



HAL
open science

Etude de l'influence de la température (T_e/T_h) sur la composition d'un plasma en non-lte

Rafik Benallal, B. Liani, B. Benallal

► **To cite this version:**

Rafik Benallal, B. Liani, B. Benallal. Etude de l'influence de la température (T_e/T_h) sur la composition d'un plasma en non-lte. JITH 2007, Aug 2007, Albi, France. 5p. hal-00156579

HAL Id: hal-00156579

<https://hal.science/hal-00156579>

Submitted on 29 Aug 2007

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

ETUDE DE L'INFLUENCE DE LA TEMPERATURE (T_e/T_h) SUR LA COMPOSITION D'UN PLASMA EN NON-LTE.

R.BENALLAL*, B.LIANI* and B.BENALLAL §

*Laboratoire Physique Théorique, Université de Tlemcen, B.P 119, 13000 Tlemcen

§Laboratoire de Biophysique, CHU de Tlemcen, Algérie

rafik.benallal@gmail.com

Résumé: La température influe directement sur la composition du gaz; l'énergie totale contenue dans le gaz dépend de l'énergie de chaque particule. Excepté les plasmas où les collisions sont dominantes, l'énergie des électrons fournie par un champ électrique externe n'est pas transférée immédiatement aux particules lourdes (au voisinage des électrodes d'un arc à pression atmosphérique) et quand il existe des gradients de concentration (à proximité des parois ou quand un gaz « froid » est injecté dans un plasma) l'équilibre ne peut être établi. C'est dû au fait que les collisions entre électrons et particules lourdes sont directement proportionnelles au rapport m_e / m_h . Cela induira à une température électronique plus élevée que celle des particules lourdes, surtout à basse pression. Dans ces conditions, le plasma est toujours en déséquilibre thermodynamique.

Dans ce travail, on a étudié l'effet du paramètre $\theta = T_e/T_h$ sur la composition du plasma, en d'autres termes, on évalue l'influence du paramètre θ sur la densité des différentes espèces. La température électronique T_e varie entre 5000 et 20000 K.

Mots clés: Plasma, composition chimique, déséquilibre thermique, équation de Saha, abaissement de potentiel d'ionisation, longueur de Debye.

1. INTRODUCTION

On calcule la composition chimique d'un plasma en minimisant l'énergie libre de Gibbs (ou Helmholtz) qui dépend des potentiels chimiques des différentes espèces existant dans le gaz[2], ce qui permet de connaître les propriétés de transports[5]. Quand on suppose que les particules lourdes (molécule, atome ou ion) et les électrons ont des énergies cinétiques de même ordre de grandeur ou des températures voisines, ceci revient à considérer le milieu à une température unique. Toutefois, si la pression est basse ou si le champ électrique augmente (au voisinage des électrodes d'un arc à pression atmosphérique) et quand il existe des gradients de concentration (à proximité des parois ou quand un gaz « froid » est injecté dans un plasma) l'équilibre ne peut être établi. Excepté un plasma à dominance collisionnelle (par exemple pour la région du noyau d'un plasma d'arc aux pressions superatmosphériques), les électrons ne peuvent pas transférer immédiatement leur énergie excessive gagnée à partir d'un champ électrique externe aux particules lourdes, en conséquence, la température électronique (T_e) du plasma est plus élevée que celle des particules lourdes (T_h) dans une même région. On dit dans ce cas que le plasma est hors d'équilibre thermodynamique. Dans la modélisation qui va suivre, les électrons et les particules lourdes sont supposés satisfaire les fonctions de distribution maxwellienne des vitesses caractérisées par la température électronique T_e et la température des particules lourdes T_h .

2. METHODE DE CALCUL

Lorsqu'un plasma est supposé être en équilibre thermodynamique, ceci revient à dire que toutes les particules constituant le gaz ont une seule température T , on peut calculer la composition chimique du plasma en utilisant l'équation de Saha qui est donné comme suite :

$$\frac{n_e n_i}{n_0} = \frac{2U_i}{U_0} \frac{(2\pi m_e k_B T)^{3/2}}{h^3} \exp\left(-\frac{E_i}{k_B T}\right) \quad (1)$$

Avec n_e , n_i et n_0 sont respectivement les densités des électrons, des ions positifs et des atomes neutres de la même espèce ; U_i et U_0 sont les fonctions de partition internes de l'ion et de l'atome ; h la constante de Planck, E_i le potentiel d'ionisation de l'espèce considérée ; m_e est la masse de l'électron et k_B est la constante de Boltzmann . Cependant si le plasma est considéré être en déséquilibre thermique, l'équation précédente n'est plus valable. On doit donc utiliser une autre équation qui est plus adéquate à ce genre de phénomène. Potapov[6] a proposé une équation de Saha modifiée qui été ensuite corrigé par Xi Chen et al[3], puis nous avons généralisé[1,9] le modèle proposé par Xi Chen pour un mélange de gaz, ayant une température propre à chaque espèce. Pour calculer la composition chimique d'un plasma hors d'équilibre thermodynamique (Non-LTE), on utilise l'équation de Saha modifiée qui suit :

$$\frac{n_e n_i}{n_0} = \frac{2U_i(T_e)}{U_0(T_e)} \frac{(2\pi m_e k_B T_e)^{3/2}}{h^3} \exp\left(-\frac{E_i - \Delta E}{k_B T_e}\right) \quad (2)$$

Ayant dans notre cas un mélange de gaz, composé de plusieurs espèces, on a supposé que les particules lourdes ont, selon leur masse, des températures différentes. Donc chaque espèce à sa propre énergie cinétique moyenne et sont supposées suivent les fonctions de distribution des vitesses maxwelliennes caractérisées par les températures $T_{h_1}, T_{h_2}, T_{h_3}$ et T_e qui correspondent à celles de l'hydrogène, du carbone, de l'argon et de l'électron, respectivement. ΔE est l'abaissement du potentiel d'ionisation dû à la présence des particules chargées. Ce terme est lié à la grande fréquence d'échanges entre les niveaux dont le nombre quantique principal est voisin de la limite d'ionisation. La fonction de partition n'est pas une fonction divergente, car on limite le nombre des niveaux à ceux qui n'ont pas une zone commune de recouvrement. Pour limiter le nombre de niveaux, on introduit l'abaissement du potentiel d'ionisation. Celui-ci est dû à la présence de particules chargées. Le potentiel d'ionisation est alors diminué de la quantité :

$$\Delta E = (z_i + 1) \frac{1}{4\pi k \epsilon_0} \frac{e^2}{\lambda_D} \quad (3)$$

Kihara et al [7,8], ont supposé que le taux de relaxation entre la température électronique et celle des ions est proportionnel au temps du taux de variation des énergies cinétiques moyennes. Et ils ont ajouté que l'énergie cinétique des particules est plus grande que leur énergie potentielle, les ions seront complètement écrantés par les électrons environnants. Cependant, les électrons ont un mouvement très rapide comparé à celui des ions et très peu d'ions prennent part à l'effet d'écrantage. Par conséquent, la longueur de Debye des interactions ion-électron est plus petite que celle des électrons:

$$\frac{1}{\lambda_D} = k_1 \exp\left[\left(\frac{k_1^2 + k_2^2}{2k_2^2}\right) \ln\left(\frac{k_1^2 + k_2^2}{2k_2^2}\right) - \frac{1}{2}\right] \quad (4)$$

Où

$$k_1 = \sqrt{\frac{e^2 n_e}{\epsilon_0 k_B T_e}}, \quad k_2 = \sqrt{\frac{e^2}{\epsilon_0 k_B} \sum_{i=1}^{N_{\max}} \frac{z_i n_i}{T_h}}$$

z_i est la charge ionique et λ_D la longueur de Debye.

3. RESULTATS ET DISCUSSION

Le gaz est composé d'un mélange CH_4 - Ar , qui sera soumis à une température électronique allant de 5000 K à $20\,000\text{ K}$ sous différentes valeurs de θ . Dans cet intervalle de température, on ne considère que les espèces suivantes : $C, H_2, H, Ar, C^+, C^{++}, C^{+++}, H^+, Ar^+, Ar^{++}, el.$

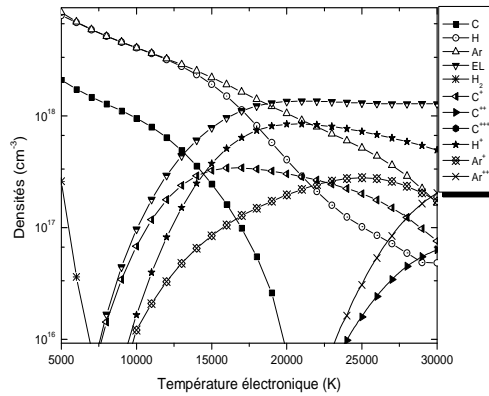


Fig.1. Evolution des densités différentes espèces avec 80% d'argon sous pression atmosphérique, et $T_e=2T_h$

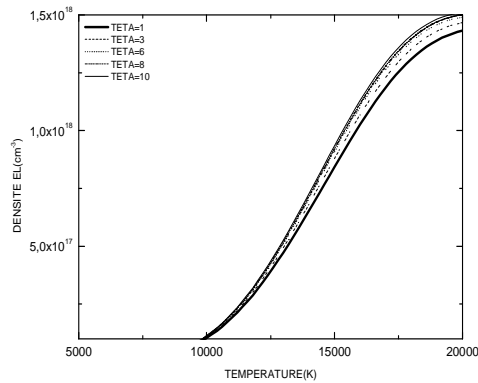


Fig.2. représente la densité électronique pour différentes valeurs de θ sous pression atmosphérique.

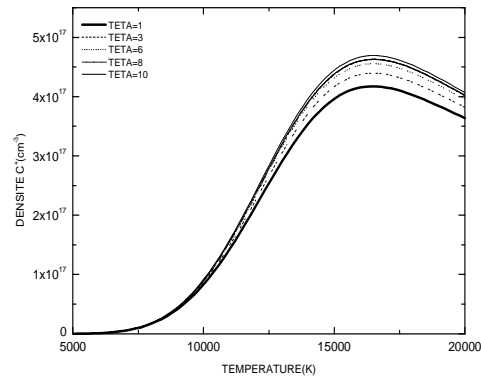


Fig.3. représente la densité de C^+ pour différentes valeurs de θ sous pression atmosphérique.

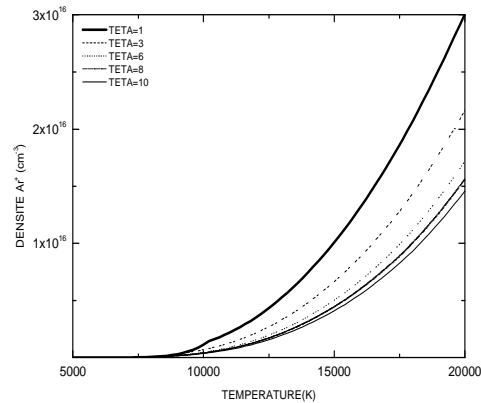


Fig.4. représente la densité de Ar^+ pour différentes valeurs de θ sous pression atmosphérique

La figure.1. représente les densités des différentes espèces qui apparaissent lorsque le gaz est soumis à une décharge électrique qui conduit à une élévation rapide de la température, on remarque que la densité électronique est la plus importante. A l'équilibre $T_{hi} = T_e$, la longueur de Debye est supérieure qu'à $T_{hi} < T_e$ par conséquent la valeur de l'abaissement de potentiel d'ionisation est plus grande quand il y a déséquilibre thermique. En d'autre terme, quand le plasma est en Non-LTE, l'abaissement de potentiel d'ionisation augmente et influence, en premier lieu sur le carbone (à cause de son faible potentiel d'ionisation). En conséquence, la densité de C^+ est la plus élevée. On constate que les espèces ioniques présents, en premier temps, sont C^+ et Ar^+ . Puis au fur est à mesure que la température électronique augmente, il y a apparition des autres espèces ioniques. Les trois dernières figures montrent l'influence du paramètre θ sur la densité de l'espèce considérée. Dans la figure.2. on remarque tout d'abord que la densité électronique est importante et sa croissance rapide et suivant l'augmentation de θ la densité électronique (Fig.2) et celle de l'ion C^+ (Fig.3) augmentent, c'est due au fait que θ influe dans le calcul de la longueur de Debye. Dans la figure.3. on constate une croissance suivie, à partir de $15000 K$, d'une diminution qui est due à l'apparition du C^{++} . On peut voir, dans les figures.2.3. que l'influence du paramètre θ implique une augmentation de la densité électronique et de C^+ , tandis que dans la figure.4., plus θ augmente plus la densité d' Ar^+ diminue, ceci est due au choix du dosage que nous avons pris

(20% d'argon et 80% de méthane). Sachant que dans nos calculs, nous prenons évidemment en compte ; la loi de la conservation de la matière $(1-Z)n_{Ar}^{tot} = Z n_{CH_4}^{tot}$ avec Z le pourcentage d'argon, la loi des gaz parfaits $\sum n_i = \frac{p}{(kT)}$ et la neutralité électrique

$$n_{el} = n_{H^+} + n_{C^+} + 2n_{C^{++}} + 3n_{C^{+++}} + n_{Ar^+} + 2n_{Ar^{++}}$$

4. CONCLUSION

Le calcul de la composition chimique d'un plasma CH_4-Ar a été étudié sous différentes valeurs de θ qui représente le déséquilibre thermique pour une température électronique variant entre 5000 et 20000 K. La méthode à 4T est une approche de calcul qui prend en compte l'écart de température qu'il peut y avoir entre les différentes espèces présentes dans le mélange, et par conséquent est plus approprié pour les plasma composés de macromolécules à basses températures.

La composition chimique est calculée en utilisant l'équation de Saha modifiée, où la longueur de Debye prend en compte les différentes températures présentes dans le plasma. A partir de cette étude, on peut conclure que :

- Le paramètre θ influe sur l'évolution de la densité des espèces.
- Le choix du dosage initial du gaz est déterminant dans le calcul de la composition.
- L'abaissement du potentiel d'ionisation, et par conséquent la longueur de Debye, a une influence directe sur la densité des espèces.

Nomenclature

n	densité,	cm^{-3}	z_i	charge ionique
T	température,	K	U	fonction de partition
k_B	cste de Boltzmann,	$J.K^{-1}$	Indices:	
m_e	masse de l'électron,	kg	i	ion
h	cste de Planck,	$J.s$	e	électron
E_I	potentiel d'ionisation,	J	a	atome
λ_D	longueur de Debye,	cm		
e	charge élémentaire,	C		
p	pression,	bar		

Références :

- [1] B.Liani , R.Benallal and Z.Bentalha, Modelling of a multi temperature plasma composition, *Chin. Phys. Lett.*22, No.12, 3119, 2005
- [2] M.Mitchner and C.H.Kruger, Partially Ionized Gases (*New York:Wiley*) pp 37- 47, 1973
- [3] X.Chen et al, *J.Phys. D:Appl.Phys.* 32, 1711-171, 1999.
- [4] L D Landau and EM Lifshitz, statistical physics. (*Oxford: Pergamon*) Part 1 p 132, 1980
- [5] A.Gleizes, B.Chervy and JJ.Gonzales , *J.Phys.D:Appl.Phys.* 32.2060, 1999
- [6] A.V.Potapov, High temperature. Vol 4 55. 1966
- [7] T.Kihara et al., *J. Phys. Soc. Jpn.* Vol 18 837. 1963
- [8] T.Kihara et al., *J. Phys. Soc. Jpn.* Vol 18 1043. 1963
- [9] R. Benallal et al, Study of pressure and proportion influence on the non-LTE plasma composition, *Journal of Molecular Structure: THEOCHEM* 777 p 121–124, 2006