



UNIVERSIDADE FEDERAL DE PERNAMBUCO

Centro de Ciências Exatas e da Natureza

Departamento de Química Fundamental

Programa de Pós-graduação em Química

Gerson Silva Paiva

“GERAÇÃO E MECANISMO DE FORMAÇÃO DE RELÂMPAGOS GLOBULARES”

Recife,

Fevereiro de 2009

Gerson Silva Paiva

**“GERAÇÃO E MECANISMO DE FORMAÇÃO DE RELÂMPAGOS
GLOBULARES”**

Tese de Doutorado apresentada ao Departamento de Química Fundamental do Centro de Ciências Exatas e da Natureza da Universidade Federal de Pernambuco, como parte dos requisitos para a obtenção do título de Doutor em Química.

Orientador: Prof. Dr. Antonio Carlos Pavão (UFPE)

Co-Orientador: Odim Mendes Júnior (INPE)

Recife,

Fevereiro de 2009

Paiva, Gerson Silva

"Geração e mecanismo de formação de relâmpagos globulares" / Gerson Silva Paiva. - Recife : O Autor, 2009.

82 folhas : il., fig. tab.

Tese (doutorado) - Universidade Federal de Pernambuco. CCEN. Química Fundamental, 2009.

Inclui bibliografia e anexos.

1.Raio. 2.Trovão. 3.Tempestades. I. Título.

551.563.2

CDD (22.ed.)

FQ2009-033

Tese submetida ao Corpo Docente do Programa de Pós-Graduação em Química do Departamento de Química Fundamental da Universidade Federal de Pernambuco como parte dos requisitos necessários para a obtenção do Grau de Doutor em Química.

Aprovada:

Prof. Antonio Carlos Pavão
(Orientador)
Departamento de Química Fundamental
Universidade Federal de Pernambuco

Prof. Ricardo de Carvalho Ferreira
Departamento de Química Fundamental
Universidade Federal de Pernambuco

Prof. Flamarion Borges Diniz
Departamento de Química Fundamental
Universidade Federal de Pernambuco

Prof. Odím Mendes Junior
Instituto Nacional de Pesquisas Espaciais - INPE

Prof. Elder Alpes de Vasconcelos
Centro Acadêmico do Agreste
Universidade Federal de Pernambuco

"Geração e Mecanismos de Formação de Relâmpagos Globulares".

por

Gerson Silva Paiva

Departamento de Química Fundamental
Centro de Ciências Exatas e da Natureza
Universidade Federal de Pernambuco
Recife-PE-Brasil
12 de março de 2009

AGRADECIMENTOS

Ao Professor Dr. Antonio Carlos Pavão, pela credibilidade, ensinamentos e incentivo.

Ao Professor Elder Alpes de Vasconcelos, do Centro Acadêmico do Agreste - UFPE, que me auxiliou muito nos trabalhos experimentais; ao Sr. Wellington Lucena, que de bom gosto colaborou, de sandálias, nos experimentos iniciais desta tese; ao Giovanni Barros, exímio conhecedor da eletrônica, também me auxiliou nos experimentos; ao Mestre Marcus Vinicius pelo apoio nos cálculos computacionais; ao Professor Odim Mendes Júnior, do INPE, pelas informações iniciais sobre raios; e aos Professores Eronides Felisberto da Silva Jr. e Lucio Acioli do DF-UFPE pelo suporte no trabalho experimental.

Ao alvirrubro, o Dr. Joacy Vicente Ferreira (Joás), que sempre prestativo e solidário e exemplo de garra e persistência nos momentos difíceis; ao Mestre Cristiano Bastos, exímio cantor e poeta da arte do cordel, um grande entusiasta da ciência teórica e amigo; ao Dr. Ribamar pelos conselhos, lições e ações de um verdadeiro propagador do evangelho; ao Wilson de Souza Mendonça, o maior árbitro do Brasil, pelo companheirismo; e aos demais colegas e amigos do Quanta-Química, Karina e Priscila; do grande trio da Central Analítica, Ricardo, Conceição (“Ceixa”) e Eliete; dos colegas da alegre e “barulhenta sala B da pós”, Nelho Galvão, Andresa, Renato Augusto, Sheila, Robson e Carlos André; ao Diógenes Júnior pelos debates de cosmologia, ao Wagner (Cearense), à Ana Rosa, ao Euzébio (do Sul), ao Alex Souza Moraes, ao Jorge Cardoso (*in memoriam*), ao Ronny e ao Marcos A. do Nascimento (Oficina de eletrônica).

Aos funcionários da Secretaria: Maurílio (o maior símbolo rubro-negro do DQF) e Dayse; e da Biblioteca Sérgio Mascarenhas: Joana e Ana, pela dedicação e presteza.

Ao Professor Ricardo Ferreira, pelo exemplo de sabedoria e nobreza; e ao Professor Sérgio Mascarenhas pelo exemplo de sabedoria, simplicidade e amor ao próximo.

À minha mãe (Maria Alves Barbosa da Silva) e aos meus irmãos: Gabriel Silva Paiva, Girlene Silva Paiva, George Silva Paiva e José Gustavo Silva Paiva pelo grande incentivo e apoio vigilantes.

À CAPES pelo financiamento do meu projeto de doutorado.

A Deus, acima de tudo, pelas linhas que se seguem.

RESUMO

Submetendo pedaços de silício dopado do tipo p, (111), (100), $350 \pm 50 \mu\text{m}$ em espessura, resistividade entre 0,02 e $1 \Omega\cdot\text{cm}$, a descargas elétricas de 23VAC e 100 A, obtivemos bolas luminosas com diâmetros entre 1 e 4 cm e tempo de vida variando entre 5 e 8 segundos, que apresentaram muitas características similares ao relâmpago globular (mover-se sobre uma longa e errática trilha, algumas vezes com variações de velocidade, subdividir-se em bolas menores, superfície vibrante, faíscas, aparência de tufo de algodão, rolar ao longo do solo, saltar de objetos sólidos, girar, queimar objetos sob contato, cor branco-alaranjado, forma esférica sem contornos definidos). No modelo proposto, as bolas luminosas apresentam um núcleo de silício metálico envolto por uma atmosfera de átomos de silício, onde a fonte de energia das bolas provém da entalpia de oxidação destes átomos. As bolas luminosas deixam uma trilha de um pó branco, identificado como SiO_2 por meio de espectroscopia de infravermelho. A energia emitida durante a formação deste pó foi estimada pelo uso da entalpia de formação (ΔH) do SiO_2 , na fase gás, através de cálculos *ab initio* utilizando a teoria coupled-cluster (CC) juntamente com o conjunto de funções de bases triplo-zeta, denotado por CCSD(T) ccpVTZ, resultando numa densidade de energia (DE) igual a $3,9 \text{ MJ m}^{-3}$ para as bolas luminosas. Este valor é comparado com a energia do corpo negro emitido pelas bolas luminosas e com a DE estimada por diversos autores a partir de danos causados pelo fenômeno natural.

Palavras-chave: Química Teórica; Química Computacional; Relâmpago.

ABSTRACT

We have submitted pieces of 2-inch diameter, p-type doped, (111) or (100), $350\mu\text{m} \pm 50\mu\text{m}$ thick, 0.02 to $1\Omega\cdot\text{cm}$ resistivity Si wafers to electrical discharges of 23VAC and 100 A, where Ball-Lightning-Like Luminous Balls were produced, with diameters between 1 and 4 cm and lifetimes ranging between 5 and 8 seconds, which showed many features of natural ball lightning (to move over an extended, erratic path, sometimes with varying speeds, to subdivide into smaller balls, vibrating surface, sparks, “fluff-cotton-wool” appearance, to roll, to bounce off ground or solid objects, to squeeze into confined spaces, to spin, to burn objects upon contact, bright orange white color, spherical in shape without well defined boundaries). In modeling the silicon luminous ball (SLB) as a metal core surrounded by an atmosphere of silicon atoms, we have considered one important source of energy: the silicon oxidation enthalpy. We have observed that in our experiments the SLB leaves a white powder trail of silicon dioxide (SiO_2) (identified through Fourier Transform Infrared system operating in transmission). The energy released for formation of this powder was calculated by using the SiO_2 heat of reaction (ΔH) in gas phase. The ΔH was calculated through *ab-initio* coupled-cluster (CC) method, including basis sets CCSD(T)/cc-pVTZ, resulting in the value of energy density (ED) equal to $3,9\text{ MJ m}^{-3}$. The mean value of ED obtained due to silicon oxidation was compared with the ED of blackbody radiation of SLB and to the estimated values from different natural ball lightning records.

Keywords: Theoretical Chemistry, Computational Chemistry;Lightning.

ÍNDICE GERAL

1.	Relâmpago globular	1
1.1.	Relatos	8
1.2.	Teorias para o relâmpago globular	14
1.2.1	Outras teorias	21
1.3.	Nossa proposta	24
1.3.1	Objetivo Geral	24
1.3.2	Objetivos Específicos	24
2.	Equipamentos materiais, e metodologia	25
2.1.	Equipamentos	25
2.2.	Materiais	26
2.3.	Montagem experimental (baixa tensão e alta corrente)	27
2.4.	Montagem experimental (alta tensão e baixa corrente)	28
2.5.	Detalhes computacionais	29
2.5.1	Método Coupled Cluster	30
2.5.1.1	Aproximações CCSD e CCSDT e funções de base do tipo cc-pVNZ	32
3.	Resultados e Discussões	34
3.1.	E as bolas apareceram	34
3.1.1	Microscopia para análise de composição dos resíduos deixados pelas bolas luminosas	41
3.1.2	Espectros	45
3.2.	Modelo e conteúdo de energia das bolas luminosas	46
3.2.1	Cálculo da energia do corpo negro	47
3.2.2	Cálculo da energia liberada pela combustão do silício	48
4.	Conclusões e Perspectivas	52
	Referências bibliográficas	54
	Anexos	61

"Bem fazer é melhor do que bem dizer"

Benjamin Franklin

CAPÍTULO 1

RELÂMPAGO GLOBULAR: OBSERVAÇÕES, TEORIAS E NOSSA PROPOSTA

1. Relâmpago Globular

O relâmpago globular é um fenômeno atmosférico aparentemente raro, constituído de um objeto luminoso que surge durante tempestades elétricas. Pode, embora muito raramente, também acontecer na ausência destas. Tal fenômeno pode assumir diferentes formas: esféricas, nebulosas, difusas, múltiplas esferas (Fig. 1) (RAYLE 1966; AMIROV, BYCHKOV & STRIZHEV, 1995). As cores variam do vermelho ao violeta, sendo as cores mais comuns o branco alaranjado e o vermelho. O tamanho pode variar desde um centímetro até dezenas de metros (Fig.2). Sua duração também varia de alguns poucos segundos até 4 minutos (MCNALLY, 1966).



Figura. 1 Fenômeno luminoso de glóbulos múltiplos. FONTE: LEWIS (1963).

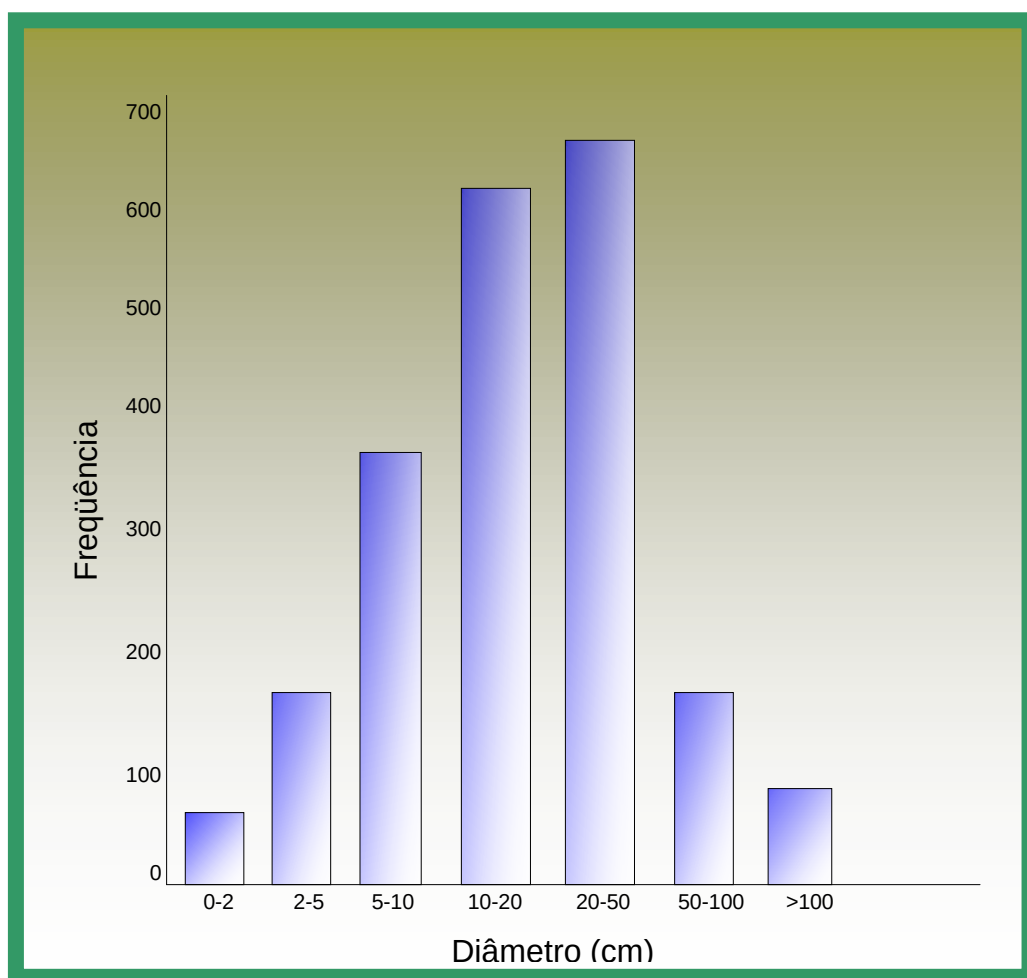


Figura 2. Distribuição de frequência em função do diâmetro do relâmpago globular em 1869 registros.
FONTE: STEINHOFF (2002).

O relâmpago globular pode aparecer em grandes altitudes (POPOV, 1959; WOJKOWSKY, 1966), caindo da nuvem (Fig. 3), ou flutuar a alguns metros do solo (Fig 4).



Figura 3. Relâmpago globular caindo de uma nuvem de tempestade. FONTE: http://www.ernmphotography.com/Pages/Ball_Lightning/BL_Gallery1.html.



Figura 4. Essa fotografia mostra um relâmpago globular, em Nagano, Japão. O tempo estava nublado e com chuva intermitente. FONTE: <http://www.transcomunicacao.net/aeroanomalia/notas.htm>.

Pode também saltar ou rolar ao longo do de objetos sólidos ou solo e inclusive aparecer sobre fios elétricos (RAYLE, 1966)(Fig.5).

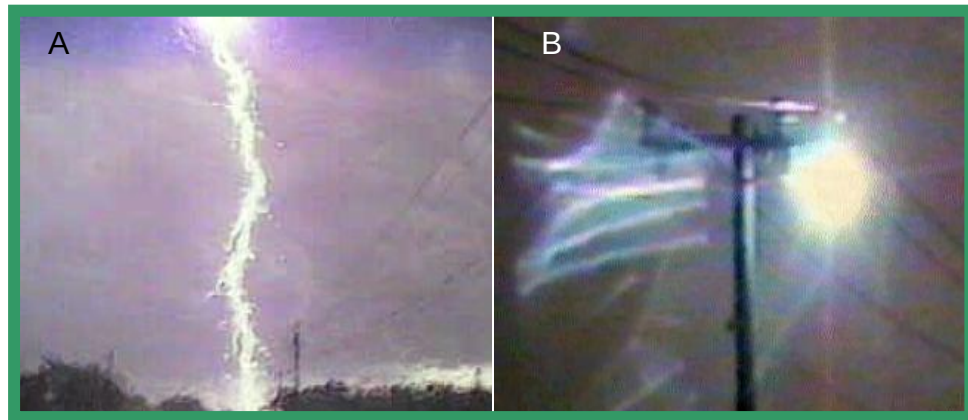


Figura 5. Fotografias tiradas no momento de uma grande tempestade sobre Broward County, Florida, em junho de 1996. (A) instante em que um raio atinge os fios da rede elétrica; (B) uma esfera de luz se forma no ponto atingido pelo raio. Possivelmente, tratou-se de um forte arco elétrico sustentado acima dos fios de alta tensão. A “bola luminosa” perdurou por cerca de 3 minutos. FONTE: www.sky-chaser.com/schlight.htm.

As bolas luminosas podem desaparecer silenciosamente (e subitamente) ou ter um final explosivo (RAYLE, 1966). Neste último caso, um odor lembrando ozônio ou enxofre é deixado. Elas podem passar por espaços muito menores que o seu diâmetro ou perfurar vidros. Pode até aparecer no interior de aviões (Fig. 6).



Figura 6. Relâmpago globular no interior de um avião. Fonte: National Geographic Channel.

Por estas e por outras razões, o relâmpago globular constitui um fenômeno que vem intrigando os cientistas há séculos. Sabe-se que potenciais atmosféricos são responsáveis por vários fenômenos luminosos, por exemplo, esferas brilhantes conhecidas como fogos de St. Elmo (MASON, 1964). Embora tradicionalmente vistos em mastros de navios, estes são também observados em árvores, pedras, e ainda em seres humanos e topos de montanhas. O fogo de St. Elmo é geralmente atribuído à descarga em corona causada por um potencial na ponta de um objeto pontiagudo tal como uma estaca no solo ou a ponta da asa de um avião (Fig. 7).

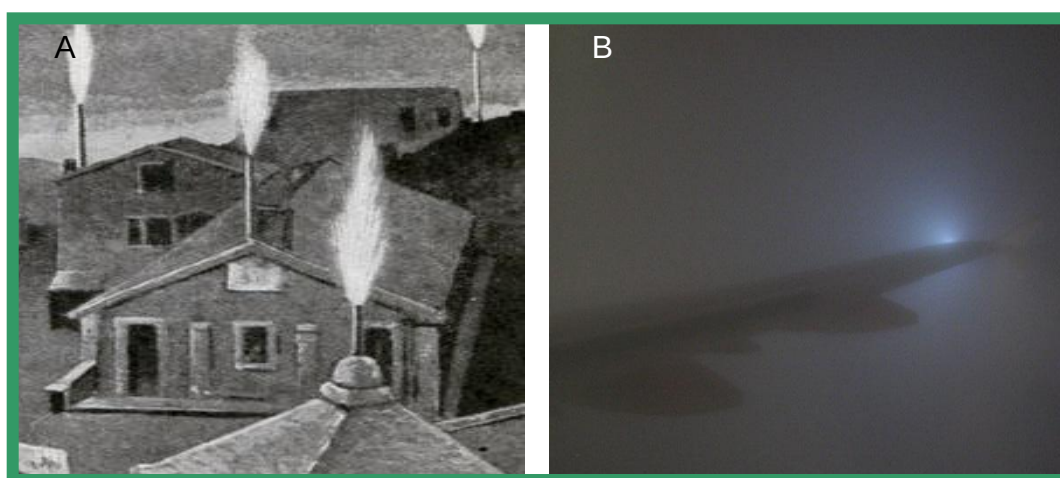


Figura 7. (A): Representação artística do fogo de St. Elmo, comum em dias de tempestades. Os objetos pontiagudos, aterrados ao solo, descarregam a eletricidade estática para a atmosfera. **(B):** Regiões pontiagudas da asa de aviões também geram este tipo de descarga, nas vizinhanças de uma tempestade. FONTE: <http://www.meteoros.de/light/elmse.htm>.

As propriedades desta descarga correspondem à posição estável do fogo de St. Elmo. O relâmpago globular, ao contrário, pode mover-se sobre uma extensa trilha, de acordo com muitos registros (GRIGOIYEV, 1978).

Muitos são os relatos, cada qual com diferentes descrições. As figuras 8 e 9 são representações de relatos feitos no século XIX. A figura 10 é uma versão moderna da figura 8, modificada com o personagem de quadrinhos Tintin.



Figura 8. Descrição de uma relâmpago globular descendo de uma chaminé (por G. Hartwig). FONTE: <http://skepdic.com/balllightning.html>



Figura 9. Tsar Nicholas II – o último imperador da Rússia surpreendido por um relâmpago globular (no século XIX). FONTE: <http://skepdic.com/balllightning.html>



Figura 10. O relâmpago globular tornou-se popular até em gibis (álbum de Tintim): "As sete bolas de cristal". FONTE: <http://www.tintin.com/#home/une.swf&lang=fr/>

A primeira morte causada pelo relâmpago globular registrado na literatura científica foi a de G. W. Richmann (Fig. 11), um físico russo (DIBNER, 1977). O incidente ocorreu em 1753, durante uma tempestade elétrica, quando Richman foi tentar medir a energia de um raio. Quando ele se aproximou de seu equipamento, uma esfera luminosa azulada, do tamanho de um punho, emergiu da haste de ferro e se deslocou rapidamente em direção à sua testa, matando-o instantaneamente.



Figura 11. O primeiro acidente causado por um relâmpago globular, registrado na literatura. No dia 26 de julho de 1753 um relâmpago globular entra num laboratório e mata um dos mais eminentes físicos do século XIX: G. W. Richmann. FONTE: http://www.russiaic.com/education_science/science/science_overview/599/

Momentos depois ela explodiu violentamente, deixando o seu assistente ferido. A porta do laboratório foi arrancada com a explosão. Os sapatos de Richmann derreteram-se e uma mancha vermelha foi deixada pela bola em sua testa.

A seguir descrevem-se alguns relatos de relâmpagos globulares ocorridos em diferentes países e épocas, sendo dois deles acontecidos no Brasil.

1.1 Relatos

São inúmeros os relatos sobre o relâmpago globular. A seguir são mostrados os relatos mais significativos para o presente trabalho, incluindo aqueles recebidos por nós logo após a publicação de nossos primeiros resultados.

RELATO 1.

Um grupo de 25 de turistas, liderados por Stakhanov, caminhava através de uma floresta perto de Moscou, durante uma trovoadas. Repentinamente, logo após um forte raio, surge uma bola luminosa branca sobre os arbustos e que descia lentamente para a Terra (Fig. 12). Ela mudou de cor lentamente, tornando-se amarela e em seguida, vermelha.

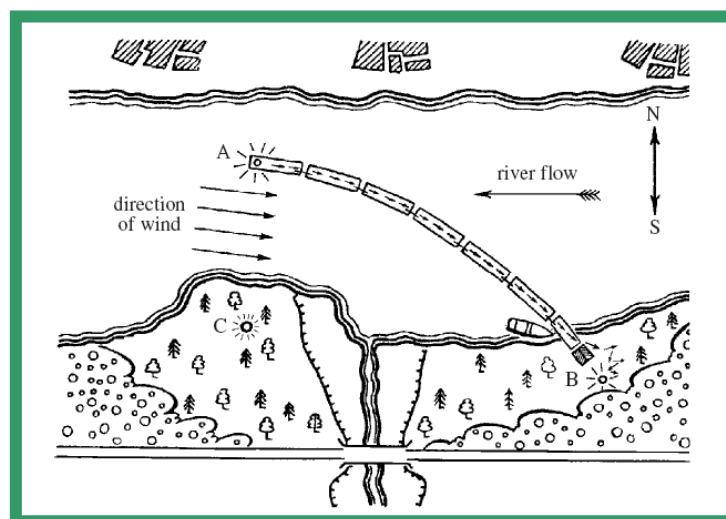


Figura 12. Relâmpago globular sobre o Rio Onega. A, primeira bola observada; B, região onde a bola desapareceu; C, ponto de queda do raio . FONTE: DMITRIEV, 1967.

Ao atingir o solo, ela gradualmente saltou sobre o mesmo, perdendo pedaços que emitiam faíscas. A esfera mudou a sua cor de vermelho vivo para vermelho escuro, após o qual uma mancha negra apareceu em seu centro. Até que finalmente a bola desapareceu. Stakhanov concluiu que a bola tinha sido visível por 100 a 200 segundos.

(FONTE: DMITRIEV, 1967)

RELATO 2.

Durante uma tempestade, acompanhada de chuva e rajadas de vento forte, eu estava sentado em uma janela e olhando para o estaleiro. Repentinamente eu vi uma bola luminosa em movimento, um emaranhado de fogo, na horta. Ela tinha uma forma um pouco esférica, mas o seu contorno não era definido. Esta bola foi rolando ao longo do solo como uma roda. O seu diâmetro foi de cerca de 500 mm. O seu denso núcleo tinha uma dimensão muito menor. O grande tamanho deste objeto foi causado por um halo de luminescência e uma espiral de fogo que rodeou o núcleo. A cor das faíscas da bola foi de um vermelho-amarelo. A bola se deslocou para a horta, em direção à casa do estaleiro e, em seguida, através dos portões abertos e desapareceu. Imediatamente depois, ouvi uma forte explosão. A duração da observação foi 2-3 s.

(G. V. Donskihk, em carta pessoal, verão de 1978, Junho - Julho, Russia. FONTE: ABRAHAMSON et al.(2002)).

RELATO 3.

“El fenómeno sucedió 1985 cuando vivía en un pequeño pueblo en Nicaragua (actualmente vivo en Paraguay). Era una tarde nublada, con amenaza de tormenta pero con viento en calma. A unos 50 metros de donde yo me encontraba había un árbol de mango entre cuyas ramas pasaban algunos cables eléctricos. Pues bien, de entre las ramas del árbol fue descendiendo más bien lentamente (es decir, no como lo haría un fragmento sólido, sino como lo haría por ejemplo un globo cargado de aire) una esfera de luz azul, tal vez algo menor que una pelota de ping-pong. A medida que descendía se

podía escuchar un sonido vibratorio como un murmullo (como el que puede escucharse cerca de una torre de alta tensión) y al tocar el suelo se devaneció de súbito produciendo el chasquido de un chispazo eléctrico’ .

(Bolívar R. Garcete-Barrett. Museo Nacional de Historia Natural del Paraguay, Sucursal 1 Campus U.N.A., 2169 CDP, Central XI, San Lorenzo PARAGUAY, enviado por email ao Prof. Pavão emm março/2007).

RELATO 4.

Era 1 hora da manhã, numa noite de céu nublado, no inverno de 1999, quando Marcílio de Souza Oliveira, Nestor Valença e Nilsinho estavam observando o céu daquela região, quando foram surpreendidos por uma bola azulada, brilhante (ver Fig.13), que desceu o morro em direção a eles e cujo tamanho era um pouco menor que o de uma laranja, que flutuava lentamente por entre as árvores.



Figura 13. Alto Jardim Petrópolis – UR-7, Várzea. Representação artística do suposto relâmpago globular visto por Marcílio Oliveira, Nestor Valença e Nilsinho.

Naquele período, não estava chovendo nem trovejando. A bola durou uns 10 segundos, desaparecendo subitamente e silenciosamente.

(Comunicação pessoal de Márcilio de Souza Oliveira, Recife-PE, Brasil)

RELATO 5.

Esses fatos ocorreram na sexta-feira, 23/03/2007 entre as 16:30 e 17:00 h. A formação de tempestade iniciou por volta das 16h30min. Após alguns minutos começou a chover granizo e a cair muitos raios. Quando eu filmava o lado leste, meus pelos se arrepiaram, ouvi um estampido e vi surgir do nada no céu uma bola de cor laranja avermelhado (Fig. 14) com uma pequena cauda e do tamanho de uma bola de basquete descendo em direção a minha casa e caindo provavelmente na rede elétrica (para raios do poste) próximo a minha casa, num tempo de no máximo 3 segundos entre o surgimento e a explosão, quando então ouvi um estrondo, então me lancei ao chão para tentar me proteger.

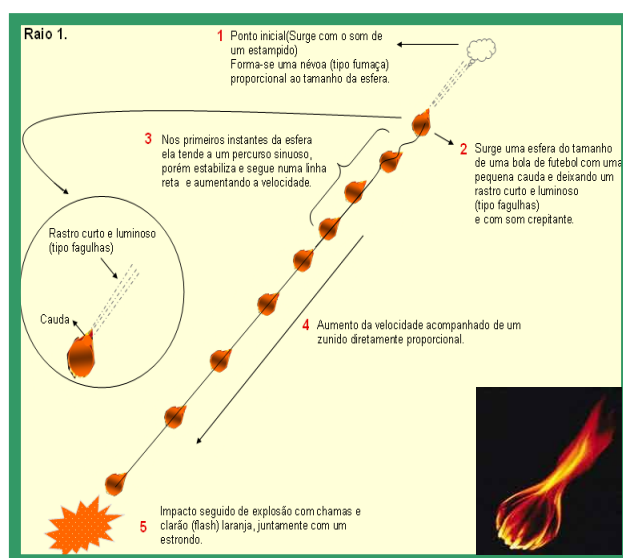


Figura 14. Primeira bola luminosa formada durante a tempestade.

Após uns 20 segundos fiquei agachado e comecei a enquadrar a câmera na mesma direção quando vi novamente outra bola surgir (Fig. 15), com as mesmas características da primeira e vindo em minha direção. Quando ela se aproximava, notei que começou a se tornar duas (sem se desprender) e desacelerou, explodindo 2 metros a minha frente e a 4,5 metros do solo (sobre a parte baixa da minha casa). O local onde eu estava (terraço da minha casa, Fig. 16) tem 6 metros de altura, o que me dá visão acima do telhado onde ocorreu a segunda explosão.

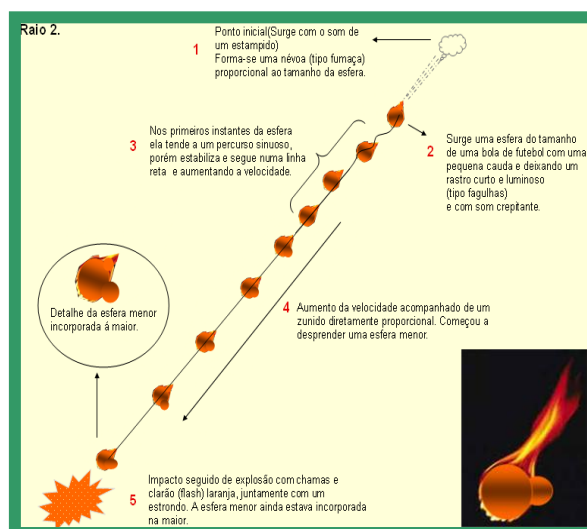


Figura 15. Segunda bola luminosa formada durante a tempestade.

No momento das explosões ocorreu um efeito tipo flash e tudo ao redor ficou cor de laranja. Minha esposa estava dentro de casa (parte baixa) e notou que segundos antes do segundo evento as lâmpadas compactas da casa (estavam apagadas) começaram a estalar e piscar levemente, como se tentassem acender sozinhas.

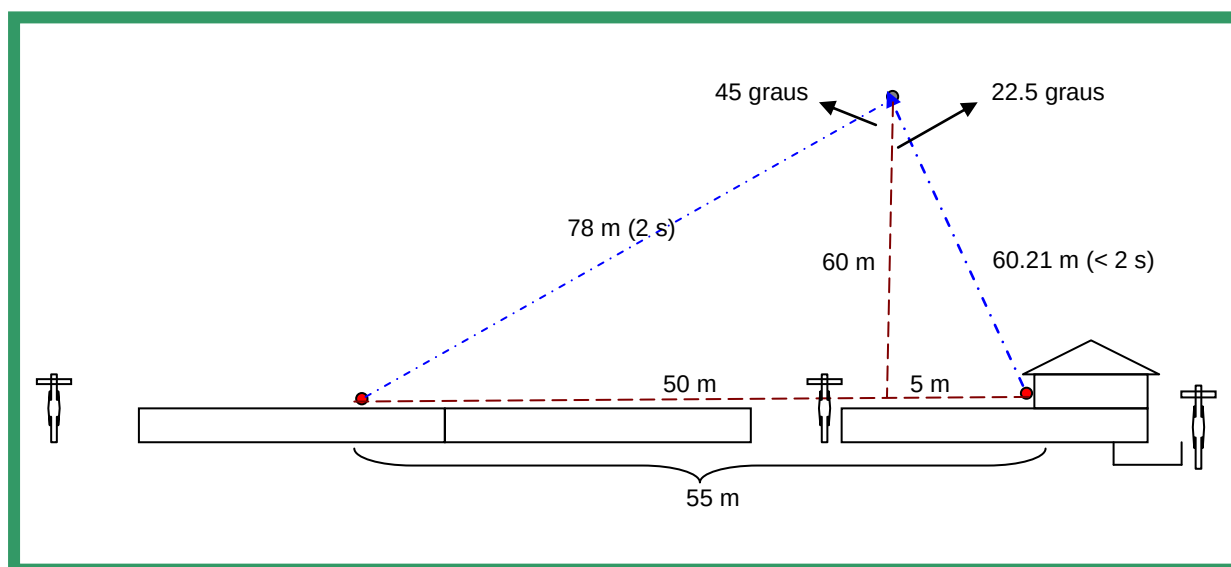


Figura 16. Local de queda das duas bolas luminosas formadas durante a tempestade próxima à residência do observador.

No outro dia fiz uma inspeção no local atingido pelas chamas da explosão e não encontrei nenhuma seqüela nem vestígios de nada. Nesse local ficam vários vasos com pés de cebolinha, coentro, tomatinho, limão, goiaba, pimentão que nada sofreram, inclusive o caule e galhos do tomateiro são revestidos de cílios, e eles estavam perfeitos, ou seja, é um fogo que não consome.

O interessante é que as labaredas da explosão a olho nu eram laranja como o fogo normal, porém pela câmera elas são azuis, e as duas bolas estavam no campo visual da câmera, porém não conseguimos vê-las na filmagem. Acredito que se não houvesse os balaustres a frente da explosão veríamos apenas um flash branco, como no primeiro evento. O portão automático de casa queimou, bem como o telefone sem fio de um vizinho e todos eletrodomésticos de um vizinho mais abaixo (A fiação de toda a casa dele torrou).

Vale lembrar que a mais ou menos um ano e meio houve uma tempestade semelhante, estávamos no quarto de casa (eu, minha esposa e as crianças) quando a lâmpada compacta que estava apagada começou a estalar (como que querendo ligar sozinha) e emitindo uma luz pouco intensa a cada estalo. De repente, saindo da parede veio lentamente uma bola laranja avermelhada (do tamanho de uma laranja) pelo fio da antena da TV do quarto (digo lentamente porque o trecho do fio é de 2,5 metros e o percurso foi feito em um ou dois segundos) e houve um estampido e um flash vermelho escuro. Verificando posteriormente a TV não sofreu nenhum dano.

(Carlos E. L. Cabral, São José dos Campos, 27/03/2007, comunicação por e-mail e correio)

1.2 Teorias para o relâmpago globular

Tempestades na natureza exibem uma marcante atividade elétrica, sendo os raios as mais comumente observadas. O problema do relâmpago globular tem recebido muita atenção, incluindo numerosas investigações experimentais (SINGER, 1963; SILBERG, 1962; GOLKA, 1994; BARRY, 1968; OHTSUKI & OFURUTON, 1991). Os experimentos têm falhado em replicar as propriedades do fenômeno natural e pode apenas ser dito que teorias promissoras têm sido propostas (algumas delas serão mostradas a seguir). David Turner (TURNER, 2002) tem sugerido que o relâmpago globular é um plasma envolto de umidade, íons hidrônio (H_3O^+) e aerossóis de ácido sulfúrico (H_2SO_4), cuja simetria da bola é regulada pela pressão atmosférica (Fig. 17).

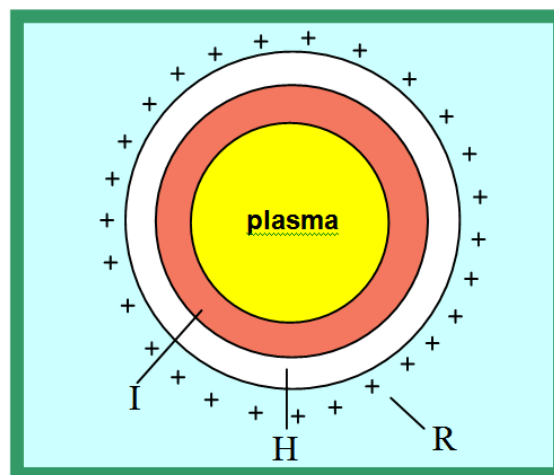


Figura 17. Estrutura idealizada de um relâmpago globular esférico. Imediatamente fora do plasma central está uma região intermediária, I, circundada por uma região de hidratação, H, e a região de refrigeração, R, onde o equilíbrio de forças dá estabilidade à estrutura. FONTE: TURNER, 2002.

Em seu modelo, chamado de modelo eletroquímico do relâmpago globular, inspirado em estudos da hidratação de íons em fase gasosa (KEBARLE et al. 1967; DZIDIC & KEBARLE 1970) o primeiro requisito para se gerar o plasma central que compõe o relâmpago globular é fazer descarga corona. O segundo passo para formar as regiões R, H e I em torno deste plasma é ainda obscuro.

Segundo Turner, a eletroquímica envolvendo substâncias na fase gasosa ainda é uma disciplina desconhecida. Para se obter o relâmpago globular será preciso dominar completamente a mesma. Isto justifica o insucesso de seus experimentos para obter-se o relâmpago globular. Inúmeras tentativas de se variar a concentração de íons (e umidade) positivos e negativos envolta de plasmas (Fogo de St. Elmo), até agora, não rendeu resultado.

Por outro lado, V. Bychkov (BYCHKOV, 2002) sugeriu que o relâmpago globular é um compósito polimérico (Fig. 18), isto é, um polímero associado a clusters de ácido monossilícico (H_4SiO_4) de dimensões menores que 5nm.

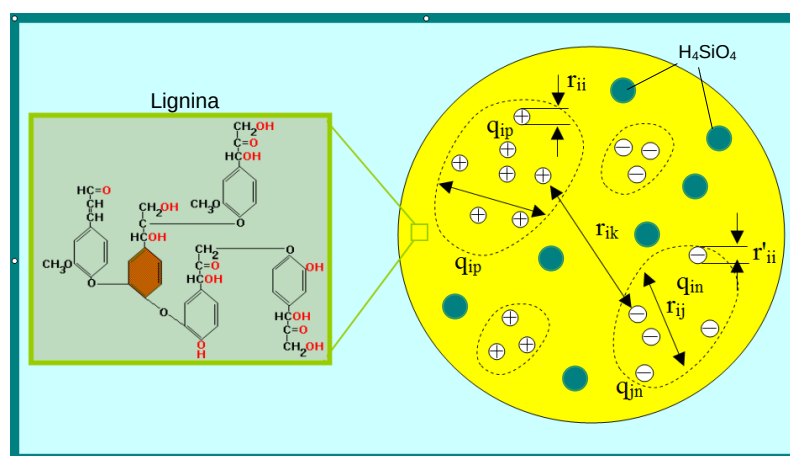


Figura 18. Modelo teórico de um relâmpago globular de compósito à base de lignina. As distâncias entre regiões carregadas positivamente e negativamente, r_{ik} , são maiores do que os tamanhos destas regiões r_{ij} . FONTE: BYCHKOV, 2002 (adaptado).

Neste modelo, quando um raio atinge uma árvore, a lignina (um polímero de açúcar e que dá sustentação à mesma) do interior do tronco passa para o estado líquido devido ao calor da corrente conduzida pela água da madeira, sendo a lignina ejetada para fora do tronco da árvore (Fig. 19) juntamente com nanopartículas de ácido monossilícico, formando um compósito de lignina aquecido (200-300°C).

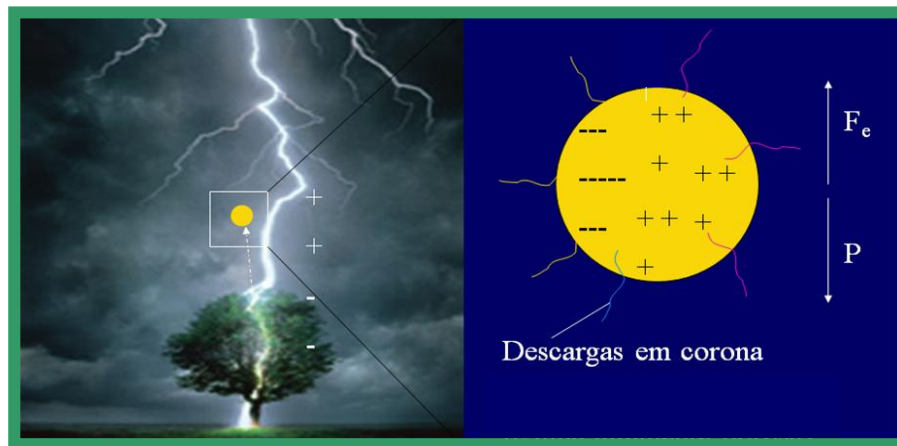


Figura 19. Raio atingindo uma árvore e formando um relâmpago globular.

Adaptado de: <http://kitsunenoir.com/blog/2007/08/16/lightning-strike/>

Tal compósito deve absorver as cargas residuais do raio como o faz um capacitor, emitindo luz ao descarregar-se por efeito corona. Neste modelo, a flutuação das bolas se explica pelo equilíbrio de forças elétrica e gravitacional. BYCHKOV (2002) tem obtido êxito experimental com base no seu modelo teórico. Num de seus experimentos (Fig. 20), usando a idéia de que a polimerização de macromoléculas é muito mais rápida com partículas maiores como centros de polimerização, colocou partículas de algodão hidrófilo ou carvão vegetal (cerca de 10 unidades, cada uma possuindo cerca de 0,1 mm em diâmetro) dentro de um tubo de 2 mm de largura, feito acrílico (PMMA).

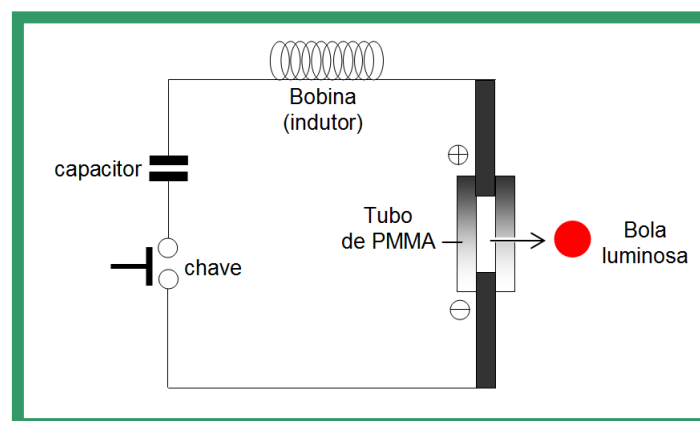


Figura 20. Arranjo experimental feito por Bychkov para produzir bolas luminosas. As bolas luminosas saem por uma fenda previamente existente no meio to tubo.

Nestes experimentos, descargas elétricas de alta tensão (2KV) com uma energia de 1-3kJ geraram várias bolas luminosas (Fig. 21)(EMELIN et al, 1997).

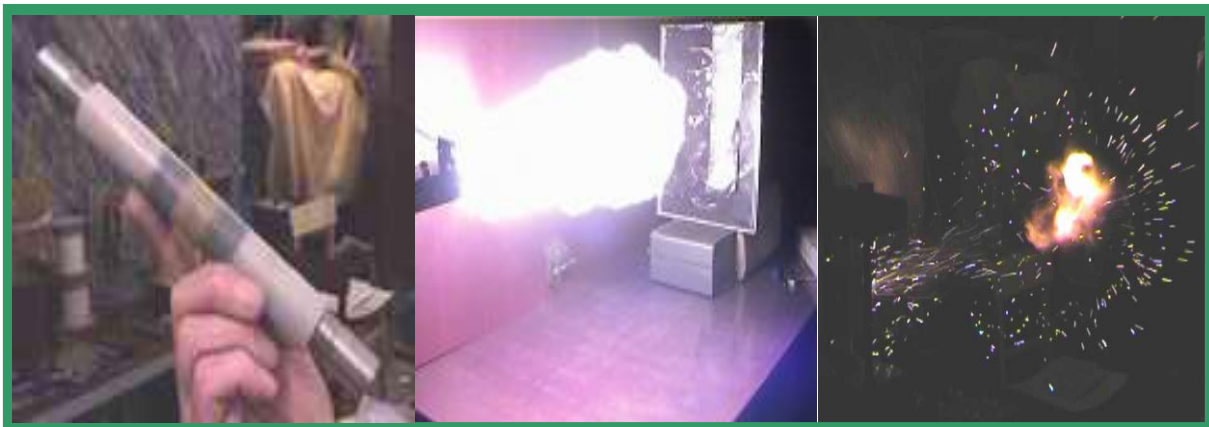


Figura 21. Experimentos envolvendo a formação de bolas luminosas com descargas em polímeros.

FONTE: <http://www.stealthtank.narod.ru/>

Estas voaram cerca de 1 metro de altura e caíram lentamente, como flocos de neve. Elas emitiram luz vermelha. O diâmetro das bolas estavam entre 5 e 6 mm e duraram 5 a 6 s antes de se extinguírem. Nenhuma fumaça foi produzida. Análises de microscopia eletrônica revelaram que os resíduos deixados pelas bolas luminosas eram PMMA altamente poroso e cheios de filamentos (Fig. 22).



Figura 22. Microscopia de varredura de elétrons (SEM) do resíduo deixado por uma das bolas luminosas.

FONTE: BYCHKOV, 2002.

A luz das bolas não se deveu à combustão do polímero, pois os resíduos estavam intactos. Deveu-se à descarga corona das cargas acumuladas pelas bolas. Em alguns casos, bolas luminosas amarelas de diâmetro menor que 1 cm foram formadas,

inicialmente voando horizontalmente em uma velocidade de uns poucos metros por segundo ou menos. Depois de percorrerem cerca de 2m, uma destas bolas de 6 a 7 mm em diâmetro atingiu uma parede de madeira e explodiu, deixando vestígios de fuligem.

No modelo de Meshcheryakov (2007), o relâmpago globular constitui-se de uma nuvem de nanopartículas de aerossol carregadas. Cada nanopartícula é uma nanobateria, cujo núcleo (carregado negativamente) é um agente redutor (carbono, por exemplo) e a sua região mais externa é carbonato de um metal fundido (por exemplo, K_2CO_3). A estabilidade da bola luminosa é formada pela atração magnética entre as nanopartículas (na verdade, “nanobaterias”), quando elas se descarregam. Tal atração é proveniente das descargas elétricas que curto-circuitam as nanobaterias de aerossol. Neste modelo, a luz do relâmpago globular também é produzida por este mecanismo de descarga. Forças Coulombianas de repulsão entre as descargas tendem a contrabalancear as forças magnéticas entre as partículas individuais adjacentes (ver Fig. 23).

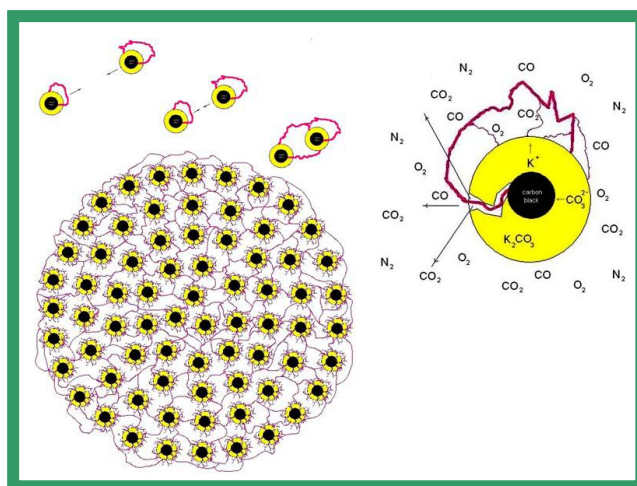


Figura 23. Raio globular, segundo o modelo de nanobaterias. FONTE: MESHCHERYAKOV, 2007.

Em 2001, Abrahamson e Dinniss (ABRAHAMSON & DINNISS, 2001) criaram uma teoria envolvendo a formação de aerogel de nanopartículas de silício e outros metais (Fig.24). Segundo eles, o raio aquece a sílica do solo, que seria rapidamente reduzida pelo carbono (comum em solos das proximidades de árvores), formando silício vaporizado no interior de estruturas chamadas fulguritos (Fig.25). O silício rapidamente se condensaria em filamentos de nanopartículas que seriam ejetadas para cima do solo. Posteriormente o silício reagiria com o oxigênio do ar e emitiria luz e calor.

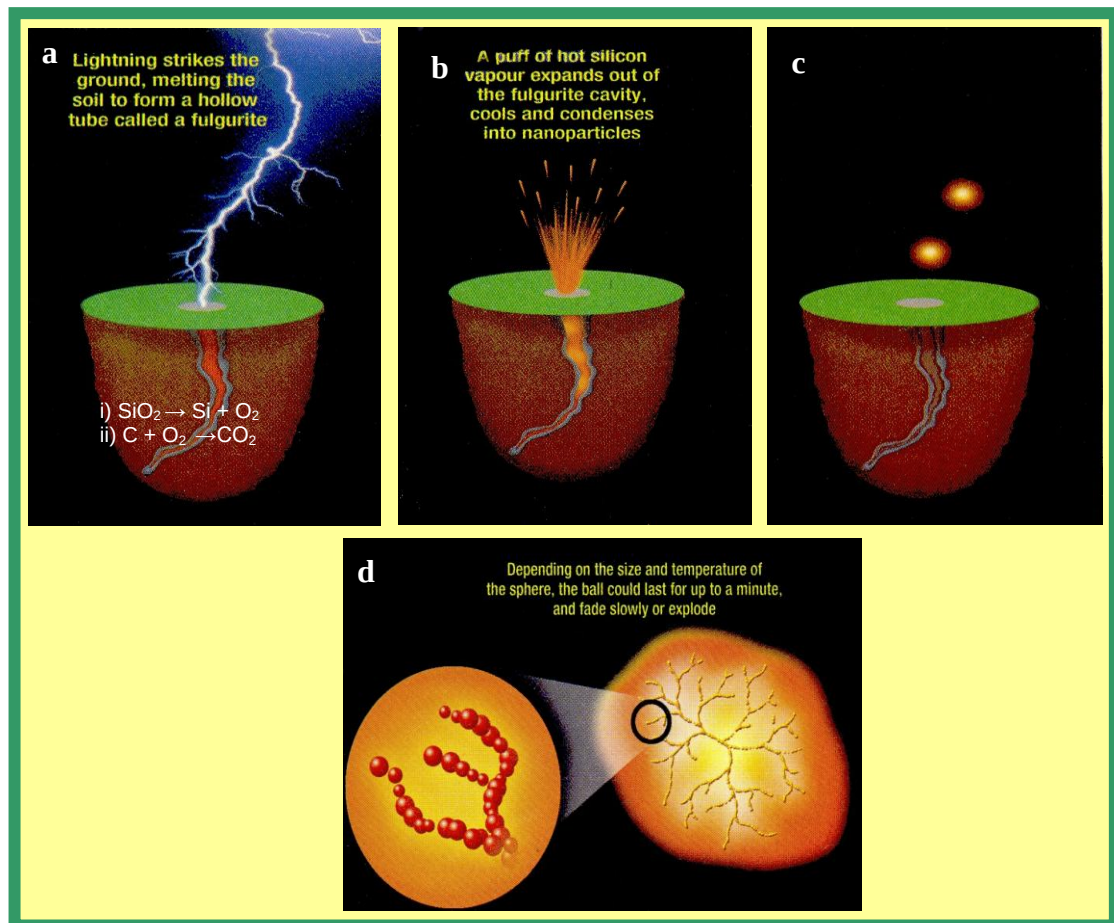


Figura 24. Teoria do aerogel para explicar a formação do relâmpago globular. Primeiramente, **a**, um raio atinge o solo, formando um canal chamado de fulgurito. Em seguida, **b**, a sílica é reduzida pelo carbono, liberando o silício para fora da cavidade. Este silício se resfria na atmosfera, formando nanopartículas, **c**, que se unem entre si formando uma bola de aerogel. Esta bola brilha devido à oxidação do silício. FONTE: ABRAHAMSON 2002.



Figura 25. Fulguritos. O nome Fulgurito vem do Latim “Fulgur” e significa “Brilhante”. São estruturas formadas por fusão instantânea de minerais silicáticos por ação de descarga de raios. FONTE: <http://paltry-sage.blogspot.com/2007/11/fulgurite.html>.

Abrahamson também extrapola a sua teoria para diferentes metais, como o alumínio, o cobre, etc. Para testar a sua teoria, Abrahamson e Dinniss submeteram amostras de solo ricas em carbono e sílica a intensos pulsos de descargas elétricas, da ordem de 20KV (Fig. 26). Mas nenhuma bola luminosa foi formada, apenas fragmentos microscópicos de nanopartículas (Fig. 27).

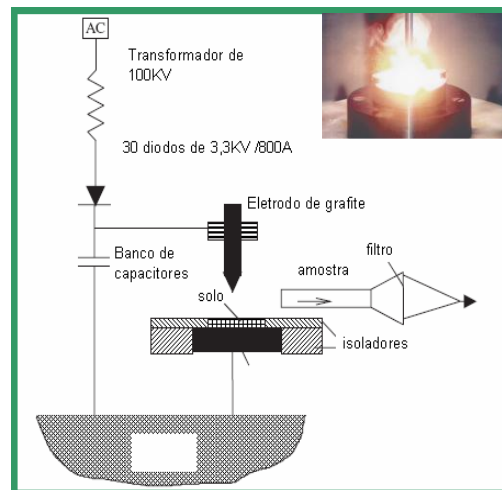


Figura 26. Arranjo experimental elaborado por Abrahamson-Dinniss para reproduzir o relâmpago globular. FONTE: ABRAHAMSON, 2002.



Figura 27. Nanoestrutura de agregados de sílica obtida nos experimentos, vista por meio da Microscopia eletrônica de Transmissão (TEM). FONTE: ABRAHAMSON, 2002.

Há teorias inspiradas no modelo de Kapitza (1955) sobre o relâmpago globular. Este modelo especula que o relâmpago globular é formado pela interferência construtiva de radiação eletromagnética na faixa do microondas. V. Dikhtyar e E. Jerby (2006) têm

criado bolas luminosas artificiais (Fig.28) usando microondas (2,45 GHz, 0,6 kW) focalizados em diferentes materiais (Si, SiO₂, Al, Ge).

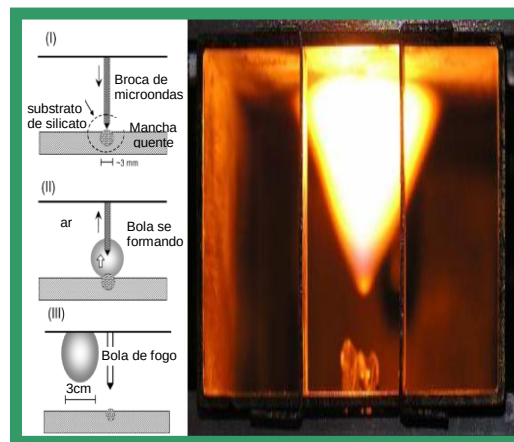


Figura 28. Bola luminosa obtida pela focalização de microondas em amostra de silicato. FONTE:

DIKHTYAR & JERBY (2006).

Entretanto, as bolas luminosas geradas por este processo só duram 40 milésimos de segundo após a fonte de microondas ser desligada. O relâmpago globular, na natureza, perdura por vários segundos (ou minutos) após o raio que o originou desaparecer.

1.2.1 Outras teorias

Outros modelos bem mais ousados sobre a natureza do relâmpago globular foram também publicados. Um deles especula que o relâmpago globular constitui-se de miniburacos negros (RABINOWITZ, 2004) (Fig 29).

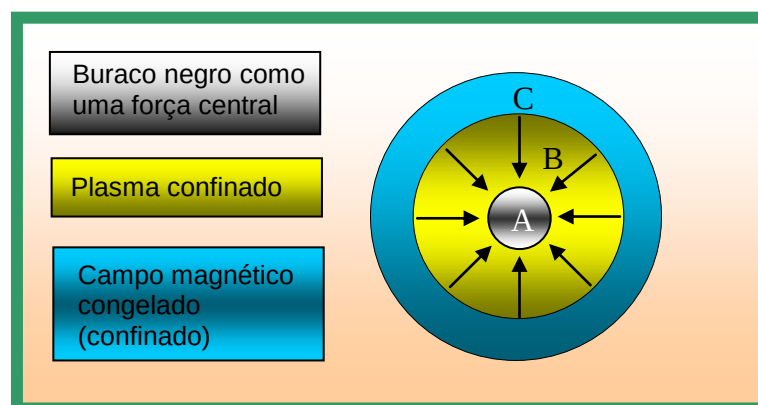


Figura 29. Estrutura de um relâmpago globular segundo o modelo de Rabinowitz. FONTE: RABINOWITZ, 2004.

Segundo o modelo de Rabinowitz (2004), o relâmpago globular é formado quando um “miniburaco negro” (ou algo simulando ele) entra na atmosfera. O gás é localmente confinado e aquecido, transformando-se num brilhante plasma. As linhas de força magnéticas, normalmente congeladas no gás atmosférico, são drasticamente amplificadas durante o colapso do plasma pelo núcleo.

Ashby e Whitehead (1971) publicaram um modelo para a formação do relâmpago globular baseado na sugestão de que micrometeoritos de antimatéria poderiam ser deslocados em direção ao solo pelo campo elétrico de uma nuvem de tempestade. A aniquilação da antimatéria proveria a energia para a formação do relâmpago globular. Ashby Whitehead (1971) e observações experimentais realizadas ao longo de um período de 12 meses indicam quatro possíveis eventos desta natureza. Crawford (1971) sugeriu que estes eventos poderiam ser explicados por chuveiros de raios cósmicos correspondentes a energia primária de aproximadamente 10^{16} eV. Uma partícula microscópica de um raio de 5 μm e uma massa de 500 pg (picogramas) deve fornecer 0,5 MJ de energia, incluindo raios gama de 511 keV devido à aniquilação de elétrons e pósitrons. Foram registrados quatro eventos de interesse, um deles relacionado com uma forte tempestade.

Recentemente, Gerd Fussmann (2008), do Instituto Max Planck, conseguiu gerar bolas luminosas de cerca de 20 cm de diâmetro e cuja duração foi de aproximadamente 0,5 s (Fig.30).

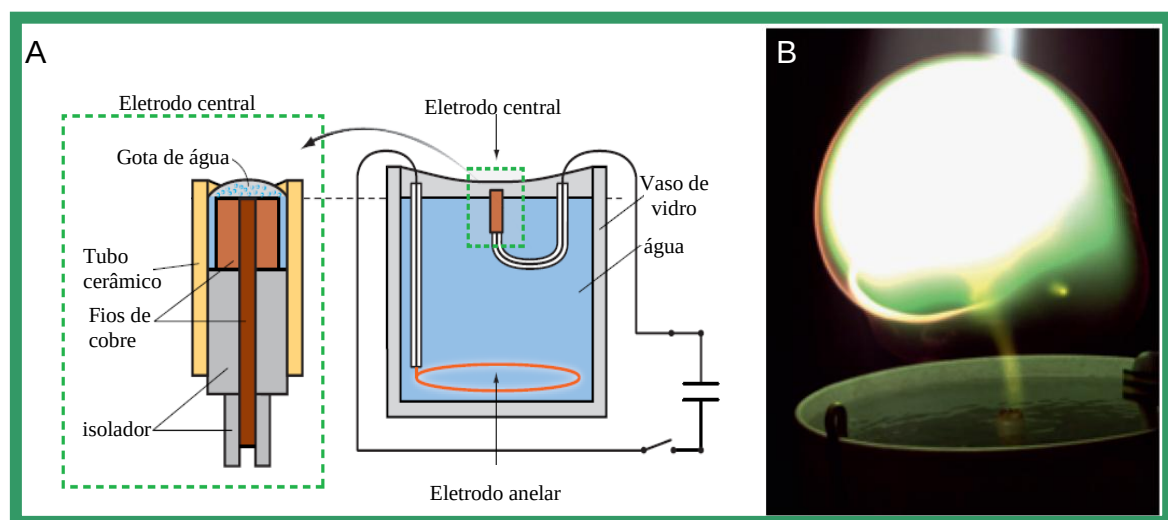


Figura 30. Aparato criado por Fussmann e colaboradores (A) para simular as bolas luminosas (B).
FONTE: FUSSMAN, 2008.

O método de produção de suas bolas luminosas consistiu em colocar dois eletrodos metálicos submersos num jarro contendo água. A tensão entre os eletrodos era de 5000 volts e a corrente de 60 Amperes. (Um dos eletrodos foi isolado totalmente da água por um tubo de argila). Quando os eletrodos são aproximados dentro da água, uma centelha salta entre eles. Tal descarga gera uma bola luminosa, de cerca de 20 cm em diâmetro (de cor esverdeada) que emana da água muito rapidamente. A emissão de luz verde, segundo eles, deve-se à recombinação de íons de água dentro da bola.

Há cientistas que não acreditam na existência do relâmpago globular. Eles argumentam, por exemplo, que o relâmpago globular não passa de um efeito de retina causado quando um forte clarão (relâmpago) é visto por uma pessoa (ARGYLE, 1971)(Fig. 31).



Figura 31. Muitos cientistas acreditam que o relâmpago globular é uma ilusão de óptica. FONTE: <http://www.straightdope.com/columns/040917.html>.

1.3 Nossa proposta

O relâmpago globular, por sua complexidade, continua a desafiar a comunidade científica em relação à sua formação e estrutura, inclusive pela variedade de propriedades que apresenta.

Nosso trabalho busca oferecer uma contribuição para o entendimento do papel desempenhado pela oxidação do silício na formação do relâmpago globular, um fenômeno intrigante e ainda pouco conhecido.

1.3.1. Objetivo Geral

Desenvolver (a) um método de produção de raios bola e (b) propor um modelo teórico para a sua formação.

1.3.2 Objetivos Específicos

- Avaliar os efeitos das descargas de baixa tensão e altas correntes (23V, 100-140 Amperes) sobre pastilhas de silício de grau eletrônico;
- Analisar o espectro de das bolas luminosas;
- Analisar o movimento das bolas luminosas;
- Comparar o experimento com as propriedades do fenômeno natural;
- Analisar o efeito das descargas de alta tensão e baixas correntes (12 a 200 KV / 2mA) sobre silício de grau eletrônico, metais, ligas e outros materiais/
- Calcular a densidade de energia das bolas luminosas.

CAPÍTULO 2

EQUIPAMENTOS, MATERIAIS E METODOLOGIA

2.1 Equipamentos

A tabela a seguir lista os equipamentos usados nos experimentos deste trabalho.

TABELA 2.1 Equipamentos usados nos experimentos

EQUIPAMENTOS
Máquina de solda elétrica de ~ 23VAC, 35-250 Amperes (Bantam, modelo Serralheiro).
Espectrofotômetro portátil (Ocean Optics, modelo USB2000)
Câmera digital (Sony, modelo TRV130)
Termômetro-higrômetro digital (Minipa, modelo MT-240)
Espectrofotômetro de infravermelho (Perkin Helmer, modelo 283B)
Microscópio Eletrônico de Varredura (Modelo JEOL JSM-5900)
Balança analítica (modelo FA 2104N)
Pirômetro infravermelho 600 a 3000°C (Modelo MR1S).
Laser de fibra Raman ($\lambda = 1430$ nm, P= 0,48W, Modelo KEOPSYS)

2.2 Materiais

A tabela a seguir lista os materiais usados nos experimentos deste trabalho.

TABELA 2.2 Materiais usados nos experimentos

MATERIAIS
Eletrodos de grafite de 4 mm de diâmetro e 4 cm de comprimento (composicao)
Eletrodos de aço de 3 mm de diâmetro (0,1 % de C, 0,15% Si, 0,35% Mn. Tipo celulósico - E 6011).
Base de aço para descarga
Pastilhas de Si dopado (tipo p)[(111), (100)], na faixa de resistividade de 0.02 a 1 Ω .cm e espessura de 350 μ m $\pm$ 50 μ m.
Pó (granulométrica: 200 Mesh) de zinco, cobre, alumínio, magnésio, tântalo, níquel, ferro, enxofre, germânio, sulfeto de ferro, cloreto de sódio (Todos da SIGMA-ALDRICH).
Lâminas de zinco, cobre, alumínio, magnésio, tântalo, níquel, ferro
Carbeto de silício (pastilhas).
Areia com diferentes quantidades de carbono vegetal (em pó).
Microesferas de sílica.
Folha de alumínio (0,05mm de espessura)
Tarugos de acrílico 7 cm de comprimento e 3 cm de diâmetro.

Pastilhas de silício dopado (tipo p, [(111), (100)]), $350\text{ }\mu\text{m} \pm 50\text{ }\mu\text{m}$ de espessura e 0,02 a $1\text{ }\Omega\cdot\text{cm}$ de resistividade, foram cortadas em peças de 1 a 2 cm^2 e colocadas (Fig. 32) na base de descarga feita de aço.



Figura 32. Pedacos de uma pastilha de silício dopado usados nos experimentos.

Em seguida o eletrodo de aço foi encostado para a face superior da pastilha. Após o contato, afastou-se o eletrodo de 2 a 3 mm da pastilha, formando com isso um arco brilhante que funde e evapora localmente o silício. A Fig. 33 ilustra o arranjo experimental.

2.3 Montagem experimental (baixa tensão e alta corrente)

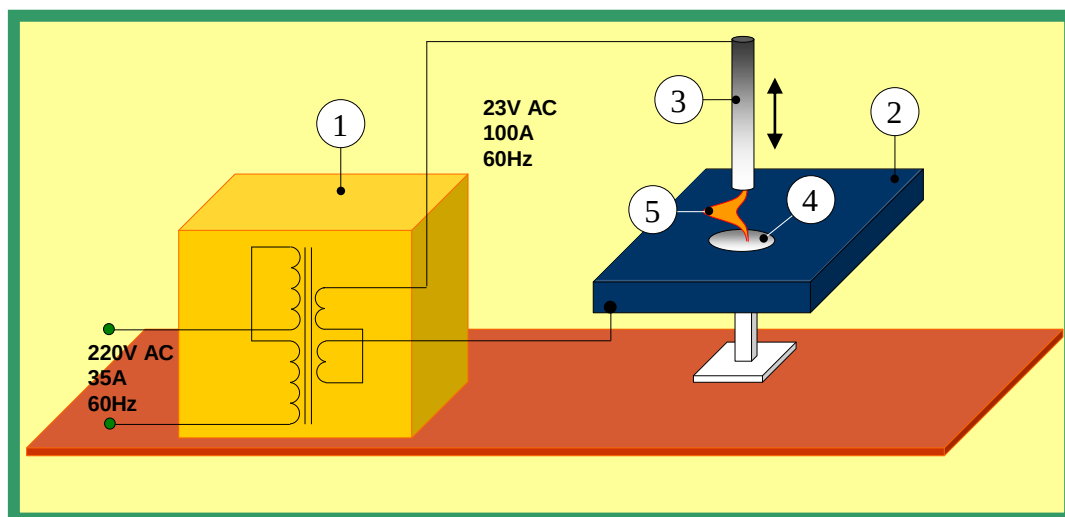


Figura 33. Arranjo experimental mostrando o circuito elétrico, os eletrodos e a pastilha de silício: 1- transformador; 2-base de descarga; 3-eletrodo móvel; 4-amostra; 5- arco-elétrico;

2.4. Montagem experimental (alta tensão e baixa corrente)

A montagem experimental usada nos ensaios envolvendo descargas elétricas de alta tensão e baixa corrente sobre diferentes amostras é mostrada na Fig. 34.

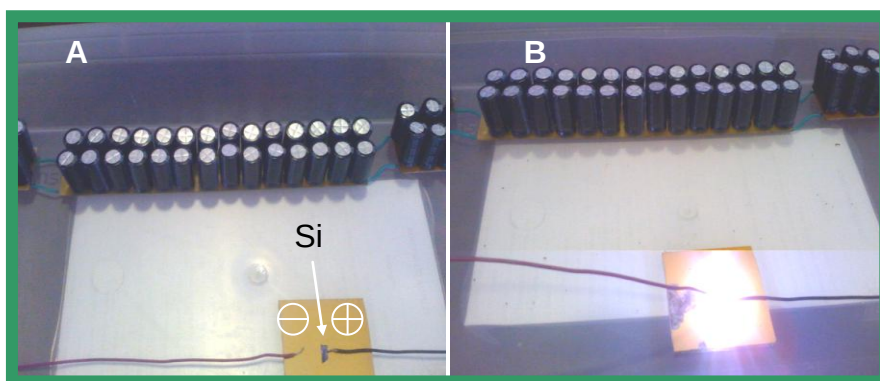


Figura 34. Experimento de alta tensão (saída de 12KV ou 100KV, corrente média de 2mA). A: vista geral do sistema. B: descarga sobre pastilha silício dopado.

Neste arranjo experimental, o gerador de alta tensão consta de 84 capacitores eletrolíticos, cada um de $10\ \mu\text{F}/450\ \text{V}$, e 42 diodos IN4007 (1A/1KV). A Fig. 35 ilustra o circuito eletrônico do mesmo.

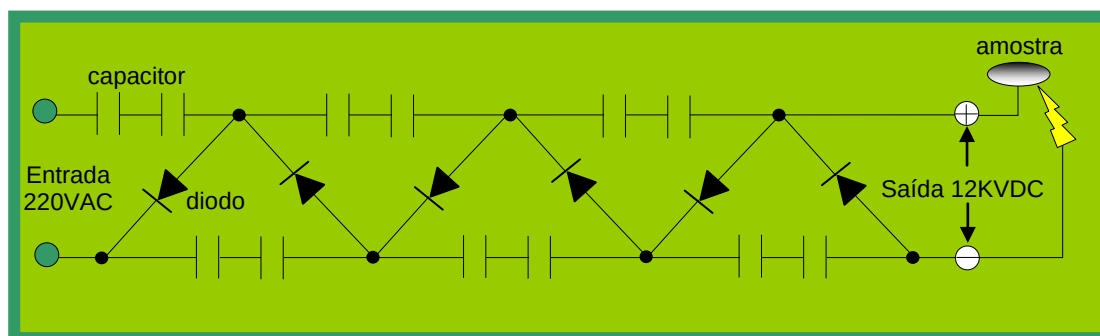


Figura 35. Circuito do gerador de AT. Apenas 7 dos 42 estágios são mostrados por motivo de limitação do espaço desta folha.

Um espectrofotômetro portátil (Ocean Optics, modelo USB 2000) foi usado para verificar o espectro emitido pelas bolas luminosas. Este dispositivo estava conectado a um computador pessoal para aquisição dos dados (Fig. 36).

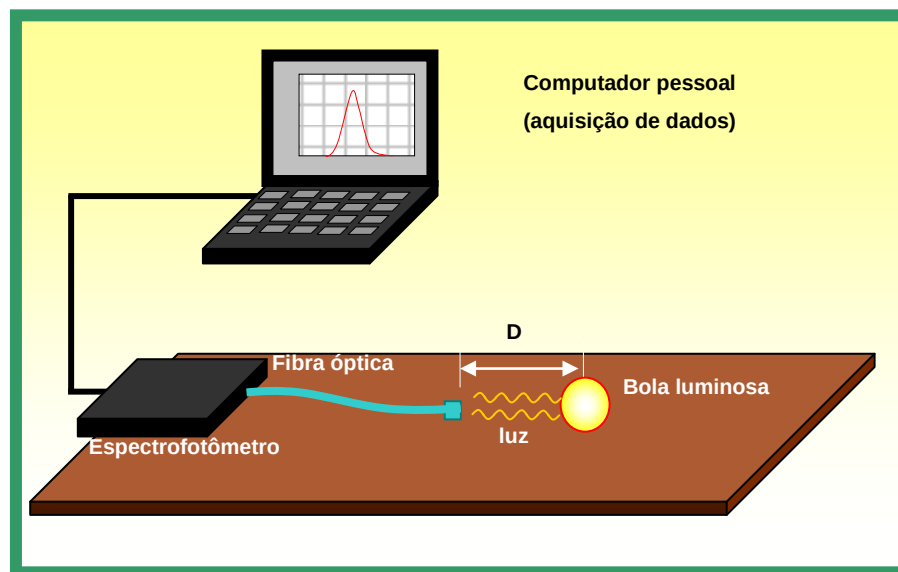


Figura 36. Arranjo experimental para a detecção do espectro das bolas luminosas ($D = 5\text{ cm}$).

A umidade relativa do ar e temperatura ambiente foram medidas com o auxílio de um termômetro-higrômetro digital (Minipa, modelo MT-240) em todos os ensaios. A temperatura ambiente variou de 26°C a 33°C . A umidade relativa do ar variou de 50% a 98%.

2.5 Detalhes computacionais

Usou-se o programa Gaussian 03 E.01 (FRISCH *et al.*, 2004) para realizar os cálculos computacionais relativos à oxidação do silício. Foram usados cálculos *ab initio* utilizando o método Coupled Cluster (CC) (PURVIS & BARTLETT, 1982; KENDALL *et al.*, 1992) com excitações simples, duplas e triplas, juntamente com o conjunto de funções de bases do tipo triplo-zeta (KENDALL E DUNNING, 1992), denotada por CCSD(T) /cc-pVTZ. Isto resulta em valores bastante precisos em cálculos de entalpia de reação.

2.5.1 Método Coupled Cluster

O método Coupled cluster (CC) é usado para descrever numericamente sistemas de muitos-corpos. Começa a partir do método Hartree-Fock de orbitais moleculares e acrescenta uma correção em relação à interação eletrônica. Alguns dos cálculos mais precisos para as pequenas e médias moléculas utilizam este método.

O método foi inicialmente desenvolvido por Fritz Coester e Hermann Kümmel em 1950 para estudar os fenômenos da física nuclear, mas tornou-se mais frequentemente utilizados após Jiri Čížek e Josef Paldus terem reformulado o método de correlação eletrônica em átomos e moléculas na década de 1960.

A idéia do método de CC é tratar um sistema de muitos elétrons separando-o em vários aglomerados (clusters) com poucos elétrons. Calculam-se as interações entre os elétrons de um mesmo aglomerado e depois entre diferentes aglomerados. O mecanismo matemático que permite esta abordagem é obtido escrevendo a função de onda de *coupled cluster* como:

$$|\Psi\rangle = e^T |\Phi_0\rangle \quad (2.1)$$

onde T é um fator determinante do tipo Slater geralmente construído a partir de orbitais moleculares Hartree-Fock. Este operador de cluster é definido como:

$$T = T_1 + T_2 + \dots + T_p \quad (2.2)$$

Onde as aplicações de T_1 , T_2 , ... significam que

$$T_1\Phi_0 = \sum_{i,a} C_{ii}^a \Phi_i^a \quad (2.3)$$

e

$$T_2\Phi_0 = \sum_{ijab} C_{ii}^{ab} \Phi_{ij}^{ab} \quad (2.4)$$

Portanto a aplicação de T_1 e T_2 ,...geram configurações mono-, duplamente excitadas, etc. Como antes Φ_i^a significa a configuração onde o orbital φ_i ocupado é substituído

pelo orbital virtual φ_a . Na notação $i, j, \dots$ representam orbitais ocupados no determinante de referência enquanto que $a, b, \dots$ representam orbitais desocupados. Basicamente T_1 é o operador que gera as configurações simplesmente substituídas, T_2 é o operador que gera as configurações duplamente substituídas, etc..

As amplitudes de cluster, C , devem ser obtidas de forma que a função de onda $|\psi\rangle$ seja uma solução da equação de Schrödinger. Assim,

$$He^T|\varphi_0\rangle = Ee^T|\varphi_0\rangle. \quad (2.5)$$

Multiplicando esta equação à esquerda por e^{-T} temos

$$e^{-T}He^T|\varphi_0\rangle = E|\varphi_0\rangle \quad (2.6)$$

que pode ser reescrita como

$$\left[H + [H, T] + \frac{1}{2!} [H, T, T] + \frac{1}{3!} [H, T, T, T] + \frac{1}{4!} [H, T, T, T, T] \right] |\varphi_0\rangle = E|\varphi_0\rangle \quad (2.7)$$

É fácil perceber que esta expansão (conhecida como Campbell-Hausdorff) se encerra no termo de quatro comutadores. Este resultado é uma consequência do fato que H envolve no máximo operadores de dois elétrons. Evidentemente, não é possível incluir operadores de cluster de todas as ordens de substituições em um cálculo CC e o que se faz na prática é truncar T em algum T_p com p pequeno.

Uma desvantagem do método CC é que ele não é variacional. Embora a expressão variacional para a energia

$$E = \frac{\langle \varphi_0 | e^{T'} H e^T | \varphi_0 \rangle}{\langle \varphi_0 | e^{T'} e^T | \varphi_0 \rangle} \quad (2.8)$$

Possa ser obtida a partir da função de onda de CC ela não é operacional porque a expressão dos exponenciais de T e T' , neste caso, não é encerrada como no caso anterior da Eq. (2.7). Enquanto $\langle \varphi_0 | e^T = \langle \varphi_0 |$ (pois ao atuar à esquerda o operador T se torna T' e

assim tentará criar onde existe orbital já ocupado e destruir orbitais já desocupados), $\langle \varphi_0 | e^{T'} = \langle \varphi_0 | (1 + T + \dots)$ será uma expansão infinita.

2.5.1.1 Aproximações CCSD e CCSDT e funções de base do tipo cc-pVNZ

Embora seja claro que as substituições duplas desempenham um papel dominante em cálculos da energia de correção, existem problemas em que a inclusão das substituições simples é de fundamental importância. Um modelo de CC levando em consideração as substituições simples e duplas (CCSD foi formulado e implementado computacionalmente por Purvis e Bartlett (2004). Neste modelo a função de onda é escrita como:

$$\psi_{CCSD} = e^{T_1+T_2} |\varphi_0\rangle \quad (2.9)$$

É importante notar que não só as substituições simples e duplas são incluídas em um cálculo CCSD. Outras substituições triplas, quádruplas,..., provenientes de termos desconexos do tipo T_1T_2 , $(1/3)T_1^3$, $(1/2)T_2^2$, ..., também são incorporados. Ao contrário das substituições quádruplas em que o termo desconexo $(1/2)T_2^2$ é o termo mais importante do que os termos desconexos T_2T_1 e $(1/3)T_1^3$. Um esquema aproximado para inclusão das substituições triplas em CCSD foi proposto por Urban et al (1998). A idéia é utilizar a expressão que dá a contribuição das triplas nas perturbações em quarta ordem (MP4 - Moller-Plesset em quarta ordem). Uma aproximação sofisticada dentro do esquema de CC incluindo as substituições simples, duplas e triplas no operador de cluster (CCSDT) foi desenvolvida e implementada por Noga e Bartlett (1998). De acordo com este esquema a função de onda é:

$$\psi_{CCSDT} = e^{T_1+T_2+T_3} |\varphi_0\rangle \quad (2.10)$$

Para a obtenção de uma expressão para a energia de correlação e das equações para as amplitudes cluster, C_i^α, C_{ij}^{ab} e C_{ijk}^{abc} , é necessário projetar esta função de onda em $|\varphi_0\rangle, |\varphi_i^a\rangle, |\varphi_{ij}^{ab}\rangle$ e $|\varphi_{ijk}^{abc}\rangle$. Estas equações são bastante trabalhosas para serem exibidas aqui. Algumas das funções de base mais comumente usadas são aquelas desenvolvidas

por Dunning (1989), uma vez que elas são designadas para convergir sistematicamente aos limites de funções de base completa (CBS em inglês) por meio de técnicas de extrapolação. Para cadeias de um e dois átomos, as funções de base são do tipo cc-pVNZ onde $N=D,T,Q,5,6,\dots$ (D = duplo, triplo, etc). O ‘cc-p’, corresponde a ‘correlation consistent polarized’ (consistente de correlação polarizada) e o ‘V’ indica que elas são funções de base de valência. Elas incluem sucessivamente funções (d, f, g, etc.) de camada de polarização. Mais recentemente as funções de base ‘cc-p’ têm sido largamente usadas e são o estado da arte para cálculos pós-[Hartree-Fock](#). Exemplos destes são:

- cc-pVDZ - correlation-consistent polarized valence double-zeta.
- cc-pVTZ - correlation-consistent polarized valence Triplo-zeta
- cc-pVQZ - correlation-consistent polarized valence Quadruplo-zeta
- cc-pV5Z - correlation-consistent polarized valence Quintuple-zeta.

Para átomos de cadeia tripla, funções adicionais são necessárias; estas são as funções de base do tipo cc-pV(N+d)Z. Átomos maiores requerem funções de base da família cc-pVNZ-PP and cc-pVNZ-DK, onde PP e DK correspondem a *pseudopotential* e *Douglas-Kroll*, respectivamente. As funções de base podem ser expandidas com funções de núcleo para cálculos geométricos e propriedades nucleares, e com funções difusas para cálculos de estados eletrônicos excitados, cálculos de propriedade de campo elétrico e interações de longa distância (forças de Wan der Waals).

CAPÍTULO 3

Resultados e Discussões

Nos experimentos, pastilhas de silício dopado foram submetidas a descargas elétricas de 23 VAC e 100 A. Neste capítulo vamos discutir em detalhes o que se observou nos ensaios do presente trabalho.

3.1 E as bolas apareceram...

Nos ensaios, quando o arco elétrico (após 1 a 2 segundos) é formado, arremessa à distância pedaços de silício incandescentes (Fig. 37). Alguns destes não passam de fragmentos, pois se extinguem rapidamente (em aproximadamente 1 segundo). Destes últimos, porém, às vezes, bolas luminosas persistem por até 8 segundos.

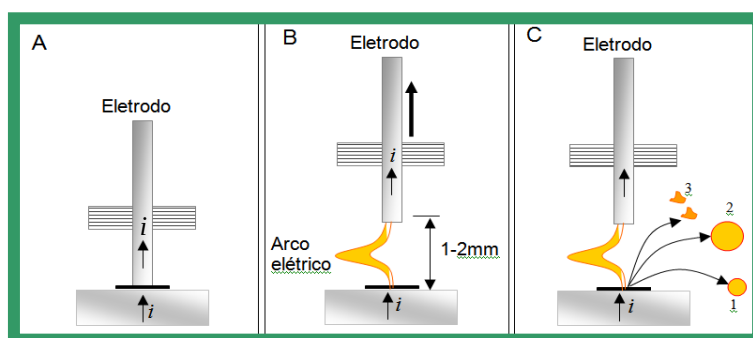


Figura 37. Passo a passo da produção de bolas luminosas: A-B, Abertura do arco elétrico; C, Bolas luminosas (1 e 2) e fragmentos (3) são formados.

Estas se comportam de forma similar ao relâmpago globular natural, saltando e rolando ao longo do solo, aleatoriamente, emitindo muitas vezes faíscas e fumaça (Fig. 38).

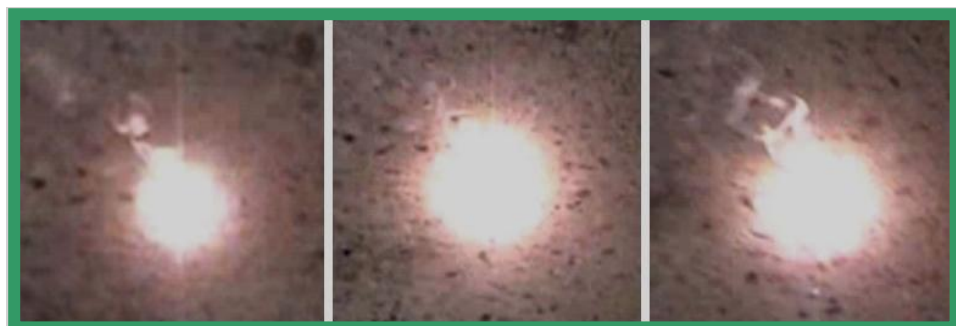


Figura 38. Fotos sucessivas mostrando uma bola luminosa emanando uma fumaça espiralada sobre si. O intervalo de tempo entre os quadros é de 80 ms.

As bolas luminosas são de um branco-alaranjado ou branco-azulado e apresentavam velocidades variadas (1 a 10 cm/s). O diâmetro das bolas variava de 1cm a 4 cm (muito raro). Mudanças de direção e outras propriedades também foram registradas com uma câmara digital Sony TRV130 (Tabela 3). Às vezes algumas bolas emitiam um som sibilante (ao ouvido desarmado), semelhante à água em fervura ou calefação (característica do fenômeno natural).

TABELA 3.1 COMPARAÇÃO ENTRE BOLAS NATURAIS E ARTIFICIAIS Convenção: 1c- observações coletadas por correspondência, registro (c). 2c – observações de coleções do Comitê Russo de Raios Bola, registro (c)

PROPRIEDADES DAS BOLAS LUMINOSAS NESTE EXPERIMENTO	REGISTRO DE TESTEMUNHAS OCULARES SOBRE O RELÂMPAGO GLOBULAR (VER ABRAHAMSON et al, 2002)
1) mover-se sobre uma longa trilha, de forma errática, algumas vezes com velocidades variáveis	1c 1g 1n 2u
2) subdivide-se em duas ou mais bolas	2c 2h
3) superfície brilhante, faíscas, “aparência de um algodão”	1g 1j 2e 2l 2n 2o 2u
4) rola, solta de objetos sólidos	1c 1g 1l 1p 1f 2j 2h 2q
5) encolhe ao passar por brechas	1j 2d 2p 2q 2s
6) gira no solo em torno de um eixo vertical	1g 1n 1r
7) queima objetos quando em contato	1i
8) cor branco alaranjada ou branco azulada	1i 1l 1m 1o 2k 2p 2u
9) forma esférica sem contornos bem definidos	2j 2n 2p 2q 2r 2s
10) tempo de vida de 5-8 segundos	1j 2j 2k

Outras peculiaridades das bolas é a de poderem se dividir espontaneamente (Fig. 39), e passar por espaços bem menores do que seu diâmetro (Fig. 40).



Figura 39. Sequência de imagens mostrando a divisão das bolas. O intervalo entre os quadros é de 80ms.

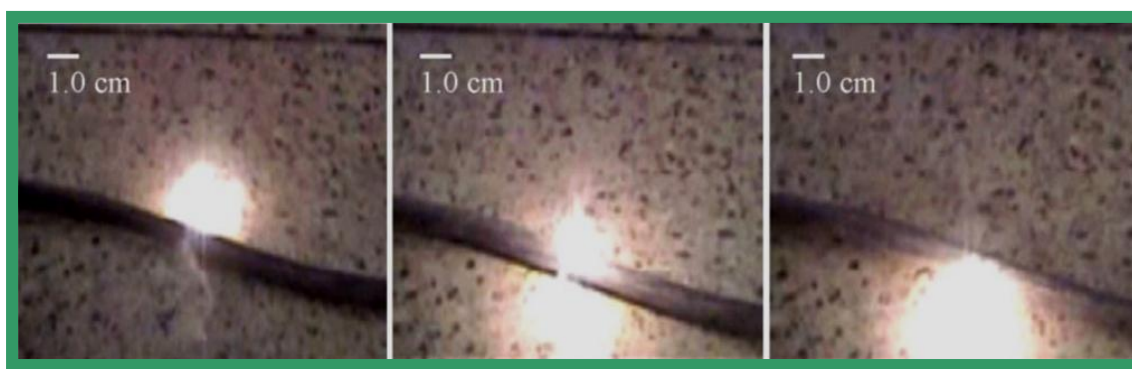


Figura 40. Quadros sucessivos mostrando a passagem de uma das bolas luminosas por baixo do fio. O intervalo entre os quadros é de 80ms.

As bolas luminosas desaparecem silenciosamente, como uma lâmpada ao ser desligado o interruptor. Este tipo de decaimento é comum no fenômeno natural, sendo que outros tipos de extinção (no fenômeno natural) são também possíveis: explosão e fragmentação.

As bolas deixam uma trilha de pó muito fino, constituído, segundo a espectroscopia de infra-vermelho, de SiO_2 . As bolas também parecem girar, comprovando assim muitas observações do fenômeno natural. A fumaça evidencia este comportamento, uma vez que se apresenta espiralada.

O mecanismo de giro é ainda desconhecido, mas provavelmente se deve ao impulso inicial da descarga sobre o silício em combustão. Tal impulso, no momento de formação

das bolas luminosas, confere um giro às mesmas. Vários ensaios foram realizados submetendo às descargas de 12KV(DC)/2mA e 100KV(DC)/2mA os materiais listados na tabela 1. Nenhuma bola luminosa foi formada nestes experimentos. Enquanto que a potência usada nos ensaios de baixa tensão (Pág.28) esteve entre 1,725 kW e 5,750 kW, a potência nos experimentos envolvendo alta tensão esteve entre 24W e 200 W (Pág. 29). Este fato evidencia que a potência da descarga elétrica é crucial para a formação das bolas luminosas de longa vida e que se comportam como o fenômeno natural. A temperatura ambiente e a unidade relativa do ar também foram levadas em consideração nos experimentos. Estas variáveis do ambiente não tiveram qualquer influência na produção das bolas luminosas (tempo de vida, tamanho, probabilidade de surgimento das bolas). Porém, o que se observou foi que a temperatura do eletrodo móvel, de aço, é de grande influência no processo de surgimento das bolas luminosas. Apenas quando a ponta do eletrodo móvel estava previamente aquecida ao vermelho-alaranjado (temperatura de cerca de 1500°C) é que surgiram as bolas luminosas. Eletrodos de grafite (retirados de pilhas de zinco-carbono) têm uma eficiência maior que a do eletrodo de aço. Com a vantagem de não se precisar aquecer o mesmo previamente. Neste caso, a probabilidade de formação das bolas é maior: 3 a 4 bolas de longo tempo de vida (6 a 8 segundos) para cada 10 a 15 tentativas. Para os de aço, 3 a 4 bolas luminosas em 40 tentativas.

Todos os procedimentos anteriores foram feitos usando-se no lugar das pastilhas de silício dopado os metais listados na tabela 1 (alumínio, cobre...), nas formas de folhas, pó e tarugos.

Porém, nenhuma destas amostras (e combinação delas) gerou bolas luminosas ao serem submetidos a um arco elétrico. Apenas fragmentos incandescentes perduraram por no máximo 1 (um) segundo. Nos fragmentos, a dinâmica (deslocamento) é muito diferente em relação às de silício. Ou seja, elas não mudam de direção, não saltam ao longo do solo e não giram ao redor de um eixo vertical. Elas se deslocam apenas em linha reta sobre a superfície e o seu decaimento luminoso é gradual (lento). Vários ensaios de alta tensão também foram feitos para tentar fazer com que as bolas luminosas de silício flutuassem (ver Fig. 41).

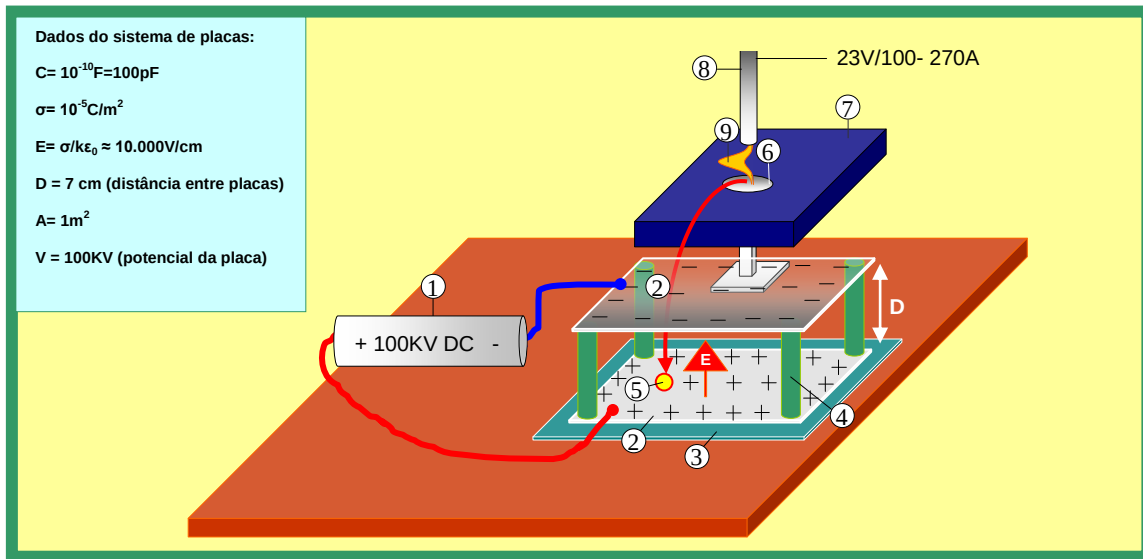


Figura 41. Arranjo experimental para verificar a flutuabilidade das bolas em campos elétricos. 1- gerador de alta tensão, 2-placa de alumínio; 3-placa de acrílico; 4- tubo de acrílico; 5-bola luminosa; 6-amostra de silício; 7-base de descarga 8-eletrodo de descarga; 9-arco-elétrico.

Nos ensaios mostrados na Fig. 41, as bolas luminosas foram geradas submetendo as pastilhas de silício dopado a descargas elétricas de 23 VAC e 100 Amperes. O experimento partiu do pressuposto de que as bolas poderiam flutuar se eletrificadas (por contato ou indução) na presença de um campo elétrico externo. Era de se esperar que quando elas atingissem a placa de alumínio inferior, com densidade de carga $+ 10^{-5} \text{C/m}^2$, elas absorveriam uma porção da carga acumulada na placa e, por repulsão (pois cargas de mesmo sinal se repelem), elas passariam a flutuar. Porém este efeito não foi observado, mesmo com um campo elétrico E entre as placas condutoras da ordem de 10000 V/cm , este dez vezes maior que o valor típico de campo elétrico no solo abaixo de uma nuvem de tempestade (MANSON, 1971). O valor da carga que deve ser acumulada pelas bolas deveria ser de no mínimo $q = MgE^{-1} \approx 1,7 \times 10^{-8} \text{C}$ para que elas viessem a flutuar.

As bolas luminosas de silício aumentam bruscamente de velocidade e mudam de direção no nível do solo, como o registrado por muitos relatos do fenômeno natural (ABRAHAMSON, 2002 & BYCHKOV, 2002). Muitos feitos de deslocamento das bolas luminosas como mudanças bruscas de velocidade e de direção, podem ser explicados pela presença de pequenos obstáculos no solo combinado com o giro

inicialmente na vertical do núcleo das bolas luminosas em torno de um eixo central (Fig.42).

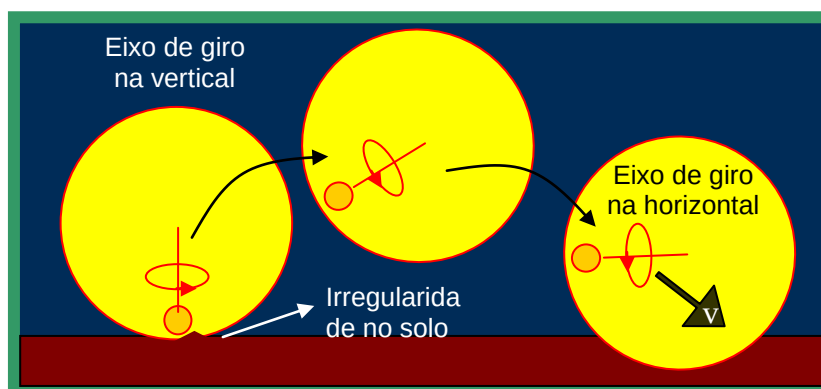


Figura 42. Mudança de direção do eixo de giro acarreta em deslocamento horizontal das bolas luminosas.

O movimento rotacional das bolas luminosas, evidenciado pela rotação da fumaça das bolas, deve-se ao impulso inicial da descarga sobre o núcleo (em ebulição) no momento de sua formação. O fato de as bolas luminosas atravessarem espaços muito menores que o seu tamanho aparente deve-se ao fato de o núcleo ser muito pequeno: O raio médio (externo) das bolas luminosas produzidas em nossos experimentos é, em média, de 1,25 cm (valor este obtido de fotos da bola próximo à objetos de dimensões conhecidas), e o raio médio do núcleo é de 150 μm . Este ultimo valor foi obtido a partir de análises de alguns fragmentos deixados pelas bolas por meio da Microscopia Eletrônica de Varredura (SEM). Nos nossos experimentos, o silício usado tem um alto grau de pureza para simplificar energeticamente o processo de redução da sílica que ocorre na natureza, uma vez que a potência das descargas usadas nos experimentos tem uma energia muito menor (média de 10^3J) em relação à média liberada por um raio que em média é de 10^{14}J (MANSON, 1971).

De acordo com nosso modelo de relâmpago globular, o que se sairá de dentro do fulgurito após a última descarga de retorno são partículas micrométricas de silício em temperaturas muito altas (acima de 2000 K) e não um aerogel, esta última uma estrutura ainda não verificada experimentalmente. Ao saírem do fulgurito, pela pressão dos vapores ali formados (metálicos e de CO_2), elas formarão o relâmpago globular. Em muitos fulguritos localizados nas proximidades de árvores (Fig. 43) são encontrados glóbulos metálicos (cujo raio varia de alguns micrômetros até centímetros) de dimensões variando entre micrômetros a centímetros ricos em silício nativo (ESSENE

& FISHER, 1986). A fase metálica tem mais de 99,5 % de átomos de silício em peso e menores quantidades de titânio e ferro sob as formas Fe_3Si_7 , FeSi , e FeTiSi_2 .

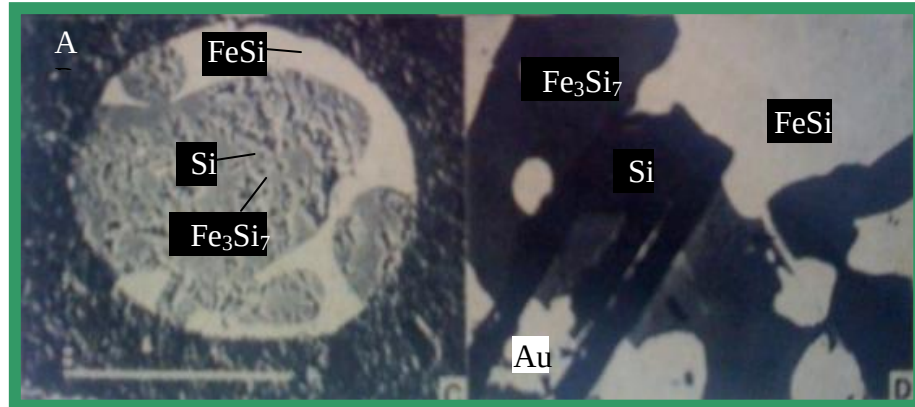


Figura 43. A - Microscopia eletrônica de varredura de um corte transversal de um fulgurito mostrando glóbulos metálicos de silício. B – Esqueleto de silício (5 μm de largura) entre resíduos de ouro em uma matriz de FeSi e Fe_3Si_7 . FONTE: ESSENE & FISHER (1986).

Os raios naturais transferem de 10 kA a 200 kA para o solo e a temperatura do ar momentaneamente chega a atingir até 30.000 K (UMAN, 1969). Fulguritos são os produtos destas descargas no solo (Ver Fig. 25). São abundantes e largamente distribuídos na superfície da Terra (FRONDEL, 1962).

3.1.1 Microscopia para análise de composição dos resíduos deixados pelas bolas luminosas

Os fragmentos das pastilhas de silício também foram analisados (Fig. 44).

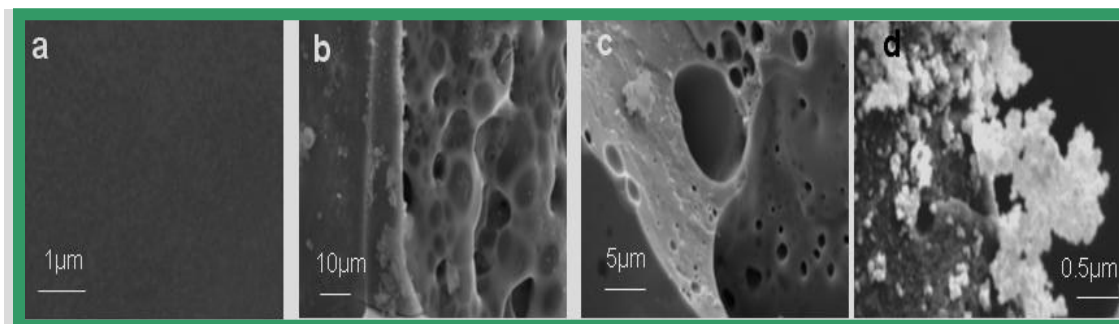


Figura 44. SEM da pastilha de Si antes (a) e após a descarga elétrica (b), (c), (d). A superfície das amostras submetidas a descarga elétrica revela buracos (b), (c) e cadeias de partículas de dimensões micrométricas (d).

Como se pode ver, as pastilhas apresentam uma superfície perfurada e com aglomerados de partículas esbranquiçadas. A composição química delas (e do pó branco deixado pelas bolas) foi feita por meio da espectroscopia de infravermelho (FT-IR), operando no modo de transmissão. Para isso raspou-se, com o auxílio de uma lâmina, a superfície dos fragmentos das pastilhas com a finalidade de se obter o pó branco. Neste caso, duas bandas de forte absorção 1463 cm^{-1} e 2924 cm^{-1} foram observadas, assim confirmando que tais partículas são compostas de SiO_2 , formado no momento que o arco elétrico é aberto sobre a pastilha. O pó branco deixado pelas bolas foi submetido à luz ultra-violeta (UV) de comprimentos de onda entre 245 nm e 365 nm. Mas nenhuma fluorescência foi observada. Prova de que nenhuma partícula nanométrica foi formada. Os fragmentos deixados pelas bolas luminosas foram também analisados com o UV (na mesma faixa anterior), mas nenhuma fluorescência foi observada.

Cerca de 50% das bolas desaparecem sem deixar resíduos visíveis e 50% deixam, após se extinguirem, um pequeno fragmento variando de 0,3 mm a 0,1 mm de diâmetro. Análises destes fragmentos foram feitas usando Microscopia Eletrônica de Varredura (SEM) (Fig.45).

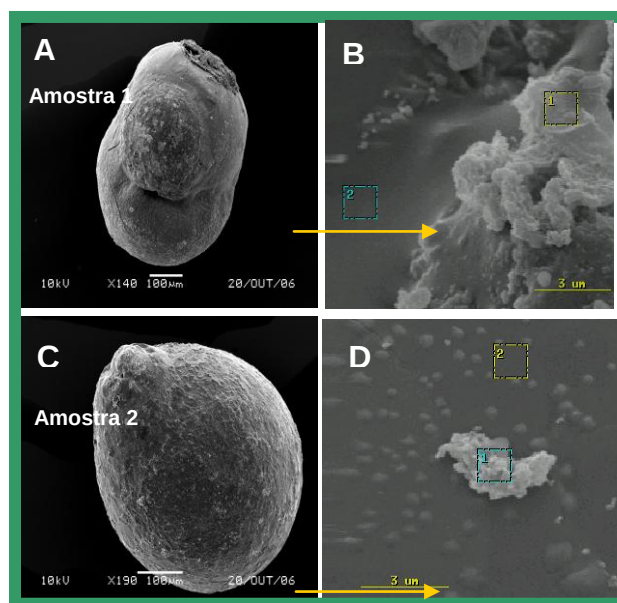


Figura 45. Fotos tiradas no microscópio eletrônico de varredura de dois núcleos distintos das bolas luminosas.

Como se pode ver, os núcleos das bolas luminosas apresentam uma superfície ligeiramente rugosa e com pequenas partículas esbranquiçadas na superfície. Análises, por meio de EDS (Energy Dispersive X-ray Spectroscopy), da composição química destes resíduos foram feitas (Fig. 46 a 49).

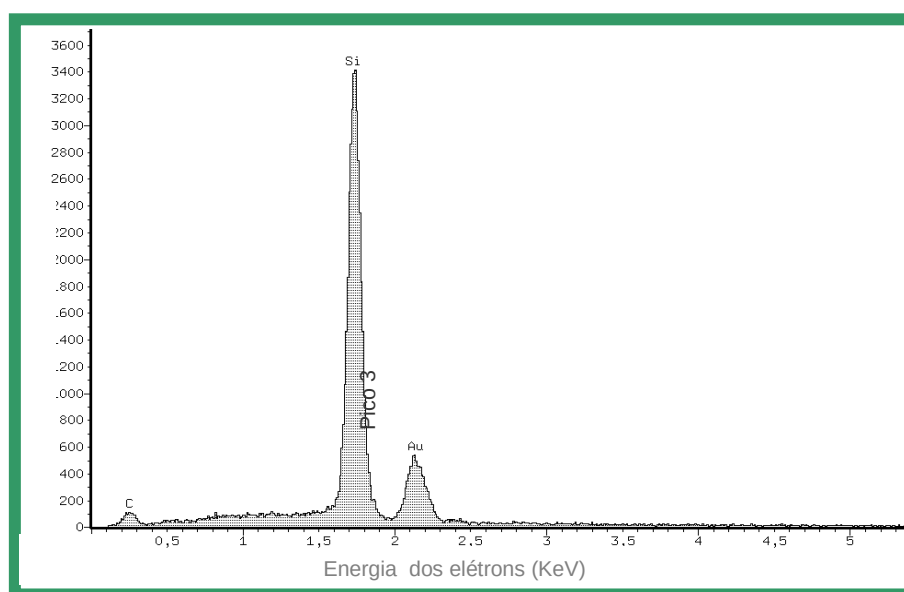


Figura 46. EDS da área “2” da superfície da amostra 1.

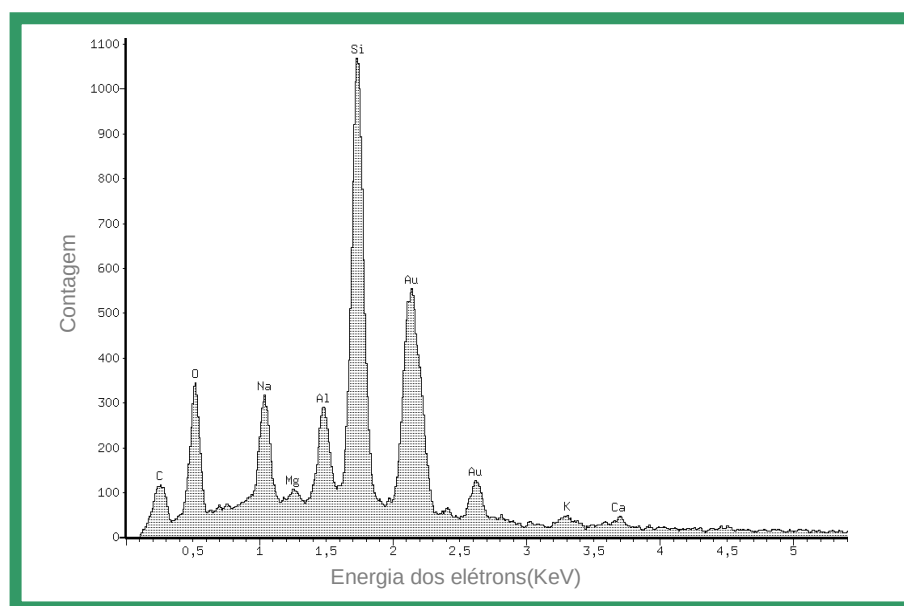


Figura 47. EDS área “1” da superfície da amostra 1.

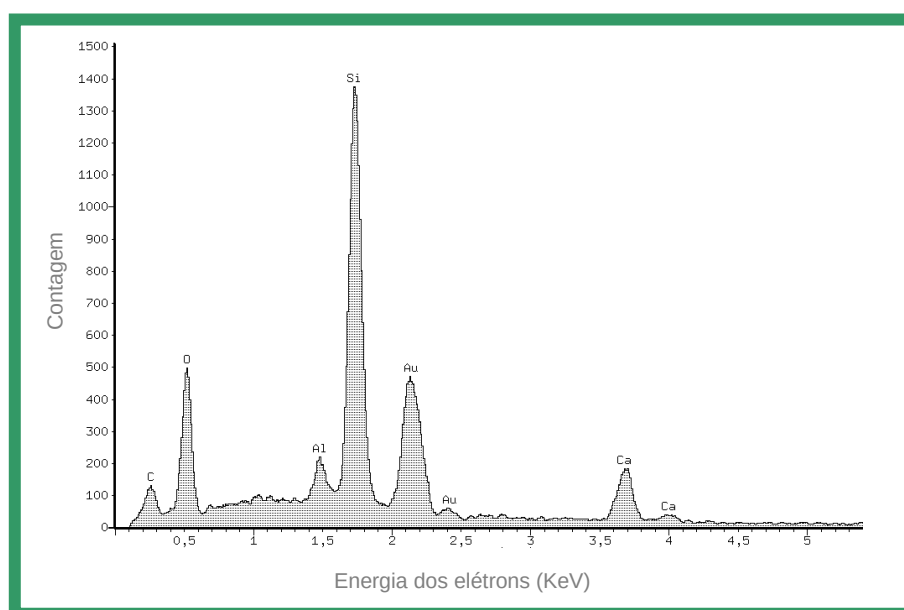


Figura 48. EDS área “2” da superfície da amostra 2.

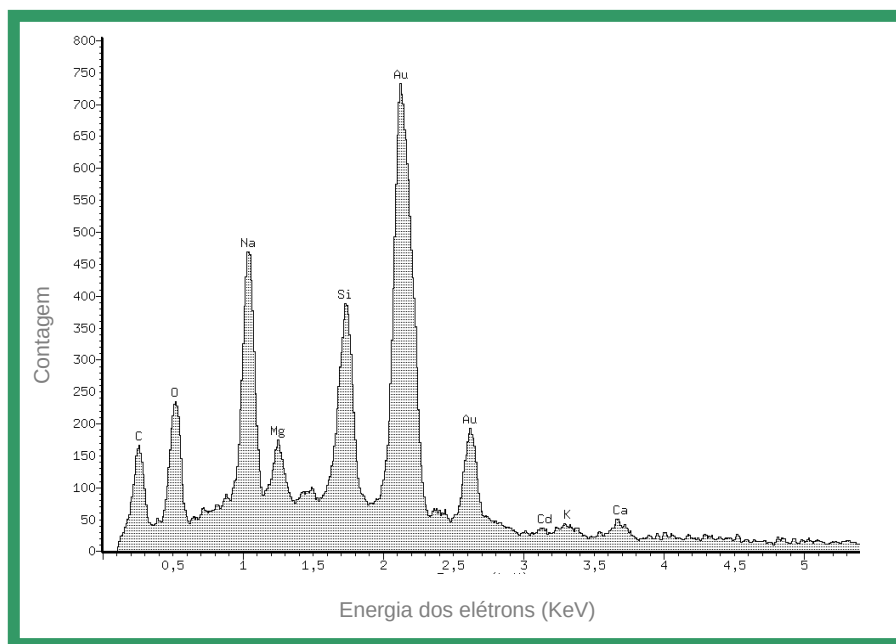


Figura 49. EDS área “1” da superfície da amostra 2.

Como se pode ver, o EDS da área “2” da superfície das amostras (Fig. 45, quadros B e D) é formada principalmente de silício. O outro elemento, o carbono, provém dos eletrodos de aço e de grafite usados nos experimentos.

Já as áreas assinaladas por “1”, das amostras 1 e 2, são esbranquiçadas (Fig. 45, quadros B e D). Elas apresentam uma composição química de óxidos metálicos. Neste caso, Os EDS das amostras 1 e 2 desta área mostram que ela é formada por óxidos de diversos metais (sódio, magnésio, alumínio, silício, potássio, cádmio, cálcio). Os metais que compõem estes óxidos (com exceção dos de silício) são provenientes dos eletrodos.

3.1.2 Espectros

Os espectros emitidos por duas bolas luminosas distintas são mostrados na Fig. 50.

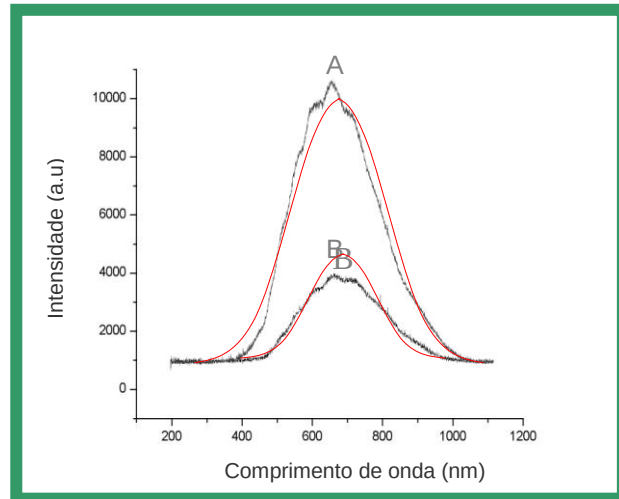


Figura 50. Espectro de duas bolas luminosas distintas, plotadas num mesmo gráfico. As protuberâncias laterais das curvas são “ruídos” gerados pela fibra óptica do espectrômetro. O Pico A foi o de maior intensidade registrado. O pico B foi o de menor intensidade registrado.

O espectro acima foi comparado com o de uma lâmpada incandescente (Fig. 51), de $\sim 1,3$ mW (potência luminosa medida para $\lambda = 675$ nm, a uma distância de 5 cm do detector).

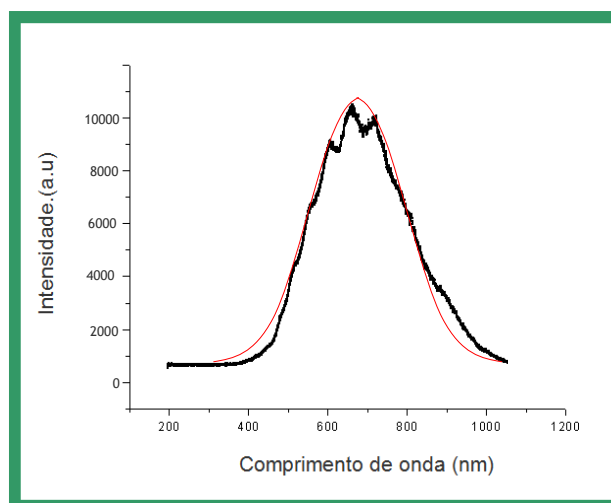


Figura 51. Espectro emitido por um filamento de tungstênio. As protuberâncias laterais do espectro são “ruídos” gerados pela fibra óptica do espectrômetro.

Como se pode ver, o espectro emitido pelo filamento aquecido é semelhante ao das bolas luminosas, forte evidência de que a fonte de luz das mesmas é de natureza térmica. Pode-se também ver que em ambos os espectros que aproximadamente 60% equivale à luz visível (400-700 nm) e que o restante (~ 40%) cai no infravermelho (700-1000 nm).

3.2 Modelo e conteúdo de energia das bolas luminosas

As bolas luminosas de silício são formadas por um núcleo em fase condensada envolto por átomos de silício em oxidação (Fig. 73), de acordo com a reação: $\text{Si(g)} + \text{O}_2\text{(g)} \rightarrow \text{SiO}_2\text{(g)}$. As bolas luminosas apresentam uma emissão de energia similar à de um corpo negro. O núcleo condensado é relativamente pequeno, cerca de 150 μm (Ver imagens da Fig. 45) em relação ao diâmetro externo (ou aparente) das bolas, de cerca de 1,25 cm.

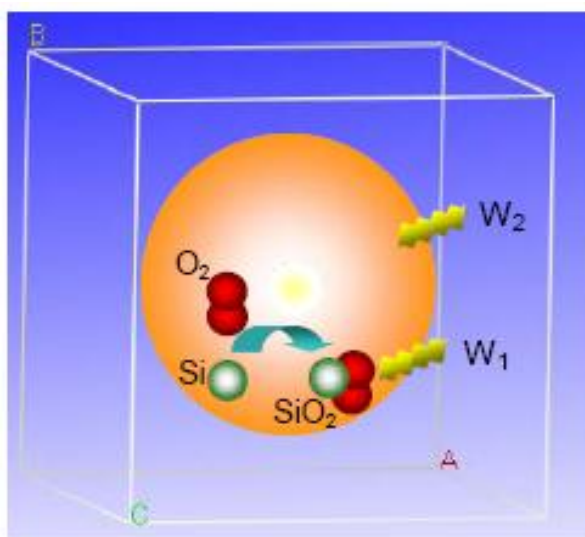


Figura 73. Estrutura de uma bola luminosa. Ela divide-se em duas partes: núcleo de silício (central) e atmosfera de átomos de silício em oxidação.

No presente modelo, o conteúdo energético das bolas luminosas resulta da energia despreendida na combustão do silício (representada por W_2). A energia do corpo

negro é estimada por meio do espectro emitido pelas bolas luminosas, obtido por meio de um espectrômetro portátil. Por outro lado, a energia emitida pela combustão é estimada a partir da massa média de SiO₂ depositado pelas bolas luminosas ao longo de sua trajetória. A seguir, estima-se a densidade de energia relacionadas a W₁ (resultante da emissão térmica) e W₂ (resultante da oxidação do Si) e em seguida compara-se os valores de densidade de energia equivalentes.

3.2.1 Cálculo da energia do corpo negro (W₁).

As bolas luminosas emitem luz por efeito térmico. Tal evidência se extrai da comparação feita entre os espectros das bolas luminosas (Fig.50) e o de um filamento de tungstênio incandescente (Fig. 51). A incandescência, ou radiação do corpo negro, consiste no processo de emissão de radiação eletromagnética por um corpo sob alta temperatura (RYBICKI & LIGHTMAN, 1979). O espectro emitido é largo, ao contrário do espectro de emissão que é uma linha e se caracteriza por frequência específica. Neste caso, a energia total irradiada é dependente da temperatura e dada pela lei de Boltzmann:

$$W_1 = S \times \Delta t \times \varepsilon \times \sigma \times T^4 \quad (3.1)$$

Onde S é a área da superfície do núcleo, ε é a emissividade, Δt é o tempo médio de duração das bolas luminosas e $\sigma = 5,67 \times 10^{-12} \text{ Js}^{-1} \text{ cm}^{-2} \text{ K}^{-4}$ é a constante de Boltzman.

Considerando bolas esféricas de raio médio (aparente) de 1,25 cm nós encontramos $S = 1,96 \times 10^{-3} \text{ m}^2$. A temperatura das bolas luminosas é dada pela lei de Wien:

$$T = \frac{0.29}{\lambda_{\max}} \quad (3.2)$$

Onde $\lambda_{\max}$ é o comprimento de onda onde o pico do espectro ocorre. O numerador da equação (3.2) é uma constante de proporcionalidade, chamada constante de dispersão de Wien, em kelvin-metros. De acordo com o espectro da Fig. 50, obtemos $\lambda_{\max} = 675 \text{ nm}$. Inserindo este valor na Eq. 2 encontramos $T = 4296 \text{ K}$. Assim, usando $\varepsilon = 1$ (corpo

negro), $\Delta t = 5\text{ s}$ (tempo médio de duração das bolas), encontramos $W_1 \sim 19$ Joules para a radiação do corpo negro.

A densidade de energia (DE) é dada por:

$$DE = \frac{W_1}{(4/3)\pi R^3} \quad (3.3)$$

Considerando que o raio externo médio das bolas luminosas vale $R = 1.25\text{ cm}$, $DE \sim 2,4\text{ MJ m}^{-3}$.

3.2.2. Cálculo da energia emitida pela combustão do silício (W_2).

Agora, calculemos a energia radiada pelo processo de oxidação do silício dentro das bolas luminosas. Em nosso experimento nós temos observado uma cor invariante de temperatura branco alaranjada durante o tempo de vida das bolas luminosas, como mostrado nas imagens de vídeo da Fig. 74.

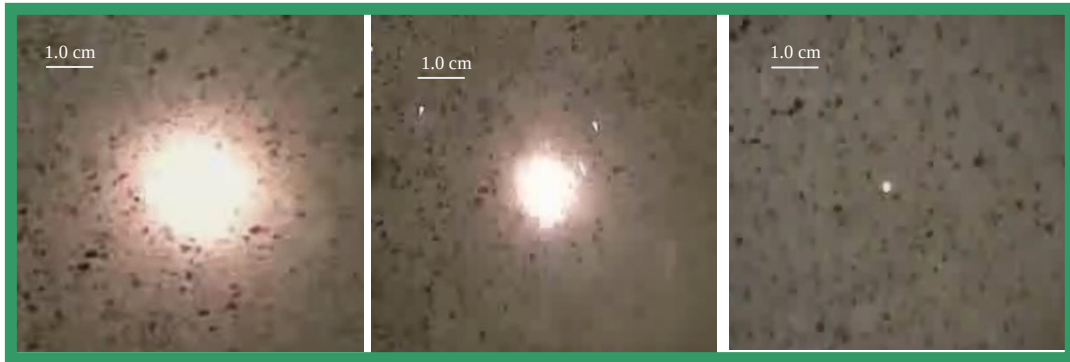


FIG. 74. Fotos sucessivas de uma imagem de vídeo mostrando o decaimento de uma bola luminosa. O intervalo de tempo entre elas é de 80 ms.

Esta evidência experimental mostra que a temperatura das bolas luminosas permanece constante ou decresce muito lentamente durante o seu tempo de vida. Assim, em nossos cálculos nós consideraremos a temperatura das bolas luminosas como sendo constante. A partir da massa média de SiO_2 formado pela combustão (depositado pelas bolas ao

longo de sua trajetória), é possível calcular a energia total liberada na combustão. A massa média coletada nas trilhas seguidas pelas bolas luminosas foi medida como sendo $m_{\text{SiO}_2} = 7 \times 10^{-3}$ g por bola luminosa. A energia emitida para a formação desta massa pode ser calculada pelo uso do calor de formação do SiO_2 na fase gasosa. Uma vez que o calor de formação do SiO_2 na fase gasosa não está disponível experimentalmente, temos realizado cálculos de orbitais moleculares utilizando diferentes níveis de teoria, a fim de estimar o seu valor. Segundo Helgaker et al (2000), os cálculos ab initio de cluster-acoplado incluindo excitações simples, duplas e triplas com a base polarizada de correlação-consistente criados por Dunning e colaboradores, denotada CCSD (T) /cc-pVTZ, dá valores precisos de entalpia (PURVIS & BARTLETT, 1982; KENDALL et al., 1992). O calor de reação é determinado como a diferença de energias entre os produtos eletrônicos e reagentes no estado fundamental, de acordo com:

$$\Delta H = E(\text{SiO}_2) - [E(\text{Si}) + E(\text{O}_2)] \quad (3.4)$$

onde $E(\text{SiO}_2)$, $E(\text{Si})$ e $E(\text{O}_2)$ são as energias eletrônicas (incluindo a correção da energia de ponto-zero) para o SiO_2 (- 439,3166897 Hartree), Si (-288,9000116 Hartree) e O_2 (-150,1254283 Hartree), respectivamente. Assim encontramos $\Delta H = -755 \text{ kJ mol}^{-1}$ (a 4296 K). Se incluirmos os efeitos da entropia, o calor será $\Delta H = -273.4 \text{ kJ mol}^{-1}$. Assim, a energia liberada pela massa de 7 mg de SiO_2 será $W_2 = 31,9 \text{ J}$ (no tempo médio de vida da bola).

A densidade de energia (DE) é dada por:

$$DE = \frac{W_2}{(4/3)\pi R^3} \quad (3.5)$$

Considerando que o raio externo médio das bolas luminosas vale $R = 1.25 \text{ cm}$, $DE = 3,9 \text{ MJ m}^{-3}$. Este valor é apenas 1,6 vezes maior que a DE calculada para as bolas luminosas considerando apenas a radiação de corpo negro emitido por elas indicando que os dois métodos (espectro do corpo negro e cálculo da energia pela massa do SiO_2 depositado pelas bolas luminosas) são plausíveis do ponto de vista quantitativo para

explicar o conteúdo de energia dentro do volume das bolas luminosas. Estes valores foram comparados com as *DE*'s estimadas para o fenômeno natural (levando em consideração relâmpagos globulares com raio médio de mesma ordem de grandeza das bolas luminosas). A tabela 3.2 mostra a densidade de energia das bolas luminosas calculadas no presente trabalho e a estimada por vários autores baseados nos danos causados pelo fenômeno natural.

TABELA 3.2. Diâmetro médio de vários relâmpagos globulares associados com sua densidade de energia para diferentes fontes da literatura.

OBSERVAÇÃO/ AUTOR	<i>D</i> (m)	<i>DE</i> (MJ m ⁻³)
(13) Stakhanov	0,08	25.85
(30) Stakhanov	0,055	1,99x10 ²
Imianitov & Tikhii	0,07	6,25
(o evento de 1981, p. 65) Stenhoff	0,0175	2,4x10 ²
(a) Barry	0,098	0,8
(b) Barry	0,090	0,4
(o evento de Smethwick) Stenhoff	0,099	6
Este trabalho	0,025	3,9 (2,4)*

*considerando o espectro das bolas luminosas.

Podemos ver na Tab. 3.2 que a densidade energética das bolas luminosas está no mesmo intervalo daquele para o relâmpago globular (com diâmetro da mesma ordem de grandeza das bolas luminosas) estimada por Stakhanov (1979), Imianitov & Tikhii (1980), e Barry (1980). Portanto, as bolas luminosas podem ser incluídas (do ponto de vista energético) na categoria relâmpago globular. É importante observar que as bolas

luminosas têm um diâmetro relativamente pequeno, talvez devido às condições experimentais em que se produziram. Por exemplo, temos utilizado 20-25 V e 100-140 A nas descargas elétricas, mas as condições naturais são bastante diferentes. Temos salientado que o uso de Si puro provavelmente otimizada a evaporação de Si, para que possam surgir como relâmpagos globulares associados com as descargas envolvendo correntes muito inferiores ao esperado em condições naturais (PAIVA et al, 2007).

CAPÍTULO 4

Conclusões e Perspectivas

Geramos bolas luminosas de longa duração com propriedades que lembram as do fenômeno natural (passa por fendas, subdividir em bolas menores, aparência de algodão, mudança brusca de movimento, giro em torno de um eixo, possuindo forma esférica de limites bem definidos. No entanto, este trabalho acrescenta um novo elemento de prova em favor da



teoria do relâmpago globular a partir da combustão do silício. A densidade de energia das bolas luminosas foi estimada usando a teoria de corpo negro e da termoquímica da oxidação do silício. Para as bolas luminosas de raio médio de 1,25 cm, foram encontrados valores muito próximos (teoria do corpo negro: $DE = 2,4 \text{ MJ m}^{-3}$; termoquímica da oxidação do silício: $DE = 3,9 \text{ MJ m}^{-3}$). Estes valores foram comparados com as DE 's estimadas para o fenômeno natural (levando em consideração relâmpagos globulares com raio médio de mesma ordem de grandeza das bolas luminosas). Neste caso, isto é mais uma prova de que as bolas luminosas de silício se inserem na categoria de relâmpago globular.

Nossa experiência envolvendo bolas luminosas não depende de fontes de energia e excitação (que são a base de algumas teorias sobre a origem fenômeno natural) que são improváveis no fenômeno natural e demonstra claramente o papel de vaporização e oxidação do Si, tal como proposto pela teoria de ABRAHAMSON-DINNISS (2002) sobre a origem do relâmpago globular.

O nosso trabalho abre perspectivas interessantes para serem exploradas:

- Usar descargas elétricas de alta potência (em torno de 15 GW), usando geradores de pulso do tipo Marx, em amostras de silício de grau metalúrgico (material com 98 % de pureza);
- Direcionar descargas elétricas naturais em amostras de silício de grau metalúrgico. Neste caso, tarugos destes materiais poderão ser colocados na ponta de hastes metálicas sobre altas torres.

- Estudar a formação de bolas luminosas usando descargas de alta tensão e potência sobre amostras de solo contendo carbono e sílica em diferentes proporções;
- Estudar a possível formação de bolas luminosas usando descargas de alta tensão e potência sobre amostras de silício submerso em água (variante do método usado por Fussmann 2008);
- Estudar descargas de alta tensão e potência sobre amostras de ZnS:Cu (material fosforescente);
- Aplicar as técnicas que foram usadas no presente trabalho a uma sistema proposto por ABRAHAMSON (2002);
- Repetir o experimento e filmar com câmeras de alta resolução.

REFERÊNCIAS

ABRAHAMSON J., Dinniss, J., *Nature* **403**, 519 (2000).

ABRAHAMSON, J., *Phil. Trans. R. Soc. A* **360**, 61 (2002).

ABRAHAMSON, J., Bychkov, A.V., Bychkov, V. L.; *Phil. Trans. R. Soc. A* **360**, 11 (2002).

ADAMO, C.; Barone, V. , *J. Chem. Phys.* **108**, 664, (1998).

ADAMO, C.; Barone, V., *J. Chem. Phys.* **116**, 5933 (2002).

ADAMSON, A.W, *A Textbook of Physical Chemistry* (Academic Press College Division, 1986), p. 167.

ALMROV, A. K., Bychkov, V. L., and Strirhev, A. Yu., *J. Met.* **20** (197), 85 (1995).

ANDRIANOV, A. M., Sinitsyn, V. I., *Sov. Phys. Tech. Phys.* **22**, 1342 (1977).

ARGYLE, E; *Nature* **230**, 179 (1971).

ASHBY, D. E. T. F., Whitehead, C.; *Nature* **230**, 180 (1971).

SÁNCHEZ-LAVEGA, A, Pérez-Hoyos, S, Hueso, R , *Am. J. of Phys.* **72**, 767 (2004).

BARRY, J. D. *J. Atmos. Terr. Phys.* **30**, 313 (1968).

BARRY, J. D., *Ball Lightning and Bead Lightning: Extreme Forms of Atmospheric Electricity* (Kluwer Academic, Dordrecht, 1980a).

BARRY, J. D.; *Ball Lightning and Bead Lightning: Extreme Forms of Atmospheric Electivity*, Plenum Press, New York (1980a).

- BARRY, J. D.; *J. Geoph. Res.* **85(C7)**, 4111(1980b).
- BECKE, A. D. *Phys. Rev. A* **38**, 3098 (1988).
- BESNOU, M; *Mem.Soc.Sci.Nat. Cherbourg* **1**, 103(1852).
- BYCHKOV, V. L., *Phil. Trans. R. Soc. A* **360**, 37 (2002).
- BYCHKOV, A. V., Bychkov, V. L. Abrahamson, J.; *Phil. Trans. R. Soc. A* **360**, 97 (2002).
- BYCHKOV, V. L.; *Physica Scr.* **50**, 591–599 (1994).
- COLLINS, J. B., Schleyer, P. V. R., Binkley, J. S., Pople, J. A., *J. Chem. Phys.* **64**, 5142 (1976).
- CHALMERS, J. A., *Atmospheric Electricity* (PERGAMOM PRESS, NEW YORK, 1957), P. 255.
- CHEETHAM, G. R.; *Marine Observer* **26** (172), 81(1965).
- CRAWFORD, I. F.; *Nature* **239**, 395 (1972).
- DIBNER, B., Benjamin Franklin in R. H. Golde (ed.) *Lightning*, Vol I, p. 2, Academic Press, New York (NBL) (1977).
- DIKHTYAR, V., Jerby, E.; *Phys. Rev. Lett.* **96**, 045002 (2006).
- DING, G.-H., C. T. Chan, Z. Q. Zhang, and P. Sheng, *Phys. Rev. B* **71**, 205302 (2005).
- DMITRIEV, M. T; *Priroda* **6**, 98 (1967).
- DUNNING, T. H., JR., *J. Chem. Phys.* **90**, 1007 (1989).

DZIDIC, I., Kebarle, P.. *J. Phys. Chem.* **74**, 1466 (1970).

EMELIN, S. E., V. S. Semenov, Bychkov, V. L., Belisheva, N. K., Kovshik, A. P.; *Zh. Tech. Fiz.* **42** (3), 23 (1997).

ESSENE, E.J, FISHER, DC; *Science* 234, 189 (1986).

FUSSMANN, G: *Leuchtende Plasmabälle im Labor. Künstlicher Kugelblitz*, in: *Physik in unserer Zeit* **39**, 246 (2008).

FRISCH, M. J., Trucks, G. W., Schlegel, H. B., Scuseria, G. E., Robb, M. A., Cheeseman, J. R., Montgomery, Jr., J. A., Vreven, T., Kudin, K. N., Burant, J. C., Millam, J. M., S. S. Iyengar, J. Tomasi, V. Barone, B. Mennucci, M. Cossi, G. Scalmani, N. Rega, G. A. Petersson, H. Nakatsuji, M. Hada, M. Ehara, K. Toyota, R. Fukuda, J. Hasegawa, M. Ishida, T. Nakajima, Y. Honda, O. Kitao, H. Nakai, M. Klene, X. Li, J. E. Knox, H. P. Hratchian, J. B. Cross, V. Bakken, C. Adamo, J. Jaramillo, R. Gomperts, R. E. Stratmann, O. Yazyev, A. J. Austin, R. Cammi, C. Pomelli, J. W. Ochterski, P. Y. Ayala, K. Morokuma, G. A. Voth, P. Salvador, J. J. Dannenberg, V. G. Zakrzewski, S. Dapprich, A. D. Daniels, M. C. Strain, O. Farkas, D. K. Malick, A. D. Rabuck, K. Raghavachari, J. B. Foresman, J. V. Ortiz, Q. Cui, A. G. Baboul, S. Clifford, J. Cioslowski, B. B. Stefanov, G. Liu, A. Liashenko, P. Piskorz, I. Komaromi, R. L. Martin, D. J. Fox, T. Keith, M. A. Al-Laham, C. Y. Peng, A. Nanayakkara, M. Challacombe, P. M. W. Gill, B. Johnson, W. Chen, M. W. Wong, C. Gonzalez, and J. A. Pople, 2004. Gaussian, Inc., Wallingford CT (Gaussian 03, Revision C.02).

FRONDEL, C; *SILICA Minerals*, Vol.3 of Dana's System of mineralogy (WILEY, NEW YORK, 1962), PP. 318-329.

GOLKA, R. K., Jr., *J. Geophys. Res.* **99**, 10 679 (1994).

GRIGOR'YEV, A. I.; *Sov. Met.Hydr.* **8**(8), 91(1978).

HELGAKER, T., Jørgensen, P., Olsen, J., 2000. *Molecular Electronic Structure Theory* (Wiley, Chichester).

HERRING, L.P. Hunt, ed., Noyes Publications, New Jersey (1990), p. 10.

HEHRE, W. J., R. F. Stewart, Pople, J. A., *J. Chem. Phys.* **51**, 2657 (1969).

HOHEMBERG, P.; Kohn, W.; *Phys. Rev. B.* **136**, 864 (1964).

IMIANITOV, I., D. Tikhii, *Beyond the edge of scientific laws*. Moscow: Atomizdat (1980).

JAIN, S. C., AGARWAL, S. K., BORLE, W. N., TATA, S.; *J. Phys. D: Appl. Phys.* **4**, 23 (1971).

KEBARLE, P., Searles, S. K., Zolla, A., Scarborough, J., Arshadi, M.; *J. Am. Chem. Soc.* **89**, 6393 (1967).

KENDALL, R. A., Dunning, Jr., T. H., Harrison, R. J., 1992. *J. Chem. Phys.* **96**, 6796.

LEE, C., Yang, W., Parr, R. G., *Phys. Rev. B* **37**, 785 (1988).

HAROLD, L. W., *Sci. Am.* **208**, 107 (1963).

MANSON, B.J.; *The Physics of Clouds* (Clarendon press, Oxford, 1971), p. 495.

MASON, D.; *Weather* **19**, 254 (1964).

MAIER, C.G., K. K. Kelley, *J. Am. Chem. Soc.* **54**, 3243 (1932).

MATTHEWS, R., *New Sci.* **2233**, 23 (2000).

MCNALLY, J. R. Jr., *Preliminary Report on Ball Lightning*: Report No. ORNL-3938, Oak Ridge National Laboratory, Oak Ridge, Tennessee (1966).

MENDENHALL, C. E.; *Phys. Rev.* **34**, 502 (1929).

MESHCHERYAKOV, Oleg. *Nanoscale Res. Lett.* **2** (3): 319 (2007).

MORGON, N. H.; Coutinho, K.; *Métodos de Química Teórica e Modelagem Molecular*. Editora livraria da física, São Paulo, 2007.

NOGA, J e R.J. Barlet, J. *Chem. Phys.* **86** 86, 7041 (1987).

OHTSUKI, Y. H., Ofuruton, H.; *Nature* **350**, 139 (1991).

PAULING, L. *Nature* **161**, 1019 (1948).

PERDEW, J. P. *Phys. Rev. B* **33**, 8822 (1986).

PERDEW, J. P.; Burke, K.; Wang, Y. *Phys. Rev. B* **54**, 16533 (1996).

PERDEW, J. P.; Burke, K.; Ernzerhof, M. *Phys. Rev. Lett.* **77**, 3865 (1996).

PERDEW, P.; Kurth, S.; Zupan, A.; Blaha, P. *Phys. Rev. Lett.* **82**, 12, 2544 (1999).

POPOV, Y. A.; *Priroda* **48** (12), 111(1959).

PROYNOV. E. I.; Vela, A.; Salahub, D. R. *Chem. Phys. Lett.* **230**, 419 (1994).

PURVIS, G. D., Bartlett, R. J., *J. Chem. Phys.* **76**, 1910 (1982).

RABINOWITZ, Mario, *Astroph. and Space. Sci.* **262** (4), 391 (1998).

RABINOWITZ, M., LITTLE BLACK HOLES: DARK MATTER AND BALL LIGHTNING. Disponível em: <<http://arxiv.org/ftp/astro-ph/papers/0212/0212251.pdf>>

RAKOV, V. A., Uman, M. A., *Lightning: Physics and Effects* (Cambridge University Press, Cambridge, England, 2003), Chap. 20.

RAYLE, W. D., *NASA Tech. Note, NASA-TN-D-3188, National Aeronautics and Space Administration*, Washington, DC (1966).

RED, A. E.; Weinstock, R. B.; Weinhold, F. *J. Chem. Phys.* **83**, 735 (1985).

RYBICKI, G. and Lightman, A. P., *Radiative Processes in Astrophysics*. New York: Wiley-Interscience, 3 (1979).

SÁNCHEZ-LAVEGA, A, PEREZ-HOYOS, S., HUESO, R; *Am. J. Phys.* **72**, 767 (2004).

SILBERG, P. A., *J. Geophys. Res.* **67**, 4941 (1962).

SINGER, S.; *Nature* **198**, 745 (1963).

SINGER, S.; *Nature* **350**, 108 (1991).

SINGER, S., *Phil. Trans. R. Soc. A* **360**, 5 (2002).

SPENCER, H. M. and J. L. Justice, *J. Am. Chem. Soc.* **56**, 2311 (1934).

STENHOFF, M. *Ball Lightning: An Unsolved Problem in Atmospheric Physics* (Springer-Verlag, New York, 1999).

STAKHANOV, I. P., *The physical nature of ball lightning*. Moscow: Atomizdat. (In Russian, CEGB Translation, CE 8244, 1979).

SWALIN, R.A., *Thermodynamics of solids*. New York: John Wiley & Sons, 1972.

TESSAN, M. de; *C. R. Hebd Siances Aucd Sci.* **49**, 189 (1859a).

TOSSELL, J.A., *Am. Mineral.* **65**, 163 (1980).

TURNER, D. J. *Phil. Trans. R. Soc. A* **360**, 107 (2002).

UMAN, M. A., *Lightning* (Dover, New York, 1969), I, Appendix C.

VIANA, J. D. M.; Fazzio, A.; Canuto, S. *Teoria Quântica de Moléculas e Sólidos – Simulação Computacional*, Ed. Livraria da Física, São Paulo, 2004.

VOLSKO, S. H.; Wilk, L; Nusair, M.; *Canadian Journal of Physics* **58**, 1200 (1980).

WARD, C. A., FANG, G.; *Phys. Rev E* **59** (1), 2 (1999).

WATSON, W. K. R.; *Nature* **185**, 449 (1960).

WEAST, R.C., *CRC Handbook of Chemistry and Physics*, 48th ed, CRC Press, Boca Raton, New York, Tokyo, p. D-26.

WOODING, E.R. *Nature* **262**, 279 (1976).

WOJOWSKY, M, *Foreign Science Bull.* **2** (4), Appendix II 52 (1966).

ANEXOS

O Objetivo aqui é mostrar as repercussões na imprensa e os artigos produzidos relativos a esta tese e também outros assuntos de nosso interesse que foram desenvolvidos durante o trabalho de doutorado.

Repercussões na imprensa

Foram poucos os trabalhos no Brasil que tiveram tanta repercussão na imprensa como o nosso o que projetou o nome da UFPE em grandes jornais nacionais e internacionais. Abaixo se encontra uma amostra das notícias veiculadas na internet, jornais e revistas.



[Log in](#) / [create account](#)

[article](#)
[discussion](#)
[edit this page](#)
[history](#)

Ball lightning

From Wikipedia, the free encyclopedia

Ball lightning may be an [atmospheric electrical](#) phenomenon, the physical nature of which is still [controversial](#). The term refers to reports of [luminous](#), usually [spherical](#) objects which vary from pea-sized to several meters in diameter. It is sometimes associated with [thunderstorms](#), but unlike [lightning](#) flashes, which last only a fraction of a second, ball lightning reportedly lasts many seconds.

Laboratory experiments have produced effects that are visually similar to reports of ball lightning, but it is presently unknown whether these are actually related to any naturally occurring phenomenon. Scientific data on natural ball lightning is scarce owing to its infrequency and unpredictability. The presumption of its existence is based on reported public sightings, and has therefore produced somewhat inconsistent findings. Given inconsistencies and the lack of reliable data, the true nature of ball lightning is still unknown.

^[1] Until recently, ball lightning was often regarded as a fantasy or a [hoax](#).^[2] Reports of the phenomenon were dismissed for lack of physical evidence, and were often regarded the same way as [UFO](#) sightings.^[1]

Natural ball lightning appears infrequently and unpredictably, and is therefore rarely (if ever truly) photographed. However, several purported photos and videos exist. Perhaps the most famous story of ball lightning unfolded when 18th-century physicist [Georg Wilhelm Richmann](#) installed a [lightning rod](#) in his home and was struck in the head - and killed - by a "pale blue ball of fire."^[3]

Some experiments describe covering the lit object with an inverted glass jar, which contains both the flame and the balls so that they will not damage the chamber walls. Other experimenters report that substituting a nickle for the match grants the best results. Some experimenters have posted instructions, photos, and videos of these experiments.^{[23][24][25]}

Silicon experiments [edit]

Some more recent experiments in 2007 involve shocking [silicon](#) wafers with electricity, which vaporizes the silicon and induces [oxidation](#) in the vapors. The visual effect can be described as small glowing, sparkling orbs that roll around a surface. Two Brazilian scientists, [Antonio Pavão](#) and [Gerson Paiva](#) of the [Federal University of Pernambuco](#)^[26] have reportedly consistently made small long-lasting balls using this method.^{[27][28]} These experiments stemmed from the theory that ball lightning is actually oxidized silicon vapors (see [vaporized silicon hypothesis](#), below).

Possible scientific explanations [edit]

An early attempt to explain ball lightning was recorded by [Nikola Tesla](#) in 1904,^[29] but currently, there is no widely accepted explanation of what exactly ball lightning is. Several theories have been advanced, however, since the phenomenon was brought into the scientific realm by the [French Academy](#) scientist [François Arago](#).^[30]

Vaporized silicon hypothesis [edit]

This hypothesis suggests that ball lightning consists of vaporized silicon burning through [oxidation](#). When lightning strikes earth's silica-rich soil, the silicon could be instantly vaporized, the vapor itself condensing and burning slowly in the oxygen in the surrounding air. A recently published experimental investigation of this effect by evaporating pure silicon with an electric arc reported



A photo purportedly depicting natural ball lightning, taken in 1987 by a student in Nagano, Japan.

Figura 53. FONTE http://en.wikipedia.org/wiki/Ball_lightning

05.01.2006

[Drucken](#) | [Senden](#) | [Bookmark](#) | [Leserbrief](#) | [Merken](#)

MYSTERIÖSE LICHTERSCHEINUNGEN

Schrift:  

Rätsel der Kugelblitze gelöst

Von *Markus Becker*

Erstmals haben Forscher Kugelblitze im Labor erzeugt, die mehrere Sekunden existiert haben - ähnlich lang wie ihre natürlichen Vorbilder. Damit könnte das jahrhundertealte Rätsel um die geisterhaften Lichterscheinungen gelöst sein.

Kugelblitze faszinieren und ängstigen die Menschen seit Jahrhunderten: Tausende Augenzeugenberichte beschreiben, wie die Lichtkugeln urplötzlich im Freien oder im Innern von Häusern auftauchen, durch Wände schweben oder bei Kontakt mit Menschen und Mobiliar explodieren.

[Abspielen](#) [Vergrößern](#)

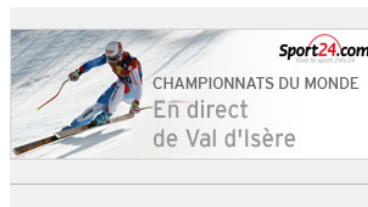
Foto: Pavão/Paiva

Wissenschaftler haben zwar eine Reihe von Theorien über das extrem seltene Phänomen aufgestellt, von denen einige kaum weniger bizarr sind als die Kugelblitze selbst. Doch der experimentelle Beweis wollte einfach nicht gelingen: Niemand konnte Kugelblitze künstlich erzeugen, die denen aus den Augenzeugenberichten ähneln. Alles, was Forscher zustande

brachten, waren Kugelblitze mit einer Lebensdauer von wenigen Sekundenbruchteilen.

Das Experiment von Antonio Pavão und Gerson Paiva von der Universität von Pernambuco scheinen die Theorie von Abrahamson und Dinniss nun zu bestätigen. Die Forscher haben 0,3 Millimeter dünne Siliziumscheiben zwischen zwei Elektroden platziert und sie mit Stromstärken von bis zu 149 Ampere traktiert. Nach einigen Sekunden schoben die Forscher die Elektroden etwas zur Seite, so dass im Zwischenraum ein elektrischer Lichtbogen entstand. Eine solche leuchtende elektrische Entladung tritt in der Natur als Blitz auf.

Des chercheurs brésiliens créent des « boules de foudre »



Dans l'album "SOS Météores", le professeur Mortimer avait été un témoin précoce de la création d'une boule de foudre. Crédits photo : DR

TOUT le monde garde en tête la célèbre image du professeur Tournesol, soulevé de terre par une boule de foudre, qui fait la couverture de *Tintin et les sept boules de cristal*. Le professeur Mortimer en fut lui aussi témoin dans l'album *SOS Météores*.

Selon l'hebdomadaire anglais *New Scientist*, ce mystérieux phénomène lumineux observé par des milliers de témoins, mais encore jamais formellement authentifié, vient d'être recréé en laboratoire par des chercheurs brésiliens.

L'équipe dirigée par Antonio Pavao et Gerson Paiva, de l'université fédérale de Pernambuco (Brésil), a eu l'idée de tester l'une des hypothèses les plus sérieuses émises à ce jour pour expliquer l'origine de ces bizarreries de la nature.

L'un de ses auteurs, John Abrahamson, de l'université de Canterbury, à Christchurch (Nouvelle-Zélande), postule en effet que les boules de feu se forment lorsque la foudre s'abat sur un sol riche en silice, le constituant

► TrovoLavoro

► TrovoAuto

► TrovoCasa

► TrovoViaggi

► Annunci

NEWS

Cronache

Politica

Esteri

Economia

Spettacoli e cultura

Cinema

Sport

Scienze

ViviMilano

Italian Life

中文版本

OPINIONI

Editoriali e commenti

Forum&Blog

Italians

Pubblico & Privato

Lettere al Corriere

Finora non si sapeva come si formassero le sfere di fuoco elettrizzate

I fulmini globulari non hanno piu' misteri

Due fisici brasiliani hanno riprodotto il meccanismo fisico e chimico che li genera . Allo studio apparsi per evitarli

BRASILIA - Si formano improvvisamente, nell'aria carica di elettricità, durante i violenti temporali: sono sfere di fuoco variopinte che danzano minacciosamente, sospese pochi metri sul terreno, talvolta irrompono nelle abitazioni, terrorizzando i malcapitati spettatori e, nei casi più sfortunati, uccidendoli. Gli scienziati li chiamano «fulmini globulari», per distinguerli dalle classiche saette che disegnano nel cielo luminosissime linee a zigzag; ma finora non sapevano spiegare da dove scaturissero. Ebbene, dopo due secoli e mezzo di esperimenti e di studi (a partire da Benjamin Franklin), il mistero dei temibili fulmini globulari è stato finalmente svelato. Due fisici sperimentali brasiliani, Antonio Pavo e Gerson Paiva, dell'Università Federale di Pernambuco (Brasile), hanno annunciato di avere riprodotto con successo nel loro laboratorio il processo di formazione dei fulmini globulari, basandosi su una teoria fisica precedentemente formulata dal loro collega statunitense Graham Hubler, dell'U.S. Naval Research Laboratory di Washington.

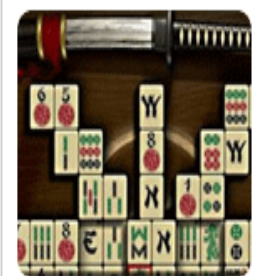
FENOMENO ELETTROCHIMICO - In termini molto semplici, la teoria prevede che i fulmini globulari siano il risultato di fenomeni elettrici e chimici.

STRUMENTI

📄 VERSIONE STAMPABILE

👍 I PIU' LETTI

✉ INVIA QUESTO ARTICOLO



Mahjong

Accoppia le tessere uguali in questo tradizionale gioco cinese.

Scopri tutti gli altri giochi gratis su Fueps!

CORRIERE DELLA SERA *it*
MORI E

Figura 56. FONTE:

http://www.corriere.it/Primo_Piano/Scienze_e_Tecnologie/2007/01_Gennaio/25/fulmini.shtml

Técnico administrativo ganha representação nos conselhos

Servidores terão três assentos nos Conselhos Administrativo e Universitário. Representantes serão escolhidos por meio de eleição ainda este semestre

▲ PÁGINA 5

Bolas de relâmpago em laboratório

Fotos: Passarinho

Os pesquisadores Gerson Paiva e Antonio Carlos Pavão, do Departamento de Química fundamental da UFPE, desenvolveram uma técnica de geração do fenômeno atmosférico conhecido como bolas de relâmpago ou bolas luminosas (foto), que normalmente aparecem durante temporais com trovões. Essa é a primeira vez que o fenômeno é reproduzido em laboratório com tempo de vida na ordem dos segundos. Bolas luminosas criadas em experimentos anteriores duravam apenas milésimos de segundo. A descoberta feita por Gerson Paiva, doutorando orientado pelo professor Antonio Carlos Pavão com o auxílio dos

professores do Departamento de Física Eider Alpes de Vasconcelos e Eronides da Silva Júnior (na foto) e de Odil Mendes Júnior, do Instituto Nacional de Pesquisas Espaciais (Inpe), foi divulgada no dia 10 de janeiro na revista inglesa *New Scientist* e no dia 11 no jornal alemão *Spiegel* online. O artigo dos professores foi selecionado para a prestigiosa publicação *Physical Review Letters*.



Ambulatório de

Pós-Graduação em

Universidade tem

Figura 57. FONTE: IN Campus (N. 107, Janeiro de 2007)

Ciência / Meio Ambiente

UFPE REPRODUZ RARO FENÔMENO ATMOSFÉRICO

EXPERIÊNCIA Equipe de físicos e químicos conseguiu, pela primeira vez, criar em laboratório bolas luminosas antes apenas vistas durante tempestades



Fenômeno atmosférico raro, de geração de bolas luminosas, foi reproduzido na Universidade Federal de Pernambuco (UFPE). Segundo a equipe, que publicará o feito este mês na prestigiosa revista científica *Physical Review Letters*, essa é a primeira vez que pesquisadores conseguem, depois de mais de 200 anos de tentativas, produzir em laboratório as bolas luminosas, normalmente relacionadas a tempestades.

Os pesquisadores dos Departamentos de Física e de Química Fundamental da UFPE utilizaram sílica para simular o fenômeno, também chamado relâmpago-bola e raios-bola, obtido pela primeira vez em setembro de 2005. A ideia de empregar a substância, encontrada na ansia, se baseou numa teoria científica formulada em 2000, segundo a qual as bolas luminosas teriam origem no ionexato do ar com o so-

nanômetro equivale a um bilionésimo de metro). "Essas nanopartículas se aglomeram, formando as bolas", esclarece. Embrões. As bolas obtidas na demonstração à imprensa tinham em torno de dois centímetros de diâmetro, mas a equipe afirma ter conseguido algumas do tamanho de uma bola de pingue-pongue, com cerca de quatro centímetros de diâmetro.

O tempo de duração também é recorde. Enquanto experiências similares as bolas não eram vistas por mais de 0,2 segundo, as da UFPE sobrevivem até oito segundos. Baseados na luz emitida pelas bolas, os pesquisadores também estimaram a temperatura. Têm dois mil graus kelvin, o equivalente a 1.700 graus centígrados. O químico Gerson Pádua, idealizador da experiência e, por isso, primeiro autor do artigo científico, assinado ainda pelo físico da UFPE de Guarara Elder de

Figura 58. FONTE: Jornal do Commercio (17 de Janeiro de 2007)

Laboratório da UFPE reproduz fenômeno

Uma máquina de solda e algumas partículas de silício prometem desvendar um mistério de mais de dois séculos de pesquisa. Associado à ocorrência de relâmpagos, o fenômeno natural das *bolas luminosas* foi reproduzido em laboratório por um grupo de cientistas da Universidade Federal de Pernambuco (UFPE). Com um equipamento simples, a equipe conseguiu simular um raio, dar origem às bolas luminosas e mantê-las "vivas" por cerca de oito segundos. Nenhum experimento realizado até então por

pesquisadores de várias partes do mundo - incluindo nomes como o do inventor Benjamin Franklin - tinha obtido resultado semelhante.

Também chamadas de raios bola e relâmpagos globulares, as bolas luminosas (*ball lightning*) despertam o interesse por serem um raro fenômeno atmosférico e existirem diversas teorias relacionadas às suas origens. Entre as hipóteses levantadas até agora estão a de origem nos pequenos buracos negros criados pelo Big Bang e em concentrações de gases iônicos. "As bolas luminosas

são intrigantes e muita gente tem relatado tê-las visto. O trabalho está na primeira fase, mas já podemos entender o fenômeno e fazer previsões sobre a temperatura e o comportamento das bolas", afirmou o químico e coordenador do estudo, professor Antônio Pavão.

Oxidação - A experiência no laboratório baseou-se na teoria proposta por John Abrahamson e James Dinniss, de 2000, que considera que as bolas surgem pela oxidação de aglomerados de nanopartículas de

silício encontradas no solo. As bolas surgiram como uma reação do calor do relâmpago recebido pelas partículas. "Na natureza, o raio fornece uma descarga elétrica de 10 a 100 mil ampères e de 100 milhões de volts. Nossa experiência conseguiu reproduzir o fenômeno com escalas reduzidas de 100 ampères e 23 volts", disse o químico e idealizador do estudo, Gerson Paiva.

Na natureza, as bolas alcançam uma altura de até 10 metros e duram entre cinco e 16 segundos. A experiência da UFPE obteve bolas com

cerca de cinco centímetros (como uma bola de tênis) que duraram uma média de oito segundos.

O equipamento utilizado custou em média R\$ 400 e uma apresentação será feita ao público, em breve, no museu de ciência Espaço Ciência. O estudo já foi publicado na revista *New Scientist* e sairá na publicação *Physical Review Letters*. Também fazem parte da equipe os físicos da UFPE, Elder Vasconcelos e Eronides da Silva Júnior, e o geofísico Odism Mendes Júnior do Instituto Nacional de Pesquisas Espaciais (Inpe).



BOLAS BRILHAM P

PRÉ-VESTIBULAR

Cursos de graça ainda têm vagas

Cursar matérias isoladas, estudar em escolas particulares e ter aulas com professores *pop stars*. Nem sempre esta combinação é pré-requisito para passar no vesti-

SARAMPO

SES investe em um caso da doença

A Secretaria Estadual de Saúde (SES) já investiu, neste ano, 12 casos de sarampo em Pernambuco de notificações. 11

Figura 59. FONTE: Diário de Pernambuco (17 de Janeiro de 2007)



Figura 60. FONTE: Folha de São Paulo

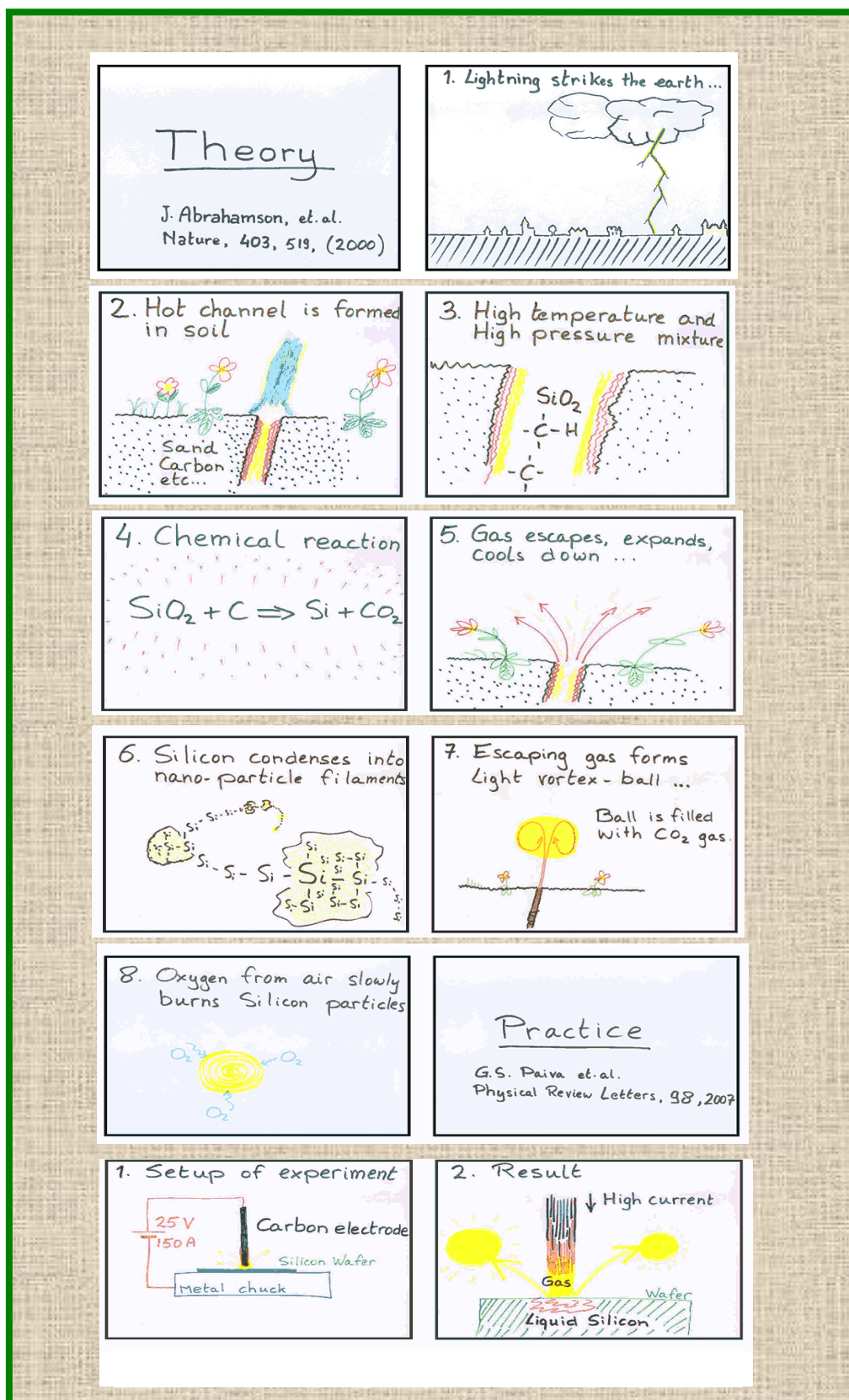


Figura 61. FONTE: <http://www.dos4ever.com/bolbliksem/bolbliksem.html>



5 notícias fantásticas da semana

Tamanho da letra **A-** **A+**



Quase um mês depois da morte de James Brown, nos Estados Unidos, o corpo do Rei da Soul Music ainda não foi enterrado. Ele é mantido dentro do caixão numa sala a baixa temperatura. A família do cantor está construindo um mausoléu que só deverá ficar pronto no mês que vem.

A Sociedade Zoológica de Londres lançou um programa para proteger alguns dos animais mais bizarros do mundo, como o simpático hipopótamo

pigmeu.

Estudantes de São Bernardo do Campo, em São Paulo, criaram um robzinho que expressa emoções com os olhos: vermelho é raiva, laranja é tristeza e verde é alegria. O robô pode ser controlado de outro ambiente.

Descoberto no interior da Paraíba um rapaz de 21 anos que mede 2,29 metros. Joelisson Fernandes da Silva é apenas sete centímetros mais baixo que o homem mais alto do mundo, o chinês Xi Shun, que estourou no Brasil no ano passado.

Cientistas da Universidade Federal de Pernambuco conseguiram reproduzir em laboratório relâmpagos esféricos, ou globulares, um dos fenômenos mais raros da natureza - e que muitas vezes é confundido com OVNI's.

Figura 62. FONTE: <http://fantastico.globo.com/Jornalismo/FANT/0,,MUL696430-15605,00.html>



Figura 63. FONTE: <http://globouniversidade.globo.com/GloboUniversidade/0,,8748-p-5-2008,00.html>



Figura 64. FONTE:

http://www.youtube.com/watch?v=8fbxQMDuVN4&feature=PlayList&p=A5B4897404F34F8B&index=3&playnext=3&playnext_from=PL



Figura 65. FONTE: <http://br.youtube.com/watch?v=QLTPELhKAYM>.



Figura 66. FONTE: <http://br.youtube.com/watch?v=KVDU-6opEqA&feature=related>

●最新サイエンス・レポート●

文＝君島史隆

写真＝©Antonio Pavão/Gerson Paiva

2007年1月、ブラジルのブラジリア大学
ふたりの科学者が実験室での
“火の玉生成”に成功した!!
約2年間の月日を費やしたこの実験は、
UFOや怪火の謎を解き明かすのか?

8秒間も浮遊する 火の玉の生成に成功!!

2007年1月、実験室で作られた
火の玉は、不規則に部屋の中を飛び回
り、科学者のジーンズに焼け焦げた穴
までつくってしまった。

ブラジルの公立ベルナンジーニョ大学
ふたりのブラジル人、物理学者アント
ニオ・パヴァオ
ンと博士課程の
学生ゲルソン・
バイーヴァは、
実験室の中で人
工的に電圧、つ

◆ピンポン大の火の玉生成に成
功した同じ実験。スピンしながら
5秒間浮遊した。

まり、火の玉”を作りだすことに成功
した。
もとより自然界での“火の玉”は、
嵐の日などによく見られた現象だった。
輪郭が地表に落ちると、二酸化ケイ素
を豊富に含む土壌によってシリコン蒸
気がつくられ、それが酸化された化学
エネルギーとなって空気中の酸素と結
合し、火の玉が発生する。
ふたりの科学者は、この現象を実験
室の中で再現するために約2年の月日
を費やした。彼らはシリコン蒸気をつ
くるために、シリコンウエアを挟んで、
厚さ350マイクロメートルの間隙で
2本の電極を置き、そこに電圧140
アンペアの電力を送り込んだ。

Figura 67. FONTE: Revista Japonesa de Física (Vol. 2, N.3, 2007)

O experimento sobre bolas luminosas produzidas na UFPE gerou críticas no Instituto Max Planck em 2008.

SPIEGEL ONLINE WISSENSCHAFT
NACHRICHTEN VIDEO ENGLISH EINESTAGES FORUM SPIEGEL WIS
Home | Politik | Wirtschaft | Panorama | Sport | Kultur | Netzwelt | Wissen:
Nachrichten > Wissenschaft > Natur
11.08.2008 Drucken | Senden | Bookmark | Feedback | Merken
DER SPIEGEL Schrift: - +
METEOROLOGIE
Feuerball aus der Pfütze
Denn nur die wenigsten Menschen haben wirklich je einen Kugelblitz zu Gesicht bekommen. Viele Wissenschaftler halten die Mär von dessen Existenz denn auch für Mumpitz. Belegbar schien wenig.


Doch nun hat der Berliner Plasmaphysiker Gerd Fußmann die vermeintliche Schimäre offenbar zum Leben erweckt - im Labor, mit einem "spottbilligen Versuchsaufbau". Über zwei Elektroden jagte der Forscher der Humboldt-Universität für den Bruchteil einer Sekunde mehrere tausend Volt in einen Bottich mit

Weit verblüffender findet der Physiker, dass eine Gruppe brasilianischer Wissenschaftler dem Fachpublikum beinahe zeitgleich zu seinen eigenen Forschungen eine völlig andere Kugelblitztheorie aufischt: Die Kollegen aus Südamerika sind davon überzeugt, dass bei einem normalen Blitzeinschlag unter günstigen Bedingungen reines Silizium entsteht.

Aus dem Halbmaterie wiederum gingen dann die sagenhaften Leuchtbomben hervor. Im Laborversuch züchteten die Brasilianer beeindruckende Exemplare, die sogar behende unter Kabeln herkriechen können. Einziger Schönheitsfehler: Ihre Kugelblitze aus der Retorte stimmen in wesentlichen Punkten nicht mit dem Erscheinungsbild der echten überein.

Die Kügelchen aus dem südamerikanischen Labor rollten über den Boden und waren im Durchmesser nicht größer als vier Zentimeter. Die Vorbilder aus der Natur erreichen hingegen mehr als das 20fache an Umfang und schweben nach einhellig verbürgter Meinung aller Zeugen durch die Luft.

Figura 68. FONTE: <http://wissen.spiegel.de/wissen/dokument/dokument.html?id=58853013&top=SPIEGEL>

A resposta às críticas acima (Der Spiegel) veio logo depois no Jornal do Comércio

Jornal do Comércio | Recife, 2 de novembro de 2008 | domingo

ciências

» ciência / meio ambiente

» GERAÇÃO DE BOLAS LUMINOSAS

Cientistas disputam autoria de experiência

Brasileiros, alemães e israelenses dizem que alcançaram o feito

Cientistas alemães estão contestando experiência realizada na Universidade Federal de Pernambuco (UFPE) que reproduziu, pela primeira vez em laboratório, o fenômeno de geração de bolas luminosas. O grupo, do Instituto Max Planck de Física de Plasma e da Universidade Humboldt, em Berlim, alega que as esferas – geradas a partir do aquecimento do silício – são muito pequenas.

Para simular o fenômeno, os pesquisadores dos Departamentos de Química e de Física da UFPE recorreram a uma teoria formulada em 2000 segundo a qual as bolas luminosas se originam do impacto dos raios com o solo, ou seja, a partir de um processo de combustão (reação com oxigênio). Como o principal componente da areia é o silício, eles esquentaram pastilhas contendo a substância.

Isso foi em janeiro de 2007. Agora, quase dois anos depois, a equipe alemã reivindica o posto de primeira a conseguir reproduzir o fe-



Natal dos Sonhos

TV LCD 32" 32A130 S0RE 3 - SAMSUNG
A vista R\$ 1.399,00
6+10 de R\$ **199,90**

CENTRÍFUGA FRUTAS JUICER 010854 - WALITA
A vista R\$ 199,00

Figura 69. FONTE: Jornal do Comércio (2 de novembro de 2008).

microwaves were directed toward it. Figure 2 compares theoretical simulations with those experimental results, revealing deviations from the ideal. In each case, as waves propagate through the cloak and approach the inner radius, the wavefronts begin to lag with a concomitant compression in wavelength and a reduction in intensity. The

penalty for using the reduced parameter set for ϵ and μ is nonzero reflectance of the incident radiation, as pictured in figures 2b and 2d. Real materials, of course, also absorb some fraction of incident radiation. Nevertheless, the device dramatically reduces backward and forward scattering of microwaves, compared with the case where the

waves are incident to an uncloaked copper cylinder (figure 2c).

Other researchers have recently proposed alternative invisibility schemes.² In 2005 the University of Pennsylvania's Andrea Alù and Nader Engheta proposed the use of a plasmonic shell that suppresses scattering by resonating in tune with the incident radiation. The

physics update

Supplementary material related to these items can be found at www.physicstoday.org.

Ball lightning in the lab. Seen infrequently and never scientifically studied in nature, the meandering globes of light known as ball lightning have nevertheless been reported thousands of times over the past few centuries, usually in the warm summer months when thunderstorms abound. Many dozens of theories



have arisen, but few can explain the most puzzling properties of the atmospheric phenomenon—the balls, which can range in size from 1 cm to 1 m, last up to 10 seconds and move unpredictably through the air. They have even entered houses through chimneys and squeezed through small openings. One recent theory says that ball lightning arises from silicon nanoparticles that form in the soil when silicon oxides react with carbon. When a lightning strike vaporizes the oxides into metallic silicon, the vapor subsequently condenses in the air, electrostatically bound and glowing with the heat of oxidation. A team of physicists and chemists in Brazil has now given credence to that so-called Abrahamson-Dinniss theory. They mounted a silicon wafer on a steel plate and completed an electric circuit by touching the wafer with a movable tungsten or graphite electrode. When the electrode was slowly removed, an electrical arc formed with hot tiny silicon fragments flying everywhere. But at a separation of about 1–2 mm, luminous

spheres formed and also flew off. The resulting balls were 1–4 cm across, had lifetimes up to 8 seconds, moved at speeds of 5–30 cm/s, and decayed with no trace. The figures show one such ball, at 80-ms intervals, passing through a small gap under an electrical conductor. The experiments were done in conditions not very different from those found in nature: room temperature, normal atmospheric pressure, and 70% relative humidity. (G. S. Paiva et al., *Phys. Rev. Lett.*, in press.) —SGS

Guided atom laser. A trapped cloud of atoms chilled into a Bose-Einstein condensate is a single coherent structure. When extracted from the trap and allowed to propagate, it acts like a laser beam, except that the coherent waves are of matter rather than light. In a typical atom laser, the atoms are released and accelerated by gravity, a process that decreases the atom laser's de Broglie wavelength. Now, physicists from the Institut d'Optique Graduate School in Palaiseau, France, have coupled atoms from an optomagnetic BEC trap to a horizontal optical waveguide, which generated a quasi-continuous atom laser, impervious to gravity and having a constant de Broglie wavelength of 0.5 μm . The RF coupling converts the atoms from a magnetic to a nonmagnetic state, and they emerge with a typical velocity of 9 mm/s and a velocity spread of just a few $\mu\text{m/s}$, driven along a confining beam of light, as shown in the figure. Changing the RF coupler's frequency can tune the de Broglie wavelength, and changing its power can alter the atom laser's density. In addition, the

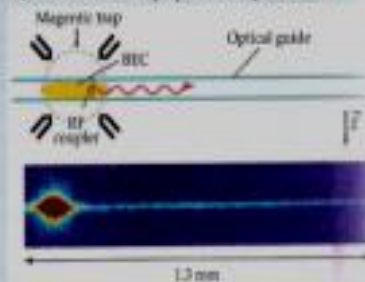


Figura 70. FONTE: Physics Today (Fevereiro de 2007)

Lightning balls created in the lab

10 January 2007 by [Hazel Muir](#)

Magazine issue [2586](#). [Subscribe](#) and get 4 free issues.

Ball lightning could soon lose its status as a mystery, now that a team in Brazil has cooked up a simple recipe for making similar eerie orbs of light in the lab, even getting them to bounce around for several seconds. [Watch a movie of the bouncing balls here](#).

Thousands of people have reported seeing ball lightning, a luminous sphere that sometimes appears during thunderstorms. It is typically the size of a grapefruit and lasts for a few seconds or minutes, sometimes hovering, even bouncing along the ground.

One eyewitness saw a glowing ball burn through the screen door of a house in Oregon, navigate down to the basement and wreck an old mangle, while in another report, a similar orb bounced on a Russian teacher's head more than 20 times before vanishing.

One theory suggests that ball lightning is a highly ionised blob of plasma held together by its own magnetic fields, while an exotic explanation claims the cause is [mini black holes created in the big bang](#).

A more down-to-earth theory, proposed by John Abrahamson and James Dinniss at the University of Canterbury in Christchurch, New Zealand, is that ball lightning forms when lightning strikes soil, turning any silica in the soil into pure silicon vapour. As the vapour cools, the silicon condenses into a floating aerosol bound into a ball by charges that gather on its surface, and it glows with the heat of silicon recombining with oxygen.

To test this idea, a team led by Antônio Pavão and Gerson Paiva from the Federal University of Pernambuco in Brazil took wafers of silicon just 350 micrometres thick, placed them between two electrodes and zapped them with currents of up to 140 amps. Then over a couple of seconds, they moved the electrodes slightly apart, creating an electrical arc that vaporised the silicon.

PRINT SEND SHARE



Figura 71. FONTE: New Scientist (10 de Janeiro de 2007)

NATIONAL GEOGRAPHIC NEWS

REPORTING YOUR WORLD DAILY

Wed

[MAIN](#)
[ANIMAL NEWS](#)
[ANCIENT WORLD](#)
[ENVIRONMENT NEWS](#)
[CULTURES NEWS](#)
[SPACE/TECH NEWS](#)
[WEI](#)

Ball Lightning Mystery Solved? Electrical Phenomenon Created in Lab

Brian Handwerk
for National Geographic News
January 22, 2007

Brazilian scientists may have solved a shocking scientific mystery by creating ball lightning in the lab.

Physicist Antonio Pavão and doctoral student Gerson Paiva of the Federal University of Pernambuco have created orbs of electricity about the size of golf balls that mimic natural ball lightning.

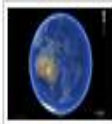


The fluffy-looking spheres spin, throw off sparks, and vibrate.

They also move erratically about the lab, rolling around on the floor, bouncing off objects, and burning whatever they touch (see *enlarged photo for stills from laboratory video*)



LATEST PHOTO
Brilliant New
Found



LATEST VIDEO
Google Earth

Most Viewed News

ADVERTISEMENT

Unlock the secrets

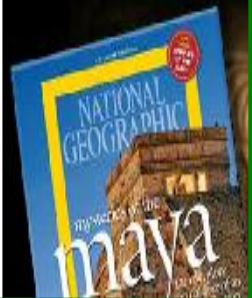


Figura 72. FONTE: <http://news.nationalgeographic.com/news/2007/01/070122-ball-lightning.html>

Trabalhos científicos de docentes da UFPE recebem apoio da Força Aérea Americana

13/08/2007

Por Mônica Melo, da Ascom/UFPE

Dois projetos de pesquisa da UFPE foram selecionados para receber apoio financeiro da Força Aérea Americana, através do Air Force Office of Science and Research (AFOSR). Na última semana, James Fillerup, engenheiro aeronáutico representante do AFOSR, visitou as dependências do Grupo de Pesquisa em Redes e Telecomunicações (GPRT), do Centro de Informática (CIn), e do Departamento de Física da Universidade. Na ocasião, o membro da Força Aérea participou de reuniões com os docentes beneficiados com os recursos e conheceu as instalações onde os projetos estão sendo desenvolvidos.

O AFOSR lançou, no ano passado, edital de apoio a projetos de pesquisa latino-americanos em temas de fronteiras científicas. Um dos trabalhos inscritos e contemplados durante três anos com uma bolsa anual no valor de US\$ 25 mil é desenvolvido pelo professor Djamel Sadok, do Centro de Informática e coordenador do GPRT da Universidade. Intitulado "O uso da tecnologia de Redes de Ambientes em cenários de emergência", o projeto trata da possibilidade de formação de redes auto-configuráveis, ou seja, com o mínimo de intervenção humana, para troca de informações multimídia numa região onde não exista uma infra-estrutura pré-estabelecida.

O pesquisador acredita que o trabalho poderia ser aplicado de forma estratégica pela Força Aérea Americana em operações militares: "Soldados numa região desconhecida poderiam se agregar e trocar informações dinamicamente através de capacetes com câmeras e de dispositivos avançados, como PDAs e sensores". O estudioso destaca, ainda, que a rede também pode ser montada em um cenário civil. "A interação dos usuários através da tecnologia pode acontecer em situações de emergência, como em operações de resgate ou em casos de desastres naturais", explica.

O segundo projeto é conduzido pelo professor Anderson Gomes, do Departamento de Física. A pesquisa é sobre dispositivos baseados em materiais poliméricos de dimensões nanométricas. Gomes objetiva compreender os fenômenos básicos que poderão levar a aplicações na área de fotodetektors. O docente defende que o projeto poderá ser utilizado de forma abrangente pelo AFOSR: "O fato de ser financiado pela Força Aérea Americana não significa que os resultados terão aplicação apenas na área militar".

O AFOSR também se interessou pelo financiamento do projeto "Ball-Lightning" (Relâmpagos Esféricos), fruto da tese de doutorado de Gerson Silva Paiva, orientada pelo professor Antonio Carlos Pavão, do Departamento de Química Fundamental. Entretanto, o docente pretende levar adiante os projetos traçados inicialmente em parceria com a Universidade de São Paulo (USP) e o Instituto Nacional de Pesquisas Espaciais (Inpe).

Figura 73. FONTE: <http://www.ufpe.br/new/visualizar.php?id=6329>

Production of Ball-Lightning-Like Luminous Balls by Electrical Discharges in Silicon

Gerson Silva Paiva and Antonio Carlos Pavão

Departamento de Química Fundamental, Universidade Federal de Pernambuco, 50740-540, Recife, Pernambuco, Brazil

Elder Alpes de Vasconcelos*

Centro Acadêmico do Agreste, Universidade Federal de Pernambuco, 55002-970, Caruaru, Pernambuco, Brazil

Odim Mendes, Jr.

Departamento de Geofísica Espacial, Instituto Nacional de Pesquisas Espaciais, 12245-970, São José dos Campos, São Paulo, Brazil

Eronides Felisberto da Silva, Jr.

Departamento de Física, Universidade Federal de Pernambuco, 50670-901, Recife, Pernambuco, Brazil

(Received 10 June 2006; published 24 January 2007)

We performed electric arc discharges in pure Si to generate luminous balls with lifetime in the order of seconds and several properties usually reported for natural ball lightning. This simple experiment does not rely on energy sources and excitation mechanisms that are improbable in the natural phenomenon and clearly demonstrates the role of vaporization and oxidation of Si, as proposed by the Abrahamson-Dinniss theory for ball-lightning formation.

DOI: [10.1103/PhysRevLett.98.048501](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.98.048501)

PACS numbers: 92.60.Pw, 52.80.Mg

Introduction.—The properties attributed to the ball-lightning phenomenon have been deduced from reports collected from hundreds of witnesses in the past two centuries [1–13]. No existing theory or model can account for all (and sometimes contradictory) observations of ball lightning. Different mechanisms able to generate luminous balls with similar appearance can be imagined and this gave rise to a variety of theories for the origin of ball lightning. A recent theory that has attracted great attention was proposed by Abrahamson and Dinniss [5–8]. They proposed that ball lightning is due to oxidation of Si nanoparticles in the atmosphere. The Si nanoparticles are formed as a result of the reaction of Si oxides and carbon in the soil. At the high temperatures created by the lightning strike, the carbon in the soil chemically reduces the Si oxides to the vaporized, metallic form of Si: $\text{SiO}_2 + 2\text{C} \rightarrow \text{Si} + 2\text{CO}$. As the hot vapor cools in the atmosphere, the Si condenses into an aerosol of nanometer-sized Si particles in the air. Electrical charges created in the heat gather around the surface of aerosol, binding it together and the resulting ball begins to glow with the heat of the Si oxidation in the atmosphere: $\text{Si} + \text{O}_2 \rightarrow \text{SiO}_2$. This model has been extended by Abrahamson to include a broad range of starting materials: from soil, or soil and wood, to also include metal and plastic or metal and wood [8].

Laboratory experiments have been aimed at testing one particular mechanism of ball formation. For instance, Barry tested the combustion mechanism and observed fireballs by triggering discharges in atmospheres containing small amounts of hydrocarbons [14]. Silberg [15] and Golka, Jr. [16] obtained luminous balls by switching high currents through metal electrodes. Recently, fireballs have been obtained using microwave excitation [17,18].

However, fireballs obtained by microwaves have short lifetime after the microwave source is removed and it is not likely that in the natural phenomenon there is a supply of microwave energy appropriate for production of fireballs with the long lifetimes observed (seconds or tens of seconds). Abrahamson tested his model by means of high voltage electrical discharges into soil samples, but none of the tests produced luminous balls [8]. In this work, we tested Abrahamson's theory by vaporizing, at normal atmospheric pressure, small pieces of highly pure Si wafers by an electric arc. The arc generated by the interruption of the electric circuit results in very high temperatures, therefore melting or vaporizing locally the Si pieces. We were able to generate luminous balls that have long lifetimes and several of the properties usually reported for natural ball lightning.

Experimental details.—We used pieces of 2-inch diameter, (111) or (100), 0.02 to 1 Ω cm resistivity, *p*-type doped, $350 \mu\text{m} \pm 50 \mu\text{m}$ thick Si wafers placed on a 5 mm thick $1000 \times 1000 \text{ mm}^2$ flat steel plate as the base electrode and a tungsten (or graphite) top electrode, as shown in Fig. 1(a). The top electrode is 4 mm in diameter and 30 cm long. The voltage at the secondary is in the range from 20 to 25 V and the current varies from 100 to 140 A. The top electrode is movable and is hand-operated. The operator gently touches the Si piece with the top electrode and closes the circuit, as shown in Fig. 1(b). Then, the top electrode is raised up to a distance of 1 to 2 mm, approximately. An electrical arc is formed during the upraising movement, as shown in Fig. 1(c). During the upraising movement of the top electrode, hot-glowing fragments and, eventually, the ball-lightning-like luminous balls fly away in all directions. The arc is then extinguished

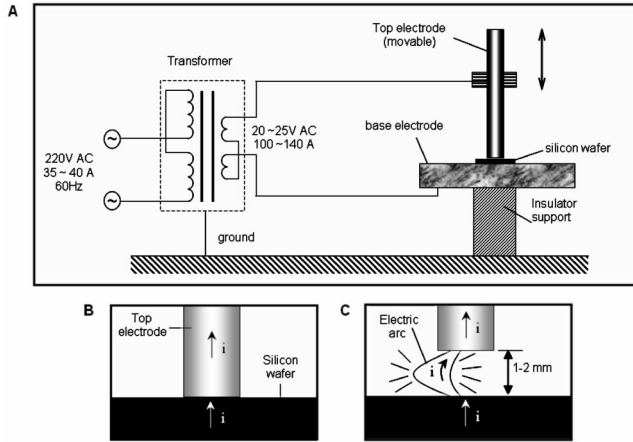


FIG. 1. (a) Experimental arrangement showing the power supply, electrode geometry and the Si wafer. (b) The top electrode is lowered until it touches the Si piece and closes the circuit. (c) The top electrode is raised up to a distance of 1 to 2 mm, approximately. An electrical arc is formed during this upraising movement. Hot-glowing fragments and, eventually, ball-lightning-like luminous balls fly away in all directions.

by moving the top electrode farther from the base electrode. This whole procedure should take 1 to 2 sec, approximately. We filmed the experiments with a Sony TRV130 digital camera. We observed the surface of the Si pieces subjected to discharges by scanning electron microscopy (SEM) after discharge using a JEOL JSM-5900. These surfaces were also scratched and the residues were analyzed in a Fourier Transform Infrared (FT-IR) system operating in transmission mode to determine the composition of the chains of particles observed in the SEM images. The discharges were performed at 29 °C room temperature and a relative humidity of 70%.

Results and discussion.—Video clips (supplementary videos 1–6) illustrating the experiment and the features of the balls are available [19]. The supplementary video 1 shows discharges which did not produce luminous balls. The supplementary videos 2–6 show discharges which produced luminous balls. Figures 2–4 consist in video frames selected from supplementary videos 2–4. Many small, hot-glowing fragments fly away in all directions during the discharge. It is clear that the luminous balls

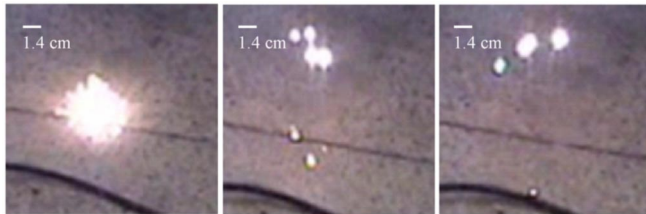


FIG. 2 (color online). Successive video frames showing the luminous balls bouncing off the ground. Time interval between the frames is 80 ms. See also the supplementary video 2 [19].

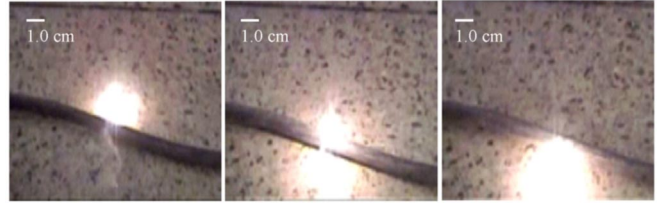


FIG. 3 (color online). Successive video frames showing a luminous ball passing through a small gap under an electrical conductor. Time interval between the frames is 80 ms. See also the supplementary video 3 [19].

resembling the ball-lightning phenomenon have a very distinct behavior. Their apparent diameter is in the range from 1–4 cm, much bigger than a typical fragment. Also, their lifetime may be up to 8 s, whereas the fragments cool very quickly, in 1 s approximately. Moreover, the luminous balls have properties that are similar to the properties of the balls observed in the natural phenomenon. Table I shows a comparison of the properties of luminous balls in this experiment with the properties observed in natural ball lightning [9,11]. We prepared Table I based on Ref. [9], which contains two collections of observations from different sources, namely, collection 1 and collection 2. Observations in collection 1 were reported by correspondence to the authors of [9] themselves, whereas the observations in collection 2 were organized by the Russian Ball-Lightning Committee. The convention in Table I is: (1c) stands for observation (c) from collection (1), (2c) means observation (c) from collection (2), and so on.

Figure 2 (from supplementary video 2) shows that the ball bounces off and moves erratically on the ground, sometimes breaking up in two or more smaller balls. The glowing balls sometimes jump to an height between 5 and 20 cm. Their estimated velocity is in a range from 5 to 30 cm/s. Figure 3 (from supplementary video 3) shows that one of these glowing balls passed through a small gap under an electrical conductor, squeezing through a space smaller than its apparent diameter. This behavior can be related with the ability of the natural ball lightning to penetrate through little gaps, according to several eyewitnesses [9]. The balls leave smoke trails above it. The balls seem to be spinning because the smoke trails tend to form a

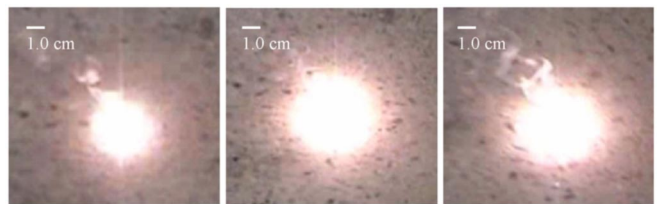


FIG. 4 (color online). Successive video frames showing a luminous ball leaving spiraling smoke trails above it. Time interval between the frames is 80 ms. See also supplementary video 4 [19].

TABLE I. Comparison between artificial balls and natural balls.

Property of the artificial luminous balls in this experiment	Eyewitness report describing similar property in natural balls ^a
To move over an extended, erratic path, sometimes with varying speeds	1c 1g 1n 2u
To subdivide into smaller balls	2c 2h
Vibrating surface, sparks, “fluff-cotton-wool” appearance	1g 1j 2e 2l 2n 2o 2u
To roll, to bounce off ground or solid objects	1c 1g 1l 1p 1f 2j 2h 2q
To squeeze into confined spaces	1j 2d 2p 2q 2s
To spin	1g 1n 1r
To burn objects upon contact	1i
Bright bluish-white or orange-white color	1i 1l 1m 1o 2k 2p 2u
Spherical in shape without well defined boundaries	2j 2n 2p 2q 2r 2s
Lifetime 2 to 5 seconds	1j 2j 2k

^aConvention: 1c—collection (1), observation (c). 2c—collection (2), observation (c). Collections included in Ref. [9], as explained in the text.

spiral, as shown in Fig. 4 (from supplementary video 4). Also, inclination changes in this rotational axis (vertical to horizontal, for instance) may be responsible for the sudden increase in speed and changes in direction observed in their movement, as can be noticed in supplementary video 3. The luminous balls behave like a jumping, elastic ball with glowing jets off its turbulent surface that apparently impulse it forward or sideways. These balls are hot (they burned polystyrene Styrofoam upon contact and ignited ethanol-imbibed cotton) and decay leaving no trace.

The SEM images of the surface of control samples not exposed to electrical discharges is regular and without holes or particles [Fig. 5(a)]. On the other hand, the surface of the samples subjected to electrical discharges, shows holes [Figs. 5(b) and 5(c)] and chains of micrometer-sized particles [Fig. 5(d)]. The holes indicate that the discharge has penetrated beneath the wafer surface and caused melting or vaporization of the material. Lightning strikes have been known to create glassy walled, hollow tubes just under the ground surface. The tubes, known as fulgurites, form where lightning melts and vaporizes soil along their paths. Some researchers have suggested that materials from such cavities might play a role in ball lightning. Almost three decades ago, Andrianov and Sinitsyn [20] proposed that the glowing material of ball lightning is generated during the formation of fulgurites. The FT-IR

spectrum of the particles shown in Fig. 5(d) had a strong absorption band in the 1103 cm^{-1} region (Si-O stretching), thus confirming that these particles are composed by SiO_2 , probably formed by the oxidation of the vaporized or molten Si.

In summary, this experiment has four important features: (1) It does not rely on energy sources and excitation mechanisms which are improbable in the natural phenomenon. (2) It clearly demonstrates the role played by the vaporization and oxidation of Si, as proposed by the Abrahamson-Dinniss theory for ball-lightning formation. (3) It generates luminous balls with long lifetimes (up to 8 sec) and several properties observed in the natural phenomenon (10 properties, at least), and (4) it is very simple.

We would like to discuss two limitations of this experiment. First, the production of the luminous balls is not under complete control. Second, free-floating balls were not observed. The lack of precise control of the production of the luminous balls is a common characteristic shared by many ball-lightning experiments. This reflects our limited understanding of the various chemical and physical processes triggered by the discharges. For example, Bychkov reports that a red-white ball resembling ball lightning appeared after 450–500 trial discharges during an experiment involving glass and wood [21]. In our experiments, we observed that the temperature and movements of the

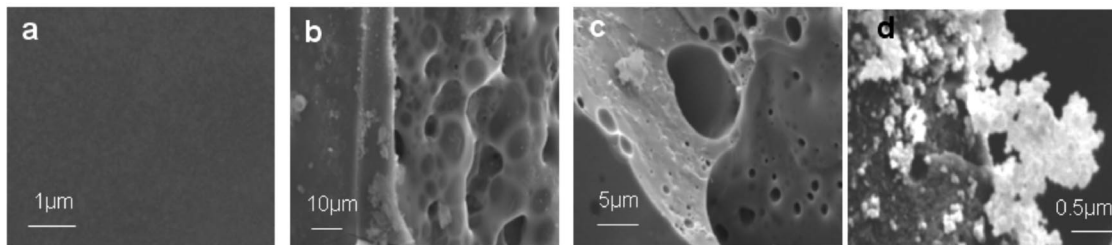


FIG. 5. SEM of the Si wafer before (a) and after electrical discharge (b),(c),(d). The surface of the samples subjected to electrical discharges shows holes (b),(c) and chains of micrometer-sized particles (d).

top electrode are somehow related with the production of the luminous balls. The balls only appear after the top electrode is glowing hot. The movements of the top electrode also influence. The top electrode is movable and is hand operated. The operator touches the wafer closing the circuit, and then raises the top electrode up to a distance of 1 to 2 mm, approximately. An electrical arc is formed when the contact is broken during the upraising movement of the top electrode. Hot-glowing fragments and, eventually, the ball-lightning-like luminous balls fly away. The arc is then extinguished by moving the top electrode farther from the base electrode. This whole procedure should take 1 to 2 seconds, approximately. If the up and down movements of the top electrode are too fast or too slow, the luminous balls do not appear. In order to improve the reproducibility of the up and down movements of the top electrode, one can use some kind of electrically-driven mechanical arm. In fact, we made some preliminary studies with the top electrode connected to a relay armature and observed improved reproducibility in the production of luminous balls. Our statistics (with the hand-operated top electrode) is approximately 1 event out of 30 trials.

Free-floating balls were not generated by our experiments. In the context of Abrahamson's theory, ball lightning is a network of nanoparticles being oxidized by the surroundings. It is reasonable to admit that such a network may have different density depending on particle size, network morphology, etc. In addition, external forces generated by electric fields or by the wind, for example, may change its buoyancy. Possibly, the oxidizing networks generated in our experiments are too dense to float. We are currently investigating the effects of the external forces, as well as changes in discharge energy and materials to better understand this issue.

To compare these results with those using a non-Si electrode, we performed similar experiments replacing the Si wafers by: (1) Al and Cu foils, (2) salty water, (3) dry and wet SiO₂ microspheres (the type used for sand blasting), (4) moistened wood and (5) a mixture of moistened wood and SiO₂ microspheres. The conductivity values of these materials are very different from the Si wafers, so we subjected each one of these materials to various combinations of voltage and current to ensure that we explored a reasonably wide range of discharge powers. None of these materials produced luminous balls with the peculiar behavior observed when the pieces of Si wafers are used.

Conclusions.—Low voltage electric arc discharges in pure Si can generate luminous balls with several of the properties usually reported for natural ball lightning. We discussed the main advantages and limitations of this

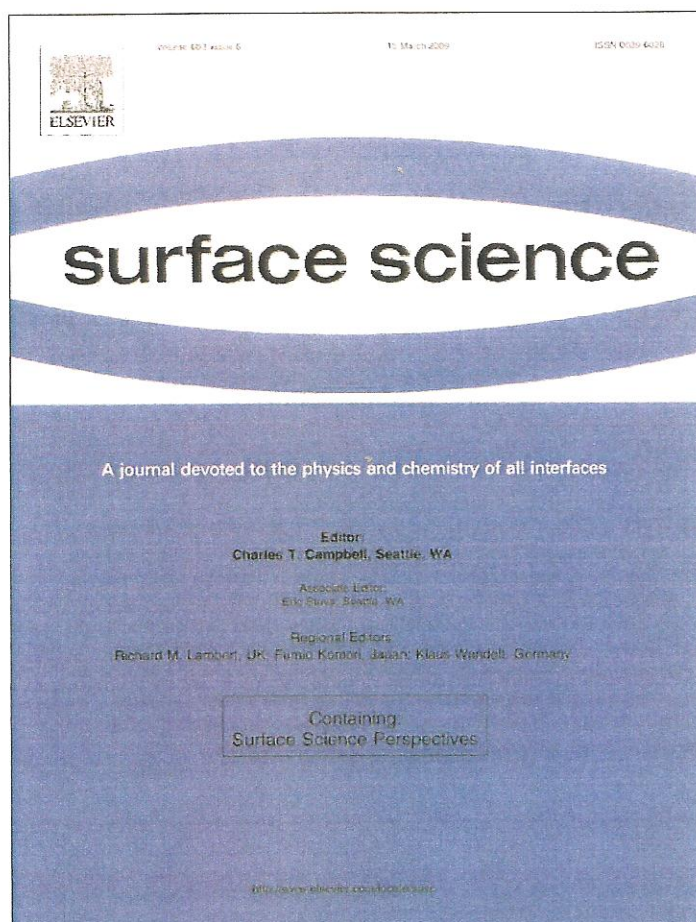
experiment in the framework of Abrahamson-Dinniss theory of ball lightning. We propose that the use of pure Si wafers probably optimized the evaporation of Si and favored the formation of the oxidizing Si nanoparticles networks predicted by the theory, so that ball-lightning-like luminous balls could appear associated with discharges involving currents much lower than expected in normal lightning strikes.

The authors are grateful to Giovanni R.R. Barros (Departamento de Engenharia Elétrica e Sistemas de Potência-Universidade Federal de Pernambuco) and Wellington Lucena for their comments and help during the experiments, Eliete Barros by infrared analysis, and Francisco Rangel for microscope investigation. This work is supported by the Brazilian agencies CAPES and CNPq.

*Corresponding author.

- [1] S. Singer, *Nature* (London) **198**, 745 (1963).
- [2] S. Singer, *Nature* (London) **350**, 108 (1991).
- [3] S. Singer, *Phil. Trans. R. Soc. A* **360**, 5 (2002).
- [4] D.J. Turner, *Phil. Trans. R. Soc. A* **360**, 107 (2002).
- [5] J. Abrahamson and J. Dinniss, *Nature* (London) **403**, 519 (2000).
- [6] J. Abrahamson, *Phys. World* **15**, 22 (2002).
- [7] R. Matthews, *New Sci.* **2233**, 23 (2000).
- [8] J. Abrahamson, *Phil. Trans. R. Soc. A* **360**, 61 (2002).
- [9] J. Abrahamson, A.V. Bychkov, and V.L. Bychkov, *Phil. Trans. R. Soc. A* **360**, 11 (2002).
- [10] M.A. Uman, *Lightning* (Dover, New York, 1969), Appendix C.
- [11] M. Stenhoff, *Ball Lightning: An Unsolved Problem in Atmospheric Physics* (Springer-Verlag, New York, 1999).
- [12] J.D. Barry, *Ball Lightning and Bead Lightning: Extreme Forms of Atmospheric Electricity* (Kluwer Academic, Dordrecht, 1980).
- [13] V.A. Rakov and M.A. Uman, *Lightning: Physics and Effects* (Cambridge University Press, Cambridge, England, 2003), Chap. 20.
- [14] J.D. Barry, *J. Atmos. Terr. Phys.* **30**, 313 (1968).
- [15] P.A. Silberg, *J. Geophys. Res.* **67**, 4941 (1962).
- [16] R.K. Golka, Jr., *J. Geophys. Res.* **99**, 10 679 (1994).
- [17] Y.H. Ohtsuki and H. Ofuruton, *Nature* (London) **350**, 139 (1991).
- [18] V. Dikhtyar and E. Jerby, *Phys. Rev. Lett.* **96**, 045002 (2006).
- [19] See EPAPS Document No. E-PRLTAO-98-047705 for video clips showing the experiment and the luminous balls. For more information on EPAPS, see <http://www.aip.org/pubservs/epaps.html>.
- [20] A.M. Andrianov and V.I. Sinitsyn, *Sov. Phys. Tech. Phys.* **22**, 1342 (1977).
- [21] V.L. Bychkov, *Phil. Trans. R. Soc. A* **360**, 37 (2002).

Provided for non-commercial research and education use.
Not for reproduction, distribution or commercial use.



This article appeared in a journal published by Elsevier. The attached copy is furnished to the author for internal non-commercial research and education use, including for instruction at the authors institution and sharing with colleagues.

Other uses, including reproduction and distribution, or selling or licensing copies, or posting to personal, institutional or third party websites are prohibited.

In most cases authors are permitted to post their version of the article (e.g. in Word or Tex form) to their personal website or institutional repository. Authors requiring further information regarding Elsevier's archiving and manuscript policies are encouraged to visit:

<http://www.elsevier.com/copyright>



A molecule detector: Adsorbate induced conductance gap change of ultra-thin silicon nanowire

Y.H. Zhang^a, X.Q. Zhang^b, H. Li^b, C.A. Taft^{a,*}, G. Paiva^c

^a Centro Brasileiro de pesquisas Físicas, Rua Dr. Xavier Sigaud, 150, 22290 Rio de Janeiro, Brazil

^b Physics Department, Ocean University of China, Qingdao, Shandong 266100, China

^c Departamento de Química Fundamental, Universidade Federal de Pernambuco, Recife, PE 50740-540, Brazil

ARTICLE INFO

Article history:

Received 11 November 2008

Accepted for publication 22 January 2009

Available online 30 January 2009

Keywords:

Nanowire

Molecule detector

Electronic transport

Adsorbate

Conductance gap

ABSTRACT

Inspired by the work of Lieber and co-workers [F. Patolsky, B.P. Timko, G. Zheng, C.M. Lieber, *MRS Bull.* 32 (2007) 142], we present a general discussion of the possibility of using atomic-chain scaled Si nanowires to detect molecules. Surface-modified Si nanowires were optimized by density functional theory (DFT) calculations. The electronic transport properties of the whole system, including Si nanowires and adsorbed molecules, sandwiched between two gold electrodes are investigated by means of non-equilibrium Green's function (NEGF) formalism. However, the overall transport properties, including current–voltage (I – V) and conductance–voltage (G – V) characteristics hardly show adsorbate sensitivity. Interestingly, our results show that the conductance gap clearly varies with the different adsorbates. Therefore different molecules can cause differences in the conductance gap compared with the bare Si nanowire. The results provide valuable information regarding the development of atomic-chain scaled molecular detectors.

© 2009 Elsevier B.V. All rights reserved.

1. Introduction

Semiconductor nanowires are emerging as a powerful and general class of ultrasensitive, electrical sensors for the direct detection of biological and chemical species [1]. The similarity in size of the nanowires and biological and chemical species being sensed makes nanowires an obvious choice for creating highly sensitive tools that can probe nanometer-sized systems. Semiconductor nanowires, moreover, exhibit unique electrical and optical properties that can be exploited for sensing. These characteristics make semiconductor nanowires one of the best defined and most versatile nanomaterial systems available today [2].

Lieber and co-workers [1] discussed representative examples of nanowire nanosensors for ultrasensitive detection of proteins and individual virus particles as well as recording, stimulation, and inhibition of neuronal signals in nanowire–neuron hybrid structures. The concepts underlying these experiments is as follows: When a single particle binds to a receptor linked to the surface of a nanowire FET detector, it yields a conductance change due to the change in surface charge; when the particle subsequently unbinds, the conductance returns to baseline. We tried to use the same method to detect molecules using ultra-thin nanowire, however our results suggest that the overall conductance–voltage

(G – V) characteristic shows only a moderate adsorbate sensitivity. Fortunately, the conductance gap clearly changes in response to different adsorbates.

Technological advances in fabrication and characterization at the nanoscale level have allowed a level of miniaturization to the extreme scale where the active component of the electronic device can involve an ultra-thin nanowire or just a single molecule [3–5]. In recent years, upon molecular adsorption, sharp changes of the conductance and mechanical properties of nanowires have been observed experimentally [6]. Small molecules or atoms adsorbed to the surface of a nanowire (that is surface-modified NWs) can lead to an increase or decrease in the device conductance depending on the net charge of adsorbed molecules or atoms and the semiconductor type [1]. The conductivity of an ultra-thin nanowire can be tuned by chemisorption of appropriate molecules, which suggests that the sensitive dependence of the conductance on molecular adsorption may be used for molecular detection [5]. Understanding the adsorbate-induced changes in conductance is therefore important for the development of nanowire nanosensors.

2. Modeling methods

In an earlier study, we have demonstrated by geometry optimization calculations that semiconductor materials confined in CNTs prefer to form well-ordered nanowires [7]. Similarly, the carbon nanotube served as a mould during the optimization of Si nanowire,

* Corresponding author.

E-mail address: catff@terra.com.br (C.A. Taft).

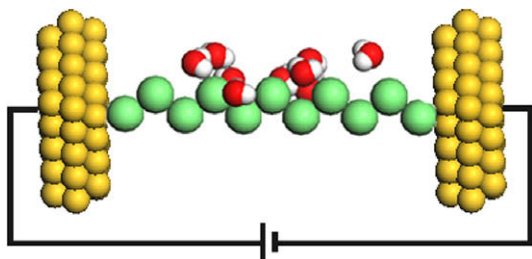


Fig. 1. Schematic representation of the contact-nanowire-contact system.

the FORCITE module of MATERIALS STUDIO was used to perform geometry optimization of Si nanowire embedded in (7, 7) single wall carbon nanotube, the diameters and the length of the nanotube are chosen as 9.49 and 36.8927 Å, respectively. DFT calculations were used to refine the optimization of the Si nanowire, to get minimized energy and stable structures of nanowire. The whole system, including the CNT and Si nanowire, has more electron density of states and is therefore not sensitive to the adsorbates. Therefore, only the optimized Si nanowires were used to test the dependence of electronic transport properties on the adsorbates. The iterative progress was done and the number of the max iterations was 10^5 . The universal force field was used to model the iterations in the optimization process. To enhance the quality of the calculation, we defined the energy convergence tolerance as 0.001 kcal/mol and the force convergence tolerance as 0.5 kcal/mol/Å. The atomic coordinates were adjusted until the total energy of the structure was minimized.

Based on the stable structures of Si nanowires, we performed DFT [8] calculations to obtain the adsorption of H_2 , H_2O , O_2 molecules and Fe atoms (Hereafter, in order to simplify, we denoted them as $Si_n\&mX$, $X = H_2, H_2O, O_2$ and Fe, where n and m is the number of the Si atoms and X , respectively). In these optimizations, the effective core potential (ECP) and a double-numerical basis including d -polarization function (DND) are chosen. The density function is treated with generalized gradient approximation (GGA) with exchange-correlation potential parameterized by Wang and Perdew [9].

The conductance of the NWs depends not only on the intrinsic properties of the NWs, but also on the electrode materials [10]. To determine the conductance of NWs, one must first bring it into contact with at least two external electrodes (Fig. 1). Here, we use gold (111) film as contacts, and the nanowire–electrode contact distance is constant when the different NWs were put into the middle of contacts, namely the vertical distance between the end atoms of the nanowires and the gold contacts is 1.811 Å. The three gold atoms of Au (111) surface connect to both ends of the nanowire. The Au–Au bond length is 2.885 Å and the end atom of the nanowire is equidistant from the three gold atoms.

The electronic transport properties of the optimized Si_{11} chain, $Si_{11}\&9H_2$, $Si_{11}\&9H_2O$, $Si_{11}\&9O_2$ and $Si_{11}\&13Fe$ were calculated by using non-equilibrium Green's function (NEGF) formalism under an applied bias [11]. According to our previous calculation [12], the self-consistent field is obtained using DFT method from the standard quantum chemistry software package Gaussian 98 [13]. The whole system is divided into two parts: contact subspace and nanowire subspace. The contact subspace is treated via a one-time calculation of the surface Green's function of the contacts (Au (111) films) including their atomicity and crystalline symmetry. Different nanowires coupled to the same contacts have different couplings, but the contact surface Green's function is independent of the nanowire. In the present calculations, the LANL2DZ [14,15] basis set with relativistic core pseudopotentials was used to describe the contacts and molecule. The self-consistent

potential is calculated using DFT with Becke-3 exchange [16] and Perdew–Wang 91 correlation [17].

The current through the contact-nanowire-contact system is an integral of the electron transmission probability over energy, which is given in Eq. (1) [18].

$$I = \frac{2q}{h} \int_{-\infty}^{\infty} T(E) [f(E - u_1) - f(E - u_2)] dE, \quad (1)$$

where $f(E)$ is the Fermi function, and u_1 and u_2 are the electrochemical potentials in the two contacts. The quantity $T(E)$ appearing in the current equation (Eq. (1)) is called the transmission function, which represents the sum of transmission probabilities over all the energy channels, is obtained from the Green's function using the Fisher–Lee formalism [19]:

$$T(E) = \text{Tr}[\Gamma_1 G \Gamma_2 G^\dagger]$$

The Green's function (G) of the gold–NW system is obtained as

$$G = (E_1 - H_{NT} - \Sigma_1 - \Sigma_2)^{-1}$$

An orthogonalized tight-binding model is used to obtain the nanowire Hamiltonian matrix H_{NW} . Here, Γ_1 and Γ_2 , defined by

$$\Gamma_{1,2} = i(\Sigma_{1,2} - \Sigma_{1,2}^\dagger)$$

are the broadening functions arising from the coupling between the NW and Au electrodes on either end. Σ_1 and Σ_2 (self-energy functions) [19] represent effective Hamiltonians that take into account the effect of coupling between the Au electrode and the nanowire and are defined by $\Sigma = C_{1,2}^\dagger G_{Au} C_{1,2}$. The coupling matrices $C_{1,2}$ are obtained by a suitable partitioning of the Hamiltonian matrix of the extended gold–NW–gold system. G_{Au} is the Green's function of the gold contact and is approximated [20] as a diagonal matrix in which each element is proportional to the local density of states (LDOS). Since conduction occurs mostly near the Fermi energy, and since in the case of gold, the s band dominates near the Fermi surface, the value of the LDOS for the s band of Au at the Fermi energy was set at the observed value [21] of 0.035 eV/atom per electron spin.

3. Results and discussion

Fig. 2 shows that the snapshots for Si_{11} chain, $Si_{11}\&9H_2$, $Si_{11}\&9H_2O$, $Si_{11}\&9O_2$ and $Si_{11}\&13Fe$ obtained from our atomistic simulations. Si nanowire is a well-ordered 11-atom double chains structure that is composed of two parallel single chains in which the atoms are arranged in a zigzag fashion. 9- H_2 , 9- H_2O , 9- O_2 and 13-Fe were adsorbed on the Si nanowire, respectively. Especially interesting, 7-atom and 6-atom Fe features two clusters. Although, surface reconstruction, chemical passivation, and cross-sectional geometry of nanowires may have an effect on the electronic trans-

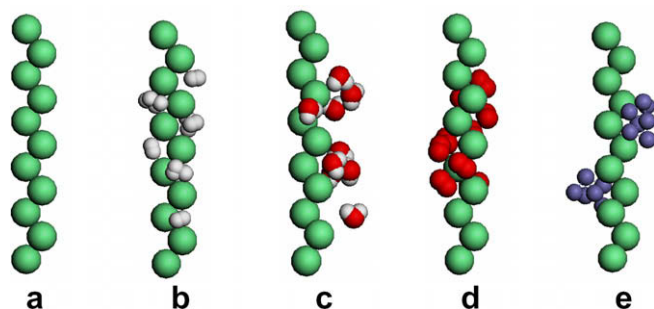


Fig. 2. (a) Snapshots of Si_{11} chain, (b) $Si_{11}\&9H_2$ (c) $Si_{11}\&9H_2O$ (d) $Si_{11}\&9O_2$ (e) $Si_{11}\&13Fe$ obtained from our calculations.

port properties [22–24], we exclude such factors and concentrate on the adsorbate effect on the electronic transport of Si nanowires.

Several semi-empirical theories and first-principles methods have been used to calculate the I – V and G – V characteristics of molecules and which agree well with experimental results [25]. Typically the first-principles methods are computationally very expensive. So in this work, the transport characteristics are calculated by using a straightforward (computationally inexpensive) yet rigorous and self-consistent procedure developed by Datta and co-workers [25]. The optimized Si NWs adsorbed molecules and atoms were chosen. In order to study the interaction between Si NWs and gold electrodes, finite gold atoms are chosen to compose gold clusters to simulate connection between electrodes and NWs. The electrodes are assumed to be essentially unperturbed relative to the surface of a bulk metal, and this assumption is clearly not true for a few atoms near the molecule–metal interface. Therefore in the electronic transport calculations the Si nanowire is defined to include two gold clusters from the surface of the electrodes.

The most fundamental quantity that describes the electrical properties of a bulk material is conductivity, based on which materials are often divided into conductors, insulators and semiconductors. Conductivity is defined as $\sigma = (I/V) \times L/A$, where I is the electrical current, V is the applied bias voltage, L is the length and A is the cross-sectional area of the material. For a nonmaterial, A and L are difficult to define precisely, and a more well-defined quantity is the conductance, G , given by $G = I/V$.

Fig. 3 shows the current–voltage (I – V) and conductance–voltage (G – V) curves for these five kinds of NWs, respectively. In the following, we will discuss the current–voltage (I – V) and conductance–voltage (G – V) characteristics of Si NWs.

The I – V characteristics of nanowires are strongly influenced by three factors: the location of equilibrium Fermi energy E_F , the potential profile across the nanowire under an applied bias and the coupling between the nanowire and the electrodes. Voltage profile across the conductor is a very important factor in determining the I – V characteristics. An applied voltage is known to drop largely across the metal–molecule interface, leading to a weaker drop in the molecule. At equilibrium, the entire system has a common Fermi energy E_F which is equal to the electrochemical potentials μ_1 and μ_2 in the two contacts. When we apply a voltage V_{appl} across the structure we cause μ_1 and μ_2 to split by eV_{appl} : $\mu_1 - \mu_2 = eV_{\text{appl}}$. Of course, we can choose freely any reference for the zero of our applied potential. For example, we could take contact 1 as our reference and write: $\mu_1 = E_F$ and $\mu_2 = E_F + eV_{\text{appl}}$. However, we also have to take into account the shifting of the molecular levels, which depends on the detailed shape of the potential profile inside the molecule. Here, we introduce the average potential $\langle \delta v_{\text{mol}}(r) \rangle$ inside the molecule due to the applied bias, namely $\langle \delta v_{\text{mol}}(r) \rangle = \eta e V_{\text{appl}}$, where the voltage division factor η is a number between 0 and 1 (detailed discussion in Ref. [25]). The precise nature of the potential profile is an important input to semi-empirical calculations of transport. Tian et al. [26] suggested using a flat potential profile inside the molecule, with a voltage division factor describing its position. Such a flat profile was obtained by Mujica et al. [27] by solving a 1-D Poisson equation, and experimentally measured for longer (μm) wires by Seshadri and Frisbie [28]. However, in all these cases the geometry under consideration is a series of 2-D charge sheets with potential variations only along the wire axis. The 1-D Poisson equation allows variations only along one coordinate, while the measurements in Ref. [28] referred to a self-assembled monolayer (SAM) where once again transverse potential variations are screened out by the presence of neighboring molecules. In contrast, Lang and Avouris [29] obtained a significant potential drop in a carbon atomic wire, which is a consequence of fields penetrating from transverse directions, as correctly predicted for break-junction geometry by a 3-D Poisson

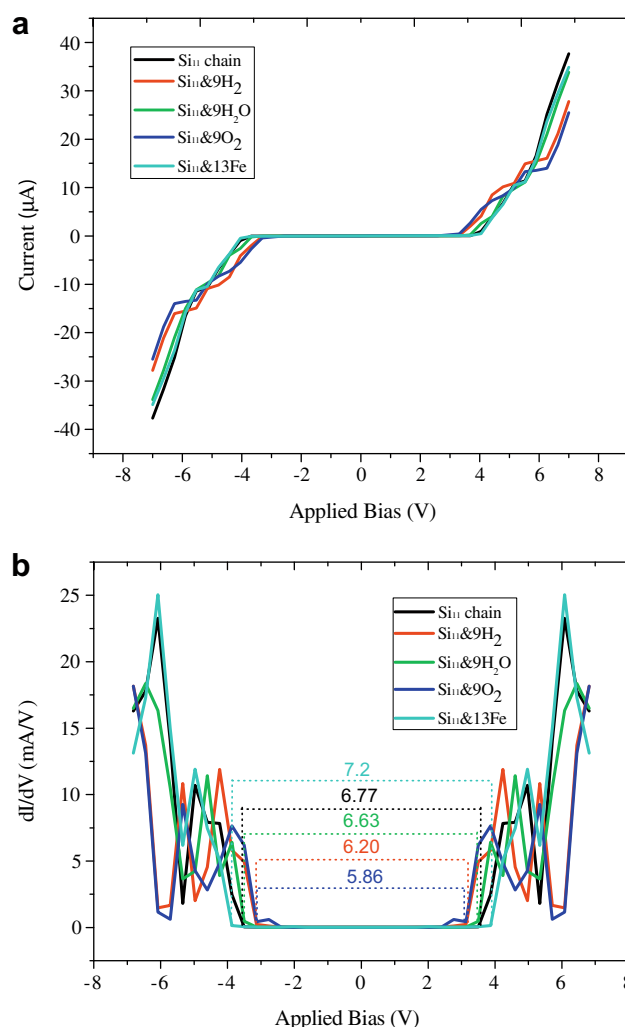


Fig. 3. (a) Current–voltage curves and (b) conductance spectra of Si₁₁ chain, Si₁₁&9H₂, Si₁₁&9H₂O, Si₁₁&9O₂ and Si₁₁&13Fe.

equation. Our particular geometry is suited to the break-junction, since the Hartree term in Gaussian 98 is calculated for a 3-D geometry. It is noted that the voltage drop across the device itself is smaller than the applied voltage bias owing to screening effects, incorporated self-consistently through the Hartree term of our Fock matrix.

Current–voltage (I – V) curves obtained from our calculations are shown in Fig. 3a. It is clear that the I – V curves of all adsorbate Si NWs do not follow an Ohmic pattern. Linear current–voltage (I – V) characteristics under a low and high applied bias and nonlinear current–voltage (I – V) characteristics under a definite applied bias are found. These interesting properties have made them the focus of intensive research. Larade and his co-workers have performed first-principles analysis of the transport properties of carbon atomic wires in contact with two metallic electrodes under external bias [22]. They found that the low-bias current–voltage (I – V) characteristic is linear. The linear region is corresponding to the conductance gap, which is caused by finite-size effects.

The conductance of a molecule depends on the alignment of the molecular energy levels, especially the highest occupied molecular orbital (HOMO) and lowest occupied molecular orbital (LUMO), relative to the Fermi levels of the electrodes. Typically, the Fermi level is positioned in the LUMO–HOMO gap of the molecule because if the HOMO or LUMO is close to the Fermi level of an electrode, electrons transfer between the molecule and the elec-

trode, and consequently the molecules are oxidized or reduced spontaneously. When the LUMO or HOMO is brought close to the Fermi levels, electrochemical oxidation or reduction occurs. For molecules that can be reversibly oxidized or reduced, significant changes in the conductance occur. The energy-level alignment is determined by the intrinsic properties of the molecule and the electrodes, and also by the interactions between the molecule and the two electrodes, which are often difficult to determine for both theory and experiment [30,31].

The first example of electrical detection of proteins in solution using nanostructures was reported by Lieber's group using single p-type silicon nanowire devices in 2001 [32]. They developed the use of nanowire devices for the detection of multiple disease marker proteins simultaneously in a single versatile detection platform [33]. Compared with Lieber and co-workers' work [1], they mainly distinguish the absorbed biological species according to the conductance; here, we find that we can use the conductance gap to distinguish the absorbed molecules.

From Fig. 3b, we observe that there are many peaks and valleys in the G - V curves. The linear region in I - V curve is corresponding to the conductance gap in G - V curve, and when the external applied bias is zero or small, every I - V curve exhibits a linear region every, and G - V curve exhibits a conductance gap. It is difficult to obtain any rule from the whole I - V or G - V curves, so it seems that we can not detect the molecules using these nanowires. However, it is obviously that the conductance gaps are different when the molecules are different, so we can detect according to this property. Si NWs absorbed molecules make conductance gap narrow. However, especially interesting, the conductance gap increase for Si NWs absorbed Fe atoms clusters, which make it possible to detect the molecules.

Underlying detection using semiconductor nanowires is their configuration as field-effect transistors (FETs), which exhibit a conductivity change in response to variations in the electric field or potential at the surface of the device [1]. In a standard FET, the conductance of the semiconductor between the source and drain is modulated between on and off states by a third gate electrode coupled through a thin dielectric layer to the semiconductor. Applying a gate voltage leads to an increase/decrease in conductance. The binding of molecules to a nanowire is analogous to applying a voltage using a gate electrode. Fig. 3b shows differential conductance as a function of bias voltage. It becomes complex to identify the molecules from the overview of the G - V curves. The increase, decrease and the positions of peaks of the G - V curves show only moderate adsorbate sensitivity. Interestingly, the width of the conductance gap clearly changes with the difference of the adsorbates. We observe wide gaps in the G - V curves when the applied bias is very low or zero, which is due to the energy gap between HOMO and LUMO. Above a given threshold bias, the conductance suddenly increases to the first peak as shown in Fig. 3b.

Fig. 4 shows the zero bias transmission through NWs absorbed molecules and atoms and corresponding to the densities of states (DOSs) of these adsorbate nanowires near the Fermi energy. Zero bias transmission is the electronic transmission probability at zero or very low applied bias. It is the probability for electrons transmitting from one electrode to the other, not the real electron transmission. Under a relatively higher bias, the electrons will transmit through the channels according to Eq. (1) which is related to transmission probability and applied bias. Very high bias can shift the zero bias transmission a bit, and then the electron transmission will be according to the shifted transmission probability. From Fig. 4a, we can see that all the transmission curves exhibit low regions around Fermi energy which are due to their energy gap between HOMO and LUMO. The Fermi energy is located at 11 eV, which is inside the HOMO–LUMO gap. The transmission is observed to be low around the Fermi level. Under and above the

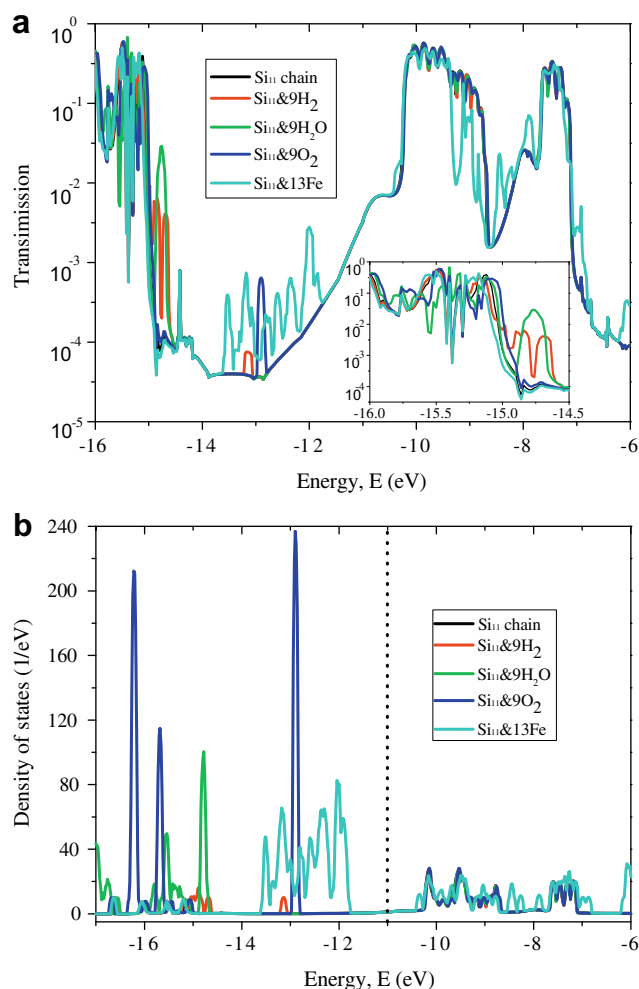


Fig. 4. (a) Transmission function and (b) the density of states of Si_{11} chain, $\text{Si}_{11}\&9\text{H}_2$, $\text{Si}_{11}\&9\text{H}_2\text{O}$, $\text{Si}_{11}\&9\text{O}_2$, $\text{Si}_{11}\&13\text{Fe}$. The dashed line is the Fermi energy.

Fermi level, there are two energy regions which contribute significantly to the transmission. The first region mainly comes from the highest occupied molecular orbital (HOMO) contribution. The second region mainly comes from the lowest unoccupied molecular orbital (LUMO) contribution. We call it HOMO (LUMO) transmission region. Electronic densities, namely DOSs result in the difference of the conductance spectra, which are corresponding to Fig. 3b.

The interaction between H_2 , O_2 , H_2O , Fe and the Si atomic chain leads to rearrangement of the electrons in the system which remarkably influences the transmission of the Si atomic chain. The middle part of the Si atomic chain is covered by the molecules or atoms, which causes a sharp change in the transmission. The numbers of DOSs are in the order of the Si_{11} chain, $\text{Si}_{11}\&9\text{H}_2$, $\text{Si}_{11}\&9\text{H}_2\text{O}$, $\text{Si}_{11}\&9\text{O}_2$ and $\text{Si}_{11}\&13\text{Fe}$ from small to large, which corresponds to the conductance order.

The conductance gap has been demonstrated by many previous works both experimentally [34] and theoretically [35,36]. In this work, we mainly focus on how its conductance gap depends on the adsorbates of the Si nanowires. Here we observe wide conductance gaps in the G - V curves, which can be ascribed to Coulomb blockade phenomena. In general, Coulomb blockade occurs when a confined electronic system (the nanowire in our simulation) is weakly coupled to source and drain electrodes [37]. At low-bias, nonresonant tunneling is the dominant transport mechanism. When the bias voltage applied is sufficient to align an energy level

of the nanowire with the Fermi level of an electrode, resonant transport commences and the Coulomb blockade is lifted. The bias voltage required to initiate resonant transport thus defines the conductance gap of the device. The conductance gap changes with the difference of the adsorbates. The adsorbates control the conductance gap as the third terminal in FET. In our devices, the Si nanowire incorporated with adsorbate molecules, coupled to two gold electrodes, act as a confined electronic system. Although, our device has only two terminals without a gate electrode, the conductance gap in Fig. 3b shows a fluctuation. The adsorbate molecules likely act as local charge defects resulting in the stochastic gating.

4. Conclusion

In summary, optimized Si NWs and Si NWs adsorbed different molecules (H_2 , H_2O and O_2) have been obtained by DFT calculations. We also investigated the electronic transport properties of silicon nanowires without and with adsorbate molecules using non-equilibrium Green's function (NEGF) formalism. Because of the presence of the adsorbate molecules, all of the electronic transport properties of the nanowires are in principle different. However it becomes difficult to identify molecules from the overview of G – V curves. Our simulation results indicate that the conductance gap changes in response to different adsorbates. It is thus possible that Si nanowires could be used as nanosensors for molecular detection by measuring the change of the conductance gap.

Acknowledgements

This work was support by National Natural Science Foundation of China: Grant No. JQ200817.

References

- [1] F. Patolsky, B.P. Timko, G. Zheng, C.M. Lieber, *MRS Bull.* 32 (2007) 142.
- [2] F. Patolsky, C.M. Lieber, *Mater. Today* 8 (2005) 20–28.
- [3] G. Cuniberti, G. Fagas, K. Richter, *Introducing Molecular Electronics*, Springer, Berlin, 2005.
- [4] H.S. Park, C.J. Ji, *Acta Mater.* 54 (2006) 2645.
- [5] H. Li, X.Q. Zhang, *Phys. Lett. A* 372 (2008) 4294.
- [6] Andrew B. Greytak, Carl J. Barrelet, Yat Li, Charles M. Lieber, *Appl. Phys. Lett.* 87 (2005) 151103.
- [7] (a) Y.H. Zhang, J. Meng, X.Q. Zhang, Hui Li, C.A. Taft, *Int. J. Quantum. Chem.* 109, in press.
(b) X.Q. Zhang, H. Li, K.M. Liew, *J. Appl. Phys.* 102 (2007) 073709.
- [8] DMOL3 is a density functional theory (DFT) program from Materials Studio distributed by Accelrys, Inc. B. Delley, *J. Chem. Phys.* 92 (1990) 508.
- [9] Y. Wang, J.P. Perdew, *Phys. Rev. B* 43 (1991) 8911.
- [10] F. Chen, J. Hihath, Z.F. Huang, X.L. Li, N.J. Tao, *Annu. Rev. Phys. Chem.* 58 (2007) 535.
- [11] F. Zahid, M. Paulsson, S. Datta, in: H. Morkc (Ed.), *Electrical Conduction Through Molecules*, Academic Press, New York, 2003.
- [12] H. Li, X.Q. Zhang, J.X. Zhang, X.F. Liu, X.F. Bian, *J. Phys. Chem. B* 112 (2008) 15588.
- [13] Gaussian 98 (Revision A.7), M.J. Frisch, G.W. Trucks, H.B. Schlegel, G.E. Scuseria, M.A. Robb, J.R. Cheeseman, V.G. Zakrzewski, J.A. Montgomery Jr., R.E. Stratmann, J. Burant, C.S. Dapprich, J.M. Millam, A.D. Daniels, K.N. Kudin, M.C. Strain, O. Farkas, J. Tomasi, V. Barone, M. Cossi, R. Cammi, B. Mennucci, C. Pomelli, C. Adamo, S. Clifford, J. Ochterski, G.A. Petersson, P.Y. Ayala, Q. Cui, K. Morokuma, D.K. Malick, A.D. Rabuck, K. Raghavachari, J.B. Foresman, J. Cioslowski, J.V. Ortiz, A.G. Baboul, B.B. Stefanov, G. Liu, A. Liashenko, P. Piskorz, I. Komaromi, R. Gomperts, R.L. Martin, D.J. Fox, T. Keith, M.A. Al-Laham, C.Y. Peng, A. Nanayakkara, C. Gonzalez, M. Challacombe, P.M.W. Gill, B.G. Johnson, W. Chen, M.W. Wong, J.L. Andres, M. Head-Gordon, E.S. Replogle, J.A. Pople, Gaussian Inc., Pittsburgh, PA, 1998.
- [14] P. Hay, W. Wadt, *J. Chem. Phys.* 82 (1985) 270.
- [15] P. Hay, W. Wadt, *J. Chem. Phys.* 82 (1985) 284.
- [16] A.D. Becke, *J. Chem. Phys.* 98 (1993) 5648.
- [17] J.P. Perdew, in: P. Ziesche, H. Eschrig (Eds.), *Electronic Structure of Solids*, Akademik Verlag, Berlin, 1991, p. 11.
- [18] S. Datta, *Quantum Transport: Atom to Transistor*, Cambridge University Press, Cambridge, 2005.
- [19] S. Datta, *Electronic Transport in Mesoscopic Systems*, Cambridge University Press, Cambridge, UK, 1995.
- [20] W. Tian, S. Datta, S. Hong, R. Reiferberger, J.I. Henderson, C.P. Kubiak, *J. Chem. Phys.* 109 (1998) 2874.
- [21] D.A. Papaconstantopoulos, *Handbook of the Band Structure of Elemental Solids*, Plenum, New York, 1986.
- [22] B. Larade, J. Taylor, H. Mehrez, H. Guo, *Phys. Rev. B* 64 (2001) 075420.
- [23] J. Taylor, H. Guo, J. Wang, *Phys. Rev. B* 63 (2001) 245407.
- [24] Yam C. Ma, X. Wang, G. Chen, *Appl. Phys. Lett.* 85 (2004) 4484.
- [25] P. Damle, A.W. Ghosh, S. Datta, *Chem. Phys.* 281 (2002) 171.
- [26] W. Tian, S. Datta, S. Hong, R. Reiferberger, J.I. Henderson, C. Kubiak, *J. Chem. Phys.* 109 (1997) 2874.
- [27] V. Mujica, A. Roitberg, M. Ratner, *J. Chem. Phys.* 112 (2000) 6834.
- [28] K. Seshadri, C. Frisbie, *Appl. Phys. Lett.* 78 (2001) 993.
- [29] N. Lang, P. Avouris, *Phys. Rev. Lett.* 84 (2000) 358.
- [30] Y. Xue, S. Datta, M.A. Ratner, *J. Chem. Phys.* 115 (2001) 4292.
- [31] G. Heimel, L. Romaner, J.-L. Brédas, E. Aojer, *Phys. Rev. Lett.* 96 (2006) 196806.
- [32] Y. Cui, Q. Wei, H. Park, C.M. Lieber, *Science* 293 (2001) 1289.
- [33] G. Zheng, F. Patolsky, Y. Cui, W.U. Wang, C.M. Lieber, *Nat. Biotechnol.* 23 (2005) 1294.
- [34] H. Yu, L.J. Webb, J.R. Heath, N.S. Lewis, *Appl. Phys. Lett.* 88 (2006) 252111.
- [35] H. Li, X.Q. Zhang, K.M. Liew, *J. Chem. Phys.* 128 (2008) 034707.
- [36] T. Rakshit, G. Liang, A.W. Ghosh, S. Datta, *Nano Lett.* 4 (2004) 1803.
- [37] Lam H. Yu, Christopher D. Zangmeister, James G. Kushmerick, *Nano Lett.* 6 (2006) 2515.

Terrestrial gamma-ray flashes caused by neutron bursts above thunderclouds

G. S. Paiva^{a)}

Departamento de Química Fundamental, Universidade Federal de Pernambuco, Av. Prof. Luiz Freire, s/n, Cidade Universitária, Recife, Pernambuco 50740-540, Brazil

(Received 2 November 2008; accepted 25 January 2009; published online 17 April 2009)

In this work, it is suggested that upward pulses of fast neutrons, which are produced by energetic intracloud lightning, will form terrestrial gamma-ray flashes (TGFs) through neutron inelastic scattering by atoms in the atmosphere. About 10^{15} fast neutrons produce gamma-ray photons that compose the TGF pulse in altitude of about 20 km, in good agreement with the altitude of TGF source estimated by Dwyer and Smith [Geophys. Res. Lett. **32**, L22804 (2005)]. © 2009 American Institute of Physics. [DOI: [10.1063/1.3089230](https://doi.org/10.1063/1.3089230)]

I. INTRODUCTION

Terrestrial gamma-ray flashes (TGFs) are very short blasts of gamma rays, lasting about 1 ms, emitted into space from Earth's upper atmosphere. They seem to be connected with powerful thunderstorm activity.¹ TGFs were first observed in the early 1990s (Ref. 2) and more recently on the Reuven Ramaty high-energy solar spectroscopic imager (RHESSI) spacecraft.¹ There is a consensus forming about the physical mechanism causing TGFs. Acceleration of electrons to high energies in electric fields above thunderstorms was predicted in 1925 by Wilson³ and this runaway process was recently shown to be capable of avalanche multiplication, making its variants good candidates for the TGF parent process.⁴ However, the proper mechanism that produces gamma rays is still uncertain. For example, in sprites electrons rarely reach energies above about 20 eV (Ref. 5) whereas gamma rays require about 1×10^6 eV. Suggested physical mechanisms include relativistic runaway breakdown from quasistatic electric fields (QEFs) at high altitudes (>30 km),⁶ backscatter from precipitating electrons at the geomagnetic conjugate point to a TGF source,^{7,8} low altitude (<20 km) QEF-driven runaway electrons,⁹ heating by the electromagnetic pulse (EMP) associated with the rapidly moving return strokes of cloud to ground (CG) lightning,¹⁰ EMP acceleration from a fractal intracloud flash,¹¹ and whistler generation of runaway electrons.¹²

On the other hand, experiments on board MIR orbital station (1991), ISS (2002), and Kolibri-2000 satellite (2002) at an altitude of 400 km detected neutron bursts ($E_n \sim 0.1$ eV–1.0 MeV) in the equator regions connected with lightning discharges.¹³ On the other hand, intense electrical discharges through polymers fibers have been shown to produce neutrons up to 10^{12} neutrons of 2.45 MeV energy by deuteron-deuteron fusion: $D(d,n)He^3$.¹⁴ Noting broad similarities between discharges in polymer fibers and natural lightning, Libby and Leukens¹⁵ suggested that neutrons are also generated in lightning flashes, as a result of the fusion of deuterium contained in the atmospheric water vapor; by rescaling the plasma parameters of polymer fibers to those in-

involved in natural lightning, they predicted a yield of $\sim 10^{15}$ neutrons per lightning flash. Whether these neutrons are thermonuclear in origin or are generated by photoneuclear processes, these remain to be experimentally determined. Babich *et al.*¹⁶ suggested that neutron bursts are produced by photoneuclear reactions (γ, n). In this work, it is suggested that upward neutron bursts, produced by thermonuclear reactions in lightning, will form TGFs through reactions of inelastic scattering by the atoms in the atmosphere.

II. THE MODEL

The gross charge distribution of the thundercloud is a tripole structure with a small lower positive charge plus an upper negative screening layer.¹⁷ The upper positive charge attracts negative ions at the top of the cloud from the electrically conducting clear air around the storm. The ions, which are produced by cosmic radiation, are attached to small cloud particles at the edge of the cloud, forming a negative screening layer that partially cancels or screens the interior positive charge from an outside observer. The upper positive charge core of the cloud is masked by a negative charge sheath of 59 C which exists primarily within the cloud-air interface.¹⁸

TGFs are strongly concentrated around Earth's equator when compared to lightning¹⁹ and thundercloud tops are higher near to this region.²⁰ In general, the main negative charge in the lower part of a thundercloud²¹ occurs at a height where the atmosphere temperature is between -10 and -20 °C. This temperature range is typically between 6 and 8 km. The positive charge at the top of the storm does not have a clear relationship with temperature as the negative charge but can typically occur between -25 and -60 °C depending on the size of the storm. This temperature range usually lies between 8 and 16 km in altitude.^{20,22}

On the other hand, Stanley *et al.*²³ recorded a link between TGFs and intracloud lightning discharges. TGFs are relatively atypical and rare phenomena. The more recent RHESSI satellite has a greatly improved detection rate²⁴ with >620 probable TGF events detected in over 3 years of operations. Energetic IntraCloud (EIC) lightnings are isolated discharge events that occur in thunderstorms and produce

^{a)}Electronic mail: gerson_trabalho@yahoo.com.br.

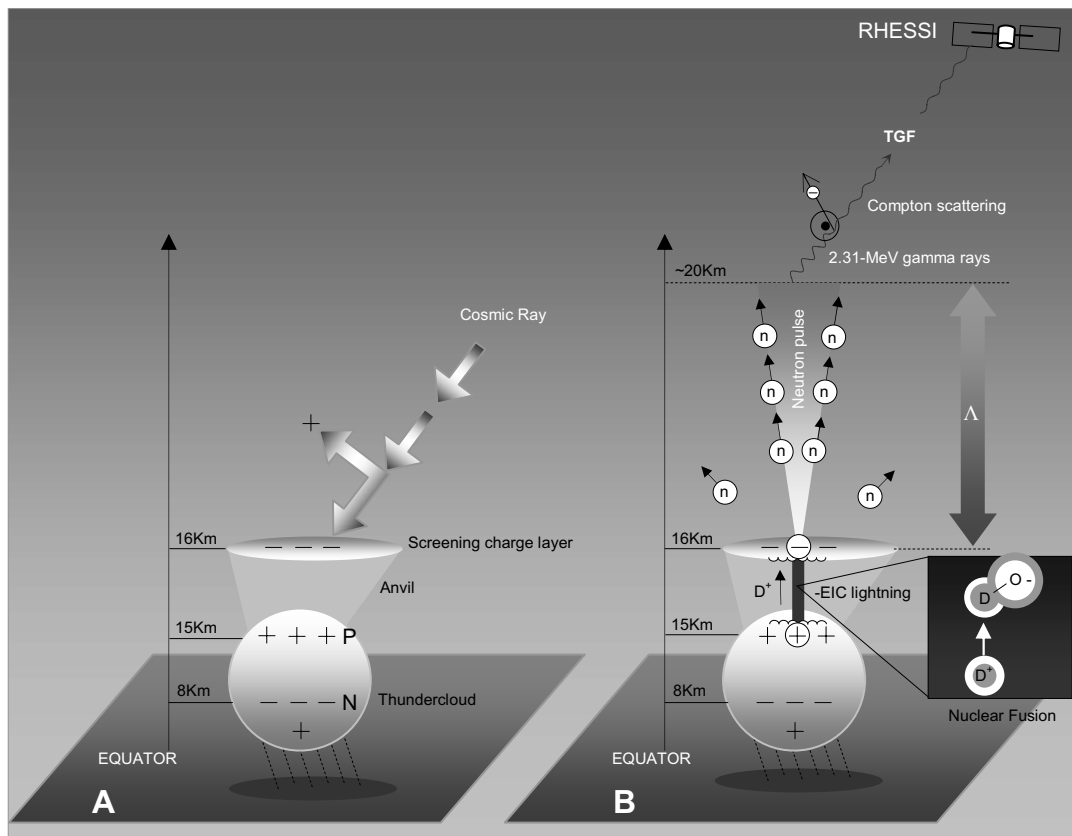


FIG. 1. Formation of TGFs above typical tropical thunderclouds. (A) Negative screening layer formation; (B) lightning between positive center (P) and negative screening layer at the top of thundercloud producing gamma rays. In nitrogen, inelastic scattering of these particles produces 2.31 MeV gamma rays (TGFs). Compton scattering of these gamma rays occurs producing the smooth energy spectrum of TGFs. A cloud discharge involves a length of about 1 km of the negatively charged region.

both very powerful high frequency (HF)/very HF (VHF) radiation and distinctive narrow bipolar electric field change pulses. Negative polarity EIC lightning occurs at the altitude range of 15–20 km.²⁵ The association of TGFs with strong VHF pulses from intracloud lightning was recorded by Rison *et al.*²⁶ and Jacobson.²⁷

As shown in Fig. 1, electrical discharge between positive charge center (P) and the upper negative screening layer at the top of thundercloud (i.e., –EIC lightning) accelerates positive deuterons upward and produces upward bursts of neutrons on thunderclouds. In lightning channel, deuterons of water (each hydrogen has a probability of 1 in 6400 of being deuterium) are transformed in ions D^+ and are accelerated, producing neutrons by thermonuclear reactions.

A similar effect has been observed in the laboratory

experiments²⁸ with high powered discharge. In this case, neutron flux direction is determined by the positive deuteron flux direction in the plasma (Fig. 2).

Upward neutrons generated by the nuclear fusion in the thunderclouds are decelerated by inelastic scattering in air up to ~20 km altitude. In nitrogen, inelastic scattering of these particles produces 2.31 MeV gamma rays²⁹ and, subsequently, Compton scattering of these gamma rays will occur, producing the smooth energy spectrum of TGFs.

Dwyer and Smith³⁰ and Williams *et al.*,¹⁹ proceeding from the results of simplified simulations, placed the TGF origin in the upper troposphere–lower stratosphere (15–21 km). In this case, the electron number necessary to produce detectable TGFs at 21 km altitude is of about 10^{16} relativistic electrons. On the other hand, the maximum neutron number

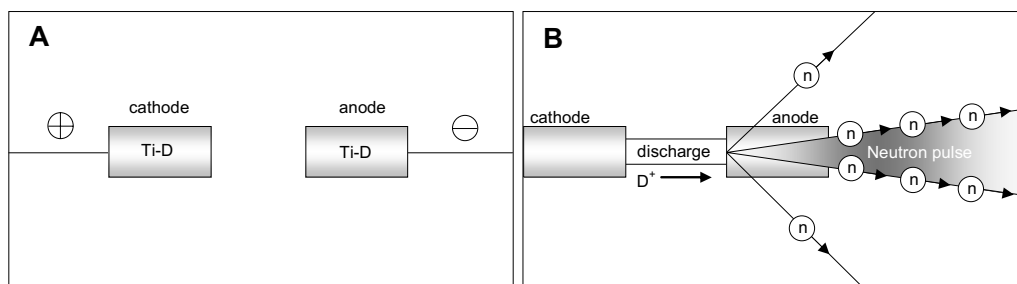


FIG. 2. Neutron production: during a brief portion of a 70 ns, 2 MV, and 50 kA pulse, positive ions from the anode and cathode plasmas are accelerated toward the Ti–D anode, which is the source of neutrons produced.

produced by a lightning is of about 10^{15} .^{15,28,31} In spite of the fact that –EIC lightnings occur typically between 15 and 16 km altitudes (this altitude range is typical for tropical thundercloud [see Fig. 1(B)]), the neutron path can achieve upper altitudes before emitting gamma rays.

The attenuation length or mean free path is the medium length of a path covered by a particle between subsequent impacts.³² The mean free path of neutron in an absorber (air) is given by

$$\Lambda = \left(\frac{1}{N(\sigma_c + \sigma_s)} \right) = \left(\frac{1}{N\sigma_T} \right), \quad (1)$$

where N is the number of atoms or molecules per volume unity of the absorber, σ_c is the capture cross section, σ_s is the scattering cross section, and σ_T is the total cross section of neutrons in the absorber.

The number of molecules per cm^3 in the air is calculated as being

$$N = \frac{\rho \times N}{M}, \quad (2)$$

where ρ is the air density in kg m^{-3} , N is Avogadro's number, and $M=0.028\,97\,\text{kg mol}^{-1}$ is the molar mass of dry air. Air density is given by³³

$$\rho = \frac{\rho_0 \times T_0}{T} \left(1 + \frac{\gamma h}{T_0} \right)^{-g/R_d \gamma}, \quad (3)$$

where ρ is the air density at sea level, T is the temperature on the kelvin scale at a height h above sea level in meters, ρ_0 is the air density at sea level in kg m^{-3} , T_0 is the temperature on the kelvin scale at sea level, $\gamma=-0.0065\,\text{K m}^{-1}$ is the atmosphere temperature gradient, $g=9.806\,65\,\text{m s}^{-2}$ is the normal gravitational acceleration, and $R_d=287.05\,\text{J kg}^{-1}\,\text{K}^{-1}$ is the specific gas constant of dry air.

Inserting Eq. (3) in Eq. (2) we have

$$N = \frac{\rho_0 \times N \times T_0}{M \times T} \left(1 + \frac{\gamma h}{T_0} \right)^{-g/R_d \gamma}. \quad (4)$$

Considering standard atmosphere values ($\rho_0=1.225\,\text{kg m}^{-3}$, $T_0=293\,\text{K}$, and $T=216.5\,\text{K}$ at 18 km altitude) in Eq. (4), we obtain $N=2.36 \times 10^{18}\,\text{molecules/cm}^3$. Thus, according to Eq. (1), considering total cross section of nitrogen for 2.5 MeV neutron equal to $\sigma_T=1.4\,\text{barn}$ (Ref. 34) and $N=2 \times 10^{18}\,\text{molecules/cm}^3$, the mean free path of these neutrons will be $\Lambda=4\,\text{km}$ [see Fig. 1(B)]. This value when summed to the mean altitude of –EIC lightning results in a gamma-ray source altitude of about 20 km, in good agreement with Monte Carlo simulations.³⁰

Neutrons emerging from the tip of –EIC lightning will collide with nitrogen atoms of the atmosphere, producing gamma rays. In this case, each 2.5 MeV neutron produces one gamma-ray photon of 2.31 MeV by inelastic scattering in the atmosphere.^{35–39} Thus, 10^{15} fast neutrons will form equal quantity of gamma-ray photons (i.e., one TGF pulse), in agreement with the gamma-ray-neutron proportion estimated by Babich *et al.*¹⁶

III. CONCLUSION

The upward neutron bursts produced by thermonuclear reactions in lightning will form TGFs through reactions of inelastic scattering by the atoms in the atmosphere. The negative polarity EIC lightning transfers positive deuterons upward (generating upward neutrons and gamma rays), in the altitude range of 15–20 km. About 10^{15} fast neutrons produce 10^{15} gamma-ray photons that compose a TGF pulse at an altitude of about 20 km, in good agreement with the altitude of TGF source estimated by Dwyer and Smith.³⁰ The findings raise many interesting questions, including whether the neutrons that emit TGFs ultimately contribute to the high-energy electrons in Earth's radiation belts, and into similar processes in less accessible parts of the universe.

ACKNOWLEDGMENTS

I would like to thank CAPES and CNPq by the financial support.

- ¹S. A. Cummer, Y. Zhai, W. Hu, D. M. Smith, L. I. Lopez, and M. A. Stanley, *Geophys. Res. Lett.* **32**, L08811 (2005).
- ²G. J. Fishman, P. N. Bhat, R. Mallozzi, J. M. Horack, T. Koshut, C. Kouveliotou, G. N. Pendleton, C. A. Meegan, R. B. Wilson, W. S. Paciasas, S. J. Goodman, and H. J. Christian, *Science* **264**, 1313 (1994).
- ³C. T. R. Wilson, *Proc. Phys. Soc. London* **37**, 32D (1924).
- ⁴A. V. Gurevich, G. M. Milikh, and R. Roussel-Dupré, *Phys. Lett. A* **165**, 463 (1992).
- ⁵V. P. Pasko, U. S. Inan, and T. F. Bell, *Geophys. Res. Lett.* **27**, 497 (2000).
- ⁶R. Roussel-Dupré, E. Symbalisty, Y. Taranenko, and V. Yukhimuk, *J. Atmos. Sol.-Terr. Phys.* **60**, 917 (1998).
- ⁷A. Gurevich, Y. Medvedev, and K. Zybin, *Geophys. Res. Lett.* **329**, 348 (2004).
- ⁸N. G. Lehtinen, U. S. Inan, and T. F. Bell, *J. Geophys. Res.* **106**, 28841 (2001).
- ⁹G. M. Milikh, P. N. Guzdar, and A. S. Sharma, *J. Geophys. Res.* **110**, A02308 (2005).
- ¹⁰U. S. Inan and N. G. Lehtinen, *Geophys. Res. Lett.* **32**, L19818 (2005).
- ¹¹G. M. Milikh and J. A. Valdivia, *Geophys. Res. Lett.* **26**, 525 (1999).
- ¹²P. K. Kaw, G. M. Milikh, A. S. Sharma, P. N. Guzdar, and K. Papadopoulos, *Phys. Plasmas* **8**, 4954 (2001).
- ¹³L. S. Bratolyubova-Tsulukidze, E. A. Grachev, O. R. Grigoryan, V. E. Kunitsyn, B. M. Kuzhevskij, D. S. Lysakov, O. Yu. Nechaev, and M. E. Usanova, *Adv. Space Res.* **34**, 1815 (2004).
- ¹⁴S. J. Stephanakis, L. S. Levine, D. Mosher, I. M. Vitkovitsky, and F. Young, *Phys. Rev. Lett.* **29**, 568 (1972).
- ¹⁵L. M. Libby and H. R. Lukens, *J. Geophys. Res.* **78**, 5902 (1973).
- ¹⁶L. P. Babich, A. Yu. Kudryavtsev, M. L. Kudryavtseva, and I. M. Kutsyk, *JETP Lett.* **85**, 483 (2007).
- ¹⁷E. R. Williams, *J. Geophys. Res.* **94**, 13151 (1989).
- ¹⁸B. B. Phillips, *Charge Distribution in a Quasi-Static Thundercloud Model* (American Meteorological Society, Washington, DC, 1967), Vol. 95, p. 847.
- ¹⁹E. R. Williams, R. A. Boldi, J. Bor, G. Satori, C. Price, E. Greenberg, Y. Takahashi, K. Yamamoto, Y. Matsudo, Y. Hobara, M. Hayakawa, T. Chronis, E. Anagnostou, D. M. Smith, and L. Lopez, *J. Geophys. Res.* **111**, D16209 (2006).
- ²⁰M. A. Uman, *Lightning* (Dover, New York, 1984), pp. 2, 69, and 255 (Appendix E).
- ²¹P. R. Krehbiel, M. Brook, and R. A. McCrosy, *J. Geophys. Res.* **84**, 2432 (1979).
- ²²D. K. Singh, R. P. Singh, and A. K. Kamra, *Space Sci. Rev.* **113**, 375 (2004).
- ²³M. A. Stanley, X.-M. Shao, D. M. Smith, L. I. Lopez, M. B. Pongratz, J. D. Harlin, M. Srock, and A. Regan, *Geophys. Res. Lett.* **33**, L06803 (2006).
- ²⁴D. M. Smith, L. I. Lopez, R. P. Lin, and C. P. Barrington-Leigh, *Science* **307**, 1085 (2005).
- ²⁵D. A. Smith, M. J. Heavner, A. R. Jacobson, X. M. Shao, R. S. Massey, R.

- J. Sheldon, and K. C. Wiens, *Radio Sci.* **39**, RS1010 (2004).
- ²⁶W. Rison, R. J. Thomas, P. R. Krehbiel, T. Hamlin, and J. Harlin, *Geophys. Res. Lett.* **26**, 3573 (1999).
- ²⁷A. R. Jacobson, *J. Geophys. Res.* **108**, 4778 (2003).
- ²⁸L. P. Bradley and G. W. Kuswa, *Phys. Rev. Lett.* **29**, 1441 (1972).
- ²⁹R. B. Day, *Phys. Rev.* **102**, 767 (1956).
- ³⁰J. R. Dwyer and D. M. Smith, *Geophys. Res. Lett.* **32**, L22804 (2005).
- ³¹L. M. Libby and H. R. Lukens, *J. Geophys. Res.* **78**, 5902 (1973).
- ³²I. Kaplan, *Nuclear Physics* (Addison-Wesley, Reading, MA, 1971), p. 581.
- ³³G. Christ, O. S. Dohm, E. Schüle, S. Gaupp, and M. Martin, *Phys. Med. Biol.* **49**, 2029 (2004).
- ³⁴P. G. Young and D. G. Foster, Jr., An Evaluation of the Neutron and Secondary Gamma-Ray Production Cross Sections for Nitrogen, LA-4725 (1972).
- ³⁵H. Bethe, *Ann. Phys.* **397**, 325 (1930).
- ³⁶C. M. Davisson and R. D. Evans, *Rev. Mod. Phys.* **24**, 79 (1952).
- ³⁷B. Hamermesh, G. R. Ringo, and S. Wexler, *Phys. Rev.* **90**, 603 (1953).
- ³⁸F. Sammarruca, *Phys. Rev. C* **77**, 047301 (2008).
- ³⁹L. L. Smith, *J. Geophys. Res.* **111**, E12S13 (2006).

“Seed” electrons from muon-decay for runaway mechanism in the terrestrial gamma-ray flashes production

Gerson S. Paiva, Antonio C. Pavão, and Cristiano C. Bastos

Departamento de Química Fundamental, Universidade Federal de Pernambuco, 50740-540, Recife,
Pernambuco, Brazil

Abstract

We describe a mechanism of enhanced terrestrial gamma-ray flashes production seeding via muon decay in the presence of high electric fields associated with lightning. Our model predicts 10^7 relativistic seed electrons per millisecond at about 15 km altitude with mean energy of 35 MeV and an avalanche multiplication factor of about 10^{10} , in good agreement with Monte Carlo simulations.

Keywords: Terrestrial gamma-ray flashes, muon decay, lightning

I. Introduction

Terrestrial Gamma-ray Flashes (TGFs) are very short blasts of gamma-rays lasting about one millisecond emitted into space from Earth's upper atmosphere. They seem to be connected with powerful thunderstorm activity [Cummer *et al.*, 2005]. TGFs were first observed in the early 1990s [Fishman *et al.*, 1994] and more recently on the RHESSI (Reuven Ramaty High Energy Solar Spectroscopic Imager) spacecraft [Dwyer and Smith, 2005]. The measurements of TGFs obtained by the RHESSI show a photon spectrum extending of 0.003 up to typically 10 to 20 MeV (sometimes exceeding 20 MeV).

Acceleration of electrons to high energies in electric fields above thunderstorms was predicted in 1925 by Wilson [1925] and this runaway process was recently shown [Gurevich *et al.*, 1992] to be capable of avalanche multiplication, making its variants good candidates for the TGFs parent process [Roussel-Dupré *et al.* 1998]. However, the proper mechanism that accelerates electron beams to produce gamma-rays is still uncertain. Suggested physical mechanisms include:

- a) In model of relativistic runaway breakdown from quasi-static electric field (QES) [Roussel-Dupré *et al.* 1998], electrons originated by the cosmic rays are accelerated upward by the transient electric field at high altitudes (>30 km) produced by the lightning will form TGFs by a process of bremsstrahlung of electrons with atoms;
- b) In low altitude (<20 km) QES-driven runaway electrons [Gurevich *et al.*, 2004], a new type discharge generated in thunderclouds by joint action of runaway breakdown and extensive atmospheric shower will produce TGFs;
- c) In heating by the electromagnetic pulse (EMP) associated with the rapidly moving return strokes of cloud-to-ground (CG) lightning [Inan and Lehtinen, 2005] the relativistic runaway electron (RRE) avalanche driven by electromagnetic impulses (EMP) radiated by rapidly moving lightning return

strokes indicates that TGFs can be produced by discharges with peak return stroke currents $I_p > 450\text{--}700$ kA with velocities $v_{rs}/c = 0.99\text{--}0.995$.

d) In EMP acceleration from a fractal intracloud flash [Milikh and Valdivia, 1999] the model relies upon a horizontal fractal lightning discharge, which generates the electromagnetic pulses that produce the stochastic electron runaway discharge in the stratosphere that will form TGFs;

e) In whistler generation of runaway electrons [Kaw *et al.*, 2001] the runaway discharge produces a plasma in which the whistler waves are excited by the energetic electrons. Whistlers are produced abundantly during thunderstorms and the coupling to the relativistic electrons of the runaway discharge can excite a self-focusing instability which leads to the formation of ducts in which the energetic electrons propagate to higher altitudes and producing TGFs.

A new physical concept of an avalanche type increase of a number of energetic electrons in air under action of the thundercloud electric field was proposed by Gurevich, Milikh, and Roussel-Dupré [1992]. The avalanche can grow in the thundercloud at the heights 3-10 km in the electric fields $E > E_c \approx 1\text{--}2\text{ kV/cm}$, which is almost an order of magnitude less than the threshold electric field of conventional air breakdown $E_{th} \approx 10\text{--}20\text{ kV/cm}$. The condition $E > E_c$ alone is insufficient for “runaway breakdown” (RB). The presence of fast seed electrons, having energy of 0.1-1 MeV, is also necessary. Due to collisions with air they can generate new fast electrons having energies $\varepsilon > \varepsilon_c$. This process of acceleration and collisions leads directly to the avalanche type growth of the number of runaway electrons.

In this paper we consider the production of “seed” electrons based on the assumption that they come out from the decay of a rest muon after an intracloud lightning discharge. Considering a source with an area of 1 km^2 , we estimate that 10^7 relativistic electrons per millisecond with mean energy of 35 MeV are produced in this process. Section II describes the TGFs muon model. Calculations and discussions are presented in section III.

II. The TGF muon model

In this work we suggest that relativistic upward electrons produced by the muon decay

$$\mu^- \rightarrow e^- + \nu_e + \bar{\nu}_\mu$$

originates the TGF energy spectrum observed above electrical storms. Muons are particles originated by several nuclear processes, including decay of pions produced in hadronic interactions of cosmic rays [Yao *et al.*, 2006]. Experimental measurements show that muon decay produces electrons with mean kinetic energy 35 MeV [Barlow *et al.*, 1964]. Surprisingly, Monte Carlo calculations of Smith *et al* [2005] indicate that seed electrons producing TGFs have this same mean energy. Then, our model is consistent with such findings.

As illustrated in Fig.1, these muons decelerate due to repulsion with the transient electrical field (ΔE) created by lightning discharges (ΔQ). From the isotropic muon decay, the relativistic upward electrons will produce gamma-rays in an avalanche-type process of runaway electrons.

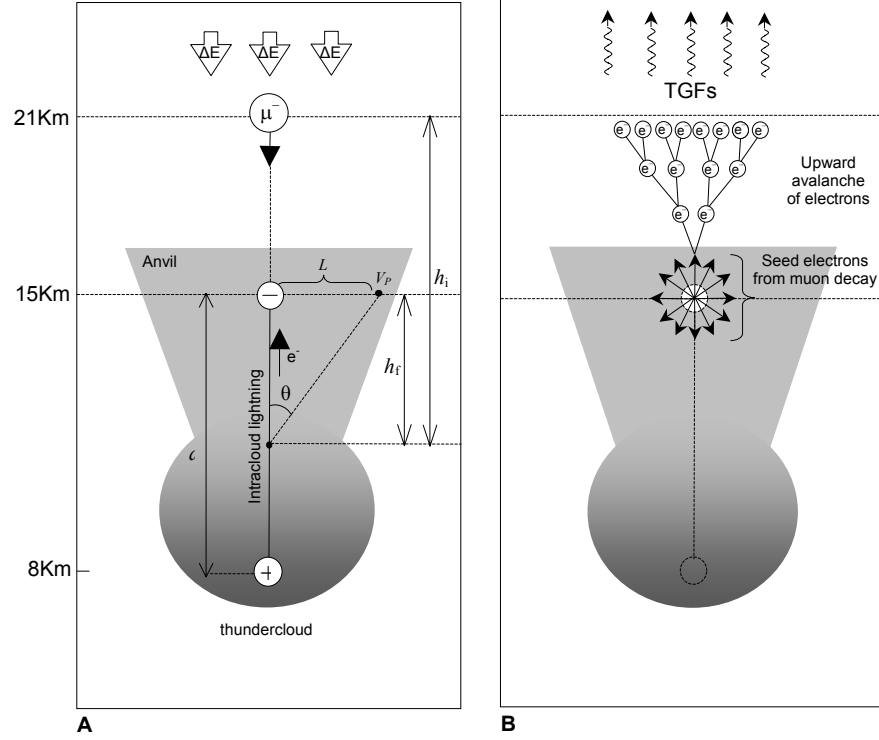


Figure 1. A: Muon stopped by the ΔE transient electrostatic field produced by an energetic intracloud lightning. **B:** Isotropic muon decay producing seed electrons, electron avalanche, and TGFs.

III. Results

Lightning is responsible for rapid electrostatic field-changes of thunderstorms [Uman, 1984]. When positive charge of the cloud is destroyed due to an intra-cloud discharge, a transient electric field produces runaway electrons on the top of the thunderstorm, as illustrated in Fig. 1B. The potential-

change measured on the conductive plane due to an intra-cloud discharge destroying a portion of vertically oriented positive electrical dipole can be calculated according to Eq. 1 [Uman, 1984]:

$$\Delta V = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Qd \cos \theta \sin^2 \theta}{L^2} \quad (1)$$

where Q is the total charge transferred by the lightning, d is the dipole length (lightning length), ϵ_0 is the vacuum dielectric permittivity, and L is the distance to the center of the horizontal conductive plane, and θ is the angle relative to the dipole axis. Using Eq. 1, we verify that ΔV is approximately constant along of a horizontal plane above the positive charge ($+Q$) for $0 \leq L \leq 1$ km, a representative thundercloud radius [Uman, 1984]. Thus, the maximum kinetic energy of muons that the cloud can stop is given by:

$$K_{\max} = q(V_f - V_i) = q \left(\frac{Q}{2\pi\epsilon_0} d \left(\frac{1}{h_f^2} - \frac{1}{h_i^2} \right) \right) \quad (2)$$

Where q is the muon charge, and h_i and h_f are the initial and final positions of muon relative to the center of the dipole (see Figure 1). *Dwyer and Smith* [2005] and *Williams et al.* [2006], proceeding from the results of simplified simulations, placed the TGFs source origin in the range of 15–21 km. Thus, we will consider those stopped muons between 15 and 20 km, corresponding to the estimated source altitudes in *Dwyer and Smith* [2005]. TGFs are strongly concentrated around Earth's equator when compared to lightning [*Williams et al.*, 2006] and thundercloud tops are higher near to this region. In general case, the main negative charge in the lower part of a thundercloud [*Krehbiel et al.*, 1979] occurs at a height where the atmosphere temperature is between -10°C and -20°C. This temperature range is typically between 6 and 8 km. The positive charge at the top of the storm does not have so clear a relationship with temperature as the negative charge but can typically occur between -25°C and -60°C depending on the size of the storm. This temperature range usually lies between 8 and 16 km in altitude [*Singh et al.*, 2004; *Uman*, 1984]. For the other side, *Stanley et al.* [2006] recorded a link between TGFs

and intracloud lightning discharges. In this case, TGFs were produced by positive-polarity intracloud (+IC) discharges that transferred electrons upward. A typical intracloud discharge travels over a total path length of 5 to 10 km and neutralizes 10 to 30 C [Uman, 1984]. TGFs are relatively atypical and rare phenomena. The more recent RHESSI satellite has a greatly improved detection rate [Smith *et al.*, 2005] with > 620 probable TGFs events detected in over 3 years of operations.

The peak currents of TGF-associated lightning discharges are often among the most intense [Inan *et al.*, 2006], in the range of 450-700 kA [Inan and Lehtinen, 2005]. Here, we will consider positive-polarity energetic intracloud lightning (+EIC) as responsible for the TGFs production. EIC is an isolated lightning event that occurs in thunderstorms and produce very powerful HF/VHF radiation and distinctive narrow bipolar electric field change pulses, occurring between 7 and 15 km altitude ground level [Smith *et al.*, 2004]. The association of a TGF with strong VHF pulses from IC flashes was recorded by Rison *et al.* [1999] and Jacobson [2003].

Thus, let us consider an intra-cloud charge transfer of $Q = 450$ C over a timescale ~ 1 ms (corresponding to the peak current of 450 kA) between 8 and 15 km altitude, $h_i = 9.5$ km, and $h_f = 3.5$ km (see Figure 1A), the calculated (Eq. 2) maximum kinetic energy of muons that the thunderclouds can stop is about $K_{max} = 4$ GeV. However, muons lose energy at a fairly constant rate of about $2 \text{ MeV g}^{-1} \text{ cm}^2$ [Gringel *et al.*, 1986]. According to the barometric height formula given by:

$$A = 1033 - (0.03648H) + (4.26 \times 10^{-7} H^2) \quad (3)$$

where A is in g/cm^2 and H is the altitude in feet [Ziegler, 1996], the mean amount of air between 21 km and 15 km is about 90 g/cm^2 . Thus, muons will lose $K_i = 0.2$ GeV to ionization before reaching the top of the cloud. Consequently, the total kinetic energy loosed by the muons is $K_{max} + K_i = 4.2$ GeV.

Roughly 80% of the secondary cosmic ray flux consists of positive and negative muons [Motoki *et al.*, 2003], where about half of this flux is formed by negative muons [Yao *et al.*, 2006]. Let us

consider that the cosmic ray rate of muon is $\sim 10^4 \text{ m}^{-2}\text{s}^{-1}$ at sea level, for all energies, and all angles [Djemil *et al.*, 2007]. Particle flux of cosmic ray increased very rapidly with altitude, with a 10 times increase at 15 km altitude [Pfozter 1936; Ziegler, 1996]. This means an ambient atmospheric muon flux of $\phi_0 = 1.5 \times 10^5 \text{ m}^{-2}\text{s}^{-1}$ at about 15 Km altitude. Considering a cloud area of $A = 1 \text{ km}^2$, the total muon flux is:

$$\phi_t = \phi_0 A \cong 1.5 \times 10^{11} \text{ s}^{-1} \quad (4)$$

From the muon momentum spectrum of Bugaev *et al.* [1998] we estimate that about 15% of the total flux has energy between 1 GeV and 4.2 GeV. Without an electric field, we estimate that less than 0.001% of total atmospheric muon flux (with energy less than 0.2 GeV) is stopped through ionization process. This fraction is insufficient to produce TGFs. Then, it seems that a strong electrical field is needed to produce detectable TGFs in higher altitudes. Considering that the duration of a TGF is 1 millisecond [Smith, 2004] the muon flux over the cloud can be taken as 2×10^7 . Considering that about half of this flux is formed by negative muons, this amount of decelerated muons will decay to produce about 10^7 energetic seeding electrons per millisecond. Monte Carlo simulations of Dwyer and Smith [2005] predict that about 10^{16} runaway electrons are created by the runaway breakdown avalanche for a source at 21 km altitude, and 2×10^{17} runaway electrons are created if avalanche was located at 15 km altitude. Dwyer and Smith [2005] have considered an ambient atmospheric cosmic ray flux of $1000 \text{ m}^{-2}\text{s}^{-1}$ and a source with an area of 1 km^2 , resulting in 10^6 seed electrons per millisecond (at 15 km altitude). In this work, we consider ambient cosmic ray flux (of muons) as being $1.5 \times 10^5 \text{ m}^{-2}\text{s}^{-1}$ and a source (thundercloud) with an area of 1 km^2 , resulting in 10^7 seed electrons per millisecond (at 15 km altitude). It corresponds to the avalanche multiplication factor of about 10 times lower ($\sim 2 \times 10^{10}$ at 15 km altitude) as compared with that calculated by Dwyer and Smith [2005] ($\sim 2 \times 10^{11}$ at 15 km altitude).

The proposed model raises many interesting questions, including the origin of electrons that produces gamma-rays seen on the ground. *Dwyer et al*[2004] detected gamma-rays on the ground in association with rocket-triggered lightning with energies extending up to more than 10-MeV. According to our model, the possibility of muons stopped below 15 km is important for its possible connections to ground based gamma-ray bursts (Fig. 2).

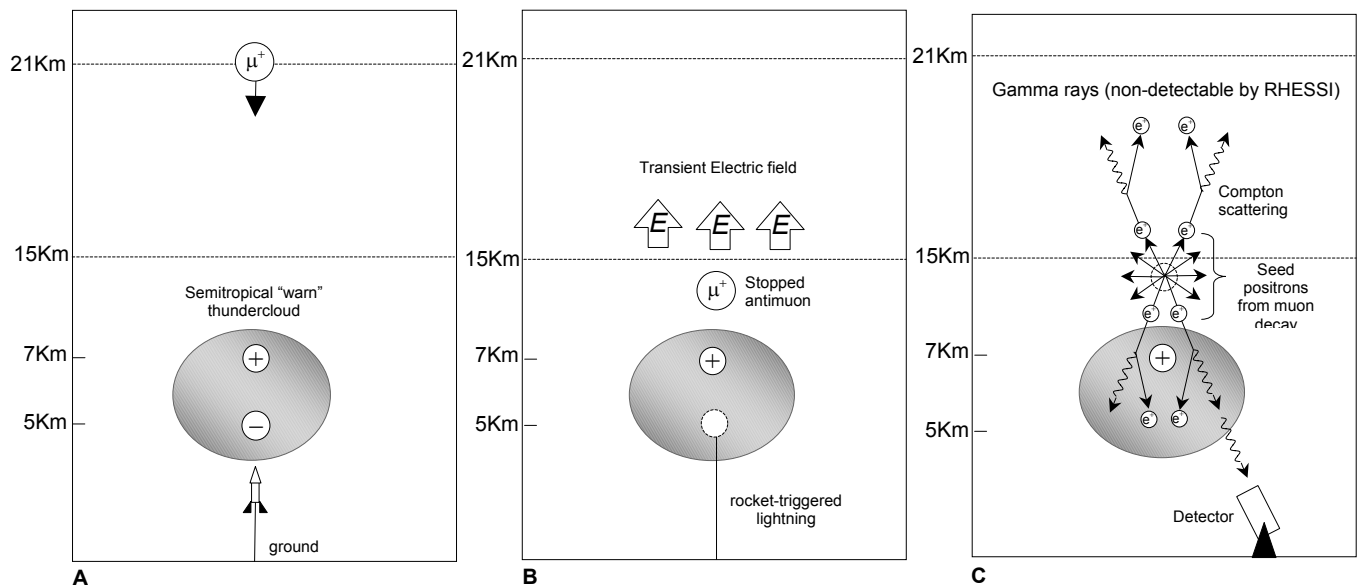


Figure 2. Mechanism for production of TGFs seen on the ground. Small thunderclouds (A) can to stop positive muons by rocket-triggered lightning (B). It will produce gamma-rays on the ground (C).

Thus, we believe that the ground based observations of gamma rays may be different in nature from those observed on satellites. In other words, seed electrons for ground-based x-ray observations, and satellite based x-ray observations, may be dominated by different altitudes, where different physical mechanisms (involving decaying of positive or negative muons) are dominant. For example, below

altitude of 15 km (considering a negative cloud-to-ground lightning), positive muon decay is dominant, producing an avalanche of positrons. Efforts in exploring such questions are in progress.

IV. Conclusion

In this paper we consider an aspect of TGFs production that has been comparatively ignored by theoreticians, which is the availability of so-called upward “seed” electrons to feed into (upward) avalanche process. Considering a source area of 1 km^2 , the present model for TGFs formation based on stationary muon decay predicts 10^7 relativistic seed electrons per millisecond with mean energy of 35 MeV and an avalanche multiplication factor of about 10^{10} , in good agreement with *Dwyer and Smith* [2005]. According to muon decay model, seed electrons for ground-based x-ray observations [*Dwyer et al.*, 2004], and satellite based x-ray observations, may be dominated by different altitudes, where different physical mechanisms (involving positive or negative muon decay) are crucial.

Acknowledgments

This work is supported by the Brazilian agencies CAPES and CNPq.

References

Barlow, J., P. S. L. Booth, L. J. Carroll, G. R. Court, J. D. Davies, D. N. Edwards, R. G. Johnson and J. R. Wormald (1964), The momentum spectrum of electrons from muon decay, *Proc. Phys. Soc.*, 84, 239.

Bugaev, E. V., A. Misaki, V. A. Naumov, T. S. Sinegovskaya, S. I. Sinegovsky, and N. Takahashi (1998), Atmospheric muon flux at sea level, underground, and underwater, *Phys. Rev., D* 58, 054001.

Cummer, S. A., Y. Zhai, W. Hu, D. M. Smith, L. I. Lopez, and M. A. Stanley (2005), Measurements and implications of the relationship between lightning and terrestrial gamma-ray flashes, *Geophys. Res. Lett.*, 32, L08811.

Djemil, T, R Attallah, and J. N. Capdevielle (2007), Sensitivity of atmospheric muon flux calculation to low energy hadronic interaction models, *J. Phys. G: Nucl. Part. Phys.*, 34, 2119.

Dwyer, J. R., H. K. Rassoul, M. Al-Dayeh, L. Caraway, B. Wright, A. Chrest, M. A. Uman, V. A. Rakov, K. J. Rambo, D. M. Jordan, J. Jerauld, and C. Smyth (2004), Measurements of x-ray emission from rocket-triggered lightning, *Geophys. Res. Lett.* **31**, L05119.

Dwyer, J. R. and D. M. Smith (2005), A comparison between Monte Carlo simulations of runaway breakdown and terrestrial gamma-ray flash observations, *Geophys. Res. Lett.*, 32, CiteID L22804.

Fishman, G. J., P. N. Bhat, R. Mallozzi, J. M. Horack, T. Koshut, C. Kouveliotou, G. N. Pendleton, C. A. Meegan, R. B. Wilson, W. S. Paciesas, S. J. Goodman, and J. J. Christian (1994), Discovery of Intense Gamma-Ray Flashes of Atmospheric Origin, *Science*, 264, 1313.

Gringel, W., J. M. Rosen, and D. J. Hofmann (1986), Electrical structure from 0 to 30 kilometres, in *The Earth's Electrical Environment, Stud. Geophys.*, edited by E.P. Kriser, and R.G. Roble, pp.166, National Academic Press, Washington D.C.

Inan, U. S., N. G. Lehtinen (2005), Production of terrestrial gamma-ray flashes by an electromagnetic pulse from a lightning return stroke, *Geophys. Res. Lett.* 32, L19818.

Inan, U. S., D. M. Smith, L. I. Lopez (2006), Terrestrial Gamma Ray Flashes and lightning discharges, *Geophys. Res. Lett.*, 33, L18802.

Jacobson, A. R. (2003), How do the strongest radio pulses from thunderstorms relate to lightning flashes?, *J. Geophys. Res.*, 108(D24), 4778.

Kaw, P. K., G. M. Milikh, A. S. Sharma, P. N. Guzdar, and K. Papadopoulos (2001), Gamma ray flashes by plasma effects in the middle atmosphere, *Phys. Plasmas* 8, 4954.

Krehbiel, P. R., M. Brook, and R.A. McCrosy (1979), An analysis of charge structure of lightning discharges to ground, *J. Geophys. Res.*, 84, 2432.

Milikh, G., and J.A. Valdivia (1999), Model of gamma-ray flashes due to fractal lightning, *Geophys. Res. Lett.*, 26(4), 525.

Motoki, M., T. Sanuki, S. Orito, K. Abe, K. Anraku, Y. Asaoka, M. Fujikawa, H. Fuke, S. Haino, M. Imori, K. Izumi, T. Maeno, Y. Makida, N. Matsui, H. Matsumoto, H. Matsunaga, J. Mitchell, T. Mitsui, A. Moiseev, J. Nishimura, M. Nozaki, J. Ormes, T. Saeki, M. Sasaki, E.S. Seo, Y. Shikaze, T. Sonoda, R. Streitmatter, J. Suzuki, K. Tanaka, I. Ueda, J.Z. Wang, N. Yajima, T. Yamagami, A. Yamamoto, Y. Yamamoto, K. Yamato, T. Yoshida, K. Yoshimura (2003). Precise measurements of atmospheric muon fluxes with the BESS spectrometer. *Astroparticle Physics* 19, 113.

Pfotzer, G. (1936), *Z. Physik*, 102, 23.

Rison, W., R. J. Thomas, P. R. Krehbiel, T. Hamlin, and J. Harlin (1999), A GPS-based three dimensional lightning mapping system: Initial observations in central New Mexico, *Geophys. Res. Lett.*, 26, 3573.

Roussel-Dupré, R., E. Symbalisty, Y. Taranenko, V. Yukhimuk (1998), Simulations of high-altitude discharges initiated by runaway breakdown, *J. Atmos. Sol. Terr. Phys.*, 60, 917.

Schultz, L.J., K.N. Borozdin, J.J. Gomez, G.E. Hogan, J.A. McGill, C.L. Morris, W.C. Priedhorsky, A. Saunders, M.E. Teasdale (2004), Image reconstruction and material Z discrimination via cosmic ray muon radiography, *Nucl. Inst. and Meth. in Phys. Res. A*, 519, 687.

- Singh, D.K., R.P. Singh, and A.K. Kamra (2004), The electrical Environment of the Earth's Atmosphere: A Review, *Space Sci. Rev.*, *113*, 375.
- Smith, D. A, M. J. Heavner, A. R. Jacobson, X. M. Shao, R. S. Massey, R. J. Sheldon, and K. C. Wiens (2004), A method for determining intracloud lightning and ionospheric heights from VLF//LF electric field records, *Radio. Sci.*, *39*, RS1010.
- Smith, D. M., L. I. Lopez, R. P. Lin, C. P. Barrington-Leigh (2005), Terrestrial Gamma-Ray Flashes Observed up to 20 MeV, *Science*, *307*, 1085.
- Stanley, M. A., X.-M. Shao, D.M. Smith, L.I. Lopez, M.B. Pongratz, J.D. Harlin, M. Srock, and A. Regan (2006), A link between terrestrial gamma-ray flashes and intracloud lightning discharges, *Geophys. Res. Lett.*, *33*, L06803.
- Uman, M. A (1984), in *Lightning*, pp. 2, 69, 255 and Appendix E, Dover Publications, INC, New York.
- Williams, E. A., R. Boldi, J. Bór, G. Sători, C. Price, E. Greenberg, Y. Takahashi, K. Yamamoto, Y. Matsudo, Y. Hobara, M. Hayakawa, T. Chronis, E. Anagnostou, D. M. Smith, L. Lopez (2006), Lightning flashes conducive to the production and escape of gamma radiation to space, *J. Geophys. Res.*, *111*, D16309.
- Wilson, C. T. R. (1925), The electric field of a thunderstorm and some of its effects, *Proc. Phys. Soc. London*, *37*, 32D.
- Yao, W. M, C. Amsler, D. Asner, R.M. Barnett, J. Beringer, P.R. Burchat, C.D. Carone, C. Caso, O. Dahl, G. D'Ambrosio, A. De Gouvea, M. Doser, S. Eidelman, J.L. Feng, T. Gherghetta, M. Goodman, C. Grab, D.E.Groom, A. Gurtu, K. Hagiwara, K.G. Hayes, J.J. Hernandez-Rey, K. Hikasa, H. Jawahery, C. Kolda, Y. Kwon, M.L. Mangano, A.V. Manohar, A. Masoni, R. Miquel, K. Monig, H. Murayama, K. Nakamura, S. Navas, K. A. Olive, L. Pape, C. Patrignani, A. Piepke, G. Punzi, G. Raffelt, J. G. Smith,

M. Tanabashi, J. Terning, N.A. Tornqvist, T.G.Trippe, P. Vogel, T. Watari, C.G.Wohl, R.L. Workman, P.A. Zyla (2006), *Review of Particle Physics. Journal of Physics G*, 33, 246.

Ziegler, J. F (1996)., Terrestrial cosmic rays and soft errors, *IBM J. of Res.& Dev.*, 40, 19.