal of Science, 40(235):472–488, 1920.
- [31] GA Schoder. Zeitsch. für angew. Physik, 13:296, 1961.
- [32] WO Schumann. Uber die elektrische festigkeit der luft. Archiv für Elektrotechnik, 11(1):1–20, 1922.
- [33] E Sher, J Ben-Ya'ish, e T Kravchik. On the birth of spark channels. Combustion and flame, 89(2):186–194, 1992.
- [34] H Sohst. Zeitsch. für angew. *Physik*, 14:620, 1962.

- [35] Jeonghoon Song e Myoungho Sunwoo. A modeling and experimental study of initial flame kernel development and propagation in si engines. Relazione tecnica, SAE Technical Paper, 2000.
- [36] TE Stern, BS Gossling, e RH Fowler. Further studies in the emission of electrons from cold metals. In *Proceedings of the Royal Society of London A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences*, volume 124, pp. 699–723. The Royal Society, 1929.
- [37] Sir JJ Thomson e GP Thomson. Conduction of electricity through gases. The Journal of Physical Chemistry, 38(7):987–987, 1934.
- [38] John Townsend. *Electricity in Gases*. Wexford College Press, 1915.
- [39] Hilde Willems e Roger Sierens. Modeling the initial growth of the plasma and flame kernel in si engines. TRANSACTIONS-AMERICAN SOCIETY OF MECHANICAL ENGINEERS JOURNAL OF ENGINEERING FOR GAS TURBINES AND POWER, 125(2):479–484, 2003.