

## Modélisation d'un laser chimique HF initié par photodissociation VUV

M. Sabonnadière, V. Tcheremiskine, Ph. Delaporte et M. Sentis

IRPHE-LP3, UMR 6594 du CNRS, Campus de Luminy, Case 918, 13288 Marseille cedex 9, France

**Résumé :** Le code numérique développé simule les caractéristiques d'un laser chimique HF sans réaction en chaîne pompé par photodissociation de la molécule fluorée  $\text{NF}_3$  à l'aide de décharges de surface. Le modèle étudie le couplage entre le transport du flux lumineux VUV intense de la source de pompage à travers le milieu actif du laser, constitué par le mélange gazeux  $\text{NF}_3/\text{H}_2/\text{N}_2/\text{Ar}$ , et les processus chimiques et radiatifs qui en découlent. Les performances lasers sont calculées en intégrant un système d'équations différentielles non linéaires couplées et permettent d'évaluer l'importance relative des différents processus cinétiques.

### 1. INTRODUCTION

Les lasers chimiques HF sans réaction en chaîne et initiés par des sources de pompage UV-VUV présentent des caractéristiques énergétiques élevées. Bien qu'ils soient moins efficaces que ceux avec réaction en chaîne [1], ils se révèlent de conception plus simple et plus sûre. Le laser chimique HF émet un rayonnement dans la bande spectrale 2,7-3,8  $\mu\text{m}$  à partir de transitions vibra-rotationnelles entre les trois premiers niveaux de vibration de la molécule HF. L'inversion de population entre ces niveaux est réalisée principalement par la réaction chimique  $\text{F} + \text{H}_2 \rightarrow \text{HF}^* + \text{H}$ . Dans notre étude, les atomes de fluor résultent de la photodissociation VUV de la molécule  $\text{NF}_3$ .

Cet article présente un modèle numérique simulant un laser HF sans réaction en chaîne pompé par décharges de surface plane multi-canaux afin d'évaluer ses caractéristiques.

Très récemment, une énergie laser de 0.4 J (énergie spécifique de 3.5 J/l) pour une durée d'impulsion de 3.2  $\mu\text{s}$  a été obtenue à l'institut Lebedev<sup>1</sup>, sur la base du schéma cinétique décrit dans cet article [2]. Simultanément et toujours par photodissociation, notre laboratoire a obtenu une énergie de 0.1 J pour une durée d'impulsion de 0.7  $\mu\text{s}$ .

### 2. MODELISATION DE LA SOURCE DE POMPAGE OPTIQUE

Les décharges de surface plane multi-canaux décrites précédemment [3], constituent la source de pompage optique du laser chimique HF étudié. D'un point de vue numérique, cette source de pompage est supposée plane, homogène et de longueur infinie. Son intensité lumineuse est alors assimilée à celle d'un corps noir présentant une température de brillance de 26 kK supposée constante et dont la valeur maximale, à la surface de la source ( $I_{o\lambda} = 4.7 \times 10^{23}$  photons/cm<sup>2</sup>.s), est donnée par la fonction de Planck [3]. Sa variation temporelle est supposée identique à celle du courant de décharge et est maximale au temps  $t = 0.8 \mu\text{s}$  pour une largeur à mi-hauteur de 2  $\mu\text{s}$ . La formule  $I_{\lambda}(t) = a I_{o\lambda} t \exp(-bt)$ , où  $a$  et  $b$  sont des constantes, décrit cette variation temporelle.

### 3. MODELE CINETIQUE ET RESULTATS NUMERIQUES

Le mélange gazeux initial, d'une pression totale de 1 bar, est composé de  $\text{NF}_3$ ,  $\text{H}_2$ ,  $\text{N}_2$  et Ar. La photodissociation des molécules  $\text{NF}_3$  dans la bande d'absorption 120-160 nm [4] représente la principale réaction de formation des atomes de fluor. Le gaz tampon  $\text{N}_2$  joue un rôle classique d'isolateur électrique

<sup>1</sup> Institut P.N. Lebedev, Laboratoire des processus photochimiques, Leninsky Prospekt 53, Moscou (Russie).

pour éviter tout claquage intempestif dans la cavité laser et l'argon permet l'obtention d'un rayonnement VUV intense dans le cas de décharges de surface.

Le code numérique développé ici, tient compte des principaux processus physico-chimiques [5]. Il permet de calculer, en intégrant un système de 21 équations différentielles non linéaires couplées, la dépendance spatio-temporelle des concentrations des espèces chimiques en présence, la température du mélange gazeux et la densité de photons d'émission stimulée. Les simulations numériques sont effectuées selon un axe  $x$  perpendiculaire au plan source et au résonateur optique. Ce dernier, d'une longueur de 50 cm, est formé par deux miroirs parallèles dont les coefficients de réflexion sont 0.6 et 1.

La figure 1 montre l'influence des pressions initiales de  $\text{NF}_3$  et de  $\text{H}_2$  sur l'énergie spécifique du laser. Les calculs ont été effectués à une distance de 6 cm du plan source en intégrant sur le volume de la cavité laser la densité d'énergie déterminée numériquement. L'énergie spécifique atteint alors une valeur maximale de 3.2 J/l lorsque les pressions initiales optimales de  $\text{NF}_3$  et de  $\text{H}_2$  sont respectivement de 4 et 8 mbars et pour des pressions d'argon et d'azote de 600 et 400 mbars.

Plusieurs réactions cinétiques sont néfastes à l'obtention d'un laser plus énergétique soit par un processus de recombinaison à trois corps entraînant une diminution locale de la densité de fluor atomique, soit par différents processus de relaxation. La figure 2 illustre l'influence négative d'un processus de relaxation vibra-électronique résonant où le radical  $\text{NF}(a)$ , produit principalement par la réaction chimique  $\text{H} + \text{NF}_2$ , dépeuple fortement les niveaux de vibration excités de la molécule HF.

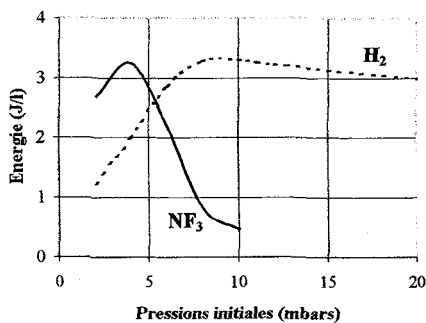


Figure 1: Energie laser spécifique en fonction des Pressions initiales de  $\text{NF}_3$  ( $[\text{H}_2]=10\text{mbars}$ ) et de  $\text{H}_2$  ( $[\text{NF}_3]=4\text{ mbars}$ )

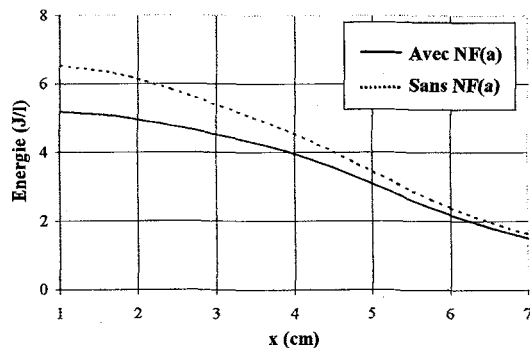


Figure 2: Influence du radical  $\text{NF}(a)$  sur l'énergie laser en fonction de  $x$  et à  $t=2\mu\text{s}$ , pour  $\text{NF}_3/\text{H}_2/\text{N}_2/\text{Ar}=4/10/400/600\text{ mbars}$ .

#### 4. CONCLUSIONS

Le modèle numérique développé, nous permet de simuler un laser chimique HF sans réaction en chaîne initié par une source VUV intense produite à l'aide de décharges de surface plane de forte température de brillance. Les performances du laser ont été obtenues en intégrant numériquement un système d'équations différentielles non linéaires couplées. L'énergie laser spécifique maximale calculée à 6 cm du plan source est de 3,2 J/l pour une composition optimal du mélange gazeux ( $\text{NF}_3/\text{H}_2/\text{N}_2/\text{Ar} = 4/10/400/600\text{ mbars}$ ). Nos résultats montrent également l'influence négative du radical  $\text{NF}(a)$  induisant une perte de l'énergie laser extraite. La recherche d'un élément chimique relaxant l'état électronique  $a$  de la molécule NF permettrait d'augmenter les performances énergétiques du laser.

#### Références

1. V.S.Zuev, L.D.Mikheev, in *Photochemical lasers*, edited by Harwood Academic Publ. (1991).
2. M.Yu.Artem'ev, A.S.Bashkin, L.D.Mikheev, V.M.Nesterov, M.L.Sentis, V.I.Tcheremiskine, in *XII Int. Symposium on Gas Flow and Chemical Lasers, St.Petersburg, (Russia,1998)*.
3. M.Sentis, M.Sabonnadiere, V.Tcheremiskine, in *Rapport final n°95-34-094-00-470-75-01 (1998)*.
4. T.Shirafuji and K.Tachibana, *Appl. Surf. Science* **79/80**, 117 (1994).
5. M.P.Sabonnadiere, V.I.Tcheremiskine, M.L.Sentis, L.D.Mikheev, Ph.C.Delaporte, in *XII Int. Symposium on Gas Flow and Chemical Lasers, St.Petersburg, (Russia,1998)*.