

الجمهورية الجزائرية الديمقراطية الشعبية
République Algérienne Démocratique et Populaire
وزارة التعليم العالي والبحث العلمي
Ministère de l'enseignement supérieur et de la recherche scientifique

جامعة أحمد درايا - أدرار - UNIVERSITE AHMED DRAIA -ADRAR



Faculté des Sciences et de la Technologie
Département des Sciences de la Matière

Mémoire de fin d'étude, en vue de l'obtention du diplôme de Master en
Physique

Option : Physique Energétique et Energies Renouvelables

Thème

***CALCUL DES SECTIONS EFFICACES ET
COEFFICIENT DE TRANSPORTS DANS
UN PLASMA D'OXYGENE***

Présenté Par :

Mlle. Zahra ELDJOUZI

Devant le jury composé de:

Mr. OMARI Boumediene	Président	MAA	Université Ahmed Draia-Adrar
Mr. HADJADJ Kacim	Examineur	MAA	Université Ahmed Draia-Adrar
Mr. MENNAD Boufeldja	Promoteur	MCB	Université Ahmed Draia-Adrar

Année Universitaire 2019/2020

Remerciements

Au terme de ce travail, avant toute chose, je remercie Allah, le tout puissant, pour m'avoir donnée la force et la patience de réaliser ce don.

Je tiens à exprimer toute ma reconnaissance à mon directeur de recherche **Dr. MENNAD Boufeldja**. Je le remercie infiniment de m'avoir encadré, orienté, aidé et conseillé.

Je tiens à exprimer mes sincères remerciements aux membres du jury de ce mémoire : **Monsieur OMARI Boumediene** qui a accepté de présider le jury de ce mémoire, je le remercie vivement ; **Monsieur, HADJADJ Kacim**, qui m'a fait l'honneur d'examiner ce travail.

J'adresse mes sincères remerciements à tous les professeurs, intervenants et toutes les personnes qui par leurs paroles, leurs écrits, leurs conseils et leurs critiques ont guidé mes réflexions et ont accepté de me rencontrer et de répondre à mes questions durant mes recherches.

À tous ces intervenants, je présente mes remerciements, mon respect et ma gratitude.

DEDICACES

A mes chers parents, pour tous leurs sacrifices, leur amour, leur tendresse, leur soutien et leurs prières tout au long de mes études,

A mes chères sœurs et chers frères pour leurs encouragements permanents, leur appui et leur soutien moral,

A mes chères amies HANNANI Wijdane et M'HAMMEDI Zineb qui ont toujours été là pour moi. Leur soutien inconditionnel et leurs encouragements ont été d'une grande aide.

Que ce travail soit l'accomplissement de vos vœux tant allégués, et le fruit de votre soutien infailible,

Merci d'être toujours là pour moi.

Résumé

Ce travail constitue une étude détaillée sur les paramètres physiques de plasma d'oxygène créée par un décharge électrique à savoir les mécanismes de collision électronique, les sections efficaces, la fonction de distribution d'énergie électronique et les coefficients de transports: coefficients Townsend réduits, coefficient de diffusion, la mobilité et les taux de réactions chimiques, la cinétique chimique implique 11 réactions chimiques avec des énergies de seuil jusqu'à 19.5 eV. Nous avons analysé et étudié l'effet des différentes espèces constituant le plasma comme les espèces métastables qu'ils ont une influence sur les sections efficaces de collision électronique et sur la fonction de distribution d'énergie électronique (EEDF), en fonction de l'énergie électronique moyen, cette étude a été faite dans les conditions de la pression atmosphérique, la température de gaz 300 K, champ électrique réduit 200 Td, ce travail est basé sur la base de donner TRINITI^[36].

Mots clés :Plasma ; Décharge ; EEDF; Modèle; Coefficients de Transports.

Abstract

This work constitutes a detailed study on the physical parameters of oxygen plasma created by an electric discharge, namely the mechanisms of electronic collision, the cross sections, the electronic energy distribution function and the transport coefficients like reduced Townsend coefficients, diffusion coefficient, mobility and rates of chemical reactions, the chemical kinetics involves 11 chemical reactions with threshold energies up to 19.5 eV. We have analyzed and studied the effect of different species constituting the plasma as métastable species that have an influence on the cross sections of electronic collision, and on the electronic energy distribution function (EEDF), depending on the medium electronic energy, this study was made under the conditions of atmospheric pressure, gas temperature 300 K °, reduced electric field 200 Td, this work is based on the basis of giving TRINITI^[36].

Keywords: Plasma; Discharge; EEDF; Model; Transport coefficients.

ملخص

يشكل هذا العمل دراسة تفصيلية حول الخصائص الفيزيائية لبلازما الأوكسجين الناتجة من التفريغ الكهربائي ، و المتضمنة في آليات التصادم الإلكتروني ، والمقاطع العرضية لتلك التصادمات بين مكونات البلازما ، دالة توزيع الطاقة الإلكترونية ، المعاملات الحركية مثل معاملات تاونسند المخفضة ، معامل الانتشار والحركة وسرعة التفاعلات الكيميائية بدلالة الطاقة الإلكترونية ، هذا البحث يتضمن دراسة 11 تفاعل كيميائي يطاقت عتبة تصل إلى 19.5 فولت، من خلاله قمنا بتحليل ودراسة تأثير المكونات المختلفة التي تشكل البلازما مثل المكونات المستقرة التي لها قابلية الانتقال لحالات أكثر استقرارا وتأثيرها على المقاطع العرضية للتصادم الإلكتروني وعلى دالة توزيع الطاقة الإلكترونية (EEDF) ، بدلالة متوسط الطاقة الإلكترونية ، أجريت هذه الدراسة تحت ظروف الضغط الجوي ، درجة حرارة الغاز 300 كلفن ، المجال الكهربائي المخفض 200 Td ، مع استعمال قاعدة بيانات TRINITI^[36]

الكلمات المفتاحية: بلازما , تفريغ , EEDF , معاملات النقل

Table des matières

1. Table des matières

- <i>Introduction générale</i>	1
Chapitre 1	
1. Généralités sur les décharges électriques et les processus chimique dans un plasma.	3
1.1 Introduction	4
1.2 Définition d'un plasma	4
1.2.1 Chocs élastiques et inélastiques.....	4
1.3 Processus chimique dans un plasma	5
1.3.1 Les réactions d'équilibre des espèces neutres.....	5
1.3.2 Réactions des molécules neutres dans des conditions de non-équilibre.....	5
1.3.3 Excitation par impact électronique.....	6
1.3.4 Dissociation des atomes et des molécules	6
1.3.5 Processus d'ionisation.....	6
1.4 Paramètres physiques des plasmas	8
1.5 Classification des plasmas	10
1.6 Décharges électriques à pression atmosphérique	11
1.7 Différents types de décharge électrique pour produire un gaz de plasmas	11
1.7.1 Les décharges électriques silencieuses	11
1.7.2 La décharge électrique surfacique	12
1.7.3 Décharge électrique couronne.....	14
1.8 Loi de PASCHEN	15
1.8.1 Coefficients de Townsend	15
1.8.2 Premier coefficient de Townsend α	16
1.8.3 Second coefficient de Townsend γ	18
Chapitre 2	
2. Modèle physique	20
2.1 Introduction	21
2.2 Fonction de distribution	21
2.2.1 Définition.....	21
2.2.2 Grandeurs moyennes	21
2.2.3 L'équation de Boltzmann	22

Table des matières

2.3	Les équations fondamentales de conservation	23
2.3.1	Équation de continuité	23
2.3.2	L'équation de transfert de quantité de mouvement	24
2.3.3	L'équation d'énergie.....	24
2.4	Approximations.....	25
2.5	Modèle électrique auto cohérent.....	25
2.5.1	Modèle fluide	26
2.5.2	Modèle hybride	26
2.5.3	Modèle microscopique.....	27
2.6	Modèle fluide et approximation du champ local.....	27
Chapitre 3		
3.	<i>Sections efficaces de diffusion électronique dans un plasma d'oxygène.....</i>	29
3.1	Introduction.....	30
3.2	Résultats et Discussion.....	32
3.3	Conclusion	38
Chapitre 4		
4.	<i>La fonction de distribution électronique et les coefficients de transports dans un plasma d'oxygène.</i>	39
4.1	Introduction.....	40
4.2	Fonction de distribution d'énergie électronique (EEDF)	41
4.3	Coefficients de transports.....	42
4.4	Conclusion	45
5.	Conclusion générale	46
6.	ANNEXES	49
6.1	Liste des tableaux.....	49
6.2	Liste des figures.....	49
7.	Bibliographie	50

Introduction générale

Le champ d'applications des plasmas devient de plus en plus vaste et suscite plusieurs champs d'application, que ce soit dans le domaine de la combustion, dépôt de couches minces, de l'aérodynamique où l'on cherche à réduire la traînée d'un avion par création d'un vent ionique, ou encore dans le domaine de l'électromagnétisme (modification de la signature radar d'un appareil). D'autre part, la décharge d'oxygène a été appliquée à de nombreuses applications incluent le traitement des déchets, les applications biomédicales et la transformation des aliments. Un plasma est un gaz ionisé. Il est constitué en général d'électrons, d'ions, d'espèces atomiques ou moléculaires neutres et des photons ; les plasmas sont souvent présentés comme un 4^{ème} état" de la matière, faisant suite aux phases solide, liquide et gazeuse.

La plupart des plasmas de laboratoire connus sous le nom de plasmas faiblement ionisés, et d'autres types des plasmas sont entièrement ionisés. La différence entre les deux types est le rapport d'ionisation. Dans un plasma entièrement ionisé, le rapport du nombre d'atomes ionisés au nombre total d'atomes constituant le gaz approche 100%, et compose d'environ 100% de plasma et d'une fraction négligeable de gaz dans son état fondamentale. D'autre part, les plasmas faiblement ionisés ont un faible taux d'ionisation, qui est typiquement inférieur à 10%; chaque collision entre les espèces constituant le plasma, il y a un échange de quantité de mouvement et d'énergie, l'énergie échangée dans ces collisions inférieures à l'énergie d'ionisation.

Le but principal de ce travail est de comprendre les paramètres physiques de plasma d'oxygène créés par un décharge électrique à savoir les mécanismes de collision électronique , Les sections efficaces des collisions électroniques avec l'état fondamental O_2 , la fonction de distribution d'énergie électronique (EEDF) et Les coefficients de transports , le code utilisé est le BOLSIG+ avec la base des données TRINITI^[36],

Le manuscrit est organisé de la façon suivante :

- ✓ Le premier chapitre présente les notions de base sur les décharges électriques et généralités sur les plasmas et les différents types de processus de collisions électroniques de l'oxygène, et on va voir les paramètres physiques des plasmas.
- ✓ Le deuxième chapitre décrit l'équation de Boltzmann et les équations qui caractérisent l'évolution du plasma dans une décharge, et nous exposerons les différents modèles électriques d'une décharge.
- ✓ Dans le troisième chapitre, nous allons faire une étude paramétrique des ensembles des sections efficaces de diffusion électronique de plasma d'oxygène avec 11 réactions impliquant 08 espèces atomiques moléculaires, utilisant la base de données TRINITI^[36], avec des données d'entrée du code numérique BOLSIG+.
- ✓ Le quatrième chapitre situe le rôle de la fonction de distribution d'énergie électronique EEDF (Electron Energy Distribution Function) du plasma d'oxygène dans les mêmes conditions que dans le chapitre 03 et les résultats relatifs aux paramètres de transport électronique.

Chapitre 1

1. Généralités sur les décharges électriques et les processus chimique dans un plasma.

Dans ce chapitre, nous avons présenté en première partie, les notions de base sur les décharges électriques et généralités sur les plasmas ainsi que les Processus chimiques créés dans un gaz ionisé et les interactions entre les électrons et les particules constitues le plasma, plusieurs processus peuvent se produire comme l'excitation, l'ionisation, l'attachement, radiative et la recombinaison. La seconde partie, l'accent est mis sur les paramètres physiques des plasmas.

1.1 Introduction

La décharge électrique est un phénomène physique se produisant dans les gaz lorsqu'on leur applique un champ électrique suffisamment intense. Ce gaz devient alors plus ou moins conducteur. Les décharges dans les gaz sont dues à l'apparition d'électrons et d'ions libres. La production d'un état plasma dans un gaz se fait à travers l'ionisation des molécules du gaz par les électrons libres accélérés grâce au champ électrique. En l'absence d'un tel champ électrique, l'état de plasma disparaît car les particules chargées s'éliminent par recombinaison, diffusion sur les parois et par capture des électrons libres par les atomes ou molécules électronégatifs ^[1]. Les décharges électriques peuvent être classifiées suivant différents critères : la pression, la caractéristique courant-tension, la nature du gaz, la configuration des électrodes, ...etc. ^[2].

1.2 Définition d'un plasma

Le plasma est défini comme étant un gaz partiellement ou totalement ionisé. Ce terme a principalement été utilisé, à ses débuts, dans le domaine de l'astrophysique pour définir un état de la matière contenant des espèces chargées positivement ou négativement, mais présentant au global un état neutre. Cet état de la matière peut être généré en fournissant de l'énergie à un gaz, en appliquant par exemple un champ électrique intense conduisant à l'ionisation du gaz. L'ionisation du gaz résulte du transfert de l'énergie cinétique des électrons aux molécules neutres du gaz.

1.2.1 Chocs élastiques et inélastiques

Les collisions élastiques, qui ne participent pas directement à l'activation du gaz, mais qui sont responsables de la conduction et de la diffusion de la chaleur.

Les collisions inélastiques qui sont responsables de changements au niveau de l'énergie interne des molécules, de la nature des particules (ionisation, dissociation, attachement électronique, ...etc.), en fonction de l'énergie cinétique des électrons.

- On distingue alors les phénomènes :

a) Excitation : lorsqu'un atome a acquis suffisamment d'énergie pour qu'un des électrons passe à un niveau (orbital) d'énergie plus élevé.

L'atome passe alors de son état *fondamental* à un état *excité* suivant les processus suivantes:

b) Ionisation : dans ce cas, l'énergie absorbée par l'atome lors de la collision est suffisante pour qu'un de ses électrons soit arraché de l'attraction du noyau. L'électron est alors soit attaché à un autre atome (attachement), soit il s'éloigne à l'infini.

c) Recombinaison : la recombinaison est le phénomène d'attachement de particules lorsqu'un ion positif rencontre un électron ou lorsque deux ions de signes contraires se rencontrent.

d) Détachement : c'est le phénomène qui se produit lorsqu'un ion perd son électron supplémentaire.

1.3 Processus chimique dans un plasma

La cinétique chimique d'un plasma à l'état non équilibre basé sur les collisions, impliquant des électrons, des ions et l'excitation des particules. En général, nous sommes concernés par :

- a) Processus chimiques initiaux de plasma impliquant des électrons,
- b) Processus chimiques secondaires de plasma impliquant des ions moléculaires et atomiques,
- c) Les réactions chimiques impliquant des atomes et des molécules neutres

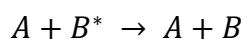
Les processus impliquant des électrons sont toujours associés à une section efficace de diffusion microscopique. Ils sont utilisés pour résoudre l'équation de Boltzmann, Les vitesses des réactions sont différentes.

1.3.1 Les réactions d'équilibre des espèces neutres

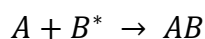
Ce sont les réactions des espèces à l'état fondamental de créations ou de recombinaisons, les produits peuvent être inclure des espèces excitées.

1.3.2 Réactions des molécules neutres dans des conditions de non-équilibre

Considérons une recombinaison de particules lourdes non chargées donnant des molécules

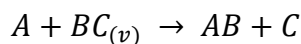


ou aussi



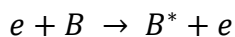
La réaction du premier type indique un transfert d'énergie, de l'énergie interne vers l'énergie cinétique. Pour de tels processus, les expressions de taux des réactions peuvent devenir assez compliquées, pour les particules excitées à l'état de vibration le taux dépend de la température de gaz et aussi de la température de vibration T_{vib} , si $T_{vib} > T_g$ les valeurs des taux rapprochées d'une simple valeur constante, donc l'énergie de vibration joue un rôle important avec les espèces à l'état de vibration pour accélérer la réaction.

Par exemples la réaction :



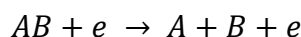
Cette réaction est plus rapide que la réaction suivante : $A + BC \rightarrow AB + C$

1.3.3 Excitation par impact électronique

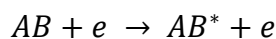


Ce type des réactions d'excitation des particules pour la combustion de plasma chaud.

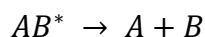
1.3.4 Dissociation des atomes et des molécules



Au niveau microscopique, ces réactions passent souvent que par des étapes



suivi par:

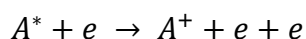


1.3.5 Processus d'ionisation

1) Ionisation par impact électronique



L'espèce A est un atome à l'état non excité, l'énergie électronique sont assez élevés, mais les niveaux d'excitation des espèces neutres sont modérés, ainsi dans la décharges thermiques et énergétiques intenses; la réaction:

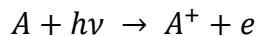


dépend de la densité électronique et la densité de gaz : $n_e \gg n_0$ et/ou $n_{A^*} \gg 0$

2) Ionisation par collision des particules lourdes

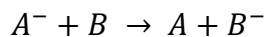
Celles-ci peuvent avoir chaque fois que l'énergie de collision dépasse le potentiel d'ionisation, la probabilité de ces processus augmente lorsque les molécules sont excitées par vibration, on parle d'ionisation PENNING ce type d'ionisation est possible seulement si la molécule a un seuil d'ionisation plus bas que l'énergie interne d'un atome dans un état excité.

3) Photo-ionisation



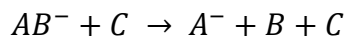
La photo-ionisation est un processus important dans les plasmas thermiques, les photons peuvent être un sous-produit des réactions

4) Réactions ion-molécule



L'espèce A peuvent être comme un espace charge ou un électron d'être un électron.

Ainsi que les processus de décomposition thermique suivant:

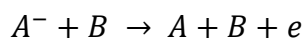


A l'équilibre, les réactions ion-molécule n'est pas importante aux changements de température.

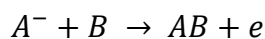
Pour les simulations numériques, les taux sont généralement supposés constants. Ceci s'explique par la forme simple des sections efficaces. par contre les réactions ions-ions de type $A^- + B^+ \rightarrow AB$ ont un taux beaucoup plus élevé que les réactions impliquant des molécules non chargées, c'est-à-dire d'un facteur 2 ou plus. Cela est dû à la forte traction de forte attraction de Coulomb.

5) Détachement d'électrons

Après les processus d'ionisation directe par impact électronique, des réactions comme:



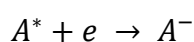
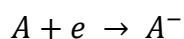
où



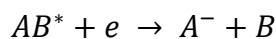
Sont des sources secondaires d'électrons, après une processus d'ionisation directe.

6) Attachement d'électrons:

Ce processus comme un transfert de charge électrique de l'espèce A ou A^* , l'espèce résulte est une espèce chargé A^-

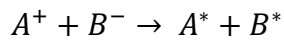


Au deuxième réaction, si la molécule A est composite, le résultat est un espèce chargé A^- avec une énergie important pour la dissociation, comme la processus de la forme :

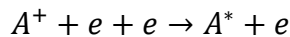
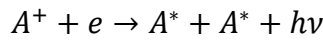


7) Recombinaison

Ce sont des processus où les particules chargées positives et négatives se combinent en espèces neutres comme de suite:



Les processus importants lorsque la particule négative est un électron comme :



8) Ionisation de surface

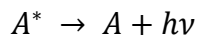
L'ionisation de surface créée par l'impact électronique, ionique ou photonique, ou par chauffage de surface.

9) Collision avec les parois

Des réactions chimiques d'espèces ou de radicaux excités avec l'environnement.

10) Photo Processus

Le rayonnement spontané créé dans un plasma suivant les réactions de type:



A^* est un espèce à haut énergie et $h\nu$ désigne les ondes électromagnétiques. Dans les simulations, ce processus est associé à des pertes d'énergie.

1.4 Paramètres physiques des plasmas

Tous les plasmas n'ont pas les mêmes caractéristiques et peuvent être ainsi classifiés en fonction de certains paramètres précis. Ces paramètres sont essentiellement :

Densité électronique : la densité électronique n_e est le nombre d'électrons libres par unités de volume (cm^{-3}).

a) Taux d'ionisation

Le taux d'ionisations τ_i représente le rapport du nombre d'électrons libre n_e sur le nombre de particules totales $n_e + N$, où N est le nombre de particules neutres par unité de volume.

Le taux d'ionisation est alors donné par :

$$\alpha = \frac{n_e}{n_e + N} \quad (1.1)$$

Si $\alpha < 10^{-4}$ on parle d'un gaz faiblement ionisé (les principales interactions sont de type électrons-particules neutres), et si $\alpha > 10^{-4}$, le gaz est fortement ionisé (interactions de type électrons-électrons ou électrons-ions).

b) Température électronique

La température T caractérisant la distribution de *MAXWELL – BOLTZMANN* des particules s'exprime normalement en Kelvin ($^{\circ}K$). Cependant, en physique des plasmas, on indique volontairement la température en électron-volt, T_e c'est-à-dire en unités d'énergie.

On passe d'ailleurs, directement, de T à T_e par la relation :

$$\frac{k_B T}{e} = T_e (\text{électron – volt}) \quad (1.2)$$

k_B constante de Boltzmann, T la température en $^{\circ}K$ et e la charge.

La température T_e ne représente que les 2/3 de l'énergie moyenne des particules du plasma:

Si $T_e = 1 \text{ eV}$, la température en Kelvin est d'environ $11600 \text{ }^{\circ}K$ pour une énergie moyenne de $1,5 \text{ eV}$.

b) Libre parcours moyen

Le libre parcours moyen λ correspond à la distance moyenne parcourue par une particule chargée entre deux collisions. Il dépend de la vitesse des particules, ainsi que de la probabilité de collision.

$$\lambda = \frac{v \delta t}{n \delta t} = \frac{1}{N \sigma} \quad (1.3)$$

Cependant cette collision ne conduira à une ionisation de l'atome que si l'énergie cinétique (notée E_c en eV) de l'électron incident est supérieure au potentiel d'ionisation (notée ϵ_i en eV) de cette molécule $E_c > \epsilon_i$.

Dans le cas où le champ électrique E est homogène, l'électron devra parcourir une distance x pour ioniser l'atome :

$$x = \frac{\epsilon_i}{e \times E} \quad (1.4)$$

c) Longueur de Debye

La longueur de Debye λ_D définit la longueur à partir de laquelle le champ électrique Coulombien issue d'une particule chargée est neutralisé par un ensemble de particules de signes opposés dans le volume environnant. Elle est donnée par la relation suivante :

$$\lambda_D = \sqrt{\frac{\epsilon_0 k_B T_e}{n_e e^2}} \quad (1.5)$$

où ϵ_0 est la permittivité du vide, k_B la constante de Boltzmann, n_e la densité électronique et T_e la température électronique ($^{\circ}K$).

$$\varepsilon_0 = 8.84 \times 10^{-12} \text{ F.m}^{-1}, \quad k_B = 1.3806 \times 10^{-23} \text{ J.K}^{-1}.\text{molécule}^{-1}$$

λ_D représente aussi la limite de neutralité électrique du plasma : si λ_D est inférieur aux dimensions du plasma, celui-ci sera globalement neutre.

1.5 Classification des plasmas

A partir des paramètres ci-dessus, il possible alors de distinguer et classier les différents plasmas. La Fig.1.1 propose une classification des différents plasmas en fonction de la densité électronique, de l'énergie électronique et de la longueur de Debye (Hollahan et Bell, 1974) [3]. Cette classification permet alors de ressortir deux grandes catégories de plasmas : les plasmas « froids » et les plasmas « chauds ».

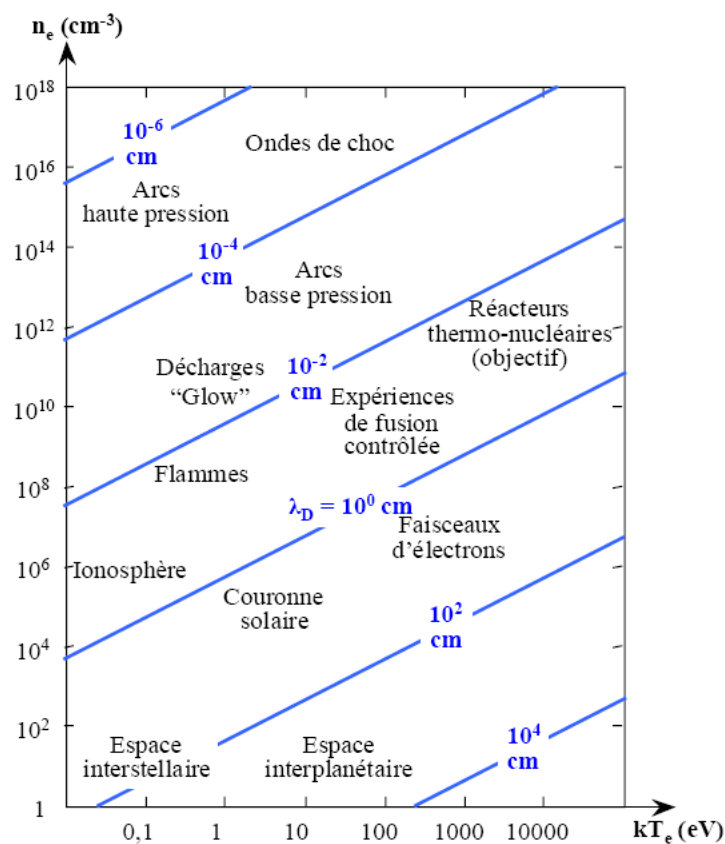


Fig.1. 1 Différentiation des plasmas par l'énergie électronique $k_B T_e$,

la densité électronique n_e et la longueur de Debye λ_D [4]

Les plasmas thermiques sont générés par des torches à plasma ou des arcs. Les températures de ces plasmas sont typiquement comprises entre $5.000 \text{ }^\circ\text{K}$ et $50.000 \text{ }^\circ\text{K}$. Ces plasmas, dont la puissance varie de quelques kilowatts à quelques mégawatts, nécessitent la mise en jeu de courants importants.

Les plasmas hors-équilibre sont généralement produits par décharge luminescente, décharge couronne ou courant inductif radiofréquence. Leur température électronique (1000 °K à 10000 °K) est très supérieure à la température du gaz, proche de l'ambiante (≤ 500 °K). Dans ce type de plasma, la majeure partie de l'énergie n'est pas convertie en chauffage du gaz mais en réactivité chimique par production d'espèces métastables, dissociées et ionisées. Les puissances typiquement mises en jeu pour obtenir un plasma hors-équilibre vont de quelques watts à quelques kilowatts [5].

1.6 Décharges électriques à pression atmosphérique

Ainsi, la caractérisation des plasmas ci-dessus permet de situer les décharges électriques. Les décharges électriques sont alors des plasmas froids et sont générées par une différence de potentiel électrique. Cependant, dans la plupart des cas, les décharges électriques sont établies à basse pression (tube à néon par exemple) car elles sont plus faciles à obtenir et plus stables qu'à pression atmosphérique. La création de décharges électriques à pression atmosphérique constitue un challenge pour le physicien.

Parmi les décharges électriques à pression atmosphérique on trouve les arcs et torches à plasmas, la décharge couronne et la décharge à barrière diélectrique.

1.7 Différents types de décharge électrique pour produire un gaz de plasmas

La méthode la plus courante pour la décharge électrique dans l'air ou l'oxygène pur. Sa génération dépend du matériel diélectrique, de la configuration des électrodes, de la source d'énergie ... etc., et peut être réalisée par différents types de décharges :

- a) Décharge silencieuse.
- b) Décharge surfacique.
- c) Décharge couronne pulsée.
- d) Décharge « DC streamer corona ».
- e) Décharge superposée, ... etc.

1.7.1 Les décharges électriques silencieuses

Les décharges silencieuses (décharge à barrière diélectrique 'DBD') sont largement utilisées dans l'industrie pour la génération de l'ozone, la dépollution, le traitement des surfaces, le traitement des effluents gazeux, la formation d'excimères....etc. Ce type de décharges est obtenu par insertion d'un matériau à propriétés diélectriques entre les deux électrodes [6]. L'accumulation de charges à la surface de cette barrière diélectrique entraîne une chute de potentiel entre les deux électrodes et évite le passage à l'arc. L'utilisation d'une alimentation alternative est alors

indispensable (de quelques Hz à quelques centaine de kHz) pour éviter que l'accumulation excessive des charges électriques à la surface du diélectrique ne neutralise pas la décharge. Les deux électrodes peuvent être planes ^[7] (géométrie "plan-plan") ou présenter une configuration dissymétrique (décharge couronne).

Le système le plus simple pour obtenir des décharges couronne avec barrière diélectrique est le système pointe-plan, qui a largement été décrit dans la littérature ^[8, 9, 10, 11]. Toutefois, le traitement d'importants débits de gaz contenant des COV , $desNO_x$, $duSO_2$ ou des gaz à effet de serre, requiert le passage à des géométries plus adaptées comme les configurations multipoints-plan ^[12, 13], multi fils-plan, fil-cylindre ^[14].

Ce type de décharge est notamment utilisé dans les tubes d'éclairage (tubes néon, tubes fluorescent), est aussi employé pour le traitement de polluants comme les COV (méthane ^[16], Chlorofluorocarbones ^[15]) ou les NO_x ^[17]. Ces décharges sont caractérisées par un plasma homogène. A basse pression, la technique permet l'utilisation de faibles champs électriques (*del'ordre* $10 V.cm^{-1}$) mais ne doit pas occulter le problème de la limitation du débit massique de gaz à traiter.

1.7.2 La décharge électrique surfacique

La décharge surfacique (DS) est un cas particulier de la décharge silencieuse. Elle est observée, par exemple, dans un dispositif composé d'un arrangement d'une petite électrode (fil, barre) ou plus sur un côté d'une couche diélectrique et d'une électrode plate sur l'autre coté (*voie Fig.1.2 (e)*). Cet arrangement est employé dans les générateurs d'ozone commerciaux.

Le développement d'une DS est déterminé par la distribution non homogène de l'intensité du champ initiale dont la valeur maximale est située à la ligne de jonction triple de contact (la surface de l'électrode, le diélectrique et l'espace de gaz).

Les expériences ^[13] et la simulation ^[18] montrent que la DS se propage par étapes sur le diélectrique durant l'augmentation de la tension. Pendant chaque étape l'accumulation des porteurs de charge sur le diélectrique réduit l'intensité du champ et affaibli la décharge.

Après élévation de la tension, l'étape suivante de décharge se produit. Le processus de diffusion de l'ozone de la région de la décharge surfacique vers l'espace libre garantit le bon rendement ^[19]. L'épaisseur de l'électrode de décharge n'a essentiellement aucun effet sur la longueur du streamer et la production d'ozone. Pour l'oxygène le maximum de la concentration d'ozone et le rendement sont comparables à ceux des générateurs d'ozone DV (décharge

volumique); tandis que dans l'air la production d'ozone et son rendement sont faibles. A hautes densités d'énergies, une destruction presque complète de l'ozone est obtenue par le DS. En principe, la faible tension appliquée et les meilleures conditions de refroidissement favorisent l'utilisation des générateurs d'ozone de décharge surfacique pour obtenir une grande concentration d'ozone.

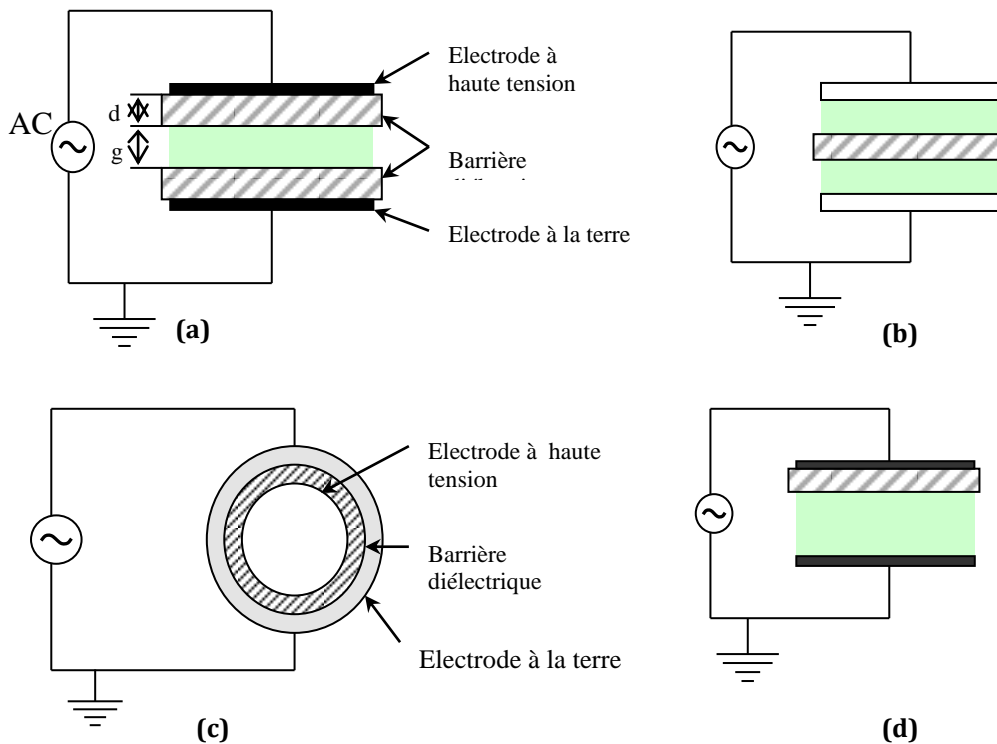
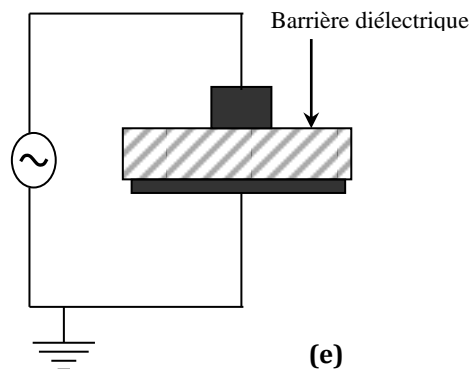


Fig.1. 2 Configurations électrodes de DBD

- (a) DBD à deux barrières
- (b) DBD à une barrière
- (c) DBD cylindrique
- (d) DBD à une barrière
- (e) DBD surfacique



1.7.3 Décharge électrique couronne

Le système de la décharge couronne à courant continu a été étudié comme une méthode alternative à la décharge silencieuse pour la génération de l'ozone. Dans cette décharge il n'y a pas de barrière diélectrique entre les électrodes métalliques [20]. Par cette méthode, on peut obtenir un grand rendement et une grande concentration d'ozone dans un espace inter-électrodes large comparé à celui d'un ozoniseur de décharge silencieuse, cette méthode a quelques avantages pour la production et la maintenance d'un ozoniseur, cependant, une haute tension par rapport à une décharge silencieuse est nécessaire.

Il est difficile d'obtenir une décharge stable. Facilement, Il peut y'avoir un développement d'un arc ou *spark*. La génération d'ozone dépend de la tension appliquée :

Dans le cas d'une tension positive, la décharge apparaît entièrement dans l'espace inter-électrodes.

Dans le cas d'une tension négative, la décharge n'apparaît que près de la région d'électrode active.

Notons que la polarité positive, représentée par le grand volume de décharge, est plus effective pour la génération de l'ozone que la polarité négative.

Parmi les configurations très variées de systèmes d'électrodes utilisés, les plus courantes sont les systèmes pointe/plan, multipoints/plan, couteau/cylindre, fil-plan, fil/cylindre ou cylindre/cylindre (Fig.1.3). La distance inter-électrodes est habituellement inférieure au centimètre.

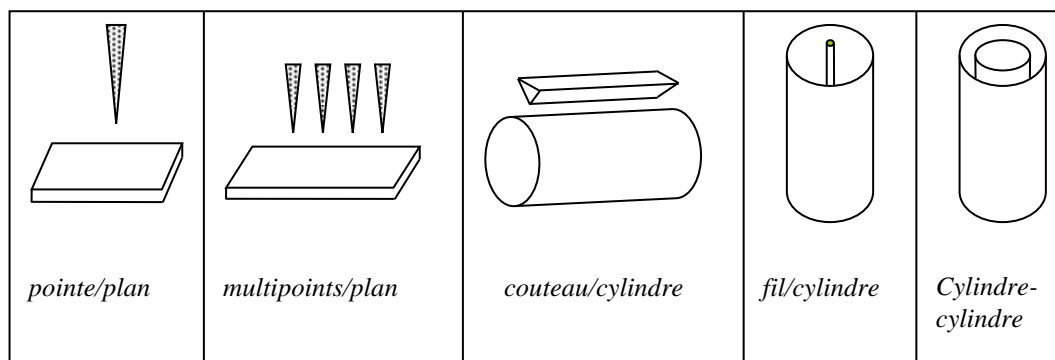


Fig.1. 3 Systèmes d'électrodes couramment utilisés pour la production de décharges couronne.

Du fait de cette dissymétrie, le champ entre les deux électrodes est hétérogène. Les décharges couronne peuvent s'appliquer à des milieux gazeux variés à des pressions allant de quelques centaines de pascals à quelques atmosphères. En revanche, à ces mêmes pressions, les plasmas de gaz rares exempts d'impuretés évolueront pratiquement instantanément en arc.

En outre, les décharges couronnes ont pour avantage d'être faciles à produire dans de bonnes conditions de stabilité et de reproductibilité. Suivant les applications envisagées, la haute tension, qui est généralement appliquée à l'électrode active, peut être pulsée, alternative ou continue de polarité positive ou négative.

L'utilisation d'une alimentation pulsée permet de générer de forts courants pendant des temps très courts (typiquement 500 A pendant 100 ns) et donc d'obtenir, sans passage à l'arc, des électrons de haute énergie, adaptés au traitement de certains polluants. Les tensions de travail habituellement utilisées varient de quelques kilovolts à une trentaine de kilovolts environ tandis que les puissances dépassent rarement quelques kilowatts.

1.8 Loi de PASCHEN

L'un des paramètres les plus importants à prendre en considération durant l'étude des décharges est la tension de claquage du gaz.

Dans la situation d'un champ électrique homogène appliqué à un intervalle gazeux, cette tension de claquage peut être prédite grâce à la loi de PASCHEN qui lie le produit distance inter-électrodes \times pression à cette tension. Une forme analytique de la loi de PASCHEN peut être proposée en considérant les différents phénomènes physiques qui décrivent la décharge ^[21, 22]

1.8.1 Coefficients de Townsend

La loi de PASCHEN décrit le mécanisme de rupture de Townsend dans un gaz situé dans un intervalle (entre les deux électrodes) où les deux paramètres principaux sont la pression et la longueur de cet intervalle appelée distance inter-électrodes.

Comme rappelé précédemment, les électrons jouent un rôle prépondérant dans la création et l'auto-entretien de la décharge. Durant le phénomène, les électrons sont produits soit par ionisation primaire (collisions électrons / molécules), soit par émission secondaire:

- a) α appelé premier coefficient de Townsend .
- b) γ appelé second coefficient de Townsend .

1.8.2 Premier coefficient de Townsend α

Le premier coefficient de Townsend est défini comme étant le nombre d'électrons produits par unité de longueur parcourue dans la direction du champ lors d'une avalanche électronique^[23].

Considérant un parcours infinitésimal dx , la probabilité d'avoir une collision, notée φ_c est donnée par :

$$\varphi_c(dx) = \frac{dx}{\lambda} \quad (1.6)$$

En complément, la probabilité qu'un électron puisse parcourir une distance dx sans collision (libre parcours) notée φ et est alors définie par :

$$\varphi(dx) = 1 - \varphi_c(dx) = 1 - \frac{dx}{\lambda} \quad (1.7)$$

Ainsi pour une succession de parcours infinitésimaux $dx_1, dx_2, dx_3 \dots, dx_n$:

$$\varphi(dx) = (1 - dx/\lambda)^n \quad (1.8)$$

Sachant que :

$$x = ndx \quad (1.9)$$

Nous aurons :

$$\varphi(x) = \left(1 - \frac{x}{n\lambda}\right)^n \quad (1.10)$$

Et pour $n \rightarrow \infty$:

$$\varphi(x) = \exp\left(-\frac{x}{\lambda}\right) \quad (1.11)$$

Pour obtenir une ionisation par impact électronique direct, il est alors nécessaire que l'électron puisse acquérir suffisamment d'énergie cinétique via un libre parcours (sans collision) et qu'une collision intervienne à la fin de son parcours. Ceci nous permettra d'exprimer la probabilité d'un « impact ionisant »^[23] définie par:

$$d\psi(x) = \varphi(x) \times \varphi_c(dx) = \exp\left(-\frac{x}{\lambda}\right) \times \frac{dx}{\lambda} \quad (1.12)$$

Le premier coefficient de Townsend α étant la quantité d'électrons dn créés pendant une avalanche électronique à partir de n d'électrons se déplaçant sur une longueur dx , il vient :

$$dn = n \times \alpha \times dx = n \times d\psi(x) = n \times \exp\left(-\frac{x}{\lambda}\right) \times \frac{dx}{\lambda} \quad (1.13)$$

Ainsi :

$$\alpha = \frac{\exp\left(-\frac{x}{\lambda}\right)}{\lambda} \quad (1.14)$$

En remplaçant l'expression (1.3) de λ et (1.4) de x dans (1.14), et en s'appuyant sur la loi des gaz parfaits $p = Nk_bT$, on obtient l'expression du premier coefficient de Townsend. On peut voir qu'il dépend du champ électrique E ainsi que de la pression p :

$$\alpha = e^{\left(-\frac{\epsilon_i \times \sigma}{e \times k_b \times T \times E} \times p\right)} \times \frac{\sigma}{k_b \times T} \times p \quad (1.15)$$

Dans le cas d'un champ électrique homogène, tel que :

$$E = \frac{V}{d} \quad (1.16)$$

V étant la tension appliquée et d la distance inter-électrodes. On peut réécrire α :

$$\alpha = e^{\left(-\frac{\epsilon_i \times \sigma}{e \times k_b \times T \times V} \times d \times p\right)} \times \frac{\sigma}{k_b \times T} \times p \quad (1.17)$$

En posant :

$$A = \frac{\sigma}{k_b \times T} \quad (1.18)$$

Et :

$$B = \frac{\epsilon_i \times \sigma}{e \times k_b \times T} \quad (1.19)$$

L'expression (1.17) devient :

$$\alpha = A \times p \times e^{\left(-\frac{B}{V} \times d \times p\right)} = A \times p \times e^{\left(-\frac{B}{E/p}\right)} \quad (1.20)$$

Sur la Fig.1.4. est présenté le premier coefficient de Townsend réduit (α/p) en fonction du champ réduit (E/p) pour différents gaz.

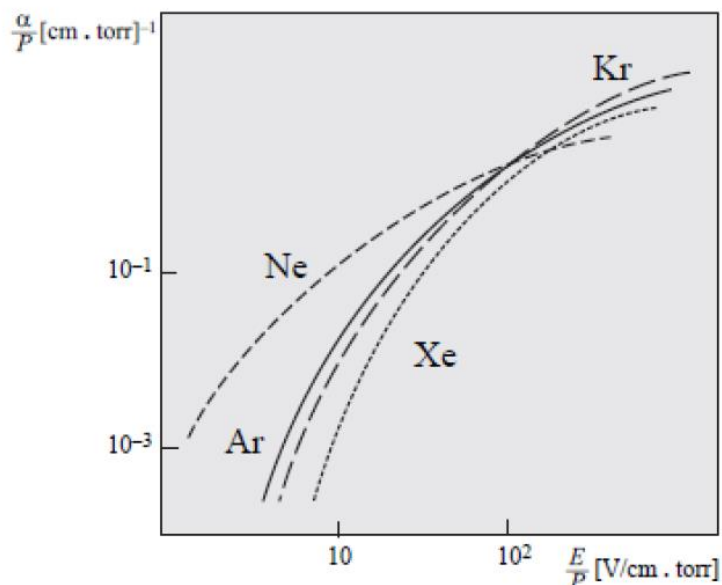


Fig.1. 4 Premier coefficient de Townsend réduit en fonction du champ réduit pour certains gaz rares (néon, krypton, xénon, argon)

1.8.3 Second coefficient de Townsend γ

Le phénomène d'avalanche électronique reposant sur le premier coefficient de Townsend seul ne permet pas de décrire l'ensemble du mécanisme de la décharge électrique.

En effet, ce qui permet d'entretenir la décharge dans l'intervalle gazeux (sans source externe d'électrons-germe) est le phénomène d'émission secondaire. En particulier, sous l'action du champ électrique, les ions sont accélérés vers la cathode et bombardent cette dernière pour en extraire un ou plusieurs électrons secondaires, à la condition que l'énergie cinétique des ions excède la valeur de travail de sortie des électrons du métal. Il est à noter que d'autres mécanismes d'émission secondaire interviennent, soit dans le gaz comme la photo-ionisation, soit au niveau des électrodes comme la photoémission, ou encore l'émission des électrons du métal par action des espèces neutres métastables ^[23].

En considérant le raisonnement précédemment appliqué, si un électron est créé à partir d'un seul électron germe, c'est que ce dernier a parcouru une distance égale au libre parcours moyen ^[25]. α serait égale à $1 / \lambda$.

Nous aurons dans ce cas $e^{\alpha \times d}$ électrons au niveau de l'anode et $(e^{\alpha \times d} - 1)$ ions au niveau de la cathode. Ces ions libèreront $\gamma(e^{\alpha \times d} - 1)$ électrons par émission secondaire^[26]. La condition d'auto entretien de Townsend^[22] est définie par la relation suivante :

$$\gamma(e^{\alpha \times d} - 1) = 1 \text{ avec } e^{\alpha \times d} \gg 1 \quad (1.21)$$

Traduisant qu'à l'issue de l'avalanche, la densité d'électrons germes est au moins égale à celle ayant initié cette avalanche. Si cette condition est satisfaite, la décharge est autonome.

On peut alors exprimer $\alpha \times d$ à partir de la relation (1.21) :

$$\alpha \times d = \ln \left(\frac{1}{\gamma} + 1 \right) \quad (1.22)$$

Ainsi qu'à partir du produit de la relation (1.20) par la distance inter-électrodes d :

$$\alpha \times d = A \times p \times d \times e^{\left(-\frac{B}{E/p}\right)} \quad (1.23)$$

Par identification il devient :

$$\alpha \times d = A \times p \times d \times e^{\left(-\frac{B}{E/p}\right)} = \ln \left(\frac{1}{\gamma} + 1 \right) \quad (1.24)$$

Le second coefficient de Townsend traduit le phénomène d'émission secondaire, qui se limitera par la suite à l'émission d'électrons à partir de la cathode bombardée par les ions issus de l'ionisation primaire. Ce coefficient dépend donc entre autres de la nature du métal des électrodes^[24] et de la nature et de l'énergie des ions incidents.

Chapitre 2

2. Modèle physique

Après avoir décrit l'équation de Boltzmann, dans cette partie nous allons détailler les équations qui caractérisent l'évolution du plasma dans une décharge, et nous exposerons les modèles électriques d'une décharge et du plasma associé comme modèle fluide, modèle hybride, modèle microscopique et les différentes approximations qui ont été faites.

2.1 Introduction

La simulation des processus du plasma est basée sur différentes approches. Le modèle fluide décrit les phénomènes plasmatiques macroscopiques et l'évolution des paramètres statistiques du plasma dans le temps et dans l'espace, nous n'avons pas besoin de connaître les informations sur le comportement des particules individuelles, la fonction de distribution des vitesses décrit le plasma comme dans le cas d'un fluide, par des grandeurs moyennes telles que la densité, la vitesse moyenne dirigée, l'énergie moyenne, l'équation de Boltzmann dans l'espace des vitesses permet de déterminer les phénomènes de transports dans un plasma ^[15,8], ainsi que il est impossible de décrire le mouvement de chaque particule, pour cela, on introduit la notion de la fonction de distribution pour chaque espèce, celle-ci étant obtenue en résolvant l'équation de Boltzmann.

2.2 Fonction de distribution

2.2.1 Définition

Chaque particule du gaz est définie par une vectrice position \mathbf{r} , qui va de l'origine du système de coordonnées vers son centre de gravité et par un vecteur de vitesse \vec{v} . On associe au vecteur position et au vecteur vitesse, deux espaces de coordonnées que l'on regroupe pour former l'espace des phases, à un instant t . Le nombre probable de particules $dN(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)$ se trouvant dans l'élément de volume d^3r situé autour du point \mathbf{r} et est animée d'une vitesse variant dans l'élément de vitesse d^3v . Cet élément est défini par :

$$dN(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) = f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) d^3r d^3v \quad (2.1)$$

Avec :

$f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)$: la fonction de distribution spatiale de densité des particules.

$d^3r d^3v$: l'élément de volume dans l'espace des phases.

2.2.2 Grandeurs moyennes

A partir de la définition précédente, on peut déduire la densité des particules en un point du plasma à un instant donné t :

$$N(\mathbf{r}, t) = \int f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) d^3v \quad (2.2)$$

Comme il a été dit précédemment, le nombre de particules étant important, nous utiliserons des grandeurs moyennes basées sur les fonctions de distribution (moments de l'équation de Boltzmann).

On peut définir la vitesse moyenne d'une particule :

$$\langle v \rangle = \frac{1}{N(\mathbf{r}, t)} \int v f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) d^3v \quad (2.3)$$

la valeur moyenne pour tout autre grandeurs χ :

$$\langle \chi \rangle = \frac{1}{N(\mathbf{r}, t)} \int \chi f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) d^3v \quad (2.4)$$

2.2.3 L'équation de Boltzmann

L'équation de Boltzmann est une équation de continuité de la fonction de distribution dans l'espace des phases $d^3r d^3v$, on peut dire que la variation de la fonction de distribution dans l'élément de volume dans l'espace des phases est due au flux de particules qui entrent, qui sortent et qui provoquent des collisions dans cet élément de volume, ce que l'on exprime en disant que la variation de la fonction de distribution est due seulement aux collisions.

$$\frac{df(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)}{dt} = \left(\frac{\delta f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)}{\delta t} \right)_{collisions} \quad (2.5)$$

$$\frac{df(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)}{dt} = \frac{\partial f}{\partial t} + \frac{\partial f}{\partial \mathbf{r}} \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial t} + \frac{\partial f}{\partial \mathbf{v}} \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} \quad (2.6)$$

Donc :

$$\frac{df(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)}{dt} = \frac{\partial f}{\partial t} + \vec{v} \cdot \vec{\nabla}_r f + \frac{\vec{F}}{m} \cdot \vec{\nabla}_v f = \left(\frac{\delta f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)}{\delta t} \right)_{collisions} \quad (2.7)$$

$\vec{\nabla}_r$: Le gradient dans l'espace des positions (x, y, z)

$\vec{\nabla}_v$: Le gradient dans l'espace des vitesses (v_x, v_y, v_z)

$\left(\frac{\delta f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)}{\delta t} \right)_{coll}$: Variation temporelle de la fonction de distribution due aux collisions

Signification des différents termes :

$\vec{v} \cdot \vec{\nabla}_r f$: exprime l'influence des phénomènes de diffusion.

$\frac{\vec{F}}{m} \cdot \vec{\nabla}_v f$: exprime l'action des forces appliquées.

$\frac{\vec{F}}{m}$: est l'action imposée aux particules par les forces externes (champ électrique ou magnétique s'il existe).

A partir de cette fonction de distribution f , on peut avoir accès à toutes les grandeurs macroscopiques comme la densité, la vitesse moyenne, l'énergie moyenne. Dans les décharges transitoires, les charges d'espace dues à la présence d'ions et d'électrons sont suffisantes pour distordre le champ électrique. Ces modifications dans le champ électrique font évoluer la fonction de distribution par le terme rendant compte de l'action des forces extérieures pour décrire correctement la décharge. Il est donc nécessaire de coupler la résolution de l'équation de Boltzmann avec celle de

l'équation de Poisson car cette équation donne les variations du champ électrique en fonction de la charge d'espace.

L'équation de Poisson s'écrit :

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{E} = \frac{\sum_i e_i N_i}{\epsilon} \quad (2.8)$$

L'équation de Boltzmann couplée à celle de Poisson forme un modèle électrique auto-cohérent de la décharge. Les seules données nécessaires sont les sections efficaces pour chaque type de collisions. Une description complète des phénomènes de transport serait obtenue, en résolvant cette équation de Boltzmann.

Pour simplifier la résolution de l'équation de Boltzmann, on passe aux valeurs moyennes qui définissent l'état de système. Ces grandeurs sont des paramètres macroscopiques définis en chaque point qui sont reliés par des équations dites "les moments de l'équation de Boltzmann". Nous nous intéresserons seulement aux deux premiers moments de l'équation de Boltzmann qui donnent l'équation de continuité et de transfert de la quantité de mouvement.

On obtient les moments de l'équation de Boltzmann, en intégrant l'équation de Boltzmann dans l'espace des vitesses après multiplication par une fonction $\chi(\mathbf{v})$:

$$\int \left(\frac{\partial f}{\partial t} + \vec{v} \cdot \vec{\nabla}_r f + \frac{\vec{F}}{m} \cdot \vec{\nabla}_v f \right) \chi(\mathbf{v}) d^3 v = \int \left(\frac{\delta f(r, \mathbf{v}, t)}{\delta t} \right)_{coll} \chi(\mathbf{v}) d^3 v \quad (2.9)$$

En tenant compte de l'indépendance des grandeurs considérées par rapport à l'espace et au temps, l'équation (2.9) peut s'écrire :

$$\frac{\partial}{\partial t} (n \langle \chi(\mathbf{v}) \rangle) + \frac{\partial}{\partial r} (n \langle \chi(\mathbf{v}) v \rangle) - \gamma n \langle \frac{\partial}{\partial v} \chi(\mathbf{v}) \rangle = \int \left(\frac{\partial}{\partial t} f \right)_{coll} \chi(\mathbf{v}) d^3 v \quad (2.10)$$

2.3 Les équations fondamentales de conservation

2.3.1 Équation de continuité

Lorsque $\chi(\mathbf{v})$ égale à 1, on obtient le premier moment de l'équation de Boltzmann qui est l'équation de continuité :

$$\frac{\partial}{\partial t} (n_{e,p}) + \frac{\partial}{\partial r} (n_{e,p} \bar{v}_{e,p}) = S_{e,p} \quad (2.11)$$

Cette équation représente la conservation de la charge.

$n_{e,p}$: représente la densité de particules chargées (électrons, ions positifs ou négatifs).

Le terme de droite noté $S_{e,p}$ est le terme source de l'équation de continuité : il rend compte des créations (ionisations) et des pertes (attachement ou recombinaison) des particules chargées. Il s'écrit, par exemple, pour les électrons :

$$S_e = n_e(v_i(\vec{r}, t) - v_a(\vec{r}, t)) - \beta_{e,p}(\vec{r}, t)n_en_p \quad (2.12)$$

v_i : représente la fréquence d'ionisation, v_a la fréquence d'attachement et $\beta_{e,p}$ le coefficient de recombinaison électron-ion (perte).

Ce terme de perte fait entrer en compte les collisions entre particules chargées : il est petit devant le terme d'ionisation pendant l'impulsion de courant. Les fréquences d'ionisation et d'attachement sont dépendantes de la fonction de distribution électronique.

2.3.2 L'équation de transfert de quantité de mouvement

Lorsque $\chi(\mathbf{v})$ est égale à $m\vec{v}$, la quantité de mouvement, on obtient l'équation de transfert de quantité de mouvement en intégrant sur l'espace des vitesses :

$$\frac{\partial}{\partial t}(nm\vec{v}) + nm\left(\vec{v} \cdot \frac{\partial}{\partial \vec{r}}\right)(\vec{v}) - \vec{v} \cdot \left(\frac{\partial}{\partial \vec{r}}(nm\vec{v})\right) + \vec{\nabla}_{\vec{r}} \otimes \vec{P} - n\vec{F} = \int \left(\frac{\partial}{\partial t}f\right)_{coll} d^3\vec{v} \quad (2.13)$$

\vec{F} : représente les forces extérieures qui s'appliquent au système dues aux champs électrique et magnétique s'il existe.

\vec{P} : est le tenseur de pression cinétique. Il est défini comme un flux de quantité de mouvement mais dans un référentiel se déplaçant à la vitesse v .

Le terme de droite représente la variation de la quantité de mouvement des particules considérées sous l'effet des collisions. On peut définir une fréquence d'échange de quantité de mouvement v_m comme on a défini une fréquence d'ionisation v_i .

En injectant l'équation (2.14) dans l'équation (2.16), on obtient :

$$nm\left[\frac{\partial}{\partial t} + \vec{v} \cdot \nabla_r\right]\vec{v} = n\vec{F} - \vec{\nabla}_{\vec{r}} \otimes \vec{P} - nmv_m\vec{v} - Sm\vec{v} \quad (2.14)$$

2.3.3 L'équation d'énergie

En remplaçant $\chi(\mathbf{v})$ dans l'équation (2.13) par $\frac{1}{2}mv^2$, on obtient l'équation d'énergie scalaire qui est le troisième moment de l'équation de Boltzmann :

$$\frac{\partial}{\partial t}\left(n\frac{1}{2}mv^2\right) + \frac{\partial}{\partial r}\left(n\langle\frac{1}{2}mv^2v\rangle\right) - \gamma n\left\langle\frac{\partial}{\partial v}\frac{1}{2}mv^2\right\rangle = \int \left(\frac{\partial}{\partial t}f\right)_{coll} \frac{1}{2}mv^2 d^3v \quad (2.15)$$

$$\Rightarrow \frac{\partial}{\partial t}(nv^2) + \frac{\partial}{\partial r}(n\langle v^2v\rangle) - 2\frac{\vec{F}}{m} \cdot \vec{v}n = \int \left(\frac{\partial}{\partial t}f\right)_{coll} v^2 d^3v \quad (2.16)$$

$$\text{Avec } \gamma = \frac{F}{m}$$

Ces trois moments de l'équation de Boltzmann forment un système qui n'est pas fermé et ne peut donc pas décrire seul le comportement des particules chargées dans une décharge électrique.

2.4 Approximations

Dans les plasmas collisionnes, les grandeurs physiques auxquelles nous allons avoir accès sont donc des grandeurs macroscopiques moyennes dans l'espace des vitesses. Pour cela, il faut résoudre le système formé par les moments de l'équation de Boltzmann en faisant des hypothèses sur la fonction de distribution en vitesse des particules pour avoir autant d'équations que d'inconnues.

A la pression atmosphères, les fréquences d'échange de quantité de mouvement v_m de l'ordre de 10^{12} s^{-1} . Le temps caractéristique de variation des phénomènes (champ électrique, courant, densité) est déterminé comme : $E \left[\frac{dE}{dt} \right]^{-1}$

Il est de l'ordre de quelque 10^{-9} s , par exemple dans les décharges impulsions, les impulsions ne durent que quelques dizaines de nanosecondes (20 à 50 ns dans les panneaux à plasma et 50 à 200 ns dans les lasers à excimère) et le temps de montée du courant est dans les deux cas de quelques nanosecondes seulement. Donc ce temps de variation des phénomènes est très grand devant le temps entre les collisions électrons-atomes neutres du gaz qui est de l'ordre de 10^{-12} s correspondant à $\left(\frac{1}{v_m} \right)$

Cela signifie que l'on peut négliger dans l'équation de transport de quantité de mouvement, le terme $\frac{\partial}{\partial t}$ de variation temporelle du flux par rapport au terme de collision qui est $en v_m$, dans les conditions des plasmas que l'on trouve dans les décharges hautes pression, on peut négliger l'énergie dirigée, due à l'accélération du champ électrique par rapport à l'énergie d'agitation thermique. Cette simplification est valable quand le champ électrique est faible donc dans le plasma mais n'est plus aussi bonne dans le cas où l'énergie dirigée des électrons peut être comparable à l'énergie thermique.

2.5 Modèle électrique auto cohérent

Le modèle électrique d'une décharge et du plasma associé à décrire le couplage entre phénomènes de transport des particules chargées et champ électrique ; l'interaction entre particules chargées et électrons ainsi doivent également être considérés. Dans un plasma, les phénomènes de transport des particules chargées sont parfaitement décrits par l'équation de Boltzmann.

L'équation de Boltzmann est une équation de continuité dans l'espace des phases position-vitesse (r, v) , qui détermine la fonction de distribution des vitesses des particules $f(r, v, t)$ en chaque point et à chaque instant, cette équation établit le bilan des variations de la fonction de distribution des particules chargées sous l'effet, d'une part, des forces extérieures (champ électrique) et d'autre part, des collisions électron-neutre ou ion-neutre. De cette distribution peuvent être déduites les variations spatiales à chaque instant de grandeurs moyennes telles que la densité $N(r, t)$, la vitesse moyenne dirigée $v(r, t)$, l'énergie moyenne $\varepsilon(r, t)$ ou les fréquences moyennes des différents processus de collision. Dans une décharge, les équations de transport des particules chargées doivent être couplées à l'équation de Poisson déterminant le champ électrique (modèle auto cohérent).

La résolution numérique de l'équation de Boltzmann est délicate, son couplage à l'équation de Poisson rendant le problème encore plus difficile. C'est pourquoi il existe une hiérarchie de modèles physiques correspondant à différents degrés d'approximation des phénomènes.

Suivants les conditions et le niveau de détail ou de précision requis, l'un de ces modèles sera mieux adapté au problème. Nous avons divisé l'ensemble de ces modèles en trois catégories décrites ci-dessous : modèle fluide, modèle hybride, modèle microscopique.

2.5.1 Modèle fluide

Dans cette catégorie de modèles ^[32], on choisit de représenter les phénomènes de transport des particules chargées de façon moins détaillée que par la détermination de leur fonction de distribution des vitesses. Leurs propriétés sont décrites uniquement, comme dans le cas d'un fluide, par des grandeurs moyennes telles que densité, vitesse moyenne dirigée, énergie moyenne etc... Une représentation naturelle des phénomènes de transport consiste à prendre les trois premiers moments de l'équation de Boltzmann dans l'espace des vitesses. On obtient ainsi les équations de continuité, de transfert de quantité de mouvement et d'énergie.

2.5.2 Modèle hybride

Ce modèle représente les propriétés de transport des électrons rapides non plus de façon fluide mais microscopique, tout en gardant une représentation fluide du corps de la distribution. Ce type de modèle est qualifié d'hybride puisqu'il est de type fluide pour les électrons froids du plasma et de type microscopique pour les électrons rapides. Les électrons rapides sont traités par exemple par une méthode de Monte Carlo ^[33].

2.5.3 Modèle microscopique

Dans un modèle microscopique, les phénomènes de transport électronique et ionique sont décrits de façon beaucoup plus détaillée que dans un modèle fluide, c'est à dire par le calcul de leur fonction de distribution des vitesses $f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)$. Il s'agit donc de résoudre simultanément les équations de Boltzmann des électrons et des ions et l'équation de Poisson. L'équation de Boltzmann spatio-temporelle ne peut pas être résolue de façon pratique et rapide par des méthodes de différences finies ou d'éléments finis. On a donc recours à des méthodes particulières dans lesquelles on considère un nombre fini de particules (quelques milliers) que l'on suppose représentatif de l'ensemble des électrons et des ions. Tout en résolvant l'équation de Poisson à intervalles de temps réguliers, on suit les trajectoires individuelles de chacune de ces particules dans l'espace des phases.

Les techniques utilisées pour résoudre ce problème font appel, en ce qui concerne l'intégration des équations du mouvement en relation avec l'équation de Poisson, aux méthodes (*particle-In-Cell*) (*PIC*)^[34,35] pour l'étude des plasmas non collisionnes (équation de Vlasov) et, en ce qui concerne les collisions, aux méthodes statistiques de Monte Carlo ^[35].

2.6 Modèle fluide et approximation du champ local

Le modèle développé pour ce travail est basé sur la résolution des deux premiers moments de l'équation de Boltzmann. Dans ce modèle, les deux premières équations de transport (continuité et transport de la quantité de mouvement) sont couplées à l'équation de Poisson et dans l'approximation du champ local, on suppose que l'énergie due au champ électrique gagnée par les électrons à un temps donné et à une position donnée est exactement compensée par la perte d'énergie due aux collisions aux mêmes instants et position.

Pour que cela soit possible, il faut que les électrons effectuent suffisamment de collisions pour supposer en première approximation qu'ils sont en équilibre avec le champ électrique, i.e. que leur fonction de distribution électronique ne dépend que du champ électrique local réduit $E(\mathbf{r}, t)/P$ où P est la pression totale du gaz. Cela implique que :

l'équation d'énergie se réduit à l'égalité entre gain et perte d'énergie localement que la fonction de distribution électronique ne dépend que du champ réduit local et qu'elle peut donc être pré calculée et tabulée. En conséquence, les fréquences de collision, d'ionisation, les mobilités, coefficients de diffusion dépendent également du champ électrique local.

L'hypothèse de localité a un aspect temporel et un aspect spatial qui peuvent être indépendants :
L'aspect temporel suppose pour l'équation d'énergie que le temps caractéristique de variations des grandeurs macroscopiques est grand vis à vis du temps de relaxation de l'énergie électronique (inverse de la fréquence de perte d'énergie)

Dans les conditions d'une décharge, comme cela a été mentionné plus haut, le temps caractéristique de variations des grandeurs macroscopiques est supérieur à 10^{-9} s tandis que le temps entre collisions (inverse de la fréquence de quantité de mouvement) est de l'ordre de 10^{-12} s.

A très faible énergie électronique, il n'y a que des collisions élastiques. Il s'ensuit que la fréquence de perte d'énergie ν_ε est beaucoup plus petite que la fréquence d'échange de quantité de mouvement (dans l'inverse du rapport de la masse de l'électron sur celle de l'atome). Dans les conditions qui nous intéressent où l'énergie moyenne électronique est suffisante pour entraîner une ionisation substantielle, le rapport entre la fréquence de perte d'énergie et la fréquence de quantité de mouvement est beaucoup plus grand. On peut le montrer simplement en milieu uniforme et stationnaire, dans ce cas, les équations de quantité de mouvement et d'énergie s'écrivent :

$$\nu_d = \frac{eE}{m_e v_m} \Rightarrow e\bar{v}E = \nu_\varepsilon \bar{\varepsilon} \text{ avec } \bar{\varepsilon} = \frac{1}{2} m \bar{v}^2 \quad (2.17)$$

En combinant ces équations, on voit que le rapport $\frac{\nu_\varepsilon}{\nu_m}$ est du même ordre de grandeur que $\frac{\nu_d^2}{v^2}$ où ν_d est la vitesse de dérive et v la vitesse totale. Dans des conditions où l'énergie électronique est suffisante pour ioniser (température électronique assez grande pour que plus de 1% des électrons puissent ioniser ou exciter), ce rapport est inférieur à 1 mais il est en général toujours supérieur à quelques 10^{-2} .

Chapitre 3

3. Sections efficaces de diffusion électronique dans un plasma d'oxygène.

Dans ce chapitre nous avons étudié un ensemble des sections efficaces de diffusion électronique de l'oxygène moléculaire. Ces sections efficaces, compilées pour des énergies électroniques jusqu'à 1000 eV, font partie de la base de données TRINITY^[36], avec des données d'entrée du code numérique BOLSIG+. Les sections efficaces de l'oxygène moléculaire à l'état fondamental décrivent les mécanismes de collision élastiques et inélastiques, excitations, attachement, excitations vibrationnels, dissociations, ionisation, L'ensemble complet de processus établis dans cette partie est regroupé dans 11 réactions impliquant 08 espèces atomiques et moléculaires Tab.3.1.

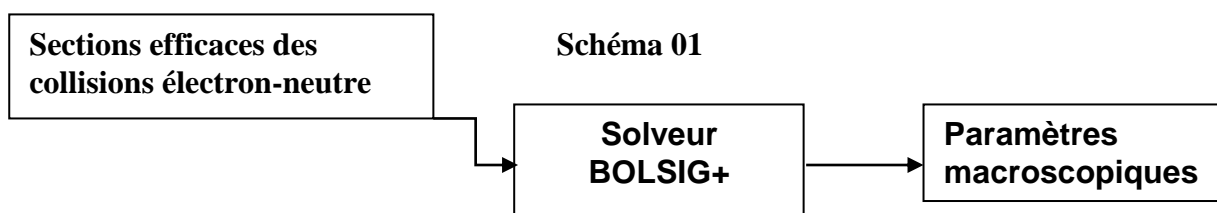
3.1 Introduction

La molécule d'oxygène O_2 est l'un des principaux composants de l'atmosphère terrestre. Il joue un rôle important dans divers plasmas. Les décharges électriques de l'oxygène à une importance pratique, parce que l'oxygène est l'un des gaz électronégatifs les plus simples et qu'il a des états métastables en basse altitude.

La dynamique de collision électronique joue un rôle important dans la génération des plasmas. L'une des caractéristiques les plus importantes de cette dynamique est l'effet des collisions électron-molécule. La modélisation détaillée de ces effets nécessite la connaissance des sections efficaces de diffusion dépendant de l'énergie électroniques.,

En 1989, Itikawa et al ^[37]. Ont publié une compilation de données en coupe sur les collisions d'électrons avec O_2 , plusieurs travaux a été publiés pour déterminer les sections efficaces des collisions électroniques dans un plasmas d'oxygène, par exemple l'auteurs. Byoung et all. ^[38] ont publié un ensemble de sections efficaces pour les collisions électroniques avec O_2 , et Yukikazu ^[39] et un travail détaillé sur les section efficaces de coalisions électroniques dans un mélange N_2, O_2 a été publié par Tim Murphy ^[40], aussi l'auteur Philippe^[41] ont fait un travail sur les section efficaces des collisions électroniques dans un plasmas d'oxygène dans la gamme du champs électriques réduits de l'ordre de 103 Td.

Nous avons basé dans ce chapitre sur 11 réactions chimique dans un plasma d'oxygène pour calculer les sections efficaces de collision dans la gamme d'énergie électronique jusqu'a 1000 eV. Nous avons trouvé des données pour les processus de collision électroniques élastiques et inélastiques, la section efficaces a un importance utiliser comme des paramètres d'entrés dans l'équation de Boltzmann pour calculer les coefficients de transports utilisant le code BOLZIG+ , voir schéma 1



L'ensemble des processus réactionnels dans le présent travail sont indiqués sur le Tab.3.2

Tab.3. 1 Paramètre de décharge

Paramètre de décharge	Data
Gaz	O_2
Pression	1 atm
Température	300 °K
Champ électrique réduit	200 Td ⁽¹⁾
coefficient d'ionisation	$\alpha = 10^{-4}$

$$^{(1)} 1 Td = 10^{-17} V cm^2$$

Tab.3. 2 Processus de réactions considérés dans nos calculs

Réaction	Processus	Energie électronique de seuil	Réf.
R1) $e + O_2 \rightarrow O^- + O$	Attachement	$E = 0 eV$	[42]
R2) $e + O_2 \rightarrow e + O_2$	Elastique	/	[43].
R3) $e + O_2 \rightarrow e + O_2(Rot)$	Rotationnel	$E = 0.000178 eV$	[44]
R4) $e + O_2 \rightarrow e + O_2(v)$	Excitation	$E = 0.193 eV$	[45]
R5) $e + O_2 \rightarrow e + O_2(a^1\Delta_g)$	Excitation	$E = 0.98 eV$	[45]
R6) $e + O_2 \rightarrow e + O_2(b^1\Sigma_g^+)$	Excitation	$E = 1.63 eV$	[45]
R7) $e + O_2 \rightarrow e + O_2(b^3\Sigma_u^+)$	Excitation	$E = 4.5 eV$	[46]
R8) $e + O_2 \rightarrow e + O + O$	Excitation	$E = 5.58 eV$	[46]
R9) $e + O_2 \rightarrow e + O + O(1D)$	Excitation	$E = 8.4 eV$	[45]
R10) $e + O_2 \rightarrow e + e + O_2^+$	Ionisation	$E = 12.1 eV$	[47]
R11) $e + O_2 \rightarrow e + e + O + O^+$	Ionisation	$E = 19.5 eV$	[47]

3.2 Résultats et Discussion

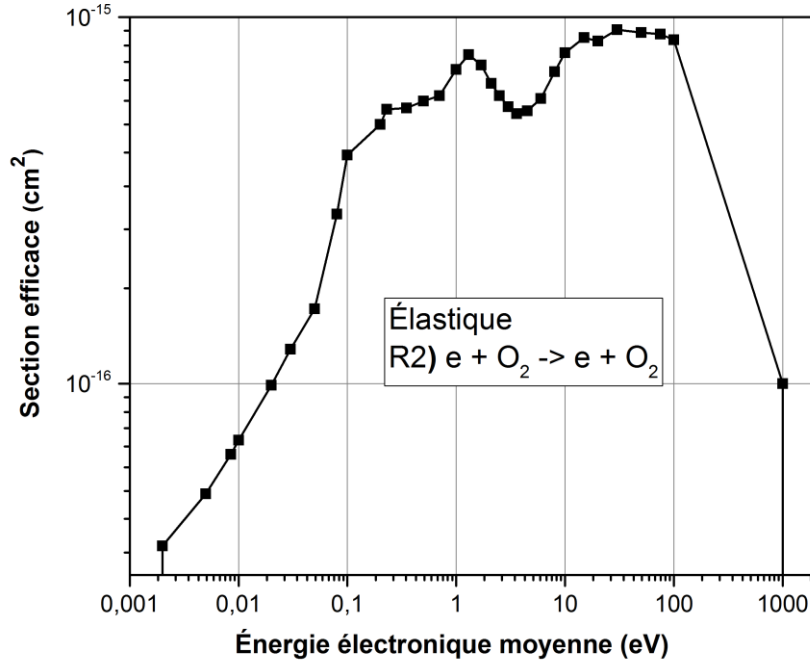


Fig.3. 1 Sections efficaces de collision élastique de O_2

La Fig.3.1 montre les sections efficaces de collision élastique de O_2 (transfert de quantité de mouvement), sur la gamme énergétique 0.001-1000 eV, la section efficace élastique expérimentalement obtenue comme des sections transversales pour les transitions de rotation, les expériences de faisceau d'électrons ont une énergie insuffisante pour résoudre chaque état de rotation de l'oxygène moléculaire, Q_{elas} représente les sections efficaces de collision élastique. En 1993, Kanik et al.^[48] ils ont déterminé les sections efficaces des collision élastique électroniques Q_{elas} de l'oxygène moléculaire O_2 dans la gamme énergétique de 1 - 1 000 eV comme notre résultat représenté dans la Fig.3.1.

En 2003, Buckman et al.^[49] ont rapporté leurs propres valeurs des sections efficaces des collision élastique pour la plage d'énergie de 1 à 100 eV. Ils ont basé sur les expériences réalisées par Trajmar et al.^[50] en 1971.

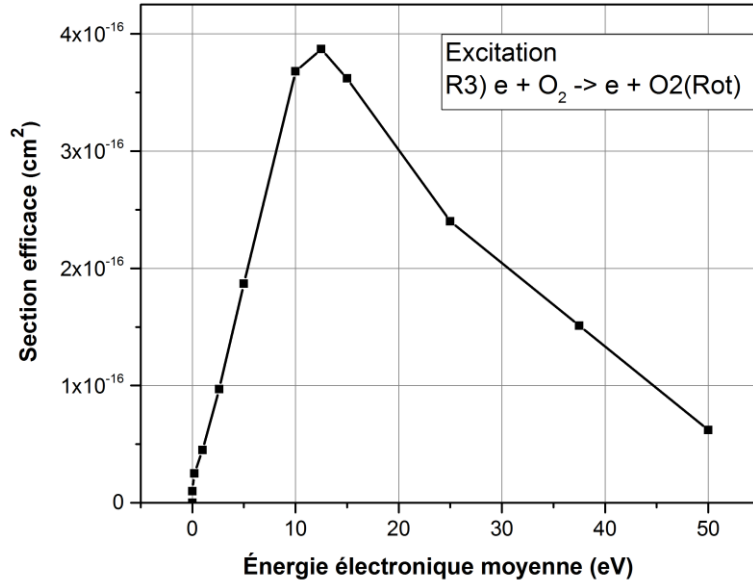


Fig.3. 2 Sections efficaces d'excitation rotationnelle de O₂

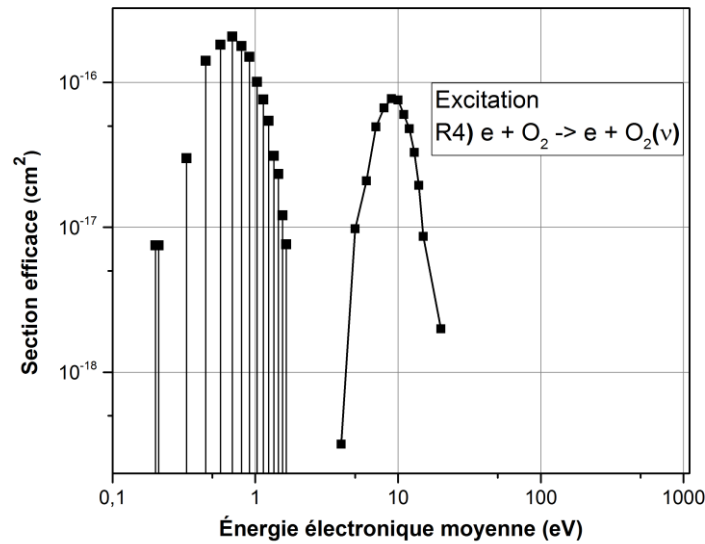


Fig.3. 3 Sections efficaces de l'excitation vibrationnel de O₂ (0→v)

La transition de rotation par l'excitation électronique illustré dans la Fig.3.2 sa dépend de transition entre les niveaux du moment angulaire total J. Cette montre les sections effaces de l'excitation vibration de O₂, on voit clairement que se divisé sur deux parties , la première partie dans la gamme énergétique de 0 - 1eV , former des pic très pointés, et sur le point de 10 eV un large pic.

D'après l'expérience d'Allan^[51], la section efficace vibratoire Q_{vib} de O_2 montre un comportement complètement différent dans les régions énergétiques au-dessous de 1 eV, cette section montre un large pic au niveaux d'énergie électronique 10 eV. Dans la région inférieure de 1 eV, la sections compose d'un ensemble des pics très pointus. Entre les deux, Q_{vib} est très pe tit. Par conséquent, cette section est divisée en deux sous-sections. Comme dans la Fig.3.3.

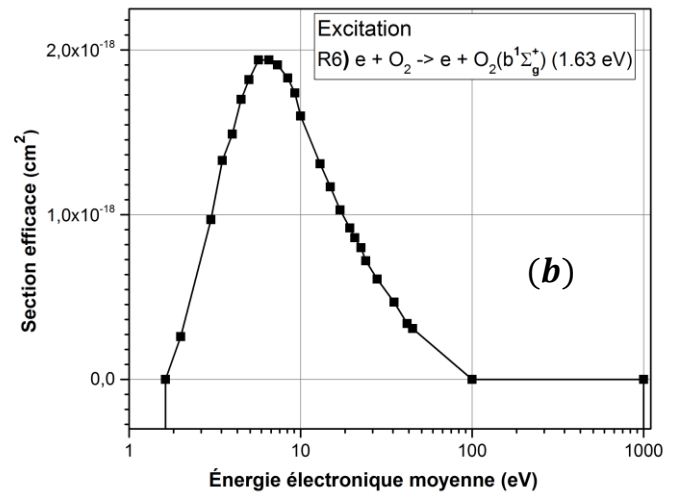
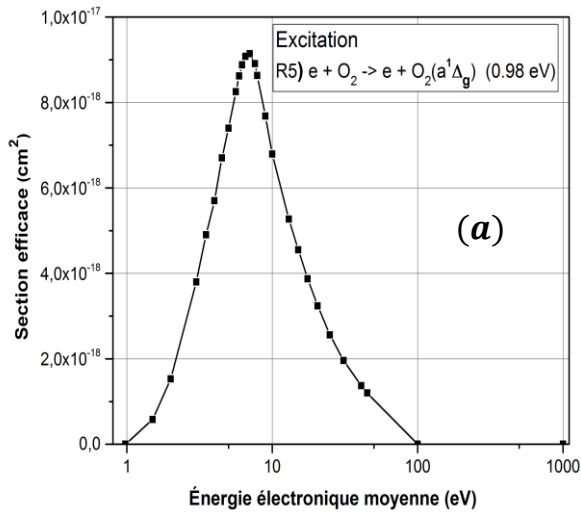
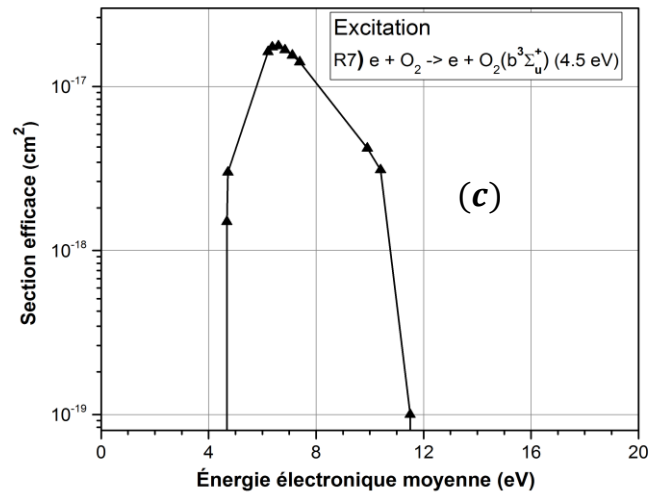


Fig.3. 4 Sections efficaces d'excitation des espèces métastables de O2:

(a) $O_2(a^1\Delta_g)$ (0.98 eV)

(b) $O_2(b^1\Sigma_g^+)$ (1.63 eV)

(c) $O_2(b^3\Sigma_u^+)$ (4.5 eV)

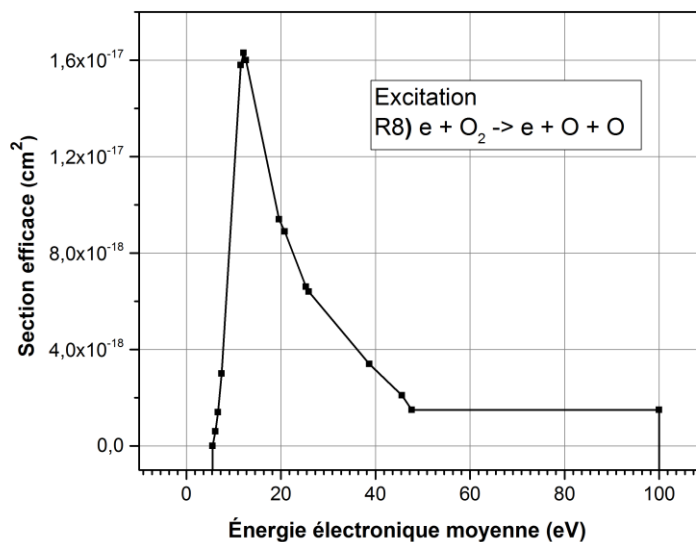


Tab.3. 3 Energie électronique du seuil.

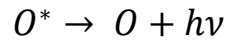
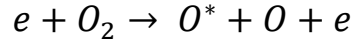
L'état de O_2	Energie électronique de seuil [52]	Fig.
$O_2(a^1\Delta_g)$	0.977 eV	Fig.3.4 (a)
$O_2(b^1\Sigma_g^+)$	1.622 eV	Fig.3.4 (b)
$O_2(b^3\Sigma_u^+)$	4.34 eV	Fig.3.4 (c)

La Fig.3.4 montre les sections efficaces de l'excitation de O_2 , trois états excités présentés dans le Tab.3.1, Les deux états $O_2(a^1\Delta_g)$ et $O_2(b^1\Sigma_g^+)$ ont la même configuration orbitale moléculaire. Les énergies d'excitation correspondantes ne sont pas très différentes 0.977 eV et 1.622 eV, donc le même comportement des sections efficaces d'excitation Fig.3.4 (a) et (b), un pic de résonance environ de 9 eV pour les deux espèces.

La Fig.3.4 (c) montre les sections efficaces de l'état excité $O_2(b^3\Sigma_u^+)$, le spectre de perte d'énergie électronique de O_2 pour créer $O_2(b^3\Sigma_u^+)$ présente un large pic de 7 à 10 eV, c'est ce qu'on appelle la perte à cause de l'émission des bandes du système de Schumann-Runge^[53].

Fig.3. 5 Sections efficaces d'excitation dissociation de O_2

La Fig.3.5 montre la dissociation de O_2 , cette processus passe par deux étapes :



La section efficace totale de dissociation est présenté dans la Fig.3.5, la réaction intermédiaire $O^* \rightarrow O + h\nu$ produit des rayonnement électromagnétique qui désigne une forme de perte d'énergie, les auteurs Kanik et al.^[54] ont obtenu les sections efficaces absolues pour les émissions des ondes électromagnétiques de raies 135,6, 130,4 et 115,2 nm de cette réaction. Terrell et al.^[55] ont mesuré les spectres d'émission dans la région de 222–660 nm lors de collisions d'électrons avec O_2 .

Selon Terrell et al.^[55], la somme des sections efficaces obtenues à 100 eV sont $0,4610^{-18} cm^2$ pour O^* est proche de notre calcul Fig.4 où nous avons trouvé la valeur de section efficace total pour 100 eV est environ de $1.510^{-18} cm^2$.

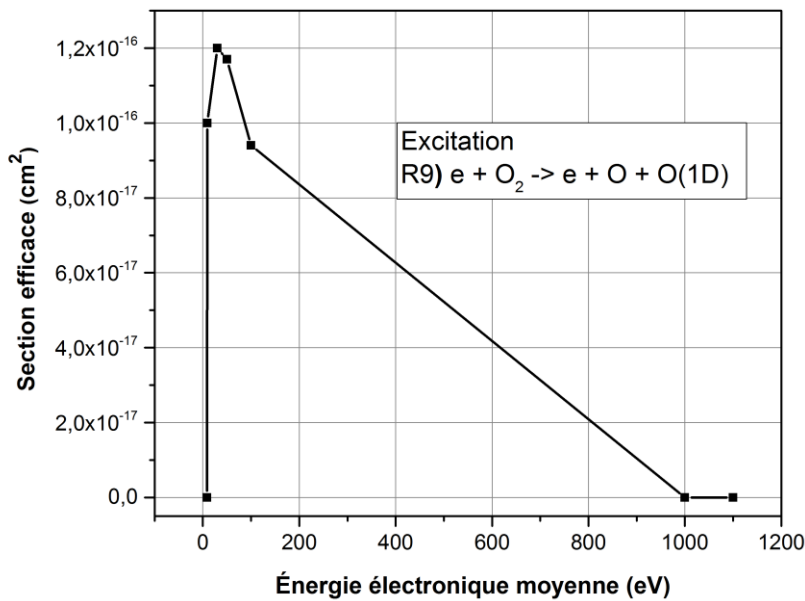


Fig.3. 6 Sections efficaces d'excitation dissociation de O_2 pour produire l'espèce instable $O(1D)$

La Fig.3.6 montre la production de l'espèce métastable $O(1D)$ par collision électronique de O_2 , cette espèce est extrêmement réactives, la section efficace forme un pic de résonance à environ de 80 eV en suit diminuée rapidement .

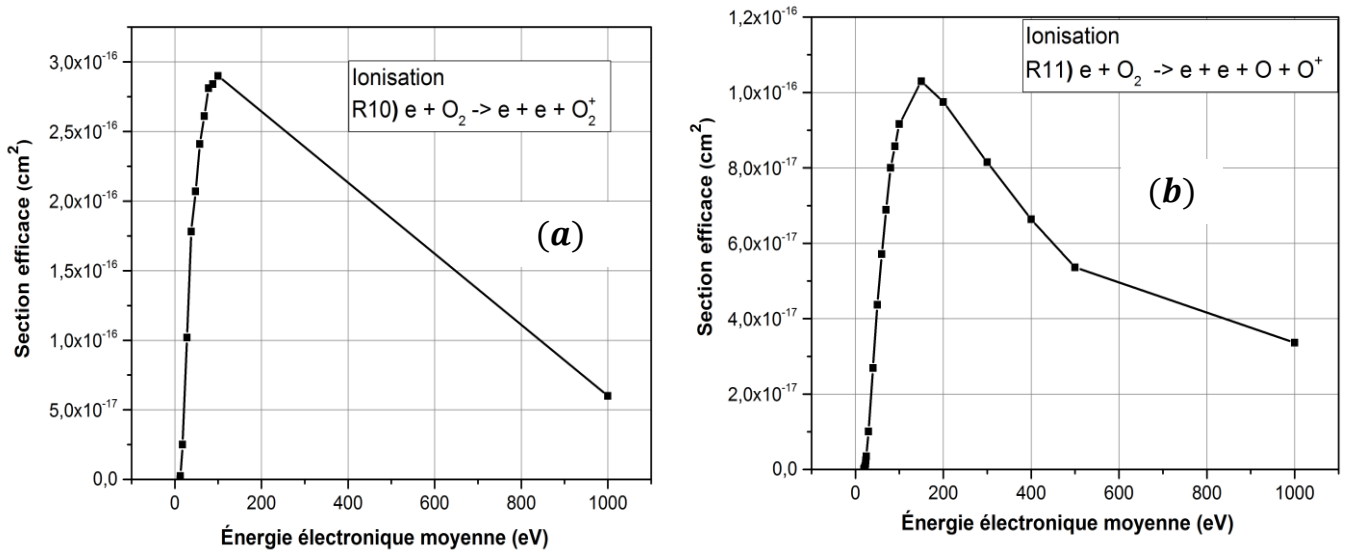


Fig.3. 7 Sections efficaces de d'ionisation de O₂: (a) O₂⁺, (b) O⁺

La Fig.3.7 présenter la section efficace d'ionisation de O_2 , même comportement et le pic de résonance au point où l'énergie électronique égale à 100 eV, les deux réactions R10 et R11 produites des électrons secondaires.

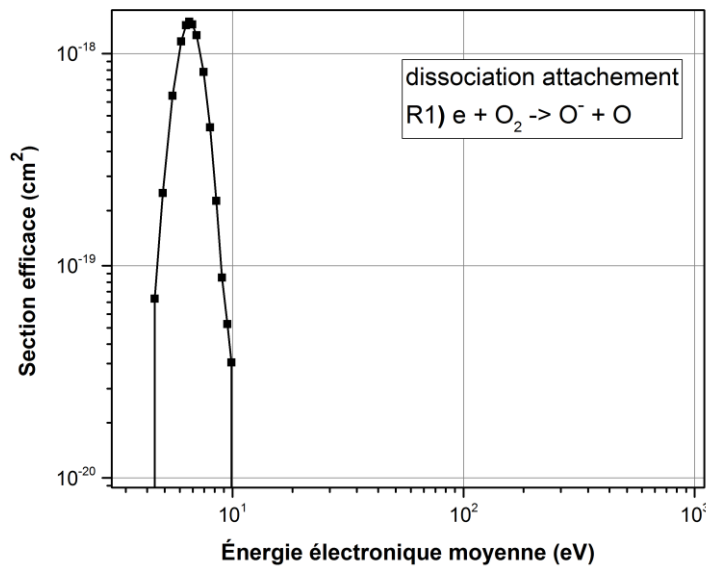


Fig.3. 8 Sections efficaces de dissociation attachement de O₂

La Fig.3.8 montre le processus de dissociation attachement électronique dans un plasma d'oxygène, on voit clairement que ce processus est plus rapide au début de la décharge, le pic de résonance au point où l'énergie électronique 6.5 eV, il est important de produire les ions négatifs.

3.3 Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons présenté une étude numérique des sections efficaces des collisions électroniques suivant 11 réactions chimiques dans un plasma d'oxygène. Les résultats obtenus montrent les points suivants :

- ✓ Sections efficaces d'excitation vibration de O_2 se divisent en deux parties, la première partie dans la gamme énergétique de 0 - 1 eV, forme des pics très pointés, et sur le point de 10 eV un large pic.
- ✓ Le spectre de perte d'énergie électronique de O_2 pour créer l'espèce $O_2(b^3\Sigma_u^+)$ montre un large pic de 7 à 10 eV.
- ✓ Les sections efficaces de deux états $O_2(a^1\Delta_g)$ et $O_2(b^1\Sigma_g^+)$ ne sont pas très différentes, un pic de résonance environ de 9 eV pour les deux espèces.
- ✓ La section efficace pour créer l'espèce métastable $O(1D)$ a un pic de résonance environ de 80 eV en suite diminue rapidement, la concentration de $O(1D)$ est importante dans le plasma d'oxygène.
- ✓ Le processus de dissociation attachement électronique dans un plasma d'oxygène pour créer O^- est plus rapide au début de la décharge, en suite diminue rapidement.

Chapitre 4

4. La fonction de distribution électronique et les coefficients de transports dans un plasma d'oxygène.

Au cours de ce chapitre, nous allons exposer les résultats relatifs aux paramètres de transport des électrons comme les coefficients de transports, coefficient de diffusion et la mobilité des électrons, présent dans un gaz faiblement ionisé de O_2 et la forme maxwellienne de EEDF (Electron Energy Distribution Function), dans les mêmes conditions indiqué dans le chapitre 03, à la température de gaz 300 K et la pression atmosphérique, et les mêmes ensemble de processus établis dans le Tab3.1 (chapitre 03), nous avons utilisé la base de données TRINITI ^[36], avec les données d'entrée du code numérique BOLSIG+.

4.1 Introduction

La dynamique de collision électronique joue un rôle important dans la décharge électrique dans les plasmas froids hors équilibre où la résolution de l'équation de Boltzmann est très difficile, et pour calculer les coefficients de transports électriques dans une décharge (gaz faiblement ionisé), en prenant en considération les différents processus de collisions électron-atome et électron-électron, plusieurs travaux ont été faits sur la forme du EEDF et l'influence de type de décharge et les paramètres avec sa forme dans un plasma N_2 ou dans un mélange N_2 et O_2 et dans un plasma O_2 [56, 60, 61, 62, 63].

La fonction de distribution d'énergie électronique (EEDF) est essentielle dans la modélisation du plasma. Diverses approches peuvent être utilisées pour décrire l'EEDF, telles que Maxwellien, et le Druyvesteyn, elle est nécessaire pour calculer les taux de réaction des collisions électroniques, et les propriétés de transport d'électrons peuvent également être calculées à partir de la dérivée de l'EEDF, le choix de l'EEDF utilisée a une influence sur les résultats du modèle de plasma, le plasma est en équilibre thermodynamique, l'EEDF prend une forme maxwellienne.

Dans cette partie du travail on suppose que le plasma de O_2 est en équilibre thermodynamique et via un code numérique de résolution de l'équation de Boltzmann (BOLSIG+) dans le cas stationnaire et pour un champ électrique uniforme ($E= 200Td$), à la température ambiante $300K^\circ$ et à la pression atmosphérique avec les mêmes processus établis dans le Tab.3.1 (chapitre 03), avons calculé les paramètres macroscopiques suivantes :

- a- La fonction de distribution d'énergie électronique (EEDF)
 - Les coefficients de transports:
 - a- Coefficients Townsend réduits
 - b- Coefficient de diffusion $\times N$
 - c- la mobilité $\times N$
 - d- Taux de réactions
- (N la densité du gaz O_2)

4.2 Fonction de distribution d'énergie électronique (EEDF)

L'équation de Boltzmann "plus détaillé dans le chapitre 02". Cette équation est nécessaire pour calculer les vitesses de réaction des collisions électroniques et les paramètres de transport d'électrons, si le plasma est en équilibre thermodynamique, l'EEDF a une forme maxwellienne.

$$\frac{df_e(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)}{dt} = \frac{\partial f_e}{\partial t} + \vec{v} \cdot \vec{\nabla}_r f_e + \frac{\vec{F}}{m} \cdot \vec{\nabla}_v f_e = \left(\frac{\delta f_e(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)}{\delta t} \right)_{collisions} \quad (4.1)$$

$f_e(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)$: La fonction de distribution d'énergie électronique

$\vec{\nabla}_r$: Le gradient dans l'espace des positions (x, y, z)

$\vec{\nabla}_v$: Le gradient dans l'espace des vitesses (v_x, v_y, v_z)

- la forme Maxwellien de $f_e(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)$, (EEDF):

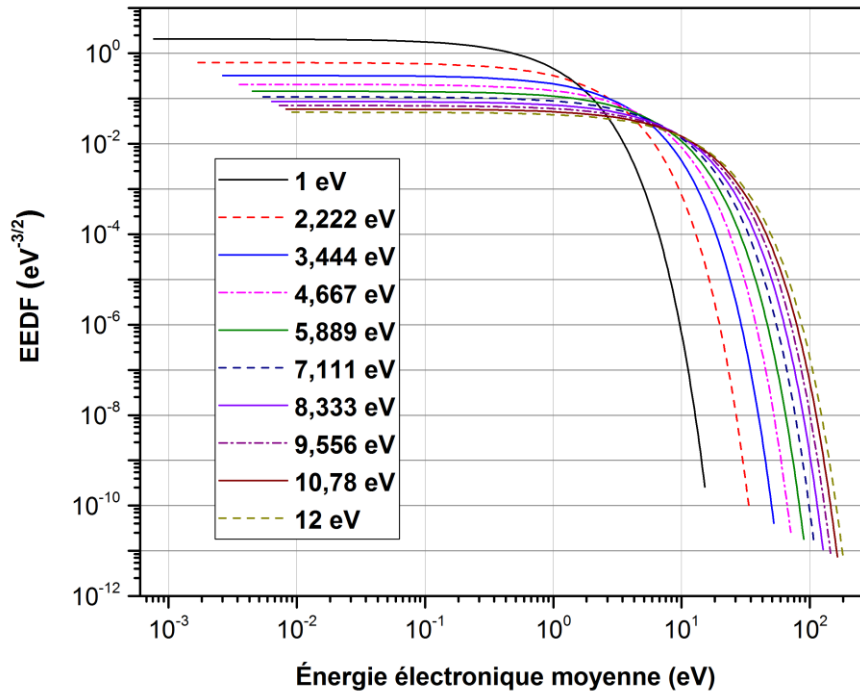
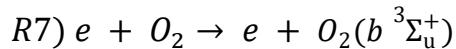
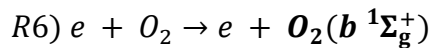
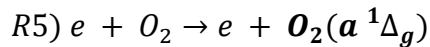


Fig.4. 1 La fonction de distribution d'énergie électronique (EEDF)

La Fig.4.1 montre La fonction de distribution d'énergie électronique (EEDF) de plasma O_2 pour différentes énergie de seuil "énergie initiales des électrons primaires". Au niveau de 4 eV, le EEDF diminue à cause de la diminution des électrons secondaire, c'est-à-dire lorsque l'ionisation est traitée comme un processus d'excitation et aucun électrons secondaires a été créés. et la section efficace des collisions électrons-électrons diminue rapidement avec l'augmentation de l'énergie électronique, le EEDF diminue, les collisions inélastiques se produisent lorsque les électrons atteignent suffisamment d'énergie pour l'excitation ou l'ionisation^[56, 57, 58, 59]. Cela conduit à la chute de la fonction de distribution de Boltzmann, qui est observée sur la fig. 4.1



La présence des espèces métastable $O_2(a^1\Delta_g)$, $O_2(b^1\Sigma_g^+)$ et $O_2(b^3\Sigma_u^+)$ suivant les réactions R5, R6 et R7 avec énergies de seuil (0,95, 1,64 et 4.5 eV respectivement) est négligeable pour des énergie supérieur à 4 eV, (voir la Fig.3.4 chapitre 03), de l'énergie électronique 4 eV le EEDF commence à diminuer Fig. 4.1, les processus d'excitation de ces espèces métastables, pratiquement aucune influence sur l'EEDF car l'excitation vibrationnel diminue^[56].

4.3 Coefficients de transports

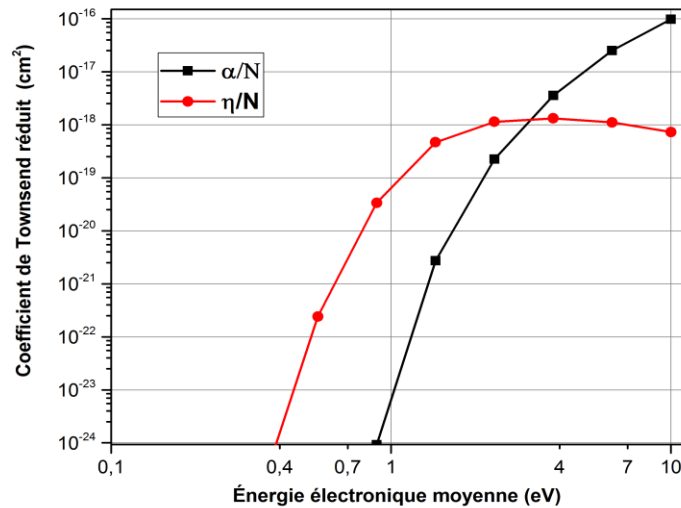


Fig.4. 2 Coefficients Townsend réduits d'ionisation et d'attachement

La Fig.4.2 présenter les coefficients Townsend réduits de O_2 , l'ionisation α/N_{et} pour l'attachement η/N , en fonction de l'énergie électronique. Dans la région 0.1–10 eV.

On voit que Coefficient Townsend d'attachement diminue a partir de l'énergie électronique 4eV a cause de la diminution de la densité des espèces métastable $O_2(a^1\Delta_g)$, $O_2(b^1\Sigma_g^+)$ et $O_2(b^3\Sigma_u^+)$, le taux des réactions produites ces espèces atteindre le maximum a cet énergie et en suit diminué Fig.4.3

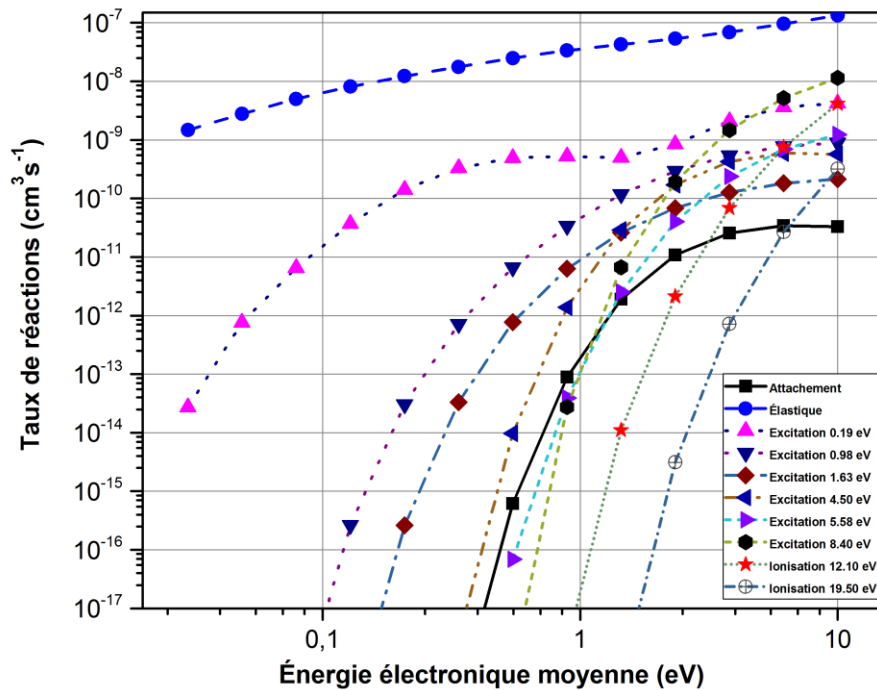


Fig.4. 3 Taux de réactions en fonction de l'énergie électronique moyen pour les réactions indiqué au Tab.3.1

La Fig.4.3 montrer Taux de réactions en fonction de l'énergie électronique moyen pour les réactions indiqué au Tab.3.1 en fonction de l'énergie électronique, les collisions inélastiques prend une valeur maximal au cour de la décharge et la production de O_2^+ suivant les réactions R10 et R11 (Tab.3.1 (chapitre 03)) avec des énergies de seuil 12.10 eV et 19.5 eV respective augment avec une vitesse de réaction plus rapide que les autres réactions en fonction de l'énergie électronique moyenne.

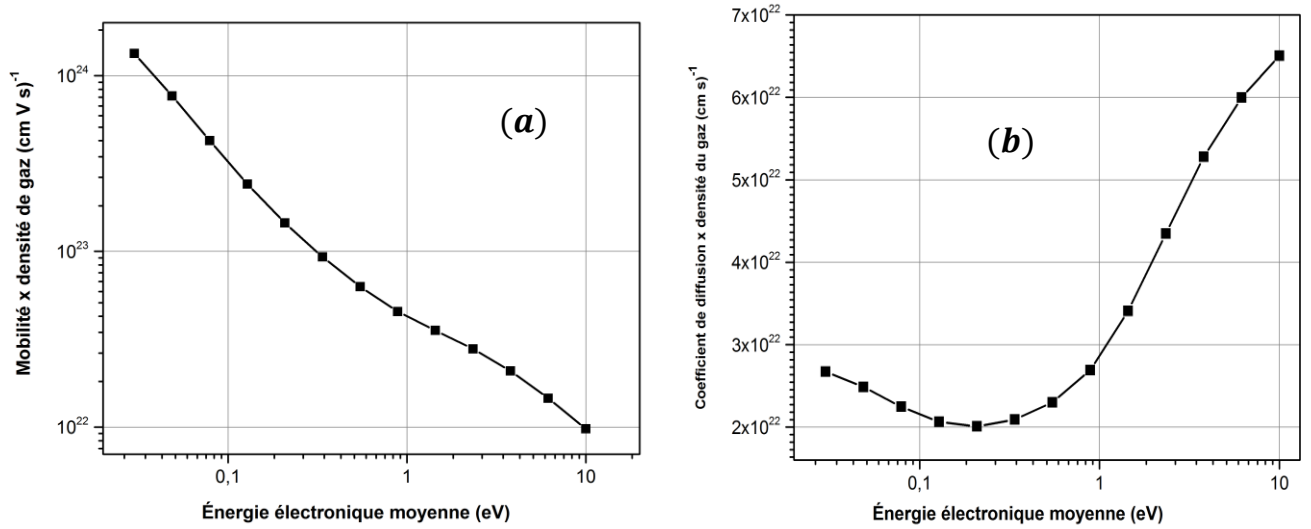


Fig.4. 4 (a) La mobilité électronique et (b) Coefficient de diffusion

Les modèles fluides utilisent souvent des approximations concernant les coefficients de transport, comme la relation d'Einstein entre le coefficient de diffusion et la mobilité^[57].

$$D_e = \frac{3}{2} \mu_e \langle \varepsilon \rangle \quad (4.2)$$

Sur la fig.4.4(a) la mobilité prend une valeur maximal au début de décharge ensuite diminue avec l'augmentation de l'énergie électronique dû à la diminution rapide de la section efficace pour les collisions électrons-électrons^[57], par contre le coefficient de diffusion augmente avec l'augmentation de l'énergie moyenne vers l'état d'équilibre de plasma fig.4.3(b)

4.4 Conclusion

- ✓ lorsque l'ionisation est traitée comme un processus d'excitation et aucun électrons secondaires a été créés. la section efficace de collision électron-électron diminue rapidement avec l'augmentation de l'énergie électronique, le EEDF diminue au niveaux d'énergie électronique 4 eV, au delà de cette énergie, les processus d'excitation des espèces métastable $O_2(a^1\Delta_g)$, $O_2(b^1\Sigma_g^+)$ et $O_2(b^3\Sigma_u^+)$ n'ont aucune influence sur l'EEDF.
- ✓ Coefficient Townsend d'attachement diminue à partir de l'énergie électronique 4 eV a cause de la diminution de la densité des espèces métastable $O_2(a^1\Delta_g)$, $O_2(b^1\Sigma_g^+)$ et $O_2(b^3\Sigma_u^+)$.
- ✓ Les collisions inélastiques prennent des valeurs maximaux au cour de la décharge et la production de O_2^+ augment suivant les réactions R10 et R11 avec une vitesse de réaction plus rapide que les autres réactions.
- ✓ la mobilité prend une valeur maximal au début de décharge ensuite diminué avec l'augmentation de l'énergie électronique dû à la diminution rapide de la section efficace pour les collisions électrons-électrons, par contre le coefficient de diffusion augmente avec l'augmentation de l'énergie moyen vers l'état d'équilibre du plasma.

5. Conclusion générale

Dans ce mémoire, nous avons présenté une étude numérique des sections efficaces des collisions électroniques dans un plasma d'oxygène, et exposé les résultats relatifs aux coefficients de transports, coefficient de diffusion et la mobilité des électrons dans ce plasma. Nous avons trouvé :

- ❖ Les Sections efficaces d'excitation vibration de O_2 se divisent en deux parties :
 - de 0 - 1 eV : des pic très pointés,
 - à 10 eV : un large pic.
- ❖ Le spectre de perte d'énergie électronique de O_2 pour créer l'espèce $O_2(b^3\Sigma_u^+)$ montre une large pic dans la gamme énergétique 7 - 10 eV.
- ❖ Les sections efficaces de deux états $O_2(a^1\Delta_g)$ et $O_2(b^1\Sigma_g^+)$ ne sont pas très différentes, les deux espèces, un pic de résonance environ de 9 eV .
- ❖ L'espèce métastable $O(1D)$: la section efficace pour créer cette espèce forme un pic de résonance pour un énergie électronique 80 eV ensuite diminue rapidement sachant que la concentration de $O(1D)$ est importante dans le plasma d'oxygène.
- ❖ Le processus de dissociation d'attachement électronique dans un plasma d'oxygène pour créer O^- est plus rapide au début de la décharge, ensuite diminue rapidement.
- ❖ Lorsque l'ionisation est traitée comme un processus d'excitation et aucun électron secondaire a été créé et la section efficace des collisions électrons-électrons diminue rapidement avec l'augmentation de l'énergie électronique, le EEDF diminue au niveau d'énergie électronique 4 eV, au-delà de cette énergie, les processus d'excitation des espèces métastables $O_2(a^1\Delta_g)$, $O_2(b^1\Sigma_g^+)$ et $O_2(b^3\Sigma_u^+)$ n'ont aucune influence sur l'EEDF.
- ❖ Le coefficient Townsend d'attachement diminue à partir de l'énergie électronique de 4 eV à cause de la diminution de la densité des espèces métastables $O_2(a^1\Delta_g)$, $O_2(b^1\Sigma_g^+)$ et $O_2(b^3\Sigma_u^+)$.

- ❖ Les collisions inélastiques prennent une valeur maximale au cours de la décharge et la production de O_2^+ s'augmente suivant les réactions $R10$ et $R11$ avec une vitesse de réaction plus rapide que les autres réactions.
- ❖ La mobilité prend une valeur maximale au début de la décharge ensuite diminue avec l'augmentation de l'énergie électronique due à la diminution rapide de la section efficace pour les collisions électrons-électrons, par contre le coefficient de diffusion s'augmente avec l'augmentation de l'énergie moyenne vers l'état d'équilibre du plasma.

6. ANNEXES

6.1 Liste des tableaux

Tab.3. 1 Paramètre de décharge	31
Tab.3. 2 Processus de réactions considérés dans nos calculs	31
Tab.3. 3 Energie électronique du seuil.....	35

6.2 Liste des figures

Fig.1. 1 Différentiation des plasmas par l'énergie électronique $kBTe$,.....	10
Fig.1. 2 Configurations électrodes de DBD	13
Fig.1. 3 Systèmes d'électrodes couramment utilisés pour la production de décharges couronne.	14
Fig.1. 4 Premier coefficient de Townsend réduit en fonction du champ réduit pour certains gaz rares (néon, krypton, xénon, argon)	18
Fig.3. 1 Sections efficaces de collision élastique de O_2	32
Fig.3. 2 Sections efficaces d'excitation rotationnelle de O_2	33
Fig.3. 3 Sections efficaces de l'excitation vibrationnel de O_2 ($0 \rightarrow v$)	33
Fig.3. 4 Sections efficaces d'excitation des espèces métastables de O_2 :.....	34
Fig.3. 5 Sections efficaces d'excitation dissociation de O_2	35
Fig.3. 6 Sections efficaces d'excitation dissociation de O_2 pour produire l'espèce instable $O(1D)$	36
Fig.3. 7 Sections efficaces de d'ionisation de O_2 : (a) O_2^+ , (b) O^+	37
Fig.3. 8 Sections efficaces de dissociation attachement de O_2	37
Fig.4. 1 La fonction de distribution d'énergie électronique (EEDF)	41
Fig.4. 2 Coefficients Townsend réduits d'ionisation et d'attachement	42
Fig.4. 3 Taux de réactions en fonction de l'énergie électronique moyen pour les réactions indiqué au Tab.3.1	43
Fig.4. 4 (a) La mobilité électronique et (b) Coefficient de diffusion	44

7. Bibliographie

- [1] J-L Delcroix, Abraham Bers, Physique des plasmas/1, pp. 65-71, (1994).
- [2] J. Meek, J.D. Craggs, Electrical Breakdown of Gases, John Wiley & Sons, (1978).
- [3] J.R. Hollahanet A.T. Bell: Techniques and applications of plasma chemistry. Wiley inter science, (1974).
- [4] M. Abdel-Salam and D. Wiitanen, "Calculation of Corona Onset Voltage for Duct-Type Precipitators," IEEE Transactions on Industry Applications 29 (2), 274-280, (1993).
- [5] Les plasmas dans l'industrie, sous la direction de M. Or feuil, collection ELECTRA (EDF),.Dopee Diffusion, 1991
- [6] U. Kogelschatz, B. Eliasson& W. Egli, Dielectric-BarrierDischarges – Principle and Applications, ICPIG XIII, Toulouse 1997.
- [7] W. Niessen, O. Wolf, R. Schruft& M. Nieger, The influence of ethane on the conversion of NO_x in a dielectric barrier discharge, J. Phys. D: Appl. Phys, vol.31, 542-550., 1998
- [8] R.S. Sigmond& M. Goldman, Corona discharge physics and applications, Electrical breakdown and discharges in gases - Part B, NATO ASI series B89-B, 1989
- [9] E. Francke, S. Robert, J. Amouroux, Hydrodynamic and electrical characterization of a corona discharge plasma reactor, Journal of High Temperature Material Processes, Vol.4, n°1, pp.139-150, 1999.
- [10] K. Yan, S. Kanazawa, T. Ohkubo & Y. Nomoto, Oxidation and reduction processes during NO_x removal with corona induced non-thermal plasma, Plasma Chem. & Plasma Proc., vol.19, pp.421-443, 1999.
- [11] M. Dhainaut, E. Odic, M. Goldman, A. Goldman & C. Karimi, Dependence of the oxidation properties of a dielectric barrier discharge in air on the plasma and gas temperature, accepted paper for 8th International symposium on high pressure low temperature plasma chemistry, July 2002.

- [12] K. Takaki, M.A. Jani, T. Fujiwara, Removal of nitric oxide in flue gases by multipoint to plane dielectric barrier discharge, *IEEE Transactions on Plasma Science*, 27 (4), pp. 1137- 1145, 1999.
- [13] Pietsch, G. J., Haacke, M., Parameters Influencing the Yield of Surface Discharge Ozone Generators, In: Proc. 14th Ozone World Congress, Michigan, and vol. 1, pp. 311-323 (1999).
- [14] C.R. McLarnon & V.K. Mathur, Nitrogen oxide decomposition by barrier discharge, *Ind. Eng. Chem. Res.*, 2000, vol.39, pp.2779-2787.
- [15] Destruction of freons by the use of high-voltage glow discharges, F-J. Spiess, X. Chen, S.L. Brock, S.L. Suib, Y. Hayashi & H. Matsumoto, *J. Phys. Chem. A*, vol.104, pp.11111-11120, 2000.
- [16] C.D. Pintassilgo, J. Loureiro, G. Cernogora & M. Touzeaum, Methane decomposition and active nitrogen in a N_2-CH_4 glow discharge at low pressures, *Plasma Sources Sci. Technol*, vol.8, pp.463-478., 1999.
- [17] Marquez, J. Luo, H. Matsumoto & Y. Hayashi, Efficient Catalytic Plasma Activation of CO_2 , NO , and H_2O ; S.L. Suib, S.L. Brock, M.; *J. Phys. Chem. B*; vol.102 (48); pp.9661-9666; 1998.
- [18] Humpert, C., Pietsch, G. J., Modelling Results of the Discharge Development and the Energy Density of Barrier Discharges on Dielectric Surfaces, In: Proc. 15th Int. Sym. Plasma Chem. (ISPC-15), Orleans, France, pp. 1485-1490,(2001).
- [19] T. Murata, S. Moniwa, Y. Okita, K. Kanemaru, K. Terai, "High Concentration Ozone Generation in Surface Discharge", Proceedings of 13th Ozone World Congress, Vol. 2, Oral Presentations, p. 895(1997).
- [20] F. Hegeler, H. Akiyama, "Ozone Generation by Positive and Negative Wire-to-Plate Streamer Discharges", *J.J. Appl. Phys.* Vol. 36, Part 1, No. 8, pp. 5335, August 1997.
- [21] J.M.Meek J. D. Craggs, "electrical breakdown of gases", vol. 1. Oxford at the clarendon press, 1953.
- [22] G. R. GovindaRaju and R. Hackam, "Note on Paschen Law and the Similarity Theorem At the Minimum Breakdown Voltage," *IEEE Trans. Plasma Sci.*, no. 2, pp. 63–66.

-
- [23] J-M Rax, "Physique des plasmas", Cours et applications, DUNOD. 2005.
- [24] A. Fridman, "Plasma chemistry", Cambridge University Press, New York, 2008.
- [25] Y. I. Davydov, "On the first Townsend coefficient at high electric field Townsend coefficient at high reduced electric field," vol. 53, no. 3, pp. 1–5, 2004.
- [26] L. B. Loeb and J. M. Meek, "The mechanism of spark discharge in air at atmospheric pressure. I," J. Appl. Phys., vol. 11, no. 6, pp. 438–447, 1940.
- [27] Jean-Luc Raimbault, Introduction à la Physique des Plasmas LPP. polytechnique.
- [28] R. W. Evans and I. I. Inculet, "The Radius of the Visible Ionization Layer for Positive and Negative Coronas," IEEE Trans. Ind. Appl. IA-14 (6), 523-525 (1978).
- [29] J. P. Boeuf et E. Marode, "A Monte Carlo analysis of an electron swarm in a non uniform field : the cathode region of a glow discharge in helium", J. Appl. Phys. 15, 2169- 2187.
- [30] Birdsall C.K, and Langdon A.B., "Plasma Physics via Computer Simulation", McGraw Hill, NY, (1985).
- [31] Dawson J.M., "Particle simulation of plasmas", Rev. Mod. Phys. 55, 403 (1983).
- [32] S. Robert, F. Genet, E. Francke & J. Amouroux, Depollution processes in non-equilibrium plasmas, Proceedings of the 6th European Conference on Thermal Plasma processes, pp.811-818, Strasbourg 2000.
- [33] M. Pospisil, I. Viden, M. Simek & S. Pekarek, Application of plasma techniques for exhaust after treatment, 9th International Symposium "Transport and Air Pollution" , pp.523-528 Avignon, 2000.
- [34] S.L. Yao, E. Suzuki, N. Meng & A. Nakayama, A high-efficiency reactor for the pulsed plasma conversion of methane, Plasma Chem. Plasma Processing, vol.22, pp.225-237, 2002.
- [35] C. Liu, Marafee, Hill, Xu, R. Mallinson, Lobban, Oxidative coupling of methane with AC and DC corona-discharge reactor, Ind. Eng. Chem. Res., vol.35, pp.3295-3301, 1996.
- [36] www.lxcat.net/TRINITI.
- [37] Yukikazu Itikawa, Cross Sections for Electron Collisions with Oxygen Molecules.

- [38] Byoung-HoonJeon , Determination of Electron Collision Cross-Sections for the Oxygen Molecule by Using an Electron Swarm Study, Journal of the Korean Physical Society, Vol. 43, No. 4, October 2003, pp. 513_525
- [39] Christian Schulz and IlonaRolfes, Effect of Pseudo Collisions on Plasma Diagnostics, 2017 IEEE.
- [40] Tim Murphy , Total And DifferentialelectronCollisioncross Sections For O2 And N2.
- [41] Philippe Coche, Marco Antonio Ridenti et Vasco Guerra Electron scattering cross sections for the modelling of oxygen-containing plasmas.
- [42] Rapp D and Englander-Golden P 1965 J. Chem. Phys. 43 1464. Updated: 3 November 2010.
- [43] DjilaliBenyoucef, Mohammed Yousfi, Ar+/Ar, O2+/O2 and N2+/N2 Elastic Momentum Collision Cross Sections: Calculation and Validation Using the Semi-Classical Model - Plasma Science and Technology, Vol.16, No.6, Jun. 2014
- [44] Islamov R Sh, Kochetov I V, Pevgov V G, 1977, Preprint FIAN 169 Report Brown BoveriForschungszentrum CH-5405 Baden. Updated: 3 November 2010.
- [45] Report KLR-86-11C. Report Brown BoveriForschungszentrum CH-5405 Baden. Updated: 3 November 2010.
- [46] Klopovskii K S and Rakhimova T V 1994, Privat communication. This cross section corresponding non-dissociative excitation of the c1, C3 and A3 electronic states of O2.
- [47] Eliasson B, Kogelschatz U 1986 Basic data for modelling of electrical discharge in gases: Oxygen.
- [48] I. Kanik, S. Trajmar, and J. C. Nickel, J. Geophys. Res. 98, 7447 -1993.
- [49] S. J. Buckman, M. J. Brunger, and M. T. Elford, in *Photon and Electron Interactions with Atoms, Molecules and Ions*, Landolt-Börnstein, New Series, Group I, Vol. 17, pt. C edited by Y. Itikawa _Springer, New York, 2003.
- [50] S. Trajmar, D. W. Cartwright, and W. Williams, Phys. Rev. A 4, 1482 1971.
- [51] M. Allan, J. Phys. B 28, 5163 _1995.
- [52] Journal of Physical and Chemical Reference Data Monographs or Supplements.
- [53] T. W. Shyn, C. J. Sweeney, A. Grafe, and W. E. Sharp, Phys. Rev. A 50, 4794-1994.

-
- [54] I. Kanik, C. Noren, O. P. Makarov, P. Vattipalle, J. M. Ajello, and D. E. Shemansky, *J. Geophys. Res.* 108, 5126-2003.
- [55] C. A. Terrell, D. L. Hansen, and J. M. Ajello, *J. Phys. B* 37, 1931-2004.
- [56] V. Yu. Bazhenov, A. V. Ryabtsev, I. A. Soloshenko, A. G. Terent'eva, V. A. Khomich, V. V. Tsiolko, and A. I. Shchedrin Investigation of the Electron Energy Distribution Function.
- [57] V. Yu. Bazhenov, A. V. Ryabtsev, I. A. Soloshenko, A. G. Terent'eva, V. A. Khomich, V. V. Tsiolko & A. I. Shchedrin Investigation of the electron energy distribution function in hollow-cathode glow discharges in nitrogen and oxygen - *Plasma Physics Reports* volume 27, pages 813–818 (2001).
- [58] G J M Hagelaar and L C Pitchford Solving the Boltzmann equation to obtain electron transport coefficients and rate coefficients for fluid models *Plasma Sources Sci. Technol.* 14 (2005) 722–733.
- [59] Lu'isLemosAlves, Philippe Coche, Marco Antonio Ridenti, and Vasco Guerra Electron scattering cross sections for the modelling of oxygen-containing plasmas *Eur. Phys. J. D* (2016) 70-124.
- [60] W.L. Morgan Elendif, a time-dependent boltzmann solver for partially ionized plasmas *computer physics communications* (1990) 127-152.
- [61] N. A. Gorbunov, N. B. Kolokolov, and A. A. Kudryavtsev, *Zh. Tekh. Tech. Phys.* 33, 1104 (1988).
- [62] N. A. Gorbunov, N. B. Kolokolov, and A. A. Kudryavtsev, *Zh. Tekh. Fiz.,Sov. Phys. Tech. Phys.* 616 (1991).
- [63] N. A. Oyatko, Yu. Z. Ionikh, N. B. Kolokov, *et al.*, *J. Phys. D* 33, 2010 (2000).