UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO

INSTITUTO DE FÍSICA

**MODELO AUTO-CONSISTENTE PARA A CINÉTICA
DA DESCARGA DO LASER A VAPOR DE COBRE**

**Tese de Doutorado
submetida ao Instituto de Física
da Universidade de São Paulo**

CLÁUDIO COSTA MOTTA

Comissão Examinadora: Prof. Dr. Nilson Dias Vieira Jr. (Orientador)
Prof. Dr. Ricardo Luiz Viana - UFPR
Prof. Dr. Homero Santiago Maciel - ITA-CTA
Prof. Dr. Armando Mirage - IPEN-CNEN
Prof. Dr. Ricardo Magnun Osório Galvão - IFUSP

SÃO PAULO - BRASIL

1996

SBI-IFUSP

305M810T2412

Manoel de Oliveira
Vice-Presidente, 1º. Conselho

580.44
M921m
①
Ex.1

Syano 44845

FICHA CATALOGRÁFICA

**Preparada pelo Serviço de Biblioteca e Informação
do Instituto de Física da Universidade de São Paulo**

Motta, Cláudio Costa

**Modelo auto-consistente para a cinética da descarga do
laser a vapor de cobre. São Paulo, 1996**

**Tese (Doutorado) - Universidade de São Paulo.
Instituto de Física. Departamento de Física Aplicada.**

Área de Concentração: Física do Estado Sólido.

Orientador: Prof. Dr. Nilson Dias Vieira Júnior.

**Unitermos: 1. Descarga Elétrica em Baixa Pressão;
2. Laser; 3. Plasma; 4. Cinética Física.**

USP/IF/SBI - 13/96

*À Elza Luzia,
...in memoriam.*

*A Ana Carolina, ao Luis Claudio,
à Lacy, ao José Claudio
e à Sandra Suelli.*

Agradecimentos

À Marinha do Brasil, que através do Diretor do Centro Tecnológico da Marinha em São Paulo, Contra-Almirante (EN) Ivan de Aquino Viana, possibilitou o desenvolvimento deste trabalho em tempo parcial.

Ao Dr. Nilson Dias Vieira Jr., pelo seu incentivo constante e sua ajuda nas horas mais difíceis deste trabalho.

Ao Prof. Dr. Ricardo M. O. Galvão pelas discussões sobre as equações de conservação.

Ao Prof. Dr. Homero Santiago Maciel pela discussão sobre transporte ambipolar, e

à Deus, pois apesar das inúmeras dificuldades que passei durante os anos que realizei este trabalho, ajudou-me a manter a clareza de idéias para que eu pudesse sobrepujá-las.

Resumo

Um modelo computacional autoconsistente para a cinética da descarga em um plasma frio, fracamente ionizado, do tipo produzido em tubos de descarga, foi desenvolvido. Ele foi utilizado para investigar a dinâmica das várias propriedades do plasma, tais como temperaturas, densidades e fluxos das espécies que o compõe. Em particular, o modelo desenvolvido considera explicitamente a composição do plasma contendo várias espécies em vários estados de excitação eletrônica. Pode-se determinar a dinâmica das populações envolvidas nas transições laser do átomo de cobre, num modelo autoconsistente para lasers operando em altas taxas de repetição ($\sim 5\text{KHz}$). O modelo mais completo construído considera cinco níveis para o gás tampão (Ne) e nove níveis para o átomo de cobre. O laser de cobre apresenta duas transições, uma no verde e outra no amarelo ($5106\text{ \AA}$ e $5782\text{ \AA}$), ambas terminando em estados metaestáveis de longa duração ($\sim 270\text{ }\mu\text{s}$), no átomo livre. No caso mais geral foram considerados trinta processos para determinar a dinâmica do plasma. O tratamento considera, primeiramente, somente a variação temporal e foi utilizado para estudar o plasma formado por três combinações diferentes de espécies: o gás de He puro; a mistura de He:Cu e por último a mistura Ne:Cu, correntemente utilizada em lasers a vapor de cobre. A evolução temporal da temperatura de elétrons, temperatura dos átomos e densidades das espécies, em particular a das espécies excitadas nos níveis de transição laser, pode ser determinada e os resultados comparados com resultados experimentais e de simulação reportados na literatura, mostrando boa concordância no comportamento geral. Verificou-se neste modelo que o principal mecanismo de desexcitação do nível metaestável inferior da transição laser são as colisões superelásticas e não a desativação via interação com as paredes (difusão). Após este primeiro tratamento o modelo passou a considerar também a dependência radial do plasma numa simetria cilíndrica (modelo radial). Neste caso, o efeito de penetração do campo elétrico é explicitamente considerado e o modelo pode ser aplicado tanto a tubos de pequeno como de grande diâmetro, uma vez que o diâmetro é uma grandeza fundamental para a obtenção de lasers de alta potência. Demonstrou-se que esse efeito produz uma distribuição de população dos níveis envolvidos nas duas transições laser (verde e amarela) do cobre, temporalmente distintas e crescentes da borda para o centro, o que concorda com resultados da literatura. Assim, o pulso do laser irá se iniciar com a emissão verde na borda do tubo, conforme previsões de nosso modelo. Determinou-se também que existe um limite máximo para o comprimento do tubo do laser, decorrente da existência de uma janela temporal de ganho ($\sim 100\text{ ns}$).

Abstract

A self-consistent computational model was developed to describe the electrical discharge in a cold plasma, weakly ionized, of the kind usually produced in discharge tubes. The various properties of the species of the plasma as temperature of the electrons, its densities and fluxes could then be obtained. In particular, the model explicitly considers the plasma containing different species in different state of electronic excitation. From these quantities, one can determine the dynamics of the populations involved in the copper atomic laser transition, in a self-consistent model for lasers operation in high repetition rates ($\sim 5\text{KHz}$). The most complete model developed takes into account five level for the buffer gas and nine levels for the copper atom. The copper laser shows two transitions, one in the green and other in the yellow, ($5106 \text{ \AA}$ e $5782 \text{ \AA}$), both ending in metaestable states of long duration ($\sim 270 \text{ }\mu\text{s}$), in the free atom. In the most complete case studied, thirty processes were considered in the calculations of the plasma dynamics. The formalism first considers solely the temporal dependence and it was used to study the plasma formed by three species: pure He; He and Cu; and Ne and Cu, the last one been currently used in copper vapor lasers. The time dependent populations of the electrons temperature, atoms temperature and densities, in particular the excited levels involved in the laser transitions, could be determined and the results were compared with experimental and simulated results of literature, showing a general good agreement. It was verified, in this model, that the main deexcitation mechanism of the lower metastable laser level is superelastic collisions and not deexcitation via interactions with the walls (diffusion). Therefore, the model was extended to take into account the radial dependence of the plasma in a cylindrical symmetry (radial model). In this case, the skin penetration effect of the electrical field was explicitly considered and the model can then be applied to either small and large diameters, as the diameter is a fundamental parameter for obtaining high power lasers. It is shown that this effect produces a temporally distinct population distribution in the levels of the laser transitions (yellow and green) of the copper atoms, that start in the border and goes to the center, in agreement with the literature. Therefore, the laser pulse starts with the green emission in the border, according to the prediction of our model. It was also found that there is a limit for the maximum length of the laser tube due to the existence of a time window for the positive gain of the laser ($\sim 100 \text{ ns}$).

Lista de Símbolos

- A probabilidade, por unidade de tempo, de emissão induzida (s^{-1}).
- A, B constantes da estrutura hiperfina (MHz).
- A_{ef} probabilidade efetiva, por unidade de tempo, de emissão induzida (s^{-1}).
- a raio do tubo de descarga do laser (cm)
- $\hat{a}_r$ vetor unitário na direção radial.
- $\vec{B}$ vetor indução magnética (Wb / cm²)
- b parâmetro de impacto (cm)
- C_s capacitância de armazenamento (F)
- C_p capacitância de sobre voltagem (F)
- c velocidade da luz no vácuo (cm/s)
- $\vec{c}_i$ velocidade peculiar de i -ésima partícula (cm/s).
- D_E coeficiente de difusão do campo elétrico (cm² / s).
- D_e coeficiente de difusão livre dos elétrons (cm² / s)
- D_e^A coeficiente de difusão ambipolar dos elétrons (cm² / s).
- D_i coeficiente de difusão da i -ésima espécie iônica (cm² / s)
- D_i^A coeficiente de difusão ambipolar de i -ésima espécie iônica (cm² / s).
- d diâmetro do tubo de descarga (cm).
- $d^3\vec{x}$ elemento de volume do espaço de configuração (cm³).
- $d^3\vec{v}$ elemento de volume do espaço de fase (cm⁶ / s³).
- $d\Omega$ elemento de ângulo sólido.
- $\vec{E}$ vetor campo elétrico (V/cm)
- E_i^T energia translacional
- e carga do elétron
- F força associada ao potencial de colisão (N).
- F_i força externa (N).
- f frequência de operação do laser (Hz).
- f_e função de distribuição dos elétrons.
- f_i função de distribuição para a i -ésima espécie.

$\bar{G}_0, \bar{G}'_0$	velocidade do centro de massa antes e após colisão
g	parâmetro de plasma
g_i, g_j	pesos estatísticos dos níveis de energia i e j .
$g(v)$	largura de linha (cm^{-1}).
$\bar{g}_{ij}$	velocidade relativa entre as velocidades das partículas i e j (cm/s).
$i(t)$	intensidade da corrente de condução elétrica (A).
$I(t)$	fluxo de fótons ($cm^{-2}s^{-1}$)
$\bar{J}$	vetor densidade de corrente de condução elétrica (A/cm^2)
J_i	termo colisional da equação de Boltzmann (número de partículas / cm^6/s^2)
k_B	constante de Boltzmann (J/K).
l_a, l_c	comprimento da região ativa e do ressonador, respectivamente (cm).
L	comprimento característico do problema (cm).
$\bar{L}$	vetor momento angular ($kg.cm^2s^{-1}$).
$\ln \Lambda$	logaritmo coulombiano.
M_j	massa da j -ésima partícula pesada (kg).
m_e	massa do elétron (kg).
$\bar{N}$	torque ($kg.cm^2s^{-2}$).
n_e	densidade em número dos elétrons (cm^{-3}).
n_i	densidade em número da i -ésima partícula pesada (cm^{-3}).
n_g	densidade em número de todas as partículas pesadas (cm^{-3}).
P_i	tensor de pressão da i -ésima espécie ($Torr$)
P_i	pressão escalar da i -ésima espécie. ($Torr$)
$\bar{q}_i$	fluxo de calor i -ésima espécie (W/cm^2)
R_i	taxa líquida de criação ou destruição da espécie i (cm^3/s)
$R_{ij}^{(p)}$	taxa de reação do tipo p devido a interação entre as partículas i e j . (cm^3/s)
R_c	resistência elétrica do modulador (Ω).
$R_d(t)$	resistência elétrica instantânea da descarga (Ω).
R_1, R_2	refletividade dos espelhos do ressonador.
$\bar{r}$	vetor posição.
r_m	distância de mínima aproximação (cm).
r_{ij}^p	constante de taxa de reação (cm^3/s)
$r_{i \rightarrow k}^p$	constante de taxa de reação (cm^3/s)
T_{parede}	temperatura da parede (K).
T_e	temperatura dos elétrons (eV)

T_g	temperatura do gás (eV) ou (<i>celsius</i>)
t	tempo (s)
$U(r)$	potencial de interação da colisão entre as partículas e o alvo.
$\bar{u}_i$	velocidade média da i -ésima partícula.
$V_1(t), V_2(t)$	voltagem sobre os capacitores (V).
$V_d(t)$	voltagem sobre o tubo de descarga (V).
$\bar{v}_i, \bar{v}'_i$	velocidade i -ésima partícula antes e após colisão.
$\vec{x}$	vetor posição da i -ésima partícula.
α, α_{ei}	coeficientes de recombinação a três corpos (cm^6 / s).
β	eficiência do processo de recombinação na parede do tubo.
γ	fração de átomos do processo de recombinação colisional radiativa.
$\Delta\varepsilon, \Delta E$	variação de energia devido a determinado processo.
Δp	variação do momento linear devido a colisão.
$\Delta E_{i,j \rightarrow k}^{(p)}$	variação de energia devido a determinado processo.
ΔN	densidade de inversão de população (cm^{-3}).
$\Delta\nu$	alargamento de linha (Hz).
$\Delta\nu_D$	alargamento Doppler (Hz)
$\bar{\Gamma}_i$	fluxo de partícula da i -ésima espécie
ϕ_{nm}	razão de ramificação.
ε	fração dos átomos no processo de recombinação radiativa.
ε	orientação do plano de colisão
ε_0	permissividade elétrica do vácuo (F / cm)
Λ	comprimento de difusão (cm).
λ_D	comprimento de Debye do plasma (cm).
λ_i	condutividade térmica da i -ésima espécie do plasma.
μ_e, μ_i	mobilidade do elétron e do íon, respectivamente ($V^{-1}cm^2s^{-1}$).
μ_{ij}	massa reduzida (kg).
μ_0	permeabilidade magnética do vácuo (H/cm)
ν_e^m	frequência de colisão eletrônica total para a transferência de momento linear
$\nu_{ij}^{(p)}$	frequência de colisão relativo ao processo tipo p entre as partículas i e j .
ν_{verde}	frequência de emissão laser na linha do verde.
$\nu_{amarelo}$	frequência de emissão laser na linha do amarelo.
ρ	coordenada radial.
ρ	densidade de massa (kg / cm^3) e densidade de carga elétrica (C / cm^3)

ρ_i	densidade de massa da i -ésima espécie (kg / cm^3)
σ	condutividade elétrica do plasma ($\Omega^{-1}cm^{-1}$)
$\sigma_{ij}^{(p)}$	seção de choque para o processo tipo p entre as partículas i e j (cm^2) .
σ_{SE}	seção de choque de emissão estimulada (cm^2) .
η	perdas distribuídas no ressonador (cm^{-1}) .
τ_D	tempo de difusão (s).
$\tau_{chaveamento}$	tempo de chaveamento da thyatron (ns).
τ_{en}	tempo médio entre colisões dos elétrons com átomos neutros (s).
τ_E	tempo de difusão elétrico (s)
τ_{pulso}	tempo de duração do pulso de descarga (s).
τ_{pos}	tempo de duração do período da pós-luminescência (s).
ω	frequência angular do campo elétrico.
ω_e	frequência de plasma (Hz)
π_i	tensor de tensão viscosa da i -ésima espécie (Torr).
χ	ângulo de espalhamento.

Conteúdo

Agradecimentos	iv
Resumo	v
Abstract	vi
Lista de Símbolos	vii
Conteúdo	xi
1. Introdução	1
2. Princípios Básicos e Modelo Geral do Plasma	8
2.1 Definições Gerais	8
2.1.1 Critério de plasma	10
2.1.2 Modelos teóricos	10
2.1.3 Função de distribuição de velocidades	10
2.1.4 Fluxos de partículas e momentos da função de distribuição	14
2.2 Colisões	15
2.2.1 Colisões binárias	15
2.2.2 Seções de choque	19
2.2.3 Seção de choque total e seção de choque para a transferência de momento	21
2.2.4 Seções de choque para processos gerais	22
2.2.5 Taxas de reação	22
2.2.6 Transferência de momento linear e de energia em colisões elásticas	22
2.3 A Equação de Transporte de Boltzmann e As Equações de Conservação	25
2.3.1 Equação geral do transporte	26

2.3.2 Momentos da equação de transporte de Boltzmann	26
2.3.3 Termo colisional da equação de transporte de Boltzmann	29
2.3.4 Resumo das equações de conservação	32
2.4 Equações de Maxwell	32
2.5 Modelo Geral Proposto para o Plasma	33
2.6 Conclusão do Capítulo	40
2.6.1 Equações de conservação durante o pulso elétrico	40
2.6.2 Equações de conservação durante a pós-luminescência	41
3. Solução para o Pulso e Pós-luminescência em Hélio Puro.	
Modelo Zero Dimensional	42
3.1 Processos que Controlam a Densidade de Espécies.	43
3.1.1 Processos inelásticos	43
3.1.2 Processos elásticos	45
3.1.3 Recombinação	46
3.1.4 Reação Penning	48
3.1.5 Desativação colisional	49
3.1.6 Difusão	49
3.2 Seções de Choque e Constantes de Taxa para o Modelo.	51
3.3 Sistema de Equações para o Modelo Zero Dimensional	58
3.4 Acoplamento entre o tubo e o circuito elétrico	64
3.5 Resultados	68
3.6 Conclusão do Capítulo	72
4. Solução para o Pulso, ação Laser e Pós-luminescência em descarga de Hélio e Vapor de Cobre. Modelo Zero Dimensional	73
4.1 A Emissão Laser	73
4.2 O Átomo de Cobre e o Laser a Vapor e Cobre.	78

4.2.1 Fator de aprisionamento da Radiação	82
4.2.2 A Estrutura hiperfina das linhas 5106 Å e 5782 Å	83
4.2.3 Forma de linha total	89
4.3 Modelo Óptico	90
4.4 Processos que Controlam a Densidade de Espécies do Plasma de He-Cu	95
4.4.1 Processos inelásticos	95
4.4.2 Processos elásticos	98
4.4.3 Recombinação	98
4.4.4 Reação Penning	99
4.4.5 Desativação colisional	100
4.4.6 Difusão	100
4.5 Constantes de Taxa de Reação para o Átomo de cobre	101
4.6 Simulação do Pulso Elétrico, Pulso Laser e Pós-Luminescência	111
4.6.1 Equações para o balanço do número de partículas	111
4.6.2 Equações para o balanço de energia	114
4.7 Circuito Modulador. Modelo Simples para a Thyatron	115
4.8 Análise dos Resultados	118
4.9 Conclusão do Capítulo	128
5. Modelo Radialmente Dependente para o Laser He-Cu	129
5.1 Modelo Radialmente Dependente	129
5.1.1 Equações para o balanço do número de partículas	129
5.1.2 Equações para a conservação do momento linear	131
5.1.3 Equações para o balanço da energia	132
5.2 A Dependência radial do Campo Elétrico	133
5.3 Considerações sobre a Amplificação de Emissão Estimulada (ASE)	136
5.4 Análise dos Resultados	137

5.5 Conclusão do Capítulo	142
6. Modelo para o LVC de Grande Diâmetro. Sistema a Ne-Cu	143
6.1 Modelo Cinético para os Átomos de Neônio	143
6.1.1 Equações para o balanço do número de partículas	146
6.1.2 Equações para a conservação do momento linear	147
6.1.3 Equações para o balanço da energia	147
6.2 Constante de Taxa de Reação para os Átomos de Neônio	148
6.3 Análise dos Resultados	152
6.4 Conclusão do Capítulo	164
7. Conclusão	165
Apêndice A	169
Apêndice B	175
Apêndice C	180
Apêndice D	183
Bibliografia	187

Capítulo 1

Introdução

O laser a vapor de cobre (LVC) é uma fonte de radiação eletromagnética no visível (linhas de emissão no verde e amarelo) bem conhecida devido suas principais características: elevada potência média (10-100W) e eficiência geral média de 1%. O LVC é um laser excitado por uma descarga elétrica longitudinal em baixa pressão (5 a 50 Torr). Este laser, assim como os laser de sua família de lasers a vapor metálico, é caracterizado por transições lasers auto-terminadas, isto é, o nível laser superior é fortemente conectado ao nível fundamental por transições ópticas e o nível laser inferior, que por sua vez, constitui-se num estado metaestável. Desta forma, segundo a aproximação de Bohr, a excitação por impacto eletrônico deverá ocorrer de forma a produzir um aumento preferencial na população do nível laser superior. Por outro lado, uma vez que o mecanismo de emissão estimulada tenha se iniciado, a população do nível laser inferior irá aumentar até a inversão cessar. A interrupção da ação laser é devida a essa característica intrínseca do sistema quântico do átomo de cobre. Como consequência deste fenômeno, a ação laser é somente obtida no regime pulsado.

A ação laser no vapor de cobre foi demonstrada pela primeira vez em 1966 por Walter (Walter W. T. et al., 1966). Desde então, a potência média do oscilador evoluiu de 20mW, numa taxa de repetição de pulso de 660Hz, para um tubo de descarga elétrica de 1cm de diâmetro, para mais de 100 W em 1982 (Warner B. et al., 1982) numa taxa de repetição de pulso de 5kHz, para um tubo de 8 cm de diâmetro. Recentemente foi publicado a obtenção de potência média superior a 210W, através da adição de uma pequena quantidade de hidrogênio molecular a mistura Ne-Cu (Tanaba Y. et al., 1992).

Este aumento foi devido principalmente aos seguintes fatores: elevação da taxa de repetição de pulso, otimização do circuito modulador tipo linha, e um projeto eletromecânico melhorado, em vista do melhor entendimento dos processos cinéticos que ocorrem no tubo de descarga. A compreensão dos processos cinéticos, e em particular o mecanismo de desativação do estado metaestável do cobre, possibilitou o desenvolvimento de uma nova geração de LVCs de grandes diâmetros. Inicialmente acreditava-se que o principal mecanismo de desativação do estado metaestável ocorria devido ao processo de difusão e a posterior desativação nas paredes do tubo de descarga. Segundo este raciocínio, um aumento do diâmetro deveria produzir uma redução na eficiência do sistema. Um estudo mais apurado revelou que o principal mecanismo de desativação do estado metaestável são as colisões super-elásticas com elétrons frios, e que na realidade a potência específica de saída está limitada pelo aquecimento do gás e não pelo mecanismo de difusão. Para entender o problema do aquecimento do gás é necessário uma explicação adicional. Nos primeiros LVCs utilizava-se o aquecimento resistivo para a vaporização do cobre (tipicamente 1500°C), e então sobre a mistura deste com um gás nobre (por exemplo, hélio ou neônio) aplicava-se um pulso de alta voltagem.

Figura (1.1) Desenho esquemático de um laser a vapor de cobre auto-aquecido

Posteriormente, descobriu-se que este sistema poderia funcionar de uma maneira auto aquecida. Isto é, a potência elétrica fornecida à descarga elétrica e a conseqüente geração de calor produzida pelo próprio gás ionizado, poderia ser utilizada como fonte de calor para manter o tubo à temperatura típica de operação, (desde que o projeto do sistema termo mecânico fosse devidamente dimensionado). Portanto, se a temperatura do gás for muito elevada, será também elevada, de acordo com a estatística de Boltzmann, a população do nível metaestável, reduzindo assim a eficiência do laser.

A Fig. (1.1) apresenta um diagrama esquemático do LVC auto-aquecido, mostrando o sistema de eletrodos, o sistema de isolamento térmico e o arranjo mecânico. Podemos observar o tubo de alumina onde são colocadas, espaçadamente ao longo da extensão do tubo, algumas pequenas quantidades de cobre (alguns gramas são suficientes para centenas de horas de operação contínua). Nas extremidades do tubo de alumina situam-se os eletrodos metálicos (normalmente construídos a partir de metais refratários, por exemplo: W, Mo ou Ta) sendo que a descarga elétrica ocorre, entre estes eletrodos, através do gás (mistura de gás nobre e vapor de cobre) no interior do tubo de alumina. O circuito elétrico é formado pelo capacitor C_s , a chave ch , os eletrodos, o tubo de alumina e a jaqueta metálica externa, que possibilita o retorno da corrente elétrica. É interessante observar que o arranjo mecânico da jaqueta produz por si só uma estrutura coaxial de baixa indutância tornando-se bastante adequada para sistemas de pulsos curtos, como é o caso do LVC. A medida em que o sistema é chaveado, a energia elétrica armazenada entre as placas do capacitor C_s é depositada ao longo da extensão da descarga. Aproximadamente $3.4 W/cm^3$ depositados no volume da descarga são suficientes para elevar a temperatura do tubo de descarga, a partir da temperatura ambiente, até a temperatura necessária para vaporizar o cobre e posteriormente à temperatura de operação. A jaqueta metálica, além de propiciar um caminho para o retorno da corrente elétrica, também serve como jaqueta de água para a refrigeração da parede externa do tubo de vidro. O diâmetro do tubo de vidro é escolhido de tal maneira que, dadas as propriedades do material de isolamento térmica (material cerâmico ou refletores de radiação), fluxo de água da jaqueta e densidade de potência elétrica entregue à descarga, a parede interna do tubo de alumina seja mantida à temperatura típica de operação. Aproximadamente 50

minutos de operação são suficientes para elevar a temperatura do tubo, a partir da temperatura ambiente, até a temperatura típica de operação, desde que o sistema termo-mecânico esteja corretamente dimensionado. Um fluxo de gás nobre (Ne ou He) é mantido a baixa vazão, principalmente no início de operação, para lavar o material de isolamento térmica das impurezas residuais contidas nele e que contaminam a descarga elétrica. Após algumas dezenas de horas de operação o sistema se auto-limpa e o fluxo de gás nobre pode ser reduzido à praticamente zero. O sistema de vácuo garante que a pressão de gás tampão seja mantida à pressão ótima durante todo o período de operação. O ressonador óptico é formado por dois espelhos planos. Um espelho de fundo totalmente refletor e um espelho de saída com refletividade típica entre 4% ou 8%. As janelas ópticas (normalmente de quartzo) permitem que a radiação laser se propague ao longo do eixo óptico do ressonador.

Durante o final da década de 70 e início da década de 80 o LVC foi objeto de grande estudo em vista a sua utilização no projeto AVLIS (Atomic Vapor Laser Isotopic Separation) (Pashner J. A., 1988). Posteriormente a este desenvolvimento, inúmeras outras aplicações comerciais foram encontradas, como na medicina (dermatologia e terapia fotodinâmica), (Ainsworth M. D. e Piper J. A., 1989), bombeamento do laser de Ti:safira para saída sintonizável (Ainsworth M. D. e Coutts D. W., 1989), além de aplicações industriais como em processamento de materiais, [32]. De interesse corrente temos a produção de radiação laser no UV de alta potência utilizando o LVC com frequência dobrada, (Coutts D. W. e Piper J.A., 1992).

Para qualquer tipo de desenvolvimento de um LVC, que não seja um experimento de demonstração do princípio, é necessário a utilização de um modelo que descreva a cinética das partículas que integram a mistura do gás nobre e do vapor de cobre, no estado de gás ionizado. Do ponto de vista econômico, torna-se extremamente custoso o desenvolvimento de LVC de alta potência pelo método de tentativa e erro, já que não existe uma descrição teórica, via expressão analítica, adequada da cinética das partículas que compõem o plasma. Sob o ponto de vista acadêmico, a construção de um modelo teórico capaz de descrever corretamente a cinética das partículas do gás ionizado é extremamente útil pois permite que se conheça os processos cinéticos, não só de maneira qualitativa, mas principalmente

de maneira quantitativa. O problema econômico motivou o desenvolvimento de modelos teóricos capazes de simular condições reais de operação, e desta forma, prever o desempenho do LVC.

Segundo nosso conhecimento, foi publicado somente um modelo, desenvolvido nos laboratórios do Lawrence Livermore (Kushner M. e Warner B., 1983) capaz de resolver a cinética do LVC e calcular a variação temporal e radial, considerando as espécies que compõem o gás ionizado de uma maneira auto consistente para LVC de grande diâmetros (maiores de que 60 mm). Recentemente, na Austrália (Carman R. J. et al., 1994), foi publicado um desenvolvimento similar para LVC com diâmetro pequeno. É o objetivo deste trabalho o desenvolvimento um modelo teórico, também num esquema auto-consistente, capaz de simular o comportamento do LVC para pequenos e grandes diâmetros. O termo auto-consistente tem o seguinte significado: uma vez que o LVC opera com elevada taxa de repetição de pulso, podemos imaginar um regime quase estacionário. E desta forma, se as condições ao final de um ciclo (entende-se por condições a especificação das densidades de partículas, fluxos e temperaturas) forem utilizados como condições iniciais para o ciclo seguinte, estas deverão reproduzir como condições finais, as condições iniciais do ciclo anterior. Todos os resultados apresentados neste trabalho foram somente considerados auto-consistentes após termos obtido um erro de 1% ou menor, entre valores de ciclos de integração consecutivos.

O modelo computacional foi desenvolvido visando simular o comportamento observado em vários LVCs publicados na literatura. O modelo visa a utilização de um mínimo número de parâmetros de entrada tais como: comprimento, diâmetro e temperatura da parede do tubo de descarga, pressão do gás nobre e parâmetros do circuito modulador. O modelo descreve a cinética das partículas na mistura gasosa, segundo a teoria de *n-fluidos*, via a solução das equações de conservação do número de partículas, do momento linear e da energia, com os devidos termos de fonte que descrevem a criação e destruição das espécies, inclusive com considerações sobre as suas respectivas populações, tanto no estado fundamental como em estados excitados. Desta forma, temos equações para a densidade de cada espécie, para os fluxos de partículas e para as temperaturas das partículas. As seções de choque utilizadas foram aquelas obtidas na literatura. Primeiramente construímos um modelo mais simples para

ser usado no modelamento de uma descarga em hélio puro, utilizando um modelo a três níveis e resolvendo as equações de conservação no esquema zero dimensional, isto é, calculando somente a evolução temporal das espécies. Então, baseado nesta experiência, um modelo mais elaborado foi desenvolvido para descrever o LVC através de uma mistura de gas de hélio e vapor de cobre. Utilizando um modelo de 3 níveis para o hélio e 9 níveis para o cobre resolvemos a evolução temporal e posteriormente a evolução radial do LVC. Neste modelo, resolvemos numericamente o sistema de equações de conservação, em conjunto com as equações de Maxwell, num total de 20 equações diferenciais não lineares dependente do tempo. Escrevemos todos dos códigos computacionais e os programas foram executados numa estação Sparc 10 da Sun. Todos os resultados obtidos em nossas simulações foram comparados com resultados encontrados na literatura e a concordância entre eles foi muito boa.

A apresentação do trabalho foi dividida em sete capítulos e quatro apêndices. No capítulo 2 apresentamos o modelo teórico que utilizaremos para o descrição da cinética da descarga. No capítulo 3 aplicamos o modelo teórico proposto para um caso simples: a descarga em hélio puro utilizando um modelo a três níveis para o hélio. Este sistema foi resolvido segundo um modelo "zero-dimensional" utilizando métodos Runge-Kutta (Carnahan B. et al., 1969) de quarta ordem para a solução do sistema de equações diferenciais não lineares de primeira ordem. A fim de compararmos os resultados obtidos do modelo, utilizamos como parâmetros de entrada valores experimentais similares aos encontrados na literatura. Ao final do capítulo, mostramos que os resultados obtidos pelo nosso modelo estão em boa concordância com os reportados na literatura.

No capítulo 4, resolvemos ainda no esquema zero-dimensional, o LVC numa mistura de hélio e vapor de cobre. Os resultados encontrados também apresentaram boa concordância com os valores encontrados na literatura.

No capítulo 5, resolvemos o LVC, num modelo unidimensional, descrevendo assim a evolução temporal e radial da cinética da descarga. Neste caso, utilizamos o procedimento de Crank-Nicolson (Carnahan B. et al., 1969) para transformar as equações diferenciais em equações de diferença. Assim,

podemos descrever a dependência radial da cinética das partículas e inferir a sua importância no "scale up" desses sistemas e confirmar que são as colisões super elásticas entre os elétrons frios e os átomos de cobre do estado metaestável o principal mecanismo de desativação do nível laser inferior.

No capítulo 6, aplicamos nosso modelamento para um LVC de alta potência média ($>60\text{W}$), numa mistura de Ne-Cu e com grande diâmetro ($d = 60\text{ mm}$), empregando um modelo de 5 níveis para o neônio e 9 níveis para o cobre. Neste caso, consideramos o efeito da penetração radial do campo elétrico longitudinal sobre o plasma, o que produz um fornecimento de energia para os elétrons com uma dependência radial. A correta compreensão deste fenômeno é fundamental para o "scale-up".

Segue-se a conclusão do trabalho, capítulo 7, com algumas sugestões para desenvolvimentos futuros. Incluímos quatro apêndices: um sobre o fenômeno do transporte ambipolar das partículas carregadas (aproximação utilizada para o cálculo do fluxo das partículas carregadas em direção às paredes do tubo de descarga, pois a densidade típica dos elétrons é da ordem de 10^{13} cm^{-3}); um apêndice em vista do cálculo dos coeficientes de transporte para um mistura binária de gases, um apêndice que mostra as equações de diferenças finitas utilizadas no modelo e, finalmente o quarto apêndice que apresenta considerações sobre a utilização da distribuição da Maxwell para o cálculo das constantes de taxa de reação.

Capítulo 2

Princípios Básicos e Modelo Geral do Plasma

Neste capítulo apresentaremos o modelo teórico que utilizamos para a solução do problema do pulso elétrico sobre o tubo de descarga, conforme discutido na introdução deste trabalho. Inicialmente discutimos o conceito de plasma e os critérios que um gás ionizado deverá satisfazer para que possa ser considerado como um plasma seguido das possíveis descrições teóricas para a descarga elétrica. Definiremos as grandezas que são utilizadas, assim como os princípios básicos da teoria das colisões elásticas e binárias, em vista da construção do termo colisional da equação de Boltzmann. A partir da equação de Boltzmann, pela aplicação do método dos momentos, obtemos as equações de conservação. Finalmente apresentamos o sistema de equações que utilizaremos para a descrição dos problemas a serem resolvidos nos capítulos posteriores.

2.1 Definições Gerais

O termo plasma é usado para descrever uma grande variedade de substâncias macroscopicamente neutras contendo um grande número de elétrons livres interagindo com átomos neutros e íons, que apresentam um comportamento coletivo devido à interação coulombiana (Bittencourt J. A., 1995).

Das diversas maneiras que o plasma pode ser produzido, é de interesse o plasma produzido em laboratório, num tubo de descarga, pela aplicação de um campo elétrico externo longitudinal ao tubo de descarga. Este campo elétrico realiza trabalho sobre os elétrons livres, e estes por sua vez serão acelerados, adquirindo energia cinética, que através de diversos processos colisionais transferem parte de sua energia para os átomos neutros do gás, onde podemos citar entre outros os processos de

excitação e ionização. Uma característica do processo de transferência de energia do campo elétrico externo para a descarga é que o campo elétrico transfere energia de maneira muito mais eficiente para os elétrons do que para os íons, em virtude da grande diferença entre as massas destas espécies. Desta forma, a temperatura eletrônica numa descarga elétrica será, de modo geral, muitas vezes superior a temperatura dos íons e do gás neutro. O processo de transferência de energia dos elétrons para as partículas pesadas também ocorre a um taxa de reação bastante lenta.

As propriedades do plasma são fortemente dependentes das interações entre as partículas. Uma das características básicas que distingue o comportamento do plasma em relação ao comportamento dos fluidos ordinários, é a existência de um comportamento coletivo, onde cada partícula do plasma interage simultaneamente com um grande número de outras partículas carregadas. A dinâmica das partículas do plasma é governada pelo campos internos devido a natureza e movimento das próprias partículas. Os efeitos quânticos para os plasmas produzidos em tubos de descarga são desprezáveis, exceto por alguns casos particulares de colisão, (colisões inelásticas).

Distingue-se dois tipos básicos de interação num plasma. São elas: interação entre partículas carregadas, e entre as partículas carregadas e partículas neutras. O campo elétrico de uma partícula carregada interage com o campo elétrico de outra partícula carregada de acordo com a interação coulombiana. Por outro lado, a interação entre partículas neutras e partículas carregadas é de curto alcance sendo somente apreciável quando a distância entre os centros das partículas interagentes for da ordem dos seus diâmetros. A dinâmica deste tipo de interação pode ser adequadamente descrito utilizando o formalismo da mecânica quântica e não será objetivo deste trabalho.

Distingue-se o plasma em relação ao seu grau de ionização. Podemos ter o plasma fracamente, parcialmente ou completamente ionizado. Num plasma fracamente ionizado, como é o caso que analisaremos neste trabalho, a interação entre partículas carregadas e partículas neutras domina sobre as múltiplas interações coulombianas.

Entre os vários fenômenos que ocorrem em plasmas devido a existência de gradientes espaciais, um fenômeno de importância é o denominado de difusão de partículas, que ocorre entres regiões mais

densas para as regiões menos densas ou entre regiões com maior temperatura para regiões de menor temperatura. Embora o problema da difusão em plasmas não magnetizados seja semelhante ao que ocorre em fluidos ordinários, existe uma diferença fundamental. Devido a reduzida massa dos elétrons, em relação a massa dos íons, os elétrons tenderão a se difundir mais rapidamente que os íons, desta forma gerando um campo elétrico de polarização como resultado da separação espacial de cargas. Este campo tende a produzir um aumento na difusão dos íons e uma redução na difusão dos elétrons, de tal maneira que os íons e elétrons se difundam aproximadamente na mesma taxa. Este tipo de difusão é denominada de difusão ambipolar. Neste trabalho, devido às peculiaridades do plasma analisado, o mecanismo de difusão das partículas carregadas será governado pela difusão ambipolar.

2.1.1 Critério de plasma

Existem alguns critérios que uma coleção de partículas neutras e carregadas deve satisfazer para ser considerada como um plasma. Na ausência de qualquer perturbação externa o plasma será macroscopicamente neutro ($\nabla \cdot \vec{E} = 0$). Um importante parâmetro físico do plasma é o comprimento de Debye, λ_D . Este parâmetro fornece uma medida da distância de influência do campo elétrico de uma partícula individual carregada sobre outra partícula carregada, no interior do plasma. As partículas carregadas se arranjam de tal forma que é criada uma blindagem efetiva do campo elétrico dentro de uma distância da ordem de λ_D . Quando uma superfície é introduzida no plasma, como por exemplo, as paredes do tubo de descarga, a perturbação produzida pela parede é estendida até uma distância da ordem de λ_D . Esta camada é denominada de bainha de plasma. No interior da bainha de plasma a condição de quase neutralidade não é satisfeita. A esfera de Debye é uma esfera imaginária cujo raio é igual ao comprimento de Debye. Qualquer campo elétrico fora da esfera de Debye será efetivamente mascarado pelas partículas carregadas e não contribuirá efetivamente para o campo elétrico existente em seu interior. Desta forma, cada partícula carregada no interior do plasma interage coletivamente somente com as cargas que se situam no interior de sua esfera de Debye, o efeito sobre outras cargas é efetivamente desprezível. Tal fenômeno possibilita a utilização da equação de Boltzmann para o plasma. Assim, uma condição necessária para a existência de um plasma é que as dimensões físicas do sistema

(diâmetro do tubo de descarga no nosso caso) sejam grandes comparados a λ_D . Caso contrário, não haveria espaço suficiente para o efeito coletivo da blindagem e a coleção de partículas carregadas não apresentaria comportamento de plasma. Se L for uma dimensão característica do plasma, o primeiro critério para a definição do plasma será portanto

$$L \gg \lambda_D = \left(\frac{\epsilon_0 k_B T_e}{n_e e^2} \right)^{\frac{1}{2}}, \quad (2.1)$$

onde ϵ_0 é a permissividade elétrica do vácuo, k_B é a constante de Boltzmann, e é a carga elétrica do elétron e n_e e T_e são a densidade e temperatura dos elétrons, respectivamente. O efeito da blindagem é um resultado do comportamento coletivo das partículas carregadas dentro de uma esfera de Debye. Portanto é também necessário que o número de elétrons, n_e , dentro da esfera seja grande para que o efeito da blindagem seja efetivo. Esta condição é traduzida pelo segundo critério para o plasma: $n_e \lambda_D^3 \gg 1$. Isto significa que a distância média entre os elétrons, que pode ser estimada por $n_e^{-1/3}$, deve ser pequena quando comparada com λ_D . Se definirmos a quantidade

$$g = \frac{1}{n_e \lambda_D^3}, \quad (2.2)$$

conhecida como parâmetro de plasma, o segundo critério para a definição de plasma pode ser escrito como $g \ll 1$. A condição, Eq.(2.1) já implica numa neutralidade de carga macroscópica se for considerado que os desvios da neutralidade podem naturalmente ocorrer somente em distâncias da ordem de λ_D . A neutralidade macroscópica é alguma vezes considerada como um terceiro critério, embora não independente, e pode ser expressa por:

$$n_e = \sum_{i=1}^N n_i. \quad (2.3)$$

onde n_i é a densidade dos íons. Quando um plasma é instantaneamente perturbado de sua posição de equilíbrio, surgem campos elétricos internos ao plasma devido às cargas espaciais. Estes movimentos coletivos são caracterizados por uma frequência natural de oscilação conhecida como frequência de plasma, ω_e , dada por:

$$\omega_e = \left(\frac{n_e e^2}{m_e \epsilon_0} \right)^{\frac{1}{2}}. \quad (2.4)$$

Por outro lado, as colisões entre os elétrons e partículas neutras tendem a amortecer estas oscilações. Desta forma, será necessário que a frequência de colisão elétrons-partículas neutras ν_{en} seja muito maior que a frequência de plasma ω_e . Caso contrário, os elétrons poderão ser capazes de se comportarem de uma maneira independente, aos invés de apresentarem um comportamento coletivo. Este constitui o quarto critério para a existência de um plasma. Este critério poder ser alternativamente escrito como:

$$\omega_e \tau_{en} > 1 \quad (2.5)$$

onde $\tau_{en} = 1/\nu_{en}$ representa o tempo médio do elétron entre colisões com átomos neutros. A aplicação deste critério não pode ser estendida para qualquer tipo de plasma. Vejamos, por exemplo, os plasmas para fusão, como aqueles existentes em máquinas tipo tokamak, ou os plasmas intergaláticos. Nestes casos, as forças eletromagnéticas de longo alcance são tão mais intensas quando comparadas com as forças devido as colisões ordinárias localizadas, que estas colisões podem ser desprezadas. Nestes casos teremos os denominados plasmas sem colisão (Chen F. C., 1974).

2.1.2 Modelos teóricos.

Para a descrição teórica dos fenômenos em plasmas e gases ionizados existem basicamente quatro métodos principais, com várias aproximações diferentes, que se aplicam em circunstâncias diferentes. São eles:

- a. teoria da órbita das partículas carregadas;
- b. descrição via a teoria cinética, onde o objetivo é o conhecimento de uma função, denominada função de distribuição de velocidades, que é solução da equação cinética para o problema.
- c. Quando as colisões forem muito frequentes, como no caso de nosso trabalho, de modo que cada espécie possa ser tratada como um fluido descrito por um campo de densidade, um campo de velocidades e um campo de temperatura, foi desenvolvida uma teoria denominada de teoria a n fluidos. Neste caso o plasma ou o gás ionizado é tratado como uma mistura de n fluidos interpenetrantes, dependendo do número de diferentes espécies a serem consideradas. Na descrição via modelo de fluido, em adição às equações de Maxwell teremos um conjunto de equações da gás-dinâmica expressando a

conservação de massa, do momento linear e energia para cada espécie de partícula que compõe o sistema; e

d. teoria a um fluido. Neste caso, o plasma é tratado como um único fluido independente do número de espécies e das diferentes temperaturas de espécies.

2.1.3 Função de distribuição de velocidades.

Seja um plasma, cujo grau de ionização situa-se entre o fraco e o parcial, composto de elétrons e N espécies atômicas. Seja um espaço de fase hexadimensional onde as variáveis independentes são o vetor posição $\vec{x}$, o vetor velocidade $\vec{v}_i$, da espécie i , sendo que ambos vetores são definidos em relação ao referencial de laboratório, além do parâmetro tempo t . Neste espaço de fase definimos então a função de distribuição de velocidades $f_i(\vec{x}, \vec{v}_i, t)$, $i = 1, 2, \dots, N$, de tal maneira que $f_i(\vec{x}, \vec{v}_i, t) d^3\vec{v}_i d^3\vec{x}$ representa o número de átomos da espécie i , no instante de tempo t , num elemento de volume de dimensões $d^3\vec{v}_i d^3\vec{x}$ no espaço de fase, elemento este localizado do ponto $(\vec{x}, \vec{v}_i)$. As espécies neutras, eletronicamente excitadas, bem como os íons positivos, são considerados como espécies distintas. A função de distribuição para os elétrons $f_e(\vec{x}, \vec{v}_e, t)$ é definida de maneira análoga. Desta forma, a densidade de partículas (em cm^{-3}) da espécie i , ($i = 1, 2, \dots, N$), no instante de tempo t , é calculada por:

$$n_i(\vec{x}, t) = \int_{\vec{v}_i} f_i(\vec{x}, \vec{v}_i, t) d^3\vec{v}_i. \quad (2.6)$$

A densidade total de partículas no plasma é calculada por

$$n_0(\vec{x}, t) = \sum_{i=1}^N n_i(\vec{x}, t). \quad (2.7)$$

A densidade de massa total do plasma $\rho_0(\vec{x}, t)$ como um todo é, desprezando a contribuição dos elétrons, devido a sua reduzida massa quando comparada com a massa das partículas pesadas,

$$\rho_0(\vec{x}, t) = \sum_{i=1}^N \rho_i(\vec{x}, t) = \sum_{i=1}^N m_i n_i(\vec{x}, t) = \sum_{i=1}^N m_i \int_{\vec{v}_i} f_i(\vec{x}, \vec{v}_i, t) d^3\vec{v}_i, \quad (2.8)$$

onde $\rho_i(\vec{x}, t)$ é a densidade de massa parcial, e m_i é a massa de uma partícula pesada de espécie i .

Definimos a velocidade média da espécie i , $\vec{u}_i(\vec{x}, t)$, através da seguinte relação

$$n_i(\vec{x}, t) \vec{u}_i(\vec{x}, t) = n_i(\vec{x}, t) \langle \vec{v}_i \rangle = \int_{\vec{v}_i} \vec{v}_i f_i(\vec{x}, \vec{v}_i, t) d^3 \vec{v}_i \quad (2.9)$$

onde $\langle \vec{v}_i \rangle$ representa o valor médio de $\vec{v}_i$ ponderado pelo função de distribuição.

Definimos a velocidade peculiar da espécie i , $\vec{c}_i(\vec{x}, t)$,

$$\vec{c}_i(\vec{x}, t) \equiv \vec{v}_i - \vec{u}_i(\vec{x}, t) \quad (2.10)$$

Definimos também a temperatura translacional $T_i(\vec{x}, t)$ da espécie i , por

$$\frac{3}{2} n_i(\vec{x}, t) k_B T_i(\vec{x}, t) = \frac{1}{2} n_i(\vec{x}, t) m_i \langle c_i^2 \rangle = \frac{1}{2} m_i \int_{\vec{v}_i} c_i^2(\vec{x}, \vec{v}_i, t) f_i(\vec{x}, \vec{v}_i, t) d^3 \vec{v}_i, \quad (2.11)$$

onde k_B é a constante de Boltzmann.

2.1.4 Fluxos de partículas e momentos da função de distribuição.

Vamos representar o fluxo de energia associado ao movimento de translação e o fluxo de momento linear da espécie i por $\vec{q}_i(\vec{x}, t)$, $\vec{P}_i(\vec{x}, t)$, respectivamente. As integrais de fluxo (quantidades por unidade de área e por unidade de tempo) da energia translacional e do momento linear transportadas pela espécie i podem ser obtidas pela multiplicação do elemento diferencial de fluxo $d\vec{\Gamma}_i = \vec{c}_i f_i(\vec{x}, \vec{v}_i, t) d^3 \vec{v}_i$ por $\frac{1}{2} m_i c_i^2$ e $m_i \vec{c}_i$ respectivamente, seguido da integração sobre todas as velocidades das partículas.

Conseqüentemente, nós teremos os seguintes momentos da função de distribuição

$$\vec{q}_i(\vec{x}, t) \equiv \frac{1}{2} \rho_i(\vec{x}, t) \langle c_i^2 \vec{c}_i \rangle = \int_{\vec{v}_i} \frac{1}{2} m_i c_i^2 \vec{c}_i f_i(\vec{x}, \vec{v}_i, t) d^3 \vec{v}_i \quad (2.12)$$

$$\vec{P}_i(\vec{x}, t) \equiv \rho_i(\vec{x}, t) \langle \vec{c}_i \vec{c}_i \rangle = \int_{\vec{v}_i} m_i \vec{c}_i \vec{c}_i f_i(\vec{x}, \vec{v}_i, t) d^3 \vec{v}_i \quad (2.13)$$

$\vec{q}_i(\vec{x}, t)$ é denominado vetor fluxo de calor e $\vec{P}_i(\vec{x}, t)$ o tensor de pressão, sendo todas estas grandezas relativas a espécie i . A temperatura da espécie i e a pressão escalar p_i , estão relacionados por

$$p_i(\vec{x}, t) = n_i(\vec{x}, t) k_B T_i(\vec{x}, t) \quad (2.14)$$

O tensor de tensão viscosa $\pi_{i,jk}$ é definido como tendo variação oposta ao tensor pressão com a pressão escalar subtraída de cada um dos seus componentes da diagonal principal. Devemos lembrar que a pressão escalar $p_i(\vec{x}, t)$ é dada por $p_i(\vec{x}, t) = \frac{1}{3} \vec{P}_i(\vec{x}, t) : \vec{I}$, onde $\vec{I}$ representa o tensor unitário.

$$\pi_{i,jk} \equiv -(p_i - P_{i,jk} \delta_{jk}), \quad (2.15)$$

e onde δ_{jk} é o delta de Kronecker. O tensor de tensão viscosa $\vec{\pi} = \pi_{ij}$, para o gás inteiro é dado por $\pi_{jk} = \sum_{i=1}^N \pi_{i,jk}$. Podemos observar, por substituição direta nas Eqs. (2.12) e (2.13), se a função de distribuição $f_\alpha = f^M$, isto é a função de distribuição de equilíbrio de Maxwell, dada por

$$f_i = f^M = n_i(\vec{x}, t) \left(\frac{m_i}{2\pi k_B T_i(\vec{x}, t)} \right)^{\frac{3}{2}} e^{-\frac{1}{2} \frac{m_i \vec{v}_i^2}{k_B T_i(\vec{x}, t)}} \quad (2.16)$$

então as quantidades $\vec{q}_i(\vec{x}, t)$ e $\vec{\pi}_i(\vec{x}, t)$ serão todas nulas. Isto decorre da propriedade da função de distribuição de Maxwell ser uma função isotrópica da velocidade, dependendo somente do módulo da velocidade.

2.2 Colisões

As propriedades fundamentais de um plasma ou gás ionizado dependem das colisões entre as partículas que o compõem e da interação entre as partículas eletricamente carregadas e o campo de força externo. Portanto, é oportuno dedicarmos esta seção ao resumo das principais definições utilizadas na descrição das colisões, bem como seções de choque e taxas de reação. Tais conceitos e definições serão utilizadas para a construção do termo colisional da equação de transporte de Boltzmann. Restringiremos a análise ao caso de colisões binárias.

2.2.1. Colisões binárias.

Consideremos a colisão entre duas partículas de massa m_i e m_j , cada partícula com velocidade $\vec{v}_i$ e $\vec{v}_i'$, $\vec{v}_j$ e $\vec{v}_j'$, respectivamente, antes e pós colisão, conforme ilustrado na Fig.(2.1). Normalmente para a formulação do problema da colisão binária utiliza-se o referencial no qual uma das partículas está em repouso (partícula m_i) e a partícula de massa m_j se aproxima com velocidade relativa

$\vec{g}_{ji} = \vec{v}_j - \vec{v}_i$. Após a colisão a velocidade relativa entre as partículas será $\vec{g}'_{ji} = \vec{v}'_j - \vec{v}'_i$. A geometria da colisão

Figura (2.1) Colisão binária no sistema de referência do laboratório.

no sistema de referência em que a partícula de massa m_i está em repouso esta mostrado na Fig. (2.2).

Figura (2.2) Colisão no sistema de referência em que a partícula de massa m_i está em repouso.

Definimos o parâmetro de impacto b como a máxima distância entre as partículas em que ainda haveria a colisão. O ângulo de espalhamento é dado por χ e a orientação do plano de colisão é dada pelo ângulo ε . A velocidade do centro de massa do sistema formado pelas duas partículas é definida por

$$\vec{G}_0(\vec{G}'_0) = \frac{m_i \vec{v}_i(\vec{v}'_i) + m_j \vec{v}_j(\vec{v}'_j)}{m_i + m_j} \quad (2.17)$$

onde os primos na Eq.(2.17) indicam a mesma grandeza após a colisão. As velocidades relativa e de centro de massa podem ser utilizadas para resolver as velocidades das partículas no referencial de laboratório resultando em

$$\vec{v}_i(\vec{v}'_i) = \vec{G}_0(\vec{G}'_0) - \frac{\mu_{ij}}{m_i} \vec{g}_{ji}(\vec{g}'_{ji}) \quad (2.18)$$

$$\vec{v}_j(\vec{v}'_j) = \vec{G}_0(\vec{G}'_0) + \frac{\mu_{ij}}{m_j} \vec{g}_{ji}(\vec{g}'_{ji}) \quad (2.19)$$

onde μ_{ij} é a massa reduzida do sistema sendo dada por $\mu_{ij} = m_i m_j / (m_i + m_j)$. As velocidades antes e após a colisão são relacionadas utilizando as teoremas de conservação do momento linear e da energia do sistema. Utilizando o teorema da conservação do momento linear obtemos a seguinte relação: $\vec{G}_0 = \vec{G}'_0$, isto é, a velocidade do centro de massa é uma quantidade que é conservada durante a colisão.

Utilizando o teorema da conservação da energia podemos escrever a seguinte relação,

$$\frac{1}{2} \mu_{ij} g_{ji}^2 = \frac{1}{2} \mu_{ij} g_{ji}'^2 + \Delta\varepsilon \quad (2.20)$$

onde $\Delta\varepsilon$ representa a variação na quantidade de energia interna das partículas como um possível resultado da colisão. Podemos então distinguir dois tipos gerais de processos colisionais: os elásticos, são aqueles em que $\Delta\varepsilon = 0$, e os inelásticos, em que $\Delta\varepsilon \neq 0$. Dentro dos processos inelásticos temos os do primeiro tipo $\Delta\varepsilon > 0$, e os do segundo tipo $\Delta\varepsilon < 0$. Segundo a Eq.(2.20) podemos verificar que a variação na energia interna do sistema, se houver, corresponderá a variação de energia cinética associada ao movimento relativo. Observe que a solução do problema da colisão binária consiste na determinação das seis componentes das velocidade após a colisão. Destas seis componentes apenas duas são independentes, pois como já vimos, quatro componentes estão relacionadas segundo os teoremas já

citados. Particularizaremos os resultados a seguir para colisões elásticas (os processos elásticos desempenham papel fundamental no cálculo dos coeficientes de transporte, além de serem responsáveis por grande parte do mecanismo de transferência de energia). Portanto, se $\Delta\varepsilon = 0$, então $g_{ji} = g'_{ji}$, e desta forma não ocorrerá variação no módulo da velocidade relativa, somente nos ângulos (χ, ε) . O ângulo de espalhamento é uma grandeza que depende intrinsecamente do processo colisional, isto é, do tipo de lei de força da colisão. Considerando um potencial de interação que depende somente da distância entre as partículas, o ângulo de espalhamento dependerá da lei da força entre as partículas, do valor absoluto da velocidade relativa e do valor do parâmetro de impacto.

Figura (2.3) Trajetória da colisão binária elástica no referencial da partícula i em repouso.

Para a determinação do ângulo de espalhamento devemos tecer alguns comentários sobre a dinâmica das colisões binárias. Seja $\vec{r}$ o vetor de posição da partícula de massa m_j em relação a partícula de massa m_i , conforme a Fig.(2.3). Para um campo de força central, $\vec{F}(\vec{r}) = F(r)\hat{a}_r$. O potencial se relaciona com a força segundo um gradiente $\vec{F} = -\nabla U(r) = -\frac{\partial U(r)}{\partial r}\hat{a}_r(\chi)$. Tendo em vista que para um campo de força central o torque, $\vec{N} = \vec{r} \times \vec{F}$ é nulo, pois $\vec{F}$ é paralelo a $\vec{r}$, e desta forma, o momento angular $\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p}$ será uma constante de movimento e a colisão ocorrerá sob um plano, que é denominado plano de colisão. É este plano cuja orientação é dada pelo ângulo ε , Fig.(2.2). Utilizando a lei de conservação de energia poderemos escrever a seguinte expressão que permite a determinação do ângulo de espalhamento (Goldstein E., 1980),

$$\chi(b, g_{ji}) = \pi - 2 \int_{r_m}^{\infty} \frac{b}{r^2} \left[1 - \frac{b^2}{r^2} - \frac{2U(r)}{\mu_{ij} g_{ji}^2} \right]^{\frac{1}{2}} dr, \quad (2.21)$$

onde r_m é a distância de máxima aproximação. Finalmente, para utilizarmos a Eq.(2.21), para a determinação do ângulo de espalhamento, devemos conhecer o parâmetro de impacto, o módulo do vetor velocidade relativa inicial e a função energia potencial relativa a interação entre as partículas.

2.2.2 Seções de choque

Na seção anterior apresentamos resumidamente os principais conceitos e definições concernentes a colisões binárias elásticas. Devemos agora, introduzir o importante conceito de seção de choque diferencial para um determinado processo atômico que genericamente designaremos por processo do *tipo p* (elástico).

Figura (2.4) Construção utilizada para a definição de seção de choque elástica.

Consideremos um feixe de partículas projéteis (de massa m_j) idênticas incidente sobre um centro de

força espalhador (partícula alvo de massa m_i) com velocidade relativa $\vec{g}_{ji}$. Adicionalmente, já que todas as partículas do feixe são idênticas, o potencial de interação entre todas as partículas do feixe e o centro espalhador relativo ao processo do tipo p será o mesmo. As partículas incidentes com um parâmetro de impacto b serão espalhadas segundo algum ângulo de espalhamento χ , enquanto aquelas que incidem sob um parâmetro de impacto $b+db$ serão espalhadas sob o ângulo de espalhamento $\chi+d\chi$. O número de partículas espalhadas no intervalo de tempo dt , entre os ângulos χ e $\chi+d\chi$ dependerá da densidade de corrente de partículas incidentes (fluxo de partículas projéteis), $\vec{\Gamma}_{ji}$, que é igual ao número de partículas do feixe incidente que atravessam uma área normal ao feixe no intervalo de tempo dt , conforme ilustrado na Fig. (2.4)

Seja $\dot{n}_j$ o número de partículas espalhadas por unidade de tempo, sob o ângulo sólido diferencial $d\Omega$, orientado em (χ, ε) . A seção de choque diferencial de espalhamento $\sigma(\chi, \varepsilon)$ é definida como o número de partículas espalhadas, por unidade de tempo, dividida pelo fluxo incidente e pelo ângulo sólido diferencial, de maneira que $\dot{n}_j = \sigma(\chi, \varepsilon) \Gamma_{ji} d\Omega$. Por outro lado, o número de partículas incidentes, durante o intervalo de tempo dt , como parâmetro de impacto entre b e $b+db$ com plano de colisão orientado entre ε e $\varepsilon+d\varepsilon$ será dado por $\Gamma_{ji} b db d\varepsilon$. Desta forma, comparando-se as duas expressões para o número de partículas espalhadas obtemos a seguinte expressão para a seção de choque diferencial, (Goldstein E., 1980).

$$\sigma(\chi, \varepsilon) = \frac{b}{\sin \chi} \left| \frac{db}{d\chi} \right| \quad (2.22)$$

onde o módulo é introduzido em vista da seção de choque diferencial ser uma grandeza intrinsecamente positiva e normalmente o ângulo de espalhamento crescer a medida que o parâmetro de impacto diminui.

A seção de choque diferencial tem dimensão de área e pode ser interpretada numa maneira geométrica de tal forma que o número de partículas espalhadas sob o ângulo sólido $d\Omega$, por unidade de tempo, é igual ao número de partículas do feixe incidente que atravessa uma área igual a $\sigma(\chi, \varepsilon) d\Omega$ neste mesmo intervalo de tempo. Se por um lado a determinação do potencial de interação entre as

partículas, exceto por alguns casos simples, constitui-se um problema quântico teoricamente formidável, a seção choque diferencial é uma quantidade que pode ser obtida experimentalmente.

2.2.3 Seção de choque total e seção da choque para transferência de momento

A seção de choque total para um determinado processo é obtida integrando-se a seção de choque diferencial sobre todo o ângulo sólido

$$\sigma_{ij}^{elas}(g) = \int_{\Omega} \sigma_{ij}(\chi, \epsilon) d\Omega \quad (2.23)$$

Devemos observar que ambas as seções de choque dependem da velocidade relativa entre as partículas. A transferência de momento linear durante as colisões é o evento microscópico básico para todos os processos de transporte. Define-se a seção de choque σ_{ij}^m , para a taxa de transferência de momento linear, como o momento linear total transferido pelo feixe de partículas projéteis, por unidade de tempo, e por unidade de fluxo, para o centro espalhador, isto é,

$$\sigma_{ij}^m = \frac{\text{momento linear transferido por unidade de tempo}}{\text{fluxo de momento incidente}} \quad (2.24)$$

O fluxo incidente é dado por $\Gamma_{ji}\mu_{ij}|\vec{g}_{ji}|$ em vista do momento associado a uma partícula projétil do feixe incidente ser $\mu_{ij}|\vec{g}_{ji}|$ no sistema do centro de massa. Após o espalhamento o momento linear da partícula espalhada será $\mu_{ij}|\vec{g}_{ji}|\cos\chi$. Conseqüentemente o momento transferido pelo feixe de partículas incidentes ao centro espalhador será $\mu_{ij}|\vec{g}_{ji}|(1 - \cos\chi)$. O momento total transferido por segundo, ao centro espalhador por todas as partículas do feixe espalhado em todas as direções do espaço será

$$\Gamma_{ji}\mu_{ij}|\vec{g}_{ji}| \int_{\Omega} (1 - \cos\chi) \sigma_{ij}(\chi, \epsilon) d\Omega,$$

e a seção de choque para a transferência de momento linear, pode ser escrita, segundo a definição,

$$\sigma_{ij}^m(g) = \int_{\Omega} (1 - \cos\chi) \sigma_{ij}^{elas}(\chi, \epsilon) d\Omega \quad (2.25)$$

2.2.4 Seções de choque para processos gerais

No resumo sobre as colisões elásticas e binárias apresentamos também os importantes conceitos das seções de choque elástica total e de transferência do momento linear, em vista de suas importâncias para a descrição dos processos de transporte que ocorrem no plasma. Por outro lado, o conceito de seção de choque pode ser generalizado para considerar diversos outros processos que não sejam os processos elásticos, tais como excitação de níveis atômicos, ionização e recombinação, entre outros. Embora a solução deste tipo de espalhamento seja um problema quântico formidável, conforme já foi mencionado, as seções de choque para um determinado processo inelástico, que genericamente designaremos por processo do *tipo p*, são grandezas mensuráveis. Podemos generalizar a seção de choque para um determinado processo do *tipo p* como

$$\sigma_{ij}^{(p)} = \frac{\text{numero de particulas projeteis (i) que ao colidirem com a particula alvo (j) produzem o processo tipo - p por unidade de tempo}}{\text{fluxo de particulas projeteis}} \quad (2.26)$$

2.2.5 Taxas de reação

Tendo em vista que o número médio de partículas projéteis espalhadas por uma única partícula alvo ser $n_i g_{ij} \sigma_{ij}^{(p)}$, a taxa total de colisão ou taxa total de reação, de um determinado processo, que genericamente designaremos por processo do *tipo-p*, admitindo que existam $n_i(\vec{x}, t)$ partículas alvos por unidade de volume será

$$R_{ij}^{(p)}(\vec{x}, t) = n_i(\vec{x}, t) n_j(\vec{x}, t) g_{ij} \sigma_{ij}^{(p)}(g) \quad (2.27)$$

A taxa de reação é uma quantidade macroscópica pois depende de variáveis tais como pressão e temperatura das espécies que compõem o plasma, grandezas estas que definem o estado termodinâmico do sistema. Por outro lado, define-se frequência de colisão do processo do *tipo-p* como a taxa média no qual uma partícula projétil colide com todas as partículas alvo de uma das espécies que compõem o plasma, sendo então, dada pela expressão

$$v_{ij}^{(p)} = \frac{R_{ij}^{(p)}}{n_i(\vec{x}, t)} = n_j(\vec{x}, t) g_{ij} \sigma_{ij}^{(p)}(g) \quad (2.28)$$

Desenvolveremos a seguir uma fórmula análoga a taxa de reação $R_{ij}^{(p)}(\vec{x}, t) = n_i(\vec{x}, t)n_j(\vec{x}, t)g_{ij}\sigma_{ij}^{(p)}(g)$, considerando a distribuição de velocidades tanto para a partícula projétil, (i) como para a partícula alvo (j). Vamos imaginar que o plasma seja construído através uma superposição de feixes de partículas projeteis (i), de comprimentos infinitesimais, sendo que cada feixe movimenta-se com velocidade, em relação ao referencial do laboratório, situada no intervalo entre $\vec{v}_i$ e $\vec{v}_i + d\vec{v}_i$. Então no sistema de referência do laboratório, o número de partículas projeteis (i), por unidade de volume, em cada feixe infinitesimal será $dn_i = f_i(\vec{x}, \vec{v}_i, t)d^3\vec{v}_i$. Por outro lado, uma partícula alvo (j) com velocidade $\vec{v}_j$, apresentará uma velocidade relativa $\vec{g}_{ij}$ em relação a cada feixe infinitesimal de partículas projeteis com velocidade $\vec{v}_i$, sendo esta velocidade relativa, definida por $\vec{g}_{ij} = \vec{v}_i - \vec{v}_j$. Desta forma, podemos escrever a seguinte expressão para a densidade de fluxo diferencial (das partículas projeteis em relação as partículas alvo) $d\vec{\Gamma}_i = f_i(\vec{x}, \vec{v}_i, t)d^3\vec{v}_i(\vec{v}_i - \vec{v}_j)$. Utilizando o conceito de seção de choque, o número de partículas projeteis neste feixe infinitesimal, que produzem um determinado processo do *tipo-p*, por unidade de tempo e de volume com uma partícula alvo será $f_i(\vec{x}, \vec{v}_i, t)d^3\vec{v}_i\vec{g}_{ij}\sigma_{ij}^{(p)}(\vec{v}_i - \vec{v}_j)$. Como existem $f_j(\vec{x}, \vec{v}_j, t)d^3\vec{v}_j$ partículas alvos por unidade de volume, com velocidades entre $\vec{v}_j$ e $\vec{v}_j + d\vec{v}_j$, o número médio de processos do *tipo-p*, por unidade de tempo e unidade de volume, entre as partículas projeteis com velocidade $\vec{v}_i$ e $\vec{v}_i + d\vec{v}_i$ com partículas alvos com velocidade entre $\vec{v}_j$ e $\vec{v}_j + d\vec{v}_j$, será, por definição, igual a taxa de reação diferencial para o processo do *tipo-p*, isto é:

$$d^2R_{ij}^{(p)} = f_i(\vec{x}, \vec{v}_i, t)f_j(\vec{x}, \vec{v}_j, t)|\vec{g}_{ij}|\sigma_{ij}^{(p)}(\vec{v}_i - \vec{v}_j)d^3\vec{v}_id^3\vec{v}_j.$$

O número total de processos *tipo-p* que ocorrem por unidade de volume e unidade de tempo, isto é, a taxa de reação, será então

$$R_{ij}^{(p)}(\vec{x}, t) = \iint_{v_i v_j} f_i(\vec{v}_i)f_j(\vec{v}_j)|\vec{g}_{ij}|\sigma_{ij}^{(p)}(\vec{v}_i - \vec{v}_j)d^3\vec{v}_id^3\vec{v}_j \quad (2.29)$$

Para um desenvolvimento adicional vamos admitir, por hipótese que, f_i e f_j sejam funções Maxwellianas nas temperaturas T_i e T_j das velocidades peculiares $\vec{c}_i$ e $\vec{c}_j$, Eq. (2.16)

$$f_i(\vec{c}_i) = f_i^M = n_i \left(\frac{m_i}{2\pi k_B T_i} \right)^{\frac{3}{2}} e^{-\frac{1}{2} \frac{m_i c_i^2}{k_B T_i}} \text{ e } f_j(\vec{c}_j) = f_j^M = n_j \left(\frac{m_j}{2\pi k_B T_j} \right)^{\frac{3}{2}} e^{-\frac{1}{2} \frac{m_j c_j^2}{k_B T_j}} \quad (2.30)$$

Para que a função de distribuição seja do tipo de Maxwell devemos ter a condição de equilíbrio termodinâmico. Contudo em muitas situações esta distribuição fornece uma descrição aproximada aceitável, desde que a função de distribuição real não difira muito da distribuição de Maxwell. A taxa de reação do processo do *tipo-p* poderá então ser escrita como.

$$R_{ij}^{(p)} = n_i n_j \left[\frac{8k_B}{\pi} \left(\frac{T_i}{m_i} + \frac{T_j}{m_j} \right) \right]^{\frac{1}{2}} \int_0^\infty x e^{-x} \sigma_{ij}^{(p)} \left[\sqrt{2k_B \left(\frac{T_i}{m_i} + \frac{T_j}{m_j} \right)} g_{ji} \right] dx. \quad (2.31)$$

Para a obtenção deste resultado utilizamos a seguinte transformação de variáveis:

$$\vec{g} = \frac{\frac{m_i}{T_i} \vec{v}_i + \frac{m_j}{T_j} \vec{v}_j}{\frac{m_i}{T_i} + \frac{m_j}{T_j}} \text{ e } \vec{g}_{ji} = \vec{v}_j - \vec{v}_i$$

e adicionalmente verificamos que o jacobiano da transformação $\{\vec{v}_i, \vec{v}_j\} \rightarrow \{\vec{g}, \vec{g}_{ji}\}$ é unitário.

2.2.6 Transferências de momento linear e de energia em colisões elásticas

Para determinarmos o momento linear transferido pela partícula projétil para a partícula alvo devemos calcular a variação no momento linear sofrida pela partícula alvo como resultado da colisão elástica, isto é,

$$\Delta \vec{p} = m_i \vec{v}_i' - m_i \vec{v}_i$$

Utilizando a Eq.(2.18) e os teoremas de conservação, obtemos

$$\Delta \vec{p} = \mu_{ij} (\vec{g}_{ji}' - \vec{g}_{ji})$$

De posse deste resultado, vamos calcular a seguinte integral que será usada nas próximas seções:

$$\int_{\Omega} \Delta p \sigma_{ij}(g, \chi, \epsilon) d\Omega = -\mu_{ij} g_{ji} \int_{\Omega} (1 - \cos \chi) \sigma_{ij}(g, \chi) d\Omega = -\mu_{ij} g_{ji} \sigma_{ij}^m(g) \quad (2.32)$$

onde utilizamos a definição de seção de choque para transferência de momento linear, Eq.(2.25), além de admitir que a seção de choque elástica seja independente do ângulo ϵ .

Em colisões binárias e elásticas a energia cinética total das partículas antes e após a colisão se mantém constante. É de relevância a expressão para a transferência de energia cinética da partícula projétil para a partícula alvo como resultado da colisão elástica. Para escrever esta expressão basta observar que

$$\Delta E = \frac{1}{2} m_i v_i'^2 - \frac{1}{2} m_i v_i^2$$

utilizando as Eqs.(2.18) e (2.19) obtemos a seguinte expressão

$$\Delta E = -\mu_{ij} \vec{G}_0 \cdot (\vec{g}'_{ji} - \vec{g}_{ji}).$$

De posse deste resultado vamos calcular outra integral que também será usada nas próximas seções

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} \Delta E \sigma_{ij}(g, \chi, \epsilon) d\Omega &= -\mu_{ij} \int_{\Omega} \vec{G}_0 \cdot (\vec{g}'_{ji} - \vec{g}_{ji}) \sigma_{ij}(g, \chi) d\Omega = \\ &= -\mu_{ij} \vec{G}_0 \cdot \vec{g}_{ji} \int_{\Omega} (1 - \cos \chi) \sigma_{ij}(g, \chi) d\Omega = -\mu_{ij} \vec{G}_0 \cdot \vec{g}_{ji} \sigma_{ij}^m(g) \end{aligned} \quad (2.33)$$

2.3 A Equação de Transporte de Boltzmann e As Equações de Conservação.

Sob condições de não-equilíbrio translacional, gradientes espaciais, variações temporais e campos de força externos, teremos valores não nulos do vetor fluxo de calor $\vec{q}_i(\vec{x}, t)$, do tensor de tensão viscosa $\vec{\pi}_i(\vec{x}, t)$ e da velocidade direta $\vec{u}_i(\vec{x}, t)$ da espécie i . Segundo as Eqs.(2.9), (2.12) e (2.13), que definem estas grandezas em termos da função de distribuição de velocidades $f_i(\vec{x}, \vec{v}_i, t)$, poderemos inferir que $f_i(\vec{x}, \vec{v}_i, t)$ será certamente não-Maxwelliana. É necessário, portanto, determinarmos $f_i(\vec{x}, \vec{v}_i, t)$ para a completa descrição do gás ionizado de maneira que seja possível calcular $\vec{q}_i(\vec{x}, t)$, $\vec{\pi}_i(\vec{x}, t)$ e $\vec{u}_i(\vec{x}, t)$.

Por sua vez, a função de distribuição é solução da equação de transporte de Boltzmann (Golant V. E. et al., 1980). Se definimos o operador $D = \frac{\partial}{\partial t} + \vec{v}_i \cdot \frac{\partial}{\partial \vec{x}} + \frac{\vec{F}_i}{m_i} \cdot \frac{\partial}{\partial \vec{v}_i}$, então a equação de Boltzmann pode ser

escrita como:

$$Df_i = \frac{\partial}{\partial t} f_i(\vec{x}, \vec{v}_i, t) + \vec{v}_i \cdot \nabla f_i(\vec{x}, \vec{v}_i, t) + \frac{\vec{F}_i}{m_i} \cdot \nabla_{\vec{v}_i} f_i(\vec{x}, \vec{v}_i, t) = J_i(\vec{x}, \vec{v}_i, t) \quad (2.34)$$

O lado esquerdo da Eq.(2.34) representa a variação da função de distribuição devida à evolução temporal, ao movimento de convecção e à ação de forças externas. O lado direito, por sua vez,

representa a variação de $f_i(\vec{x}, \vec{v}_i, t)$ devido a todo e qualquer tipo de colisões das partículas i no intervalo de velocidades entre $\vec{v}_i$ e $\vec{v}_i + d\vec{v}_i$, com todas as demais espécies de partículas que constituem o gás ionizado.

2.3.1 Equação geral do transporte

Seja uma função $\Phi(\vec{x}, \vec{v}_i, t)$ que descreve alguma propriedade do plasma, a equação geral do transporte é obtida segundo a transformação da função $\Phi(\vec{x}, \vec{v}_i, t)$ por $Df_i(\vec{x}, \vec{v}_i, t)$, isto é,

$$\int_{\vec{v}_i} \Phi(\vec{x}, \vec{v}_i, t) Df_i(\vec{x}, \vec{v}_i, t) d\vec{v}_i = \int_{\vec{v}_i} \Phi(\vec{x}, \vec{v}_i, t) J_i(\vec{x}, \vec{v}_i, t) d^3\vec{v}_i \quad (2.35)$$

O lado esquerdo desta equação pode ser transformado, lembrando que $\vec{x}$ e $\vec{v}_i$ são variáveis independentes no espaço de fase e da condição de não haver partículas com velocidades infinitas. Em vista destes fatos obtemos, segundo (Bittencourt J. A., 1995), uma vez realizada a integração indicada na Eq.(2.35), a equação geral do transporte

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} n_i \langle \Phi_i \rangle - n_i \left\langle \frac{\partial}{\partial t} \Phi_i \right\rangle + \nabla \cdot n_i \langle \Phi_i \vec{v}_i \rangle - n_i \langle (\vec{v}_i \cdot \nabla) \Phi_i \rangle - n_i \left\langle \left(\frac{\vec{F}_i}{m_i} \cdot \nabla \right) \Phi_i \right\rangle \\ = \int_{\vec{v}_i} \Phi(\vec{x}, \vec{v}_i, t) J_i(\vec{x}, \vec{v}_i, t) d^3\vec{v}_i \end{aligned} \quad (2.36)$$

2.3.2 Momentos da equação de transporte de Boltzmann

O desenvolvimento apresentado aqui segue a metodologia descrita por (Bittencourt J. A., 1995). Obteremos as equações de conservação para os momentos da função de distribuição. Para isto substituiremos várias formas funcionais para Φ e realizaremos a integração indicada pela Eq.(2.36). Φ será tomado igual a 1, m_i , $m_i \vec{v}_i$, $\frac{1}{2} m_i v_i^2$. Como resultado obteremos as equações para a conservação do número de partículas, conservação de massa, do momento linear, e da conservação de energia translacional, referentes as partículas que compõem o plasma, conforme a Tab.(2.2).

$\Phi_i(\vec{x}, \vec{v}_i, t)$	Nome da equação de conservação
1	número de partículas $n_i(\vec{x}, t)$
m_i	conservação de massa $\rho_i(\vec{x}, t)$
$m_i \vec{v}_i$	conservação de momento linear $\vec{u}_i(\vec{x}, t)$
$\frac{1}{2} m_i v_i^2$	conservação de energia translacional $\vec{q}_i(\vec{x}, t)$

Tabela (2.2) Momentos a equação de Boltzmann

i. Equação para o número de partículas, $\Phi_i = 1$

$$\frac{\partial n_i}{\partial t} + \nabla \cdot (n_i \vec{u}_i) = \int_{\vec{v}_i} J_i d^3 \vec{v}_i \quad (2.37)$$

No caso de colisões elásticas, o termo colisional anula-se, pois não haverá nem a criação nem a destruição de partículas. O lado direito considera todos os processos inelásticos responsáveis pela criação e destruição das espécies i . A forma explícita para este termo dependerá do tratamento que vamos utilizar para o modelamento do plasma, e somente poderá ser desenvolvida totalmente ao estabelecermos um modelo para o plasma.

ii. Equação para a conservação da massa, $\Phi_i = m_i$

$$\frac{\partial}{\partial t} n_i m_i + \nabla \cdot n_i m_i \vec{u}_i = \int_{\vec{v}_i} m_i J_i d^3 \vec{v}_i \quad (2.38)$$

utilizando a Eq.(2.8) poderemos escrever a equação acima como,

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho_i + \nabla \cdot \rho_i \vec{u}_i = \int_{\vec{v}_i} m_i J_i d^3 \vec{v}_i \quad (2.39)$$

iii. Equação para a conservação do momento linear, $\Phi_i = m_i \vec{v}_i$

Seguindo o procedimento utilizado nos itens anteriores, obtemos

$$\frac{\partial}{\partial t} n_i m_i \vec{u}_i + \nabla \cdot n_i m_i \vec{u}_i \vec{u}_i + \nabla \cdot n_i m_i \langle \vec{c}_i \vec{c}_i \rangle - n_i \vec{F}_i = \int_{\vec{v}_i} m_i \vec{v}_i J_i(\vec{x}, \vec{v}_i, t) d^3 \vec{v}_i$$

Utilizando a definição do tensor de pressão, Eq.(2.13), além de desenvolver o segundo termo do lado esquerdo da equação acima segundo a identidade vetorial

$$\nabla \cdot n_i m_i \vec{u}_i \vec{u}_i = n_i m_i (\vec{u}_i \cdot \nabla) \vec{u}_i + \vec{u}_i [\nabla \cdot (n_i m_i \vec{u}_i)],$$

e a posterior substituição da Eq.(2.38), obtemos a equação para a conservação do momento linear para cada espécie do plasma

$$n_i m_i \left[\frac{\partial \vec{u}_i}{\partial t} + (\vec{u}_i \cdot \nabla) \vec{u}_i \right] + \nabla \cdot \vec{P}_i - n_i \vec{F}_i = \int_{\vec{v}_i} m_i \vec{v}_i J_i(\vec{x}, \vec{v}_i, t) d^3 \vec{v}_i - \vec{u}_i \int_{\vec{v}_i} m_i J_i(\vec{x}, \vec{v}_i, t) d^3 \vec{v}_i \quad (2.40)$$

iv. *Equação para a conservação da energia translacional.* $\Phi_i = \frac{1}{2} m_i v_i^2$

Φ_i neste caso é a energia cinética da i -ésima espécie com velocidade $\vec{v}_i$

$$n_i \langle \Phi_i \rangle = \int_{\vec{v}_i} \frac{1}{2} m_i v_i^2 f_i d^3 \vec{v}_i = E_i^{(T)} \quad (2.41)$$

que define a densidade de energia translacional $E_i^{(T)} = E_i^{(T)}(\vec{x}, T_i, t)$.

$$n_i \langle \Phi_i \rangle = \int_{\vec{v}_i} \frac{1}{2} m_i v_i^2 f_i d^3 \vec{v}_i = E_i^{(T)} = \frac{1}{2} n_i m_i u_i^2 + \frac{3}{2} n_i k_B T_i \quad (2.42)$$

Substituindo $\Phi_i = \frac{1}{2} m_i v_i^2$ na equação geral do transporte, utilizando as definições do tensor de pressão, Eq.(2.13) e do vetor fluxo de calor, Eq.(2.12), a equação para a conservação de energia pode ser escrita como

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{1}{2} n_i m_i u_i^2 + \frac{3}{2} n_i k_B T_i \right) + \nabla \cdot \left(\frac{1}{2} n_i m_i u_i^2 + \frac{3}{2} n_i k_B T_i \right) \vec{u}_i + \nabla \cdot (\vec{P}_i \cdot \vec{u}_i) + \nabla \cdot \vec{q}_i + n_i \vec{F}_i \cdot \vec{u}_i = \\ = \int_{\vec{v}_i} \frac{1}{2} m_i v_i^2 J_i(\vec{x}, \vec{v}_i, t) d^3 \vec{v}_i \end{aligned}$$

Através da substituição da equação para a conservação da massa, Eq.(2.38) e da equação para a conservação do momento linear, Eq.(2.40), e a utilização da identidade

$$\nabla \cdot (\vec{P}_i \cdot \vec{u}_i) = (\vec{P}_i \cdot \nabla) \vec{u}_i + \vec{u}_i \nabla \cdot \vec{P}_i$$

na equação para a conservação de energia, obtemos outra forma para a referida equação:

$$\frac{3}{2} n_i k_B \left[\frac{\partial}{\partial t} + (\vec{u}_i \cdot \nabla) \right] T_i + (\vec{P}_i \cdot \nabla) \vec{u}_i + \nabla \cdot \vec{q}_i = \int_{\vec{v}_i} \frac{1}{2} m_i v_i^2 J_i d^3 \vec{v} + \vec{u}_i \cdot \int_{\vec{v}_i} m_i \vec{v}_i J_i d^3 \vec{v} + \left(\frac{1}{2} u_i^2 - \frac{3}{2} \frac{k_B T_i}{m_i} \right) \int_{\vec{v}_i} m_i J_i d^3 \vec{v} \quad (2.43)$$

2.3.3 Termo colisional da equação de transporte de Boltzmann

Desenvolveremos o termo colisional $J_i(\vec{x}, \vec{v}_i, t)$ da Eq.(2.34), sob as seguintes hipóteses:

- (i) somente colisões elásticas e binárias,
- (ii) não existe campo de força externo, ou que o efeito das forças externas sobre as partículas durante a colisão seja pequeno em relação as forças no instante da colisão,
- (iii) as funções de distribuição que caracterizam cada participante da colisão não variam de modo sensível na escala de tempo e distância em que ocorre o processo colisional, e
- (iv) não existe correlação entre as velocidades das partículas antes da colisão.

O termo colisional J_i traduz a variação da função de distribuição incógnita $f_i(\vec{x}, \vec{v}_i, t)$ na equação de transporte de Boltzmann devido a todo e qualquer tipo de colisão. Tendo em vista que $f_i(\vec{x}, \vec{v}_i, t)$ representa o número de partículas da i -ésima espécie localizadas no intervalo de velocidades entre $\vec{v}_i$ e $\vec{v}_i + d\vec{v}_i$ e no intervalo de configuração entre $\vec{x}$ e $\vec{x} + d\vec{x}$, podemos inferir, em vista de nossa discussão sobre as colisões binárias e elásticas que, dois tipos de colisões que ocorrem no intervalo de configuração entre $\vec{x}$ e $\vec{x} + d\vec{x}$, contribuirão para a variação de $f_i(\vec{x}, \vec{v}_i, t)$.

São elas:

- (i) Colisões onde o feixe de partículas projéteis, que colide com as partículas alvos, retiram as partículas alvos do intervalo de velocidades $\vec{v}_i$ e $\vec{v}_i + d\vec{v}_i$ e as colocam em outro intervalo de velocidade, reduzindo assim o número de partículas da i -ésima espécie. Em vista de nossa discussão sobre a taxa de reação, o número de eventos responsáveis por esta redução em $f_i(\vec{x}, \vec{v}_i, t)$, Eq.(2.29), por unidade de volume e unidade de tempo, será dado por

$$d^2 R_{ij}^{e(-)} = f_i(\vec{x}, \vec{v}_i, t) f_j(\vec{x}, \vec{v}_j, t) g_{ij} \sigma_{ij}^m(g, \chi, \epsilon) d\Omega d^3 \vec{v}_i d^3 \vec{v}_j \quad (2.44)$$

- (ii) Colisões onde o feixe de partículas projéteis ao colidir com as partículas alvo que inicialmente estavam localizadas no intervalo $\vec{v}_i'$ e $\vec{v}_i' + d\vec{v}_i'$ de velocidades, colocam as partículas alvo no intervalo de velocidades $\vec{v}_i$ e $\vec{v}_i + d\vec{v}_i$, aumentando desta forma $f_i(\vec{x}, \vec{v}_i, t)$. Este aumento, por unidade de volume e unidade de tempo, será dado por,

$$d^2 R_{ij}^{e(+)} = f_i(\vec{x}, \vec{v}'_i, t) f_j(\vec{x}, \vec{v}'_j, t) g'_{ij} \sigma_{ij}^m(g'_{ij}, \chi, \epsilon) d\Omega d^3 \vec{v}'_i d^3 \vec{v}'_j \quad (2.45)$$

Já mostramos que $g_{ij} = g'_{ij}$ e além disso $d^3 \vec{v}'_i d^3 \vec{v}'_j = d^3 \vec{v}_i d^3 \vec{v}_j$. Desta forma a taxa de variação líquida de $f_i(\vec{x}, \vec{v}_i, t)$ por unidade de tempo e unidade de volume será

$$d^2 R_{ij}^{e(+)} - d^2 R_{ij}^{e(-)} = \left[f_i(\vec{x}, \vec{v}'_i, t) f_j(\vec{x}, \vec{v}'_j, t) - f_i(\vec{x}, \vec{v}_i, t) f_j(\vec{x}, \vec{v}_j, t) \right] g_{ij} \sigma_{ij}^m(g_{ij}, \chi, \epsilon) d\Omega d^3 \vec{v}_i d^3 \vec{v}_j \quad (2.46)$$

Para obter a expressão para J_i devemos integrar a equação acima sobre todas as velocidades das partículas projéteis, sobre todos os ângulos, somar sob todos os tipos de partículas projéteis e dividir o resultado por $d^3 \vec{v}_i$. Desta forma, J_i pode ser escrito como

$$J_i(\vec{x}, \vec{v}_i, t) = \sum_{j=1}^N \iiint_{\Omega, \vec{v}_j} \left[f_i(\vec{x}, \vec{v}'_i, t) f_j(\vec{x}, \vec{v}'_j, t) - f_i(\vec{x}, \vec{v}_i, t) f_j(\vec{x}, \vec{v}_j, t) \right] g_{ij} \sigma_{ij}^m(g_{ij}, \chi, \epsilon) d\Omega d^3 \vec{v}_j \quad (2.47)$$

onde integração em relação a Ω é sobre todo o ângulo de 4π , com exceção das colisões entre as partículas carregadas onde o limite inferior χ_{min} é imposto sobre o ângulo de espalhamento χ para considerar o efeito da blindagem de Debye, (Tanenbaun B. S., 1967).

A fim de obtermos as integrais dos termos colisionais nas equações dos momentos da função de distribuição devemos considerar o seguinte procedimento: multiplicando a Eq.(2.47) por $\Phi(\vec{x}, \vec{v}_i, t)$ e integrando sobre todas as velocidades das partículas alvo, isto é:

$$\begin{aligned} \int_i \Phi(\vec{x}, \vec{v}_i, t) J_i(\vec{x}, \vec{v}_i, t) d^3 \vec{v}_i &= \\ &= \sum_{j=1}^N \iiint_{\Omega, \vec{v}_j} \int_{\vec{v}_i} \Phi(\vec{x}, \vec{v}_i, t) \left[f_i(\vec{x}, \vec{v}'_i, t) f_j(\vec{x}, \vec{v}'_j, t) - f_i(\vec{x}, \vec{v}_i, t) f_j(\vec{x}, \vec{v}_j, t) \right] g_{ij} \sigma_{ij}^m(g_{ij}, \chi, \epsilon) d\Omega d^3 \vec{v}_i d^3 \vec{v}_j. \end{aligned}$$

Transformando o lado direito da expressão segundo $\vec{v}'_i \rightarrow \vec{v}_i$ e $\vec{v}'_j \rightarrow \vec{v}_j$ como e $d^3 \vec{v}'_i d^3 \vec{v}'_j = d^3 \vec{v}_i d^3 \vec{v}_j$, o resultado final será

$$\begin{aligned} \int_{\vec{v}_i} \Phi(\vec{x}, \vec{v}_i, t) J_i(\vec{x}, \vec{v}_i, t) d^3 \vec{v}_i &= \sum_{j=1}^N \iiint_{\Omega, \vec{v}_j} \left[\Phi(\vec{x}, \vec{v}'_i, t) - \Phi(\vec{x}, \vec{v}_i, t) \right] \times \\ &\quad f_i(\vec{x}, \vec{v}_i, t) f_j(\vec{x}, \vec{v}_j, t) g_{ij} \sigma_{ij}^m(g_{ij}, \chi, \epsilon) d\Omega d^3 \vec{v}_i d^3 \vec{v}_j \end{aligned} \quad (2.48)$$

Vamos agora escrever as integrais colisionais para as equações de conservação considerando somente

colisões elásticas.

(i) *Termo colisional para a equação para o número de partículas e densidade de massa.*

Neste caso, segundo a Eq.(2.48), a integral colisional é nula já que estamos considerando somente colisões elásticas.

(ii) *Termo colisional para a equação do momento linear.*

O termo colisional para a Eq. (2.40), tem a seguinte forma:

$$\sum_{i=1}^N \iiint_{\Omega, \vec{v}_i, \vec{v}_j} [m_i \vec{v}_i' - m_i \vec{v}_i] f_i(\vec{x}, \vec{v}_i, t) f_j(\vec{x}, \vec{v}_j, t) g_{ij} \sigma_{ij}^m(g_{ij}, \chi, \epsilon) d\Omega d^3\vec{v}_i d^3\vec{v}_j$$

utilizando o resultado da Eq.(2.20) e Eq.(2.32) esta expressão passa ser escrita como

$$-n_i \sum_{j=1}^N \frac{m_i m_j}{m_i + m_j} \langle v_{ij}^m \vec{g}_{ij} \rangle \quad (2.49)$$

se considerarmos que $f_i(\vec{x}, \vec{v}_i, t)$ e $f_j(\vec{x}, \vec{v}_j, t)$ sejam funções maxwellianas das velocidades, e calculando-se o valor médio obtemos a seguinte expressão, segundo (Tenenbaum B. S., 1967),

$$-n_i \sum_{j=1}^N m_{ij} \langle v_{ij}^m \rangle (\vec{u}_i - \vec{u}_j) \quad (2.50)$$

(iii) *Termo colisional para a equação de transporte de energia.*

Neste caso a integral colisional passa ser escrita como

$$\sum_{i=1}^N \iiint_{\Omega, \vec{v}_i, \vec{v}_j} \left[\frac{1}{2} m_i v_i'^2 - \frac{1}{2} m_i v_i^2 \right] f_i(\vec{x}, \vec{v}_i, t) f_j(\vec{x}, \vec{v}_j, t) g_{ij} \sigma_{ij}^m(g_{ij}, \chi, \epsilon) d\Omega d^3\vec{v}_i d^3\vec{v}_j$$

substituindo a expressão obtida na Eq.(2.33), a expressão acima pode ser escrita como:

$$\begin{aligned} & \sum_{j=1}^N -\frac{m_i m_j}{m_i + m_j} n_i \langle \vec{G}_0 \cdot \vec{g}_{ij} \sigma_{ij}^m \rangle = \\ & -n_i \sum_{j=1}^N \frac{2m_i m_j}{(m_i + m_j)^2} \langle \sigma_{ij}^m \left[\frac{m_i v_i^2}{2} - \frac{m_j v_j^2}{2} + \frac{(m_j - m_i) \vec{v}_i \cdot \vec{v}_j}{2} \right] \rangle \end{aligned}$$

Se a seção de choque for independente da velocidade relativa, o cálculo do valor médio é bastante simples, mas, no caso geral, a seção de choque é dependente da velocidade relativa. Neste caso contudo,

é possível obter uma forma aproximada para a expressão acima se considerarmos que $f_i(\vec{x}, \vec{v}_i, t)$ e $f_j(\vec{x}, \vec{v}_j, t)$ sejam funções maxwellianas das velocidades. Calculando-se o valor médio obtemos a seguinte expressão, (utilizando a definição de temperatura Eq.(2.11)), (Tanenbaum B. S., 1967):

$$-n_i \sum_{j=1}^N \frac{2m_i m_j}{(m_i + m_j)^2} < v_{ij}^m > \frac{3}{2} k_B (T_i - T_j) \quad (2.51)$$

2.3.4 Resumo das equações de conservação

As equações de conservação Eq.(2.37), Eq.(2.40) e Eq.(2.43) escritas com os respectivos termos colisionais, em vista não somente considerar agora as colisões elásticas, mas como também as colisões inelásticas, assumem a seguinte forma:

$$\frac{\partial n_i m_i}{\partial t} + \nabla \cdot (n_i m_i \vec{u}_i) = R_i \quad (2.52)$$

$$n_i m_i \left[\frac{\partial \vec{u}_i}{\partial t} + (\vec{u}_i \cdot \nabla) \vec{u}_i \right] + \nabla \cdot \vec{P}_i - n_i \vec{F}_i = n_i \sum_{j=1}^N m_j < v_{ij}^m > (\vec{u}_i - \vec{u}_j) - m_i \vec{u}_i R_i \quad (2.53)$$

$$\begin{aligned} \frac{3}{2} n_i k_B \left[\frac{\partial}{\partial t} + (\vec{u}_i \cdot \nabla) \right] T_i + (\vec{P}_i \cdot \nabla) \vec{u}_i + \nabla \cdot \vec{q}_i = -n_i \sum_{j=1}^N \frac{2m_i m_j}{(m_i + m_j)^2} < v_{ij}^m > \frac{3}{2} k_B (T_i - T_j) \\ -\vec{u}_i \cdot n_i \sum_{j=1}^N m_j < v_{ij}^m > (\vec{u}_i - \vec{u}_j) + \left(\frac{1}{2} u_i^2 - \frac{3}{2} \frac{k_B T_i}{m_i} \right) R_i \end{aligned} \quad (2.54)$$

onde $R_i = \int_{\vec{v}_i} m_i J_i d^3 \vec{v}_i$ representa a taxa líquida de criação ou destruição da partícula da espécie i devido

a colisões inelásticas.

2.4 Equações de Maxwell

Conforme discutido anteriormente, o campo externo ao tubo de descarga é devido a uma descarga capacitiva de alta voltagem. Deveremos então utilizar as equações de Maxwell para relacionar o transferência da energia armazenada nas placas do capacitor para o tubo de descarga. Consideremos as equações de Maxwell;

$$\nabla \cdot \vec{E} = \frac{\rho}{\epsilon_0} \quad (2.55)$$

$$\nabla \times \vec{E} = -\frac{\partial \vec{B}}{\partial t} \quad (2.56)$$

$$\nabla \times \vec{B} = \mu_0 \vec{J} + \mu_0 \frac{\partial}{\partial t} \epsilon_0 \vec{E} \quad (2.57)$$

$$\nabla \cdot \vec{B} = 0 \quad (2.58)$$

Devido à propriedade de quase neutralidade do plasma temos a seguinte expressão para a lei de Gauss para o campo elétrico: $\nabla \cdot \vec{E} = 0$. Em vista da ocorrência do pulso de corrente através do tubo de descarga, teremos corrente de condução fluindo longitudinalmente ao tubo de descarga. Segundo a lei de Ohm, esta corrente de condução se relaciona com o vetor intensidade de campo elétrico pela seguinte expressão $\vec{J} = \sigma \vec{E}$, onde a condutividade elétrica é definida pela seguinte relação:

$$\sigma = \frac{n_e e^2}{m_e \langle v_e^m \rangle} \quad (2.59)$$

onde é $\langle v_e^m \rangle$ a frequência de colisão para transferência de momento linear total para os elétrons.

Nestas condições, o campo elétrico satisfaz a seguinte equação diferencial

$$\nabla^2 \vec{E} - \frac{\partial}{\partial t} \sigma \vec{E} - \mu_0 \frac{\partial}{\partial t} \epsilon_0 \vec{E} = 0 \quad (2.60)$$

onde μ_0 e ϵ_0 são a permeabilidade magnética do vácuo e a susceptibilidade elétrica do vácuo, respectivamente.

2.5 Modelo Geral Proposto para o Plasma

Apresentaremos as hipóteses que utilizamos para construir o modelo para descrever a cinética do plasma produzido por um pulso de voltagem capacitivo num tubo de descarga. O pulso de alta voltagem é oriundo do chaveamento de um capacitor carregado com a alta voltagem sobre o tubo de descarga. A descarga elétrica é aplicada longitudinalmente sobre o tubo de descarga. Particularizando para o plasma

produzido no laser a vapor de cobre, onde temos uma mistura gasosa sendo comumente empregadas as seguintes misturas: Ne-Cu ou He-Cu. Os valores típicos para as densidades de partículas são: $Ne \approx 10^{17} cm^{-3}$ e $Cu \approx 10^{15} cm^{-3}$, (Kushner M. J. e Warner B., 1983), $He \approx 5 \times 10^{16} cm^{-3}$ e $Cu \approx 10^{15} cm^{-3}$, (Kushner M. J., 1981). A densidade típica do vapor de cobre é essencialmente devida à temperatura da parede do tubo de descarga, ($1500^\circ C$).

A cada intervalo de tempo de $200\mu s$, que denominaremos de ciclo, é aplicado sobre o tubo o pulso de alta voltagem. Este pulso cria entre os eletrodos do tubo de descarga uma campo elétrico, que por sua vez origina um pulso de corrente que pode atingir entre 800 a 3 mil A, dependendo da impedância do plasma. A corrente elétrica é oscilatória, devido às características peculiares do circuito modulador. Quando a corrente elétrica cruza o valor zero, e por conseguinte, tende a adquirir um valor negativo, o circuito corta, desacoplando o capacitor da descarga. O intervalo de tempo total típico de duração do pulso de voltagem está localizado entre $500ns - 1\mu s$. Durante o pulso de descarga elétrica a densidade de elétrons varia de $10^{13} cm^{-3}$ até $10^{14} cm^{-3}$ e retorna ao valor inicial após $1\mu s - 5\mu s$ do corte do pulso, (Kushner M. J. e Warner B., 1983). A temperatura eletrônica atinge um valor de pico de $8 eV$, sendo reduzida rapidamente com o decréscimo da voltagem aplicada, retornando ao final do ciclo ao seu valor de aproximadamente $0.2 eV$.

Ao final de cada ciclo e antes da aplicação do pulso do ciclo seguinte o sistema retorna às mesmas condições que existiam antes da aplicação do pulso anterior. Sob estas condições experimentais, que foram obtidas da literatura, (Kushner M. J. e Warner B., 1983), e (Hargrove R. S. et al., 1979), é que formulamos nosso conjunto de hipóteses que aplicaremos as equações de conservação, Eqs.(2.52) e (2.54), e que serão utilizadas neste trabalho.

Hipóteses.

1. Em vista do plasma do laser a vapor de cobre ser fracamente ionizado, segue que a frequência de colisão para a transfência de momento linear elétron-átomo v_{ea}^m satisfaz as seguintes relações:

$$\begin{aligned} v_{ea}^m &>> v_{ei}^m, v_{ee}^m \\ v_{ia}^m &>> v_{ii}^m, \frac{m_e}{m_i} v_{ie}^m \end{aligned} \quad (2.61)$$

isto é, a frequência de colisão dos elétrons com átomos neutros no estado fundamental, (gás tampão), excede grandemente a frequência de colisão entre as partículas carregadas, v_{ei}^m, v_{ee}^m (Golant V. E. et al., 1980).

2. Como uma extensão do critério para plasma fracamente ionizado, formularemos nossa hipótese, sobre a frequência de colisão entre átomos em estados metaestáveis e estados em níveis energeticamente superiores ao estado metaestáveis em relação ao átomo de cobre no estado fundamental. A frequência de colisão entre qualquer espécie e os átomos do gás tampão excede grandemente qualquer outro tipo de frequência de colisão, isto é,

$$v_{ag}^m \gg v_{ab}^m, a \neq b \quad (2.62)$$

onde v_{ag}^m representa a frequência de colisão entre qualquer espécie e o gás tampão, e v_{ab}^m representa a frequência de colisão para qualquer outro tipo de colisão elástica que não com o gás tampão.

3. Existem escalas de tempo distintas para o sistema:

- a: a escala de tempo do pulso laser cuja duração típica $50ns \approx 100ns$;
- b: a escala de tempo para o pulso de elétrico de excitação $500ns \approx 1\mu s$, e
- c: a escala de tempo da pós-luminescência $\approx 200\mu s$.

Para cada escala de tempo processos cinéticos distintos serão representativos.

4. O sistema é caracterizado por duas temperaturas. Uma temperatura T_e para caracterizar a energia térmica dos elétrons e uma temperatura T_g para caracterizar a energia térmica do gás formado pela partículas pesadas. A hipótese de utilizarmos uma única temperatura para caracterizar todas as partículas pesadas, inclusive os íons, é fundamentada no bom contato térmico existente entre as partículas pesadas, em vista da proximidade do valor de suas massas, quando comparada com a diferença de massa entre as partículas pesadas e os elétrons, (Ecker G. e Zoller O., 1964).

5. Durante o pulso de descarga elétrica, a temperatura do gás permanece essencialmente constante.

Esta hipótese se baseia na relação $\frac{2m_e}{M}$, entre a massa do elétron e a massa das partículas pesadas.

Embora a frequência de colisão $\langle v_{ea}^m \rangle$ seja elevada, o produto

$$\frac{2m_e}{M} \langle v_{ea}^m \rangle \tau_{pulso}$$

não o é, já que τ_{pulso} , a constante de tempo de caracteriza a duração do pulso, $0 < \tau_{pulso} < 1\mu s$, ser pequeno. Por outro lado o produto

$$\frac{2m_e}{M} \langle v_{ea}^m \rangle \tau_{pos-lumin}$$

não o será ao final da pós luminescência, $1\mu s < \tau_{pos-lumin} < 200\mu s$, razão pela qual o aquecimento do gás ocorrerá durante o período da pós-luminescência.

5. O principal mecanismo para o aquecimento do gás são as colisões elásticas entre os elétrons e as partículas pesadas. O processo de aquecimento do gás devido a colisões inelásticas é de menor importância e não será considerado, (Kenty C. et al., 1951).

6. A variação na densidade de partículas do gás tampão no estado fundamental, devido à criação ou destruição de átomos em estados excitados ou ionizados, é de pouca importância durante qualquer instante de tempo do ciclo de descarga. $< 1\%$ para o *He*, e $< 0.5\%$ para o *Ne*.

7. O sistema é analisado por unidade de comprimento. O comprimento do tubo e a distância entre os eletrodos somente são necessários para o cálculo da intensidade do campo elétrico externo produzido sobre descarga, a impedância do tubo e o ganho do laser. Variações axiais da densidade de partículas, do fluxo de partículas e temperatura das partículas, não serão considerados. Somente a velocidade direta do elétrons na direção do campo é de relevância, cujo valor é responsável pela transferência do campo elétrico para o sistema durante o pulso elétrico. Isto pode ser justificado pela grande razão comprimento/raio do tubo.

8. A hipótese anterior implica em não considerar os fenômenos que ocorrem nos eletrodos. Ainda assim justificamos esta hipótese em vista da pequena extensão dos eletrodos quando comparada com o tamanho total do tubo.

9. Os processos difusivos, isto é, fluxo de partículas (neutras ou carregadas), ocorrem na direção radial e ocorrem somente durante o período da pós luminescência. Devido a curta duração do período em que

ocorre o pulso elétrico os fluxos radiais não são de importância. Esta hipótese se baseia nos tempos característicos para que efetiva difusão de partículas possa ocorrer, (ordinária e ambipolar) ,ver Apêndice A e B. O processo de condução de calor, em vista da energia térmica armazenada no gás, para a parede do tubo ocorre numa constante de tempo comparável a duração do final do período de pós luminescência.

10. Como a densidade de elétrons típica é da ordem $n_e \approx 10^{13} \text{ cm}^{-3}$, o fluxo de partículas carregadas será governado por um fluxo ambipolar, ver Apêndice A.

11. O transporte de energia associada ao movimento térmico é muito maior que o transporte de energia associada do movimento direto, isto é,

$$\frac{1}{2} m_i u_i^2 \ll \frac{3}{2} k_B T_i$$

Isto equivale a admitir que a anisotropia do sistema seja bem pequena, (Golant B. S. et al., 1980).

12. Os efeitos de viscosidade são desprezíveis. Para avaliarmos o efeito da viscosidade sobre o efeito da pressão escalar devemos verificar o valor da razão entre $(\nu_{ij}^m)^{-1}$, (onde ν_{ij}^m é a frequência de colisão para a transferência de momento linear) e o tempo característico para que o gás possa relaxar para o seu valor de equilíbrio, τ_c , (Mitchner M. e Kruger C. H., 1973),

$$\left| \frac{\tilde{P}_i}{P_i} \right| = \frac{(\nu_{ij}^m)^{-1}}{\tau_c} \quad (2.64)$$

Para efeito deste cálculo devemos considerar o tempo no qual o gás relaxa após o pulso de corrente, que é da ordem do comprimento do tubo de descarga dividido pela velocidade do som no gás em que estivermos trabalhando. Este tempo τ_c , para as condições do problema, não será inferior a $\tau_c \approx 10^{-4} \text{ s}$. Para condições típicas da pós-luminescência $T_e \approx 0.5 \text{ eV}$ e $T_g \approx 0.2 \text{ eV}$, o valor estimado para a Eq.(2.64) é da ordem 10^{-4} .

13. O termo convectivo da equação para a conservação do momento linear para todas as partículas não é de importância. Esta hipótese pode ser justificada através da comparação entre o termo convectivo e o termo para a força de pressão, Eq.(2.53). O termo convectivo pode ser avaliado por

$$|m_i (\vec{u}_i \cdot \nabla) \vec{u}| \approx \frac{m_i u_i^2}{L}$$

onde L é uma distância característica do sistema onde existe uma variação significava da velocidade direta, (raio tubo). Por outro lado a força de pressão pode ser avaliada segundo

$$\frac{|\nabla p_i|}{n_i} \approx \frac{k_B T_i}{L}$$

Em vista da hipótese 11, que supõe que o transporte de energia direto é muito pequeno comparado com a energia térmica, podemos desprezar o efeito do termo convectivo na equação para a conservação do momento linear.

14. A derivada temporal na equação para a conservação do momento linear para todas as outras espécies, que não seja a do gás tampão, será desprezada. Mais uma vez, para verificarmos esta hipótese deveremos comparar o tempo característico para a variação da velocidade direta com o tempo característico das colisões para a transferência de momento linear, τ_u isto é,

$$\left| m_i \frac{\partial \vec{u}_i}{\partial t} \right| \approx \frac{m_i u_i}{\tau_u} \ll m_i \langle v_{ij}^m \rangle u_i$$

ou $\langle v_{ij}^m \rangle \tau_u \gg 1$. Isto significa que o uso de soluções estacionárias para a equação de conservação do momento linear é valida quando o tempo característico da variação dos parâmetros do plasma exceder grandemente o tempo entre colisões para a transferência de momento linear.

15. A corrente de condução elétrica excede enormemente a corrente de deslocamento elétrico. Para avaliarmos a magnitude da corrente de condução sobre a corrente de deslocamento, devemos avaliar a seguinte razão:

$$\left| \frac{1}{\vec{J}} \left\| \frac{\partial}{\partial t} \epsilon_0 \vec{E} \right\| \right| = \frac{\epsilon_0 E}{\sigma E \tau_{pulso}} = \frac{\epsilon_0}{\sigma \tau_{pulso}}$$

Considerando uma densidade típica para o condutividade elétrica, $\sigma \approx 1\Omega^{-1}cm^{-1}$ a $5\Omega^{-1}cm^{-1}$ e sendo τ_{pulso} constante de tempo, o tempo necessário para o pulso de corrente completar meio ciclo, aproximadamente 500ns. A razão fica da ordem $\epsilon_0/\sigma\tau_{pulso} \approx 9 \times 10^{-7}$. Este resultado, como verificamos, implica no campo elétrico externo longitudinal obedecer a uma equação tipo difusão. Este resultado implica também que o vetor densidade de corrente de condução deverá satisfazer a relação: $\nabla \cdot \vec{J} = 0$.

16. Em vista da baixa densidade dos estados atômicos excitados durante o período da pós-luminescência, o transporte de energia direta associada a seus estados internos será considerado

desprezível.

17. Condições de contorno.

- a. Para todas as espécies ionizadas ou em estados excitados considera-se nula a densidade nas paredes do tubo de descarga. (A parede do tubo é considerada como uma parede catalisadora perfeita, estas espécies são destruídas transformando-se em átomos no estado fundamental.)
- b. A densidade de vapor de cobre na parede é fixada pela temperatura da parede.
- c. A densidade de partículas do gás tampão é obtida pela condição de fluxo nulo na parede.
- d. No centro do tubo todas as espécies apresentam o gradiente de densidade nulo, além do fluxo nulo.
- e. A temperatura dos elétrons e das partículas pesadas na parede do tubo é fixada pela temperatura da parede.
- f. No centro do tubo o gradiente de temperatura, tanto para elétrons como para partículas pesadas, é nulo.

18. As condições iniciais do problema são obtidas seguindo um esquema de auto-consistência.

19. O trabalho realizado pelas forças de pressão será tal que: $nk_B T \nabla \cdot \vec{u} \approx 0$. A propriedade $\nabla \cdot \vec{u} = 0$, implica que o fluido é incompressível. Contudo, $nk_B T \nabla \cdot \vec{u} \approx 0$, não implica necessariamente que o plasma seja incompressível, mas sim que o trabalho realizado pelas forças de pressão sejam pequenas perturbações no elemento de volume, (Krall N. A. e Trivelpiece A. W., 1973).

20. O termo $\frac{3}{2}nk_B \vec{u} \cdot \nabla T$, na equação da conservação da energia, pode ser considerado desprezível se comparado com o termo que corresponde a lei de Fourier, $\nabla \cdot \lambda \nabla T$, onde λ é a condutividade térmica para a espécie considerada. Este termo pode ser escrito segundo, (Michtner M. e Kruger C H. Jr., 1973), como:

$$|\nabla \cdot \lambda \nabla T| \approx \frac{8}{\pi} \frac{k_B^2 n T}{m v} \frac{T}{L^2}$$

Por outro lado,

$$\left| \frac{3}{2} nk_B \vec{u} \cdot \nabla T \right| \approx \frac{3}{2} nk_B T \frac{u}{L}$$

Comparando-se as duas expressões, e utilizando a hipótese 11, podemos verificar a consistência da hipótese.

2.6 Conclusão do Capítulo

Neste capítulo apresentamos o formalismo da teoria de muitos fluidos direcionado para a descrição do plasma produzido por uma descarga elétrica em condições similares àsquelas encontradas nos tubos de descargas dos lasers a vapor de cobre. Em vista dos valores típicos obtidos experimentalmente e reportados na literatura, formulamos uma série de hipóteses, que aplicadas ao formalismo geral da teoria de muitos fluidos, torna esta teoria específica para a solução do problema proposto neste trabalho. Em nenhuma das referências, (Kushner M. J. e Warner B., 1983), e (Carman R. J. et al., 1994), que resolveram um problema similar, houve uma preocupação em justificar todas as aproximações, o que é explicitamente considerado em nosso trabalho. A seguir escreveremos o conjunto de equações de conservação sob as hipóteses apresentadas na Sec.(2.5).

2.6.1 Equações de conservação durante o pulso elétrico:

1. *Equação para a densidade da i-ésima espécie*

$$\frac{dn_i}{dt} = \frac{R_i}{m_i} \quad (2.65)$$

2. *Equação para o momento linear radial da i-ésima espécie*

$$\bar{\Gamma}_i = \bar{0} \quad (2.66)$$

3. *Equação para a temperatura dos elétrons.*

$$\frac{3}{2}n_e k_B \frac{dT_e}{dt} = \bar{J} \cdot \bar{E} - \frac{3}{2}k_B T_e \sum_{j=1}^N \frac{R_j}{m_j} - \Delta T_e^{inelastica} - n_e \sum_{j=1}^N \frac{2m_e}{m_i} \langle v_{ej}^m \rangle > \frac{3}{2}k_B (T_e - T_g) \quad (2.67)$$

onde $\Delta T_e^{inelastica}$ representa a variação na temperatura devido aos processos inelásticos, e o primeiro termo do lado direito representa o ganho de energia fornecido aos elétrons pelo campo elétrico, devido ao efeito Joule, que pode ser escrito como, segundo (Mitchner M. e Kruger C. H., 1973),

$$\sum_{j=1}^N \frac{m_e m_j^2}{(m_e + m_j)^2} n_j \langle v_{ij}^m \rangle (\vec{u}_i - \vec{u}_j)^2 = m_e n_e \langle v_e^m \rangle u_e^2 = \frac{n_e e^2 E^2}{m_e \langle v_e^m \rangle} = \vec{J} \cdot \vec{E}$$

4. Equação para a temperatura do gás.

$$T_g \approx cte \quad (2.68)$$

2.6.2 Equações de conservação durante a pós-luminescência:

1. Equação para o densidade da i -ésima espécie

$$\frac{\partial n_i}{\partial t} + \nabla \cdot \vec{\Gamma}_i = \frac{R_i}{m_i}, \quad (2.69)$$

onde $\vec{\Gamma}_i$ representa o fluxo radial de cada espécie.

2. Equação para o momento linear radial da i -ésima espécie neutra.

$$\vec{\Gamma}_i = -D_i \nabla n_i - D_i^T \nabla T_i \quad (2.70)$$

onde D_i é o coeficiente de difusão ordinária e D_i^T é o coeficiente de termo-difusão. Para o fluxo de partículas carregadas devemos acrescentar mais um termo para considerar o efeito do campo elétrico ambipolar, ver Apêndice A.

3. Equação para a temperatura dos elétrons.

$$\frac{3}{2} n_e k_B \frac{\partial T_e}{\partial t} + \nabla \cdot \vec{q}_e = -n_e \sum_{j=1}^N \frac{2m_e}{M_j} \langle v_{ej}^m \rangle \frac{3}{2} k_B (T_e - T_g) - \frac{3}{2} k_B T_e \sum_{j=1}^N \frac{R_j}{m_j} - \Delta T_e^{\text{inelastica}} \quad (2.71)$$

4. Equação para a temperatura do gás.

$$\frac{3}{2} n_g k_B \frac{\partial T_g}{\partial t} + \nabla \cdot \vec{q}_g = n_e \sum_{j=1}^N \frac{2m_e}{M_j} \langle v_{ej}^m \rangle \frac{3}{2} k_B (T_e - T_g) \quad (2.72)$$

5. Equação para o campo elétrico.

$$\nabla^2 \vec{E} - \mu_0 \frac{\partial}{\partial t} \sigma \vec{E} = 0. \quad (2.73)$$

Capítulo 3

Solução para o Pulso e Pós-luminescência em Hélio Puro. Modelo Zero Dimensional

Neste capítulo utilizaremos o modelo proposto no capítulo anterior para a solução do problema da ruptura do gás, do pulso elétrico e do período pós-luminescente, isto é, o intervalo de tempo onde ocorre a relaxação do gás ionizado no interior do tubo de descarga. Utilizaremos um modelo "zero dimensional", um modelo que emprega o valor médio das grandezas calculado sobre a seção transversal do tubo de descarga. Embora esta abordagem torne a solução do problema mais simples em relação a solução radialmente dependente, ela é capaz de reproduzir o comportamento temporal do sistema. Analisamos uma descarga cujos dados foram obtidos da literatura, e os resultados de nossas simulações encontraram boa concordância com os resultados encontrados por (Kushner M. J. e Culick F. E. C., 1980).

Apresentamos inicialmente o modelo de níveis de energia que adotamos para a descrição da descarga em hélio, seguido das reações pertinentes para a descrição dos processos colisionais associados e as seções de choque e constantes de taxa para cada processo. Calculamos todas as constantes de taxas e os resultados são mostrados na forma gráfica. As constantes de taxa permitem que possamos incluir os termos correspondentes à criação ou destruição de espécies na equação de conservação do número de espécies, com a correspondente absorção ou liberação de energia na equação para o balanço de energia, conforme apresentado no final do capítulo anterior. No final deste capítulo apresentamos os resultados obtidos pela solução numérica das equações de conservação para o presente problema.

3.1 Processos que Controlam a Densidade de Espécies

O hélio foi escolhido em virtude de encontrarmos na literatura grande quantidade de informações, tais como seções de choque para processos específicos. Utilizaremos um modelo a três níveis de energia, conforme ilustrado na Fig.(3.1). Embora este modelo seja um modelo simples, foi possível obter resultados bastantes satisfatórios para a abordagem em questão. Este fato se deve aos estados $He(2^3S_1)$ e $He(2^1S_0)$ serem estados metaestáveis e os primeiros níveis de energia acima do estado fundamental, canalizando assim praticamente todos os processos radiativos oriundos de estados excitados superiores.

Os processos que ocorrem durante o pulso de descarga são preponderantemente processos de impacto eletrônico direto, enquanto que durante a pós-luminescência, isto é, durante o decaimento do plasma, os processos térmicos, tais como difusão, desativação colisional, e reações Penning, governam a cinética da descarga. Os seguintes processos serão considerados no modelo:

1	excitação
2	ionização
3	processos superelásticos
4	recombinação
5	difusão
6	transferência de momento linear
7	reações Penning
8	troca de carga
9	desativação colisional

Tabela (3.1) Processos gerais considerados no modelo

Os processos de impacto eletrônico podem ser classificados como inelásticos e elásticos como discutiremos a seguir.

3.1.1 Processos Inelásticos.

Para facilitar a descrição dos processos considerados utilizaremos a Fig.(3.1).

1. Excitação do nível metaestável, $He(2^3S_1)$ e $He(2^1S_0)$, por impacto eletrônico direto, de um átomo que inicialmente se encontrava no nível fundamental, com a correspondente redução da temperatura dos

elétrons. Este processo pode ser representado utilizando a seguinte equação:

A constante de taxa que caracteriza o processo de excitação eletrônica do estado metaestável do He, será denotada por $r_{He:1 \rightarrow 2}^E$.

Figura 3.1. Diagrama simplificado dos níveis de energia do hélio que serão utilizados para o modelo do pulso de descarga.

2. Ionização, por impacto eletrônico, de átomos do estado fundamental e do estado metaestável. As seguintes equações serão utilizadas para representar estes processos.

Observe que nestes processos ocorrerão, além da redução da temperatura eletrônica, a criação de um elétron, de um íon, e a destruição de um átomo de hélio no estado fundamental ou a destruição de um átomo metaestável. As constantes de taxas de reação para estes processos serão representadas por $r_{He:1 \rightarrow 3}^I$ e $r_{He:2 \rightarrow 3}^I$, respectivamente.

3. Colisões para o relaxamento superelástico. Este processo, em conjunto com o campo elétrico aplicado, é um dos processos responsáveis pela elevação da temperatura eletrônica. Neste caso ocorrerá a destruição de um átomo no estado metaestável e a criação de um átomo no estado fundamental. Este processo será representado pela seguinte equação,

A constante de taxa de colisões superelásticas será representada por $r_{He:2 \rightarrow 1}^S$.

3.1.2 Processos Elásticos.

Os processos elásticos com transferência de momento linear desempenham papel fundamental para o cálculo dos coeficientes de transporte, (Chapman S. e Cowling T. G., 1970).

1. Colisão elétron-átomo neutro.

Esta é a reação de transferência de momento linear dos elétrons para os átomos do gás.

sendo a constante de taxa de reação representada por r_{He}^{momen} .

2. Colisão elétron-ion de hélio.

Este processo é a bem conhecida colisão coulombiana sendo representada por

Este processo também contribui para a elevação da temperatura do gás. A constante de taxa deste processo é calculada de maneira fechada, (Tanenbaum B. S., 1967), resultando em

$$r_{ei} = 3.62 \times 10^{-6} T_e^{-3/2} \ln \Lambda \quad (3.7)$$

onde Λ , neste caso representa o parâmetro de corte coulombiano, sendo dado por $\Lambda = 1.23 \times 10^7 \left(\frac{T_e^3}{n_e} \right)^{1/2}$.

3. Colisão íon de hélio - átomo neutro de hélio.

Embora este processo não seja um processo de impacto eletrônico, ele é necessário para o cálculo do coeficiente de difusão ambipolar. No apêndice A, mostramos como relacionar a mobilidade do íon com a taxa de reação. A equação para este processo é dada por

3.1.3 Recombinação

Para gases parcialmente ionizados, um processo particularmente importante é a recombinação eletrônica. O coeficiente macroscópico de recombinação α é definido pela relação (na ausência de outros processos),

$$\frac{dn_e}{dt} = -\alpha n_e [He^+], \quad (3.9)$$

onde a notação entre colchetes representa a concentração, isto é, neste caso o número de íons de hélio por unidade de volume. O coeficiente de recombinação geralmente pode ser medido de maneira não muito complicada, e inúmeros dados são disponíveis para α , (Biondi M. A., 1976).

A recombinação pode ocorrer segundo diferentes mecanismos possíveis. Se a energia liberada na recombinação de um elétron com um íon é na forma de um fóton, então teremos uma recombinação radiativa. Este processo poder ser representado pela seguinte equação de reação

Se a energia de recombinação é liberada como um aumento da energia cinética de um terceiro corpo que participa na colisão, então falamos de recombinação a três corpos. Sendo representado segundo a equação de reação,

O cálculo rigoroso das seções de choque inelásticas é realizado utilizando o formalismo da mecânica quântica. Contudo existem problemas em que o tratamento clássico leva a resultados muito precisos.

Discutiremos a seguir, resumidamente, a idéia em que está baseada o modelo clássico da recombinação proposto por J. J. Thomson em 1924, (Massey H. S. W. e Burhop E. H. S., 1969). As idéias básicas da teoria de Thomson são as seguintes: Na ausência de colisão a energia total relativa do par íon-elétron é positiva e constante, e portanto as trajetórias são não-ligadas. Quando as duas partículas carregadas se aproximam uma da outra, a energia cinética relativa aumenta como consequência do gasto da energia potencial. Se uma das partículas carregadas sofrer uma colisão de termalização com outro elétron (um terceiro corpo), então a energia cinética relativa é reduzida. Se tal colisão para termalização ocorrer dentro de uma certa separação mínima entre as partículas carregadas, a energia total relativa do par de partículas carregadas pode ser reduzida para um valor negativo. O par elétron-íon se movimentará em trajetórias ligadas entre si e então ocorrerá a reação de recombinação. O aquecimento do elétron, (o terceiro corpo), pode ser escrito como

$$\Delta E^{RC} = E^I - E^E \quad (3.12)$$

onde E^I é o potencial de ionização do átomo e E^E é energia de excitação do orbital atômico no qual o elétron cai antes da relaxação radiativa.

1. Recombinação Colisional Radiativa

É possível provar que seguindo idéias apresentadas anteriormente o coeficiente de recombinação a três corpos é dado por

$$\alpha_{ei} = 2.13 \times 10^{-20} \frac{n_e}{T_e^{3/2}} \ln \Lambda \quad (3.13)$$

Valores para o coeficiente de recombinação a três corpos obtidos segundo argumentos mais rigorosos foram calculados por (Hinnov E. e Hirschberg J. G., 1962),

$$\alpha_{ei} = 1.09 \times 10^{-20} \frac{n_e}{T_e^{3/2}} \quad (3.14)$$

e de acordo com (Gurevich A. V. e Pitaenskii L. P., 1964),

$$\alpha_{ei} = 1.71 \times 10^{-20} \frac{n_e}{T_e^{3/2}} \ln \Lambda \quad (3.15)$$

onde a densidade e a temperatura eletrônica são expressos em cm^{-3} e K, respectivamente.

2. Recombinação Radiativa

Este processo, conforme já discutimos, consiste na captura de um elétron por um íon resultando em uma transição entre um estado não-ligado para um estado ligado, conforme a equação,

Esta processo foi investigado detalhadamente por (Bates D. R. e Dalgarno A., 1962), e (Seaton M. J., 1959). A constante de taxa para este processo pode ser escrita, segundo (Biondi, M. A. 1976), como:

$$r_{He}^{RR} = 4.2 \times 10^{-12} \left(\frac{T_e}{300} \right)^{-0.7} cm^3 / s \quad (3.17)$$

Os coeficientes que multiplicam os produtos de reação correspondem as frações dos átomos que após a reação estarão no estado metaestável e no estado fundamental.

3.1.4 Reação Penning

Os processos de destruição dos átomos em estados metaestáveis podem ser subdivididos em processos de superfície e processos de volume. Os processos de destruição pela superfície ocorrem nas paredes do tubo de descarga elétrica e são devidos a difusão dos átomos metaestáveis em direção as paredes. A difusão dos átomos de hélio em estados metaestáveis em seu próprio gás de origem é um importante processo para pressões baixas e temperaturas elevadas. Entre os diferentes processos volumétricos para a destruição dos átomos em estados metaestáveis, um dos mais importantes é a colisão entre dois átomos de hélio em estados metaestáveis. Quando dois átomos de hélio em estados metaestáveis colidem, ocorre uma captura mútua, com a formação de uma quase molécula instável excitada de hélio. Devido a excessiva reserva de energia de excitação, esta quase molécula decai imediatamente segundo um esquema de autoionização, ocorrendo uma reação tipo Penning. Os produtos de decaimento são um elétron energético, que carrega apreciável fração da energia de excitação, o íon de hélio atômico He^+ , além de um átomo de hélio no estado atômico fundamental. O esquema da reação pode ser escrito como

(Fugol I. Y. et al., 1971), determinou a constante de taxa de reação para este processo. Para a temperatura do gás em kelvin, esta constante de taxa pode ser escrita como

$$r_{He}^P = 7.1 \times 10^{-10} T_g^{1/2} cm^3 / s \quad (3.19)$$

(Ingraham J. C. e Brown S. C., 1965), determinaram a fração da energia total dos átomos no estado metaestável, que é entregue para os produtos da reação Penning. A máxima energia disponível para o elétron produzido segundo a esquema da reação, Eq.(3.18) é a diferença entre duas vezes a energia do metaestável e a energia de ionização do hélio a partir do estado fundamental, ou aproximadamente $14.5eV$. Estes autores, utilizando teoremas de conservação, foram capazes de determinar que a energia média do elétron criado é de $5/8 \varepsilon'_m \cong 9eV$ onde $\varepsilon'_m = 14.5eV$. Os demais produtos da reação dividem a diferença de $6eV$ em energia translacional.

3.1.5 Desativação Colisional

O processo de desativação colisional é apresentado e discutido por (Mitchell A. C. G. e Zemansky W. M., 1961), onde os autores apresentam expressões que permitem o cálculo da taxa de reação para o processo. Este processo, ao contrário da recombinação que ocorre as paredes do tubo é um processo que ocorre no volume do plasma. A equação que descreve este processo é dada por

Seguindo os passos indicados em, (Mitchell A. C. G. e Zemansky W. M., 1961), calculamos, para o processo de desativação dos átomos no estado metaestável do hélio, a seguinte taxa de reação.

$$r_{He}^D = 9 \times 10^{-15} \left(\frac{T_g}{300} \right)^{1/2} cm^3 / s \quad (3.21)$$

3.1.6 Difusão

O processo de difusão de partículas neutras e eletricamente carregadas encontra-se discutido em linhas gerais no apêndice A.

1. Recombinação dos íons de hélio e elétrons nas paredes do tubo.

Este processo pode ser representado pela equação,

Os coeficientes δ e $(1 - \delta)$ que aparecem multiplicando os produtos de reação representam a fração dos íons de hélio, que devido a recombinação na parede de tubo produz uma fração de átomos de hélio no estado fundamental $He(1^1S_0)$ e outra fração de átomos no estado metaestável $He(2^3S_1)$. Uma representação esquemática dos processos que ocorrem na parede está ilustrada na Fig.(3.2).

2. Destruição átomos em estados metaestáveis nas paredes do tubo.

Os átomos no estado metaestável do hélio $He(2^3S_1)$, através do fenômeno da difusão ordinária, também atingirão as paredes

Fig. (3.2) Processos de recombinação que ocorrem na parede do tubo.

e uma fração desses decairão para o estado fundamental do hélio $He(1^1S_0)$. O processo é descrito pela equação.

As equações para o balanço de partículas para o processo de difusão com a correspondente destruição nas paredes podem ser escritas como

$$\frac{d}{dt}[He] = \beta \frac{D_m}{\Lambda^2}[He_m] + (1 - \delta) \frac{D_{He^+}^A}{\Lambda^2}[He^+] \quad (3.25a)$$

$$\frac{d}{dt}[He_m] = -\beta \frac{D_m}{\Lambda^2}[He_m] + \delta \frac{D_{He^+}^A}{\Lambda^2}[He^+] \quad (3.25b)$$

$$\frac{d}{dt}[He^+] = -\frac{D_{He^+}^A}{\Lambda^2}[He^+] \quad (3.25c)$$

onde Λ é o comprimento de difusão, conforme discutido no apêndice A, representando o autovalor do problema. O coeficiente de difusão dos átomos metaestáveis do hélio difundindo-se no próprio hélio foi determinado experimentalmente por vários autores, entre eles, podemos citar o trabalho clássico de (Phelps A. V., 1955), sendo dado por

$$D_m = 9.155 \times 10^{17} \frac{T_g^{1/2}}{[He]} \text{ cm}^2 / \text{s} \quad (3.26)$$

Devemos observar que as eficiências dos processos de recombinação e desativação nas paredes do tubo de descarga que ora foram descritos e considerados através dos coeficientes (δ e β), não estão de acordo com a hipótese 17, ítem a, isto é, o caso em que ($\delta = 1$ e $\beta = 1$). Contudo estas eficiências foram introduzidas somente com a finalidade de podermos comparar os resultados fornecidos pelo nosso modelo com os resultados reportados por (Kushner M. J. e Culick F. E. C., 1980).

3.2. Seções de Choque e Constantes de Taxa para o Modelo

Descreveremos a seguir o procedimento que se mostrou adequado para o cálculo das constantes de taxa de reação de impacto eletrônico, utilizando-se a integração numérica da seção de choque para um determinado processo em conjunto com a distribuição de velocidades das partículas projeteis. Consideramos que como a massa do elétron é muito menor que a massa dos átomos de hélio, estes poderão ser considerados em repouso.

É evidente que, na presença que qualquer fluxo de corrente na descarga elétrica, não poderemos

esperar que a distribuição de velocidades dos elétrons seja completamente maxwelliana. Não obstante este fato, nós freqüentemente encontramos que as funções de distribuição para os elétrons são próximas a de Maxwell. Desta forma utilizaremos esta função de distribuição para o cálculo da taxas colisionais de reação. Na realidade estaremos utilizando distribuições maxwellianas locais, (Bittencourt J. A., 1995). No apêndice D, discutimos a validade da utilização da distribuição de Maxwell para o cálculo das contantes de taxa durante a existência do pulso elétrico.

Se considerarmos que tanto as partículas alvo como as projéteis possam ser descritas por distribuições de Maxwell, a forma geral da taxa de reação será dada pela Eq.(2.39). Para uma distribuição de velocidades de Maxwell, quando as partículas projeteis possuem uma massa muito menor do que a massa das partículas alvo, a constante de taxa para um determinado processo é escrita na seguinte forma

$$r = \langle \sigma(v_e) v_e \rangle = \frac{1}{n_e} \int_0^{\infty} \sigma(v_e) v_e f(v_e) d^3v = 4\pi \left(\frac{m_e}{2\pi k_B T_e} \right)^{\frac{3}{2}} \int_0^{\infty} v_e^3 \sigma(v_e) e^{-\frac{m_e v_e^2}{2k_B T_e}} dv_e, \quad (3.27)$$

onde os limites de integração compreendem todos os possíveis valores da velocidade da partícula projétil. Contudo, sabemos que estes dois limites são inatingíveis. Portanto, vamos substituí-los por algum valor mínimo e máximo de velocidades. Este valores são escolhidos de maneira a não alterar significativamente o resultado da integral para a constante de taxa de reação. A Eq.(3.27) será escrita como

$$\langle \sigma(v_e) v_e \rangle = 4\pi \left(\frac{m_e}{2\pi k_B T_e} \right)^{\frac{3}{2}} \int_{v_{min}}^{v_{max}} v_e^3 \sigma(v_e) e^{-\frac{m_e v_e^2}{2k_B T_e}} dv_e \quad (3.28)$$

Geralmente as seções de choque encontradas na literatura são expressas em termos das energia relativas das partículas que participam do processo colisional ao invés de suas velocidades relativas, de modo que é mais conveniente rescrever a Eq.(3.28) em termos de energia. Para isto basta fazer $v_e = \sqrt{2E_c / m_e}$, e a Eq.(3.28) se transforma

$$\langle \sigma(v_e) v_e \rangle = \frac{1}{\sqrt{\pi m_e}} \left(\frac{2}{k_B T_e} \right)^{\frac{3}{2}} \int_{E_{min}}^{E_{max}} E \sigma(E) e^{-\frac{E}{k_B T_e}} dE \quad (3.29)$$

Para tornar a Eq.(3.28) adequada para o cálculo vamos fazer, $u = E/k_B T_e$, além de expressarmos a temperatura eletrônica em elétron-volt. A expressão obtida após substituirmos os valores numéricos da carga e da massa do elétron é

$$\langle \sigma(v_e) v_e \rangle = 6.692 \times 10^7 \sqrt{T_e} \int_{u_{min}}^{u_{max}} u \sigma(u) e^{-u} du, \quad (3.30)$$

onde a temperatura dos elétrons é expressa em (eV) e a constante de taxa de reação em cm^3/s . Esta expressão será utilizada para a integração numérica, sendo este cálculo realizado com o uso da regra de Simpson, e um interpolador de Lagrange, $L_i(x)$, para obter uma curva contínua por partes.

A exatidão dos resultados obtidos pelos métodos numéricos foi verificada pelo procedimento descrito a seguir. Aproximamos a seção de choque de excitação de uma determinada transição do mercúrio, por uma função degrau deslocada para o ponto $E = 4.9 eV$ com a corresponde seção de choque de $\sigma_0 = 7.9 \times 10^{-16} cm^2$, sendo esta aproximação bem conhecida, (Cherrington B. E., 1980), Fig. (3.3) que mostra o comportamento desta seção de choque. Utilizando a seção de choque mostrada na Fig.(3.3), a constante de taxa de reação do processo pode ser resolvida analiticamente resultando na seguinte expressão:

$$r = 2.322 \times 10^{-9} \sqrt{T_e} \left(1 + \frac{4.9}{T_e} \right) e^{-\frac{4.9}{T_e}} \quad (3.31)$$

Considerando um comportamento da seção de choque como uma função do tipo degrau, como mostrado na Fig. (3.3), para uma transição eletrônica do átomo de Hg, podemos, com o uso da Eq. (3.30),

Figura 3.3 Seção de choque de excitação do nível $H_g \ 6^1S_0 \rightarrow 6^3P_1$ por impacto eletrônico.

calcular a constante de taxa e compará-la com o resultado gerado através a utilização da Eq. (3.31), e efetuar os ajustes necessários no algoritmo de integração. Com esse ajuste, a nossa concordância foi melhor que 0.1% e assim assumimos este procedimento válido para os demais cálculos das constante de taxa.

Os gráficos que apresentaremos a seguir serão utilizados para a descrição do pulso de descarga. As constantes de taxa apresentadas são aquelas relacionadas com os processos discutidos na Sec.(3.1). Calculamos todas as constantes de taxa segundo o esquema acima apresentado, para os valores da temperatura dos elétrons, de interesse para o nossos problema.

A constante de taxa para o processo superelástico entre os átomos do estado metaestável do hélio para o estado fundamental foi obtida utilizando o princípio do balanço detalhado, (Michell A. C. G. e Zemanski M. Z., 1961). Desta forma. obtemos a seção de choque para o processo superelástico segundo a expressão

$$\sigma_{He}^{Sup}(u) = \frac{g_2}{g_1} \frac{u + E_{21}}{u} \sigma_{He}^{Exc}(u + E_{21}) \quad (3.32)$$

onde g_2 e g_1 são os pesos estatísticos dos níveis 2 e 1, respectivamente, e E_{21} é o intervalo de energia entre os estados. A constante de taxa para transferência de momento linear entre os elétrons e os átomos de hélio neutro é calculado segundo a expressão, para T_e em eV, (Fugol I. Y. et al., 1971),

$$r_{He}^{momem} = 2.93 \times 10^7 \left(\frac{P(torr)}{T_g(eV)} \right) T_e^{\frac{1}{2}} \quad (3.33)$$

Na tabela abaixo apresentamos a relação das constantes de taxa para as reações de impacto eletrônico utilizada no modelo além da referência da seção de choque

Fig.	Constante de taxa para o processo	Referência
3.4	Transferência de momento linear	Crompton R. W. et al., 1970
3.5	Excitação do estado metaestável	Schulz G. J. e Fox R. E., 1957
3.6	De-excitação superelástica do estado metaestável.	-----
3.7	Ionização a partir do estado fundamental	Montage R. G. et al., 1984
3.8	Ionização a partir do estado metaestável	Long D. R. e Geballe R., 1970

Tabela 3.2. Constantes de taxa para as reações de impacto eletrônico que utilizamos no modelo

Figura(3.4) Constante de taxa para a reação de transferência de momento linear

Figura (3.5) Constante de taxa da reação de excitação do estado metaestável

Figura (3.6) Constante de taxa de reação para a de-excitação super-elástica do estado metaestável.

Figura (3.7) Constante de taxa de reação para ionização do hélio do estado fundamental

Figura (3.8) Constante de taxa de reação para a ionização dos átomos no estado metaestável

3.3 Sistema de Equações para o Modelo Zero Dimensional

De posse das equações para o modelo, Eqs.(2.65) a (2.73) para a descrição do problema em questão (descrição da evolução espacial e temporal do plasma produzido pela descarga capacitiva), em conjunto com as constantes de taxa apresentadas na Sec.(3.2), o próximo passo será a solução deste sistema de equações. Como já mencionamos, neste trabalho analisaremos o problema para um tubo de descarga de geometria cilíndrica com seção transversal circular de raio $\rho = a$, e altura $z = L$, sendo que a altura do cilindro é muito maior do que o raio. Por este motivo, não consideraremos variações axiais, isto é, ao longo do eixo de cilindro, sendo portanto grandezas como a densidade e temperatura funções somente das variáveis independentes (ρ, t) . Como primeiro passo para a solução do problema deveremos ser capazes de estabelecer as condições de contorno e condições iniciais. Começaremos com as condições de contorno.

Condições de Contorno.

Com o intuito de resolvermos as equações para o transporte será necessário o estabelecimento das condições de contorno para o problema. Iniciaremos nossa discussão com as condições de contorno a serem satisfeitas para a equação para o transporte de partículas.

Transporte de partículas

Segundo a geometria do problema é imediato que:

$$\left(\frac{\partial n_i}{\partial \rho} \right)_{\rho=0} = 0, \quad (3.34)$$

onde n_i representa a densidade de qualquer tipo de partícula, (devido a simetria cilíndrica do problema). Devemos encontrar a condição de contorno a ser satisfeita pelas partículas para $\rho = a$, sendo que para isto dividiremos as partículas em átomos neutros, átomos em estados metaestáveis e partículas carregadas.

1. **Átomos neutros:** A densidade na parede é especificada pela condição de fluxo nulo.
2. **Átomos em estados metaestáveis:** A densidade é fixada pelo esquema apresentado pelas Eqs.(3.25).
3. **Átomos ionizados e elétrons:** Como eles se recombina na parede dielétrica, (a parede dielétrica se

comporta como uma parede catalisadora perfeita), temos que a densidade de partículas carregadas é nula nas paredes do tubo de descarga. Embora exista o problema da bainha de plasma na região adjacente a parede do tubo de descarga desprezaremos seu efeito.

Transporte de energia.

Para o transporte de energia as seguinte condições de contorno devem ser satisfeitas pelos campos de temperatura dos elétrons e de temperatura do gás.

Para a região central:

$$\left. \frac{\partial T_e}{\partial \rho} \right|_{\rho=0} = 0, \quad \left. \frac{\partial T_g}{\partial \rho} \right|_{\rho=0} = 0 \quad (3.35)$$

Para a região da parede:

$$T_e|_{\rho=a} = T_{parede}, \quad T_g|_{\rho=a} = T_{parede} \quad (3.36)$$

O Modelo Zero Dimensional

Neste ponto é instrutivo recordarmos que em muitos experimentos que utilizam aparatos experimentais semelhantes ao descrito neste capítulo, para a produção de descargas elétricas, as determinações experimentais da densidade e temperatura eletrônicas não resolvem a evolução espacial destas grandezas, resolvendo somente a evolução temporal. Tendo este fato em mente podemos, como uma primeira abordagem em direção a solução do problema, resolver o sistema de equações de transporte, Eqs.(2.65) a (2.73), cujo valor médio das grandezas foi calculado sobre a seção transversal do tubo. Com esta abordagem, que é denominada modelo zero dimensional, haverá grande redução de esforços na solução do problema e ao mesmo tempo obter a evolução temporal do sistema, sendo que muito das propriedades físicas do problema poderão ser avaliadas não somente em relação a sua consistência, como também quanto a comparação com resultados experimentais disponíveis na literatura. Definiremos os valores médios das grandezas segundo a definição:

$$\bar{n}_i(t) = \frac{1}{\pi a^2} \int n_i(\rho, t) ds = \frac{2}{a^2} \int_0^a n_i(\rho, t) \rho d\rho, \quad (3.37)$$

para a densidade de partículas, e

$$\bar{T}_e(t) = \frac{2}{a^2} \int_0^a T_e(\rho, t) \rho d\rho, \quad (3.38)$$

para a temperatura eletrônica, e de maneira semelhante para as demais grandezas que caracterizam a cinética do plasma. Vamos então tomar esta média sobre as equações de conservação.

Equações para o balanço de partículas.

i. *Elétrons.* Utilizando a Eq.(2.69) e considerando os processos de criação e de destruição dos elétrons, conforme formulado na Sec.3.1, podemos escrever a seguinte equação:

$$\begin{aligned} \frac{\partial n_e}{\partial t} = & -\nabla \cdot \bar{\Gamma}_e + n_e [He] r_{He,1 \rightarrow 3}^I + n_e [He_m] r_{He,2 \rightarrow 3}^I + [He_m] [He_m] r_{He}^P + \\ & -n_e^2 [He^+] r_{He,3 \rightarrow 2}^{RC} - n_e [He^+] r_{He,2 \rightarrow 3}^{RR} \end{aligned} \quad (3.39)$$

A expressão para o fluxo dos elétrons é: $\bar{\Gamma}_e = -D_{He}^A \nabla n_e - D_{He}^T (\nabla T_e + \nabla T_g) - n_e \mu_e \bar{E}_0$, onde μ_e é a mobilidade eletrônica, e $\bar{E}_0(\rho, t)$, é o campo elétrico externo que existe somente durante o pulso de corrente, atuando na direção longitudinal ao tubo de descarga. Decorre das equações de Maxwell para o nosso sistema que: $\nabla \cdot \bar{J} = 0$. Mas pela, lei de Ohm, temos que $\nabla \cdot \bar{J} = \nabla \cdot \sigma \bar{E} = \nabla \cdot n_e \mu_e \bar{E}_0 = 0$.

Tomando a média da Eq.(3.39),

$$\frac{2}{a^2} \int_0^a \frac{\partial n_e}{\partial t} \rho d\rho = -\frac{2}{a^2} \int_0^a \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \rho \Gamma_e \cdot \rho d\rho + \frac{2}{a^2} \int_0^a R_e \rho d\rho$$

a equação resultante poderá ser escrita, considerando que para $\rho \rightarrow a$,

$$\left| \frac{\nabla n_e}{n_e} \right| \gg \left| \frac{\nabla T_e}{T_e} \right|, \left| \frac{\nabla T_g}{T_g} \right|,$$

¹na seguinte forma aproximada:

¹**Justificativa para a aproximação acima.** Durante o período do pulso de descarga, onde T_e é elevada, o fluxo de elétrons na direção radial devido a difusão ambipolar e termo-difusão, conforme já discutido, é desprezível. Desta forma, deveremos verificar a validade da aproximação somente durante o período da pós-luminescência. Tendo em vista que estamos analisando um tubo de descarga de pequeno diâmetro, os gradientes das temperaturas tornam-se pequenos quando comparados com o gradiente da densidade. A validade da hipótese do gradiente relativo da temperatura dos elétrons ser pequeno em relação ao gradiente relativo da densidade é discutida por (Golant V. E. et al., 1980). Adicionalmente podemos verificar a validade desta hipótese observando a Fig. (6.20) deste trabalho. A validade da hipótese sobre o gradiente relativo da temperatura do gás ser muito menor que o gradiente relativo da densidade de elétrons pode ser verificada com a auxílio da Fig. (18) da referência (Kushner M. J. e Warner B., 1983).

$$\begin{aligned} \frac{d\bar{n}_e}{dt} = & -\frac{\bar{D}_{He}^A}{\Lambda^2} \bar{n}_e + \bar{n}_e [\bar{He}] r_{He1 \rightarrow 3}^I + \bar{n}_e [\bar{He}_m] r_{He2 \rightarrow 3}^I + [\bar{He}_m] [\bar{He}_m] r_{He}^P + \\ & -\bar{n}_e^2 [\bar{He}^+] r_{He3 \rightarrow 2}^{RC} - \bar{n}_e [\bar{He}^+] r_{He2 \rightarrow 3}^{RR} \end{aligned} \quad (3.40)$$

onde o primeiro termo do lado direito da Eq.(3.40) considera a variação da densidade eletrônica devido a difusão ambipolar, o segundo termo considera a ionização dos átomos de hélio no estado fundamental por impacto eletrônico direto, o terceiro termo representa a ionização dos átomos no estado metaestáveis por impacto eletrônico, o quarto termo considera os elétrons gerados devido a ionização Penning, e os quinto e sexto termos referem-se aos processos de recombinação colisional e radiativa, respectivamente.

ii. Íons

De forma análoga a Eq.(3.40), escreveremos a seguinte equação para os íons

$$\frac{d}{dt} [\bar{He}^+] = -\frac{\bar{D}_{He}^A}{\Lambda^2} [\bar{He}^+] + \bar{R}_{He^+} \quad (3.41)$$

onde o termo $\bar{R}_{He^+}$ devido as colisões inelásticas é idêntico ao da Eq.(3.40)

iii. Metaestável

A equação que descreve o comportamento temporal dos átomos no estado metaestável do hélio é obtida seguindo-se o mesmo procedimento utilizado na obtenção da Eq.(3.40).

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} [\bar{He}_m] = & -\beta \frac{\bar{D}_{He}^m}{\Lambda^2} [\bar{He}_m] + \gamma \frac{\bar{D}_{He}^A}{\Lambda^2} [\bar{He}^+] + \bar{n}_e [\bar{He}] r_{He1 \rightarrow 2}^E + (1-\delta) \bar{n}_e^2 [\bar{He}^+] r_{He3 \rightarrow 2}^{RC} \\ & + (1-\delta) \bar{n}_e [\bar{He}^+] r_{He3 \rightarrow 2}^{RR} - \bar{n}_e [\bar{He}_m] r_{He2 \rightarrow 3}^I - \bar{n}_e [\bar{He}_m] r_{He2 \rightarrow 1}^S \\ & - 2[\bar{He}_m] [\bar{He}_m] r_{He}^P - [\bar{He}_m] [\bar{He}_m] r_{He}^{DC} \end{aligned} \quad (3.42)$$

O primeiro e o segundo termos do lado direito consideram o fenômeno da difusão conforme discutido no apêndice A, além do processo de recombinação nas paredes. O terceiro termo representa o processo de

excitação dos átomos para o estado metaestável por impacto eletrônico direto; Os coeficientes que multiplicam os quarto e quinto termos consideram as eficiências dos processos de recombinação; O sexto termo corresponde a ionização dos átomos no estado metaestável; O sétimo termo corresponde a reação de desexcitação dos átomos do estado metaestável devido a processos superelásticos; O oitavo termo corresponde a reação Penning e o último termo diz respeito ao processo de desativação colisional que ocorre no volume do plasma.

iv. Estado Fundamental

Esta equação poderá ser escrita se observarmos a propriedade da conservação total do número de partículas.

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}[\bar{He}] &= -\frac{d}{dt}[\bar{He}^+] - \frac{d}{dt}[\bar{He}_m] \\ &= (1-\gamma)\frac{D_{He}^A}{\Lambda^2}[\bar{He}^+] + \beta\frac{D_{He}^m}{\Lambda^2}[\bar{He}_m] + [\bar{He}_m][\bar{He}_m]r_{He}^P - (1-\delta)\bar{n}_e^2[\bar{He}^+]r_{He}^{RC} \\ &\quad - (1-\varepsilon)\bar{n}_e[\bar{He}^+]r_{He}^{RR} + [\bar{He}_m][\bar{He}]r_{He}^D - \bar{n}_e[\bar{He}]r_{He:1\rightarrow2}^E - \bar{n}_e[\bar{He}]r_{He:1\rightarrow3}^I + \bar{n}_e[\bar{He}_m]r_{He:2\rightarrow1}^S \end{aligned} \quad (3.43)$$

Equações para o Balanço de Energia

i. Elétrons

A equação para a temperatura eletrônica média pode ser escrita a partir a Eq.(2.71), utilizando o procedimento apresentado por (Golant V. E. et al., 1980), não considerando o efeito da bainha de plasma, como:

$$\begin{aligned} \frac{d\bar{T}_e}{dt} &= -\frac{\bar{D}_{He}^A}{\Lambda^2}\bar{T}_e - \frac{2m_e}{M_{He}}\left([\bar{He}]r_{He}^{momen} + [\bar{He}^+]r_{He}^{coulom}\right)(\bar{T}_e - \bar{T}_g) \\ &\quad - \frac{2}{3}[\bar{He}]r_{He:1\rightarrow2}^E\Delta E_{12}^{He} + \frac{2}{3}[\bar{He}_m]r_{He:2\rightarrow1}^S\Delta E_{21}^{He} + \left(\frac{2}{3}\Delta E_{He}^P - \bar{T}_e\right)[\bar{He}_m][\bar{He}_m]r_{He}^P \\ &\quad - \left(\bar{T}_e + \frac{2}{3}\Delta E_{13}^{He}\right)[\bar{He}]r_{He:1\rightarrow3}^I - \left(\bar{T}_e + \frac{2}{3}\Delta E_{23}^{He}\right)[\bar{He}_m]r_{He:2\rightarrow3}^I \\ &\quad + \left(\bar{T}_e + 0.5 \times \frac{2}{3}\Delta E_{13}^{He}\right)(\bar{n}_e r_{He}^{RC} + r_{He}^{RR})[\bar{He}^+] + \frac{2}{3en_e}\vec{J} \cdot \vec{E} \end{aligned} \quad (3.44)$$

O primeiro termo do lado direito da Eq.(3.44) considera efeito do transporte ambipolar de energia. O segundo termo, considera o efeito da transferência de energia dos elétrons para o gás devido as colisões elásticas. (Transferência de momento linear entre colisões de elétrons e átomos neutros e elétrons e íons.). O terceiro termo representa a redução na temperatura eletrônica devido ao processo de excitação eletrônica dos átomos do gás entre o nível fundamental e o estado metaestável. O quarto termo representa a elevação da temperatura eletrônica devido ao processo superelástico. O quinto termo representa a elevação da temperatura eletrônica devido a ionização Penning. Os sexto e sétimo termos são devidos ao consumo de energia eletrônica por ocasião dos processos de ionização. Os oitavo e o nono termos representam um aumento na temperatura dos elétrons devido aos processos de recombinação. O último termo representa o ganho de energia dos elétrons a partir do campo elétrico externo $(\vec{J} \cdot \vec{E})$.

II. *Partículas Neutras.* (Hipótese: $T_g \approx T_{ion}$)

Se considerarmos como principal fonte para a elevação da temperatura do gás as colisões elásticas com os elétrons, então a Eq.(2.72) para a temperatura do gás pode ser escrita como:

$$\frac{d}{dt} \bar{T}_g(t) = \frac{2}{3e} \frac{\lambda(\bar{T}_g)}{a \bar{n}_g} \left(\frac{\partial T_g}{\partial \rho} \right)_{\rho=a} + \frac{\bar{n}_e}{\bar{n}_g} \frac{2m_e}{M_g} \langle v_e^m \rangle (\bar{T}_e - \bar{T}_g) \quad (3.45)$$

Em vista da condição de simetria para a temperatura do gás temos que: $\left(\frac{\partial T_g}{\partial \rho} \right)_{\rho=0} = 0$, Eq.(3.35), que

por sua vez já foi utilizada na integração do primeiro termo do lado direito da equação acima. A condição de contorno para $\rho = a$ pode ser estimada como se a parede do tubo se comportasse como um sorvedouro de calor à temperatura constante T_p . Portanto escreveremos numa forma aproximada, a seguinte expressão para o primeiro termo do lado direito da Eq.(3.45)

$$\frac{2}{3e} \frac{\lambda(\bar{T}_g)}{a \bar{n}_g} \left(\frac{\partial T_g}{\partial \rho} \right)_{\rho=a} = - \frac{2}{3e} \frac{\lambda(\bar{T}_g)}{a \bar{n}_g} \left(\frac{\bar{T}_g - \bar{T}_p}{\Lambda} \right). \quad (3.46)$$

Desta forma, estamos admitindo que a evolução temporal da temperatura do gás terá como causa dois fatores. O primeiro é a perda de calor para as paredes. Este termo estará sempre presente. O segundo é o calor transferido pelos elétrons para os átomos do gás devido a colisões elásticas. A forma final para a temperatura do gás será

$$\frac{d}{dt} \bar{T}_g(t) = -\frac{2}{3e} \frac{\lambda(\bar{T}_g)}{a \bar{n}_g} \left(\frac{\bar{T}_g - \bar{T}_p}{\Lambda} \right)_{\rho=a} + \frac{\bar{n}_e}{\bar{n}_g} \frac{2m_e}{M_g} \langle v_e^m \rangle (\bar{T}_e - \bar{T}_g) \quad (3.47)$$

3.4 Acoplamento entre o tubo e o circuito elétrico

A distribuição longitudinal do potencial elétrico, devido a aplicação de um pulso de alta voltagem e curta duração, ao longo da coluna positiva mantida por uma descarga *dc*, tipo descarga luminosa ("glow discharge"), foi investigada experimentalmente por Breusova (Breusova L. N., 1965). Breusova verificou, que sob o regime de pulsos de alta voltagem e duração suficientemente curta para que não haja movimento dos íons em direção ao catodo, e a consequente produção de elétrons secundários devido ao bombamento de íons, existe a possibilidade de operação da descarga elétrica com valores elevados da razão E/p , onde E é o campo elétrico devido ao pulso de alta voltagem aplicado sobre a coluna positiva e p é a pressão do gás, (Willet C. S. 1974). Este fenômeno é de extrema importância para os lasers a gás operando sob regime de descargas elétricas pulsadas. É devido a este fenômeno, isto é, a operação da descarga com elevados valores de E/p , que existe a possibilidade da elevação do pico da temperatura eletrônica para intervalos de 8 à 10 eV. Estes picos da temperatura eletrônica estão bem acima dos valores da temperatura de elétrons típicos numa descarga luminosa tipo "normal glow". Portanto podemos aproximar o campo elétrico externo por $E_0(t) = \frac{V_d(t)}{l}$ onde l é distância entre os eletrodos, e V_d , a voltagem aplicada entre os eletrodos do tubo, sem considerar o efeito da queda de potencial do catodo.

Os processos microscópicos que ocorrem no interior do tubo de descarga são descritos macroscopicamente pela impedância dinâmica $R_d(t)$. Para obtermos uma expressão para $R_d(t)$,

considerando que a seção transversal do tubo de descarga seja constante e igual $\rho = a$ e o comprimento do tubo L , a resistência instantânea do tubo de descarga elétrica será dada por

$$R_d(t) = \frac{1}{\sigma(t)} \frac{L}{a} \quad (3.48)$$

A condutividade elétrica $\sigma(t)$ do plasma se relaciona com a frequência de colisão total para a transferência de momento linear dos elétrons com as partículas do gás, através da seguinte expressão,

$$\sigma(t) = \frac{n_e(t)e^2}{m_e \langle v_e^m(t) \rangle} \quad (3.49)$$

Circuito elétrico.

Para verificação do modelo zero dimensional proposto para a descrição do comportamento cinético do gás ionizado, utilizaremos o seguinte circuito. O circuito elétrico modulador está representado na Fig.(3.9). A chave *Ch.* fecha-se para um instante de tempo t_0 e abre-se no instante de tempo t_f quando a corrente elétrica mudar de sentido, mecanismo similar ao funcionamento de um diodo ou de uma thyatron. Desta forma poderemos desconectar a fonte de energia do tubo de descarga simulando um dispositivo eletrônico de chaveamento, quando a corrente elétrica passar pelo zero. Neste instante termina o período de descarga do pulso e inicia-se o período da pós-luminescência.

Figura (3.9). Desenho esquemático do circuito modulador tipo linha, (Glasoe G. N. e Lebacqz J. V., 1948), e do tubo de descarga

Como existem dois componentes que armazenam energia serão necessários duas variáveis de estado, (Desoer C. A. e Kuh E. S., 1969) para a descrição do nível de excitação elétrica do circuito. Serão elas: a voltagem V_c sob os terminais do capacitor, e a corrente i_L que circula pelo indutor. Uma vez tendo acoplado as equações para o balanço de energia e de partículas com as equações do circuito modulador, o sistema final assume a seguinte a forma:

$$\frac{dV_c}{dt} = -\frac{i_L}{C} \quad (3.50)$$

$$\frac{di_L}{dt} = -\frac{R_c + R_d(t)}{L_c} i_L + \frac{1}{L_c} V_c \quad (3.51)$$

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}[\bar{H}e] &= -\frac{d}{dt}[\bar{H}e^+] - \frac{d}{dt}[\bar{H}e_m] \\ &= (1-\gamma)\frac{D_{He}^A}{\Lambda^2}[\bar{H}e^+] + \beta\frac{D_{He}^m}{\Lambda^2}[\bar{H}e_m] + [\bar{H}e_m][\bar{H}e_m]r_{He}^P - (1-\delta)\bar{n}_e^2[\bar{H}e^+]r_{He}^{RC} \\ &\quad - (1-\varepsilon)\bar{n}_e[\bar{H}e^+]r_{He}^{RR} + [\bar{H}e_m][\bar{H}e]r_{He}^D - \bar{n}_e[\bar{H}e]r_{He:1\rightarrow2}^E - \bar{n}_e[\bar{H}e_m]r_{He:2\rightarrow3}^I + \bar{n}_e[\bar{H}e_m]r_{He:2\rightarrow1}^S \end{aligned} \quad (3.52)$$

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}[\bar{H}e_m] &= \bar{n}_e[\bar{H}e]r_{He:1\rightarrow2}^E + (1-\delta)\bar{n}_e^2[\bar{H}e^+]r_{He:3\rightarrow2}^{RC} + (1-\delta)\bar{n}_e[\bar{H}e^+]r_{He:3\rightarrow2}^{RR} - \bar{n}_e[\bar{H}e_m]r_{He:2\rightarrow3}^I \\ &\quad - \bar{n}_e[\bar{H}e_m]r_{He:2\rightarrow3}^I - \bar{n}_e[\bar{H}e_m]r_{He:2\rightarrow1}^S - 2[\bar{H}e_m][\bar{H}e_m]r^P - [\bar{H}e_m][\bar{H}e]r^{DC} \end{aligned} \quad (3.53)$$

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}[\bar{H}e^+] &= -\frac{D_{He}^A}{\Lambda^2}\bar{n}_e + \bar{n}_e[\bar{H}e]r_{He:1\rightarrow3}^I + \bar{n}_e[\bar{H}e_m]r_{He:2\rightarrow3}^I \\ &\quad + [\bar{H}e_m][\bar{H}e_m]r^P - \bar{n}_e^2[\bar{H}e^+]r_{He:3\rightarrow2}^{RC} - \bar{n}_e[\bar{H}e^+]r_{He:3\rightarrow2}^{RR} \end{aligned} \quad (3.54)$$

$$\begin{aligned} \frac{d\bar{n}_e}{dt} &= -\frac{D_{He}^A}{\Lambda^2}\bar{n}_e + \bar{n}_e[\bar{H}e]r_{He:1\rightarrow3}^I + \bar{n}_e[\bar{H}e_m]r_{He:2\rightarrow3}^I \\ &\quad + [\bar{H}e_m][\bar{H}e_m]r^P - \bar{n}_e^2[\bar{H}e^+]r_{He:3\rightarrow2}^{RC} - \bar{n}_e[\bar{H}e^+]r_{He:3\rightarrow2}^{RR} \end{aligned} \quad (3.55)$$

$$\frac{d}{dt}\bar{T}_g(t) = -\frac{2}{3e}\frac{\lambda(\bar{T}_g)}{\bar{n}_g}\left(\frac{\bar{T}_g - \bar{T}_p}{\Lambda}\right)_{p=a} + \frac{\bar{n}_e}{\bar{n}_g}\frac{2m_e}{M_g} <v_e^m>(\bar{T}_e - \bar{T}_g) \quad (3.56)$$

$$\begin{aligned}
\frac{d\bar{T}_e}{dt} = & -\frac{D_{He}^A}{\Lambda^2} T_e - \frac{2m_e}{M_{He}} \left([\bar{He}] r_{He}^{momen} + [\bar{He}^+] r_{He}^{coulom} \right) (\bar{T}_e - \bar{T}_g) \\
& - \frac{2}{3} [\bar{He}] r_{He:1 \rightarrow 2}^E \Delta E_{12}^{He} + \frac{2}{3} [\bar{He}_m] r_{He:2 \rightarrow 1}^S \Delta E_{21}^{He} + \left(\frac{2}{3} \Delta E_{He}^P - \bar{T}_e \right) [\bar{He}_m] [\bar{He}_m] r_{He}^P \\
& - \left(\bar{T}_e + \frac{2}{3} \Delta E_{13}^{He} \right) [\bar{He}] r_{He:1 \rightarrow 3}^I - \left(\bar{T}_e + \frac{2}{3} \Delta E_{23}^{He} \right) [\bar{He}_m] r_{He:2 \rightarrow 3}^I \\
& + \left(\bar{T}_e + 0.5 \times \frac{2}{3} \Delta E_{13}^{He} \right) \left(\bar{n}_e r_{He}^{RC} + r_{He}^{RR} \right) [\bar{He}^+] + 1.477 \times 10^{14} [\bar{He}] r_{He}^{mom} \left[\frac{i(t)}{A\phi \times \bar{n}_e} \right]^2
\end{aligned} \tag{3.57}$$

$\rightarrow \frac{2}{3} \frac{ne}{e^3}$

Acreditamos que este sistema constituído de oito equações diferenciais, não lineares, de primeira ordem, seja suficientemente exato para descrever a evolução temporal das espécies e como consequência o comportamento macroscópico do plasma. Os parâmetros utilizados no modelo estão resumidos da Tab.(3.3). Estes parâmetros foram selecionados da referência (Kushner M. J. e Culick F. E. C., 1980) em vista de podermos comparar os resultados gerados pelo nosso modelo.

1.	Temperatura do tubo (T_g)	400°C
2.	Pressão de hélio	5.0 Torr
3.	Comprimento do tubo espaçamento entre os eletrodos (L)	65 cm
4.	Raio do tubo (a)	0.5 cm
5.	Potencial de carregamento (V_o)	10.0 kV
6.	Resistência do circuito (R)	0.8 Ω
7.	Indutância do circuito (L_c)	0.5 μ H
8.	Capacitância da descarga (C)	10 nF

Tabela 3.3 Parâmetros padrão para a simulação (Kushner M. J. e Culick F. E. C., 1980).

Condições iniciais

Normalmente aparatos deste tipo operam não de modo único pulso, mas com uma taxa de repetição da ordem de $f = 5kHz$. Este fato indica a possibilidade de um esquema tipo auto-consistência ou a existência de um regime quase estacionário. As condições ao final de um determinado pulso, isto é, ao final do pós-luminescência, serão utilizadas como condições iniciais para o pulso seguinte. De modo análogo, as condições iniciais utilizadas deverão reproduzir as mesma condições da pós-luminescência que existiam antes da aplicação do pulso seguinte. Desta forma, as equações que simulam o sistema

físico, são resolvidas numericamente, de forma iterativa, até atingirmos o esquema de auto-consistência descrito acima (erro $< 10^{-3}$). Os resultados apresentados foram registrados após o sistema ter atingido a auto consistência.

O problema que surge imediatamente é a questão do primeiro pulso, pois antes dele não havia gás ionizado. A utilização da equação de Saha não é correta pois os plasmas e gases ionizados produzidos em laboratório estão sujeitos aos efeitos da radiação de fundo (raios cósmicos). Mesmo utilizando o valor estimado para a densidade devido a radiação de fundo, 10^3 elétrons cm^{-3} o tempo computacional gasto para simular a ruptura foi excessivamente longo. Utilizamos uma densidade inicial da ordem de 10^7 elétrons cm^{-3} que embora tenha necessitado um longo tempo de computação, este não foi proibitivo. Após o primeiro pulso o sistema foi resolvido de modo iterativo (tipicamente 10 vezes) e então os resultados foram registrados.

3.5 Resultados

Nas Figs.(3.10) a (3.14) apresentamos a evolução temporal das densidades de partículas e da temperatura dos elétrons além das formas temporais para o pulso de corrente e do pulso de voltagem. Estes resultados foram obtidos pela solução do sistema de Eqs. (3.50) a (3.57) utilizando as constantes de taxa discutidas na Sec.(3.2) e os parâmetros da Tabela (3.3). Os resultados são fruto do critério de auto-consistência descrito anteriormente. Na Fig.(3.10) apresentamos a evolução temporal das espécies consideradas no modelo. A Fig. (3.11) mostra a variação de temperatura eletrônica durante todo o ciclo. Estes valores foram comparados com os valores apresentados por (Kushner M. J. e Culick F. E. C., 1980), sendo encontrado uma concordância geral muito boa, conforme podemos verificar através da comparação dos gráficos. Nas Figs. (3.12a) e (3.12b) mostramos as curvas de corrente e voltagem geradas pelas simulações de (Kushner M. J. e Culick F. E. C., 1980) e às geradas pelo nosso modelo. Estas curvas de voltagem e corrente são referentes a somente o primeiro pulso onde o gás estava não ionizado. Portanto estas curvas descrevem a ruptura elétrica do gás, conforme demonstrado pelo patamar na curva de voltagem ao longo do tubo.

FIG. 5. Density of electrons, helium ions, and helium metastables, and electron temperature for a discharge and afterglow in 5.0 Torr of helium. Note the superelastic electron heating.

Figura (3.10a). Evolução temporal das espécies no plasma de hélio puro e da temperatura eletrônica. (Kushner M. J. e Culick F. E. C., 1980).

Figura (3.10b). Evolução temporal das espécies no plasma de hélio puro.

Figura (3.11) Evolução temporal da temperatura dos elétrons. Este resultado foi obtido já no esquema de auto-consistência.

FIG. 4. Computed voltage and current for a discharge in 5.0 Torr of helium with the parameters in Table II. ($V_0 = 13$ kV). Peak current is 675 A and FWHM is 165 ns. Typical experimental values are 650–700 A and 150–175 ns.

Figura (3.12a) Voltagem e corrente no tubo de descarga em função do tempo (Kushner M. J. e Culick F. E. C., 1980).

Figura (3.12b) Voltagem e corrente no tubo de descarga em função do tempo.

3.6 Conclusão do Capítulo

Neste capítulo verificamos que o modelo utilizado para a descrição do pulso elétrico num tubo de descarga, segundo a teoria de *n-fluidos*, sob a aproximação zero dimensional, descreveu de forma satisfatória a evolução temporal das espécies que compõem o plasma produzido pelo pulso de descarga. Em outras palavras: neste capítulo, resolvemos numericamente o conjunto de equações de conservação, sob a aproximação zero dimensional. A solução foi satisfatória, pois o modelo foi capaz de descrever a ruptura do gás, o pulso de alta voltagem e o período de pós-luminescência.

Capítulo 4

Solução para o Pulso, ação Laser e Pós-luminescência na Descarga em Hélio e Vapor de Cobre. Modelo Zero Dimensional

Neste capítulo apresentamos um modelo cinético para a descrição do comportamento temporal do plasma produzido por uma descarga elétrica em hélio e vapor de cobre. Com base nos resultados obtidos no Cap.3 para o problema do pulso em hélio puro, que servirá de balizamento para as demais simulações, resolveremos um problema mais elaborado para as seguintes condições: temperatura da parede $T_{parede} = 1450^{\circ}C$, e pressão de equilíbrio de $P_{eq} = 9Torr$. A este novo sistema é incorporado um outro tipo de circuito modulador, comumente encontrado na literatura no caso do laser a vapor de cobre. Ao modelo do hélio puro é acrescido o vapor de cobre. Utilizamos neste capítulo um modelo a nove níveis para o cobre de maneira que tanto a transição laser em $5106\text{\AA}$ como a $5782\text{\AA}$ são consideradas. A partir deste modelo muitos resultados experimentais são explicados, apesar de utilizarmos grandezas médias, calculadas sobre a seção transversal do tubo. Iniciamos o capítulo com uma breve discussão dos princípios básicos da emissão laser.

4.1 A Emissão Laser (Koechner W., 1976), (Svelto O., 1982)

O efeito laser é fundamentado em três processos básicos que ocorrem devido à interação da radiação eletromagnética com um meio material. Estes processos são conhecidos por; emissão espontânea, absorção e emissão estimulada da radiação eletromagnética pelo meio material.

Emissão espontânea de radiação.

Vamos admitir um meio material, com dois estados atômicos E_2 e E_1 ($E_2 > E_1$), e sejam N_2 e N_1 as densidades de átomos deste meio material com energias E_2 e E_1 , respectivamente. A densidade de átomos de um determinado nível de energia é denominada população do nível. Tendo em vista que $E_2 > E_1$, haverá uma probabilidade finita que átomos no nível 2 decaiam para o nível 1, emitindo fótons de frequência ν proporcional a diferença de energia entre os níveis, ($\Delta E = E_2 - E_1$). A taxa de emissão espontânea será expressa por

$$\frac{dN_2}{dt} = -AN_2 \quad (4.1)$$

A constante proporcionalidade A é a probabilidade, por unidade de tempo, de um átomo que inicialmente encontrava-se no nível 2 decaia para o nível 1, devido ao processo de emissão espontânea. O tempo de vida do nível é definido por: $\tau = 1/A$.

Absorção de radiação.

Consideremos a interação de uma onda eletromagnética quase monocromática na frequência ν , associada a um fluxo de fótons $I(\nu)$, com o meio material em questão. Nesta situação haverá uma probabilidade finita que átomos, do meio material que estavam inicialmente no nível 1, absorvam fótons na frequência ν proporcional à diferença de energia entre os níveis e sofram transições para o nível 2. A taxa de redução da população do nível 1 devido à absorção será proporcional ao fluxo de fótons associado ao campo de radiação, e a população do nível, isto é,

$$\frac{dN_1}{dt} = -\sigma_{12}I(\nu)N_1 \quad (4.2)$$

onde σ_{12} é uma grandeza denominada seção de choque de absorção. O produto $\sigma_{12}I(\nu)$ é a probabilidade, por unidade de tempo, de um átomo que inicialmente encontrava-se no nível 1, absorva um fóton, e sofra uma transição do nível 1 para o nível 2.

Emissão estimulada de radiação.

Por ocasião da interação do campo de radiação, quase monocromático na frequência ν , com o meio material haverá também, uma probabilidade finita, dos átomos que populam o nível 2, decaírem para o

nível 1, estimulados pelo campo de radiação. Tendo em vista que este processo é estimulado pelo fluxo de fótons do campo de radiação, cada fóton emitido devido a emissão estimulada terá a mesma direção do fóton que produziu a emissão estimulada, além da mesma fase. A taxa na qual a população do nível 2 é reduzida devido a este processo será, de modo semelhante ao processo de absorção, proporcional a população do nível e a intensidade do campo de radiação, caracterizado pelo fluxo de fótons $I(\nu)$, isto é,

$$\frac{dN_2}{dt} = -\sigma_{21}I(\nu)N_2 \quad (4.3)$$

onde σ_{21} é uma grandeza denominada seção de choque de emissão estimulada, e o produto $\sigma_{21}I(\nu)$ é a probabilidade, por unidade de tempo, de um átomo que estava inicialmente do nível 2, decair para o nível 1 devido ao processo de emissão estimulada.

A idéia do laser.

Cosideremos um fluxo de fótons propagando-se no meio material numa dada direção, direção z , por exemplo, conforme a Fig. (4.1),

Figura (4.1). Variação elementar no fluxo de fótons.

A variação elementar no fluxo de fótons em dz , devido aos processos de absorção e emissão estimulada de radiação pode ser escrita como

$$\frac{I(\nu, z + dz) - I(\nu, z)}{dz} = \frac{dI(\nu, z)}{dz} = \sigma_{21}I(\nu, z)N_2 - \sigma_{12}I(\nu, z)N_1. \quad (4.4)$$

Como mostrado por (Yariv A., 1985), as seções de choque de absorção e emissão estimulada se relacionam por $g_2\sigma_{21} = g_1\sigma_{12}$, onde g_2 e g_1 são pesos estatísticos dos níveis 2 e 1, respectivamente.

Além disso (Yariv A., 1985) mostrou também a relação entre a seção de choque de absorção e a

probabilidade de emissão espontânea, isto é,

$$\sigma_{21} = A \frac{\lambda^2}{8\pi} g(\nu) . \quad (4.5)$$

onde $g(\nu)$ é uma função denominada forma de linha da transição e expressa a probabilidade de que a transição ocorra no intervalo de frequências entre ν e $\nu + d\nu$, dentro da largura de linha da transição.

Com estas definições a Eq. (4.4) passa a ser escrita como

$$\frac{dI(\nu, z)}{dz} = A \frac{\lambda^2}{8\pi} g(\nu) \left(N_2 - \frac{g_2}{g_1} N_1 \right) I(\nu, z) . \quad (4.6)$$

Segundo a Eq. (4.6) podemos verificar que a condição de amplificação do fluxo de será expressa por:

$$\left(N_2 - \frac{g_2}{g_1} N_1 \right) > 0 \quad (4.7)$$

e neste caso o material será denominado meio ativo e a amplificação será devida a emissão estimulada de radiação. Caso a desigualdade acima não se verifique, o meio material se comportará como um meio absorvedor e o fluxo de fótons será atenuado. No equilíbrio termodinâmico as populações dos níveis 2 e 1 são relacionadas pela estatística de Boltzmann, isto é,

$$\frac{N_2}{N_1} = \frac{g_2}{g_1} e^{-\frac{E_2 - E_1}{k_B T}} , \quad (4.8)$$

onde k_B é a constante de Boltzmann e T é a temperatura do meio material. Podemos observar, segundo as Eqs.(4.6) a (4.8), que numa situação de equilíbrio não haverá amplificação de fótons devido a emissão estimulada de radiação. Portanto, a ação laser, isto é, a amplificação de luz por emissão estimulada de radiação, somente poderá ser obtida em situação de não equilíbrio, onde a desigualdade apresentada pela Eq.(4.7) poderá ser verificada. Em tal situação dizemos que ocorreu uma inversão de população. Podemos também inferir que será necessário a presença de uma fonte externa de energia, denominada fonte de bombeio, para popular o nível superior e produzir a inversão de população. Através de uma análise mais apurada do presente equacionamento, podemos verificar que será impossível obter a inversão de população num esquema de dois níveis. Para entendermos este fato, podemos considerar uma situação inicial onde, $N_2 < N_1$. A medida que a fonte de bombeio aumenta a população do nível 2, a população do nível 1 será reduzida. Haverá um ponto onde se verificará a igualdade $N_2 = N_1$ e os

processos de absorção e emissão estimulada se compensarão, independente de quão intensa seja a fonte de bombeio. Nesta situação o material é dito ter atingido a saturação, tornando-se transparente ao campo de radiação. A ação laser pode ser obtida em esquemas de três e quatro níveis de energia, conforme ilustrado na Fig. (4.2).

Figura (4.2). Esquema à três níveis de energia (diagrama à esquerda). Esquema à quatro níveis de energia (diagrama à direita).

No esquema à três níveis, parte da população no nível 1 sofrerá, devido a fonte de bombeio, transições para os níveis 2 e 3. Neste caso, pode-se perceber que é necessário que mais da metade da população do nível 1 seja transferida para o nível 2, de forma a se obter a inversão de população. No caso do esquema de 4 níveis, quando o tempo de decaimento do nível 1 para o nível 0 for rápido, sempre haverá inversão de população (esquema de níveis ideal).

Com o intuito de construirmos um oscilador a partir de um amplificador, devemos introduzir uma realimentação positiva ao meio amplificador. No caso dos lasers esta realimentação é obtida introduzindo o meio amplificador no interior de um ressonador óptico, formado por um par de espelhos, conforme ilustrado na Fig. (4.3)

Figura (4.3) Esquema simplificado de um oscilador laser.

Um tratamento bastante detalhado sobre os modos de oscilação em ressonadores ópticos pode ser encontrado em (Fox A. G. e Li. T., 1961).

4.2 O Átomo do Cobre e o Laser a Vapor de Cobre

Como mostrado, no diagrama de níveis de energia simplificado da Fig. (4.4), o cobre é essencialmente um sistema de três níveis de energia. Os níveis laser superiores 2P são níveis ressonantes, fortemente conectados ao estado fundamental. Os níveis laser inferiores 2D são estados metaestáveis e não são conectados opticamente ao estado fundamental por transições de dipolo elétrico.

Figura (4.4) Diagrama simplificado dos níveis de energia do cobre.

Os níveis inferiores da transição laser apresentam tempos de vida da ordem de $270\mu s$, (Tanaba Y. et al., 1992), caracterizando um esquema de transição de três níveis. Dentre as transições permitidas do multipletto $^2P \rightarrow ^2D$, duas são muito intensas, dando origem, as emissões nas linhas do verde (5106Å) e nas linhas do amarelo (5782Å). As transições entre os estados $^2D \rightarrow ^2S$ são de ordem multipolar mais alta e portanto fracamente permitidas.

Este tipo de estrutura de três níveis conduz por si só a uma eficiente produção transiente de inversão de população numa descarga elétrica de alta voltagem. O átomo de cobre apresenta a característica favorável de não possuir níveis de energia próximos ao nível laser superior dentro de um intervalo de 1 eV . Esta propriedade contribui para a eficiência pois minimiza o número de caminhos paralelos que poderiam vir a competir ocasionando uma adicional perda de energia

	Transição	$\lambda(\text{Å})$	$A(s^{-1})$
1	$4p^1\ ^2P_{\frac{1}{2}} \rightarrow 4s^1\ ^2S_{\frac{1}{2}}$	3247	134×10^7
2	$4p^1\ ^2P_{\frac{3}{2}} \rightarrow 4s^1\ ^2S_{\frac{1}{2}}$	3274	136×10^7
3	$4p^1\ ^2P_{\frac{1}{2}} \rightarrow 4s^2\ ^2D_{\frac{3}{2}}$	5782	1.66×10^6
4	$4p^1\ ^2P_{\frac{3}{2}} \rightarrow 4s^2\ ^2D_{\frac{3}{2}}$	5700	2.35×10^5
5	$4p^1\ ^2P_{\frac{3}{2}} \rightarrow 4s^2\ ^2D_{\frac{5}{2}}$	5106	1.98×10^6
6	$5s^1\ ^2S_{\frac{1}{2}} \rightarrow 4s^2\ ^2P_{\frac{1}{2}}$	7933	2.25×10^7
7	$5s^1\ ^2S_{\frac{1}{2}} \rightarrow 4s^2\ ^2P_{\frac{3}{2}}$	8093	4.59×10^7
8	$4d^1\ ^2D_{\frac{3}{2}} \rightarrow 4p^1\ ^2P_{\frac{1}{2}}$	5153	10.34×10^7
9	$4d^1\ ^2D_{\frac{5}{2}} \rightarrow 4p^1\ ^2P_{\frac{3}{2}}$	5218	12.22×10^7

Tabela 4.1. Probabilidades de transição para as transições do cobre de interesse para este trabalho.

Átomo isolado. (Não há efeito do aprisionamento de radiação). (Fu K. et al., 1995)

O Laser Cíclico.

Tendo em mente o esquema de um sistema a três níveis apresentaremos os cinco critérios que definem o laser cíclico, segundo (Walter W. T. et al., 1966).

1. O nível laser superior deve ser um nível ressonante, preferivelmente o nível mais intensamente

conectado ao nível fundamental por uma transição radiativa.

2. O nível laser inferior não deve ser conectado ao nível fundamental por um elemento de matriz de dipolo elétrico. Portanto, o nível laser inferior será um nível metaestável e a inversão de população será inerentemente transitória.

Estas duas condições são satisfeitas pela seguinte sequência de níveis de energia: nível fundamental, um nível laser inferior com mesma paridade que o nível fundamental, e um nível laser superior tendo paridade oposta. Desta forma, para uma descarga elétrica onde a aproximação de Born possa ser empregada para o cálculo dos elementos de matriz, o nível laser superior será preferivelmente excitado quando se iniciar o pulso elétrico da descarga.

3. A razão entre a probabilidade, por unidade de tempo, de uma particular transição radiativa e a probabilidade total de transição radiativa, para um determinado nível de energia, é denominado de razão de ramificação, ϕ_{nm} , isto é,

$$\phi_{nm} = \frac{A_{nm}}{\sum_{m < n} A_{nm}}, \quad (4.9)$$

onde A_{nm} é a probabilidade de transição, por unidade de tempo, devido a emissão espontânea entre os níveis $n \rightarrow m$. O fenômeno do aprisionamento da radiação ressonante da transição entre o estado fundamental, (mais populado), e o nível laser superior, favorece a razão de ramificação para a transição laser de interesse, devendo tornar a razão de ramificação para o nível laser superior aproximadamente unitária. Se a emissão espontânea para o nível laser inferior for competitiva com a emissão laser de interesse, será necessário aumentar a taxa de bombeamento para o nível laser superior e, como consequência, a eficiência do sistema será reduzida. Desse modo o nível laser superior deverá ser opticamente conectado somente ao estado fundamental e ao nível laser inferior. Os elementos de matriz de dipolo elétrico para quaisquer outras transições partindo do nível laser superior devem ser pequenos comparados com as transições radiativas de interesse. A densidade de meio ativo deve ser suficiente elevada para aprisionar a radiação ressonante de modo que $A(\text{da transição laser}) > A(\text{da radiação ressonante aprisionada})$. Além disso o estado atômico fundamental deve consistir de um único nível. Se

o nível fundamental apresentar realmente uma estrutura, os níveis devem ser poucos e pouquíssimo espaçados de modo que eles sejam suficientemente populados na temperatura de operação para aprisionar a emissão espontânea oriunda do nível laser superior.

4. O tempo de vida do nível laser superior deve ser maior do que a constante de tempo para a subida do pulso elétrico de excitação. Se o tempo de vida radiativo da transição é menor que o tempo de subida do pulso de corrente, então a emissão espontânea depopulará o nível laser superior antes que uma suficiente inversão de população seja alcançada. Em outras palavras, se o valor de A para o nível laser superior for muito curto em relação à constante de tempo da excitação, então uma inatingível densidade de inversão será necessária para adequar o ganho. A dependência entre a indutância do sistema e a potência de saída foi investigada, por (Bokhan P. A. et al., 1978), sendo um dos parâmetros importantes a ser considerado para o escalonamento do LVC.

5. O nível laser inferior deve estar num intervalo entre 6000 e 18000 cm^{-1} acima do estado fundamental. Tendo em vista que a variação de energia no processo de relaxação do nível laser inferior não é aproveitada, é importante que o nível laser inferior esteja próximo ao estado fundamental. Desta forma poderíamos estabelecer um patamar energético da ordem de 18000 cm^{-1} entre o nível laser inferior e o estado fundamental. Se uma quantidade maior de energia que esta é dissipada no processo de relaxação do nível laser inferior, a vantagem fundamental para utilização de níveis de baixa energia não seria aproveitada. Por outro lado, existe um limite inferior para o espaçamento energético entre o nível laser inferior e o estado fundamental devido à distribuição de Boltzmann para a temperatura de operação. Um valor máximo razoavelmente admissível para a população de equilíbrio do nível laser inferior pode ser estabelecido como 10% do valor total da população.

Infelizmente, poucos são os sistemas atômicos com a estrutura de níveis de energia incluindo um possível nível laser inferior com energia abaixo de 18000 cm^{-1} . Além disso, no caso dos vapores metálicos é normalmente necessário elevada temperatura para alcançar-se densidade razoável de vapor monoatômico. Exemplificando, uma temperatura média de operação de 1000°C estabelece um limite

de aproximadamente 6000 cm^{-1} para o nível laser inferior, sendo que um decréscimo no nível energético prejudicaria a eficiência e eventualmente impediria o fenômeno da inversão de população.

Laser cíclicos com estas propriedades foram demonstrados pela primeira vez por, Walter et al, para o manganês, em 1965, e para o vapor de cobre em 1966.

4.2.1 Fator de Aprisionamento da Radiação.

O fenômeno do aprisionamento da radiação em gases ionizados está relacionado com a absorção e reemissão dos fótons emitidos por um átomo e pelos seus átomos vizinhos. Este fenômeno de absorção e reemissão, depende da densidade do gás, e pode ser tão freqüente que um fóton passará a apresentar pequena chance de, por exemplo, atingir as paredes do tubo de descarga. Desta forma, um eventual escape de um fóton a partir do volume do gás ionizado, somente ocorrerá após um grande número de reabsorções e reemissões pelo meio. Sob estas condições costuma-se dizer que a radiação está aprisionada. O efeito imediato do fenômeno de aprisionamento de radiação está relacionado com o tempo de decaimento radiativo das espécies excitadas do gás ionizado. Se A_{ef} é a probabilidade efetiva, por segundo, de uma transição cujo comprimento de onda associado é λ num tubo de descarga cilíndrico de raio $r = a$, então A_{ef} esta relacionada com a probabilidade de transição A , do átomo isolado, segundo a expressão, (Holstein T., 1954)

$$A_{ef} = \frac{1.6A}{k_0 a [\pi \ln(k_0 a)]^{\frac{1}{2}}} \quad (4.10)$$

onde k_0 é o coeficiente de absorção na frequência central ν_0 da linha de absorção, sendo expresso por

$$k_0 = A \frac{\lambda_0^2}{8\pi} \left[\frac{g_3}{g_1} [Cu] - [Cu^*] \right] \frac{1}{\Delta \nu_D} \quad (4.11)$$

onde g_3 e g_2 são os pesos estatísticos, e $\Delta \nu_D$ é o alargamento Doppler, que pode ser escrito como,

$$\Delta v_D = \frac{1}{c} \sqrt{\frac{2\pi k T_g}{M_{Cu}}} \quad (4.12)$$

onde M_{Cu} é a massa do átomo de cobre, c é a velocidade de luz, e T_g é a temperatura do gás. Na Tab. (4.2) apresentamos alguns valores para $A_{ef}(s^{-1})$ nas condições típicas do LVC.

O efeito do fenômeno da aprisionamento de radiação reduz os requisitos de bombeamento para a população do nível laser superior e desta forma favorece o início da inversão de população.

Transição	$A(s^{-1})$	$A(s^{-1})$, aprisionado após 50 ns
$4p^1 2P_{\frac{1}{2}} \rightarrow 4s^1 2S_{\frac{1}{2}}$	1.34×10^8	2.87×10^4
$4p^1 2P_{\frac{3}{2}} \rightarrow 4s^1 2S_{\frac{1}{2}}$	1.36×10^8	1.41×10^4
$4p^1 2P_{\frac{1}{2}} \rightarrow 4s^2 2D_{\frac{3}{2}}$	1.66×10^6	não ocorre
$4p^1 2P_{\frac{3}{2}} \rightarrow 4s^2 2D_{\frac{3}{2}}$	2.35×10^5	não ocorre
$4p^1 2P_{\frac{3}{2}} \rightarrow 4s^2 2D_{\frac{5}{2}}$	1.98×10^6	não ocorre

Tabela 4.2. Probabilidades de transição para algumas transições do cobre de interesse para este trabalho, considerando o efeito do aprisionamento de radiação.

4.2.2 A Estrutura Hiperfina das Linhas 5106 Å e 5782 Å.

As linhas do cobre atômico apresentam uma estrutura hiperfina complexa. Esta complexidade é em parte devido ao spin nuclear do cobre e em parte a ocorrência de dois isótopos. Os dois isótopos, ^{63}Cu e ^{65}Cu , tem uma razão de abundância de 68.9% e 31.1%, respectivamente. Desta forma, a intensidade das componentes da estrutura hiperfina contribuirão para a estrutura de linha total. O spin nuclear I de ambos os isótopos é $\frac{3}{2}$ de maneira que temos tanto momento de dipolo magnético como momentos de quadrupolo elétrico. O momento angular total F de um estado atômico é dado por

$$|J - I| \leq F \leq |J + I| \quad (4.13)$$

onde J é o momento angular dos elétrons. Utilizando a Eq.(4.13) podemos verificar que os níveis de energia, $^2P_{3/2}$, $^2D_{5/2}$, e $^2D_{3/2}$ se resolvem em quatro níveis hiperfinos de energia para cada isótopo. O nível $^2P_{1/2}$ se resolve em dois níveis hiperfinos de energia para cada isótopo. As regras de seleção para as transições opticamente permitidas são dadas por

$$\Delta F = \pm 1, 0 \quad (4.14)$$

Seguindo estas regras de seleção encontramos que ocorrem 9 transições ópticas para cada isótopo na linha do $5106\text{\AA}$ e 6 transições para cada isótopo na linha de $5782\text{\AA}$. Os deslocamentos em energias $\Delta\tilde{\nu}$ de cada componente em relação ao centro de gravidade dos níveis foi calculado segundo a expressão., (Kopfermann H. et al., 1958)

$$\Delta\tilde{\nu} = \frac{AC}{2} + \frac{B(3/2)C(C+1) - 2I(I+1)J(J+1)}{4IJ(2I-1)(2J-1)} \quad (4.15)$$

onde A e B são as constantes da estrutura hiperfina dos momentos de dipolo magnético e momento de quadrupolo elétrico, sendo seus valores numéricos obtidos das referências, (Ritschl R., 1932), (Wagner S., 1955), (Fisher W., 1968), e C é dado por

$$C = F(F+1) - J(J+1) - I(I+1) \quad (4.16)$$

De posse destes valores numéricos construímos as Tabs. (4.3) a (4.10).

$^2P_{3/2}$			$A = 209.1 \text{ MHz}$	$B = -26.6 \text{ MHz}$
I	J	F	$\Delta\nu(\text{MHz})$	$\Delta\tilde{\nu}(\text{cm}^{-1})$
3/2	3/2	3	463.8	0.01546
3/2	3/2	2	-136.9	-0.004563
3/2	3/2	1	-581.7	-0.01939
3/2	3/2	0	-817.4	-0.02725

Tabela 4.3 Desvio em frequência da estrutura hiperfina do nível $^2P_{3/2}$. Isótopo ^{65}Cu

$^2D_{\frac{3}{2}}$			$A = 803.6 \text{ MHz}$	$B = 174.3 \text{ MHz}$
I	J	F	$\Delta\nu(\text{MHz})$	$\Delta\tilde{\nu}(\text{cm}^{-1})$
3/2	3/2	3	3.057,1	0.1019
3/2	3/2	2	-296,8	-0.009892
3/2	3/2	1	-2629,1	-0.08764
3/2	3/2	0	-4.096,9	-0.1365

Tabela 4.4 Desvio em frequência da estrutura hiperfina $^2D_{\frac{3}{2}}$. Isótopo ^{65}Cu

$^2P_{\frac{1}{2}}$			$A = 543.3 \text{ MHz}$	
I	J	F	$\Delta\nu(\text{MHz})$	$\Delta\tilde{\nu}(\text{cm}^{-1})$
3/2	1/2	2	407.5	0.01358
3/2	1/2	1	-679.1	-0.0264

Tabela 4.5 Desvio em frequência da estrutura hiperfina $^2P_{\frac{1}{2}}$. Isótopo ^{65}Cu

$^2D_{\frac{3}{2}}$			$A = 1983.9 \text{ MHz}$	$B = 127.2 \text{ MHz}$
I	J	F	$\Delta\nu(\text{MHz})$	$\Delta\tilde{\nu}(\text{cm}^{-1})$
3/2	3/2	3	4.495,6	0.14985
3/2	3/2	2	-1.583,3	-0.052778
3/2	3/2	1	-5.423,9	-0.18079
3/2	3/2	0	-7.280,6	-0.24268

Tabela 4.6 Desvio em frequência da estrutura hiperfina $^2D_{\frac{3}{2}}$. Isótopo ^{65}Cu

$^2P_{\frac{3}{2}}$			$A = 195.2 \text{ MHz}$	$B = -28.8 \text{ MHz}$
I	J	F	$\Delta\nu(\text{MHz})$	$\Delta\tilde{\nu}(\text{cm}^{-1})$
3/2	3/2	3	432	0.0144
3/2	3/2	2	-124.8	-0.0041599
3/2	3/2	1	-544	-0.01813
3/2	3/2	0	-768	-0.0256

Tabela 4.7 Desvio em frequência da estrutura hiperfina $^2P_{\frac{3}{2}}$. Isótopo ^{63}Cu

$^2D_{\frac{5}{2}}$			$A = 749.1 \text{ MHz}$	$B = 186.0 \text{ MHz}$
I	J	F	$\Delta\nu(\text{MHz})$	$\Delta\tilde{\nu}(\text{cm}^{-1})$
3/2	5/2	4	2.855,6	0.095187
3/2	5/2	3	-289,6	-0.009653
3/2	5/2	2	-2453.2	-0.08177
3/2	5/2	1	-3.802,6	-0.1268

Tabela 4.8 Desvio em frequência da estrutura hiperfina $^2D_{\frac{5}{2}}$. Isótopo ^{63}Cu

$^2P_{\frac{1}{2}}$			$A = 506.9 \text{ MHz}$	
I	J	F	$\Delta\nu(\text{MHz})$	$\Delta\tilde{\nu}(\text{cm}^{-1})$
3/2	1/2	2	380.2	0.01267
3/2	1/2	1	-633.6	-0.02112

Tabela 4.9 Desvio em frequência da estrutura hiperfina $^2P_{\frac{1}{2}}$. Isótopo ^{63}Cu

$^2D_{\frac{3}{2}}$			$A = 1851.0 \text{ MHz}$	$B = 137.4 \text{ MHz}$
I	J	F	$\Delta\nu(\text{MHz})$	$\Delta\tilde{\nu}(\text{cm}^{-1})$
3/2	3/2	3	4.199,1	0.1399
3/2	3/2	2	-1.491,3	-0.04971
3/2	3/2	1	-5.055,9	-0.1685
3/2	3/2	0	-6.769,5	-0.2257

Tabela 4.10. Desvio em frequência da estrutura hiperfina $^2D_{\frac{3}{2}}$. Isótopo ^{63}Cu

A partir dos valores para as frequências de transição construímos os seguintes diagramas ilustrando as transições que ocorrem nas linhas do verde e do amarelo para cada isótopo, Figs. (4.5) e (4.6).

Figura (4.5) Diagrama das transições ópticas na linha de 5106 Å para ambos os isótopos

$2P_{3/2}$	$2D_{5/2}$	^{63}Cu	$2P_{3/2}$	$2D_{5/2}$	^{65}Cu
F	F'	$\Delta\nu(\text{MHz})$	F	F'	$\Delta\nu(\text{MHz})$
3	4	-2423.6	3	4	-343.2
3	3	721.6	3	3	3010.6
3	2	2885.2	3	2	4297.4
2	3	164.8	2	3	2110.0
2	2	2328.4	2	2	4742.3
2	1	3677.8	2	1	6210.1
1	2	1909.2	1	2	4297.4
1	1	3277.8	1	1	5765.2
0	1	3067.8	0	1	5529.5

Tabela (4.11). Deslocamento em frequência das componentes hiperfinas da transição na linha de 5106 Å

Figura (4.3). Diagrama das transições ópticas na linha de 5782 Å para ambos os isótopos

$2P_{1/2}$	$2D_{3/2}$	^{63}Cu
F	F'	$\Delta\nu(\text{MHz})$
2	3	-3818.9
2	2	1871.5
2	1	5436.1
1	2	857.7
1	1	4422.3
1	0	6135.9

$2P_{1/2}$	$2D_{3/2}$	^{65}Cu
F	F'	$\Delta\nu(\text{MHz})$
2	3	-1868.1
2	2	4210.9
2	1	8051.4
1	2	3124.3
1	1	6964.8
1	0	8821.4

Tabela (4.12). Deslocamento em frequência das componentes hiperfinas da transição na linha de 5782 Å

Regras para a Intensidades relativa das transições.

As intensidade relativas, que são funções dos números quânticos, I, J e F, foram construídas segundo as regras apresentadas na (Condon E. U. e Shortley G. H., 1963). As tabelas a seguir apresentam os resultados destas regras para as intensidades das transição entre as componentes hiperfinas. Por exemplo, na primeira coluna, da Tab. (4.13), o valor de 16.7 indica que a intensidade de luz emitida na transição $^2P_{\frac{3}{2}}(F=0) \rightarrow ^2D_{\frac{5}{2}}(F'=1)$ é 16.7% da intensidade da transição $^2P_{\frac{3}{2}}(F=3) \rightarrow ^2D_{\frac{5}{2}}(F'=4)$, que é de 100%.

F'				
1	16.7	15.0	1.7	
2		35.0	19.4	1.1
3			62.2	15.6
4				100
F	0	1	2	3

Tabela (4.13). Intensidades relativas das componente hiperfinas da linha da emissão verde $^2P_{\frac{3}{2}} \rightarrow ^2D_{\frac{5}{2}}$

F'		
0	14.3	
1	35.7	7.1
2	35.7	35.7
3		100
F	1	2

Tabela (4.14). Intensidades relativas das componentes hiperfinas da linha da emissão amarelo $^2P_{\frac{1}{2}} \rightarrow ^2D_{\frac{3}{2}}$

4.2.3 Forma de Linha Total

Construímos a forma de linha total para a emissões nas linhas do verde do amarelo, utilizando o padrão "flag" para as transições, segundo as Tabs. (4.11) a (4.12) e mais regras para as intensidades relativas,

segundo as Tabs. (4.13) e (4.14). A fim de compararmos as amplitudes dos diferentes isótopos, estas foram multiplicadas pelas razões isotópicas. A forma final foi então obtida acrescentado-se o alargamento Doppler, (Yariv A., 1985),

$$\Delta\nu_D = 2\nu_0 \left(\frac{2k_B T_g}{M_{Cu} c^2} \ln 2 \right)^{\frac{1}{2}} s^{-1}, \quad (4.17)$$

para cada padrão "flag", onde ν_0 , para esta construção a frequência em relação ao centro de gravidade de cada transição. Uma expressão analítica pode ser escrita para a largura de linha total (Chimenti R., 1972) e (Tenenbaum J. et al., 1980),

$$g(\nu) = \sum_{i=1}^M a_i \frac{2(\ln 2)^{\frac{1}{2}}}{\pi^{\frac{1}{2}} \Delta\nu_D} e^{-\frac{\ln 2}{\Delta\nu_D^2} (\nu - (\nu_c - \nu_i))^2}, \quad (4.18)$$

onde a soma vai até 18 para o caso da linha do verde e até 12 para o caso da linha do amarelo. O fator a_i considera efeito das diferentes intensidades e ν_c é a frequência de transição em relação ao centro de gravidade da transição cuja frequência é ν_0 .

4.3 Modelo Óptico

No modelo que construímos para avaliarmos a emissão laser utilizamos três procedimentos para a determinação das seções de choque de emissão estimulada. Construiremos a equação para o fluxo de fótons pela discussão sobre as perdas no ressonador e perdas distribuídas. O efeito da amplificação da emissão estimulada (ASE) será considerado no capítulo seguinte. O fluxo de fótons que utilizaremos é o fluxo de fótons cuja média foi tomada ao longo do comprimento do ressonador.

Mecanismos de perdas consideradas.

1. Perdas devido a transmissão pelo espelho de saída cuja refletividade $R_2 < 1$. O espelho de fundo é considerado totalmente refletor $R_1 = 1$. No caso de um ressonador plano paralelo a seguinte expressão é utilizada para o cálculo deste tipo de perda, considerando uma cavidade de comprimento l_c , (Yariv A., 1985).

$$p_c = \frac{1}{2l_c \ln \frac{1}{R_1 R_2}} \quad (4.19)$$

onde esta perda é medida em cm^{-1} .

2. Perdas parasitas e uniformemente distribuídas. (devido a reflexões imperfeitas, absorção, espalhamento e perdas devido a difração da luz). Normalmente estas perdas são da ordem de $\eta = 5\%$, (Yariv A., 1985).

$$\eta = 0.05 / l_c \quad cm^{-1}$$

Feitas estas considerações a equação para o transporte de fótons, onde tomamos a média do fluxo de fótons ao longo do eixo da cavidade, para um meio ativo de comprimento l_a , pode ser escrita como, (Yariv A., 1985):

$$\frac{1}{c} \frac{dI_v}{dt} = \sigma_{SE}(v) \Delta N \frac{l_a}{l_c} I_v - I_v \eta - p_c I_v - \frac{d\Omega}{4\pi} h\nu [Cu^*] p(v) \quad (4.20)$$

O último termo foi incluído para considerarmos o efeito da emissão espontânea, (ruído quântico), responsável pelo início da oscilação laser. O fator $\frac{d\Omega}{4\pi}$ está relacionado com a probabilidade do fóton emitido por emissão espontânea esteja com sua direção alinhada ao eixo óptico do ressonador, realimente o amplificador, e inicie a oscilação laser. $p(v)$ é uma função bastante estreita e com o pico bastante pronunciado para $v = v_0$, satisfazendo a condição de normalização

$$\int_{-\infty}^{+\infty} p(v) dv = 1.$$

A seção de choque para a emissão estimulada, $\sigma_{SE}(v)$ pode ser escrita como, (Yariv A., 1985):

$$\sigma_{SE}(v) = A \frac{\lambda^2}{8\pi} g(v) \quad cm^{-2} \quad (4.21)$$

onde A é a probabilidade, por unidade de tempo, de o fóton decair por emissão espontânea, λ , é o comprimento de onda associado a esta emissão (linha do verde ou linha do amarelo), e $g(v)$ é o perfil de linha da transição. A densidade de população de inversão é dada por

$$\Delta N = N_2 - \frac{g_2}{g_1} N_1 \quad (4.22)$$

onde N_2 , g_2 representam a densidade de átomos no nível laser superior e a degenerescência naquele nível, respectivamente, e de maneira similar, N_1 , g_1 . $g(\nu)$. Como foi discutido na Sec.(4.2) o cobre apresenta estrutura hiperfina. Um modelo detalhado para $g(\nu)$, que possibilite verificar o efeito do "hole-burning" é algo que está além do objetivo do presente trabalho, já que estamos direcionados para a cinética da descarga. Necessitamos, porém, de um modelo que descreva pelo menos de modo aproximado a expressão para $g(\nu)$. Utilizamos três expressões ou valores numéricos para a estimação de $g(\nu)$.

1. Alargamento de linha devido ao efeito Doppler.

Segundo (Yariv A., 1985), utilizamos a seguinte expressão para $g(\nu)$,

$$g(\nu) = \frac{2(\ln 2)^{\frac{1}{2}}}{\pi^{\frac{1}{2}} \Delta \nu_D} e^{-\frac{4 \ln 2}{\Delta \nu_D^2} (\nu - \nu_0)^2} \quad (4.23)$$

onde

ν_0 é a frequência central de oscilação,

$\Delta \nu_D = 2\nu_0 \left(\frac{2k_B T_g}{M_{Cu} c^2} \ln 2 \right)^{\frac{1}{2}} s^{-1}$ é a largura Doppler, além da condição de normalização,

$$\int_{-\infty}^{+\infty} g(\nu) d\nu = 1.$$

Considerando que tanto I_ν como $g(\nu)$ sejam descritas pela Eq. (4.23), todos os termos são imediatamente integráveis, exceto o primeiro termo do lado direito da Eq. (4.20) que resulta na seguinte expressão

$$A \frac{c^2}{8\pi} I(t) (\Delta N - \eta) \frac{2 \ln 2}{\pi \Delta \nu_D^2} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{e^{-\frac{8 \ln 2}{\Delta \nu_D^2} (\nu - \nu_0)^2}}{\nu^2} d\nu \quad (4.24)$$

A integral acima pode ser calculada observando que integrando é uma função bastante pronunciada para $\nu = \nu_0$ e vai rapidamente a zero para valores de ν diferentes destes, portanto fizemos $\nu^{-2} \approx \nu_0^{-2}$, realizamos o cálculo da integral gaussiana, e obtemos a seguinte expressão para a seção de choque de

emissão estimulada

$$\sigma_{SE} = A \frac{\lambda_0^2}{8\pi} \frac{1}{\Delta\nu_0} \quad (4.25)$$

onde

$$\Delta\nu_0 = \frac{2\pi^{\frac{1}{2}}}{\lambda_0} \sqrt{\frac{k_B T_g}{M_{Cu}}} \quad (4.26)$$

A equação para o transporte de fótons pode agora ser escrita como

$$\frac{1}{c} \frac{dI}{dt} = \sigma_{SE} \Delta N \frac{l_a}{l_c} I - \eta I - p_c I - \frac{d\Omega}{4\pi} h\nu [Cu^*] \quad (4.27)$$

2. Utilização da largura total de linha

Outra possibilidade para avaliarmos $g(\nu)$ é utilizar a largura de linha que foi calculada na seção anterior. Procedendo desta forma poderemos escrever

$$g(\nu) = \frac{1}{\Delta\nu_0}$$

onde $\Delta\nu_0$ é a largura total de emissão que inclui todas as transições devido a estrutura hiperfina com o alargamento de linha devido ao efeito Doppler. Neste caso teremos

$$\sigma_{SE} = A \frac{\lambda_0^2}{8\pi} \frac{1}{\Delta\nu_0(T_g)} \quad (4.28)$$

onde T_g foi colocado para explicitar a dependência da largura de linha de emissão com a temperatura do gás.

3. Valor medido das larguras de linha.

Utilizamos o valor da largura de linha $\Delta\nu_0$ medido experimentalmente segundo (Oxford Lasers, 1989)

Estes valores são de 6 Ghz para a linha do verde e 9 GHz para a linha do amarelo. Se admitirmos que a largura de linha apresente uma dependência com a temperatura do gás da forma $T_g^{-\frac{1}{2}}$, ver Eq.(4.26), poderemos escrever uma expressão fenomenológica.

$$g(v_0)_{verde} = 1.67 \times 10^{-10} \left(\frac{1773}{T_g} \right)^{\frac{1}{2}} \quad (4.29)$$

$$g(v_0)_{amarelo} = 1.11 \times 10^{-10} \left(\frac{1773}{T_g} \right)^{\frac{1}{2}} \quad (4.30)$$

Na Tab.(4.13) as larguras de linha segundo as três aproximações na temperatura de $T_g = 1500^\circ C$ são comparadas.

aprox.	$\Delta v_{amarelo} (GHz)$	$\sigma_{SE\ amarelo} (10^{-14} cm^2)$	$\Delta v_{verde} (GHz)$	$\sigma_{SE\ verde} (10^{-14} cm^2)$
1	11.0	2.0	7.0	2.9
2	3.0	7.5	3.3	6.2
3	9.0	2.5	6.0	3.4

Tabela (4.13). Comparação entre as diferentes larguras de linha e seções de choque para a emissão estimulada.

4.4 Processos que Controlam a Densidade de Espécies do Plasma de He-Cu.

Os processos envolvendo reações entre átomos de hélio e elétrons e átomos de hélio e seus derivados (estados metaestáveis e íons) já foram considerados do Cap. 3. Desta forma, nesta seção apresentaremos somente os processos envolvendo átomos de cobre e elétrons e átomos de cobre e átomos de hélio e seus derivados. Portanto a mesma tabela que foi utilizada no Cap.3 se aplica neste capítulo com as devidas interpretações. Os seguintes processos serão considerados no modelo:

1	excitação
2	ionização
3	processos superelásticos
4	recombinação
5	difusão
6	transferência de momento linear
7	reações Penning
8	troca de carga
9	desativação colisional

Tabela (4.14) Processos gerais considerados no modelo

Os processos de impacto eletrônico podem ser classificados como segue:

4.4.1 Processos Inelásticos.

Para facilitar a descrição dos processos considerados utilizaremos a Fig.(4.7).

1. Excitação de um nível energeticamente superior ao nível fundamental com a correspondente redução da temperatura dos elétrons. Este processo pode ser representado para o caso do átomo de cobre utilizando as seguintes equações:

$$e^- + Cu(^2S_{1/2}) \rightarrow e^- + Cu(^2D_{3/2}) - \Delta E_{Cu:1 \rightarrow 2}^E \quad (4.31)$$

$$e^- + Cu(^2S_{1/2}) \rightarrow e^- + Cu(^2D_{5/2}) - \Delta E_{Cu:1 \rightarrow 3}^E \quad (4.32)$$

$$e^- + Cu(^2S_{1/2}) \rightarrow e^- + Cu(^2P_{1/2}) - \Delta E_{Cu:1 \rightarrow 4}^E \quad (4.33)$$

$$e^- + Cu(^2S_{1/2}) \rightarrow e^- + Cu(^2P_{3/2}) - \Delta E_{Cu:1 \rightarrow 4}^E \quad (4.34)$$

$$e^- + Cu(^2S_{1/2}) \rightarrow e^- + Cu(^2P_{3/2}) - \Delta E_{Cu:1 \rightarrow 5}^E \quad (4.35)$$

$$e^- + Cu(^2D_{3/2}) \rightarrow e^- + Cu(^2D_{5/2}) - \Delta E_{Cu:2 \rightarrow 3}^E \quad (4.36)$$

$$e^- + Cu(^2D_{3/2}) \rightarrow e^- + Cu(^2P_{1/2}) - \Delta E_{Cu:2 \rightarrow 4}^E \quad (4.37)$$

$$e^- + Cu(^2D_{3/2}) \rightarrow e^- + Cu(^2P_{3/2}) - \Delta E_{Cu:2 \rightarrow 5}^E \quad (4.38)$$

$$e^- + Cu(^2D_{3/2}) \rightarrow e^- + Cu(^2P_{1/2}) - \Delta E_{Cu:3 \rightarrow 4}^E \quad (4.39)$$

$$e^- + Cu(^2D_{3/2}) \rightarrow e^- + Cu(^2P_{3/2}) - \Delta E_{Cu:3 \rightarrow 5}^E \quad (4.40)$$

$$e^- + Cu(^2P_{1/2}) \rightarrow e^- + Cu(^2S_{1/2}) - \Delta E_{Cu:4 \rightarrow 6}^E \quad (4.41)$$

$$e^- + Cu(^2P_{1/2}) \rightarrow e^- + Cu(^2D_{3/2}) - \Delta E_{Cu:4 \rightarrow 7}^E \quad (4.42)$$

$$e^- + Cu(^2P_{3/2}) \rightarrow e^- + Cu(^2S_{1/2}) - \Delta E_{Cu:5 \rightarrow 6}^E \quad (4.43)$$

$$e^- + Cu(^2P_{3/2}) \rightarrow e^- + Cu(^2D_{3/2}) - \Delta E_{Cu:5 \rightarrow 8}^E \quad (4.44)$$

As constantes de taxa que caracterizam o processo de excitação eletrônica do estado metaestável do Cu, no nível laser superior, e a excitação do nível laser superior a partir do nível metaestável, e níveis superiores, serão denotadas por $r_{Cu:i \rightarrow j}^E$, com $i < j$.

2. Ionização por impacto eletrônico a partir de estado fundamental ou de um estado metaestável ou de um nível superior. As seguintes equações serão utilizadas para representar estes processos.

$$e^- + Cu(^2S_{1/2}) \rightarrow e^- + e^- + Cu^+ - \Delta E_{Cu:1}^I \quad (4.45)$$

$$e^- + Cu(^2D_{3/2}) \rightarrow e^- + e^- + Cu^+ - \Delta E_{Cu:2}^I \quad (4.46)$$

$$e^- + Cu(^2D_{3/2}) \rightarrow e^- + e^- + Cu^+ - \Delta E_{Cu:3}^I \quad (4.47)$$

$$e^- + Cu(^2P_{1/2}) \rightarrow e^- + e^- + Cu^+ - \Delta E_{Cu:4}^I \quad (4.48)$$

$$e^- + Cu(^2P_{3/2}) \rightarrow e^- + e^- + Cu^+ - \Delta E_{Cu:5}^I \quad (4.49)$$

$$e^- + Cu(^2S_{1/2}) \rightarrow e^- + e^- + Cu^+ - \Delta E_{Cu:6}^I \quad (4.50)$$

$$e^- + Cu(^2D_{3/2}) \rightarrow e^- + e^- + Cu^+ - \Delta E_{Cu:7}^I \quad (4.51)$$

$$e^- + Cu(^2D_{3/2}) \rightarrow e^- + e^- + Cu^+ - \Delta E_{Cu:8}^I \quad (4.52)$$

Observe que nestes processos ocorrerão, além da redução da temperatura eletrônica, a criação de um elétron, de um íon, e a destruição de um átomo do cobre no estado fundamental, ou a destruição de um átomo metaestável, ou a destruição de um átomo de cobre no nível laser superior, ou a destruição de um átomo de cobre num nível superior. As constantes de taxa de reação para estes processos serão representadas por $r_{Cu:i \rightarrow 9}^I$.

3. Colisões para o relaxamento superelástico. Este processo, em conjunto com o campo elétrico aplicado, é responsável pela elevação da temperatura eletrônica. Para o caso do diagrama de níveis considerado neste modelo, quatorze reações serão consideradas,

Figura (4.7). Diagrama simplificado dos níveis de energia do cobre que serão utilizados para a simulação do pulso de descarga.

e as constantes de taxa para as colisões superelásticas sendo representadas por $r_{Cu i \rightarrow j}^S$, com, $i > j$.

$$e^{-} + Cu(^2P_{3/2}) \rightarrow e^{-} + Cu(^2S_{1/2}) + \Delta E_{Cu:5 \rightarrow 1}^S \quad (4.59)$$

$$e^{-} + Cu(^2P_{3/2}) \rightarrow e^{-} + Cu(^2D_{3/2}) + \Delta E_{Cu:5 \rightarrow 2}^S \quad (4.60)$$

$$e^{-} + Cu(^2P_{3/2}) \rightarrow e^{-} + Cu(^2D_{5/2}) + \Delta E_{Cu:5 \rightarrow 3}^S \quad (4.61)$$

$$e^{-} + Cu(^2P_{3/2}) \rightarrow e^{-} + Cu(^2P_{1/2}) + \Delta E_{Cu:5 \rightarrow 4}^S \quad (4.62)$$

$$e^{-} + Cu(^2S_{1/2}) \rightarrow e^{-} + Cu(^2P_{1/2}) + \Delta E_{Cu:6 \rightarrow 4}^S \quad (4.63)$$

$$e^{-} + Cu(^2S_{1/2}) \rightarrow e^{-} + Cu(^2P_{3/2}) + \Delta E_{Cu:6 \rightarrow 5}^S \quad (4.64)$$

$$e^{-} + Cu(^2D_{3/2}) \rightarrow e^{-} + Cu(^2P_{1/2}) + \Delta E_{Cu:7 \rightarrow 4}^S \quad (4.65)$$

$$e^{-} + Cu(^2D_{5/2}) \rightarrow e^{-} + Cu(^2P_{1/2}) + \Delta E_{Cu:8 \rightarrow 5}^S \quad (4.66)$$

4.4.2 Processos Elásticos.

Os processos elásticos com transferência de momento linear desempenham papel fundamental para o cálculo dos coeficientes de transporte.

1. Colisão elétron-átomo neutro.

Esta reação é representada por pela seguinte equação:

$$e^{-} + Cu(\text{qualquer estado}) \rightarrow e^{-} + Cu - \Delta E_{Cu}^{elast} \quad (4.67)$$

sendo a constante de taxa de reação representada por r_{Cu}^{momen} .

2. Colisão elétron-íon de cobre.

Este processo é a bem conhecida colisão coulombiana sendo representada por

$$e^{-} + Cu^{+} \rightarrow e^{-} + Cu^{+} - \Delta E_{Cu}^{Coulomb} \quad (4.68)$$

A constante de taxa deste processo é calculada de maneira fechada (Tanenbaum B. S., 1967) resultando em

$$r_{Cu}^{Coulomb} = 3.62 \times 10^{-6} n_e [Cu^{+}] T_e^{-3/2} \ln \Lambda \quad (4.69)$$

onde Λ , neste caso representa o parâmetro de corte coulombiano, sendo dado por $\Lambda = 1.23 \times 10^7 \left(\frac{T_e^3}{n_e} \right)^{1/2}$.

4.4.3 Recombinação

1. Recombinação colisional radiativa.

De maneira similar ao processo discutido do capítulo 3, temos para o cobre a seguinte equação:

$$e^- + e^- + Cu^+ \rightarrow Cu^* + h\nu \rightarrow Cu \text{ (níveis rad. superiores)} + e^- + \Delta E_{Cu}^{Elas} \quad (4.70)$$

cuja a taxa será de (Biberman L. M., et al., 1974),

$$\alpha_{ei} = 2.13 \times 10^{-20} \frac{n_e}{T^{9/2}} \ln \Lambda \text{ cm}^6 s^{-1} \quad (4.71)$$

2. Recombinação Radiativa.

Este processo é discutido extensamente por (Biberman L. M., et al., 1974)

$$e^- + Cu^+ \rightarrow Cu^* \text{ (níveis rad. superiores)} + h\nu \quad (4.72)$$

com a seguinte constante de taxa

$$r_{Cu}^{RR} = 4.2 \times 10^{-12} \left(\frac{T_e}{300} \right)^{-0.7} \text{ cm}^3 / s \quad (4.73)$$

6. Reações de troca de carga.

Os seguintes processos para a troca de carga serão considerados,

$$He^+ + Cu \rightarrow Cu^+ + He \quad (4.74a)$$

$$He^+ + Cu_m \rightarrow Cu^+ + He \quad (4.74a)$$

Este processo, (McDaniel E. W., 1964) apresenta uma seção de choque estimada por:

$$\sigma = 2.5 \times 10^{-15} \text{ cm}^2$$

o que produzirá utilizando-se a Eq.(2.31), a seguinte expressão para a constante de taxa de reação

$$r_{Cu}^{TC} = 2 \times 10^{-10} T_g^{1/2} \text{ cm}^3 / s \quad (4.75)$$

4.4.4 Reação Penning

Dois esquemas de reações Penning serão considerados no modelo, com as mesmas considerações energéticas discutidas no Cap. 3.

$$He_m + Cu_m \rightarrow He + Cu^+ + e^+ + \Delta E^P \quad (4.76a)$$

$$He_m + Cu \rightarrow He + Cu^+ + e^+ + \Delta E^P \quad (4.76b)$$

As seções de choque para estes processos foram estimadas, (Riseberg L. A., et al., 1973),

$$\sigma = 4 \times 10^{-15} \text{ cm}^2$$

e que resulta na seguinte expressão para a taxa de reação,

$$r_{Cu}^P = 7.1 \times 10^{-10} T_g^{1/6} cm^3 / s \quad (4.77)$$

4.4.6 Desativação Colisional

A taxa para estes processos foi estimada seguindo o mesmo procedimento do Cap. 3 para um processo que ocorre no volume do plasma. As equações que descrevem estes processos são dadas por

E a seguinte constante de taxa de reação foi utilizada para descrever ambos os processos, (Mitchell A. C. G. e Zemansky M. Z., 1961).

$$r_{Cu}^{DC} = 2 \times 10^{-13} \left(\frac{T_g}{300} \right)^{\frac{1}{2}} cm^3 / s \quad (4.79)$$

4.4.7 Difusão

1. Difusão ambipolar

No plasma formado pelo He e Cu teremos o fenômeno de difusão ambipolar denominado de difusão em descargas de multiplas espécies. Este processo foi abordado por (Oskam e Brown S. C., 1964) . Uma forma aproximada para os coeficientes de difusão foi escrita para este processo. A expressão para o coeficiente de difusão para este caso está apresentada no Apêndice A.

2. Difusão dos metaestáveis Cu_m .

Os átomos metaestáveis do hélio $Cu(2^2D_{\frac{3}{2}})$ através do fenômeno da difusão também atingirão a parede onde serão desativados resultando no estado fundamental do cobre. O processo é descrito pela equação abaixo sendo o coeficiente de difusão para este processo apresentado no Apêndice B.

4.5 Constantes de Taxa de Reação para o Átomo de Cobre

Conforme discutimos nos processos colisionais que consideraremos para a descrição do pulso de descarga apresentaremos as constantes de taxa das reações que impacto eletrônico. As seções de choque para a excitação eletrônica dos níveis lasers (2P , $^2D_{3/2}$ e $^2D_{5/2}$), foram determinadas experimentalmente por (Trajmar S. et al., 1977) e (Borozdin Y. S. et al., 1977). Contudo, a utilização destas seções de choque para o cálculo das constantes de taxa e posterior determinação da potência do laser, conduziram a potências acima do que foi medido experimentalmente. Foi necessário reduzir as o valor das seções de choque de fatores entre 4 e 5. Este fato foi reportado posteriormente por alguns autores, (Kull G. M. et al., 1979), (Winter N. W. e Hazi A. U., 1982) e (Scheibner K. F. e Hazi A. U., 1987), sendo que diversas tentativas de renormalização daquelas seções. Devido a importância das seções de choque em nosso modelo, utilizamos seções de choque calculadas segundo as expressões de Gryzinski, (Gryzinski M., 1959). As Figs.(4.8) à (4.25) mostram as constante de taxa de reação para as reações de excitação eletrônica do átomo de cobre para os diversos níveis de energia que consideramos em nosso modelo. As seções de choque para os processos superelásticos foram calculadas utilizando princípio do balanço detalhado conforme Eq.(3.32).

Figura (4.8). Constante de taxa de reação de transferência de momento linear.

Figura (4.9). Constante de taxa de reação de excitação $4s^2S_{\frac{1}{2}} \rightarrow 4s^2D_{\frac{3}{2}}$, curva A. Constante de taxa de reação super elástica $4s^2D_{\frac{3}{2}} \rightarrow 4s^2S_{\frac{1}{2}}$, curva B.

Figura (4.10). Constante de taxa de reação de excitação $4s^2S_{\frac{1}{2}} \rightarrow 4s^2D_{\frac{3}{2}}$, curva A. Constante de taxa de reação super elástica $4s^2D_{\frac{3}{2}} \rightarrow 4s^2S_{\frac{1}{2}}$, curva B.

Figura (4.11). Constante de taxa de reação de excitação $4s^2S_{\frac{1}{2}} \rightarrow 4p^2P_{\frac{1}{2}}$, curva A. Constante de taxa de reação super elástica $4p^2P_{\frac{1}{2}} \rightarrow 4s^2S_{\frac{1}{2}}$, curva B.

Figura (4.12). Constante de taxa de reação de excitação $4s^2S_{1/2} \rightarrow 4s^2P_{3/2}$, curva A. Constante de taxa de reação super elástica $4s^2P_{3/2} \rightarrow 4s^2S_{1/2}$, curva B.

Figura (4.13). Constante de taxa de reação de excitação $4s^2D_{3/2} \rightarrow 4s^2D_{5/2}$, curva A. Constante de taxa de reação super elástica $4s^2D_{5/2} \rightarrow 4s^2D_{3/2}$, curva B.

Figura (4.14). Constante de taxa de reação de excitação $4s^2D_{3/2} \rightarrow 4p^2P_{1/2}$, curva A. Constante de taxa de reação super elástica $4p^2P_{1/2} \rightarrow 4s^2D_{3/2}$, curva B.

Figura (4.15). Constante de taxa de reação de excitação $4s^2D_{5/2} \rightarrow 4p^2P_{3/2}$, curva A. Constante de taxa de reação super elástica $4p^2P_{3/2} \rightarrow 4s^2D_{5/2}$, curva B.

Figura (4.16). Constante de taxa de reação de excitação $4s^2D_{3/2} \rightarrow 4p^2P_{1/2}$, curva A. Constante de taxa de reação super elástica $4p^2P_{1/2} \rightarrow 4s^2D_{3/2}$, curva B.

Figura (4.17). Constante de taxa de reação de excitação $4s^2D_{3/2} \rightarrow 4p^2P_{3/2}$, curva A. Constante de taxa de reação super elástica $4p^2P_{3/2} \rightarrow 4s^2D_{3/2}$, curva B.

Figura (4.18). Constante de taxa de reação de excitação $4p^2P_{\frac{1}{2}} \rightarrow 4p^2P_{\frac{3}{2}}$, curva A. Constante de taxa de reação super elástica $4p^2P_{\frac{3}{2}} \rightarrow 4p^2P_{\frac{1}{2}}$, curva B.

Figura (4.19). Constante de taxa de reação de excitação $4p^2P_{\frac{1}{2}} \rightarrow 5s^2S_{\frac{1}{2}}$, curva A. Constante de taxa de reação super elástica $5s^2S_{\frac{1}{2}} \rightarrow 4p^2P_{\frac{1}{2}}$, curva B.

Figura (4.20). Constante de taxa de reação de excitação $4p^2P_{\frac{1}{2}} \rightarrow 4d^2D_{\frac{3}{2}}$, curva A. Constante de taxa de reação super elástica $4d^2D_{\frac{3}{2}} \rightarrow 4p^2P_{\frac{1}{2}}$, curva B.

Figura (4.21). Constante de taxa de reação de excitação $4p^2P_{\frac{3}{2}} \rightarrow 5s^2S_{\frac{1}{2}}$, curva A. Constante de taxa de reação super elástica $5s^2S_{\frac{1}{2}} \rightarrow 4p^2P_{\frac{3}{2}}$, curva B.

Figura (4.22). Constante de taxa de reação de ionização: $4s^2S_{\frac{1}{2}} \rightarrow Cu^+$, curva A. Constante de taxa de reação de ionização $4s^2D_{\frac{3}{2}} \rightarrow Cu^+$, curva B.

Figura (4.23). Constante de taxa de reação de ionização: $4s^2D_{\frac{3}{2}} \rightarrow Cu^+$, curva A. Constante de taxa de reação de ionização $4p^2P_{\frac{1}{2}} \rightarrow Cu^+$, curva B.

Figura (4.21). Constante de taxa de reação de ionização: $4p^2P_{3/2} \rightarrow Cu^+$, curva A. Constante de taxa de reação de ionização $5s^2S_{1/2} \rightarrow Cu^+$, curva B.

Figura (4.22). Constante de taxa de reação de ionização: $4d^2D_{3/2} \rightarrow Cu^+$, $4d^2D_{5/2} \rightarrow Cu^+$. Ambas constantes foram aproximadas para a mesma constante de taxa.

4.6 Simulação do Pulso Elétrico, Pulso Laser e Pós-Luminescência

A seguir apresentamos as equações de taxa que descrevem o sistema na aproximação utilizada neste capítulo. Ao escrever estas equações, não fizemos distinção entre os diferentes períodos do ciclo de descarga. Este fato, se deve em vista de podermos comprovar várias das hipóteses formuladas no Cap. 2 deste trabalho. A Tab. (4.14), mostra a equivalência entre as notações das espécies nas equações de taxa.

	Espécie	Designação do modelo
1	$Cu(4s^2S_{1/2})$	Cu
2	$Cu(4s^2D_{3/2})$	Cu_1^m
3	$Cu(4s^2D_{5/2})$	Cu_2^m
4	$Cu(4p^2P_{1/2})$	Cu_1^*
5	$Cu(4p^2P_{3/2})$	Cu_2^*
6	$Cu(5s^2S_{1/2})$	Cu_1^s
7	$Cu(4d^2D_{3/2})$	Cu_2^s
8	$Cu(4d^2D_{5/2})$	Cu_3^s
9	Cu^+	Cu^+
10	$He(1s^2^1S_0)$	He
11	$He(2s^1^1S_1 + 2s^1^3S_1)$	He_m
12	He^+	He^+

Tabela 4.15. Designação das espécies no modelo He-Cu zero-dimensional

4.6.1 Equações para o balanço do número de partículas.

1. Cobre no estado fundamental

$$\begin{aligned}
 \frac{d}{dt}[\bar{C}u] = & -\bar{n}_e[\bar{C}u]r_{Cu:1 \rightarrow 9}^I - \bar{n}_e[\bar{C}u]r_{Cu:1 \rightarrow 2}^E - \bar{n}_e[\bar{C}u]r_{Cu:1 \rightarrow 3}^E - \bar{n}_e[\bar{C}u]r_{Cu:1 \rightarrow 4}^E - \bar{n}_e[\bar{C}u]r_{Cu:1 \rightarrow 5}^E \\
 & + \bar{n}_e[\bar{C}u_1^m]r_{Cu:2 \rightarrow 1}^S + \bar{n}_e[\bar{C}u_2^m]r_{Cu:3 \rightarrow 1}^S + \bar{n}_e[\bar{C}u_1^*]r_{Cu:4 \rightarrow 1}^S + \bar{n}_e[\bar{C}u_2^*]r_{Cu:5 \rightarrow 1}^S \\
 & + A_{41}F_{41}[\bar{C}u_1^*] + A_{51}F_{51}[\bar{C}u_2^*] - [\bar{C}u][\bar{H}e^+]r_{Cu}^{TC} - [\bar{H}e_m][\bar{C}u]r_{Cu}^P \\
 & + \frac{\bar{D}_{Cu}^M}{\Lambda^2}[\bar{C}u_1^m] + \frac{\bar{D}_{Cu}^A}{\Lambda^2}[\bar{C}u^+] + [\bar{C}u_1^m][\bar{C}u]r_{Cu}^{DC} + [\bar{C}u_1^m][\bar{H}e]r_{Cu}^{DC}
 \end{aligned} \tag{4.81}$$

2. Cobre nos estados metaestáveis

$$\begin{aligned}
\frac{d}{dt}[\bar{C}u_1^m] = & \bar{n}_e[\bar{C}u]r_{Cu:1 \rightarrow 2}^E - \bar{n}_e[\bar{C}u_1^m]r_{Cu:2 \rightarrow 9}^I - \bar{n}_e[\bar{C}u_1^m]r_{Cu:2 \rightarrow 3}^E - \bar{n}_e[\bar{C}u_1^m]r_{Cu:2 \rightarrow 4}^E - \bar{n}_e[\bar{C}u_1^m]r_{Cu:2 \rightarrow 5}^E \\
& + \bar{n}_e[\bar{C}u_2^m]r_{Cu:3 \rightarrow 2}^S + \bar{n}_e[\bar{C}u_1^*]r_{Cu:4 \rightarrow 2}^S + \bar{n}_e[\bar{C}u_2^*]r_{Cu:5 \rightarrow 2}^S + \sigma_{SE}^{43} \left[[\bar{C}u_1^*] - \frac{g_4}{g_3} [\bar{C}u_2^m] \right] \left(\frac{v_{amarel}}{\lambda_{amarel}^2} \right) \\
& + A_{52}[\bar{C}u_2^*] + A_{42}[\bar{C}u_1^*] - [\bar{C}u_1^m][\bar{C}u]r_{Cu}^{DC} - [\bar{C}u_1^m][\bar{H}e]r_{Cu}^{DC} \\
& - \frac{\bar{D}_{Cu}}{\Lambda^2} [\bar{C}u_1^m] - [\bar{C}u_1^m][\bar{C}u]r_{Cu}^P - [\bar{C}u_1^m][\bar{H}e^+]r_{Cu}^{TC}
\end{aligned} \tag{4.82}$$

$$\begin{aligned}
\frac{d}{dt}[\bar{C}u_2^m] = & \bar{n}_e[\bar{C}u]r_{Cu:1 \rightarrow 3}^E + \bar{n}_e[\bar{C}u_1^m]r_{Cu:2 \rightarrow 3}^E - \bar{n}_e[\bar{C}u_2^m]r_{Cu:3 \rightarrow 9}^I - \bar{n}_e[\bar{C}u_2^m]r_{Cu:3 \rightarrow 4}^E - \bar{n}_e[\bar{C}u_2^m]r_{Cu:3 \rightarrow 5}^E \\
& + \bar{n}_e[\bar{C}u_1^*]r_{Cu:4 \rightarrow 3}^S + \bar{n}_e[\bar{C}u_2^*]r_{Cu:5 \rightarrow 3}^S + \sigma_{SE}^{52} \left[[\bar{C}u_2^*] - \frac{g_5}{g_2} [\bar{C}u_1^m] \right] \left(\frac{v_{verde}}{\lambda_{verde}^2} \right) \\
& + A_{53}[\bar{C}u_2^*] - [\bar{C}u_2^m][\bar{C}u]r_{Cu}^{DC} - [\bar{C}u_2^m][\bar{H}e]r_{Cu}^{DC} - \frac{\bar{D}_{Cu}}{\Lambda^2} [\bar{C}u_2^m] - [\bar{C}u_2^m][\bar{C}u]r_{Cu}^P - [\bar{C}u_2^m][\bar{H}e^+]r_{Cu}^{TC}
\end{aligned} \tag{4.83}$$

3. Cobre nos níveis laser superiores

$$\begin{aligned}
\frac{d}{dt}[\bar{C}u_1^*] = & \bar{n}_e[\bar{C}u]r_{Cu:1 \rightarrow 4}^E + \bar{n}_e[\bar{C}u_1^m]r_{Cu:2 \rightarrow 4}^E + \bar{n}_e[\bar{C}u_2^m]r_{Cu:3 \rightarrow 4}^E - \bar{n}_e[\bar{C}u_1^*]r_{Cu:4 \rightarrow 9}^I - \bar{n}_e[\bar{C}u_1^*]r_{Cu:4 \rightarrow 5}^E \\
& - \bar{n}_e[\bar{C}u_1^*]r_{Cu:4 \rightarrow 6}^E - \bar{n}_e[\bar{C}u_1^*]r_{Cu:4 \rightarrow 7}^E + \bar{n}_e[\bar{C}u_2^*]r_{Cu:5 \rightarrow 4}^S + \bar{n}_e[\bar{C}u_1^s]r_{Cu:6 \rightarrow 4}^S + \bar{n}_e[\bar{C}u_2^s]r_{Cu:7 \rightarrow 4}^S \\
& - \sigma_{SE}^{43} \left[[\bar{C}u_1^*] - \frac{g_4}{g_3} [\bar{C}u_2^m] \right] \left(\frac{v_{amarel}}{\lambda_{amarel}^2} \right) - \frac{\bar{D}_{Cu}}{\Lambda^2} [\bar{C}u_1^*] + (A_{41}F_{41} + A_{42})[\bar{C}u_1^*] \\
& + A_{64}F_{64}[\bar{C}u_1^s] + A_{74}F_{74}[\bar{C}u_2^s]
\end{aligned} \tag{4.84}$$

$$\begin{aligned}
\frac{d}{dt}[\bar{C}u_2^*] = & \bar{n}_e[\bar{C}u]r_{Cu:1 \rightarrow 5}^E + \bar{n}_e[\bar{C}u_1^m]r_{Cu:2 \rightarrow 5}^E + \bar{n}_e[\bar{C}u_2^m]r_{Cu:3 \rightarrow 5}^E + \bar{n}_e[\bar{C}u_1^*]r_{Cu:4 \rightarrow 5}^E - \bar{n}_e[\bar{C}u_2^*]r_{Cu:5 \rightarrow 9}^I \\
& - \bar{n}_e[\bar{C}u_2^*]r_{Cu:5 \rightarrow 4}^S - \bar{n}_e[\bar{C}u_2^*]r_{Cu:5 \rightarrow 3}^S - \bar{n}_e[\bar{C}u_2^*]r_{Cu:5 \rightarrow 2}^S - \bar{n}_e[\bar{C}u_2^*]r_{Cu:5 \rightarrow 1}^S \\
& - \bar{n}_e[\bar{C}u_2^*]r_{Cu:5 \rightarrow 6}^E - \bar{n}_e[\bar{C}u_2^*]r_{Cu:5 \rightarrow 8}^E + \bar{n}_e[\bar{C}u_2^s]r_{Cu:6 \rightarrow 5}^S + \bar{n}_e[\bar{C}u_3^s]r_{Cu:8 \rightarrow 5}^S \\
& - \sigma_{SE}^{52} \left[[\bar{C}u_2^*] - \frac{g_5}{g_2} [\bar{C}u_1^m] \right] \left(\frac{v_{verde}}{\lambda_{verde}^2} \right) - \frac{\bar{D}_{Cu}}{\Lambda^2} [\bar{C}u_2^*] \\
& - (A_{51}F_{51} + A_{52} + A_{53})[\bar{C}u_2^*] + A_{65}F_{65}[\bar{C}u_1^s] + A_{85}F_{85}[\bar{C}u_3^s]
\end{aligned} \tag{4.85}$$

5. Cobre nos níveis radiativos superiores

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}[\bar{C}u_1^s] = & \bar{n}_e[\bar{C}u_1^*]r_{Cu:4 \rightarrow 6}^E + \bar{n}_e[\bar{C}u_2^*]r_{Cu:5 \rightarrow 6}^E - \bar{n}_e[\bar{C}u_1^s]r_{Cu:6 \rightarrow 9}^I - \bar{n}_e[\bar{C}u_1^s]r_{Cu:6 \rightarrow 4}^S - \bar{n}_e[\bar{C}u_1^s]r_{Cu:6 \rightarrow 5}^S \\ & + 0.33\bar{n}_e(\bar{n}_e r_{Cu}^{RC} + r_{Cu}^{RR})[\bar{C}u^+] + (A_{61}F_{61} + A_{62}F_{62})[\bar{C}u_1^s] \end{aligned} \quad (4.86)$$

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}[\bar{C}u_2^s] = & \bar{n}_e[\bar{C}u_1^*]r_{Cu:4 \rightarrow 7}^E + \bar{n}_e[\bar{C}u_2^*]r_{Cu:5 \rightarrow 7}^E - \bar{n}_e[\bar{C}u_2^s]r_{Cu:7 \rightarrow 9}^I - \bar{n}_e[\bar{C}u_2^s]r_{Cu:7 \rightarrow 4}^S - \bar{n}_e[\bar{C}u_2^s]r_{Cu:7 \rightarrow 5}^S \\ & + 0.33\bar{n}_e(\bar{n}_e r_{Cu}^{RC} + r_{Cu}^{RR})[\bar{C}u^+] - A_{74}F_{74}[\bar{C}u_1^s] \end{aligned} \quad (4.87)$$

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}[\bar{C}u_3^s] = & \bar{n}_e[\bar{C}u_1^*]r_{Cu:4 \rightarrow 8}^E + \bar{n}_e[\bar{C}u_2^*]r_{Cu:5 \rightarrow 8}^E - \bar{n}_e[\bar{C}u_3^s]r_{Cu:8 \rightarrow 9}^I - \bar{n}_e[\bar{C}u_3^s]r_{Cu:8 \rightarrow 4}^S - \bar{n}_e[\bar{C}u_3^s]r_{Cu:8 \rightarrow 5}^S \\ & + 0.33\bar{n}_e(\bar{n}_e r_{Cu}^{RC} + r_{Cu}^{RR})[\bar{C}u^+] - A_{65}F_{65}[\bar{C}u_1^s] - A_{83}F_{83}[\bar{C}u_3^s] \end{aligned} \quad (4.88)$$

6. Cobre no estado ionizado.

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}[\bar{C}u^+] = & \bar{n}_e[\bar{C}u]r_{Cu:1 \rightarrow 9}^I + \bar{n}_e[\bar{C}u_1^m]r_{Cu:2 \rightarrow 9}^I + \bar{n}_e[\bar{C}u_2^m]r_{Cu:3 \rightarrow 9}^I + \bar{n}_e[\bar{C}u_1^*]r_{Cu:4 \rightarrow 9}^I + \bar{n}_e[\bar{C}u_2^*]r_{Cu:5 \rightarrow 9}^I \\ & + \bar{n}_e[\bar{C}u_1^s]r_{Cu:6 \rightarrow 9}^I + \bar{n}_e[\bar{C}u_2^s]r_{Cu:7 \rightarrow 9}^I + \bar{n}_e[\bar{C}u_3^s]r_{Cu:8 \rightarrow 9}^I - \frac{\bar{D}_{Cu}^A}{\Lambda^2}[\bar{C}u^+] \\ & + [\bar{H}e_m][\bar{C}u]r_{Cu}^P + [\bar{H}e_m][\bar{C}u_1^m]r_{Cu}^P + [\bar{H}e_m][\bar{C}u_2^m]r_{Cu}^P + [\bar{H}e^+][\bar{C}u]r_{Cu}^{TC} \\ & + [\bar{H}e^+][\bar{C}u]r_{Cu}^{TC} + [\bar{H}e^+][\bar{C}u_1^m]r_{Cu}^{TC} + [\bar{H}e^+][\bar{C}u_2^m]r_{Cu}^{TC} \end{aligned} \quad (4.89)$$

7. Hélio do estado fundamental

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}[\bar{H}e] = & -\bar{n}_e[\bar{H}e]r_{He:1 \rightarrow 3}^I - \bar{n}_e[\bar{H}e]r_{He:1 \rightarrow 2}^E + \bar{n}_e[\bar{H}e]r_{He:2 \rightarrow 1}^S + \beta \frac{\bar{D}_{He}^M}{\Lambda^2}[\bar{H}e_m] + (1-\gamma) \frac{\bar{D}_{He}^A}{\Lambda^2}[\bar{H}e^+] \\ & + (1-\delta)\bar{n}_e^2[\bar{H}e^+]r_{He}^{RC} + (1-\varepsilon)\bar{n}_e[\bar{H}e^+]r_{He}^{RR} + [\bar{C}u][\bar{H}e^+]r_{Cu}^{TC} + [\bar{H}e_m][\bar{C}u]r_{Cu}^P \\ & + [\bar{H}e_m][\bar{H}e_m]r_{He}^P + [\bar{H}e_m][\bar{C}u_1^m]r_{Cu}^P + [\bar{H}e_m][\bar{H}e]r_{He}^{DC} + [\bar{H}e^+][\bar{C}u_1^m]r_{Cu}^{TC} \end{aligned} \quad (4.90)$$

8. Hélio no estado metaestável.

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}[\bar{H}e_m] = & \bar{n}_e[\bar{H}e]r_{He:1 \rightarrow 2}^E - \bar{n}_e[\bar{H}e_m]r_{He:2 \rightarrow 3}^I - \bar{n}_e[\bar{H}e_m]r_{He:2 \rightarrow 1}^S - \beta \frac{\bar{D}_{He}^M}{\Lambda^2}[\bar{H}e_m] + \gamma \frac{\bar{D}_{He}^A}{\Lambda^2}[\bar{H}e^+] \\ & + \delta \bar{n}_e^2[\bar{H}e^+]r_{He}^{RC} + \epsilon \bar{n}_e[\bar{H}e^+]r_{He}^{RR} - [\bar{H}e_m][\bar{C}u_i^m]r_{Cu}^P - [\bar{H}e_m][\bar{C}u]r_{Cu}^P \\ & - 2[\bar{H}e_m][\bar{H}e_m]r_{He}^P - [\bar{H}e_m][\bar{H}e]r_{He}^{DC} \end{aligned} \quad (4.91)$$

9. Hélio no estado ionizado

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}[\bar{H}e^+] = & -\frac{\bar{D}_{He}^A}{\Lambda^2}[\bar{H}e^+] + \bar{n}_e[\bar{H}e]r_{He:1 \rightarrow 3}^I + \bar{n}_e[\bar{H}e_m]r_{He:2 \rightarrow 3}^I + [\bar{H}e_m][\bar{H}e_m]r_{He}^P \\ & - [\bar{H}e^+][\bar{C}u]r_{Cu}^{TC} - [\bar{H}e^+][\bar{C}u_i^m]r_{Cu}^{TC} - \bar{n}_e^2[\bar{H}e^+]r_{He}^{RC} - \bar{n}_e[\bar{H}e^+]r_{He}^{RR} \end{aligned} \quad (4.92)$$

10. Elétrons

Em vista da propriedade de quase neutralidade do plasma podemos escrever:

$$\frac{dn_e}{dt} = \frac{d}{dt}[Cu^+] + \frac{d}{dt}[He^+] \quad (4.93)$$

4.6.2 Equações para o balanço de energia

1. Temperatura dos elétrons

Em virtude do grande número de termos que contribuem para a equação da temperatura eletrônica, (aproximadamente setenta termos), utilizamos uma notação condensada. A primeira soma corresponde a redução na temperatura dos elétrons devido ao processo de ionização, o segundo, aos processos Penning, o terceiro, aos processos de excitação, o quarto termo, a elevação da temperatura devido aos processos superelásticos. O quinto termo, representa a redução na temperatura dos elétrons devido a termalização com o gás. O sexto termo é o termo correspondente a energia que o campo elétrico externo fornece aos elétrons da descarga. O sétimo é devido ao transporte ambipolar de energia. O oitavo e último termo corresponde a elevação da temperatura dos elétrons devido aos processos de recombinação.

$$\begin{aligned}
\frac{d\bar{T}_e}{dt} = & - \sum_{k=1}^2 \sum_{i,j;i < j} (\bar{T}_e + \frac{2}{3} \Delta E_{ki \rightarrow j}^I) [\bar{k}] r_{ki \rightarrow j}^I + \sum_{k,j=1}^2 (\frac{2}{3} \Delta E_k^P - \bar{T}_e) \frac{[\bar{k}][\bar{l}]}{\bar{n}_e} r_k^P - \sum_{k=1}^2 \sum_{i,j;i < j} \frac{2}{3} \Delta E_{ki \rightarrow j}^E [\bar{k}] r_{ki \rightarrow j}^E \\
& + \sum_{k=1}^2 \sum_{i,j;i > j} \frac{2}{3} \Delta E_{ki \rightarrow j}^S [\bar{k}] r_{ki \rightarrow j}^S - \sum_{j=1}^2 \frac{2m_e}{M_j} \langle v_{ej}^m \rangle (\bar{T}_e - \bar{T}_g) + \frac{2}{3\bar{n}_e e} JE - \sum_{k=1}^2 \frac{\bar{D}_k^A}{\Lambda^2} [\bar{k}^+] \frac{\bar{T}_e}{\bar{n}_e} \\
& + \sum_{k=1}^2 (\Delta E_k^{RC} + \bar{T}_e) [\bar{k}^+] (\bar{n}_e r_k^{RC} + r_k^{RR})
\end{aligned} \quad (4.94)$$

2. Temperatura do gás. (Hipótese: $T_g \approx T_{ion}$)

Se considerarmos como principais fonte para a elevação da temperatura do gás o aquecimento Joule e as colisões elásticas com os elétrons, então a Eq.(2.72) para a temperatura do gás, se modifica com o intuito de acrescentar as duas espécies pesadas,

$$\frac{d}{dt} \bar{T}_g(t) = \frac{2}{3e} \frac{\lambda(\bar{T}_g)}{a\bar{n}_g} \left(\frac{\partial \bar{T}_g}{\partial \rho} \right)_{\rho=a} + \frac{\bar{n}_e}{\bar{n}_g} \sum_{j=1}^2 \frac{2m_e}{M_j} \langle v_{ej}^m \rangle (\bar{T}_e - \bar{T}_g) \quad (4.95)$$

4.7 Circuito modulador. Modelo simples para a thyatron.

Os LVCs que operam em elevada taxa de repetição de pulsos empregam um circuito modulador do tipo linha mais elaborado do que aquele que foi utilizado na Sec.(3.5). O diagrama elétrico circuito modulador normalmente empregado está ilustrado na Fig.(4.26)

Figura (4.26) Diagrama do circuito modulador comumente empregado para a excitação do LVC de alta taxa de repetição de pulsos

Uma vantagem imediata sobre o circuito modulador da Fig.(4.26) é a possibilidade de um ganho de voltagem em $V_2(t)$ sobre $V_1(t)$. Para vermos isto, basta observar que a voltagem de pico do capacitor C_p será de

$$V_{pico} = \frac{2C_s}{C_s + C_p} V_0$$

onde V_0 é a voltagem de carga do capacitor C_s antes de a thyatron conduzir. Para os LVCs utiliza-se a seguinte relação entre os valores das capacitâncias: $C_1 = 3 C_2$, e desta forma $V_{pico} = 1.5 V_0$. A indutância do tubo de descarga é representada por L_{laser} e a indutância malha é representada por L_{malha} . Valores típicos para os componentes do circuito modulador estão mostrados na Tab. (4.16). O resistor R_c atua aproximadamente somente durante o primeiro pulso, alguns momentos antes de ser produzido o plasma do tubo de descarga. Após o segundo pulso a impedância dinâmica do plasma situa-se entre $5-10\Omega$. O problema do modelamento da thyatron é bastante complicado. Poderíamos em princípio construir um modelo cinético para o plasma de hidrogênio molecular. Contudo, uma tarefa desta tipo é da envergadura do trabalho que ora desenvolvemos. Outra possibilidade seria utilizar um modelo fenomenológico baseado em experimentos que resultem na curva característica de voltagem e corrente. Mas esta informação não é disponível pois não dispomos de um arranjo experimental. A terceiro possibilidade, a que utilizamos, foi modelarmos a thyatron de modo semelhante a um diodo cuja corrente elétrica flui somente em uma direção, sendo

Parâmetro	valor
$L_{laser}(nH)$	275
$L_{malha}(nH)$	200
$C_s(nF)$	4
$C_p(nF)$	1
$R_c(\Omega)$	200
$\tau_{chavemento}(ns)$	15-40

Tabela (4.16) Valores típicos dos componentes elétricos utilizados para a implementação do circuito modulador (Hargrove R. S. et al., 1979).

$\tau_{chaveamento}(ns)$ o tempo de chaveamento da thyatron, (EGG, Technical Note). Desta forma, utilizamos a seguinte expressão para descrever o chaveamento a thyatron:

$$V_{th} = (V_0 - V_{anodo})e^{-at} + V_{anodo} \quad (4.96)$$

onde o valor da constante a foi escolhido de maneira que o tempo de chaveamento esteja de acordo com os valores fornecidos pelos fabricantes. V_{anodo} é a queda de potencial no anodo durante o intervalo em que a thyatron está conduzindo, tipicamente 50V para o hidrogênio. As equações para o circuito, em termos da variáveis de estado, são:

$$\frac{di_2}{dt} = \frac{V_2 - V_d}{L_{laser}} \quad (4.97)$$

$$\frac{dV_2}{dt} = \frac{i_1 - i_2}{C_p} \quad (4.98)$$

$$\frac{di_1}{dt} = \frac{V_1 - V_{th} - V_2}{L_{malha}} \quad (4.99)$$

$$\frac{dV_1}{dt} = -\frac{i_1}{C_s} \quad (4.100)$$

onde $V_d = \frac{R_c R_d(t)}{R_c + R_d(t)} i_2$.

4.8 Análise dos Resultados

O gráfico da evolução temporal da temperatura do gás, Fig. (4.27), mostra que entre o início do ciclo até o intervalo de $1\mu s$, a elevação na temperatura do gás é de aproximadamente 20% da elevação total.

Portanto, este resultado vem de encontro com nossa hipótese nº. 5, em que afirmamos que a elevação da temperatura do gás ocorre principalmente no período da pós-luminescência.

O gráfico da Fig. (4.28) mostra a evolução temporal da temperatura eletrônica. O pico da temperatura corresponde a máxima transferência de energia do campo elétrico para o plasma, realizando trabalho sobre os elétrons. A temperatura dos elétrons decai rapidamente em função do mecanismo de transferência de energia devido à excitação dos níveis eletrônicos do átomo de cobre. A partir de $100 ns$, ocorre uma desaceleração na taxa de redução da temperatura eletrônica, e durante o período entre $1\mu s$ e $100\mu s$, a temperatura decresce sob uma taxa bem pequena. Esta pequena taxa é o resultado do balanço entre os processos de perda, principalmente a termalização, e os processos de aquecimento dos elétrons: reações Penning, recombinação e processos superelásticos.

No gráfico da Fig. (4.29) estão mostradas as curvas da voltagem e corrente através tubo do laser. Podemos observar que a corrente está atrasada em relação à voltagem, em vista da existência da indutância de $200 nH$, estimada como a indutância do laser. Podemos também verificar, que devido à constante de tempo do pulso de corrente elétrica e os valores numéricos da condutividade do plasma, a corrente de condução elétrica é muito maior que a corrente de deslocamento. Este resultado confirma nossa hipótese nº. 15.

No gráfico da Fig. (4.30) está mostrado a evolução temporal da impedância dinâmica do tubo de descarga. Esta curva é uma informação importante pois mostra o valor da impedância do tubo no início do ciclo. Podemos observar que esta se mantém constante durante os primeiros $10 ns$ do início do ciclo. Isto se deve a dois fatores: o tempo de atraso para que a thyratron entre em condução, e segundo, o atraso de tempo necessário para que o crescimento da voltagem através do tubo atinja valores que permitam que a temperatura eletrônica cresça a níveis em que os processos de ionização sejam importantes, iniciando-se com o aumento da densidade eletrônica e com a consequente queda da impedância dinâmica do tubo. Neste período ocorrerá um aumento acentuado da corrente elétrica

através do tubo. Um fato curioso a ser observado é a estrutura (uma quase ressonância) que aparece durante o período entre 50 e 70 ns na impedância do tubo. Este fenômeno ocorre em conjunto com estruturas semelhantes, mostradas nas curvas do fator de aprisionamento de radiação dos estados radiativos superiores, na Fig.(4.31), e durante a emissão laser Fig. (4.32). Acreditamos tratar-se do efeito optogalvânico. Ao nosso conhecimento, é a primeira vez que este efeito tenha sido observado ou teorizado para o laser a vapor de cobre. O gráfico da Fig. (4.31) mostra a ocorrência do fenômeno de aprisionamento de radiação no meio que envolve os átomos de cobre (plasma He-Cu). Observe que a radiação fica sempre aprisionada entre os níveis laser superiores e o estado fundamental, desde que tenhamos uma densidade mínima de átomos de cobre para que ocorra o fenômeno. Isto estabelece uma densidade mínima de átomos de cobre para que tenhamos o fenômeno de aprisionamento de radiação. Podemos também inferir que seria difícil imaginar a emissão laser no átomo de cobre isolado, ver Tab. (4.1), e podemos observar realmente que é o fenômeno de aprisionamento da radiação que torna a razão de ramificação para a transição laser unitária, satisfazendo assim o terceiro critério proposto por (Walter W. T. et al., 1966), ver Sec. 4.1.

Na curva Fig. (4.32) mostramos a intensidade da radiação laser intracavidade. A razão entre as emissões verde e amarela obedece a relação 3:1, conforme reportado na literatura. A evolução inicial do ganho é muito rápida, de forma que o sistema atingirá um ganho maior que o ganho de limiar de operação. Desta forma, após a evolução inicial do ganho, deveríamos esperar um decaimento da intensidade tipo exponencial, característico de lasers de ganho chaveado. Como podemos observar na Fig.(4.33), apesar da forte modulação sofrida pelo ganho devido a evolução do pulso, este ainda se regenera para valores positivos, introduzindo um acréscimo de intensidade ao pulso após o seu valor de pico, fugindo do decaimento exponencial. Na Fig.(4.33) mostramos as curvas de evolução do ganho para as emissões da linha do verde 0.35 cm^{-1} e da linha do amarelo 0.2 cm^{-1} . Estes valores confirmam a afirmação que o laser a vapor de cobre é uma laser de alto ganho.

O gráfico da Fig.(4.34) mostra o coeficiente de ganho (proporcional à diferença de população), para ambas as transições laser [amarela $^2P_{\frac{3}{2}} \rightarrow ^2D_{\frac{3}{2}}$] e [verde $^2P_{\frac{3}{2}} \rightarrow ^2D_{\frac{5}{2}}$], na ausência do campo de radiação eletromagnética intracavidade. Observe que existe ganho líquido positivo para um intervalo de

tempo de aproximadamente 80 ns para a transição amarela e 110 ns para a transição verde. Então como esperado, na ausência do campo de radiação, a relaxação ocorre em tempos compatíveis com os tempos de decaimento espontâneo da transição laser, até a saturação.

Na presença do campo de radiação, considerando-o desde o seu surgimento do ruído quântico (fluorescência) nota-se, que como mostrado na Fig.(4.33), que as populações são fortemente afetadas pelo campo de radiação. A Fig.(4.30) mostra que o coeficiente de ganho apresenta uma redução drástica, para as duas linhas, com um atraso temporal para a transição do amarelo, de 15 ns. Isto indica claramente, que a inversão de população é rapidamente reduzida devido ao decaimento estimulado pela ação do campo de radiação de alta intensidade desenvolvido no laser. Pode-se calcular a taxa de decaimento da transição para o pico de $16 kW \cdot cm^{-2}$, segundo $A_{est} \cong \sigma_e I_p$. Portanto para uma seção de choque de emissão estimulada da ordem de $10^{-14} cm^2$ para a transição de $5106 \text{ \AA}$, a constante de decaimento corresponde a um tempo de 35 ns, que é o tempo mínimo de decaimento possível nessas condições de operação. Este é aproximadamente o tempo em que o ganho mostrado da Fig. (4.33), decai do valor de pico para o seu mínimo, ainda maior que zero. Como a intensidade da transição amarela é menor, a variação temporal desse ganho também o é. Olhando atentamente para a evolução do ganho da transição verde, verificamos que o ganho ainda é aumentado após o pico do pulso laser, o que indica que os processos eletrônicos de população do nível laser superior ainda estão ocorrendo com uma taxa compatível a do decaimento estimulado.

O gráfico da Fig.(4.35) mostra a evolução temporal das populações de todos os níveis (exceto do Cu^+) durante o período do pulso do ciclo e o gráfico da Fig. (4.36) mostra o comportamento no período da pós-luminescência. Os gráficos mostram que a variação na população dos átomos neutros de Cu é de somente 20%, fração esta que da origem à população de todos os possíveis estados excitados considerados no modelo. Observa-se também que a população dos níveis superiores decaem drasticamente após 1 μs , de tal maneira que suas densidades representam um parcela insignificante em relação a população total, e desta forma não são importantes durante a pós-luminescência. Em outras palavras, durante a pós-luminescência a cinética do plasma é governada pela densidade de átomos no

estado fundamental e de átomos nos estados metaestáveis, $^2D_{\frac{3}{2}}$ e $^2D_{\frac{5}{2}}$ o que vem de encontro com a hipótese nº. 16 do Cap. 2

Como um último comentário podemos observar, que a condição de auto-consistência, formulada na hipótese nº. 18 do Cap. 2, é obedecida, como mostrado nos gráficos de evolução temporal durante um ciclo completo, Figs (4.27), (4.28) e (4.29).

Figura (4.27) Evolução temporal do temperatura do gás

Figura (4.28). Evolução temporal da temperatura eletrônica

Figura (4.29) Curvas da corrente e voltagem sobre o tubo do laser

Figura (4.30) Impedância dinâmica do plasma do LVC

Figura (4.31) Evolução temporal dos fatores de aprisionamento. Vide tabela abaixo.

Número	Transição
1	$4p^2P_{\frac{1}{2}} \rightarrow 4s^2S_{\frac{1}{2}}$
2	$4p^2P_{\frac{3}{2}} \rightarrow 4s^2S_{\frac{1}{2}}$
3	$5s^2S_{\frac{1}{2}} \rightarrow 4s^2D_{\frac{5}{2}}$
4	$4d^2D_{\frac{5}{2}} \rightarrow 4p^2P_{\frac{3}{2}}$
5	$5s^2S_{\frac{1}{2}} \rightarrow 4p^2P_{\frac{1}{2}}$
6	$4d^2D_{\frac{3}{2}} \rightarrow 4p^2P_{\frac{1}{2}}$

Tabela (4.17) Legenda da Fig.(4.31)

Figura (4.32) Intensidade da radiação laser intracavidade

Figura (4.33) Curvas de ganho do laser na presença do campo de radiação

Figura (4.34) Curvas de ganho positivo para ambas as transições na ausência de campo de radiação intracavidade.

Figura (4.35) Evolução temporal das espécies do cobre.

Figura(4.36) Evolução temporal dos metaestáveis do cobre durante a pós-luminescência

4.9 Conclusão do Capítulo

Neste capítulo desenvolvemos um modelo cinético para o laser He-Cu baseado nas equações de conservação, segundo a aproximação zero-dimensional. O modelo descreveu muito bem o comportamento geral observado no laser a vapor de cobre.

O modelo, como uma extensão do modelo desenvolvido do Cap. 3, foi capaz de simular o comportamento da ruptura do gás, do pulso elétrico e do período da pós-luminescência. Em adição ao do vapor de cobre ao plasma de He puro, que analisamos no capítulo anterior, utilizamos um modelo simples para a descrição do comportamento da thyatron.

Em particular, pode-se determinar o intervalo de tempo máximo em que haverá ganho líquido positivo, e portanto uma janela temporal de ganho. Praticamente isto corresponde a uma limitação intrínseca no comprimento máximo do laser.

Capítulo 5

Modelo Radialmente Dependente para o Laser He-Cu

Neste capítulo avançamos um pouco mais em busca de um modelo cinético mais elaborado para a descrição do comportamento temporal de um plasma de hélio - vapor de cobre. Para isto, utilizamos a seguinte linha de ação. Tendo como base os resultados obtidos nos Caps. 3 e 4 para o problema do pulso e pós-luminescência em hélio puro, e o problema do pulso, pulso laser e pós-luminescência do plasma hélio-vapor de cobre, respectivamente, analisamos o comportamento radial do problema para as condições previamente estabelecidas. Para aproximar as equações diferenciais parciais para equações de diferenças, utilizamos um esquema de diferenças finitas na forma implícita do tipo Crank-Nicholson, (Camahan B. et al., 1969). Embora este método possa não simplificar o problema numérico, ele apresenta vantagens no que diz respeito à problemas de estabilidade e convergência computacional. O ponto de partida para o solução do problema será a resolução do problema discutido no Cap. 4 sob a dependência radial.

5.1 O Modelo Radialmente Dependente

5.1.1 Equações para o balanço do número de partículas.

As equações que agora escreveremos descrevem o comportamento radial das espécies que compõem o plasma He-Cu. Estas equações aplicam-se durante período da pós-luminescência, pois durante o curto período em que ocorre o pulso de descarga elétrica, os fluxos radiais de partículas e de energia são desprezíveis. Em vista deste fato, podemos utilizar equações de taxa, como uma excelente aproximação, para descrever o comportamento do plasma durante o período do pulso elétrico. Por outro lado, as condições iniciais para o período do pulso são aquelas estabelecidas ao final do período da pós-

luminescência, no ciclo anterior, onde os fenômenos da difusão radial de partículas e distribuição radial de temperaturas são importantes.

a. *Equação para o balanço do número de elétrons.*

Vamos rescrever a Eq.(2.69),

$$\frac{\partial n_e}{\partial t} + \nabla \cdot \vec{\Gamma}_e = \frac{R_e}{m_e} \quad (5.1)$$

e o termo fonte R_e é o mesmo que foi utilizado na Eq.(4.87), mas agora com uma dependência radial. A Eq.(5.1), em coordenadas cilíndricas (ρ, t) , assume a seguinte forma

$$\frac{\partial n_e}{\partial t} + \frac{\partial \Gamma_e}{\partial \rho} + \frac{\Gamma_e}{\rho} = \frac{R_e(\rho, t)}{m_e} \quad (5.2)$$

Vamos substituir a expressão dada pela Eq.(A.11) para o fluxo ambipolar de múltiplas espécies iônicas, obtendo a seguinte expressão para a densidade de elétrons:

$$\begin{aligned} \frac{\partial n_e}{\partial t} = D_e^A \left[\frac{\partial^2 n_e}{\partial \rho^2} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial n_e}{\partial \rho} \right] + \frac{\partial D_e^A}{\partial \rho} \frac{\partial n_e}{\partial \rho} + \sum_{j=1}^2 D_j^T \left[\frac{\partial^2 T_e}{\partial \rho^2} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial T_e}{\partial \rho} \right] + \frac{\partial D_j^T}{\partial \rho} \frac{\partial T_e}{\partial \rho} + \\ + \sum_{j=1}^2 D_j^T \left[\frac{\partial^2 T_g}{\partial \rho^2} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial T_g}{\partial \rho} \right] + \frac{\partial D_j^T}{\partial \rho} \frac{\partial T_g}{\partial \rho} = \frac{R_e(\rho, t)}{m_e} \end{aligned} \quad (5.3)$$

As demais equações para o balanço de partículas, exceto para o gás tampão, são construídas de maneira similar a Eq.(5.3).

b. *Equação para o balanço do número de íons do hélio.*

$$\begin{aligned} \frac{\partial [He^+]}{\partial t} = D_{He^+}^A \left[\frac{\partial^2 [He^+]}{\partial \rho^2} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial [He^+]}{\partial \rho} \right] + \frac{\partial D_{He^+}^A}{\partial \rho} \frac{\partial [He^+]}{\partial \rho} + D_{He^+}^T \left[\frac{\partial^2 T_e}{\partial \rho^2} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial T_e}{\partial \rho} \right] + \frac{\partial D_{He^+}^T}{\partial \rho} \frac{\partial T_e}{\partial \rho} + \\ + D_{He^+}^T \left[\frac{\partial^2 T_g}{\partial \rho^2} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial T_g}{\partial \rho} \right] + \frac{\partial D_{He^+}^T}{\partial \rho} \frac{\partial T_g}{\partial \rho} = \frac{R_{He^+}(\rho, t)}{m_{He^+}}, \end{aligned} \quad (5.4)$$

onde o termo colisional $R_{He^+}(\rho, t)$ é idêntico àquele da Eq. (4.92).

c. *Equação para o balanço do número de átomos do hélio no estado metaestável.*

$$\frac{\partial [He_m]}{\partial t} = D_{He_m}^A \left[\frac{\partial^2 [He_m]}{\partial \rho^2} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial [He_m]}{\partial \rho} \right] + \frac{\partial D_{He_m}^A}{\partial \rho} \frac{\partial [He_m]}{\partial \rho} + D_{He_m}^T \left[\frac{\partial^2 T_g}{\partial \rho^2} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial T_g}{\partial \rho} \right] + \frac{\partial D_{He_m}^T}{\partial \rho} \frac{\partial T_g}{\partial \rho} = \frac{R_{He_m}(\rho, t)}{m_{He_m}}, \quad (5.5)$$

onde o termo colisional $R_{He_m}(\rho, t)$ é idêntico àquele da Eq. (4.91).

d. Equação para o balanço do número de íons do cobre.

$$\begin{aligned} \frac{\partial [Cu^+]}{\partial t} = D_{Cu^+}^A \left[\frac{\partial^2 [Cu^+]}{\partial \rho^2} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial [Cu^+]}{\partial \rho} \right] + \frac{\partial D_{Cu^+}^A}{\partial \rho} \frac{\partial [Cu^+]}{\partial \rho} + D_{Cu^+}^T \left[\frac{\partial^2 T_e}{\partial \rho^2} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial T_e}{\partial \rho} \right] + \frac{\partial D_{Cu^+}^T}{\partial \rho} \frac{\partial T_e}{\partial \rho} + \\ + D_{Cu^+}^T \left[\frac{\partial^2 T_g}{\partial \rho^2} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial T_g}{\partial \rho} \right] + \frac{\partial D_{Cu^+}^T}{\partial \rho} \frac{\partial T_g}{\partial \rho} = \frac{R_{Cu^+}(\rho, t)}{m_{Cu^+}} \end{aligned} \quad (5.6)$$

onde o termo colisional $R_{Cu^+}(\rho, t)$ é idêntico àquele da Eq. (4.89).

e. Equação para o balanço do número de átomos do cobre em estados metaestáveis.

$$\frac{\partial [Cu_j^m]}{\partial t} = D_{Cu_j^m} \left[\frac{\partial^2 [Cu_j^m]}{\partial \rho^2} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial [Cu_j^m]}{\partial \rho} \right] + \frac{\partial D_{Cu_j^m}}{\partial \rho} \frac{\partial [Cu_j^m]}{\partial \rho} + D_{Cu_j^m}^T \left[\frac{\partial^2 T_g}{\partial \rho^2} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial T_g}{\partial \rho} \right] + \frac{\partial D_{Cu_j^m}^T}{\partial \rho} \frac{\partial T_g}{\partial \rho} = \frac{R_{Cu_j^m}(\rho, t)}{m_{Cu_j^m}}, \quad (5.7)$$

onde $j = 1$, para o $Cu(^2D_{3/2})$ e $j = 2$, para o $Cu(^2D_{5/2})$, com os respectivos termos colisionais, $R_{Cu_j^m}(\rho, t)$,

expressos pelas Eqs. (4.82) e (4.83).

f. Equação para o balanço do número de átomos do cobre no estado fundamental.

$$\frac{\partial [Cu]}{\partial t} = D_{Cu} \left[\frac{\partial^2 [Cu]}{\partial \rho^2} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial [Cu]}{\partial \rho} \right] + \frac{\partial D_{Cu}}{\partial \rho} \frac{\partial [Cu]}{\partial \rho} + D_{Cu}^T \left[\frac{\partial^2 T_g}{\partial \rho^2} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial T_g}{\partial \rho} \right] + \frac{\partial D_{Cu}^T}{\partial \rho} \frac{\partial T_g}{\partial \rho} = \frac{R_{Cu}(\rho, t)}{m_{Cu}}, \quad (5.8)$$

com o termo colisional sendo expresso pela Eq. (4.90).

g. Equação para o balanço do número de átomos do hélio no estado fundamental.

Conforme observamos, na análise dos resultados do Cap. 4, a variação na densidade de átomos neutros do hélio é tão pequena (menor que 1%), que o erro introduzido, ao admitirmos um termo de criação nulo, deverá ser desprezível. Sob esta hipótese, a equação para o balanço de partículas do gás tampão pode ser escrita como:

$$\frac{\partial [He]}{\partial t} = u_g \frac{\partial [He]}{\partial \rho} + [He] \frac{\partial u_g}{\partial \rho} + \frac{u_g [He]}{\rho} \quad (5.9)$$

onde $u_g[He]$ é o fluxo radial de átomos de hélio.

5.1.2 Equações para a conservação do momento linear.

Sob a hipótese do plasma fracamente ionizado, isto é, a frequência de colisão entre elétrons e átomos neutros ser muito maior do que qualquer outro tipo de frequência de colisão, e a hipótese dos átomos em

estados metaestáveis apresentarem similar propriedade em relação a frequência de colisão com os átomos do gás tampão, bem como, os átomos de cobre no estado fundamental, podemos escrever as seguintes expressões para os fluxos de partículas, excetuando-se a expressão para a equação do momento linear do gás tampão, que será escrita por último, Eq (5.13).

a. Fluxo de elétrons.

Segundo a expressão, Eq.(A.11) podemos escrever

$$\Gamma_e = -D_e^A \frac{\partial n_e}{\partial \rho} - \sum_{j=1}^2 D_j^T \left(\frac{\partial T_e}{\partial \rho} + \frac{\partial T_g}{\partial \rho} \right) \quad (5.10)$$

b. Fluxo de íons.

Íons de cobre e do hélio, onde $i = [Cu^+]$ e $[He^+]$.

$$\Gamma_i = -D_i^A \frac{\partial n_i}{\partial \rho} - D_i^T \left(\frac{\partial T_e}{\partial \rho} + \frac{\partial T_g}{\partial \rho} \right) \quad (5.11)$$

c. Fluxo de átomos em estados metaestáveis e do cobre no estado fundamental

O índice i representa: $j = [Cu]$, $[Cu_1^m]$, $[Cu_2^m]$ e $[He_m]$.

$$\Gamma_j = -D_j \frac{\partial n_j}{\partial \rho} - D_j^T \frac{\partial T_g}{\partial \rho} \quad (5.12)$$

As expressões numéricas para os coeficientes de difusão, difusão ambipolar e termo difusão estão no Apêndice B.

d. Conservação do momento linear dos átomos do gás tampão

$$\frac{\partial u_g}{\partial t} = -\frac{1}{[He]m_{He}} \frac{\partial p_{He}}{\partial \rho} = -\frac{k_B T_g}{m_{He}} \left(\frac{1}{[He]} \frac{\partial [He]}{\partial \rho} + \frac{1}{T_g} \frac{\partial T_g}{\partial \rho} \right) \quad (5.13)$$

5.1.3 Equações para o balanço da energia.

a. Equação para a temperatura dos elétrons

Esta equação é semelhante a Eq.(4.94), exceto pelo termo $\nabla \cdot \vec{q}$ que corresponde a lei de Fourier para a condução de calor, em vista da obtenção da distribuição radial de temperatura. Para a temperatura dos elétrons expressa em eV, a equação apresenta a seguinte forma,

$$\begin{aligned}
\frac{\partial T_e}{\partial t} = \frac{2}{3n_e} \left[\lambda_e \left(\frac{\partial^2 T_e}{\partial \rho^2} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial T_e}{\partial \rho} \right) + \frac{\partial \lambda_e}{\partial \rho} \frac{\partial T_e}{\partial \rho} \right] & - \sum_{k=1}^2 \sum_{i,j;i < j} \frac{2}{3} \Delta E_{ki \rightarrow j}^E [k] r_{ki \rightarrow j}^E \\
& - \sum_{k=1}^2 \sum_{i,j;i < j} (T_e + \frac{2}{3} \Delta E_{ki \rightarrow j}^I) [k] r_{ki \rightarrow j}^I + \sum_{k,l=1}^2 (\frac{2}{3} \Delta E_k^P - T_e) \frac{[k][l]}{n_e} r_k^P \\
& + \sum_{k=1}^2 \sum_{i,j;i > j} \frac{2}{3} \Delta E_{ki \rightarrow j}^S [k] r_{ki \rightarrow j}^S - \sum_{j=1}^2 \frac{2m_e}{M_j} \langle v_{ej}^m \rangle (T_e - T_g) + \frac{2}{3n_e} JE \\
& + \sum_{k=1}^2 (\frac{2}{3} \Delta E_k^{RC} + T_e) [k^+] (n_e r_k^{RC} + r_k^{RR}),
\end{aligned} \tag{5.14}$$

onde a soma em $k = 1$ é para o cobre e $k = 2$ é para o hélio.

b. Equação para a temperatura do gás

De maneira semelhante a Eq. (4.89), a equação para temperatura do gás, em kelvin, é

$$\frac{3}{2} n_g k_B \frac{\partial T_g}{\partial t} = \lambda_g \left[\frac{\partial^2 T_g}{\partial \rho^2} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial T_g}{\partial \rho} \right] + \frac{\partial \lambda_g}{\partial \rho} \frac{\partial T_g}{\partial \rho} + n_e \sum_{j=1}^N \frac{2m_e}{M_j} \langle v_{ej}^m \rangle > \frac{3}{2} k_B (T_e - T_g). \tag{5.15}$$

É importante observarmos que as equações de conservação para o gás tampão são exatamente as equações da gás-dinâmica, para um fluido ordinário, quando a velocidade do fluido é muito baixa, na ausência de forças externas, para um fluido compressível e não viscoso, tendo como fonte de calor a energia transferida pelos elétrons através das colisões elásticas, (Liepmann H. W. e Rosko A., 1957).

5.2 A dependência radial do campo elétrico.

O campo elétrico externo aplicado ao tubo de descarga, no caso de um tubo de descarga com condutividade finita variando radialmente pode ser escrito como, segundo a Eq.(2.73)

$$\nabla^2 \vec{E}(\vec{r}, t) = \mu_0 \frac{\partial}{\partial t} \sigma \vec{E} \tag{5.16}$$

Se admitirmos uma dependência do campo elétrico longitudinal da forma $\vec{E}(\vec{r}, t) = E(\rho, t) \hat{a}_z$, então a Eq.(5.16) pode ser escrita como

$$\frac{1}{\mu_0 \sigma} \left(\frac{\partial^2 E}{\partial \rho^2} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial E}{\partial \rho} \right) = \frac{\partial E}{\partial t}, \tag{5.17}$$

Portanto, segundo a Eq. (5.16), podemos verificar que o campo elétrico externo, quando aplicado ao tubo de descarga obedece uma equação do tipo difusão. Para avaliarmos o efeito desta dependência radial construímos a Tab. (5.1).

$\sigma(\Omega^{-1}cm^{-1})$	$D_E = \frac{1}{\mu_0\sigma}(cm^2s^{-1})$	$\delta(cm)$	$\tau_E(s), a = 1.27cm$	$\tau_E(s), a = 3.00cm$
0.5	15.9×10^7	4.5	1.76×10^{-9}	5.7×10^{-9}
1	7.59×10^7	3.18	3.45×10^{-9}	19.2×10^{-9}
5	1.59×10^7	1.42	17.2×10^{-9}	96.2×10^{-9}
10	7.95×10^6	1.01	34.5×10^{-9}	202.3×10^{-9}

Tabela 5.1. Valores típicos da condutividade elétrica, coeficiente de difusão do campo elétrico, profundidade de penetração e tempo de difusão.

onde o coeficiente de difusão do campo elétrico no plasma é dado por

$$D_E = \frac{1}{\mu_0\sigma} \quad (5.18)$$

A profundidade de penetração, (Ramo S. et al., 1965), pode ser escrita como

$$\delta = \left(\frac{2}{\omega\mu_0\sigma} \right)^{\frac{1}{2}} \quad (5.19)$$

onde $\omega = 2\pi f$ é a frequência angular do campo elétrico. O tempo de difusão elétrica τ_E é definido por

$$\tau_E = \frac{1}{D_E} \left(\frac{a}{2.4} \right)^2 \quad (5.20)$$

onde a é o raio do tubo. Segundo a Tab. (5.1) podemos inferir que, em consequência de uma condutividade finita do plasma, o campo elétrico externo, a medida que penetra no volume do plasma, sofrerá uma atenuação, devido ao efeito pelicular e um atraso temporal em virtude do tempo de difusão. Podemos verificar ainda, que estes dois efeitos serão mais pronunciados a medida em que aumenta a condutividade do plasma e aumenta o raio do tubo de descarga. Por exemplo, para condutividades de $5\Omega^{-1}cm^{-1}$, o tempo de difusão elétrica é de aproximadamente 17ns, para o tubo de pequeno diâmetro e

de aproximadamente 6 vezes maior para o tubo de grande diâmetro. Para valores típicos de condutividade elétrica do laser analisado no Cap. 4, (um raio de tubo de 1.27 cm), o efeito da dependência radial do campo elétrico não é importante, e a expressão aproximada $E(t) = V_d(t)/L$ pode ser utilizada. Contudo, este efeito será importante para LVCs de grandes diâmetros.

Acoplamento com o circuito externo.

A impedância instantânea do tubo de plasma pode ser obtida através das seguintes expressão. Pela definição de corrente elétrica temos que

$$I(t) = \int_s \vec{J}(\vec{r}, t) \cdot d\vec{s} \quad (5.21)$$

onde $\vec{J}(\vec{r}, t)$. Segundo a lei de Ohm,

$$\vec{J}(\vec{r}, t) = \sigma(\vec{r}, t) \vec{E}(\vec{r}, t) \quad (5.22)$$

Substituindo a Eq.(5.22) na Eq.(5.21) obtemos

$$I(t) = \int_s \sigma(\vec{r}, t) \vec{E}(\vec{r}, t) \cdot d\vec{s} \quad (5.23)$$

se admitíssemos que $\vec{E}(\vec{r}, t) = \vec{E}(t)$ então poderíamos escrever que $\vec{E}(t) = V_d(t)/L$, e a impedância instantânea do tubo passaria a ser escrita como

$$R_d(t) = \frac{1}{\bar{\sigma}(t)} \frac{L}{A} \quad (5.24)$$

onde

$$\bar{\sigma}(t) = \frac{2}{a^2} \int_0^a \sigma(\vec{r}, t) \rho d\rho \quad (5.25)$$

Como estamos admitindo uma dependência radial para o campo elétrico, por consistência, devemos então tomar a média sobre a seção transversal do tubo.

$$\bar{E}(t) = \frac{2}{a^2} \int_0^a E(\vec{r}, t) \rho d\rho. \quad (5.26)$$

5.3 Considerações sobre a Amplificação de Emissão Estimulada (ASE).

Com o intuito de realizarmos uma avaliação entre a emissão laser e a amplificação de emissão estimulada, ASE (Verdeyen J. T., 1981), utilizamos a seguinte linha de raciocínio. Se a diferença básica entre o laser e a ASE for a realimentação no meio ativo introduzida pela cavidade ressonante, formada pelo par de espelhos, então se formos capazes de calcular o fluxo de fótons intracavidade tanto para o caso do laser como para a ASE e efetuar a razão entre estes, poderemos inferir considerações sobre a importância da ASE no LVC. Consideremos o esquema de um LVC, como o mostrado na Fig.(5.1), composto de um ressonador e um meio de ganho.

Figura (5.1) Diagrama esquemático de um ressonador laser e o meio ativo.

Vamos considerar uma cavidade de comprimento L_c , em um meio ativo cujo ganho é homogêneo e comprimento L_a e dois espelhos cujas refletividades estão indicadas conforme ilustrado na Fig.(5.1).

Sob estas condições a equação de transporte de fótons para emissão laser pode ser escrita como:

Para a região $z_1 \leq z \leq z_2$.

$$\frac{1}{c} \frac{\partial I^\pm}{\partial t} \pm \frac{\partial I^\pm}{\partial z} = \left\{ \frac{1}{\pi a^2} \int_0^a \sigma_{SE} \Delta N(\rho, t) \rho d\rho \right\} + \frac{d\Omega}{4\pi} h\nu c \left\{ \frac{1}{\pi a^2} \int_0^a C u^*(\rho, t) \rho d\rho \right\} \quad (5.27a)$$

Para a região $z \leq z_1$ e $z_2 \leq z$

$$\frac{1}{c} \frac{\partial I^\pm}{\partial t} \pm \frac{\partial I^\pm}{\partial z} = 0, \quad (5.27b)$$

onde o fluxo de fótons da emissão laser está sujeito as seguintes condições de contorno:

$$\begin{cases} I^+(0, t) = R_1 I^-(0, t) \\ I^-(L, t) = R_2 I^+(L, t) \end{cases}$$

Para a ASE em vista da discussão anterior teremos as seguintes condições de contorno

$$\begin{cases} ASE^+(0, t) = 0. \\ ASE^-(L, t) = 0. \end{cases}$$

O sistema de equações, Eqs.(5.27) foi resolvido numericamente utilizando um método de Euler, (Nakamura S., 1993). Contudo, em vista da equação de transporte de fótons ser uma equação diferencial parcial hiperbólica, quando transformada em uma equação de diferenças, encontramos o problema da difusão numérica e o problema do "alising", (Nakamura S., 1993). Não obstante este fato, não houve uma preocupação maior para corrigirmos o fluxo, pois estamos interessados na razão entre o fluxo de fótons da ASE e o fluxo de fótons do laser. Além disso, como o fluxo de fótons do laser será realimentado pelos espelhos estes efeitos serão mais acentuados sobre o fluxo de fótons do laser. Uma vez resolvida as Eqs.(5.27), então calculamos a evolução temporal de ambos fluxos através das seguintes relações:

$$I_{laser}(t) = \frac{1}{L_c} \int_0^{L_c} [I^+(z, t) + I^-(z, t)] dz$$

$$I_{ASE}(t) = \frac{1}{L_c} \int_0^{L_c} [ASE^+(z, t) + ASE^-(z, t)] dz$$

A razão entre ambos os fluxos foi menor do 10^{-3} , para um meio de ganho de 50 cm e uma cavidade de 200 cm. Desta forma podemos inferir que o efeito da ASE para estas dimensões do oscilador LVC não será significativa.

5.4 Análise dos Resultados.

A Fig. (5.2) mostra a distribuição radial da densidade de átomos no estado fundamental do hélio em função do tempo para quatros instantes de tempo distintos: $1\mu s$, $10\mu s$, $100\mu s$ e $200\mu s$. Na Fig. (5.3) mostramos essa mesma distribuição para os átomos de cobre. Podemos observar que em ambos os casos as soluções satisfazem as condições de contorno.

$$\left. \frac{\partial n}{\partial \rho} \right|_{\rho=0} = 0; \quad n_{Cu}(\rho = a) = n_{parede}(T_p).$$

No gráfico da Fig.(5.4) mostramos a distribuição radial da temperatura do gás nos tempos de $1\mu s$, $10\mu s$, $100\mu s$ e $200\mu s$. É interessante compararmos estes resultados com o resultado obtido pelo modelo zero dimensional, onde podemos observar que em ambos os modelos os máximos de temperatura ocorrem no tempo de $10\mu s$. Podemos observar ainda neste gráfico que condições de contorno para a temperatura do gás são satisfeitas.

$$\left. \frac{\partial T_g}{\partial \rho} \right|_{\rho=0} = 0; \quad T_g(\rho = a) = T_{parede}$$

A Fig. (5.5) mostra a evolução radial da temperatura eletrônica durante o período do pulso. Finalmente na Fig. (5.6) apresentamos a distribuição radial da intensidade do campo eletromagnético intracavidade. Podemos observar que a emissão laser se inicia do centro e evolui para a borda. Este mecanismo concorda com os resultados experimentais de (Brown D. J. W., 1988) e com as simulações teóricas de (Çarman R. J. et al., 1994).

Figura (5.2) Distribuição radial da densidade de átomos de hélio no estado fundamental.

Figura (5.3). Distribuição radial dos átomos de Cu no estado fundamental.

Figura (5.4) Distribuição radial de temperatura do gás

Figura (5.5). Distribuição radial da temperatura dos elétrons durante do pulso de descarga.

Figura (5.6) Distribuição radial do campo de radiação intracavidade.

5.5 Conclusão do Capítulo

Neste capítulo resolvemos radialmente o laser de He-Cu para um tubo de descarga de raio $r = 12.7mm$. Pela comparação da evolução temporal das grandezas do plasmas (temperaturas e densidades), podemos verificar a boa concordância com os resultados do Cap. 4.

Consideramos a dependência radial do campo elétrico, e verificamos que para um tubo laser de raio $r = 12.7mm$ a variação do campo elétrico na borda do tubo e no centro do tubo não é muito acentuada. Desta forma, podemos aproximar a expressão para o campo elétrico pela razão da voltagem aplicada entre os eletrodos do tubo dividida pela distância entre eles. A evolução do crescimento da intensidade da radiação laser concorda com os resultados obtidos por (Carman R. J. et al., 1994) e (Brown D. J. W., 1988).

O efeito da ASE não parece ser significativo para as dimensões do laser que analisamos neste capítulo. Contudo, este resultado não pode ser estendido para laser com maior comprimento do tubo, sendo que para estes casos é necessário que façamos nova avaliação.

Capítulo 6

Modelo para o LVC de Grande Diâmetro. Sistema a Ne-Cu.

Define-se um LVC de grande diâmetro quando o raio do tubo de descarga satisfazer a relação: $a \geq 3 \text{ cm}$. Este número, conforme foi discutido no Cap. 5, para as condições típicas encontradas nos LVCs, indica a dimensão radial a partir da qual deveremos considerar a dependência radial do campo elétrico longitudinal. Este efeito terá consequências muito importantes. A transferência de energia, a partir do campo elétrico externo, para os elétrons é não uniforme. Isto é, em virtude da distribuição da condutividade elétrica variar radialmente, o campo elétrico, a medida que penetra no volume da descarga, terá sua amplitude atenuada além de um tempo de atraso para que o mesmo penetre. Torna-se então necessário resolvermos a equação do tipo difusão, conforme mostrado no Cap. 5. Os LVCs de grande diâmetros são utilizados para a geração de grandes potências médias, isto é, acima de $60W$, sendo que para estes sistemas costuma-se empregar o gás neônio como gás tampão.

Neste capítulo apresentaremos o modelo cinético para o plasma Ne-Cu. Inicialmente apresentaremos o diagrama de níveis de energia para o neônio. O modelo para o cobre será o mesmo utilizado no Cap. 4. Para o neônio utilizaremos um modelo a cinco níveis de energia. Para este sistema consideremos um total de 80 processos.

6.1 Modelo cinético para os Átomos de Neônio.

Para o átomo de Ne consideremos um modelo a cinco níveis de energia. São eles: o estado fundamental ($3p^6 \text{ } ^1S_0$), dois estados metaestáveis: o estado $3s \text{ } ^3P_2$ e o $3s \text{ } ^3P_0$, que, para efeito deste modelamento, consideramos um único nível soma. Ambos os estados metaestáveis apresentam tempos de vida superiores a 0.8 s, (Delcroix J. L. et al., 1967). O estado concentrado, formado a partir da soma dos

níveis ($3p^1S_0 + 3p^3D_3$). Um íon atômico Ne^+ , e um íon molecular Ne_2^+ , onde consideraremos somente o estado vibracional para $v=0$. O diagrama energético para o Ne encontra-se na Fig. (6.1). Neste diagrama representamos todos os processos de impacto eletrônico, cada um dos quais sendo identificado pela constante de taxa relativa ao correspondente processo.

Figura 6.1 Diagrama de níveis de energia simplificado utilizado para o modelo do Neônio

Reações de impacto eletrônico

Reações de excitação

Reações superelásticas.

$$Ne^*(3p^1S_0 + 3p^3D_3) + e^- \xrightarrow{r_{Ne:3 \rightarrow 2}^S} Ne_m(3s^3P_2 + 3s^3P_0) + e^- + \Delta E_{32} \quad (6.5)$$

$$Ne_m(3s^3P_2 + 3s^3P_0) + e^- \xrightarrow{r_{Ne:2 \rightarrow 1}^S} Ne(2p^6^1S_0) + e^- + \Delta E_{21} \quad (6.6)$$

Reações de Ionização

$$Ne(2p^6^1S_0) + e^- \xrightarrow{r_{Ne:1 \rightarrow 4}^I} Ne^+ + e^- - \Delta E_{14} \quad (6.7)$$

$$Ne_m(3s^3P_2 + 3s^3P_0) + e^- \xrightarrow{r_{Ne:2 \rightarrow 4}^I} Ne^+ + e^- - \Delta E_{24} \quad (6.8)$$

$$Ne^*(3p^1S_0 + 3p^3D_3) + e^- \xrightarrow{r_{Ne:3 \rightarrow 4}^I} Ne^+ + e^- - \Delta E_{34} \quad (6.9)$$

Outras Reações

Os seguintes processos serão também considerados no modelo

1. *Recombinação Colisional Radiativa*, (Biberman L. M. et al., 1974),

$$Ne^+ + e^- + e^- \xrightarrow{r_{Ne}^{RC}} Ne^* + e^- + h\nu + \Delta E_{Ne}^{RC} \quad (6.10)$$

$$r_{Ne}^{RC} = \begin{cases} 1897 \times 10^{-27} T_e^{-5} (eV) \text{ cm}^6 s^{-1}, & T_e < 0.267 eV \\ 6.88 \times 10^{-31} T_e^{-11} (eV) \text{ cm}^6 s^{-1}, & T_e > 0.267 eV \end{cases}$$

2. *Recombinação Radiativa*, (Biondi M. A., 1976),

$$Ne^+ + e^- \xrightarrow{r_{Ne}^{RR}} Ne^* + h\nu + \Delta E_{Ne}^{RR} \quad (6.11)$$

$$r_{Ne}^{RR} = 2.32 \times 10^{-13} T_e^{-0.7} (eV) \text{ cm}^3 s^{-1},$$

3. *Reação Penning*, (Brau C. A., 1984),

$$Ne_m + Ne_m \xrightarrow{r_{Ne}^P} Ne^+ + Ne + e^- + \Delta E_{Ne}^P \quad (6.12)$$

$$r_{Ne}^P = 3.12 \times 10^{-9} T_g^{0.5} (eV) \text{ cm}^3 s^{-1},$$

4. *Formação do íon molecular*, (Vitols A. P. e Oskam H. J., 1972),

$$Ne^+ + Ne + Ne \xrightarrow{r_{Ne}^{IM}} Ne_2^+ + Ne + \Delta E_{Ne}^{IM} \quad (6.13)$$

$$r_{Ne}^{IM} = 2.74 \times 10^{-31} T_g^{0.5} (eV) \text{ cm}^6 s^{-1},$$

5. *Recombinação dissociativa*, (Bardsley J. N. e Biondi M. A., 1970),

$$Ne_2^+ + e^- \xrightarrow{r_{Ne}^{RD}} 2Ne + \Delta E_{Ne}^{RD} \quad (6.14)$$

$$r_{Ne}^{RD} = 3.22 \times 10^{-9} T_e^{-0.43} (eV) \text{ cm}^3 s^{-1},$$

6. *Desativação Colisional*, (Huestis D. L. et al., 1978),

$$Ne_m + 2Ne \xrightarrow{r_{Ne}^{DC}} 3Ne + \Delta E_{Ne}^{DC} \quad (6.15)$$

$$r_{Ne}^{DC} = 2.56 \times 10^{-33} T_g^{0.5} (eV) \text{ cm}^3 s^{-1},$$

7. *Reação Penning Híbrida*, (Riseberg L. A. e Schearer W. F., 1973),

$$Ne_m + Cu \xrightarrow{r_{Ne}^P} Cu^+ + Ne + e^- + \Delta E_{Ne,Cu}^P \quad (6.16)$$

$$r_{Ne}^P = 3.12 \times 10^{-9} T_g^{0.5} (eV) \text{ cm}^3 s^{-1},$$

6.1.1 Equações para o balanço do número de partículas

Com base nos processos cinéticos descritos na seção anterior vamos escrever as seguintes equações para densidade de partículas

a. *Estado fundamental*:

$$\frac{\partial Ne}{\partial t} + \nabla \cdot [Ne] \bar{u}_{Ne} = 0 \quad (6.17)$$

b. *Equação para a número de partículas dos metaestáveis do neônio.*

$$\begin{aligned} \frac{\partial Ne_m}{\partial t} + \nabla \cdot \bar{\Gamma}_{Ne_m} = & -n_e Ne_m r_{Ne:2 \rightarrow 3}^E + n_e Ne_m r_{Ne:2 \rightarrow 3}^E + n_e Ne_m r_{Ne:2 \rightarrow 1}^S + n_e Ne_m r_{Ne:1 \rightarrow 2}^E + n_e Ne^* r_{Ne:3 \rightarrow 2}^S \\ & - Ne_m Ne_m r_{Ne}^P - Ne_m Cu r_{Ne,Cu}^P \end{aligned} \quad (6.18)$$

c. *Equação para a número de partículas no estado concentrado do neônio.*

$$\frac{\partial Ne^*}{\partial t} + \nabla \cdot \bar{\Gamma}_{Ne^*} = -n_e Ne^* r_{Ne:3 \rightarrow 4}^I - n_e Ne^* r_{Ne:3 \rightarrow 1}^S - n_e Ne^* r_{Ne:3 \rightarrow 2}^S + n_e Ne r_{Ne:1 \rightarrow 3}^E + n_e Ne_m r_{Ne:2 \rightarrow 3}^E \quad (6.19)$$

d. *Equação para a número de ions atômicos do neônio.*

$$\frac{\partial Ne^+}{\partial t} + \nabla \cdot \bar{\Gamma}_{Ne^+} = +n_e Ne r_{Ne:1 \rightarrow 4}^I + n_e Ne_m r_{Ne:2 \rightarrow 4}^I + n_e Ne^* r_{Ne:3 \rightarrow 4}^I + Ne_m Ne_m r_{Ne}^P \quad (6.20)$$

d. *Equação para a número de ions moleculares do neônio.*

$$\frac{\partial Ne_2^+}{\partial t} + \nabla \cdot \vec{\Gamma}_{Ne_2^+} = Ne^+ Ne Ne r_{Ne}^{IM} - Ne_2^+ n_e r_{Ne}^{RD} \quad (6.21)$$

6.1.2 Equações para a conservação do momento linear.

O fluxo de partículas neutras, segundo a Eq.(2.70), será dada por, com $j = Ne_m, Ne^*$

$$\Gamma_j = -D_j \frac{\partial n_j}{\partial \rho} - D_j^T \frac{\partial T_j}{\partial \rho} \quad (6.22)$$

onde o primeiro termo é o fluxo devido ao gradiente de concentração (lei de Fick) e o segundo corresponde a termo-difusão. Para as partículas carregadas devemos acrescentar mais um termo devido ao fluxo ambipolar de partículas carregadas.

$$\Gamma_j = \mu_j E_a - D_j \frac{\partial n_j}{\partial \rho} - D_j^T \frac{\partial T_j}{\partial \rho} \quad (6.23)$$

onde neste caso $j = e^-, Ne^+, Ne_2^+$. A expressão para o campo ambipolar está discutida no Apêndice A.

No caso dos átomos de neônio do estado fundamental, escrevemos, de maneira semelhante ao Cap. 5, a seguinte expressão:

$$\frac{\partial [Ne]}{\partial t} = u_g \frac{\partial [Ne]}{\partial \rho} + [Ne] \frac{\partial u_g}{\partial \rho} + \frac{u_g [Ne]}{\rho} \quad (6.24)$$

6.1.3 Equações para o balanço da energia

De maneira semelhante aos capítulos anteriores utilizaremos duas temperaturas para a descrição do pulso de descarga elétrica. As partículas pesadas serão todas caracterizadas por uma única temperatura. Este fato se deve a intensa troca de energia entre as partículas que compõem o gás ionizado, conforme discutido no Cap. 2:

a. Equação para a temperatura do gás

$$\frac{3}{2} n_g k_B \frac{\partial T_g}{\partial t} = \lambda_g \left[\frac{\partial^2 T_g}{\partial \rho^2} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial T_g}{\partial \rho} \right] + \frac{\partial \lambda_g}{\partial \rho} \frac{\partial T_g}{\partial \rho} + n_e \sum_{j=1}^N \frac{2m_e}{M_j} \langle v_{ej}^m \rangle \frac{3}{2} k_B (T_e - T_g) \quad (6.24)$$

b. Equação para a temperatura eletrônica

$$\begin{aligned} \frac{\partial T_e}{\partial t} = \frac{2}{3n_e} \left[\lambda_e \left(\frac{\partial^2 T_e}{\partial \rho^2} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial T_e}{\partial \rho} \right) + \frac{\partial \lambda_e}{\partial \rho} \frac{\partial T_e}{\partial \rho} \right] - \sum_{k=1}^2 \sum_{i,j;i < j} \frac{2}{3} \Delta E_{ki \rightarrow j}^E [k] r_{ki \rightarrow j}^E \\ - \sum_{k=1}^2 \sum_{i,j;i < j} (T_e + \frac{2}{3} \Delta E_{ki \rightarrow j}^I) [k] r_{ki \rightarrow j}^I + \sum_{k,l=1}^2 (\frac{2}{3} \Delta E_k^P - T_e) \frac{[k][l]}{n_e} r_k^P \\ + \sum_{k=1}^2 \sum_{i,j;i > j} \frac{2}{3} \Delta E_{ki \rightarrow j}^S [k] r_{ki \rightarrow j}^S - \sum_{j=1}^2 \frac{2m_e}{M_j} \langle v_{ej}^m \rangle (T_e - T_g) + \frac{2}{3en_e} JE \\ + \sum_{k=1}^2 (\frac{2}{3} \Delta E_k^{RC} + T_e) [k^+] (n_e r_k^{RC} + r_k^{RR}) \end{aligned} \quad (6.25)$$

A seguir apresentaremos as constantes de taxas que serão utilizadas. As seções de choque para a ionização de estados excitados foram calculadas utilizando as fórmulas de Gryzinski, (Gryzinski M., 1959).

6.2 Constantes de Taxa de Reação para os Átomos de Neônio.

Na tabela abaixo apresentamos a relação das constantes de taxa para as reações de impacto eletrônico utilizadas no modelo além de referenciar a seção de choque

Fig.	Constante de taxa para o processo	Referência
6.2	Transferência de momento linear	(Fon W. C. e Berrington K. A., 1981) (Teubner P. J. O. et al., 1985)
6.3	Excitação do estado metaestável	(Freund S. R. et al., 1990)
6.3	De-excitação superelástica do estado metaestável.	-----
6.4	Excitação do estado concentrado a partir do fundam.	(Sharpton F. A., 1970)
6.4	De-excitação superelástica do est. conc. para o fundam	-----
6.5	Excitação do estado concentrado a partir do metaest.	-----
6.5	De-excitação superelástica do est. conc. para o metaest.	-----
6.6	Ionização a partir do estado fundamental	(Freund S. R. et al., 1990)
6.6	Ionização a partir do estado metaestável	(Hyman H. A., 1979)
6.7	Ionização a partir do estado concentrado	

Tabela 6.1. Constantes de taxa para as reações de impacto eletrônico que utilizamos no modelo

Figura (6.2) Constante de taxa da reação de transferência de momento linear para o Ne.

Figura (6.3) Curva A. Constante de taxa da reação de excitação: $Ne \rightarrow Ne_m$. Curva B. Constante de taxa da reação super elástica $Ne_m \rightarrow Ne$.

Figura (6.4) Curva A. Constante de taxa da reação de excitação: $Ne \rightarrow Ne^*$. Curva B. Constante de taxa da reação super elástica $Ne^* \rightarrow Ne$.

Figura (6.5) Curva A. Constante de taxa da reação de excitação: $Ne_m \rightarrow Ne^*$. Curva B. Constante de taxa da reação super elástica $Ne^* \rightarrow Ne_m$.

Figura (6.6) Curva A. Constante de taxa da reação de ionização: $Ne \rightarrow Ne^+$. Curva B. Constante de taxa da reação ionização $Ne_m \rightarrow Ne^+$.

Figura (6.7) Constante de taxa da reação de ionização: $Ne^* \rightarrow Ne^+$.

6.3 Análise dos resultados.

Para a realizar as simulações do LVC de 60 mm, utilizamos os parâmetros mostrados na Tab.(6.2)

	Parâmetro do laser	Valor da grandeza
1	diâmetro interno do tubo	60 mm
2	distância ente eletrodos	122cm
3	tamanho da zona quente	90cm
4	Pressão do gás tampão (Ne)	32 Torr
5	capacitância de armazenamento	13nF
6	capacitância de sobrevoltagem	4nF
7	indutância da malha	275nH
8	indutância do laser	350nH
9	resistência de carga	200 Ω
10	temperatura do tubo	1500°C
11	taxa de repetição do pulso	5kHz

Tabela 6.2. Valores nominais dos parâmetros do LVC de 60mm. Valores obtidos segundo a referência, (Kushner M. J. e Warner B., 1983).

A Fig. (6.8) mostra a forma de onda do pulso de voltagem no capacitor C_p . Podemos verificar que a medida em que a voltagem em C_p oscila, oscila também a corrente elétrica através do tubo de descarga do laser, Fig. (6.9). Por outro lado, a corrente elétrica através do tubo está atrasada em relação a voltagem em C_p devido a indutância de 350nH do tubo do laser. Em virtude da aplicação do pulso de voltagem sobre os eletrodos do tubo do laser, será originado entre os eletrodos um campo elétrico de excitação. A Fig.(6.10) mostra o comportamento radial e temporal do campo elétrico onde podemos ver claramente o atraso de tempo necessário para o campo elétrico se difundir entre a borda e o centro do tubo. Além disso a intensidade do campo é atenuada a medida que o campo se difunde em direção a região central do tubo. Em vista deste fenômeno, a distribuição radial e temporal da temperatura eletrônica será fortemente dependente do comportamento do campo elétrico. A região do gás de elétrons que se situa mais próxima à borda do tubo será aquecida primeiro e à uma temperatura mais elevada que a região do gás de elétrons que fica no centro do tubo, comportamento este mostrado na Fig.(6.11).

Como resultado deste aquecimento não uniforme, o aumento das populações nos níveis laser superior e inferior crescerão da borda do tubo para a região central conforme mostrado nas Figs. (6.12) e (6.13). Estes gráficos mostram também o efeito do mecanismo de emissão estimulada, efeito este inferido através de um crescimento adicional da população do nível laser inferior com a correspondente redução da população no nível laser superior. A combinação destes dois efeitos é mostrada na Fig.(6.14) que apresenta a evolução radial e temporal da população invertida. A população invertida positiva migra da borda do tubo para o centro do tubo. Em vista do comportamento ora descrito para a população invertida, a intensidade do campo de radiação laser intracavidade seguirá comportamento similar, e a emissão laser se iniciará na borda do tubo numa forma aureolar e se "propagará" em direção ao centro do tubo, passando da forma aureolar para a forma circular. Verificamos também, Fig.(6.15), que a emissão laser não preenche totalmente o diâmetro total do tubo em nenhum instante de tempo.

As Figs. (6.16) e (6.17) mostram a evolução radial e temporal das populações dos níveis laser inferior e superior. Podemos ver que a população do nível laser superior durante o período da pós-luminescência atinge valores tão pequenos em relação a população do estado fundamental do cobre, que seu papel para a descrição da cinética do plasma é de pouca importância neste período da descarga.

As Figs. (6.18) e (6.19) mostram a evolução temporal e radial da população dos átomos de cobre no estado fundamental. Podemos observar o caráter cíclico da população deste nível mostrando que a condição de auto-consistência do problema é satisfeita, além de mostrar que realmente é somente uma pequena parcela dos átomos de cobre do estado fundamental utilizada para popular os níveis laser.

A Fig. (6.20) mostra a evolução radial e temporal da temperatura eletrônica durante o período da pós-luminescência. Podemos observar que, após os primeiros $10\mu s$, o gradiente da temperatura eletrônica é pequeno, mesmo para lasers de grande diâmetro. A Fig. (6.21) mostra a evolução radial e temporal da temperatura do gás durante o período da pós-luminescência. É interessante observar o aspecto cíclico de T_g apresentando seu valor de pico após $100\mu s$ do início do ciclo. Nota-se um comportamento quase-estacionário da temperatura do gás (variação máxima de $100^\circ C$ para uma temperatura máxima de $2500^\circ C$ no centro tubo). Se compararmos este resultado com o resultado análogo apresentado do Cap. 5, para LVC de pequeno diâmetro, podemos verificar que, a medida em

que aumentamos o diâmetro do tubo, a temperatura do centro do tubo será aumentada também, reduzindo assim, a eficiência da ação laser na região central do tubo devido a estatística de Boltzmann. É devido a este fenômeno que podemos afirmar que a limitação na potência de saída, para LVCs de grandes diâmetros, é o aquecimento do gás, conforme foi apresentado na introdução deste trabalho.

A Fig.(6.22) mostra a distribuição da densidade eletrônica durante a pós-luminescência. Mais uma vez, é interessante relacionar o comportamento radial da densidade eletrônica à excitação seletiva produzida por um campo elétrico radialmente difusivo.

A Fig. (6.23) mostra a evolução espacial e temporal do gás tampão (Ne). Este resultado vem de encontro à nossa hipótese que o problema da cinética do gás tampão é similar a um problema de gás dinâmica. Neste caso, teríamos um gás ordinário confinado numa região cilíndrica e sua cinética seria governada pelos mecanismos de termo-difusão e difusão ordinária. Para o gás tampão tudo passa como se não tivesse ocorrido emissão laser alguma, sendo seu aquecimento, devido as colisões elásticas entre os átomos de gás tampão e os elétrons, o único mecanismo responsável pelo comportamento radial e temporal do gás.

Finalmente, nas Figs. (6.64) e (6.25) mostramos a evolução radial e temporal da condutividade elétrica do plasma, tanto para o período do pulso quanto para a pós-luminescência. Conforme discutido no Cap. 5, é o valor finito da condutividade elétrica do plasma o responsável pelo comportamento radialmente difusivo do campo elétrico de excitação. Este campo elétrico de excitação, por sua vez é o responsável pelos processos cinéticos de excitação e ionização, que em conjunto com os processos de difusão ambipolar e recombinação eletrônica, controla a condutividade elétrica. Esta sequência de fenômenos demonstra que a auto-consistência, neste tipo de problema, é uma característica física deste sistema.

Figura (6.8) Evolução temporal da tensão sobre o capacitor C_p

Figura (6.9) Evolução temporal da corrente elétrica através do tubo de descarga.

Figura (6.10) Distribuição radial do campo elétrico de excitação

Figura (6.11) Distribuição radial da temperatura eletrônica durante o pulso de descarga.

Figura (6.12) Distribuição radial da densidade de população do nível laser inferior durante o pulso de elétrico.

Figura (6.13) Distribuição radial da densidade de população do nível laser superior durante o pulso elétrico.

Figura (6.14) Evolução radial da densidade de inversão de população

Figura (6.15) Evolução radial e temporal do campo de radiação intracavidade

Figura (6.16) Distribuição radial da densidade de população do nível laser inferior durante o período da pós-luminescência.

Figura (6.17) Distribuição radial da densidade de população do nível laser superior durante o período da pós-luminescência.

Figura (6.18) Distribuição radial da densidade de átomos de Cu no estado fundamental durante o período do pulso elétrico de excitação.

Figura (6.19) Distribuição radial da densidade de átomos de Cu no estado fundamental durante o período de pós-luminescência.

Figura (6.20) Distribuição radial da temperatura eletrônica durante o período da pós-luminescência.

Figura (6.21) Distribuição radial da temperatura do gás durante o período da pós-luminescência.

Figura (6.22) Distribuição radial da densidade eletrônica durante o período da pós-luminescência

Figura (6.23) Distribuição radial da densidade de átomos do gás Ne durante o período da pós-luminescência

Figura (6.24) Distribuição radial da condutividade elétrica do plasma durante o período do pulso elétrico.

Figura (6.24) Distribuição radial da condutividade elétrica do plasma durante o período da pós-luminescência.

6.4 Conclusão do Capítulo.

A inclusão da dependência radial do campo elétrico longitudinal de excitação possibilita a melhor compreensão do mecanismo de transferência da energia do campo para os elétrons do plasma. Pudemos demonstrar que existe uma maior quantidade de energia transferida para a região mais próxima da borda interna do tubo.

A inversão de população origina-se a partir da borda do tubo e migra para o centro do tubo. Segundo os resultados obtidos de nosso modelo não ocorre a inversão, e como consequência a ação laser, simultaneamente em toda a extensão radial do tubo, fato este já observado por, (Kushner M. J. e Warner B., 1983). A dependência radial do campo longitudinal é denominada efeito pelicular. Outro efeito interessante produzido pelo atraso na excitação entre a borda e o centro do tubo é o atraso na emissão do pulso laser, que em nossas simulações para o LVC de 60 mm é da ordem de 40 ns . O fenômeno da excitação sequencial dos níveis laser apresenta efeitos interessantes em vista do limiar de oscilação ser função do raio (considerando uma cavidade plano paralela). Este efeito, como podemos observar, resulta num pulso inicialmente anular e mudando para circular, preenchendo totalmente o centro do tubo, a medida que a região mais interna do plasma é excitada. Também observamos um aumento na duração total do pulso laser a medida que o diâmetro do tubo aumenta, que por sua vez, também é consequência da excitação sequencial do meio. De fato, conforme pudemos verificar, o pulso laser total consiste de pulsos que se "propagam", da borda para o centro do tubo. A taxa de aquecimento devido ao efeito joule também é modificada, já que esta taxa está ligada diretamente com o quadrado da intensidade do campo. Mostramos que a intensidade do campo é maior na borda do que no centro e mostramos também que este efeito produz um melhor distribuição radial de potência no volume do plasma.

Capítulo 7

Conclusão

Neste trabalho desenvolvemos um código computacional capaz de resolver o sistema de equações de conservação (densidade de partículas, momento linear e energia) aplicadas a um plasma frio e fracamente ionizado do tipo existente no laser a vapor de cobre, sob ação de uma descarga elétrica periódica. Em virtude do valor elevado das frequências de colisão entre as espécies constituintes do plasma, a descrição do plasma via teoria de n-fluidos se mostrou bastante adequada. Nesta descrição, cada espécie atômica distintas é representada por um fluido. Desta forma, cada espécie é caracterizada por sua densidade de partículas, pelo seu fluxo, e por sua temperatura. Contudo, neste modelo utilizamos somente duas temperaturas para caracterizar o plasma: uma temperatura para os elétrons e uma temperatura para as partículas pesadas. Caracterizar as partículas pesadas (átomos e íons) por uma só temperatura constitui-se numa boa aproximação, em vista da proximidade de suas massas, devido a intensa troca de energia entres elas. O modelo construído foi então aplicado ao laser de vapor de cobre. O modelo foi capaz de descrever corretamente a cinética da descarga elétrica e caracterizar a ação laser, sob várias situações.

Inicialmente, com base na equação de Boltzmann, e aplicando-se o método dos momentos, obtivemos as equações para a gás-dinâmica ordinária e posteriormente, acrescentamos as colisões inelásticas. De posse deste sistema de equações, formulamos um conjunto de hipóteses, que foram verificadas ao longo deste trabalho, sendo que estas hipóteses tornaram o sistema de equações de conservação adequado para a descrição do presente problema.

O sistema de equações de fluido foi aplicado ao caso de uma descarga elétrica capacitiva, pulsada, aplicada longitudinalmente num tubo de descarga. Resolvemos o sistema de equações de

fluidos num esquema auto-consistente e utilizamos a aproximação zero-dimensional para a cinética da descarga no sistema de hélio puro. O modelo foi capaz de descrever corretamente a ruptura elétrica do gás, o pulso de descarga e o período de pós-luminescência. Utilizamos distribuições de Maxwell locais para o cálculo das constantes de taxa de reação. Esta hipótese mostrou-se uma boa aproximação durante o todo o ciclo, mas é questionável sua utilização durante a ação do campo elétrico externo. Contudo, como pudemos verificar pela análise dos resultados, devido à elevada frequência de colisão entre elétrons e átomos neutros, que os elétrons tendem a rapidamente trocar energia com as partículas pesadas, resultando assim, num desvio não muito acentuado da distribuição de Maxwell. Através da comparação dos resultados obtidos pelo modelo com resultados reportados na literatura, pudemos validar nosso modelo.

Resolvemos então o problema do plasma produzido numa mistura de gás nobre e vapor de cobre. Este sistema foi também resolvido sob aproximação zero dimensional. Foi possível investigar fisicamente a importância do fenômeno de aprisionamento de radiação. Utilizamos um modelo de nove níveis energéticos para os átomos de cobre e três níveis para o átomo de hélio. Obtivemos a evolução temporal das grandezas que caracterizam o plasma tais como a temperatura e densidade das espécie. Obtivemos boa concordância dos resultados de nossas simulações com os resultados experimentais reportados na literatura. Entre os principais resultados obtidos podemos citar como fato inovador, a obtenção da largura da janela de ganho do sistema na ausência do campo de radiação laser. A partir desta informação pode-se inferir uma limitação intrínseca do sistema em relação ao escalonamento do comprimento do tubo, pois até então, esta limitação era atribuída a limitações tecnológicas para a obtenção de pulsos de alta voltagem. Outro resultado interessante e inovador foi a observação de uma estrutura na evolução temporal da impedância dinâmica do tubo, que atribuímos ao efeito opto-galvânico. Obtivemos também o valor do coeficiente de ganho para o laser a vapor de cobre para as transições do verde e do amarelo. O modelo inclui os fatores de aprisionamento de radiação para todas as transições ópticas do sistema. Também pudemos inferir que a ação laser no cobre ocorre devido ao

efeito do aprisionamento da radiação, pois este torna a razão de ramificação para as transições laser aproximadamente unitária.

O modelo, então, foi aprimorado de maneira a resolver radialmente as grandezas do plasma, desta forma capaz de gerar as distribuições radiais da densidade de partículas, seus fluxos e distribuição de temperaturas. Obtivemos também o perfil radial do campo de radiação intracavidade. Observamos que o campo da radiação do laser evolui do centro do tubo para a borda, no caso de laser de pequeno diâmetro. Este resultado, foi verificado experimental recentemente, para o laser a vapor de cobre. Avaliamos também o efeito da ASE, cujo resultado revelou que para uma oscilador LVC com 50 cm de região de ganho e cavidade de 150cm, o efeito da ASE não é importante. Contudo, para dimensões maiores este cálculo deverá ser refeito. Avaliamos, também, a dependência radial do campo elétrico longitudinal de excitação e verificamos quando então, dependendo do diâmetro do tubo do laser, esse efeito deverá ser considerado. Para lasers de grande diâmetro, o campo elétrico é responsável pelo comportamento radial do pulso do laser. Para as situações onde a dependência radial do campo de excitação é importante, este campo transfere de maneira não uniforme energia para os elétrons do plasma. Deste modo, a elevação na temperatura eletrônica ocorre mais intensamente nas regiões mais próximas a borda. A medida que o campo de excitação penetra no volume do plasma, a parte do gás de elétrons, localizado nas regiões mais próximas a parede do tubo, também terá sua temperatura elevada. Contudo esta elevação será atenuada, além de atrasada no tempo. Isto produzirá uma inversão de população sequencial nos níveis do laser, que por sua vez dará origem a formação do pulso laser inicialmente anular, sendo que esta região anular se propaga para o centro do tubo até se tornar uma região circular. Não haverá preenchimento simultâneo do volume do plasma pelo campo de radiação. Por outro lado, como já mencionamos, quando a dependência radial do campo de excitação não é importante, o pulso laser se inicia no centro do tubo.

Como linhas futuras de trabalho, propomos os seguintes aspectos as serem abordados: a investigação da cinética da descarga Ne-Cu sob a adição de uma pequena quantidade de hidrogênio

molecular, com o objetivo de elucidar qual a razão do aumento da potência média de saída do laser sob estas circunstâncias.

Apêndice A

Difusão Ordinária e Difusão Ambipolar.

Consideremos o problema da difusão ordinária num tubo cilíndrico de raio a e altura muito grande. Vamos admitir que inicialmente exista uma distribuição espacial de átomos em estados metaestáveis, $N_m(\rho, 0)$, e que devido a esta distribuição inicial irão se difundir em direção as paredes do tubo até atingir-lás, onde lá decairão para a forma de átomos do gás de fundo, que por sua vez é mantido a temperatura constante tanto no espaço como no tempo. Nesta condições o fluxo de átomos metaestáveis em direção as paredes será descrito segundo a lei de Fick. Na ausência de qualquer mecanismo cinético volumétrico, a destruição dos átomos metaestáveis ocorrerá somente nas paredes e portanto a distribuição radial de metaestáveis $N_m(\rho, t)$ será descrita segundo a equação:

$$\frac{\partial N_m}{\partial t} - D \left(\frac{\partial^2 N_m}{\partial \rho^2} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial N_m}{\partial \rho} \right) = 0 \quad (\text{A.1})$$

onde nós admitimos que o coeficiente de difusão D seja aproximadamente constante. A solução da Eq.(A.1) é sujeita as seguintes condições inicial e de contorno

$$\begin{cases} N_m(\rho, 0) \neq 0, \\ N_m(a, t) = 0, \end{cases}$$

e será dada por:

$$N_m(\rho, t) = \frac{2}{a^2} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{J_0\left(\frac{k_{0n}}{a} \rho\right)}{\left[J_0'\left(\frac{k_{0n}}{a} \rho\right)\right]^2} e^{-\frac{D}{a^2} t} \int_0^a N_m(\rho', 0) J_0\left(\frac{k_{0n}}{a} \rho'\right) \rho' d\rho' \quad (\text{A.2})$$

onde $\frac{1}{\Lambda^2} = \frac{k_{0n}^2}{a^2}$ é o autovalor do problema, J_0 é a função de Bessel de ordem zero do primeiro tipo, e k_{0n} é o n -ésimo zero da referida função. Λ é denominado de comprimento de difusão e para o modo fundamental de difusão, $n = 0$, $\Lambda = \frac{a}{2.4}$. Um resultado imediato é que

$$\frac{\partial N_m}{\partial t} = -\frac{D}{\Lambda^2} N_m$$

Se tomarmos a média sobre a seção transversal do tubo deste resultado obteremos o seguinte expressão

$$\frac{d\bar{N}_m}{dt} = -\frac{D}{\Lambda^2} \bar{N}_m \quad (\text{A.3})$$

onde $\bar{N}_m = \frac{2}{a^2} \int_0^a N_m(\rho, t) \rho d\rho$ é o valor médio da grandeza sobre a seção transversal do tubo. Este resultado foi utilizado por ocasião dos modelos zero-dimensionais.

Consideraremos agora o problema da difusão ambipolar. Existem situações em que o fluxo de partículas carregadas, elétrons e íons positivos em nosso caso, poderá ocorrer de maneira não isolada, de forma que o efeito da interação elétrica entre as partículas carregadas é responsável pelo fluxo destas partículas. Este fenômeno torna-se apreciável tão logo a densidade de partículas carregadas atinja um certo valor, que como veremos, será função de grandezas que caracterizam o plasma, tais como a densidade eletrônica e da temperatura das espécies. Este fenômeno, isto é, a difusão de partículas carregadas em direção as paredes, sendo governado pela interação elétrica entre as partículas que se difundem, é denominada de difusão ambipolar. Fisicamente este fenômeno está ligado ao fato do coeficiente de difusão livre dos elétrons,

$$D_e = \frac{k_B T_e}{m_e \langle v_e^m \rangle} \quad (\text{A.4})$$

ser muito maior do que o coeficiente de difusão livre dos íons, sendo esta relação válida ainda que ambas as espécies estejam a mesma temperatura, fato este devido a reduzida massa do elétron em

relação a massa do íon. Como consequência desta diferença nos fluxos em direção as paredes será criada uma separação de cargas e como consequência o estabelecimento de um campo elétrico devido a carga espacial. Uma vez que seja estabelecido este campo elétrico, este atuará de tal forma a reduzir o fluxo eletrônico e aumentar o fluxo dos íons. Uma situação de regime será atingida quando tivermos a igualdade de fluxos, isto é, para um plasma com N espécies iônicas, temos que

$$\vec{\Gamma}_e = \sum_{j=1}^N \vec{\Gamma}_i \quad (\text{A.5})$$

onde $\vec{\Gamma}_e$, $\vec{\Gamma}_i$ representam os fluxos dos elétrons e dos íons, respectivamente.

Para estabelecermos, de maneira quantitativa, as condições em que o transporte difusivo de partículas seja governado pelo campo ambipolar, escreveremos a expressão para o fluxo de partículas, conforme a Eq.(1.50),

$$\vec{\Gamma}_i = n_j \mu_j \vec{E}_a - D_j \nabla n_j - D_j^T \nabla T_j \quad (\text{A.6})$$

onde D_j , D_j^T são os coeficientes de difusão ordinária e da termo-difusão. O primeiro termo do lado direito desta equação foi acrescentado na expressão do fluxo para considerar o efeito da interação entre as partículas carregadas, sendo μ_j , a mobilidade da espécie ionica em questão, e $\vec{E}_a$, o campo ambipolar criado. A condição em que a difusão ambipolar governa, pode ser obtida segundo uma estimativa da ordem de grandeza entre o fluxo devido a força elétrica e o fluxo devido a força de pressão. Segundo a lei de Gauss o campo elétrico é dado por

$$\nabla \cdot \vec{E}_a = -e \frac{n_e - \sum_{j=1}^N n_j}{\epsilon_0}$$

com $\left| n_e - \sum_{j=1}^N n_j \right| \ll n_e$ e desta forma o campo elétrico terá uma intensidade da ordem

$$E_a \approx -eL \frac{n_e - \sum_{j=1}^N n_j}{\epsilon_0} = eL \frac{n}{\epsilon_0}$$

onde L é uma dimensão característica do plasma. A força elétrica por unidade de massa poderá ser escrita como $f_E = \frac{eE_a}{m} \approx \frac{e^2 n L}{m \epsilon_0}$. Por outro lado, a intensidade da força de pressão, por unidade de massa

pode ser avaliada segundo a Eq.(A.6)

$$f_p = \frac{v_{ea} \Gamma_j}{n_0} = \frac{1}{m} |\nabla n_j k T_0| \approx \frac{n_j k T_0}{m n_0 L}$$

Para que o efeito do campo ambipolar seja apreciável devemos satisfazer a condição, $f_E \gg f_p$, e esta condição implica que

$$L \gg \frac{\epsilon_0 k T_j}{n_0 e^2} = \lambda_D^2 \quad (\text{A.8})$$

onde λ_D^2 é o comprimento de Debye, Eq. (2.1). A relação dada pela Eq.(A.8) estabelece a condição em que o transporte difusivo de partículas carregadas é controlado pela difusão ambipolar. Aplicando a relação para LVC que analisamos nestes trabalho, e utilizando valores típicos para a densidade e temperatura eletrônicas, $n_e \approx 10^{13} \text{ cm}^{-3}$, $T_e \approx 0.5 \text{ eV}$, no período da pós-luminescência, construímos as curvas que estão mostradas na Fig.(A.1). Tendo em vista que, $1 \text{ cm} \leq L \leq 10 \text{ cm}$, a condição Eq.(A.8) será sempre satisfeita. Conforme ilustrado na Fig.(A.1) Para a construção da Fig. (A.1), utilizamos a seguintes expressão para o comprimento de Debye

$$\lambda_D = 1051.4 \left[\frac{T_e T_g}{n_e (T_e + T_g)} \right]^{\frac{1}{2}} \text{ cm} \quad (\text{A.9})$$

para a densidade em cm^{-3} e as temperatura em eV . A Eq.(A.9) é uma expressão mais geral para a Eq.(A.8) no sentido considerarmos diferentes temperaturas para elétrons e íons.

Expressão para o Campo Ambipolar

No desenvolvimento do modelo para a cinética do LVC utilizamos uma expressão para o fluxo ambipolar. Esta expressão foi obtida, igualando-se os fluxos dos elétrons com o somatório do fluxos dos íons. Desta forma, para o fluxos dos elétrons, temos

$$\bar{\Gamma}_e = -n_e \mu_e \bar{E}_a - D_e \nabla n_e - D_e^T \nabla T_e \quad (\text{A10a})$$

e para o fluxo dos íons, de modo semelhante

$$\bar{\Gamma}_j = n_j \mu_j \bar{E}_a - D_j \nabla n_j - D_j^T \nabla T_g \quad (\text{A10b})$$

Utilizando a Eq. (A.5) e a hipótese adicional, (Cherrington B. E., 1980),

$$\frac{\nabla n_e}{n_e} = \frac{\nabla n_j}{n_j}$$

além de observarmos que $n_e \mu_e + \sum_{j=1}^N n_j \mu_j \approx n_e \mu_e$, resolvemos então o sistema formado pelas Eqs.(A.10)

e Eq. (A.5) e obtemos a seguinte expressão para o fluxo eletrônico

$$\bar{\Gamma}_e = -D_e^A \nabla n_e - \sum_{j=1}^N D_j^T (\nabla T_e + \nabla T_g) \quad (\text{A.11})$$

onde o coeficiente de difusão ambipolar para o elétrons é dado por

$$D_e^A = \frac{1}{n_e} \sum_{j=1}^N n_j D_j^A \quad (\text{A.12})$$

e o coeficiente de difusão ambipolar para os íons dado por

$$D_j^A = D_j \left[1 + \frac{T_e}{T_g} \right] \quad (\text{A.13})$$

Para o fluxo dos íons encontramos a seguinte expressão

$$\bar{\Gamma}_j = -D_j^A \nabla n_j - D_j^T (\nabla T_e + \nabla T_g), \quad (\text{A.14})$$

e para o campo ambipolar,

$$\bar{E}_a = \frac{-D_e \nabla n_e + \sum_{j=1}^N D_j \nabla n_j}{n_e \mu_e + \sum_{j=1}^N n_j \mu_j} + \frac{-D_e^T \nabla T_e + \sum_{j=1}^N D_j^T \nabla T_g}{n_e \mu_e + \sum_{j=1}^N n_j \mu_j} \quad (\text{A.15})$$

Figura (A.1). Variação radial do comprimento de Debye durante o período da pós-luminescência. Dados utilizados do LVC de 60mm de diâmetro.

Apêndice B

Mobilidade, Coeficientes de Difusão, Condutividade Térmica e Pressão de Vapor

Neste apêndice apresentamos os valores numéricos para os coeficientes de transporte que utilizamos para os cálculos realizados neste trabalho. Do ponto de vista do cálculo teórico, estes coeficientes podem ser obtidos utilizando o formalismo de Chapman e Enskog, (Chapman S. e Cowling T. G., 1970), ou Hirschfelder, Curtiss e Bird, (Hirschfelder J. O. et al., 1954), em termos de um certo conjunto de funções de base, denominado de polinômios de Sonine. Os coeficiente são obtidos como razões entre determinantes cujos elementos são formados a partir dos polinômios de Sonine e certas integrais denominadas de integrais colisionais, onde por sua vez, para resolver estas integrais necessitamos dos potenciais interatômicos. Por brevidade, utilizamos para os coeficientes de transporte os valores medidos experimentalmente.

Mobilidade.

A mobilidade μ dos íons atômicos, tanto para o hélio como para o neônio, assim bem como de seus íons moleculares estáveis são apresentados na Tab. (B.1). A mobilidade do íon do cobre também é apresentada para os casos de interesse para este trabalho, isto é, quando o gás de fundo é o hélio e quando o gás de fundo é o neônio.

Uma fórmula de redução, (McDaniel E. W., 1964), possibilita relacionar as mobilidades reduzidas μ^* para os valores de pressão e temperatura utilizados em nossos modelos.

$$\mu = \mu^* \left(\frac{n_g^*}{n_g} \right) \left(\frac{273}{T_g} \right)^{\frac{1}{2}} \quad (\text{B.1})$$

íon	gás de fundo	$\mu^* (cm^2V^{-1}s^{-1})$	referência
He^+	He	10.7	*
He_2^+	He	16.2	*
Ne^+	Ne	4.1	*
Ne_2^+	Ne	6.5	*
Cu^+	He	23.0	*
Cu^+	Ne	9.0	*

Tabela. (B.1) Mobilidade reduzida dos íons. (300 K e $2.683 \times 10^{-19} cm^{-3}$). * (McDaniel E. W., 1964)

A mobilidade do íon do cobre em He e Ne foi estimada com base na Fig.(9.9.4) da referência (McDaniel E. W., 1964), com base na dependência funcional da mobilidade dos íons de metais alcalinos com o número de massa.

Coefficientes de difusão dos íons.

A partir do conhecimento da mobilidade de uma determinada espécie iônica calculamos o coeficiente de difusão associada à esta espécie, utilizando a relação de Einstein,

$$D_i = \frac{k_B T_g}{e} \mu_i \quad (B.2)$$

Defini-se tempo característico de difusão, τ_D , através da seguinte relação,

$$\tau_D = \left[\frac{D}{\Lambda^2} \right]^{-1} \quad (B.3)$$

Fisicamente, podemos verificar com a ajuda da Eq.(A.2), que o tempo de difusão corresponde ao tempo necessário para que a densidade inicial de partículas atinja um valor de $1/e$ do seu valor inicial. A Tab. (B.2) é construída para valores típicos do LVC com diâmetro de 60 mm para o caso de Ne-Cu e para o laser venus, (Kushner M. J., 1981), de 15W, de 25.4 mm de diâmetro, para a mistura de He-Cu. O comprimento de difusão é tomado como $\Lambda = a/2.4$, onde a é o raio do tubo de descarga e 2.4 é o valor aproximado para o primeiro zero da função de Bessel de ordem zero. Para o caso do laser venus, utilizamos uma pressão de 9 Torr e uma temperatura média do gás igual a temperatura da parede do tubo, (1450°C). Para o laser com diâmetro $d = 60$ mm, a pressão utilizada foi 32 Torr e a temperatura média de 1500°C. O coeficiente de difusão ambipolar é calculado em ajuda da Eq.(A.10).

íon	$D_i^*(cm^2s^{-1})$	$D_i(cm^2s^{-1})$	$\tau_D(s)$	$D_a(cm^2s^{-1})$	$\tau_a(s)$
He^+	1.59	337	8.3×10^{-4}	1180	2.4×10^{-4}
He_2^+	2.41	510	5.5×10^{-4}	1785	1.6×10^{-4}
Ne^+	6.25×10^{-1}	37.8	4.1×10^{-2}	132	1.2×10^{-4}
Ne_2^+	9.92×10^{-1}	60.0	2.6×10^{-2}	210	7.4×10^{-3}
Cu^+	3.42	724	3.9×10^{-4}	2534	1.1×10^{-4}
Cu^+	1.38	83.2	1.9×10^{-2}	291	5.4×10^{-3}

Tabela (B.2). Valores típicos do coeficiente de difusão, tempo de difusão ordinária e ambipolar para o laser de d=60 mm e para o laser venus, d=2.54cm. Consideramos uma temperatura eletrônica média de $T_e = 0.5 eV$ para a pós luminescência.

Coeficientes de difusão para espécies neutras.

O coeficiente de difusão para a difusão ordinária das espécies neutras (átomos do estado fundamental e no estado metaestável) foi estimado utilizando a expressão obtida pela teoria de Chapman e Enskog utilizando um potencial do tipo esfera rígida,

$$D = \frac{k_B T_g}{\mu_{ij} < v_{ij}^m >} \quad (B.4)$$

onde a frequência de colisão $< v_{ij}^m >$, segundo as Eqs. (2.31) e (2.28), pode ser escrita como:

$$< v_{ij}^m > = 10^2 \sigma_{ij}^m n_g \sqrt{\frac{8k_B T_g}{\pi \mu_{ij}}} \quad (B.5)$$

onde σ_{ij}^m , medida em cm^2 , é a seção de choque para a transferência de momento linear entre os dois átomos. Os valores dos coeficientes de difusão reduzidos, seções de choque e tempo de difusão estão na Tab.(B.3). O valor do coeficiente de difusão para condições de nossas simulações também se relaciona com o valor reduzido, através da fórmula de redução, (McDaniel E. W., 1964),

$$D_j = D_j^* \left(\frac{760}{p_g} \right) \left(\frac{T_g}{273} \right)^{\frac{1}{2}} \quad (B.6)$$

Átomo	Gás	$D^*(cm^2s^{-1})$	$D(cm^2s^{-1})$	$\sigma_{12}^m(10^{-14}cm^2)$	$\tau_D(10^{-3}s)$	Ref.
<i>He</i>	<i>He</i>	125×10^0	265.2	2.00×10^{-1}	1.06	*
<i>He_m</i>	<i>He</i>	9.97×10^{-1}	211.5	2.50×10^{-1}	1.33	*
<i>Cu, Cu_m, Cu*</i>	<i>He</i>	1.01×10^{-1}	22.5	4.56×10^{-1}	12.45	**
<i>Ne</i>	<i>Ne</i>	4.57×10^{-1}	27.7	3.22×10^{-1}	56.41	**
<i>Ne_m</i>	<i>Ne</i>	2.14×10^{-1}	13.0	5.21×10^{-1}	120.2	***
<i>Cu, Cu_m, Cu*</i>	<i>Ne</i>	2.89×10^{-1}	17.5	2.60×10^{-1}	89.3	****

Tabela (B.3). Valores típicos do coeficiente de difusão, e tempo de difusão ordinária dos átomos neutros para ambos os lasers. Referências: * (McDaniel E. W., 1964), ** (Gray D. E., 1972), *** (Phelps A. V., 1959), **** (Cho Y. S. et al., 1984).

Os valores para os coeficientes de difusão para os átomos em estados metaestáveis e outros estados excitados, em virtude da ausência de informação experimental, foram considerados iguais ao do átomo de cobre no estado fundamental.

Coeficientes da termo-difusão

Os coeficientes de termo-difusão são calculados utilizando a seguinte expressão

$$D_j^T = D_j \frac{n_j}{T_g} \quad (B.7)$$

Condutividade Térmica

As seguintes expressões são utilizadas para o condutividade térmica do gás inerte

a. Condutividade térmica do *Ne*, (Kestin J. et al., 1984), para o intervalo de $50K < T_g < 3000K$

$$\lambda_{Ne}^T = 1.015 \times 10^{-3} T_g^{0.679} Wm^{-1}K^{-1} \quad (B.8)$$

b. Condutividade térmica do *He*, (Collins D. J. et al., 1965),

$$\lambda_{He}^T = 2.97 \times 10^{-3} T_g^{0.679} Wm^{-1}K^{-1} \quad (B.9)$$

c. Condutividade térmica dos elétrons, (Mitchner M. e Kruger C. H., 1973),

$$\lambda_e^T = \frac{2.4}{1 + 0.71 \frac{\langle v_{ei}^m \rangle}{\langle v_{eg}^m \rangle}} \frac{k_B^2 n_e T_e}{m_e \langle v_{eg}^m \rangle} Wm^{-1}K^{-1} \quad (B.10)$$

É possível fazer uma estimativa do tempo de condução de calor, algo similar ao que foi calculado para a difusão. O tempo de condução de calor corresponde ao intervalo de tempo necessário para que a temperatura atinja o valor de $1/e$ do valor inicial.

Pressão de Vapor do Cobre

A pressão de vapor é estimada utilizando a temperatura da parede como temperatura de referência utilizando a seguinte expressão, (Nesmeyanov A. N., 1963),

$$n_{Cu}^{vapor} = 1.23 \times 10^7 e^{0.0124 T_{parede}} cm^{-3} \quad (B.11)$$

Apêndice C

Equações de Diferenças

As equações de conservação foram aproximadas para equações de diferenças utilizando o esquema proposto por Crank-Nicholson, (Carnahan B. et al., 1969). Desta forma, as soluções serão incondicionalmente estáveis independentemente do tamanho da malha espacial ($\Delta\rho$) e do incremento de tempo (Δt). Segundo este esquema de discretização, as equações para a conservação do número de partículas e para a conservação de energia foram escritas sob a forma geral.

$$A_i^n F_{i-1}^{n+1} + B_i^n F_i^{n+1} + C_i^n F_{i+1}^{n+1} = D_i^n \quad (\text{C.1})$$

onde utilizamos F_i^{n+1} para representar tanto uma densidade parcial de partículas como uma temperatura. Os coeficientes A_i^n , B_i^n , C_i^n e D_i^n podem ser funções de F_i^n , $i = 1, 2, \dots, N_{max} - 1$. Para cada valor de n teremos, segundo a Eq. (C.1) um conjunto de $N_{max} - 1$ equações para $N_{max} + 1$ incógnitas, F_i^{n+1} , $i = 0, 1, \dots, N_{max}$. As equações para os pontos inicial e final, isto é, para $i = 0$ e $i = N_{max}$, são obtidas a partir das condições de contorno. A Fig.(C.1) ilustra a malha utilizada.

Figura C.1. Malha utilizada para discretizar as equações de conservação em coordenadas cilíndricas.

Apresentamos o desenvolvimento da equação para a conservação do número de partículas. Em vista da transformação da equação para a conservação da energia ser mais simples, este não será apresentado aqui. Consideremos equação de conservação de partículas para uma dada espécie neutra, que pode ser escrita como

$$\frac{\partial n}{\partial t} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \rho \Gamma = R_n, \quad (\text{C.2})$$

onde o fluxo é dado por:

$$\Gamma = -D \frac{\partial n}{\partial \rho} - D^T \frac{\partial T}{\partial \rho}. \quad (\text{C.3})$$

Substituindo a expressão para o fluxo na equação de conservação de partículas, obtemos:

$$\frac{\partial n}{\partial t} - D \left(\frac{\partial^2 n}{\partial \rho^2} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial n}{\partial \rho} \right) - \frac{\partial D}{\partial \rho} \frac{\partial n}{\partial \rho} - D^T \left(\frac{\partial^2 T}{\partial \rho^2} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial T}{\partial \rho} \right) - \frac{\partial D^T}{\partial \rho} \frac{\partial T}{\partial \rho} = R_n \quad (\text{C.4})$$

A seguir cada derivada é substituída pela aproximação:

$$\begin{aligned} \frac{\partial n}{\partial \rho} &= \frac{n_{i+1}^{n+1} - n_{i-1}^{n+1}}{4\Delta\rho} + \frac{n_{i+1}^n - n_{i-1}^n}{4\Delta\rho} \\ \frac{\partial^2 n}{\partial \rho^2} &= \frac{n_{i+1}^{n+1} - 2n_i^{n+1} + n_{i-1}^{n+1}}{2(\Delta\rho)^2} + \frac{n_{i+1}^n - 2n_i^n + n_{i-1}^n}{2(\Delta\rho)^2} \\ \frac{\partial T}{\partial \rho} &= \frac{T_{i+1}^n - T_{i-1}^n}{2\Delta\rho} \\ \frac{\partial^2 T}{\partial \rho^2} &= \frac{T_{i+1}^n - 2T_i^n + T_{i-1}^n}{(\Delta\rho)^2} \\ \frac{\partial D}{\partial \rho} &= \frac{D_{i+1}^n - D_{i-1}^n}{2\Delta\rho} \\ \frac{\partial D^T}{\partial \rho} &= \frac{D_{i+1}^{T^n} - D_{i-1}^{T^n}}{2\Delta\rho} \end{aligned}$$

Substituindo cada expressão aproximada para as derivadas na Eq.(C.4), podemos escrever uma equação de diferenças para a equação de conservação do número de partículas

$$A^n n_{i-1}^{n+1} + B^n n_i^{n+1} + C^n n_{i+1}^{n+1} = D^n \quad (\text{C.5})$$

onde:

$$\begin{aligned} A^n &= -\frac{\alpha}{8} \left[D_{i+1}^n + 4 \left(1 + \frac{1}{2i} \right) D_i^n - D_{i-1}^n \right] \\ B^n &= \left[1 + D_i^n \alpha - R_i^n \right] \end{aligned}$$

$$C^n = \frac{\alpha}{8} \left[D_{i+1}^n - 4 \left(1 - \frac{1}{2i} \right) D_i^n + D_{i-1}^n \right]$$

$$D^n = -A_1^n T_{i-1}^n - B_1^n T_i^n - C_1^n T_{i+1}^n - A_2^n n_{i-1}^n - B_2^n n_i^n - C_2^n n_{i+1}^n + R_i'^n,$$

e onde

$$A_1^n = -\frac{\alpha}{4} \left[D_{i+1}^{T^n} + 2 \left(1 - \frac{1}{2i} \right) D_i^{T^n} - D_{i-1}^{T^n} \right]$$

$$B_1^n = \alpha D_i^{T^n}$$

$$C_1^n = \frac{\alpha}{4} \left[D_{i+1}^{T^n} + 2 \left(1 + \frac{1}{2i} \right) D_i^{T^n} - D_{i-1}^{T^n} \right]$$

$$A_2^n = -\frac{\alpha}{4} \left[D_{i+1}^n + 2 \left(1 - \frac{1}{2i} \right) D_i^n - D_{i-1}^n \right]$$

$$B_2^n = [D_i^n \alpha - 1]$$

$$C_2^n = \frac{\alpha}{4} \left[D_{i+1}^n - 2 \left(1 + \frac{1}{2i} \right) D_i^n + D_{i-1}^n \right]$$

$$\alpha = \frac{\Delta t}{(\Delta \rho)^2}.$$

O termo colisional é escrito como a soma de duas componentes: a primeira onde não aparece a densidade de partículas n , e a segunda onde ela aparece:

$$R_i^n = R_i^n + R_i'^n n_i^{n+1}.$$

Por exemplo, se o termo colisional da Eq.(C.1), fosse escrito segundo:

$R = -n_e [Cu] r_{Cu:1 \rightarrow 9}^I + n_e [Cu_1^m] r_{Cu:2 \rightarrow 1}^S$, no caso da Eq.(C.1) representar a equação para a conservação do número de átomos de cobre no estado fundamental, então

$$R_i^n = -(n_e)_i \left(r_{Cu:1 \rightarrow 9}^I \right)_i^n ([Cu])_i^{n+1} + (n_e)_i \left(r_{Cu:2 \rightarrow 1}^S \right)_i^n ([Cu_1^m])_i^n.$$

A Eq. (C.5) é resolvida utilizando-se o método de eliminação de Gauss para cada incremento de tempo

Δt , isto é para cada n .

Apêndice D

Distribuição de Energia para os Elétrons.

Neste apêndice discutiremos sob quais condições o uso da função de distribuição das velocidades de Maxwell pode ser empregada no cálculo das constantes de taxa. A fim de assegurar uma distribuição de Maxwell, a frequência média de colisão elétron-elétron, $\langle v_{ee}^m \rangle$, deve ser elevada o suficiente para termalizar os elétrons. Esta condição é verificada através das relações, (Michtner M. e Kruger C. H., 1973).

$$\frac{m_e \langle v_{eg}^m \rangle}{m_g \langle v_{ee}^m \rangle} \ll 1 \quad (D.1)$$

e

$$\tau \ll \frac{1}{\langle v_{ee}^m \rangle} \quad (D.2)$$

onde τ representa um tempo característico onde ocorre uma variação macroscópica. Além disso, a velocidade de deriva dos elétrons, devido a ação do campo elétrico externo, deve ser menor que a velocidade térmica dos elétrons. Esta condição pode ser expressa pela relação:

$$\frac{eE}{m_e \langle v_{ee}^m \rangle} \ll \left(\frac{8k_B T_e}{\pi m_e} \right)^{\frac{1}{2}}. \quad (D.3)$$

No caso do laser a vapor de cobre com diâmetro $d = 2.54\text{cm}$, e pressão hélio de 9 Torr, a frequência de colisão dos elétrons com os átomos de hélio pode ser calculada segundo a expressão dada por (Fugol I. Y. et al., 1971):

$$\langle v_{eg}^m \rangle = 3.4 \times 10^{11} \left(\frac{P_g(\text{Torr})}{T_g} \right) T_e^{\frac{1}{2}} \text{s}^{-1} \quad (D.4)$$

Vamos agora construir os gráficos para as desigualdades acima e verificar para que períodos do ciclo da descarga estas condições são verdadeiras. A frequência de colisão elétron-elétron pode ser escrita como, (Michtner M. e Kruger C. H., 1973)

$$\langle v_{ee}^m \rangle = 4.09 \times 10^{-6} \frac{n_e}{T_e^{3/2}} \ln \Lambda \quad (\text{D.5})$$

onde $\ln \Lambda = 23 + 1.5 * \ln(T_e(eV)) - 0.5 * \ln(n_e)$. As expressões para a frequência de colisão elétron-elétron, Eq.(D.5) e a frequência de colisão elétron-átomo neutro do gás, Eq.(D.4) são substituídas nas Eqs. (D.1) e (D.3). Após alguma álgebra, podemos escrever as seguintes expressões para a verificação da validade da distribuição de Maxwell.

$$1.5 \times 10^{10} \frac{T_e^2}{n_e \ln \Lambda} \ll 1 \quad (\text{D.6})$$

e

$$5.3 \times 10^{10} \frac{T_e}{n_e \ln \Lambda} \frac{V_d}{L} \ll 1 \quad (\text{D.7})$$

A Fig.(D.1) mostra o tempo de colisão elétron-elétron. Podemos verificar que a condição, Eq.(D.2), é somente satisfeita para $\tau \gg 2.5 \times 10^{-8} s$. A Fig. (D.2) ilustra a condição a ser satisfeita pela expressão, Eq.(D.6). Podemos observar que esta condição será sempre satisfeita. A Fig.(D.3) ilustra a condição expressa pela Eq.(D.7). Podemos observar, neste caso, que durante intervalo de tempo entre $50 \approx 80 ns$, a condição não é satisfeita.

Em vista destas considerações, evidentemente a utilização da distribuição de Maxwell é uma aproximação. Por outro lado, se alguma aproximação não é usada, deveremos resolver a equação de Boltzmann para a cada instante do problema. Então, as seções de choque devem ser integradas sobre esta função de distribuição para obter as constantes de taxa, e este procedimento exigiria um tempo computacional proibitivo.

Figura (D.1) Tempo de colisão elétron-elétron.

Figura (D.2) Razão proposta pela Eq.(D.6)

Figura (D.3) Razão entre a velocidade de deriva e a velocidade térmica

BIBLIOGRAFIA

- [1] Ainsworth M. D. and Piper J. A., Laser systems for photodynamic therapy, em "Phototherapy of Cancer", Harwood, (1989), pp 37-92
- [2] Ainsworth M. D., Coutts D. W. and Piper J. A., "Wavelength extention of copper vapour lasers", Proc. SPIE, vol. 1041, Metal Vapor, Deep Blue Ultraviolet Lasers, pp. 92-103, (1989).
- [3] Bardsley J. N. e Biondi M. A.. Adv. At. Mol. Phys. 6 (1970) p. 2.
- [4] Bates D. R. and Dalgarno A., em "Electronic Recombination, Atomic and Molecular Processes". D. R. Bates (ed). Academic Press. NY, (1962).
- [5] Biondi M. A., "Recombination" in "Principles of laser plasmas." John Wiley & Sons, (1976).
- [6] Biberman, L. M.; Vorobev, V. P. e Yakubov, I. T., "Kinetics of impact-radiation ionization and ". Sov. Phys.- Usp., 15, no 4, pp. 375-394, (1974).
- [7] Bittencourt, J. A. "Fundamentals of Plasma Physics." (1995). 2. ed.
- [8] Bokhan, P. A.; Gerasimov, V. A.; Solomonov, V. I.; e Shcheglov, V. B. "Stimulated emission mechanism of a copper vapor laser.", Sov. J. Quantum Electron. 8 (10), Oct. (1978).
- [9] Borozdin, Y. S.; Smirnov, Y. M. e Sharonov, Y. D. "Measurement of the Cross Sections of the Copper Atoms for Excitation by Electron Impact". Opt. Spectrosc. (USSR), 43 (2) Aug. (1977). pp. 227-228.
- [10] Brau C. A., em "Excimer Laser" C. K. Rhodes (ed). Springer-Verlag NY. (1984).
- [11] Breusova L. N., Radio Engng. Electron. Phys. 10, 1595 (1965).
- [11] Brown D. J. W., "Experimental study of excited state densities in a copper vapor laser," Ph.D. dissertation, Univ. New England, Armidale, Australia, (1988).
- [13] Carman, R. J.; Brown, D. J. W. e Piper, J. A. "A Self-Consistent Model for the Discharge Kinetics in a High-Repetition-Rate Copper Vapor Laser". IEEE J. Quantum Electron., 30, no. 8, Aug. (1994). pp. 1876-1895.
- [14] Carnahan, B.; Luther, H. A. e Wilkes, J. O. "Applied Numerical Methods". John Wiley & Sons., (1969).
- [15] Chapman S. and Cowling T. G. "The mathematical Theory of Non-Uniform Gases." Cambridge University Press. (1970). 3. ed.
- [16] Chen F. C., "Introduction to plasma physics". Plenum Press (1974).
- [17] Cherrington, B. E. "Gaseous Electronics and Gas Lasers", Pergamon Press, (1980).
- [18] Chimenti R. "The Copper Vapor Laser", Ph.D. Thesis. UMI Ann Arbor, Michigan, USA, (1972).

- [19] Cho Y. S., Ernie D. W. and Oskan H. J., "Energy transfer processes in decay neon-copper gaseous plasma" *Phys. Rev. A* 30 (1984) p.1760-1765.
- [20] Collins D. J., Greif R. and Bryson Jr. A. E., "Measurements of the Thermal Conductivity of Helium in the temperatura Range 1600-6700 K". *Int. J. Heat. Mass Transfer.* 8, (1965) p.1209.
- [21] Condon E. U. e Shortley G.H., in "The Theory of Atomic Spectra" Cambrigde Press. (1963).
- [22] Coutts D. W. and Piper J. A., "1 W average power by second harmonic and sum frequency generation from a single medium scale copper capor laser, *IEEE. J. Quantum Electron.*, vol QE-28, pp.1761-1764, (1992).
- [23] Crompton R. W., Elford M.T. and Robertson A. G., *Australian J. Phys.* 23, (1970), p. 667
- [24] Delcroix, J. L.; Ferreira, C. M. e Ricard, A. "Metaestable Atoms and Molecules in Ionized Gases". Table 5.2. in "Principles of laser plasmas", G. Bekefi (ed), John Wiley & Sons, (1976).
- [25] Desoer C. A. and Kuh E. S. "Basic Circuit Theory". McGraw-Hill. (1969).
- [26] Duman E. L. and Smirnov B. M., "Tables of cross Sections of Ion-Atom ressonance charge exchange." *High Temperature.* 12, (1974), p. 431.
- [27] Ecker, G. e Zoller, O. "Thermally Inhomogeneous Plasma Column". *Phys. Fluids*, 7, no.12.Dec. (1964) pp. 1996-2000.
- [28] EGG., Thyatron Catalog. Technical Notes.
- [29] Fisher W., Hühnermann H. and Kollath K. J. , "Die Hyperfeinstruktur der Übergäng $^{65}\text{Cu}, 5s^2S_{\frac{1}{2}} \rightarrow 4p^2P_{\frac{1}{2}}$ und $3d^{10}4p^2P_{\frac{1}{2}} \rightarrow 3d^94s^2m^2D_{\frac{3}{2}}$ und das Quadrupolmomemnt von ^{65}Cu *Zeit. fur Physik*, 194, 417 (1966) e 200, 158 (1967).
- [30] Fon, W. C. e Berrington, K. A. "The elastic scattering of electrons form inert gases II. Neon". *J. Phys. B: At. Mol. Phys.* 14 (1981) pp.323-334.
- [31] Freund, S. R.; Wetzel, R. C.; Shul, R. J. e Hayes, T. R. "Cross-Sections Measurements for Electron-Impact Ionization of Atoms". *Phys. Rev. A.*, 41, 7, (1990), pp. 3575-3595.
- [32] Fu, K.; Jogwich, M.; Knebel, M. e Wiesemann, K. "Atomic Transition Probabilities and Lifetimes for the Cu I Sistem". *Atom. Data Nucl. Data Tab.* G1, (1995). pp. 1-30.
- [33] Fugol I. Y., Grigorashchenko O. N. e Myshkis D. A , *Sov. Phys. JETP.* 33, 227 (1971).
- [34] "Future prospect and applications for UV and VUV lasers", in *Proc. Eng. Found. Conf. NY* (1987), p.14.
- [35] Glasoe G. N. e Lebacqz J. V. "Pulse Generators". McGraw Hill. (1948).
- [36] Golant V. E., Zhilinsky A. P, Sakharov I. E. and Brown S. C. "Fundamentals of Plasma Physics." John Wiley & Sons, NY. (1980).

- [37] Goldstein H., in "Classical Mechanics", A. Wesley. (1980).
- [38] Gray D. E.(ed), "Amer. Instit. Phys. Handbook". Mc.Graw-Hill (1972) pp 2-225 e 7-6.
- [39] Gryzinski M., "Classical theory of electronic and ionic inelastic collisions". Phys. Rev., vol. 115, pp 374-383, July 15. (1959).
- [40] Gurevich A. V. e Pitaenskii L. P., "Recombination Coefficient in a Dense Low-Temperature Plasma". Sov. Phys. JETP. 19, 870. (1964)
- [41] Hargrove, R. S.; Grove, R e Kan, T. "Copper Vapor Laser Unstable Resonator Oscillator and Oscillator Amplifier". IEEE J. Quantum Electron. QE-15, no. 11.Nov. (1979). pp. 1228-1233.
- [42] Hinno E. and Hirschberg J. G. . "Electron-Ion Recombination in Dense Plasma" Phys. Rev. 125 (1962) p. 795.
- [43] Hirschfelder J. O., Curtiss C. F. and Bird R. B., "The Molecular Theory of Gases and Liquids". John Wiley & Sons. Inc. NY., (1954).
- [44] Holstein T., "Imprisonment of resonance radiation in gases". Phys. Rev. 72, (1954). 1212.
- [45] Huestis D. L., Hill R. M., Nakano H. H. and Lorents D. C., "Quenching of Ne*, F*, and F_2^* in Ne/Xe/N F_3 , and Ne/Xe/ F_2 mistures", J. Chem. Phys., 69 (1978) p. 5133-5139.
- [46] Hyman, H. A. "Electron-impact ionization cross section for excited states of the rare gases (Ne, Ar, Kr, Xe), cadmium, and mercury" Phys. Rev. A. 20, no.3 Set. (1979). pp. 855-859.
- [47] Ingraham J. C. and Brown S. C. . "Helium afterglow and the Decay of the electron Energy" Phyx. Rev. 138 (1995) A 1015.
- [48] Kenty C., Easley M. A., and Barnes B. T. "Gas temperature and elastic losses in low pressures mercury - argon discharges". J. Applied Phys. 8, (1951), p. 1006
- [49] Kestin J., Knierim K., Mason E. A., Najaki B., Ro S. T. and Waldman M., "Equilibrium and transport properties of the noble gases and their mixtures at low density", J. Phys. Chem. ref. Data, 13 (1984) pp. 229-305.
- [50] Kopfermann H., in "Nuclear Moments". Academic Press Inc. (1958).
- [51] Koechner W., "Solid-State Laser Engineering", Springer-Verlag, (1976).
- [52] Krall N. A. and Trivelpiece A. W., em "Principles of Plasma Physics". McGraw-Hill. (1973).
- [53] Kull G. M., Solimene N. and Walter W. T., "Modeling of pulsed gas lasers and comparison with experimental results for the copper vapor laser", in Proc. Int. conf. Lasers '79. Orlando, FL:STS, (1979).
- [54] Kushner M. J. and Culick F. E. C., "A model for the dissociation pulse afterglow and laser pulse in the Cu/CuCl double pulse laser," J. Appl. Phys., vol. 51, pp. 3020-3032, (1980).

- [55] Kushner M. J., "A self-consistent model for high repetition rate copper vapor laser," IEEE J. Quantum Electron., vol. QE-17, pp. 1555-1565, (1981).
- [56] Kushner M. J. e Warner B., "Large-bore copper-vapor laser: kinetics and scaling issues". J. Appl. Phys. 54(6). (1983) p.2970.
- [57] Liepmann H. W. and Rosko A., em "Elements of Gasdynamics". J. Wiley (1957).
- [58] Long D. R. and Geballe R., "Electron-Impact Ionization of the $He(2s^3S_1)$ ". Phys. Rev. A 1 (1970) p. 260.
- [59] Massey H. S. W. and Burhop E. H. S., "Electronic and Ionic Impact Phenomena I: Collision of Electrons with Atoms", 2nd ed., Oxford. (1970)
- [60] McDaniel E. W., em "Collisional Phenomena in Ionized Gases". John Wiley & Sons. (1964)
- [61] Mitchell A. C. G. e Zemansky M. W., "Resonance Radiation and Excited Atoms", Cambridge, (1961). pag. 245-250.
- [62] Mitchner M. e Kruger C. H., Jr. "Partially Ionized Gases". John Wiley & Sons, (1973).
- [63] Montague R. G., Harrison M. F. A. and Smith A. C. H., "A measurement of the cross section for ionization of helium by electron impact using a fast crossed beam technique". J. Phys. B: At. Mol. Phys. 17 (1984) 3295-3310
- [64] Nakamura, S. "Applied Numerical Methods in C". Prentice Hall. NJ. (1993). Cap. 13.
- [65] Nesmeyanov A. N., "Vapor Pressure of the Chemical Elements". Amsterdam. Elsevier. (1983).
- [66] Oxford Lasers, "Lineshapes and Coherence of metal vapor laser", Oxford, U. K., tech. note 2, (1989).
- [67] Pasner J. A., "Atomic Vapor laser Isotope Separation". Appl. Phys. B.46 (1988). p.253.
- [68] Phelps A. V., "Absorption Studies of Helium Metastable Atoms and Molecules". Phys. Rev. 99, 1307 (1955)
- [69] Phelps, A. V. "Diffusion, De-excitation, and Three-body Collision Coefficients for Excited Neon Atoms". Phys. Rev. 114, no.4 (1959). pp. 1011-1025.
- [70] Ramo S., Whinnery J. R. and vanDuzer T., "Fields and Waves in Communication Electronics", Wiley NY, (1965).
- [71] Register, D. F. e Trajmar, S. "Differential, integral, and momentum-transfer cross sections for elastic electron scattering by neon: 5 to 100 eV". Phys. Rev. A. 29, 4. Apr. (1984). pp. 1785-1792
- [72] Ritschl R., "Die Hyperfeinstruktur der Bogenlinien und das Kernmoment von Kupfer", Zeits. f. Physik 79 (1932) 1

- [73] Riseberg, L. A.; Parks, W. F. e Schearer, L. D. "Penning Ionization of Zn and Cd by Noble-Gas Metaestable Atoms". Phys. Rev. A. 8, no.4 (1973). pp. 1962-1968.
- [74] Scheibner, K. F.; e Hazi, A. U. "Electron-impact excitation cross sections for transitions in atomic copper". Phys. Rev. A. 35, no.11 June 1, (1987). pp. 4869-4872.
- [75] Seaton M. J., Mon. Notes roy. Astron. Soc. 119 (1959). p.81
- [76] Sharpton F.A., et al, Phys. Rev. A 2, (1970) 1305.
- [77] Shulz G. J. and Fox R. E., "Excitation of Metastable Levels in Helium near Threshold". Phys. Rev. 106, (1957) p. 1179
- [78] Svelto O., "Principles of Lasers", 2 ed. Plenum Press. (1982).
- [79] Tanaba Y., Hara K. and Ueguri S., "Lasing Characteristics of a Large-bore Copper Vapor Laser", SPIE Vol. 1628 Intense Laser Beams (1992) p. 32.
- [80] Tanenbaum B. S., "Plasma Physics". McGraw-Hill. (1967).
- [81] Tenenbaum, J.; Smilanski, I.; Gabay, S.; Levin, L. A.; Erez, G.; e Lavi, S. "Structure of 510.6 and 578.2 nm Copper Laser Lines". Opt. Comm. 32, no.3 March. (1980). pp. 473-477.
- [82] Teubner, P. J. O.; Riley, J. L.; Furst, J. E. e Buckman, S. J. "Total cross sections for the production of metastable neon atoms by electron impact". J. Phys. B: At. Mol. Phys. 18 (1985). pp. 3641-3652.
- [83] Trajmar, S.; Williams. W. e Srivastava, S. K. "Electron-Impact Cross Sections for Cu Atoms". J. Phys. B: Atom. Molec. Phys., 10, no. 16. (1977). pp. 3323-3333.
- [84] Verdeyen J. T., "Laser Electronics", Prentice-Hall. (1981).
- [85] Vitols, A. P. e Oskam, H. J. "Reaction Rate Constant for $Ne^+ + 2Ne \rightarrow Ne_2^+ + Ne$ ". Phys. Rev. A. 5, no. 6 (1972) pp. 2618-2622.
- [86] Walter W. T., Solimene N., Piltch M. and Gould G.. "6C3-Efficient Pulsed Gas discharge lasers." IEEE J. Quantum Electronics, vol. QE-2, N.9, Sep. (1966).
- [87] Wagner S., "Zur Isotopieverschiebung im Cu I-Spektrum", Zeits. f. Physik 141 (1955) 122.
- [88] Warner B. E., Grove R. E. and Anderson R. S., in CLEO, Digest of Technical Papers, (1980) p.80.
- [89] Willet C. S., "Introduction do Gas Lasers: Population Inversion Mechanisms", Pergamomn Press. (1974).
- [90] Winter, N. W.; e Hazi, A U.; "Review of Electron-Impact-Excitation Cross Sections for Copper Atom." Lawrence Livermore National Laboratory. Report no. UCID - 19314. (1982).
- [91] Yariv A., in "Optical Electronics" CBS. College Publishing. (1985).