الجمهورية الجزائرية الديمقراطية الشعبية République Algérienne Démocratique et Populaire وزارة التعليم العالي والبحث العلمي Ministère de l'Enseignement Supérieur et de la Recherche Scientifique حامعة أحمد دراية - 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

Étude de la fonction de distribution d'énergie électronique, sections efficaces et coefficient de transports dans un plasma froid $O_2 + N_2$

Présenté Par :

Mme. BOUAM Soumia

Mlle. RABHI Khoula

Devant le jury composé de:

Mr. SMILI Billel

Mr. KHALLADI Mohamed Fadel Mr. MENNAD Boufeldja Président MCB Examinateur MCB Université Ahmed Draia-Adrar

Université Ahmed Draia-Adrar

Promoteur MCB Université Ahmed Draia-Adrar

Année Universitaire 2020/2021

Remerciements

Au terme de ce modeste travail, Nous tenons pour toutes les commodités et aisances qu'il nous a apportées durant nos études et réalisation de ce projet. à remercier en premier grade le bon DIEU tout puissant de nous avoir donné le courage, la patience,

la foi et la volonté pour pouvoir continuer et réaliser ce travail. Nous remercions vivement notre promoteur Dr. MENNAD BOUFELDJA, pour l'intéressante documentation qu'ils la mettent à notre disposition, pour ses conseils précieux.

Nos remerciements vont aux membres du Jury, **Dr. SMILI Billel** qui nous accepté de présider le jury de cette mémoire, nos remerciements vivement ; **Dr. KHALLADI** Mohamed Fadel, qui nous a fait l'honneur d'examiner ce travail.

Nous tenons à exprimer toute notre reconnaissance à Mr. HARRACHE Zahir, professeur à l'université USTO pour leurs conseils avisés.

Nous exprimons également notre gratitude à tous les professeurs et enseignants qui ont collaboré à notre formation depuis notre premier cycle d'étude jusqu'à la fin de notre cycle universitaire. Sans négliger bien sur de remercier profondément tous ceux qui ont contribué de prés ou de loin à réalisation du présent travail.

Dédicaces

Je remercie Dieu tout puissant de m'avoir donné de la force et du courage pour finir ce modeste travail. C'est par un vif plaisir que je dédie ce travail conçu comme fruit prés requis à: Celle qui m'a offert la vie, qui ma bercée mes nuit blanches, celle qui m'a promis le succès après la persévérance ... à ma très chère maman, que dieu la protège. A l'âme pure de mon père que le bon Dieu l'accueille dans son vaste paradis A mes très chères sœurs et mes frères. A toute la famille **RABHI et BOUAM**.

A tous mes collègues de la promotion de 2020/2021. À tous les professeurs et enseignants qui ont collaboré à ma formation depuis mon premier cycle d'étude jusqu'à la fin du cycle universitaire.

Résumé

Ce travail constitue une étude détaillée sur les paramètres physiques du plasma issu d'un mélange $(N_2 \ 80\% - O_2 \ 20\%)$ et pompé par un décharge électrique, à savoir les processus de collision électronique, les sections efficaces, la fonction de distribution d'énergie électronique (EEDF : Electron Energy Distribution Function), et les coefficients de transports: coefficients Townsend réduits, coefficient de diffusion, , la fréquence des collisions, la mobilité et les taux de réactions chimiques impliquant des électrons. La cinétique de la décharge est décrite par 31 réactions chimiques avec des énergies de seuil, jusqu'à 20 *eV*. Nous avons analysé et étudié l'effet des différentes espèces constituant le plasma comme les espèces métastables, affectant d'une manière remarquable les sections efficaces de collision électronique et la fonction de distribution d'énergie électronique. Cette étude a été conduite pour les conditions : pression atmosphérique, température ambiante ($T_g = 300 \ K$), champ électrique réduit $E/N = 200 \ Td$ (où N est la densité du gaz). Le code utilisé est le BOLSIG+, avec la base de données PHELPS.

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

Abstract

This work constitutes a detailed study of physical parameters issued from gas mixture $(N_2 80\% - O_2 20\%)$ and generated by an electrical discharge, such as the electronic collision processes, the cross sections, the electron energy distribution function (EEDF), and the electronic transport coefficients: reduced Townsend coefficients, diffusion coefficient, collisions frequency, mobility, and electron reaction rates. The discharge kinetics is described by 31 chemical reactions with threshold energies until 20 *eV*. We analyzed and studied the effect of different plasma species as the metastable one, influencing notably the electron collision cross sections and the electron energy distribution function. This study is conducted for the following conditions: atmospheric pressure, ambient temperature ($T_g = 300 K$), reduced electric field E/N = 200 Td (where N is the gas' density). The used software is the BOLSIG+, with database of PHELPS.

Key words: Plasma; Discharge; EEDF; Model; Transport coefficients.

Sommaire

Introduc	ction générale	1
1. Chap	pitre 1: Généralités sur les décharges électriques et les processus chimique	dans un
1.1	Introduction	
1.2	Définition d'un plasma	5
1.2.1	Chocs élastiques et inélastiques	5
1.3	Processus chimique dans un plasma	6
1.3.1	Les réactions d'équilibre des espèces neutres	6
1.3.2	Réactions des molécules neutres dans des conditions de non-équilibre	6
1.3.3	Excitation par impact électronique	7
1.3.4	Dissociation des atomes et des molécules	7
1.3.5	Processus d'ionisation	7
1.4	Paramètres physiques des plasmas	9
1.4.1	Température électronique	10
1.4.2	Libre parcours moyen	10
1.4.3	Longueur de Debye	10
1.5	Classification des plasmas	
1.6	Décharges électriques à pression atmosphérique	
1.7	Différents types de décharge électrique pour produire un gaz de plasmas	s 12
1.7.1	Les décharges électriques silencieuses	12
1.7.2	Configurations de décharges électriques	13
1.7.3	Décharge électrique couronne	15
1.8	Loi de PASCHEN	
1.8.1	Coefficients de Townsend	16
1.8.2	Premier coefficient de Townsend $lpha$	16
1.8.3	Second coefficient de Townsend $oldsymbol{\gamma}$	18
2. Chap	pitre 2: Sections efficaces et Modèle physique	
2.1	Introduction	

2.2	Sections efficaces	21
2.2.1	Définition	21
2.2.2	Section efficace différentielle	22
2.2.3	Section efficace totale	23
2.3	Fonction de distribution	23
2.3.1	Définition	23
2.3.2	Grandeurs moyennes	24
2.3.3	L'équation de Boltzmann	24
2.4	Les équations fondamentales de conservation	26
2.4.1	Équation de continuité	26
2.4.2	L'équation de transfert de quantité de mouvement	26
2.4.3	L'équation d'énergie	27
2.4.4	La mobilité et coefficient de diffusion	27
2.4.5	Fréquence totale de collision	28
2.5	Approximations	
2.5.1	Modèle électrique auto cohérent	29
2.5.2	Modèle fluide	30
2.5.3	Modèle hybride	30
2.5.4	Modèle microscopique	30
2.5.5	Modèle fluide et approximation du champ local	31
3. Chap	oitre 3: Sections efficaces de diffusion électronique dans un gaz plasmagène (N	12
80% — O	2 20%)	
3.1	Introduction	
3.2	Résultats et discussions	
3.3	Conclusion	47
4. Chap	oitre 4: Coefficients de transport et fonction de distribution électronique dans	un
gaz plasm	agène (N ₂ 80% – O ₂ 20%)	
4.1	Coefficients de transports	50
4.2	Taux de réactions et coefficients de transport	51
4.2.1	Résultats et discusion	51
4.3	Fonction de distribution d'énergie électronique (EEDF)	55
4.3.1	Résultats et discussion	56

4.4	Conclusion	
5. Coi	nclusion générale	
6. AN	NEXES	
6.1	Liste des figures	
6.2	Liste des tableaux	
7. Bib	liographies	

Introduction générale

Le plasma est un état de la matière et pour lequel beaucoup reste aujourd'hui à comprendre, découvert en 1879, il fait l'objet de nombreuses études et son utilisation connait de nombreuses applications, qui sont de plus en plus palpables dans la vie de tous les jours. Le plasma est créé à partir des gaz selon deux possibilité : soit en les chauffant, soit en les soumettant à une décharge électrique. Cette dernière option permet d'obtenir un plasma qui possède une température relativement basse ; ce type de plasma, appelé plasma froid, est très important à l'égard de nombreux procédés technologiques et son contrôle est un enjeu très important. Un système de génération de plasma de décharge est généralement constitué d'une alimentation électrique, d'un applicateur et d'un gaz. L'applicateur comporte les électrodes conductrices et éventuellement des matériaux isolants. La géométrie de l'applicateur contribue à définir l'endroit où le courant électrique, fourni par l'alimentation, est injecté dans le gaz.

Les décharges électriques à la pression atmosphérique peuvent générer des plasmas non thermiques chimiquement très actifs. Ce type de milieu ionisé est intéressant par son caractère hors équilibre thermodynamique, L'étude des plasmas atmosphériques concerne plusieurs champs d'applications, que ce soit dans le domaine de l'aérodynamique, la combustion, ou encore dans le domaine de l'électromagnétisme.

Dans les plasmas froids hors équilibre, les électrons peuvent acquérir des énergies suffisamment élevées pour induire des collisions inélastiques générant des radicaux, des ions, et des espèces métastables. L'énergie électrique est dans ce cas transformée en énergie chimique pour avoir de l'ionisation, la dissociation et l'excitation des atomes et des molécules du gaz. Le mélange constitué 80 % d'azote et 20 % d'oxygène peut être considéré comme un bon modèle de l'air atmosphérique.

La modélisation théorique des processus cinétiques dans un plasma de mélange $N_2 - O_2$ a été développé dans plusieurs travaux de recherche. Par exemple, la fonction de distribution en énergie des électrons (EEDF : Electron energy distribution function), les coefficients de transport pour l'excitation, la dissociation et l'ionisation ont été calculés [1–5]. Dans la référence [1], les différentes approximations analytiques pour différents paramètres de transport ont été montrées afin de déterminer les caractéristiques de transport et d'énergie dans un plasma N_2-O_2 . Lafonction d'énergie électronique, le bilan énergétique et le taux de perte d'énergie électronique pour différents processus d'interaction (collisions élastiques, excitation, vibrationnels, dissociation, ionisation, ionisation dissociative,) ont été calculés par plusieurs groupes de recherche [6–13] dans un gaz à la pression atmosphérique.

Le présent travail est une extension logique d'un travail antérieur de Master de Z.ELDJOUZI, dirigé par le Dr. B.MENNAD et dont le titre est : *Calcul des Sections Efficaces et Coefficient de Transports dans un Plasma d'Oxygène), en ajoutant cette fois-ci le gaz d'azote avec un pourcentage de 80% (Etude d'un plasma d'air)*. Le but principal de ce travail est de comprendre les paramètres physiques dans un gaz plasmagène (N₂ 80 %–O₂ 20 %) crée par une décharge électrique. Ces paramètres sont les processus de collisions, les sections efficaces totales de collisions électroniques avec les états fondamentaux O₂ et N₂, la fonction de distribution d'énergie électronique (EEDF), et les coefficients de transports. Le code utilisé est le BOLSIG+[14], avec la base de données PHELPS[15].

Le manuscrit est organisé de la façon suivante :

 \checkmark Le premier chapitre présente les notions de base sur les décharges électriques et des généralités sur les plasmas et les différents types de processus de collisions électroniques, la cinétique chimique, ainsi que les paramètres physiques des plasmas.

✓ Le deuxième chapitre décrit la section efficace, l'équation de Boltzmann et les équations qui caractérisent l'évolution du plasma dans une décharge, les paramètres de transport. Les différents modèles d'une décharge électrique ont été également exposés.

✓ Dans le troisième chapitre, nous allons faire une étude paramétrique de l'ensemble des sections efficaces totales de collisions électroniques avec les molécules d'oxygène et d'azote à l'état fondamental. Un ensemble de 31 réactions a été considéré et impliquant22 espèces atomiques et moléculaires (fondamentales, excitées, métastables, états vibrationnels).

✓ La premier partie du quatrième chapitre décrit les taux de réactions (les 31 réactions chimique considérées) et les coefficients de transport à savoir coefficients Townsend réduits d'ionisation α/N , et d'attachement η/N , fréquence totale de collision, mobilité électronique et coefficient de diffusion. La deuxième partie traite la fonction de distribution d'énergie électronique (EEDF : Electron energy distribution function) du gaz plasmagène (N_2 80%- O_2 20%), sous les mêmes conditions que dans chapitre trois.

Chapitre 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 crées 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 leurs 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 [16]. Les décharges électriques peuvent être classifiées suivant différents critères : la pression, la caractéristique courant-tension, la nature du gaz, la configuration des électrodes, ...etc. [17].

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 acquit suffisamment d'énergie pour qu'un des électrons passe à un niveau (orbital) d'énergie plus élevé.

5

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

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 plasmas à l'état non équilibre baser sur les collision, impliquant des électrons, des ions et l'excitations des particules. En générales, 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 a 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

 $A + B^* \rightarrow A + B$ ou aussi $A + B^* \rightarrow AB$

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 excités a l'états 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 valeur des taux rapprochées d'une simple valeur constante, donc l'énergie de vibration jouer un rôle important avec les espèces a l'état de vibration pour accélère la réaction.

Par exemples la réaction :

$$A + BC_{(\nu)} \rightarrow AB + C$$

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

1.3.3 Excitation par impact électronique

$$e + B \rightarrow B^* + e$$

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

1.3.4 Dissociation des atomes et des molécules

$$AB + e \rightarrow A + B + e$$

Au niveau microscopique, ces réactions passer s souvent que par des étapes

$$AB + e \rightarrow AB^* + e$$
, suivi par la réaction: $AB^* \rightarrow A + B$

1.3.5 Processus d'ionisation

a) Ionisation par impact électronique

 $A + e \rightarrow A^+ + e + e$

L'espèce *A* est un atome a 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:

$$A^* + e \rightarrow A^+ + e + e$$

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

b) 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.

c) Photo-ionisation

$$A + h\nu \rightarrow A^+ + \epsilon$$

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

d) Réactions ion-molécule

$$A^- + B \rightarrow A + B^-$$

L'espèce A peuvent être comme un espace charge ou un électron d'être un électron. Ainsi que les processus de décomposition thermique suivant:

$$AB^- + C \rightarrow A^- + B + C$$

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.

e) Détachement d'électrons

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

$$A^- + B \rightarrow A + B + e$$
 où la réaction: $A^- + B \rightarrow AB + e$

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

f) 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^-

$$\begin{array}{l} A+e \ \rightarrow \ A^{-} \\ \\ A^{*}+e \ \rightarrow \ A^{-} \end{array}$$

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 :

$$AB^* + e \rightarrow A^- + B$$

g) Recombinaison

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

$$A^+ + B^- \rightarrow A^* + B^*$$

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

 $A^{+} + e \rightarrow A^{*} + A^{*} + h\nu$ $A^{+} + e + M \rightarrow A^{*} + M$ $A^{+} + e + e \rightarrow A^{*} + e$

h) Ionisation de surface

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

i) Collision avec les parois

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

j) Photo Processus

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

$$A^* \rightarrow A + h\nu$$

 A^* est un espèce a haut énergie et hvdésigne 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:

a) Densité électronique: la densité électronique n_e est le nombre d'électrons libres par unités de volume (cm⁻³).

b) 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:

$$\alpha = \frac{n_e}{n_e + N} \tag{1.1}$$

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

1.4.1 Température électronique

La température *T* caractérisant la distribution de *MAXWELL* – *BOLTZMANN* des particules s'exprime normalement en Kelvin (°*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 :

$$\frac{k_B T}{e} = T_e (\text{\'electron} - \text{volt})$$
(1.2)

 k_B constante de Boltzmann, T la température en °K et e la charge.

La température T_e ne représente que les 2/3 de l'énergie moyenne des particules du plasma: Si $T_e = 1 \ eV$, la température en Kelvin est d'environ 11600 °K pour une énergie moyenne de 1,5 eV.

1.4.2 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.

$$\lambda = \frac{v\delta t}{n\delta t} = \frac{1}{N\sigma} \tag{1.3}$$

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 $E_c > \varepsilon_i$.

Dans le cas où le champ électrique *E* est homogène, l'électron devra parcourir une distance x pour ioniser l'atome : $x = \frac{\varepsilon_i}{e \times E}$ (1.4)

1.4.3 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 :

$$\lambda_D = \sqrt{\frac{\varepsilon_0 k_B T_e}{n_e e^2}} \tag{1.5}$$

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 (°*K*). $\varepsilon_0 = 8.84 \times 10^{-12} F. m^{-1}$, $k_B = 1.3806 \times 10^{-23} J. K^{-1}.molécule^{-1}$

 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 classifier les différents plasmas.



Figure 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

[19]

La Figure 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) [18].

Cette classification permet alors de ressortir deux grandes catégories de plasmas: les plasmas « froids » et les plasmas « chauds ».

Les plasmas thermiques sont générés par des torches à plasma ou des arcs. Les températures de ces plasmas sont typiquement comprises entre $5.000 \,^{\circ}K$ et $50.000 \,^{\circ}K$. 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 [20].

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 décharge:

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[21]. 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 [22] (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 [23-26]. 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 [27, 28], multi fils-plan, fil-cylindre [29].

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 [31], Chlorofluorocarbones [30]) ou les NO_x [32]. Ces décharges sont caractérisées par un plasma homogène. A basse pression, la technique permet l'utilisation de faibles champs électriques (*de l'ordre de* 10 *V. cm*⁻¹) mais ne doit pas occulter le problème de la limitation du débit massique de gaz à traiter.

1.7.2 Configurations de décharges électriques

Plusieurs types et configurations de décharges électriques peuvent être utilisées Figure.1.2, les plus courantes sont les décharges à barrières diélectriques (DBD) Figure.1.2(a) qui sont préférentiellement utilisables pour le traitement de faibles volumes gazeux en raison de la limitation de la distance inter-électrodes à quelques mm pour les alimentations électriques standards.

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* Figure.1.2 (e)). 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 [28] et la simulation [33] 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.



Figure 1.2 Configurations électrodes de DBD: (a) à deux barrières, (b) DBD à une barrière, (c) DBD cylindrique, (d) DBD à une barrière, (e) 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. Dans ce type de décharge il n'y a pas de barrière diélectrique entre les électrodes métalliques [34, 35]. pour ce type de décharge dans le cas de de plasma O_2 ou dans l'air on peut obtenir un grand rendement et une grande concentration d'ozone dans un espace inter-électrodes.

Il est difficile d'obtenir une décharge stable. Facilement, Il peut y'avoir un développement d'un arc ou *spark*.Dans le cas d'une tension positive, la décharge apparaît entièrement dans l'espace inter-électrodes. Et 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. 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 (Figure 1.3). La distance inter-électrodes est habituellement inférieure au centimètre.



Figure 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 Apendant 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 interélectrodes multiplie par la 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 [36, 37].

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 joue 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 [38].Considérant un parcours infinitésimal dx, la probabilité d'avoir une collision, notée φ_c est donnée par :

16

(1.9)

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

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

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

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

$$\varphi(dx) = (1 - dx/\lambda)^n \tag{1.8}$$

Sachant que : x = ndx

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

Et pour
$$n \to \infty$$
 : $\varphi(x) = \exp\left(-\frac{x}{\lambda}\right)$ (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 » [38] définie par:

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

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

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

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

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

$$E = \frac{v}{d} \tag{1.16}$$

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

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

En posant :

I

$$A = \frac{\sigma}{k_b \times T} \tag{1.18}$$

Et :

$$B = \frac{\varepsilon_i \times \sigma}{e \times k_b \times T} \tag{1.19}$$

L'expression (1.17) devient :

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



Figure 1.4 Premier coefficient de Townsend réduit en fonction du champ réduit pour certains gaz rares (néon, krypton, xénon, argon) [42].

La Figure 1.4 représenté le premier coefficient de Townsend réduit (α/p) en fonction du champ réduit (E/p) pour différents gaz.

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 [38].

En considérant le raisonnement précédemment appliqué, si un électron est créé à partir d'un seul électron germe, ce dernier a parcouru une distance égale au libre parcours moyen [40], α serait égale à 1 / λ . 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[41].

La condition d'auto entretien de Townsend[37] est définie par la relation suivante :

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

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) :

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

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

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

Par identification il devient :

$$\alpha \times d = A \times p \times d \times e^{\left(-\frac{B}{E/p}\right)} = \ln\left(\frac{1}{\gamma} + 1\right)$$
(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 [39] et de la nature et de l'énergie des ions incidents.

Chapitre 2: Sections efficaces et Modèle physique.

Nous allons décrire dans ce chapitre les sections efficaces des collisions dans un plasma, l'équation de Boltzmann et les équations qui caractérisent l'évolution du plasma dans une décharge, les coefficients de transports et nous exposerons les différents modèles électriques d'une décharge.

2.1 Introduction

La simulation des processus du plasmas 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 décrire le plasmas 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 permit de déterminer les phénomènes de transports dans un plasmas [30,23], 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 Sections efficaces

2.2.1 Définition

dans le plasmas, les interactions entre les espèces chimique produisent des collisions élastique et inélastique, les collisions élastiques lorsque les deux particules gardent leur identité et reste dans la même état d'énergie, et les collisions inélastiques peuvent laisser la molécule dans un état rotationnel, vibratoire ou excité., dissocier ou ionisation les particules faiblement liés.. La probabilité pour chacun de ces types d'interactions qui se produisent est quantifiée par la section efficace.

Les sections efficaces sont généralement définies en terme de faisceau de particules identiques qui arrivent sur une cible a symétrie sphérique. Le potentiel d'interaction est le même pour toutes les particules du faisceau.

Les particules incidentes avec un paramètre d'impact *b* seront devisées avec un angle χ , et on peut considérer que les particules incidentes avec un paramètre d'impact *b* + *db* seront devisées avec un angle $\chi + d\chi$ Figure 2.1.

Le nombre de particules devisées par seconde dans un angle compris entre χ et χ + $d\chi$ dépendra du flux Γ (densité de courant) de particules incidentes. Le flux de particules Γ est donnée par le nombre particules incidentes par unité de surface perpendiculaire au faisceau et par unité de temps [43].



Figure 2.1 Illustration d'une section efficace pour une collision binaire dans un champ de force centrale [43].

2.2.2 Section efficace différentielle

La section efficace différentielle $\sigma(\chi, \varepsilon)$ appelée parfois fonction de distribution angulaire est définie comme le nombre de particules devisées par unité de temps, par unité de flux incident Γ et par unité d'angle solide Ω faisant un angle χ avec l'axe des z. La formule mathématique dégagée de cette définition est donnée par [43]:

$$\frac{dN}{dt} = \sigma(\chi, \varepsilon) \Gamma. d\Omega$$
(2.1)

Le nombre de particules incidentes par unité de temps avec un paramètre d'impact compris entre *b* et *b* + *db* dans un plan orbital orientée entre ε et ε + *d* ε est donnée par Γ . *b*. *db*. *d* ε .

Le même nombre de particules devisées par unité de temps entre élément différentiel d'angle solde $d\Omega$ contenu entre les angles χ et $\chi + d\chi$ et entre ε et $\varepsilon + d\varepsilon$, permet décrire l'égalité

suivante
$$\frac{dN}{dt} = \sigma(\chi, \varepsilon)$$
. Γ . b. db. d ε (2.2)

Combinant les deux équations (2.1) et (2.2) on obtient :

$$\sigma(\chi,\varepsilon) = \frac{b}{\sin(\chi)} \frac{db}{d\chi}$$
(2.3)

La dimension de la section efficace différentielle est la dimension d'une surface $\sigma(\chi, \varepsilon)$ dépend directement du potentiel d'interaction des particules.

2.2.3 Section efficace totale

La section efficace totale est définie comme le nombre de particules devisées par unité de temps et par unité de flux de particules incidentes dans toutes les directions ou orientations par rapport au centre diffuseur (cible). En intégrant la section efficace différentielle sur tout l'angle solide on obtient la formule relative à la section efficace totale [43]:

$$\sigma_t = \int_{\Omega} \sigma(\chi, \varepsilon) d\Omega = \int_0^{2\pi} d\varepsilon \int_0^{\pi} \sigma(\chi, \varepsilon) \sin(\chi) d\chi$$
(2.4)

Dans le cas où le potentiel d'interaction est symétrie sphérique et non polaire, la section efficace différentielle est indépendante de la variable ε L'équation (2.4) prend alors la forme simple suivante:

$$\sigma_t = 2\pi \int_0^\pi \sigma(\chi) \sin(\chi) \, d\chi \tag{2.5}$$

2.3 Fonction de distribution

2.3.1 Définition

Chaque particule du gaz est définie par une vectrice positionr, qui va de l'origine du système de cordonnées 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 cordonnées que l'on regroupe pour former l'espace des phases, à un instant t, le nombre probable de particules dN(r, v, t) se trouvant dans l'élément de volume d^3r situe autour du point r avec une vitesse variant dans l'élément de vitesse d^3v .

Cet élément est défini par :

$$dN(r, v, t) = f(r, v, t)d^{3}rd^{3}v$$
(2.6)

Avec : f(r, v, t): la fonction de distribution spatial de densité des particules et d^3rd^3v : l'élément de volume dans l'espace des phases.

2.3.2 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:

$$N(\mathbf{r},t) = \int f(\mathbf{r},\mathbf{v},t)d^3v \qquad (2.7)$$

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 :

$$\langle v \rangle = \frac{1}{N(r,t)} \int v f(r, v, t) d^3 v$$
(2.8)

la valeur moyenne pour tout autre grandeurs χ :

$$\langle \chi \rangle = \frac{1}{N(\mathbf{r},t)} \int \chi f(\mathbf{r},\mathbf{v},t) d^3 v$$
(2.9)

2.3.3 L'équation de Boltzmann

L'équation de Boltzmann est une équation de continuité de la fonction de distribution dans l'espace des phases d^3rd^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.

$$\frac{df(\mathbf{r},\mathbf{v},t)}{dt} = \left(\frac{\delta f(\mathbf{r},\mathbf{v},t)}{\delta t}\right)_{collisions}$$
(2.10)
$$\frac{df(\mathbf{r},\mathbf{v},t)}{\delta t} = \frac{\partial f}{\partial t} \frac{\partial f}{\partial t$$

$$\frac{df(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)}{dt} = \frac{\partial f}{\partial t} + \frac{\partial f}{\partial \mathbf{r}} \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial t} + \frac{\partial f}{\partial \mathbf{v}} \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t}$$
(2.11)

Donc :

$$\frac{df(\mathbf{r},\mathbf{v},t)}{dt} = \frac{\partial f}{\partial t} + \vec{v}.\vec{\nabla}_{r}f + \frac{\vec{F}}{m}.\vec{\nabla}_{v}f = \left(\frac{\delta f(\mathbf{r},\mathbf{v},t)}{\delta t}\right)_{collisions}$$
(2.12)

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

Signification des différents termes:

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

 $\frac{\vec{F}}{m}$. $\vec{\nabla}_{v} f$: 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 distorde 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 :

$$\vec{\nabla}.\vec{E} = \frac{\sum_i e_i N_i}{s} \tag{2.13}$$

L'équation de Boltzmann couplée à celle de Poisson forme un modèle électrique autocohérent 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 x(v):

$$\int \left(\frac{\partial f}{\partial t} + \vec{v}.\vec{\nabla}_r f + \frac{\vec{F}}{m}.\vec{\nabla}_v f\right) \chi(v) d^3 v = \int \left(\frac{\delta f(r,v,t)}{\delta t}\right)_{coll} \chi(v) d^3 v \qquad (2.14)$$

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

$$\frac{\partial}{\partial t}(n\langle \chi(\boldsymbol{\nu})\rangle) + \frac{\partial}{\partial r}(n\langle \chi(\boldsymbol{\nu})\boldsymbol{\nu}\rangle) - \gamma n \langle \frac{\partial}{\partial \boldsymbol{\nu}}\chi(\boldsymbol{\nu})\rangle = \int \left(\frac{\partial}{\partial t}f\right)_{coll}\chi(\boldsymbol{\nu})d^3\boldsymbol{\nu}$$
(2.15)

2.4 Les équations fondamentales de conservation

2.4.1 Équation de continuité

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

$$\frac{\partial}{\partial t}(n_{e,p}) + \frac{\partial}{\partial r}(n_{e,p}\bar{v}_{e,p}) = S_{e,p}$$
(2.16)

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 :

$$S_e = n_e (v_i(\vec{r}, t) - v_a(\vec{r}, t)) - \beta_{e,p}(\vec{r}, t) n_e n_p$$
(2.17)

 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.

2.4.2 L'équation de transfert de quantité de mouvement

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

$$\frac{\partial}{\partial t}(nm\vec{v}) + nm\left(\vec{v}.\frac{\partial}{\partial \vec{r}}\right)(\vec{v}) - \vec{v}.\left(\frac{\partial}{\partial \vec{r}}(nm\vec{v})\right) + \vec{\nabla}_{\vec{r}}\otimes\vec{P} - n\vec{F} = \int \left(\frac{\partial}{\partial t}f\right)_{coll} d^{3}\vec{v}$$
(2.18)

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

 \overrightarrow{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 définit une fréquence d'ionisation v_i .

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

$$nm\left[\frac{\partial}{\partial t} + \vec{v}.\nabla_r\right]\vec{v} = n\vec{F} - \vec{\nabla}_{\vec{r}}\otimes\vec{P} - nmv_m\vec{v} - Sm\vec{v}$$
(2.19)

2.4.3 L'équation d'énergie

En remplaçant $\chi(v)$ 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:

$$\frac{\partial}{\partial t}\left(n\frac{1}{2}mv^{2}\right) + \frac{\partial}{\partial r}\left(n\left\langle\frac{1}{2}mv^{2}v\right\rangle\right) - \gamma n\left\langle\frac{\partial}{\partial v}\frac{1}{2}mv^{2}\right\rangle = \int \left(\frac{\partial}{\partial t}f\right)_{coll}\frac{1}{2}mv^{2}d^{3}v$$
(2.20)

$$\Rightarrow \frac{\partial}{\partial t}(nv^2) + \frac{\partial}{\partial r}(n\langle v^2 v \rangle) - 2\frac{\vec{F}}{m}.\vec{v}n = \int \left(\frac{\partial}{\partial t}f\right)_{coll} v^2 d^3 v(2.16)$$
(2.21)

Avec
$$\gamma = \frac{r}{m}$$

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.

2.4.4 La mobilité et coefficient de diffusion

Pour résoudre l'équation de continuité (2.16), les auteurs Hagelaar et al [1] ont supposé que la fonction de distribution d'énergie électronique f est symétrique dans espace de vitesse autour de la direction du champ électrique.donc la fonction f varie suivant la direction du champ électrique (z), on obtient:

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(n_{e,p} \right) + \frac{\partial}{\partial r} (\Gamma) = S_{e,p} \tag{2.22}$$

d'après les approximation de Hagelaar et al [1] :

$$\Gamma = \mu E.n - \frac{(\partial D.n)}{\partial z}$$
(2.23)

La mobilité multiplie par la densité du gaz [1]:

$$\mu . N = -\frac{1}{3} \sqrt{\frac{2e}{m}} \int_0^\infty \frac{\varepsilon}{\overline{\sigma_m}} \frac{\partial F_0}{\partial \varepsilon} d\varepsilon$$
(2.24)

Coefficient de diffusion multiplie par la densité du gaz [1]:

$$D.N = \frac{1}{3} \sqrt{\frac{2e}{m}} \int_0^\infty \frac{\varepsilon}{\overline{\sigma_m}} F_0 d\varepsilon$$
(2.25)

avec $\overline{\sigma_m}$ la section efficace moyen de transfert quantité de mouvement, N la densité du gaz et F_0 la fonction de distribution d'énergieélectronique normalisé donnée par la formule:

$$\int_0^\infty \sqrt{\varepsilon} F_0 d\varepsilon = 1 \tag{2.26}$$

2.4.5 Fréquence totale de collision

La fréquence totale de collision v_{tot} donnée par la formule :

$$v_{tot}(t) = N. \langle v_t(t) \rangle. Q_{tot}(\varepsilon)$$
(2.27)

où N est la densité du gaz, $\langle v_t(t) \rangle$ la vitesse relative moyen et $Q_{tot}(\varepsilon)$ la section efficace totale de collision.

2.5 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 impulsionels, les impulsions ne durent que quelques dizaines de nanosecondes (20 à 50 ns dans les panneaux a 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 ou' l'énergie dirigée des électrons peut être comparable à l'énergie thermique.

2.5.1 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 positionvitesse (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 dirigéev(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.

2.5.2 Modèle fluide

Dans cette catégorie de modèles [44-46], 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.

2.5.3 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 [45].

2.5.4 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 particulaires 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*) [46] pour l'étude des plasmas non collisionnes (équation de Vlasov) et, en ce qui concerne les collisions, aux méthodes statistiques de Monte Carlo.

2.5.5 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 $10^{-12} s$.

31

A très faible énergie électronique, il n'y a que des collisions élastiques. Il s'ensuit que la fréquence de perte d'énergie v_{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 :

$$v_d = \frac{eE}{m_e v_m} \Rightarrow e\bar{v}E = v_{\varepsilon}\bar{\varepsilon}avec\bar{\varepsilon} = \frac{1}{2}m\bar{v}^2$$
 (2.28)

En combinant ces équations, on voit que le rapport $\frac{v_{\varepsilon}}{v_m}$ est du même ordre de grandeur que $\frac{v_d^2}{v^2}$ où v_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: Sections efficaces de diffusion électronique dans un

gaz plasmagène (N₂ 80% – O₂ 20%).

Dans ce chapitre, nous avons fait une étude paramétrique de l'ensembles des sections efficaces totales de collisions électroniques avec les molécules d'oxygène et d'azote à l'état fondamental. Un ensemble de 31 réactions a été considéré et impliquant 32 espèces atomiques et moléculaires (fondamentales, excitées, métastables, et états vibrationnels).

3.1 Introduction

La dynamique de collision électronique joue un rôle important dans la génération des plasmas, une collision inélastique peut laisser la molécule dans un état d'interaction rotationnel, vibratoire ou excité. Les électrons peuvent également dissocier la molécule ou produire un état ionisé. Les particules vont perdre d'énergie par ce type d'interaction. La probabilité de collision qui se produit est quantifiée par la section efficace, qui est mesurée en unité de surface.

Un grand nombre de processus chimiques impliquant des atomes, des molécules et des ions comme l'excitation et la désactivation des états électroniques de O_2 et N_2 ont été publiés [47–50] et en impliquant des états métastables de $N_2(A, B, a'')$. Il a été observé que le processus de collisions entre deux états de vibration $N_2(\nu)$ n'est pas très important.

Les processus d'excitation, d'ionisation et de dissociation des plasmas, peuvent être nécessaires pour créer un état atomique et/ou moléculaire donnés. Ces états sont caractérisés en termes d'énergie moyenne. Par exemple, l'énergie électronique ε_0 nécessaire pour créer une paire électron-ion est 36 *eV* dans l'azote et de 28 *eV* dans l'oxygène [48–51]. Ces valeurs sont légèrement plus de deux fois que les énergies d'ionisation de l'état fondamental, De plus, l'énergie moyenne est environ 30 *eV* dans tous les gaz est indépendante du courant.

Pour créer un plasma, la concentration des états métastables est importante, en raison de leur durée de vie. Ces états sont capables de stocker de l'énergie pendant une longue période, avant de libérer cette énergie, le premier est l'ionisation : d'une part il faut moins d'énergie pour ioniser une molécule par l'impact d'un électron avec un état métastable, d'autre part l'espèce métastable peut stocker suffisamment d'énergie pour ioniser le gaz, soit par l'effet de PENNING ou l'ionisation associative [9]. La figure 3.1 représente les transitions radiatives dans la molécule N_2 entretenue par une décharge [51].

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 collision, qui dépendent de l'énergie électronique.

Itikawa (en 2009) [8], Alves et al. [52], et Brunger et al. [53] ont publié une compilation des données sur les collisions d'électrons avec O_2 , pour calculer les sections efficaces de collisions électroniques dans un plasmas d'oxygène. Un travail détaillé sur les section efficaces de collisions électroniques dans un mélange N_2 - O_2 a été publie par Campbell et al. [5] en 2001 qui ont étudié les

sections efficaces intégrales pour l'excitation par impact électronique de N_2 . Campbell et al. [6] en 2004 ont montré la production de l'état excité N_2 (ν), par impact électronique, aussi Itikawa [54] en 2009 a étudié les section efficaces de collisions électroniques avec les molécules d'azote. Le même auteur [55] en 1986 a mis en évidence les collisions d'électrons et de photons avec l'azote moléculaire.



Figure 3.1 Niveaux d'énergie et transitions radiatives dans N_2 [49].

Nous avons basé dans ce chapitre sur 31 réactions chimique dans un gaz plasmagène de N_2 et O_2 pour calculer les sections efficaces de collision totale dans la gamme d'énergie électronique jusqu'à 1000 eV. Nous avons trouvé des données pour les processus de collisions électroniques élastiques et inélastiques. Les sections efficaces sont utilisées comme des paramètres d'entrée dans l'équation de Boltzmann pour calculer les coefficients de transports utilisant le code BOLSIG+ [14] (voir Schéma 3.1).



Schéma 3.1 : Principe des calculs effectués via le code BOLSIG+

Les processus réactionnelle comprennent 32 espèces chimiques du plasma dans le mélange gazeux (20% de O_2 et 80% de N_2), et regroupés dans 31 réactions. Les paramètres du plasma de décharge sont indiqués sur le Tableau 3.1.

Paramètre de décharge	Data
Gaz	<i>O</i> ₂ 20% , <i>N</i> ₂ 80%
Pression	1 atm
Température	300 °K
Champ électrique réduit	200 <i>Td</i> (où: 1 Td = 10^{-17} V cm ²)
Coefficient d'ionisation	$\alpha = 10^{-4}$

Tableau 3.1 Paramètre du plasma

Nous montrons sur le Tableau 3.2 les détails des espèces chimiques considérées,

Et sur le Tableau 3.3 les réactions chimiques impliquant les espèces que nous avons tenu compte dans nos calculs.

Espèce	Etat
N ₂ , O ₂ , <i>O</i>	fondamental
$N_2(v = 1), O_2(v = 1)$	vibration
$N_2(A \ ^3\Sigma_u^+)(\ v = 0 - 10)$	Métastable vibration
$N_2(B^3\Pi_g)$	métastable
$N_2(W^3\Delta_u)$	métastable
$(\boldsymbol{B}^{3}\boldsymbol{\Sigma}_{\mathbf{u}}^{-})$	métastable
$N_2(a' {}^1\Sigma_u^-)$	métastable
$N_2(a \ ^1\Pi_u)$	métastable
$(w^{1}\Delta_{u})$	métastable
$N_2(C^3\Pi_u)$	métastable
$N_2(E^{3}\Sigma_g^+)$	métastable
$N_2(a'' \ {}^1\Sigma_g^+)$	métastable
$\boldsymbol{O}_2\left(\boldsymbol{a}\ ^1\Delta_{\boldsymbol{g}}\right)$	métastable
$O_2(b \ {}^1\Sigma_g^+)$	métastable
0 (1 D)	métastable
O_2^+, O^+, N_2^+, O^-	ionisé

Tableau 3.2. Les espèces considérés dans ce travail.

Réaction	Processus	Energie électronique de seuil	Réf.
$R1) e + N_2 \rightarrow e + N_2$	Effective	$E = 0 \ eV$	[15]
$R2) e + N_2 \rightarrow e + N_2(v = 1)$	Excitation	0.29 eV	[15]
$R3) e + N_2 \rightarrow e + N_2(v = 2)$	Excitation	0.59 eV	[15]
$R4) e + N_2 \rightarrow e + N_2(v = 3)$	Excitation	0.88 eV	[15]
$R5) e + N_2 \rightarrow e + N_2(v = 4)$	Excitation	1.17 eV	[15]
$R6) e + N_2 \rightarrow e + N_2(v = 5)$	Excitation	1.47 eV	[15]
$R7$) e + N ₂ \rightarrow e + N ₂ ($v = 6$)	Excitation	1.76 eV	[15]
$R8) e + N_2 \rightarrow e + N_2(v = 7)$	Excitation	2.06 eV	[15]
$R9) e + N_2 \to e + N_2 (v = 8)$	Excitation	2.35 eV	[15]
R10) e + N ₂ → e + N ₂ (A ³ Σ _u ⁺)(v = 0 − 4)	Excitation	6.17 eV	[15]
R11) e + N ₂ → e + N ₂ (A ³ Σ _u ⁺)(v = 5 − 9)	Excitation	7 eV	[15]
$R12) e + N_2 \rightarrow e + N_2 (B^{-3}\Pi_g)$	Excitation	7.35 eV	[15]
$R13) e + N_2 \rightarrow e + N_2(W^3 \Delta_u)$	Excitation	7.36 eV	[15]
R14) e + N ₂ → e + N ₂ (A ³ Σ _u ⁺)(v = 10)	Excitation	7.8 eV	[15]
$R15) e + N_2 \rightarrow e + N_2 (B^{-3}\Sigma_u^{-})$	Excitation	8.16 eV	[15]
$R16) e + N_2 \rightarrow e + N_2(a' {}^{1}\Sigma_u^{-})$	Excitation	8.4 eV	[15]
$R17) e + N_2 \rightarrow e + N_2(a \ ^1\Pi_u)$	Excitation	8.55 eV	[15]
$R18) e + N_2 \rightarrow e + N_2(w \ ^1\Delta_u)$	Excitation	8.89 eV	[15]
$R19) e + N_2 \rightarrow e + N_2(C^{3}\Pi_u)$	Excitation	11.03 eV	[15]
$R20) e + N_2 \rightarrow e + N_2(E^{-3}\Sigma_g^+)$	Excitation	11.88 eV	[15]
$R21) e + N_2 \rightarrow e + N_2(a'' \Sigma_g^+)$	Excitation	12.25 eV	[15]

Tableau 3.3. Réactions chimiques considérées dans ce travail.

$R22) e + N_2 \to e + e + N_2^+$	Ionisation	15.6 eV	[15]
$R23) e + 0_2 \to 0^- + 0$	Attachement	0 eV	[58]
$R24) e + 0_2 \rightarrow e + 0_2$	Elastique	0 eV	[57]
$R25) e + 0_2 \rightarrow e + 0_2(v = 1)$	Excitation	0.193 eV	[57]
$R26) e + O_2 \to e + O_2 (a {}^{1}\Delta_g)$	Excitation	0.98 eV	[57]
$R27) e + 0_2 \to e + 0_2 (b {}^{1}\Sigma_g^{+})$	Excitation	1.63 eV	[57]
$R28) e + 0_2 \to e + 0 + 0$	Excitation	5.58 eV	[59]
$R29) e + 0_2 \to e + 0 + 0(1D)$	Excitation	8.4 eV	[57]
$R30) e + 0_2 \to e + e + 0_2^+$	Ionisation	12.1 eV	[57]
$R31) e + 0_2 \to e + e + 0 + 0^+$	Ionisation	19.5 eV	[57]

3.2 Résultats et discussions



Figure 3.2 Sections efficaces totales de collisions élastiques dans N₂.

La courbe des sections efficaces totales de collisions élastiques dans N_2 en fonction de l'énergie électronique est représentée sur la Figure 3.2, comme dans le travail de Karwasz et al.[56] qui ont déterminé les meilleures valeurs de sections efficaces dans N_2 : le pic de résonance est d'environ 2 *eV*.

On voit sur cette figure que les collisions élastiques porte un large pic au cours de la décharge, ce sont les premiers processus créés dans le plasma.



Figure 3.3. Sections efficaces totales de collisions dans N₂: (a)($\nu = 1, 2, 3$), (b) ($\nu = 4, 5, 6$).



Figure 3.4 Sections efficaces totales de collisions des espèces $N_2(v = 7, 8)$.

Le premier processus créé dans le plasma concerne les transitions de l'état fondamental d'azote vers les états de vibrations. On présente sur la Figure 3.3 (a) les sections efficace des transitions de l'état fondamentale de N_2 vers les niveaux devibration (v = 1, 2, 3). Pour le niveau de vibration v = 1, on voit 5 pics derésonance, le premier pic d'énergie électronique est à 2 *eV* et le dernier pic d'énergie électronique à 3.1 *eV*.

La valeur maximale des section efficaces varie entre 2.4 $\times 10^{-16}$ cm² et 3.1 $\times 10^{-16}$ cm²pour cette transition. Dans le cas où v = 1 et 2, la Figure 3.3 montre 4 pics de résonance pour chaque niveau de vibration, ces pics prennent des maximums pour des énergies électroniques de 2.1 *eV*, 2.15 *eV*, 2.7 *eV*, 3 *eV*. Pour le niveau de vibration v = 2, les énergies électroniques des pics de résonance sont 2.19 *eV*, 2.58 *eV*, 2.75 *eV*, 2.9 *eV*, avec des maximums desections efficaces variant entre 2.4 $\times 10^{-16}$ et 3×10^{-16} cm².

La Figure 3.3 (b) représente les variations de sections efficaces pour les niveaux de vibration v = 4, 5, 6). Pour v = 4 et 5, 4 pics de résonance sont observés avec des énergies électroniques variant entre 2 eV et 3 eV. La diminution des valeurs de sections efficaces et le nombre des pics est due à l'augmentation de nombre quantique de vibration. On voit ça clairement sur la Figure 3.4 : deux pics de

résonance pour les niveaux de vibration v = 7 et 8, avec des valeurs maximales de sections efficaces de l'ordre de $2 \times 10^{-16} \text{ cm}^2$.

Ce résultat est en accord avec les travaux de Brunger et al. [4], Campbell et al. [5], Itikawa [4], qui ont trouvé le même nombre de pics pour chaque transition v = 1 - 8, et le même ordre de grandeur de sections efficaces. D'après Campbell et al. [6], les transitons de l'état fondamental de N₂ vers les états de vibration v = 1 - 10 sont faibles par comparaison avec les autre transitions des états de vibrations (v > 10), qui ne font pas partie de ce travail.



Dans le cas de l'azote, le premier état métastable électronique créé dans la décharge est l'états vibrationnels $N_2 \left(A^{3}\Sigma_{u}^{+}\right)$ (v = 0 - 10), avec un seuil d'énergie de 6.2 eV (Tableau 3.3) et avec une durée de vie proche de 2 s [48]. Dans le cas de l'azote, l'énergie interne conservé n'est pas celle des espèces métastables électroniques $N_2(B^{3}\Sigma_{u}^{-})$, $N_2(a'^{1}\Sigma_{u}^{-})$, $N_2(E^{1}\Sigma_{g}^{+})$, $N_2(a''^{1}\Sigma_{g}^{+})$ mais de l'espèce métastable à l'états de vibrationnels $N_2 \left(A^{3}\Sigma_{u}^{+}\right)$ (v = 0 - 10) [48]. Donc, les collisions entre les électroniques N₂($B^{3}\Sigma_{u}^{-})$, $N_2(a'^{3}\Sigma_{u}^{+})$ (v = 0 - 10) produisent des espèces métastables électroniques $N_2(B^{3}\Sigma_{u}^{-})$, $N_2(a'^{3}\Sigma_{u}^{+})$ (v = 0 - 10) [48].

La Figure 3.5 (a) montre les sections efficaces de collision des espèces métastables à l'état vibrationnels $N_2(A^{3}\Sigma_u^+)(v = 0 - 10)$. Les sections efficaces des espèces $N_2(A^{3}\Sigma_u^+)(v = 0 - 10)$ prennent un large pic d'énergie électronique d'environ 17 eV. Le pic de sections efficaces des espèces $N_2(A^{3}\Sigma_u^+)(v = 5 - 10)$ atteint une valeur de 3×10^{-18} cm², tandis que l'espèces $N_2(A^{3}\Sigma_u^+)(v = 1 - 4)$ atteint un maximum de 1.4×10^{-18} cm².

La Figure 3.5 (b) représente les section efficaces de collision pour les espèces métastables à l'états électroniques $N_2(B \ ^3\Sigma_u)$, $N_2(a' \ ^1\Sigma_u)$, $N_2(E \ ^1\Sigma_g)$, $N_2(a'' \ ^1\Sigma_g)$. Ces espèces sont produits à cause des collisions électroniques avec l'espèce $N_2(A \ ^3\Sigma_u^+(v = 0 - 10))$. Il est clair que les pics de résonances de ces espèces se situent dans l'intervalle d'énergie électronique entre 15 et 20 eV. Ce résultat est en accord avec le travail de Itikawa et al. [55] qui ont déterminé les sections efficaces de ces espèces.

D'après le travail de Guerra et al.[48], l'ionisation directe se fait par les collisions entre les espèces $N_2(A^{3}\Sigma_{u}^{+}(v))$ et l'especes $N_2(a'^{1}\Sigma_{u}^{-})$ pour produire l'espèce ionisé N_4^{+} suivant la réaction: $N_2(A^{3}\Sigma_{u}^{+}(v)) + N_2(a'^{1}\Sigma_{u}^{-}) \rightarrow N_4^{+} + e$. Il est important de souligner que la concentration de $N_2(A^{3}\Sigma_{u}^{+}(v))$ joue un rôle important sur la concentration de l'espèce ionisé N_4^{+} suivant la réaction $e + N_2(A^{3}\Sigma_{u}^{+}(v)) \rightarrow N_2^{+} + e$.



Figure 3.6 Sections efficaces totale des collisions: $N_2(B^3\Pi_g)$, $N_2(a^1\Pi_u)$, $N_2(C^3\Pi_u)$

La Figure 3.6 représente les sections efficaces de collisions des espèces métastables $N_2(B^{3}\Pi_g)$, $N_2(a^{1}\Pi_u)$, $N_2(C^{3}\Pi_u)$. Les pics de résonance pour les trois espèces se situent dans la gamme d'énergie électronique entre 14 et 20 eV. Le maximum de section efficace est entre 2×10^{-17} et 10^{-16} cm², ce qui est le même résultat de Campbell et al.[5] qui ont fait un travail pour déterminer les sections efficaces de ces espèces dans le cas d'énergie électronique inférieure à 20 eV.



Figure 3.7 Sections efficaces totale de collision: $N_2(W^3\Delta_u)$, $N_2(w^1\Delta_u)$.

La Figure 3.7 montre les variations de sections efficaces de collision électronique pour produire les espèces métastables $N_2(W^3\Delta_u)$, $N_2(w^1\Delta_u)$. Le grand pic de résonnance atteint la valeur de $2.5 \times 10^{-17} cm^2$ à l'énergie électronique de 16.7 eV. Cette valeur proche de la valeur calculée par Campbell et al.[5], qui ont trouvé $2.5 \times 10^{-17} cm^2$. Notons que d'après Lofthus et al.[7], il y a toujours des transitions entre les espèces métastables: $N_2(W^3\Delta_u)$, $N_2(w^1\Delta_u)$, $N_2(B^3\Pi_g)$, $N_2(a^1\Pi_u)$, $N_2(C^3\Pi_u)$, $N_2(B^3\Sigma_u^-)$, $N_2(a'^1\Sigma_u^-)$, $N_2(E^1\Sigma_g^+)$, $N_2(a''^1\Sigma_g^+)$, $N_2(A^3\Sigma_u^+(v))$ au cours de la décharge.



Figure 3.8 Sections efficaces totale de collisions $\mathbf{0}_2(\boldsymbol{\nu}=\mathbf{1})$.

D'après l'expérience d'Allan [60], la section efficace vibratoire pour produire $O_2(v = 1)$ montre un comportement complètement différent dans les régions énergétiques au-dessous de 1 eV. Elle montre un large pic au niveau d'énergie électronique de 10 eV. Dans la région inférieure de 1 eV, la section se compose d'un ensemble de pics très pointus. Entre deux pics, la section efficace prend une valeur très faible. Par conséquent, cette section est divisée en deux sous-sections (voir Figure 3.8).



Figure 3.9 Sections efficaces totale de collisions: **0**, **0**⁻, **0**₂ ($a^{1}\Delta_{g}$), **0**₂($b^{1}\Sigma_{g}^{+}$).

La Figure 3.9 montre les sections efficaces d'excitation de O_2 pour produire le espèce O, O^- , $O_2(a \ ^1\Delta_g)$, $O_2(b \ ^1\Sigma_g^+)$. Les deux états métastables $O_2(a \ ^1\Delta_g)$ et $O_2(b \ ^1\Sigma_g^+)$ ont la même configuration orbitale moléculaire. Les énergies de seuil correspondantes ne sont pas très différentes 0.98 et 1.63 eV, respectivement. Donc, c'est le même comportement : un pic de résonance d'énergie électronique d'environ 9 eV pour les deux espèces. Egalement, on voit que la section efficace de $O_2(b \ ^1\Sigma_g^+)$ est petite comparé à celles des autres espèces, due à la perte d'émission des bandes du système de Schumann-Runge [61]. Une comparaison de ces résultats (Figure 3.9) avec le travail de Itikawa [8] est indiquée sur le Tableau 3.4.

Espèce	Nos calculs		Itikawa[8]		
	Le pic de	Energie	Le pic de	Energie	
	résonance (cm ²)	électronique (eV)	résonance (cm ²)	électronique (eV)	
0-	1.4×10^{-18}	6.7	1.4×10^{-18}	7	
0	1.6×10^{-17}	12	6.2×10^{-17}	30	
$O_2(a \ ^1\Delta_g)$	9.1×10 ⁻¹⁸	6.8	10 ⁻¹⁷	8	
$0_2(b \ {}^1\Sigma_g^+)$	1.9×10 ⁻¹⁸	6.5	3.8×10 ⁻¹⁸	7.5	

Tableau 3.4. Comparaison des résultats (Figure 3.9) avec ceux de Itikawa [8].



Figure 3.10 Sections efficaces totales des collisions: O(1D), O_2^+ , O^+ , N_2^+ .

Figure 3.10 montre les variations de sections efficaces de N₂, O₂ pour produire les espèces O(1D), O_2^+ , O^+ , N_2^+ en fonction de l'énergie électronique. On voit deux larges pics de sections efficaces des espèces chargés O_2^+ , N_2^+ dans l'intervalle d'énergies électroniques 0-1000 eV, ce qui signifie l'ionisation du plasma au cours de décharge. L'espèce O(1D) est extrêmement réactif, sa section efficace forme un large pic de résonance d'énergie électronique d'environ 30 eV. Ensuite, cette section efficace diminue lentement.

Le tableau suivant (Tableau 3.5) montre une comparaison des valeurs de sections efficaces aux points des pics de transitions, entre nos calculs et les deux travaux de ltikawa (1986) [55] et ltikawa et al. (2009) [8]. Sur ce tableau, on voit des résultats presque identiques.

Tableau 3.5. Comparaison des valeurs de sections efficaces aux pics des transitions, entre nos calculs et les deux travaux de ltikawa (1986) [55] et ltikawa et al. (2009) [8].

Espèce	Ce travail		Réf.			
	Le pic de	Energie	Le pic de résonance (cm ²)		Energie électronique	
	résonance	électronique			(eV)	
	(cm^2)	(eV)				
0+	10 ⁻¹⁶	150	10 ⁻¹⁶	ltikawa et al [8]	151	ltikawa et al [8]
0_{2}^{+}	2.89 10 ⁻¹⁶	101	2 10 ⁻¹⁶	ltikawa et al [8]	100	ltikawa et al [8]
N_{2}^{+}	2.15 10 ⁻¹⁶	101	2.5 10 ⁻¹⁶	ltikawa [55]	100	ltikawa [55]
O(1D)	1.19 10 ⁻¹⁶	30		/		/

3.3 Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons présenté les sections efficaces de différents processus se produisant dans le mélange gazeux N_2 80% – O_2 20%. Les résultats issus des calculs de ce chapitre montrent les points suivants:

- ✓ Les premiers processus créés dans le plasma correspondent aux transitions de l'état fondamentale d'azote vers les états excités vibrationnels.
- ✓ Les pics de transitions de résonance de l'état fondamentale de N_2 vers les états de vibrations. Pour v = 1, 5 pics dans la gamme d'énergie électronique 2 − 3.1 eV sont observés et les valeurs maximales de ces section efficaces varient entre 2.4×10^{-16} et 3.1×10^{-16} cm². 4 pics pour les transitions, v = 2, 3, 4, 5 sont détectés dans la gamme d'énergie électronique 2−3 eV et 2 pics de transition sont observés vers les état N₂(v = 7, 8)
- ✓ La diminution des valeurs de sections efficaces et le nombre de pics est due à l'augmentation de nombre quantique de vibration.
- ✓ Un large pic de résonance vers l'états excités N₂ $(A^{3}\Sigma_{u}^{+})$ (v = 0 10) est observé avec des maximums entre 1.4×10^{-18} et 3×10^{-18} cm². Les premiers états métastables créés dans la décharge sont les états excités vibrationnels N₂ $(A^{3}\Sigma_{u}^{+})$ ((v = 0 - 10), avec un seuil d'énergie de 6.2 eV. Ces états sont responsables de la conservation d'énergie interne dans le plasma.
- ✓ Les pics des résonances des espèces métastables N₂($B^{3}\Sigma_{u}^{-}$), N₂($a'^{1}\Sigma_{u}^{-}$), N₂($E^{1}\Sigma_{g}^{+}$), N₂($a''^{1}\Sigma_{g}^{+}$), N₂($B^{3}\Pi_{g}$), N₂($a^{1}\Pi_{u}$), N₂($C^{3}\Pi_{u}$), N₂($W^{3}\Delta_{u}$), N₂($w^{1}\Delta_{u}$) se situent dans l'intervalle d'énergie électronique 14–20 eV. Ces valeurs sont supérieures à celles de N₂($A^{3}\Sigma_{u}^{+}$) ((v = 0 - 10). Notons que ces espèces sont produites à cause des collisions électroniques avec l'espèce N₂($A^{3}\Sigma_{u}^{+}$ (v = 0 - 10).
- ✓ Les section efficaces des transitions vers $O_2(v = 1)$ montrent un ensemble des pics très pointus au-dessous de 1 eV, et un large pic à l'énergie électronique de 10 eV.

- ✓ Deux larges pics de section efficaces des espèces chargées O_2^+ , N_2^+ dans l'intervalle d'énergie électronique 0–1000 eV sont détectés, ce qui signifie l'ionisation du plasma au cours de la décharge,
- ✓ L'espèce O(1D) est extrêmement réactif, sa section efficace forme une large pic de résonance de valeur 1.19×10^{-16} cm² et à l'énergie électronique de 30 *eV*. Ensuite, cette section efficace diminue lentement.

Chapitre 4: Coefficients de transport et fonction de distribution électronique dans un gaz plasmagène ($N_2 80\% - O_2 20\%$).

La premier partie de ce quatrième chapitre traite les variations des taux de réactions considérées (31 réactions chimique, Tableau 3.3), et des coefficients de transport : coefficients Townsend réduits d'ionisation α /N et d'attachement η /N, fréquence totale de collision, mobilité électronique et coefficient de diffusion en fonction de l'énergie moyenne des électrons. La deuxième partie est consacrée au calcul de la fonction de distribution d'énergie électronique (EEDF : Electron energy distribution function) du plasma dans le mélange gazeux (N_2 80% – O_2 20%), sous les mêmes conditions que dans le troisième chapitre.

4.1 Coefficients de transports

La modélisation théorique des processus cinétiques dans un plasma issu d'un mélange gazeux N₂–O₂a été développée dans plusieurs travaux de la littérature scientifique. L'EEDF, les coefficients de transport, les taux des processus d'excitation, de dissociation et d'ionisation par impact électronique ont été calculés. Yamabe et al.[63] ont présenté une étude sur les coefficients de transport et les taux de réactions d'espèces $O_2(a \ {}^{1}\Delta_g)$, $O_2(b \ {}^{1}\Sigma_g^+)$. Ils ont trouvé que l'énergie d'excitation de ces espèces métastables est au voisinage de 5 eV dans un mélange gazeux N₂-O₂

En dessous de 5 eV, la concentration de $O_2(b \ {}^1\Sigma_g^+)$ diminue a cause des collisions avec l'espèce O(1D), et l'énergie de dissociation de O_2 est prés de 2 eV. Sergey et al.[63] ont présenté une étude expérimentale sur les taux d'ionisations et les coefficients de transport dans un mélange gazeux $N_2 - O_2$.

L'effet des électrons secondaires sur l'ionisation par impact électronique et sur les coefficients de transports et le taux de réactions sont partie de travail de Yoshida et al [64].

Les auteures [2] ont fait un travail analytique sur l'équation de Boltzmann pour obtenir les formules analytique de coefficients de transport et de taux des réactions pour les modèles fluides. C'était la base mathématique de code BOLSIG+. Les processus physico-chimiques dans le plasmas entre les électrons et le gaz sont représenté à l'aide des coefficients de transport et des taux de réactions, dépendant des sections efficaces de collisions.

Dans cette première partie de ce chapitre, on suppose que le plasma de mélange gazeux $(O_2 \ 20\% + N_2 \ 80\%)$ 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 ($E = 200 \ Td$), à la température ambiante300 K, et à la pression atmosphérique, avec les mêmes processus établis dans le Tableau 3.3 du chapitre 3, nous avons étudié les paramètres de transports suivants:

- 1- Taux de réactions,
- 2- Coefficients Townsend réduit d'ionisation α/N ,
- 3- Coefficients Townsend réduit d'attachement η/N,
- 4- Fréquence totale de collision,
- 5- Mobilité électronique,
- 6- Coefficient de diffusion.



Figure 4.1 La variation du champ électrique réduit en fonction de l'énergie électronique moyenne.

4.2 Taux de réactions et coefficients de transport

L'énergie électronique moyenne dépend du champ électrique réduit en Td (Townsend) dans le plasma. La Figure 4.1 représente les variations du champ électrique réduit en fonction de l'énergie moyenne électronique. Une augmentation linéaire de l'énergie électronique moyenne en fonction du champ est constatée.

4.2.1 Résultats et discusion



Figure 4.2. Taux d'excitation de N₂ en fonction d'énergie électronique moyenne pour les réactions d'énergie de seuil inférieure à 7 eV (voir Tableau 3.3).



Figure 4.3. Taux d'excitation de N₂ en fonction d'énergie électronique moyenne pour les réactions d'énergie de seuil entre 7 et 15.6 eV (voir Tableau 3.3).

Le processus dans le plasma est la création des espèces métastables et les espèces excitées vibrationnels. La Figure 4.2 montre les taux de réactions dans la gamme énergétique inférieure à 7 eV. On voit clairement que la collision élastique (effective) ($e + N_2 \rightarrow e + N_2$) prend le maximum pour n'importe quelle valeur d'énergie électronique. Cette réaction responsable de la création des premiers états excités vibrationnels $N_2(v = 1 - 8)$. Les taux de ces réactions augmentent rapidement pour atteindre un maximum pour une énergie électronique de 2 eV.

Ensuite, ces taux diminuent lentement. Au-delà de 2eV, les espèces métastables $N_2(A^3\Sigma_u^+)(v=0-10)$, $N_2(B^3\Pi_g)$, $N_2(W^3\Delta_u)$, $N_2(B^3\Sigma_u^-)$, $N_2(a'^1\Sigma_u^-)$, $N_2(a^{-1}\Pi_u)$, $N_2(w^{-1}\Delta_u)$, $N_2(C^{-3}\Pi_u)$, $N_2(E^{-3}\Sigma_g^+)$, $N_2(a''^{-1}\Sigma_g^+)$ commencent à se créer dans le plasmas.

La Figure 4.3 indique les variations des taux de réactions de ces espèces métastables dans la gamme énergétique entre 7 et 15.6 eV. Les valeurs de ces taux augmentent pour atteindre un maximum lorsque l'énergie électronique égale à 20 eV.

Le taux d'ionisation de N_2 $(e + N_2 \rightarrow e + e + N_2^+)$ augmente également avec une vitesse de réaction rapide jusqu'à ce que le plasma atteint l'état d'équilibre. Ces résultats sont

similaires à ceux de Guerra et al. [12], qui ont calculé les taux de réactions dans le cas des mélange $N_2 - O_2$ et $N_2 - H_2$, et ceux d'un autre travail expérimentale sur les taux d'attachements et d'ionisations, publié par Haefliger et al.[2].



Figure 4.4 Taux de réactions impliquant l'espèce O_2 en fonction de l'énergie électronique moyenne (voir Tableau 3.3).

La Figure 4.4 représente les variations des taux de réactions impliquant O_2 , Comme dans le cas de l'azote, les premières espèces créées sont les états excités pour atteindre un maximum lorsque l'énergie électronique dépasse la valeur de 4 eV. Aussi comme dans le cas de l'azote, les taux de réactions des espèces ionisées de l'oxygène O^+ , O_2^+ augmentent avec une vitesse de réaction rapide jusqu'à ce que le plasma atteint l'état d'équilibre.



Figure 4.5 (a) Coefficients Townsend réduits d'ionisation α/N et d'attachement η/N(b) fréquence totale des collisions.

Figure 4.5(a) représente les coefficients réduits de Townsend dans le plasma O_2 , d'ionisation α/N et d'attachement η/N , en fonction de l'énergie électronique. Au début de la décharge, les deux coefficients augmentent rapidement. Puisque le plasma est à l'état hors équilibre et quand l'énergie électronique devient 4 eV, le coefficient d'attachement atteint un maximum et ensuite diminue lentement. Par contre, le coefficient d'ionisation continue à s'élever afin que la valeur de $(\alpha/N - \eta/N)$ devient constante à la fin de la décharge (état d'équilibre) et le courant électrique soit stable et constant.

Figure 4.5 (b) montre la variation de fréquence totale de collision en fonction de l'énergie électronique. Une augmentation rapide au début de la décharge de la fréquence est observée à cause de la création des espèces excitées vibrationnels pour une énergie inférieure à 4 eV. ensuite, cette fréquence augmente moins rapidement vers l'état ionisé du plasma.



Figure 4.6 (a) Mobilité électronique, (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 [65].

$$D_e = \frac{3}{2}\mu_e \langle \varepsilon \rangle \tag{4.1}$$

Sur la Figure 4.6 (a), la mobilité prend une valeur maximale au début de décharge. Ensuite, elle diminue avec l'augmentation de l'énergie électronique, due à la diminution rapide de la section efficace pour les collisions électrons-électrons, ce qui concorde avec les constatations de Bazhenov et al.[65]. Par contre, le coefficient de diffusion augmente avec l'augmentation de l'énergie moyenne jusqu'à l'état d'équilibre du plasma [voir Figure 4.6 (b)].

4.3 Fonction de distribution d'énergie électronique (EEDF)

L'équation de Boltzmann, décrite dans le deuxième chapitre, est nécessaire pour calculer les vitesses de réaction des collisions électroniques et les paramètres de transport électronique. Si le plasma est en équilibre thermodynamique, l'EEDF a une forme maxwellienne. L'EEDF est représentée par la fonctions $f_e(\epsilon^{-3/2})$.

$$\frac{df_e(\mathbf{r},\mathbf{v},t)}{dt} = \frac{\partial f_e}{\partial t} + \vec{v}.\vec{\nabla}_r f_e + \frac{\vec{F}}{m}.\vec{\nabla}_v f_e = \left(\frac{\delta f_e(\mathbf{r},\mathbf{v},t)}{\delta t}\right)_{collisions}$$
(4.2)

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

4.3.1 Résultats et discussion



Figure.4.7 L'EEDF en fonction de l'énergie électronique moyenne dans la

gamme 0 –6 eV.



Figure 4.8 L'EEDF en fonction de l'énergie électronique moyenne dans la gamme 7–13 eV.



Figure 4.9 L'EEDF en fonction de l'énergie électronique moyenne dans la gamme 14–20 eV.

La Figures 4.7 montre les fonctions de distribution d'énergie électronique (EEDF) dans un plasma $N_2 \, 80\% - O_2 \, 20\%$, en fonction de l'énergie électronique, Au niveau de 2 eV, l'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 électron secondaire a été créé. La section efficace des collisions électron-électron diminue rapidement avec l'augmentation de l'énergie électronique, et par conséquent la EEDF diminue. Les collisions inélastiques se produisent lorsque les électrons atteignent suffisamment d'énergie pour l'excitation ou l'ionisation [65,66], cela conduit à la diminution de la fonction de distribution de Boltzmann.

Sur les Figures 4.7 et 4.8, on voit que pour des faibles énergies électroniques (jusqu'à 2 eV) il y a un plateau d'EEDF, étant le résultat des processus vibrationnels, et dans la région intermédiaire entre 2 et 3 eV, il y a une forte chute de EEDF. D'après Slavik et al.[67], la diminution rapide pour d'énergies plus élevées est due à l'effet du champ électrique réduit appliqué. Donc, l'effet principal du champ électrique réduit appliqué est exprimé dans le dépendance de la chute d'EEDF. Cette diminution rapide d'EEDF affecte les vitesses de réactions,

qui ont des énergies de seuil supérieures à 3 eV. L'influence des espèces excités vibrationnels sur l'EEDF est observé seulement pour des énergies inférieures à 3 eV [67].

4.4 Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons présenté les taux de réactions considérées et la variation de la fonction de distribution en énergie des électrons en fonction de l'énergie moyenne des électrons. Les résultats obtenus dans ce chapitre montrent les points suivants:

- ✓ La collision élastique (effective) (e + N₂ → e + N₂) prend le maximum pour n'importe quelle valeur d'énergie électronique. Cette réaction responsable de la création des premiers états excités vibrationnels N₂(v = 1 − 8). Les taux de ces réactions augmentent rapidement pour atteindre un maximum pour une énergie électronique de 2 eV. Ensuite, ces taux diminuent lentement. Au-delà de 2 eV, les espèces métastables N₂(A ³Σ_u⁺)(v = 0 − 10), N₂(B ³Π_g), N₂(W ³Δ_u), N₂(B ³Σ_u⁻), N₂(a' ¹Σ_u⁻), N₂(a ¹Π_u), N₂(w ¹Δ_u), N₂(C ³Π_u), N₂(E ³Σ_g⁺), N₂(a'' ¹Σ_g⁺) commencent à se créer dans le plasmas.
- ✓ Comme dans le cas de l'azote, les taux de réactions des espèces ionisées de l'oxygène O⁺,
 O⁺₂ augmentent avec une vitesse de réaction rapide jusqu'à ce que le plasma atteint l'état d'équilibre.
- ✓ Puisque le plasma est à l'état hors équilibre et quand l'énergie électronique devient 4 eV, le coefficient d'attachement atteint un maximum et ensuite diminue lentement. Par contre, le coefficient d'ionisation continue à s'élever afin que la valeur de $(\alpha/N - \eta/N)$ devient constante à la fin de la décharge (état d'équilibre) et le courant électrique soit stable et constant.
- ✓ Une augmentation rapide au début de la décharge de la fréquence est observée à cause de la création des espèces excitées vibrationnels pour une énergie inférieure à 4 eV. Ensuite, cette fréquence augmente moins rapidement vers l'état ionisé du plasma.
- ✓ La 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 électron secondaire a été créé. La section efficace des collisions électron-électron diminue rapidement avec l'augmentation de l'énergie électronique, et par conséquent la EEDF diminue. Les collisions inélastiques se produisent lorsque les électrons atteignent suffisamment d'énergie pour l'excitation ou l'ionisation.

5. Conclusion générale

Dans ce mémoire de Master, nous avons présenté une étude détaillée des sections efficaces, la fonction de distribution en énergie des électrons, les coefficients de transport électroniques et les taux de toutes les réactions considérées.

Les résultats du chapitre 3 : Sections efficaces électronique dans un gaz plasmagène $(N_2 \ 80\% - O_2 \ 20\%)$ ont indiqué clairement les points suivants:

- ✓ Les premiers processus créés dans le plasma correspondent aux transitions de l'état fondamentale d'azote vers les états excités vibrationnels.
- ✓ Les pics de transitions de résonance de l'état fondamentale de N₂ vers les états de vibrations. Pour v = 1, 5 pics dans la gamme d'énergie électronique 2 3.1 eV sont observés et les valeurs maximales de ces section efficaces varient entre 2.4 ×10⁻¹⁶ et 3.1×10⁻¹⁶ cm². 4 pics pour les transitions, v = 2, 3, 4 5 sont détectés dans la gamme d'énergie électronique 2-3 eV et 2 pics de transition sont observés vers les état N₂(v = 7,8)
- ✓ La diminution des valeurs de sections efficaces et le nombre de pics est due à l'augmentation de nombre quantique de vibration.
- ✓ Un large pic de résonance vers l'états excités N₂ $(A^{3}\Sigma_{u}^{+})$ (v = 0 10) est observé avec des maximums entre 1.4×10^{-18} et 3×10^{-18} cm². Les premiers états métastables créés dans la décharge sont les états excités vibrationnels N₂ $(A^{3}\Sigma_{u}^{+})$ ((v = 0 - 10), avec un seuil d'énergie de 6.2 eV. Ces états sont responsables de la conservation d'énergie interne dans le plasma.
- ✓ Les pics des résonances des espèces métastables N₂($B^{3}\Sigma_{u}^{-}$), N₂($a'^{1}\Sigma_{u}^{-}$), N₂($E^{1}\Sigma_{g}^{+}$), N₂($a''^{1}\Sigma_{g}^{+}$), N₂($B^{3}\Pi_{g}$), N₂($a^{1}\Pi_{u}$), N₂($C^{3}\Pi_{u}$), N₂($W^{3}\Delta_{u}$), N₂($w^{1}\Delta_{u}$) se situent dans l'intervalle d'énergie électronique 14–20 eV. Ces valeurs sont supérieures à celles de N₂($A^{3}\Sigma_{u}^{+}$) (v = 0 - 10). Notons que ces espèces sont produites à cause des collisions électroniques avec l'espèce N₂($A^{3}\Sigma_{u}^{+}$)(v = 0 - 10).

- ✓ Les section efficaces des transitions vers $O_2(v = 1)$ montrent un ensemble des pics très pointus au-dessous de 1 eV, et un large pic à l'énergie électronique de 10 eV.
- ✓ Deux larges pics de section efficaces des espèces chargées O_2^+ , N_2^+ dans l'intervalle d'énergie électronique 0–1000 eV sont détectés, ce qui signifie l'ionisation du plasma au cours de la décharge,
- ✓ L'espèce O(1D) est extrêmement réactif, sa section efficace forme une large pic de résonance de valeur 1.19×10^{-16} cm² et à l'énergie électronique de 30 *eV*. Ensuite, cette section efficace diminue lentement.

Les calculs issus du chapitre 4 : Coefficients de transport et fonction de distribution électronique dans un gaz plasmagène ($N_2 80\% - O_2 20\%$) ont conclu aux constatations suivantes :

- ✓ La collision élastique (effective) (e + N₂ → e + N₂) prend le maximum pour n'importe quelle valeur d'énergie électronique. Cette réaction responsable de la création des premiers états excités vibrationnels N₂(v = 1 − 8). Les taux de ces réactions augmentent rapidement pour atteindre un maximum pour une énergie électronique de 2 eV. Ensuite, ces taux diminuent lentement. Au-delà de 2 eV, les espèces métastables N₂(A ³Σ_u⁺)(v = 0 − 10), N₂(B ³Π_g), N₂(W ³Δ_u), N₂(B ³Σ_u⁻), N₂(a' ¹Σ_u⁻), N₂(a ¹Π_u), N₂(w ¹Δ_u), N₂(C ³Π_u), N₂(E ³Σ_g⁺), N₂(a'' ¹Σ_g⁺) commencent à se créer dans le plasmas.
- ✓ Comme dans le cas de l'azote, les taux de réactions des espèces ionisées de l'oxygène O⁺,
 O⁺₂ augmentent avec une vitesse de réaction rapide jusqu'à ce que le plasma atteint l'état d'équilibre.
- ✓ Puisque le plasma est à l'état hors équilibre et quand l'énergie électronique devient 4 eV, le coefficient d'attachement atteint un maximum et ensuite diminue lentement. Par contre, le coefficient d'ionisation continue à s'élever afin que la valeur de $(\alpha/N - \eta/N)$ devient constante à la fin de la décharge (état d'équilibre) et le courant électrique soit stable et constant.
- ✓ Une augmentation rapide au début de la décharge de la fréquence est observée à cause de la création des espèces excitées vibrationnels pour une énergie inférieure à 4 eV. Ensuite, cette fréquence augmente moins rapidement vers l'état ionisé du plasma.

✓ La 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 électron secondaire a été créé. La section efficace des collisions électron-électron diminue rapidement avec l'augmentation de l'énergie électronique, et par conséquent la EEDF diminue. Les collisions inélastiques se produisent lorsque les électrons atteignent suffisamment d'énergie pour l'excitation ou l'ionisation.

6. ANNEXES

6.1 Liste des figures

Figure 1.1 Différentiation des plasmas par l'énergie électronique $k_B T_e$, la densité électronique n_e
et la longueur de Debye $\lambda_D[19]$
Figure 1.2 Configurations électrodes de DBD: (a) à deux barrières, (b) DBD à une barrière, (c)
DBD cylindrique, (d) DBD à une barrière, (e) surfacique14
Figure 1.3 Systèmes d'électrodes couramment utilisés pour la production de décharges couronne.
Figure 1.4 Premier coefficient de Townsend réduit en fonction du champ réduit pour certains gaz
rares (néon, krypton, xénon, argon) [42]18
Figure 2.1 Illustration d'une section efficace pour une collision binaire dans un champ de force
centrale [43]
Figure 3.1 Niveaux d'énergie et transitions radiatives dans N ₂ [49]
Figure 3.2 Sections efficaces totales de collisions élastiques dans N ₂
Figure 3.3. Sections efficaces totales de collisions dans N ₂ : (a)($\nu = 1, 2, 3$), (b) ($\nu = 4, 5, 5$)
6)
Figure 3.4 Sections efficaces totales de collisions des espèces $N_2(v = 7, 8)$ 40
Figure 3.5 Sections efficaces totales: (a) $N_2(A^{3}\Sigma_u^+)(\nu = 0 - 10)$, (b) $N_2(B^{3}\Sigma_u^-)$, $N_2(a'^{1}\Sigma_u^-)$,
$N_2(E^{-1}\Sigma_g^+), N_2(a''^{-1}\Sigma_g^+)$
Figure 3.6 Sections efficaces totale des collisions: $N_2(B^{3}\Pi_g)$, $N_2(a^{1}\Pi_u)$, $N_2(C^{3}\Pi_u)$ 43
Figure 3.7 Sections efficaces totale de collision: $N_2(W^3\Delta_u)$, $N_2(w^1\Delta_u)$ 43
Figure 3.8 Sections efficaces totale de collisions $O_2(v = 1)$ 44
Figure 3.9 Sections efficaces totale de collisions: 0 , 0^- , 0_2 ($a \ {}^1\Delta_g$), $0_2(b \ {}^1\Sigma_g^+)$ 45
Figure 3.10 Sections efficaces totales des collisions: $O(1D)$, O_2^+ , O^+ , N_2^+ 46
Figure 4.1 La variation du champ électrique réduit en fonction de l'énergie électronique moyenne.
Figure 4.2. Taux d'excitation de N2 en fonction d'énergie électronique moyenne pour les
réactions d'énergie de seuil inférieure à 7 eV (voir Tableau 3.3)51

Figure 4.3. Taux d'excitation de N_2 en fonction d'énergie électronique moyenne pour les réactions
d'énergie de seuil entre 7 et 15.6 eV (voir Tableau 3.3)
Figure 4.4. Taux de réactions impliquant l'espèce O ₂ en fonction de l'énergie électronique
moyenne (voir Tableau 3.3)
Figure 4.5 (a) Coefficients Townsend réduits d'ionisation α/N et d'attachement η/N (b) fréquence
totale des collisions
Figure 4.6 (a) Mobilité électronique, (b) Coefficient de diffusion
Figure.4.7 L'EEDF en fonction de l'énergie électronique moyenne dans la gamme 0 –6 eV 56
Figure 4.8 L'EEDF en fonction de l'énergie électronique moyenne dans la gamme 7–13 eV56
Figure 4.9 L'EEDF en fonction de l'énergie électronique moyenne dans la gamme 14-20 eV57

6.2 Liste des tableaux

Tableau 3.1 Paramètre du plasma	36
Tableau 3.2. Les espèces considérés dans ce travail.	36
Tableau 3.3. Réactions chimiques considérées dans ce travail.	37
Tableau 3.4. Comparaison des résultats (Figure 3.9) avec ceux de Itikawa [8].	45
Tableau 3.5. Comparaison des valeurs de sections efficaces aux pics des transitions, entre nos	
calculs et les deux travaux de ltikawa (1986) [55] et ltikawa et al. (2009) [8]	46

7. Bibliographies

- 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.
- [2] P Haefliger, A Hösl and C M Franck, Experimentally derived rate coefficients for electron ionization, attachment and detachment as well as ion conversion in pure O₂ and N₂–O₂ mixtures, J. Phys. D: Appl. Phys. 51 (2018) 355201 (15pp).
- [3] E.H. Lock, S. Slinker, S.G. Walton, Electron Beam–Generated Plasmas Produced in Pure Argon, Nitrogen, Oxygen, and Their Mixtures, NRL/MR/6750--11-9333.
- [4] Brunger, M.J., Buckman, S.J., Elford, M.T., 2003, Integral cross sections for electron impact excitation of molecules, In: Itikawa, Y. (Ed.), Electron Collisions with Molecules: Scattering and Excitation.
- [5] L Campbell, M J Brunger, A M Nolan, L J Kelly, A B Wedding, J Harrison, P J O Teubner, D C Cartwright and B McLaughlin,Integral cross sections for electron impact excitation of electronic states of N_{2,} J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 34 (2001) 1185– 1199.
- [6] L. Campbell, M.J. Brunger, D.C. Cartwright, P.J.O. Teubnera, Production of vibrationally excited N₂ by electron impact, Planetary and Space Science 52 (2004) 815 – 822.
- [7] Alf Lofthus, Paul H. Krupenie, The Spectrum of Molecular Nitrogen, J. Phys. Chem. Ref. Data, Vol. 6, No.1, 1977.
- [8] Yukikazu Itikawa, Cross Sections for Electron Collisions with Oxygen Molecules, J. Phys. Chem. Ref. Data, Vol. 38, No. 1, 2009.
- [9] D. MACZKA, A. MELDIZON, W. ZUK and A. LATUSZYlqSKI, PENNING IONIZATION IN A PLASMA ION SOURCE, Nuclear Instruments and Methods 186 (1981) 335-342
- [10] Aleksandrov N.L., Konchakov A.M. and Son E.E., Discharges in N₂—O₂ Mixtures Plasma Kinetics in Atmospheric Gases, SpringerLink (1979), pp 229-250

- [11] Aleksandrov N.L, Vysikailo F.I., Islamov R.Sh., Kochetov I.V, Napartovich, Plasma Kinetics in Atmospheric Gases, Vols. 1-26 of the former Springer Series on Atoms and Plasmas are listed at the end of the book.
- [12] Guerra V., Pinheiro M.J., Gordiets B.F., Loureiro J. and Ferreira C.M, Calculated data on electron transport and excitation rate coefficients in N₂-O₂and N₂-H₂discharges Plasma Sources Sci. Technol. 6 (1997) 220–230
- [13] Aleksandrov N.L., Konchakov A.M. and Son E.E. (1979), Discharges in N₂ O₂ Mixtures
 Plasma Kinetics in Atmospheric Gases, SpringerLink , pp 229-250
- [14] nl.lxcat.net/solvers/BolsigPlus/
- [15] A. V. Phelps, Pitchford. JILA, Information Center Report No. 26 and No. 28, University of Colorado, Boulder, 1985.
- [16] J-L Delcroix, Abraham Bers, Physique des plasmas/1, pp. 65-71, (1994).
- [17] J. Meek, J.D. Craggs, Electrical Breakdown of Gases, John Wiley & Sons, (1978).
- [18] J.R. Hollahan et A.T. Bell, Techniques and applications of plasma chemistry. Wiley inter science, (1974).
- [19] 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).
- [20] Les plasmas dans l'industrie, sous la direction de M. Or feuil, collection ELECTRA (EDF), Dopee Diffusion, 1991.
- [21] U. Kogelschatz, B. Eliasson& W. Egli, Dielectric-BarrierDischarges Principle and Applications, ICPIG XIII, Toulouse 1997.
- [22] 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.
- [23] R.S. Sigmond & M. Goldman, Corona discharge physics and applications, Electrical breakdown and discharges in gases - Part B, NATO ASI series B89-B, 1989.
- [24] 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.
- [25] 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.
- [26] 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.
- [27] 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.
- [28] 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).
- [29] C.R. McLarnon & V.K. Mathur, Nitrogen oxide decomposition by barrier discharge, Ind. Eng. Chem. Res., 2000, vol.39, pp.2779-2787
- [30] 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.
- [31] C.D. Pintassilgo, J. Loureiro, G. Cernogora & M. Touzeaum, Methane decomposition and active nitrogen in a N₂-CH₄ glow discharge at low pressures, Plasma Sources Sci. Technol, vol.8, pp.463-478., 1999.
- [32] Marquez, J. Luo, H. Matsumoto & Y. Hayashi, Efficient Catalytic Plasma Activation of CO₂, NO, and H₂O ; S.L. Suib, S.L. Brock, M.; J. Phys. Chem. B; vol.102 (48); pp.9661-9666; 1998.
- [33] 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).
- [34] 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).
- [35] 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.
- [36] J.M.Meek J. D. Craggs, electrical breakdown of gases, vol. 1. Oxford at the clarendon press, 1953.

- [37] 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.
- [38] J-M Rax, Physique des plasmas, Cours et applications, DUNOD. 2005.
- [39] A. Fridman, Plasma chemistry, Cambridge University Press, New York, 2008.
- [40] 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.
- [41] 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.
- [42] A.A. Kruithof, Townsend ionisation coefficient for neon, argon, krypton and xenon, Physica, 7, 519, 1940.
- [43] Ali MAHFOUF, Calcul des coefficients de transport dans des plasmas hors de l'équilibre, thèse doctorat, L'Université Blaise Pascal, Clermont-Ferrand (2016)
- [44] R. W. Evans and I. I. Inculet, The Radius of the Visible Ionization Layer forPositive and Negative Coronas, IEEE Trans. Ind. Appl. IA-14 (6), 523-525 (1978).
- [45] J. P. Boeuf et E. Marode, A Monte Carlo analysis of an electron swarm in a nonuniformfield : the cathode region of a glow discharge in helium, J. Appl. Phys. 15, 2169-2187.
- [46] Vladimir V. Serikov, Member, IEEE, Shinji Kawamoto, and Kenichi Nanbu, Particle-in-Cell Plus Direct Simulation Monte Carlo (PIC-DSMC) Approach forSelf-Consistent Plasma-Gas Simulations, IEEE TRANSACTIONS ON PLASMA SCIENCE, VOL. 27, NO. 5, OCTOBER 1999.
- [47] Capitell, M., Ferreir, C. M., Gordiet, B. F., & Osipo, A. I. (2000). Electron Rate Coefficients. Plasma Kinetics in Atmospheric Gases, 119–154. ink.springer
- [48] V Guerra, P A S and J Loureiro, Role played by the N₂(A ${}^{3}\Sigma_{u}^{+}$) metastable in stationary N₂ and N₂–O₂ discharges, J. Phys. D: Appl. Phys. 34 (2001) 1745–1755. 5555
- [49] Guerra and J Loureiro, Non-equilibrium coupled kinetics in stationary N₂-O₂ discharges,J. fhys. D: Appl. fhys. 28 (1995) 1903-1918. Printed in he UK.
- [50] Boris F. Gordiets, Carlos M. Ferreira, Vasco L. Guerra, Jorge M. A. H. Loureiro, Jacimar Nahorny, Daniel Pagnon, Michel Touzeau, and Marinette Vialle, Kinetic Model of a Low-Pressure N₂-O₂ Flowing Glow Discharge, IEEE TRANSACTIONS ON PLASMA SCIENCE, VOL. 23, NO. 4, AUGUST 1995.

- [51] B. M. Jelenkovic and A. V. Phelps Excitation of N₂ in dc electrical discharges at very high E/n, physical review a, volume 36, number 11, December 1, 1987.
- [52] Lu'is Lemos Alves, 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.
- [53] Brunger, M.J., Buckman, S.J., Elford, M.T., 2003, Integral cross sections for electron impact excitation of molecules, In: Itikawa, Y. (Ed.), Electron Collisions with Molecules: Scattering and Excitation.
- [54] Yukikazu Itikawa Cross Sections for Electron Collisions with Nitrogen Molecules, J. Phys. Chem. Ref. Data, Vol. 38, No. 1, 2009.
- [55] Y. Itikawa, M. Hayashi, A. Ichimura, K. Onda, K. Sakimoto, K. Takayanagi, Cross Sections for Collisions of Electrons and Photons with Nitrogen Molecules J. Phya. Chern. Ref. Data, Vot.15, No. 3.1986.
- [56] Karwasz G P, Brusa R S, et Zecca A, in Photon and Electron Interactions with Atoms, Molecules and Ions, Landolt-Bo¨rnstein Vol.I/17, Subvolume C, edited by Y. Itikawa (Springer, New York, 2003).
- [57] Eliasson B, Kogelschatz U 1986 Basic data for modelling of electrical discharge in gases: Oxygen. Report KLR-86-11C. Report Brown Boveri Forschungszentrum CH-5405 Baden. Momentum transfer cross-section for O₂.
- [58] Rapp D and Englander-Golden P 1965 J. Chem. Phys. 43 1464. Updated: 3 November 2010.
- [59] Klopovskii K S and Rakhimova T V 1994, Privat communication, This cross section corresponding dissociative excitation of the C1, C3 and A3 electronic states of O₂. Updated: 3 November 2010.
- [60] Michael Allan, Measurement of absolute differential cross sections for vibrational excitation of O₂ by electron impact, I, Phys. B: At, Mol. Opt. Phys. 28 (1995) 5163-5175.
- [61] TW Shyn, CJ Sweeney, A Grafe, WE Sharp, Absolute differential cross sections for the excitation of molecular oxygen by electron impact: Decomposition of the Schumann-Runge continuum, Phys Rev A . 1994 Dec;50(6):4794-4801
- [62] C. Yamabea) and A. V. Phelps, Excitation of the O_2 (a ${}^1\Delta_g$) state by low energy electrons in 02-N2 mixtures, J. Chern. Phys. 78(6), Part 1,15 March 1983

- [63] Sergey Pancheshnyi, Effective ionization rate in nitrogen-oxygen mixtures, J. Phys. D: Appl. Phys. 46 (2013) 155201 (8pp),
- [64] S. Yoshida and A. V. Phelps, Effect of electrons produced by ionization on calculated electron-energy distributions, physical revie a volume 27, number 6
- [65] 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).
- [66] 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.
- [67] Jan Slavik ~ and Gianpiero Colonna, The Study of Electron Energy Distribution Functions, Swarm Parameters, and Transition Rates in N₂ + O₂ Plasma, Plasma Chemistry and Plasma Processing, Vol. 17, No. 3, 1997.