

Modelo de la descarga eléctrica que excita a un láser químico de HF iniciado a partir de SF₆ y C₃H₈

M. T. BERNAL, C. F. MOSQUERA*, C. A. RAFFO, J. L. LADAGA, E. G. SANCHO*

Laboratorio de Láser - Facultad de Ingeniería - UNBA
Paseo Colón 850 (1063) - Capital Federal - Argentina
e-mail: esancho@aleph.fi.uba.ar

Se presenta un modelo simple que simula la cinética de las sustancias químicas presentes en la cavidad láser (SF₆ y C₃H₈) con las provenientes de la descarga eléctrica, a fin de predecir los valores observados de la intensidad de salida y la evolución temporal del pulso láser de HF de un dispositivo desarrollado en nuestro laboratorio. El modelo supone composición homogénea del gas: se desprecian las causas que alteran esta homogeneidad (tales como gradiente de temperatura, arcos, etc.). Se presentan gráficos de concentraciones de especies en el tiempo (en el lapso de duración del pulso), y se compara la potencia de salida calculada, con los resultados experimentales.

We submit a simple computer simulation of the kinetics of chemical substances originally present in the laser cavity (SF₆ and C₃H₈) and also of those arising from the electrical discharge, with the aim of predicting the observed values of the output intensity and temporal evolution of HF laser pulse of a device developed in our Laboratory. The model assumes an homogeneous composition of the gas: any cause that could alter this homogeneity (such as temperature gradients, arcs, etc.) were regarded. Graphs of concentrations vs. time are plotted within the width of the laser pulse. A plot of the outcoupled power against time is obtained from the kinetics of concentrations and it is compared with experimental results.

Introducción

A fin de reproducir los valores experimentales de la potencia del pulso del láser de HF desarrollado en el Laboratorio, se simuló por computadora la descarga eléctrica que excita el medio activo.

Las ecuaciones del modelo incluyen las principales reacciones y los mecanismos de activación y desactivación que contribuyen significativamente a la potencia de salida del láser. Se despreciaron los factores que alteran la uniformidad del medio activo, tales como: gradientes de temperatura, formación de arcos, etc. Así se obtienen las poblaciones, las temperaturas electrónica y traslacional en función del tiempo en el intervalo en que se produce el pulso láser, la ganancia en función de la temperatura traslacional y la potencia de salida en función del tiempo. De aquí surge que el láser se dispara antes de finalizado el pulso de corriente, lo que coincide con la experiencia.

1.- Características del láser y de la descarga

El láser de HF es pulsado, con descarga eléctrica transversal rápida ($\cong 1 \mu\text{s}$). Tiene electrodos de grafito con perfil de Rogowsky separados 1.2 cm, de 45 cm de longitud y un volumen activo de 0.12 litros. La mezcla es de 50 Torr de SF₆ y 4 Torr de C₃H₈. En régimen multimodo y con 20 KV, el pulso de salida es de alrededor de 40 mJ con un ancho temporal de 0,5 μs ; sintonizado en una línea, es de aproximadamente 15 mJ y de 0,2 μs de ancho temporal. De datos experimentales se determinaron valores de la intensidad de corriente en función del tiempo mediante la técnica de diferencias finitas. Estos valores fueron ajustados mediante la función:

$$I(t) = a t^4 + b t^3 + c t^2 + d t + e$$

donde a, b, c, d y e son constantes de ajuste.

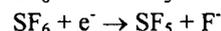
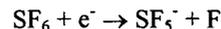
*Autor a quien se remite la correspondencia

2.- Determinación de las poblaciones

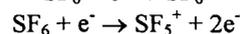
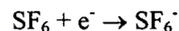
Dado que la energía necesaria para romper la molécula de SF₆ liberando un átomo de flúor¹ es de 3.1 eV, no se produce ruptura térmica del SF₆ en el rango de las temperaturas traslacionales calculadas. La única fuente significativa de producción de SF₅ es por impacto electrónico en el SF₆. Se consideró despreciable la probabilidad de procesos que condujeran a la formación de SF₃.

Las reacciones consideradas^{2,3,4} son:

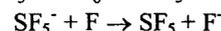
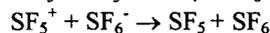
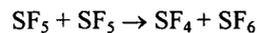
1. las de ruptura del SF₆ por colisión con los electrones de la descarga:



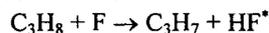
(la primer reacción es más probable que la segunda pues el átomo de flúor pierde más rápidamente el electrón capturado que en el caso de un sistema de átomos fuertemente acoplados como el SF₅, ya que la energía debida a la captura del electrón es compartida por los muchos grados de libertad de la molécula compleja).



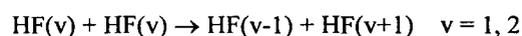
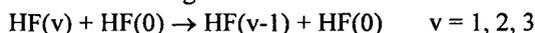
2. las que tienden a restablecer la población de SF₆ y modifican la de F:

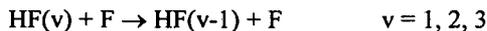


3. las que producen el HF excitado:



4. las de desexcitación del HF por colisiones con otras moléculas de HF en igual o diferente nivel vibracional:





Se despreció la desactivación del HF por colisiones con las otras especies⁵, pues la velocidad de las mismas es muy pequeña en comparación a la desactivación por colisiones HF-HF.

Las ecuaciones que dan cuenta de la evolución temporal de las especies presentes, son de la forma:

$$dc_i/dt = -k_{\text{directa}} c_i c_j + k_{\text{inversa}} c_n c_p$$

donde k es el coeficiente de velocidad de la reacción directa o inversa²; c_i y c_j son las concentraciones de todas las especies reaccionantes, y c_n y c_p son las concentraciones de las especies producidas por la reacción: $c_i + c_j \rightarrow c_n + c_p$. Los procesos de recombinación se despreciaron pues son de pequeña probabilidad, debido a la baja presión de trabajo y a la breve duración de la descarga.

Conocidas las condiciones iniciales de las poblaciones de las sustancias reaccionantes, se determinó la variación de las producidas por la reacción durante el lapso de tiempo en que ocurre la emisión láser, aproximadamente 0.5 μs (ver figs. 1,2,3 y 4)

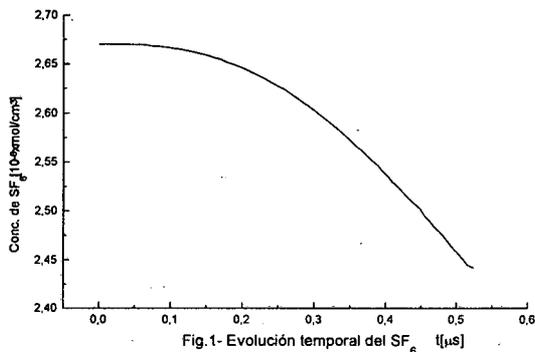


Fig. 1- Evolución temporal del SF₆

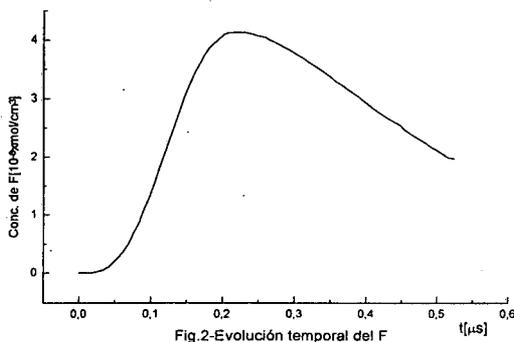


Fig. 2- Evolución temporal del F

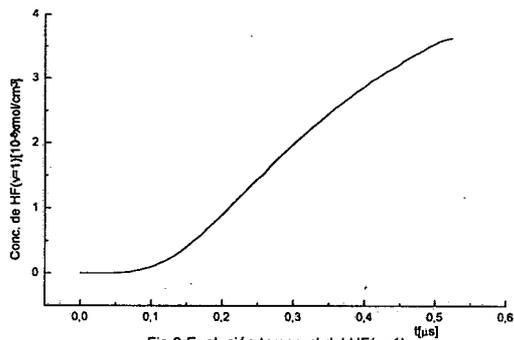


Fig. 3- Evolución temporal del HF(v=1)

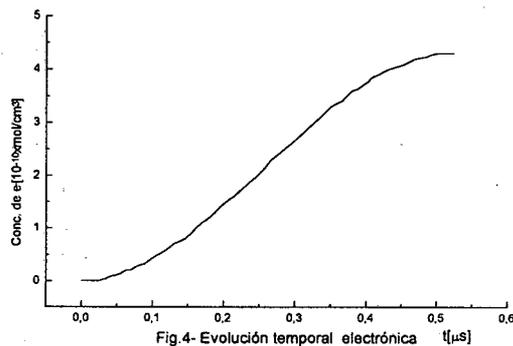


Fig. 4- Evolución temporal electrónica

3.- Temperatura electrónica y traslacional

Para determinar las temperaturas electrónica (de los electrones libres) y traslacional se supuso que, dentro del estado de no equilibrio del sistema, coexisten subsistemas próximos al equilibrio termodinámico. Se consideró que los electrones obedecen a la distribución de Maxwell-Boltzman. Igualando la energía total de la distribución, con la disipada en el gas (su resistencia óhmica durante la descarga es de 0.45 ohm), se obtuvo la siguiente expresión de la temperatura electrónica T_e en función del tiempo:

$$T_e(t) = [A_1 \int I^2 dt + A_2] n_e^{-1}$$

donde n_e es la población de los electrones dependiente del tiempo, y A_1 y A_2 son constantes. A_1 se calcula integrando la ecuación diferencial que surge de igualar la derivada temporal de la energía total del plasma electrónico con la distribución de Boltzmann, con una fracción de la potencia entregada por la fuente durante la descarga. Esta fracción se estimó considerando que cada fotón del pulso láser corresponde a un choque inelástico eficiente. A_2 se determina suponiendo que en $t=0$ los electrones tienen energía aproximadamente igual a 3.1 eV, energía necesaria para romper el SF₆ y liberar un átomo de flúor.

Se considera que a la presión de trabajo los gases se comportan como ideales. Por lo tanto se debe cumplir que:

$$P = RT \left[\sum_i n_i(t) + \sum_i n(v,t) \right]$$

donde R es la constante de los gases, $n_i(t)$ son las poblaciones de todas las especies químicas y $n(v,t)$ las correspondientes a las especies que intervienen en la generación

del pulso láser, ambas en moles por unidad de volumen. Derivando la ecuación de estado respecto del tiempo -suponiendo que la presión P es constante- se obtiene para la temperatura traslacional:

$$T_r(t) = C \left[\sum_i n_i(t) + \sum_i n(v,t) \right]^{-1}$$

donde C es una constante que se determina considerando que en $t=0$ es $T_r(0) = 300$ K.

4.- Ganancia

La ganancia se obtuvo asignando a las poblaciones vibro-rotacionales de la molécula de HF, la distribución de Maxwell-Boltzman⁶. Su expresión es:

$$\alpha(v, j, m) = \left(\frac{hN_A}{4\pi} \right) \omega_c \Phi B(2j+1) \times$$

$$\left\{ \left[\frac{n(v+1)}{Q_{rot}^{v+1}} \exp\left(\frac{-hcE_{v+1,j+m}}{kT_r}\right) \right] - \left[\frac{n(v)}{Q_{rot}^v} \exp\left(\frac{-hcE_{v,j}}{kT_r}\right) \right] \right\}$$

en la cual la energía vibro-rotacional está dada por:

$$E_{v,j} = \sum_{j=1} \sum_{l=0} Y_{lj} (v+1/2)^l [j(j+1)]^j$$

donde Y_{lj} son los coeficientes de Dunham; Φ es el factor de ensanchamiento de línea -lorentziano, pues a las presiones de trabajo el ensanchamiento es colisional-; v y j son los números vibracional y rotacional respectivamente, del nivel inferior; $m = -1$ para la rama P; B es la constante rotacional de la molécula de HF; ω_c es la frecuencia central de la transición involucrada; Q_{rot} la función de partición rotacional para cada nivel vibracional y $n(v)$ es la población del nivel vibracional. La línea de trabajo es la 1P(6), que corresponde a una transición de energía de 3693.4 cm^{-1} . La ganancia umbral estimada de nuestro dispositivo es $\alpha = 0.007 \text{ cm}^{-1}$.

5.- Energía y potencia

La energía del pulso láser $E(t,v)$, (expresada en milijoule), está relacionada con la variación de la población del HF en el nivel v causada por la acción láser en la transición $(v+1, j+m) \rightarrow (v, j)$, que llamaremos $\chi_{rad}(v)$. Por lo tanto:

$$E(t,v) = hc N_A f \int_0^t \sum_{j_m} \omega_c(v, J_m, m) \chi_{rad}(v) dt$$

donde f es la razón de la potencia de salida a la potencia de salida más la absorbida por el espejo, que en nuestro dispositivo vale 0.54; ω_c es la inversa de la longitud de onda de la transición considerada. $\chi_{rad}(v)$ se conoce a partir de las poblaciones de las especies excitadas. La variación temporal de la población total del nivel v es:

$$\frac{dn(v)}{dt} = \chi_{ch}(v) + \chi_{rad}(v) - \chi_{rad}(v-1)$$

donde

Referencias:

1- Atteo, E., Salvetti G. and Solimeno S., Lettere al Nuovo Cimento, 29, N° 5, 145 (1980).

$$\chi_{ch}(v) = \frac{dn_i}{dt}$$

corresponde a la variación temporal de la población química del nivel v cuando no lasea. O sea, $\chi_{rad}(v)$ representa el efecto de la emisión estimulada más la absorción⁶. En el instante en que la ganancia alcanza a la ganancia umbral, $\chi_{rad}(v)$ deja de ser cero y comienza a crecer.

Se puede calcular la energía $E(t,v)$ (fig. 5) y la potencia instantánea de salida (fig. 6). Esta última magnitud fue calculada derivando la expresión de $E(t,v)$.

Para realizar estos cálculos, es necesario tener en cuenta las variaciones de energía debida a los intercambios de calor equivalente, involucrados en las reacciones químicas a través de expresiones que dependen de las entalpías y de los calores específicos⁶.

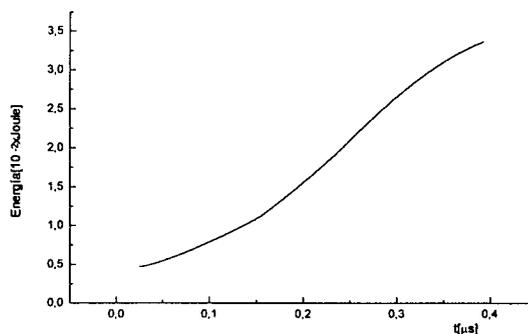


Fig. 5-Distribución de la energía en el tiempo

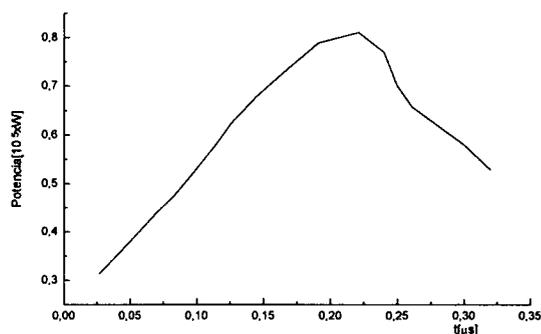


Fig. 6-Potencia instantanea

6.- Resultados y conclusiones

El objetivo de este trabajo fue reproducir el pulso láser obtenido en forma experimental con nuestro dispositivo. Para la línea 1P(6) la energía total del pulso es de 20 mJ y el ancho temporal es de 250 ns.

Los resultados obtenidos mediante este modelo dan una buena aproximación a los valores experimentales, ya que la energía total calculada es de 16 mJ y el ancho temporal del pulso es de 0.2 μs. La fig. 6 muestra la evolución temporal de la potencia instantánea de salida calculada, en la que se observa el ancho medio del pulso.

3- Pearson K., Cowles J. O., Hermann G. L., Gregg D. W. and Creighton J. R., IEEE, QE-9, N° 9 (1973).

4-Jacobson, W. and Kimbell G. H., IEEE, QE-9, N° 1 (1973).

5- Molina M. J. and Pimentel G. C., IEEE, QE-9, 64, N° 1 (1973).

6- Emanuel G., Handbook of Chemical Lasers, chapter 8, (1976).