

Calcul de la composition chimique dans un plasma issu de mélanges de PTFE, d'air, de cuivre et de vapeur d'eau dans le cadre d'appareillages de coupure électrique à air

Pascal André, Marie Agnès Courty, A K Kagoné, Z K Koalaga, N K Kohio, F Zougmoré

▶ To cite this version:

Pascal André, Marie Agnès Courty, A K Kagoné, Z K Koalaga, N K Kohio, et al.. Calcul de la composition chimique dans un plasma issu de mélanges de PTFE, d'air, de cuivre et de vapeur d'eau dans le cadre d'appareillages de coupure électrique à air. Journal International de Technologie, de l'Innovation, de la Physique, de l'Energie et de l'Environnement , 2016, Journal International de Technologie, de l'Innovation, de la Physique, de l'Energie et de l'Environnement, 2 (1), 10.18145/jitipee.v2i1.128.g70 . hal-01478777

HAL Id: hal-01478777

https://hal.science/hal-01478777

Submitted on 1 Mar 2017

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.

JOURNAL INTERNATIONAL DE TECHNOLOGIE, DE L'INNOVATION, DE LA PHYSIQUE, DE L'ENERGIE ET DE L'ENVIRONNEMENT

Calcul de la composition chimique dans un plasma issu de mélanges de PTFE, d'air, de cuivre et de vapeur d'eau dans le cadre d'appareillages de coupure électrique à air

P. André, M.-A. Courty, A. K. Kagoné,Z. Koalaga, N. Kohio, F. Zougmoré



ISSN: 2428-8500

DOI: 10.18145/jitipee.v2i1.128.g70

Calcul de la composition chimique dans un plasma issu de mélanges de PTFE, d'air, de cuivre et de vapeur d'eau dans le cadre d'appareillages de coupure électrique à air

Pascal André ⁽¹⁾, Marie-Agnès Courty⁽²⁾, Abdoul K. Kagoné⁽³⁾, Zacharie Koalaga⁽³⁾, Niessan Kohio⁽³⁾, François Zougmoré ⁽³⁾

- (1) LAEPT, Campus Universitaire des Cézeaux, 4, Avenue Blaise Pascal, TSA 60026, CS 60026, 63178 AUBIERE CEDEX, FRANCE
- (2) PROMES UPR 8521,CNRS Tecnosud Rambla de la thermodynamique 66100 PERPIGNAN FRANCE
- (3) LAME, Université Ouaga 1 Professeur Joseph Ki-Zerbo,BP 7020, OUAGADOUGOU, BURKINA FASO

pascal.andre@univ-bpclermont.fr

Résumé – Le climat des zones sub-sahariennes est marqué par une forte variabilité du taux d'humidité dans l'air, surtout entre la saison sèche et la période de mousson, et par un empoussièrement atmosphérique élevé lors des tempêtes de poussières et de vents de sable. Sous ces conditions, les appareillages de coupure de type disjoncteur à air en contact avec des joues gazogènes en PTFE (Téflon©) ont des comportements anormaux et des échecs à la coupure sont souvent observés. Pour comprendre ce problème, le travail présenté propose d'abord d'étudier l'influence de la proportion d'eau et de poussières sur le fonctionnement des disjoncteurs, puis d'étudier l'influence de l'état du plasma, pression et déséquilibre thermique, sur sa composition chimique. Quatre mélanges sont comparés: les deux premiers avec de la silice simulant les poussières M_1 : 1,95 g air sec, 0,01 g cuivre, 0,02 g PTFE, 0,5 g silice, 6 μ g vapeur sèche M_2 : 1,95 g air sec, 0,01 g cuivre, 0.02 g PTFE, 0.5 g silice, 28 μ g vapeur sèche et les deux derniers sans poussières M_3 : 1.95 g air sec, 0.01 g cuivre, 0.02 g PTFE, 6 μ g vapeur sèche M_4 : 1.95 g air sec, 0.01 g cuivre, 0.02 g PTFE, 28 μ g vapeur sèche. Le couple (M_1, M_3) correspond à la période de la saison sèche et le couple (M_2, M_4) correspond à la période de mousson. Pour l'état du plasma nous considérons deux pressions (10⁵ Pa et 5×10^5 Pa) et deux états de déséquilibre thermique (à l'équilibre et hors de l'équilibre $T_e/T_l=2$). Pour mener à bien ce travail, nous utilisons la minimisation de l'énergie libre de Gibbs (enthalpie libre), qui est bien adaptée pour des transformations ayant lieu à une pression et à température(s) fixée(s). Cette méthode permet de déterminer les fractions molaires dans la gamme de température comprise entre 500 K et 6 000 K. Les calculs réalisés montrent que le graphite ne se forme pas, que la poussière de sable a une influence importante sur la formation des phases condensées et que la variation d'hygrométrie joue un rôle majeur sur les espèces minoritaires (fraction molaire $<10^{-5}$).

Mots clés : composition chimique, multiphases, enthalpie libre, plasmas thermiques, arc électrique, disjoncteur à air, polytétrafluoroéthylène

DOI: 10.18145/jitipee.v2i1.128.g70

Introduction

Dans les zones sub-sahariennes le taux d'humidité dans l'air peut varier dans des proportions importantes compte tenu des conditions climatiques. Cette variation importante est fonction des vents et des masses d'air. Durant la saison des pluies le taux d'hygrométrie est de l'ordre de 80% et la température mensuelle moyenne est de 23°C. Ce taux durant l'hiver peut baisser à 20% pour une température mensuelle moyenne identique. Sous ces conditions les appareillages de coupure de type disjoncteur à air en contact avec des joues gazogènes en polytétrafluoroéthylène (PTFE ou Téflon©) ont des comportements anormaux et des échecs à la coupure sont souvent observés (Figure 1). Il est à noter que les thermoplastiques et les thermodurcissables sont largement utilisés comme joues gazogènes [1] et [2]. Ces matériaux ont des propriétés qui peuvent varier en fonction des conditions climatiques notamment leurs propriétés à absorber l'eau, leurs propriétés mécaniques ainsi que leur composition chimique [1]. Deux conséquences majeures sur le plasma : sa conductibilité thermique va changer avec apparition de pic de conductibilité thermique bénéfique à la coupure [3] et changement du rayonnement émis et apparition de spectre moléculaire complexe [4] (la perte d'énergie par rayonnement du bilan énergétique va être modifiée). Le disjoncteur devant être réutilisable le dépôt de matériaux condensés peut modifier fortement les propriétés des matériaux en interaction avec l'arc.

Les vents de sable et de poussières sont également l'une des caractéristiques du climat subsaharien. Dans les appareillages de coupure à air les poussières fines s'introduisent par les trous d'évent et forment une couche plus ou moins épaisse sur les joues gazogènes (Figure 1) susceptible de perturber le mécanisme de coupure des appareillages électriques.

Des mesures réalisées in situ montrent une variation de pression et de température respectivement de 1 à 5 bars mais avec une onde de choc de pression pouvant atteindre 10 à 20 bars et des températures variant de 300 K à 5000 K [1] et [2]. L'objectif de ce travail est de montrer l'influence de la vapeur d'eau et des poussières sur la composition chimique comprise entre 500 K et 6 000 K. Nous discuterons des mélanges considérés afin de tenir compte du taux d'hygrométrie et des poussières dans le premier paragraphe. Puis dans le second paragraphe, nous discuterons de la méthode numérique employée afin d'obtenir la composition chimique du mélange multiphasique. Dans le troisième paragraphe, nous discuterons des résultats numériques obtenus. Enfin nous conclurons.

1. Mélanges considérés

Les alizés et la mousson apportent du Golfe de Guinée un air humide avec une hygrométrie moyenne de 80%. En saison sèche, le Harmattan fait descendre des zones sahariennes et sahéliennes un air très sec dont l'hygrométrie tombe à 20% en Janvier [5]. La température ambiante étant de l'ordre de 23°C durant ces deux périodes [5]. L'humidité absolue de saturation est la masse d'eau en phase gazeuse que peut contenir un mètre cube d'air sans condensation. L'humidité relative à une température donnée est le pourcentage de vapeur d'eau présent dans l'air par rapport à l'humidité absolue de saturation. Sur la figure 2, nous avons représenté l'humidité absolue de saturation. La masse d'eau contenue dans un

kilogramme d'air sec s'obtient en multipliant le taux d'hygrométrie en pourcentage par l'humidité absolue à la température donnée (Figure 2). A 23°C, l'humidité absolue est de 17,8×10⁻³ kg/kg d'air sec durant les alizés, le taux d'hygrométrie est de 80%, on obtient une masse d'eau contenue dans l'air de l'ordre de 14,24×10⁻³ kg/kg d'air sec et durant la saison sèche, le taux d'hygrométrie est de 20%, on obtient une masse d'eau contenue dans l'air sec de l'ordre de 3,56×10⁻³ kg/kg d'air sec.



Figure 1 : Appareillages de protection soumis à de fortes contraintes (Ouagadougou).

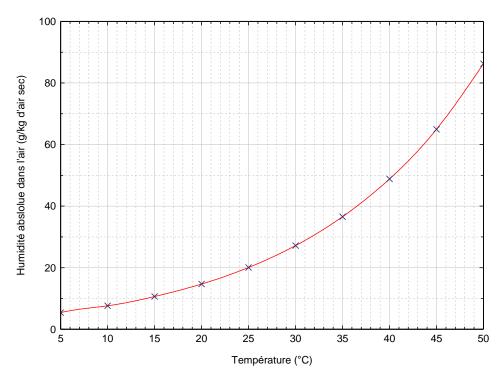


Figure 2 : Humidité (g par kilogramme d'air sec) absolue de saturation de l'air en fonction de la température.

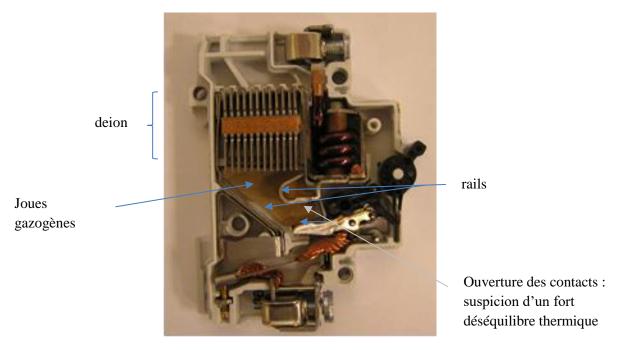


Figure 3: Disjoncteur basse tension.

La Figure 3 représente la coupe d'un disjoncteur basse tension où l'on retrouve les différents éléments nécessaires à la coupure. La chambre où se forme l'arc d'un disjoncteur s'étend généralement entre une zone de contacts et la chambre d'extinction (deion). Dans la zone de contacts, la formation de l'arc est initiée par séparation des contacts. Un champ électrique parfois élevé peut apparaître entraînant un déséquilibre thermique [6]. La température des électrons est alors supérieure à celle des espèces lourdes. Cette zone comporte généralement des rails permettant le départ de l'arc vers la chambre d'extinction. Le plus souvent ces rails sont constitués de cuivre. La force électromagnétique induite par la circulation du courant entraîne l'arc, plus ou moins vite en fonction du courant à couper, vers les plaques de désionisation (deion) de la chambre d'extinction. Les joues gazogènes vont dégazer et refroidir l'arc faisant varier ainsi sa viscosité et donc sa vitesse de déplacement. Dans un disjoncteur à air classique on peut estimer le volume entre les joues gazogènes à 1,5 cm³, en prenant en compte la densité de l'air on obtient une masse d'air sec de l'ordre de 1,95 g. Avec cette masse d'air on obtient les masses de vapeur sèche d'eau : 1,95×10⁻³×14,24×10⁻³≈28µg pour la saison des pluies et $1.95 \times 10^{-3} \times 3.56 \times 10^{-3} \approx 6 \text{ µg}$ pour la saison sèche. On peut estimer un volume de poussières réparti sur les deux joues gazogènes de l'ordre de 0,3 cm³ conduisant à une masse de silice de l'ordre de 0,5 g. On fixe une proportion de PTFE ablatée identique dans tous les cas de figure à 0,02 g et pour le cuivre provenant des rails conducteurs à 0,01 g. Il est à noter que nous avons pris une température moyenne [1] et que nous ne prenons pas en compte les variations journalières de la température; notre objectif étant de définir des mélanges a priori typiques des conditions climatiques et des disjoncteurs utilisés. Le tableau 1 résume les mélanges considérés.

Nous prenons comme formulation de l'air la composition chimique standard suivante [US Standard] : N_2 78,084 %; O_2 20,9476 % ; Ar 0,934 % ; CO_2 0,0314 % en pourcentage molaire [7].

composés	Mélange 1	Mélange 2	Mélange 3	Mélange 4
Air sec	1,95 g	1,95 g	1,95 g	1,95 g
Cuivre	0,01 g	0,01 g	0,01 g	0,01 g
PTFE	0,02 g	0,02 g	0,02 g	0,02 g
Silice	0,5 g	0,5 g	0 g	0 g
Vapeur sèche	6×10 ⁻⁶ g	28×10 ⁻⁶ g	6×10 ⁻⁶ g	28×10 ⁻⁶ g

Tableau 1. Mélanges considérés.

2. Méthode de calcul

Pour chaque espèce chimique considérée la fonction de partition de translation s'écrit :

$$Z_{tr} = \left(\frac{2\pi m_i k \, T_{tr}}{h^2}\right)^{3/2} \, \frac{k \, T_{tr}}{P^0} \tag{1}$$

Avec k la constante de Boltzmann, h la constante de Planck, m_i la masse de l'espèce chimique i, P^0 la pression standard (10^5 Pa), T_{tr} est égale à T_e pour les électrons libres et T_l pour les espèces chimiques dites lourdes (atomes, ions, molécules).

Pour les espèces chimiques ne comportant qu'un seul atome, la fonction de partition interne s'écrit [8]:

$$Z_{int} = \sum_{n,l,s} g(n,l,s) e^{-\frac{E(n,l,s)}{kT_{ex}}}$$
(2)

avec g(n, l, s) la dégénérescence du niveau quantique (n, l, s), E(n, l, s) l'énergie du niveau quantique de nombre quantique principal n, de nombre quantique azimutal l et de spin s et T_{ex} la température d'excitation électronique. Pour augmenter la précision de la fonction de partition aux températures élevées, certains auteurs ajoutent artificiellement des niveaux d'énergie en dessous du niveau d'ionisation [9]. Ces niveaux ne sont peuplés qu'à haute température [10]. En raison de la gamme de température considérée : 500 K à 6 000 K, nous prenons en compte uniquement les niveaux quantiques disponibles dans la littérature [11].

Pour les espèces chimiques comportant deux atomes, nous utilisons la méthode décrite par Drellishak et al [12] à l'équilibre thermique. Ainsi la fonction de partition des espèces chimiques diatomiques s'écrit :

$$Z_{int} = \sum_{n=1}^{n_{max}} g_n e^{-L\frac{T_e(n)}{T}} \sum_{v=0}^{v_{max}(n)} e^{-L\frac{G(n,v)}{T}} \sum_{I=0}^{J_{max}(n,v)} \frac{2J+1}{\sigma} e^{-L\frac{F(n,v,J)}{T}}$$
(3)

Avec J le nombre quantique de rotation; F(n,v,J) est l'énergie de rotation du niveau quantique (n,v,J) avec v le nombre quantique de vibration et d'état quantique électronique n; G(n,v) est l'énergie de vibration dépendant du nombre quantique de vibration et d'état quantique électronique n; $T_e(n)$ est l'énergie du niveau d'état quantique électronique n, g_n est le poids statistique du niveau n; σ est un facteur de symétrie égal à 1

lorsque les deux atomes constituants la molécule sont identiques et égal à 2 pour deux atomes différents et $L = \frac{hc}{k}$.

Pour obtenir les fonctions de partition dans un plasma hors de l'équilibre thermique, nous séparons artificiellement les niveaux quantiques électroniques de vibration et de rotation afin de pouvoir écrire le potentiel chimique [13] et [14] :

$$Z_{int} = \left(\sum_{n=1}^{n_{max}} g_n e^{-L\frac{T_e(n)}{T_{ex}}}\right) \left(\sum_{v=0}^{v_{max}} e^{-L\frac{G(1,v)}{T_{vib}}}\right) \left(\sum_{J=0}^{J_{max}\binom{n=1}{v=0}} \frac{2J+1}{\sigma} e^{-L\frac{F(1,0,J)}{T_{rot}}}\right)$$
(4)

$$Z_{int} = Z_{ex}Z_{vib}Z_{rot}$$

Avec Z_{ex} la fonction de partition électronique, Z_{vib} la fonction de vibration et la fonction de partition de rotation Z_{rot} .

Le potentiel chimique des espèces chimiques monoatomiques s'écrit :

$$\mu_{monoat}^{0} = -k T_{ex} \ln(Z_{int}) - k T_{l} \ln(Z_{tr}) + e_{0}$$
 (5)

Avec e_0 l'enthalpie de formation de l'espèce chimique considérée.

Il est trivial de constater qu'à l'équilibre thermique la température d'excitation électronique est identique à la température de translation. Le potentiel chimique des espèces diatomiques s'écrit :

• À l'équilibre thermique toutes les températures sont identiques :

$$\mu_{diat}^{0} = -k T \ln(Z_{int}) - k T \ln(Z_{tr}) + e_0$$
 (6)

• Et hors de l'équilibre :

$$\mu_{diat}^{0} = -k T_{ex} \ln(Z_{ex}) - k T_{vib} \ln(Z_{vib}) - k T_{rot} \ln(Z_{rot}) - k T_{l} \ln(Z_{tr}) + e_{0}$$
 (7)

Des mesures effectuées dans plusieurs configurations [15] [16] [4] montrent que la température vibrationnelle T_{vib} est intermédiaire entre la température des espèces lourdes et la température électronique. Ces conditions permettent de faire l'hypothèse simplificatrice suivante:

$$\begin{cases} T_l = T_{rot} \\ T_e = T_{ex} = \theta T_l \\ T_{vib} = \sqrt{\theta} T_l \end{cases}$$
 (8)

Avec T_{rot} la température de rotation.

Pour les espèces chimiques polyatomiques et les espèces chimiques condensées, nous prenons le potentiel chimique et l'enthalpie de formation dans une table de données thermodynamiques [17]. La principale contrainte appliquée au plasma étant la pression, suivant [18] et [19] nous utilisons la minimisation de l'énergie libre de Gibbs hors d'équilibre thermique.

L'énergie de Gibbs du système peut être divisée en trois termes [20]:

• La contribution des électrons libres :

$$G_e = n_e \left[\mu_e^0 + k \, T_e \ln \left(\frac{T_e n_e}{T_e n_e + T_l \sum_{i=1, i \neq e}^{N_{pg}} n_i} \right) + k \, T_e \ln \left(\frac{P}{P^0} \right) \right]$$
(9)

• La contribution des espèces chimiques lourdes gazeuses :

$$G_{pg_i} = \sum_{i=1}^{N_{pg}} n_i \left[\mu_i^0 + kT_l \ln \left(\frac{T_l \, n_i}{T_e \, n_e + T_l \sum_{i=1; i \neq e}^{N_{pg}} n_i} \right) + kT_l \ln \left(\frac{P}{P^0} \right) \right]$$
(10)

• La contribution des espèces chimiques condensées:

$$G_{ls} = \sum_{i=1}^{N_{ls}} n_i \mu_i^0 \tag{11}$$

Avec le nombre d'espèces chimiques gazeuses N_{pg} , N_{ls} le nombre de phases condensées et N le nombre total d'espèces chimiques, P^0 la pression standard 10^5 Pa, P la pression.

Plusieurs méthodes numériques ont été développées dans le cas de composition chimique complexe à l'équilibre thermique [21]. Ainsi, nous modifions la méthode numérique donnée dans [22] pour prendre en compte toutes les phases condensées et le déséquilibre thermique. On obtient le système suivant :

On obtient le système suivant :
$$\begin{pmatrix} \frac{kT}{n_1} & \dots & 0 & a_{1,0} & \dots & a_{1,8} \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ \frac{kT}{n_N} & a_{N,0} & \dots & a_{N,8} \\ a_{1,0} & \dots & a_{N,0} & 0 & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ a_{1,4} & \dots & a_{N,8} & 0 & \dots & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Delta n_1 \\ \dots \\ \Delta n_N \\ \Delta \pi_0 \\ \dots \\ \Delta \pi_8 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\mu_1^0 - kT \ln \frac{n_1}{\sum_{i=1}^N n_i} - kT \ln \frac{P}{P^0} - \sum_{j=0}^8 \pi_j a_{i,j} \\ \dots \\ -\mu_N^0 - kT \ln \frac{n_N}{\sum_{i=1}^N n_i} - kT \ln \frac{P}{P^0} - \sum_{j=0}^8 \pi_j a_{N,j} \\ \sum_{j=0}^N n_j a_{N,j} - kT \ln \frac{P}{P^0} - \sum_{j=0}^8 \pi_j a_{N,j} \\ \sum_{j=0}^N n_j a_{N,j} - kT \ln \frac{P}{P^0} - \sum_{j=0}^8 \pi_j a_{N,j} \\ \sum_{j=0}^N n_j a_{N,j} - kT \ln \frac{P}{P^0} - \sum_{j=0}^8 \pi_j a_{N,j} \\ \sum_{j=0}^N n_j a_{N,j} - kT \ln \frac{P}{P^0} - \sum_{j=0}^8 \pi_j a_{N,j} \\ \sum_{j=0}^N n_j a_{N,j} - kT \ln \frac{P}{P^0} - \sum_{j=0}^8 \pi_j a_{N,j} \\ \sum_{j=0}^N n_j a_{N,j} - kT \ln \frac{P}{P^0} - \sum_{j=0}^8 \pi_j a_{N,j} \\ \sum_{j=0}^N n_j a_{N,j} - kT \ln \frac{P}{P^0} - \sum_{j=0}^8 \pi_j a_{N,j} \\ \sum_{j=0}^N n_j a_{N,j} - kT \ln \frac{P}{P^0} - \sum_{j=0}^8 \pi_j a_{N,j} \\ \sum_{j=0}^N n_j a_{N,j} - kT \ln \frac{P}{P^0} - \sum_{j=0}^8 \pi_j a_{N,j} \\ \sum_{j=0}^N n_j a_{N,j} - kT \ln \frac{P}{P^0} - \sum_{j=0}^8 \pi_j a_{N,j} \\ \sum_{j=0}^N n_j a_{N,j} - kT \ln \frac{P}{P^0} - \sum_{j=0}^8 \pi_j a_{N,j} \\ \sum_{j=0}^N n_j a_{N,j} - kT \ln \frac{P}{P^0} - \sum_{j=0}^8 \pi_j a_{N,j} \\ \sum_{j=0}^N n_j a_{N,j} - kT \ln \frac{P}{P^0} - \sum_{j=0}^8 \pi_j a_{N,j} \\ \sum_{j=0}^N n_j a_{N,j} - kT \ln \frac{P}{P^0} - \sum_{j=0}^8 \pi_j a_{N,j} \\ \sum_{j=0}^N n_j a_{N,j} - kT \ln \frac{P}{P^0} - \sum_{j=0}^8 \pi_j a_{N,j} \\ \sum_{j=0}^N n_j a_{N,j} - kT \ln \frac{P}{P^0} - \sum_{j=0}^8 \pi_j a_{N,j} \\ \sum_{j=0}^N n_j a_{N,j} - kT \ln \frac{P}{P^0} - \sum_{j=0}^8 \pi_j a_{N,j} \\ \sum_{j=0}^N n_j a_{N,j} - kT \ln \frac{P}{P^0} - \sum_{j=0}^8 \pi_j a_{N,j} \\ \sum_{j=0}^N n_j a_{N,j} - kT \ln \frac{P}{P^0} - \sum_{j=0}^8 \pi_j a_{N,j} \\ \sum_{j=0}^N n_j a_{N,j} - kT \ln \frac{P}{P^0} - \sum_{j=0}^8 \pi_j a_{N,j} \\ \sum_{j=0}^N n_j a_{N,j} - kT \ln \frac{P}{P^0} - \sum_{j=0}^8 \pi_j a_{N,j} \\ \sum_{j=0}^N n_j a_{N,j} - kT \ln \frac{P}{P^0} - \sum_{j=0}^8 \pi_j a_{N,j} \\ \sum_{j=0}^N n_j a_{N,j} - kT \ln \frac{P}{P^0} - \sum_{j=0}^8 \pi_j a_{N,j} \\ \sum_{j=0}^N n_j a_{N,j} - kT \ln \frac{P}{P^0} - \sum_{j=0}^8 \pi_j a_{N,j} \\ \sum_{j=0}^N n_j a_{N,j} - kT \ln \frac{P}{P^0}$$

Les coefficients a_{ij} de l'espèce chimique j considérée correspondent au nombre de type d'atome dans la base (Nombre de charge électrique, Ar, C, Cu, F, H, N, O, Si). Par exemple pour CO_2 nous aurons (0, 0, 1, 0, 0, 0, 0, 2, 0) les b_i sont le nombre d'atomes de la base précédente calculé à partir du mélange initial (Tableau 1). Les espèces chimiques du type Ar et N⁻ ont une affinité électronique très faible et sont donc instables nous ne les prenons pas en compte [7]. Nous devons déterminer les potentiels chimiques de 22 espèces chimiques monoatomiques : Ar, Ar⁺, C, C⁻, C⁺, Cu, Cu⁻, Cu⁺, F, F⁻, F⁺, H, H⁻, H, H⁺, N, N⁺, O, O⁻, O⁺, Si, Si⁻, Si⁺, 49 espèces chimiques diatomiques, C_2 , C_2 , C_2 , C_2 , C_2 , C_2 , C_3 , C_4 , CH, CH, CH, CH, CN, CN,

CN⁺, CO, CO⁻, CSi, Cu₂, CuF, CuH, CuO, F₂, F₂⁻, FN, FO, H₂, H₂⁻, H₂⁺, HF, HF⁺, N₂, N₂⁻, N₂⁺, NH, NH⁻, NH⁺, NO, NO⁻, NO⁺, NSi, O₂, O₂⁻, O₂⁺, OH, OH⁻, OH⁺, Si₂, SiH, SiH⁺, SiO, 110 espèces chimiques polyatomiques : C₂F₂, C₂F₃N, C₂F₄, C₂F₆, C₂H, C₂H₂, C₂H₄, C₂H₄O, C₂HF, C₂N, C₂N₂, C₂O, C₂Si, C₃, C₃O₂, C₄, C₄N₂, C₅, CF₂, CF₂O, CF₂⁺, CF₃, CF₃⁺, CF₄, CF₄O, CFN, CFO, CH₂, CH₂F₂, CH₂O, CH₃, CH₃F, CH₄, CHF, CHF₃, CHFO, CHN, CHNO, CHO, CHO⁺, CNN, CNO, CO₂, CO₂-, CO₂⁺, CSi₂, CuF₂, F₂H₂, F₂N, F₂N₂_Cys,F₂N₂_Trans, F₂O, F₃N, F₃NO, F₄H₄, F₄N₂, F₅H₅, F₆H₆, F₇H₇, FHO, FNO, FNO₂, FNO₃, FO₂, H₂N, H₂N₂, H₂O, H₂Si, H₃N, H₃O⁺, H₃Si, H₄N₂, H₄Si, HNO, HNO₂_Cys, HNO₂_Trans, HNO₃, HO₂, N₂O₃, N₂O₄, N₂O₅, N₂O⁺, N₃, NCN, NO₂, NO₂⁻, NO₃, NSi₂, O₃, Si₃, SiO₂, H₃⁺, HO₂⁻, H₂O⁺, H₂O₂, NO₃⁻, NH₄⁺, NH₂OH, NH₂NO₂, C₂H₃, C₂H₅, C₂H₆, COOH, HCOOH, CH₃O, CH₂OH, CH₃OH, C₂H₅OH, HCCN et des électrons. Ainsi le nombre d'espèces gazeuses N_{pg} total est de 183 et le nombre total d'espèces chimiques $N = N_{ls} + N_{pg}$ varie en fonction du nombre de phase condensée N_{ls} disparaissant pour une température donnée.

$$\begin{cases} n_i^{it+1} = n_i^{it} + \lambda \, \Delta n_i & \forall i \in [1, N] \\ \pi_i^{it+1} = \pi_i^{it} + \lambda \, \Delta \pi_i & \forall i \in [0, 8] \end{cases}$$

$$(13)$$

Le paramètre λ correspond à la valeur réelle la plus élevée comprise entre zéro et un qui remplit les conditions suivantes :

$$n_i^{it+1} = n_i^{it} + \lambda \,\Delta n_i > 0 \quad \forall i \in [1, N] \tag{14}$$

Cette étape permet d'éviter l'obtention d'un nouveau nombre de mole n_i négatif à l'itération it+1 ce qui peut arriver si les nombres de mole n_i sont loin de la solution. Les nouvelles valeurs des nombres de mole n_i et des multiplicateurs de Lagrange π_i obtenues à l'itération it+1 sont utilisées pour un nouveau cycle de calcul. La convergence est considérée comme étant atteinte lorsque les valeurs obtenues à l'itération it satisfont la relation suivante:

$$\Delta n_i < 10^{-15} n_i \quad \forall i \in [1, N]$$
 (15)

Comme l'indique les calculs réalisés pour des plastiques et pour le PTFE [22] et [23], le graphite devrait être l'espèce condensée majoritaire. Cette espèce qui s'étale à l'intérieur du disjoncteur diminue sa rigidité diélectrique après coupure pouvant conduire à un réamorçage de l'arc. La silice peut se retrouver sous plusieurs formes : β-quartz; trydimite, cristobalite et silice fondue [24], et en fonction du taux d'oxygène on peut obtenir soit du cuivre sous forme liquide, soit de l'oxyde de cuivre liquide Cu₂O soit de l'oxyde de cuivre solide CuO [25].

3. Résultats

3.1. Influence du pourcentage de vapeur sèche dans l'air

En prenant en compte les quatre mélanges initiaux proposés dans le Tableau 1, nous avons tracé la fraction molaire des espèces chimiques en fonction de la température sur les Figures 4.a à 4.d à la pression de 10⁵ Pa. On observe que les espèces gazeuses majoritaires diazote N₂, dioxygène O₂, argon Ar, dioxyde de carbone CO₂, suivent toutes le même comportement quelques soient les proportions de poussières et de vapeur sèche contenues dans l'air (Tableau 1). Le dioxygène se dissocie pour former de l'oxygène atomique autour de

3 375 K. Le dioxyde de carbone se dissocie en monoxyde carbone aux alentours de 3 075 K. Néanmoins pour les cas des mélanges en présence de poussières (M₁, M₂), lorsque la silice liquide se vaporise, on observe une augmentation en dioxygène et la création de l'espèce gazeuse de monoxyde de silice SiO vers 2 920 K. Pour les quatre mélanges considérés, nous observons la présence de fluorure d'hydrogène HF aux basses températures.

La conductivité électrique est liée directement à la densité électronique du milieu. Pour les mélanges M_1 et M_2 , la neutralité électrique est réalisée entre les électrons et NO^+ pour les températures inférieures à 4 400 K et avec Si^+ pour les températures plus importantes. Pour les mélanges M_3 et M_4 , la neutralité électrique est réalisée uniquement entre les électrons et NO^+ dans la gamme de température considérée.

La silice passe par quatre phases successives en fonction de la température : β -quartz (β -q), tridymite (T), cristobalite (C), silice liquide (liq) lorsque les poussières sont présentes. Nous pouvons remarquer qu'une autre phase condensée sous forme liquide Cu_2O apparait.

Aux températures les plus basses (<2500 K), une différence notoire est la présence de CF₄, de CF₂O et de FNO à faible fraction dans le mélange 1 (M_1) et le mélange 3 (M_3). Ces mélanges comportent un faible pourcentage de vapeur sèche présente dans l'air. Alors que pour le mélange 2 (M_2) et le mélange 4 (M_4) la vapeur sèche est plus importante. Nous observons alors la molécule d'eau H_2O .

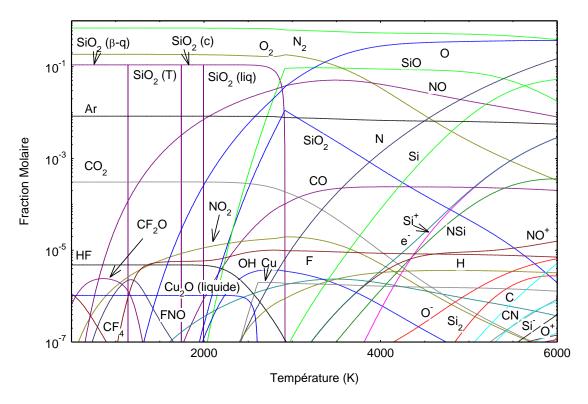


Figure 4.a : Fraction molaire du mélange 1 (1,95 g air sec, 0,01 g cuivre, 0,02 g PTFE, 0,5 g silice, 6 10⁻⁶ g vapeur sèche) à la pression de 10⁵ Pa.

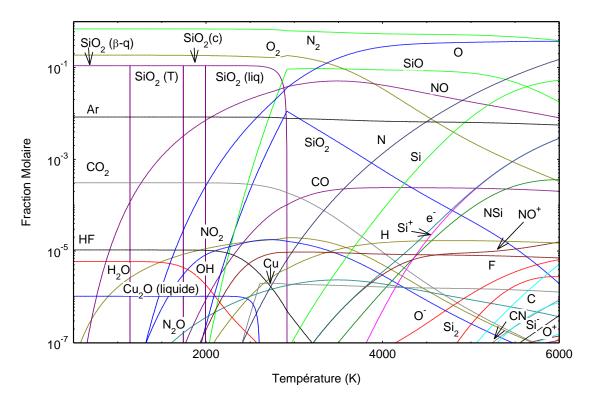


Figure 4.b : Fraction molaire du mélange 2 (1,95 g air sec, 0,01 g cuivre, 0,02 g PTFE, 0,5 g silice, 28 10⁻⁶ g vapeur sèche) à la pression de 10⁵ Pa.

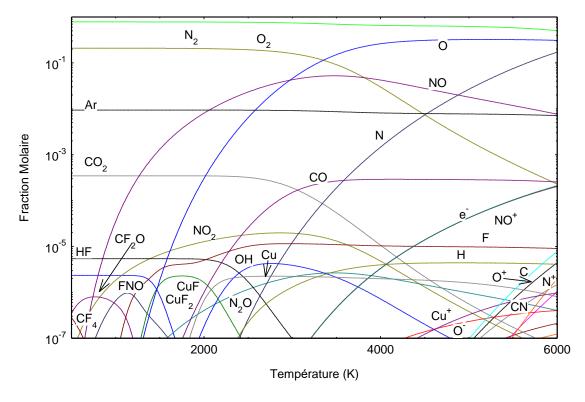


Figure 4.c : Fraction molaire du mélange 3 (1,95 g air sec, 0,01 g cuivre, 0,02 g PTFE, 6×10^6 g vapeur sèche) à la pression de 10^5 Pa.

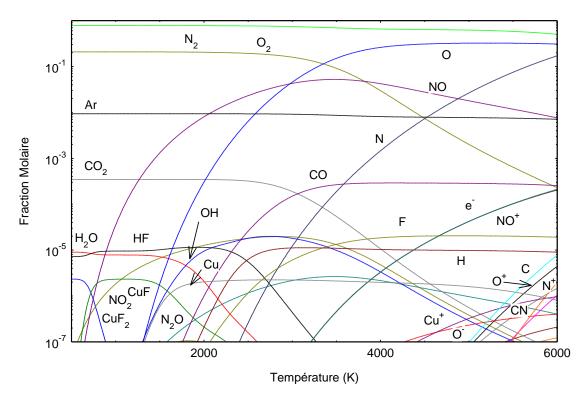


Figure 4.d: Fraction molaire du mélange 4 (1,95 g air sec, 0,01 g cuivre, 0,02 g PTFE, 28×10^6 g vapeur sèche) à la pression de 10^5 Pa.

3.2. Influence de la pression

Nous avons tracé la fraction molaire des espèces chimiques en fonction de la température sur les Figures 5.a à 5.d à la pression de 5×10^5 Pa pour les quatre mélanges proposés (Tableau 1). Les remarques faites à la pression de 10^5 Pa pour les différents mélanges sont toujours valables à la pression de 5×10^5 Pa. Nous observons une augmentation de la température pour lesquelles les réactions chimiques apparaissent. Par exemple, la dissociation de l'oxygène diatomique O_2 en oxygène monoatomique O apparaît à une température de 3 360 K à 10^5 Pa. et de 3 680 K à 5×10^5 Pa. La dissociation du CO_2 apparaissant à 3 075 K à 10^5 Pa apparait à 3 320 K à 5×10^5 Pa. Pour les mélanges M_2 et M_4 , la molécule d'eau se dissocie à 1 795 K à 10^5 Pa et à 1855 K à 5×10^5 Pa.

De même pour les vaporisations de CuO_2 et de SiO_2 on observe une augmentation de température pour laquelle ces phases disparaissent, de 2912 K à 3165 K pour la silice liquide, de 2 600 K à 2 750 K pour le Cu_2O liquide. L'ionisation de Si et de NO suit la même évolution en direction des plus hautes températures. C'est-à-dire que pour une concentration électronique identique la température doit être plus importante. Par exemple la fraction molaire de 10^{-5} est atteinte à 4 285 K pour une pression de 10^{5} Pa et à 4 465 K pour une pression de 5×10^{5} Pa pour les mélanges M_1 et M_2 ; dans le cas des mélanges M_3 et M_4 à 4 380 K pour une pression de 10^{5} Pa et à 4 570 K pour une pression de 5×10^{5} Pa. Nous remarquons ainsi que la loi de Le Chatelier est bien vérifiée. C'est-à-dire que pour une température donnée si le système à l'équilibre est soumis à une augmentation de pression les équilibres produiront un changement compensateur. Par exemple pour une dissociation son

taux aura tendance à diminuer afin que le nombre d'espèces chimiques différentes diminue et ainsi via la loi de Dalton que la pression baisse.

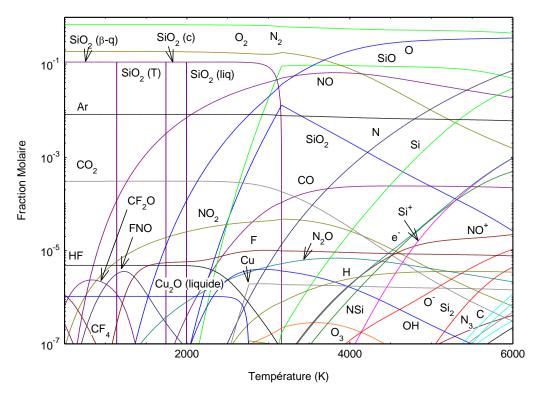


Figure 5.a : Fraction molaire du mélange 1 (1,95 g air sec, 0,01 g cuivre, 0,02 g PTFE, 0,5 g silice, 6×10^{-6} g vapeur sèche) à la pression de 5×10^{5} Pa.

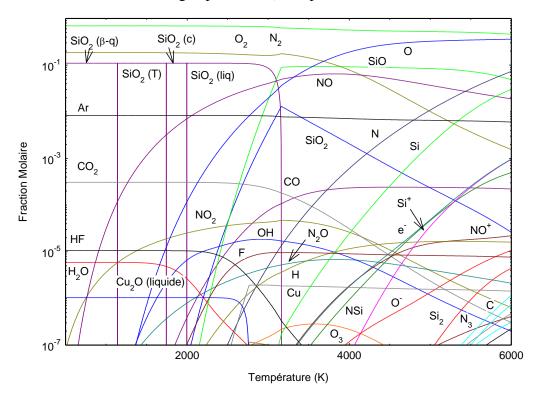


Figure 5.b : Fraction molaire du mélange 2 (1,95 g air sec, 0,01 g cuivre, 0,02 g PTFE, 0,5 g silice, 28×10^{-6} g vapeur sèche) à la pression de 5×10^{5} Pa.

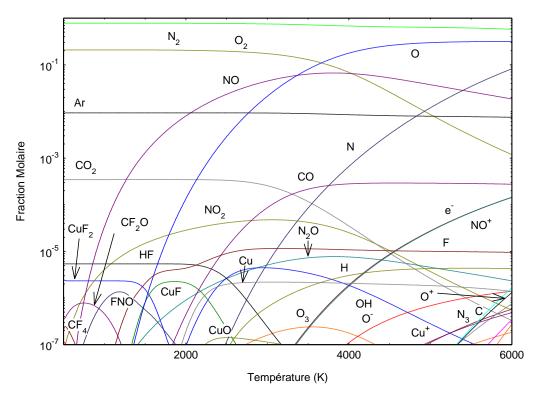


Figure 5.c: Fraction molaire du mélange 3 (1,95 g air sec, 0,01 g cuivre, 0,02 g PTFE, 6×10^{-6} g vapeur sèche) à la pression de 5×10^{5} Pa.

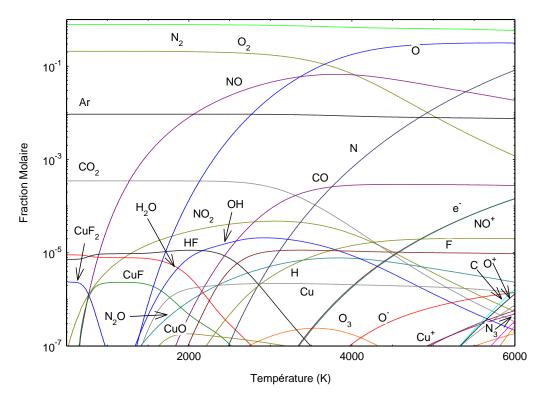


Figure 5.d : Fraction molaire du mélange 4 (1,95 g air sec, 0,01 g cuivre, 0,02 g PTFE, 28×10^{-6} g vapeur sèche) à la pression de 5×10^{5} Pa.

3.3 Influence du déséquilibre thermique

En comparant les Figures 6, les principales remarques faites à l'équilibre thermique sont toujours vérifiées. Une caractéristique importante de ces graphes est l'augmentation importante de la fraction molaire en électrons. A la différence des deux cas précédents (à l'équilibre thermique et en pression) l'ion cuivre Cu⁺ apparaît aux basses températures des lourds T_l (2 000 K). Dans les cas précédents l'ionisation du cuivre n'était pas visible dans la gamme de fraction molaire considérée la concentration en cuivre initiale étant trop basse (Tableau 1) bien que son énergie d'ionisation soit faible. Pour les mélanges M₃ et M₄, on remarque que lorsque la phase liquide de Cu₂O n'est pas présente, il y a suffisamment de cuivre pour que l'ion cuivre Cu⁺ participe visiblement à la neutralité électrique. Dans le cas des mélanges M₁ et M₂, la neutralité électrique est réalisée entre les électrons et Cu⁺ en dessous de 2 200 K puis avec NO⁺ jusqu'à 3 550 K puis avec Si⁺. Pour les mélanges M₃ et M₄ la neutralité électrique est réalisée entre les électrons et Cu⁺ en dessous de 2 200 K puis avec NO⁺. L'équilibre de la phase liquide de SiO₂ avec la vapeur s'effectue essentiellement entre l'oxygène O, le monoxyde de silicium SiO et la silice gazeuse SiO₂. Les fonctions de partition d'excitation électronique de SiO et O sont calculées à la température électronique et la fonction de vibration de SiO à une température intermédiaire (relation (8)) ce qui modifie leurs propriétés thermodynamiques spécifiques notamment leurs potentiels chimiques µ. Ainsi le système (12) est modifié et nous observons un abaissement de la température de vaporisation de 2 920 K à 2 770 K pour les mélanges M₁ et M₂. De façon générale les réactions chimiques (dissociation, ionisation) s'effectuent à plus basse température des espèces lourdes.

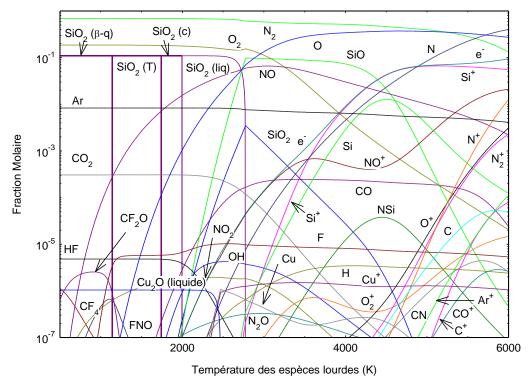


Figure 6.a : Fraction molaire du mélange 1 (1,95 g air sec, 0,01 g cuivre, 0,02 g PTFE, 0,5 g silice, 6×10^{-6} g vapeur sèche) à la pression de 10^5 Pa et avec un déséquilibre thermique (θ =T_e/T₁) de 2.

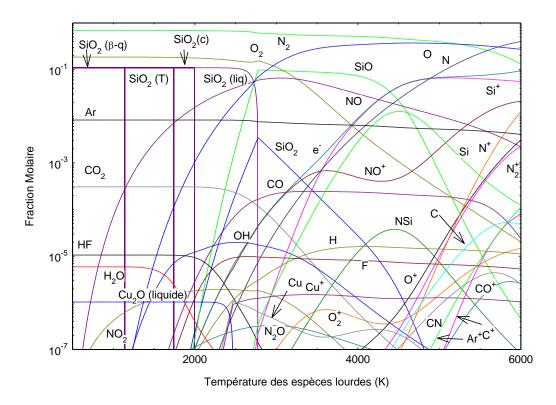


Figure 6.b : Fraction molaire du mélange 2 (1,95 g air sec, 0,01 g cuivre, 0,02 g PTFE, 0,5 g silice, 28×10^{-6} g vapeur sèche) à la pression de 10^{5} Pa et avec un déséquilibre thermique (θ =T_e/T₁) de 2.

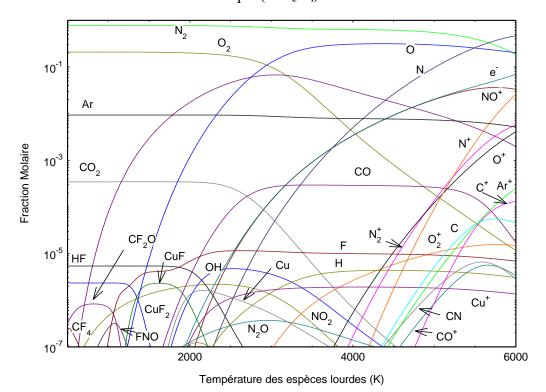


Figure 6.c: Fraction molaire du mélange 3 (1,95 g air sec, 0,01 g cuivre, 0,02 g PTFE, 6×10^{-6} g vapeur sèche) à la pression de 10^5 Pa et avec un déséquilibre thermique (θ =T_e/T₁) de 2.

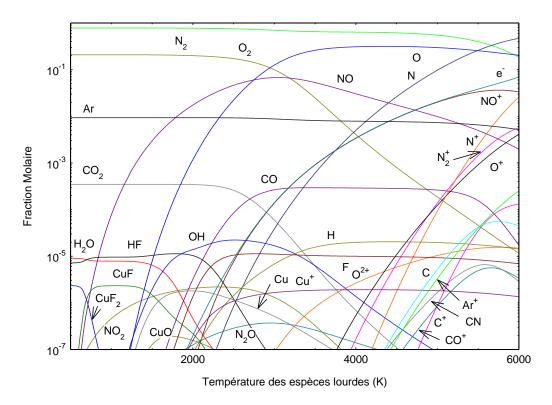


Figure 6.d: Fraction molaire du mélange 4 (1,95 g air sec, 0,01 g cuivre, 0,02 g PTFE, 28×10^{-6} g vapeur sèche) à la pression de 10^{5} Pa et avec un déséquilibre thermique $\theta = T_e/T_1$) de 2.

Conclusion

Le calcul des fractions molaires en fonction de la température a permis de démontrer l'influence de la vapeur d'eau et des poussières sur la composition chimique du plasma appliquée aux appareillages de coupure à air. Les poussières et le taux d'humidité dans l'air peuvent varier dans des proportions importantes compte tenu des conditions climatiques dans les zones subsahariennes. Nous avons proposé quatre mélanges caractéristiques : été, hiver avec et sans poussières. Nous avons également fait varier les caractéristiques du plasma : pression et déséquilibre thermique. A partir de ces calculs plusieurs tendances ont pu être relevées. La première est que la présence de graphite n'est relevée dans aucun des mélanges considérés bien que la présence de PTFE ablaté aurait pu le laisser présager [22]. A contrario la présence de poussières, simulée par de la silice, change totalement les fractions molaires avec l'apparition de deux phases condensées SiO₂ solide et liquide et Cu₂O liquide. La variation de la proportion d'eau (6 microgrammes à 28 microgrammes) a un impact important sur les espèces chimiques minoritaires (inférieur à une fraction molaire de 10⁻⁵). Nous observons notamment une forte augmentation de la vapeur sèche aux basses températures avec l'augmentation de la proportion d'eau et la diminution de la proportion présente de CF₄, de CF₂O et de FNO pour les faibles proportions d'eau. La présence d'hydroxyde de fluor HF dans tous les mélanges est également à noter. Les calculs de composition ne permettent pas de mettre en évidence le rôle de l'eau dont la masse est relativement faible sur la coupure. Les calculs des coefficients de transport, et plus particulièrement la conductibilité thermique pourraient le mettre en exergue [26]. Le dépôt de matériaux condensés sur les joues gazogènes peuvent changer notablement la composition chimique du plasma et influer sur la viscosité dynamique de l'arc et donc de sa vitesse de déplacement.

La distance entre les contacts électriques étant petite juste après l'ouverture des contacts, le champ électrique devient alors très important. Ainsi un déséquilibre thermique important apparait et par conséquent, les calculs montrent une forte augmentation de la fraction molaire des électrons. L'augmentation de pression lors de l'augmentation de la température tend à diminuer la fraction molaire d'électrons. Seule la présence de la poussière change les espèces chimiques permettant la neutralité électrique (Si⁺ au lieu de NO⁺).

Remerciements

Les auteurs souhaitent remercier l'aide financière de Université Ouaga 1 Professeur Joseph Ki-Zerbo pour les voyages d'études de trois des auteurs.

Références

- [1] M. Rapeaux, J.-M. Mladjian et V. Nosov, «Comportement des thermoplastiques exposés à un arc électrique,» chez *Colloque SFIP*. *Défis de la Plasturgie: de la formulation aux propriété*, At Mines ParisTech, Sophia Antipolis, 2012.
- [2] B. Cheminat, «Influence de l'ablation des parois sur les carctéristiques d'un arc électrique laminé,» *Rev. Phys. Appl.*, vol. 24, pp. 277-284, 1989 doi: 10.1051/rphysap:01989002403027700.
- [3] M. Abbaoui, Z. Koalaga et A. Lefort, «Composition et coefficients de transport des plasmas de matériaux plastiques,» *Canadian Journal of Physics*, vol. 70, n° 12, pp. 1291-1308, 1992 <hal-00019740> doi: 10.1139/p92-210.
- [4] P. André, Y. Barinov, G. Faure et S. Shkol'nik, «Modelling radiation spectrum of a discharge with two liquid non-metallic (tap-water) electrodes in air at atmospheric pressure,» *Journal of Physics D: Applied Physics*, vol. 44, n° 37, p. 375203, 2011. doi: 10.1088/0022-3727/44/37/375203
- [5] «Bulletin Agrométéorologique décadaire,» Faso, Direction de la météorologie Burkina, Ouagadougou, 2009.
- [6] P. André, W. Bussière, A. Coulbois, J. Gelet et D. Rochette, «Modelling of electrical conductivity of a silver plasma at low temperature,» *Plasma Science and Technology*, vol. 18, n° 8, pp. 812-820, 2016. doi: 10.1088/1009-0630/18/8/04
- [7] W. Haynes, D. R. Lide et T. J. Bruno, *CRC Handbook of Chemistry and Physics*, 93rd éd., C. Press, Éd., Taylor & Francis Group, 2012.
- [8] M. Capitelli, G. Colonna et A. D'Angola, Fundamental Aspects of Plasma Chemical Physics, New York: Springer, 2012. doi: 10.1007/978-1-4419-8185-1
- [9] M. Capitelli et E. Molinari, «Problems of determination of high temperature thermodynamic properties of rare gases with application to mixtures,» *Journal of Plasma Physics*, vol. 4, n° 2, pp. 335-355, 1970. doi: 10.1017/S0022377800005043
- [10] J. Aubreton, M. Elchinger et P. André, «Influence of Partition Function and Intercation Potential on Transport Properties of Thermal Plasmas,» *Plasma Chemistry Plasma Processing*, vol. 33, n° 1, pp. 367-399, 2013.doi: 10.1007/s11090-012-9427-3
- [11] NIST. [En ligne]. Available: http://physics.nist.gov/PhysRefData/ASD/levels_form.html.
- [12] K. Drellishak, D. Aeschliman et Ali Bulent Cambel, «Partition Functions and Thermodynamic Properties of Nitrogen and Oxygen Plasmas,» *The Physics of Fluids*, vol. 8, n° 9, p. 1590, 1965. doi: 10.1063/1.1761469
- [13] P. André, «Partition Functions and Concentrations in Plasmas Out of Thermal Equilibrium,» *IEEE Transctions on Plasma Science*, vol. 23, n° 3,

- p. 453, 1995.doi: <u>10.1109/27.402339</u>
- [14] P. André et A. Lefort, «The influence of thermal disequilibrium on a plasma consisting of insulator vapours,» *Journal of Physics D: Applied Physics*, vol. 31, n° 6, p. 717, 1998. doi: 10.1088/0022-3727/31/6/020
- [15] D. Staack, F. Bakhtier, A. Gutsol et A. Fridman, «Characterization of a dc atmospheric pressure normal glow discharge,» *Plasma Sources Science and Technology*, vol. 14, n° 4, pp. 700-711, 2005. doi: 10.1088/0963-0252/14/4/009.
- [16] T.-L. Zhao, Y. Xu, Y. H. Song, . X.-S. Li, J.-L. Liu, . J.-B. Liu et A.-M. Zhu, «Determination of vibrational and rotational temperatures in a gliding arc discharge by using overlapped molecular emission spectra,» *Journal of Physics D: Applied Physics*, vol. 46, n° 34, p. 345201. doi: 10.1088/0022-3727/46/34/345201.
- [17] M. W. Chase, NIST-JANAF Thermochemical Tables, Fourth edition éd., NIST, Éd., 1998.
- [18] D. Giordano et M. Capitelli, «Nonuniqueness of the two temperature Saha equation and related considerations,» *Physical Review E*, vol. 65, p. 016401, 2002. doi: 10.1103/PhysRevE.65.016401.
- [19] D. Giordano et M. Capitelli, «Two-temperature Saha Equation a misunderstood problem,» *Journal of Thermophysics and Heat Transfer*,, vol. 9, n° 4, p. 803, 1995. doi: 10.2514/3.745.
- [20] P. André, M. Abbaoui, A. Augeard, P. Desprez et T. Singo, «Study of Condensed Phases, of Vaporization Temperatures of Aluminum Oxide and Aluminum, of Sublimation Temperature of Aluminum Nitride and Composition in an Air Aluminum Plasma,» *Plasma Chemistry and Plasma Processing*, vol. 36, n° 4, p. 1161–1175, 2016. doi: 10.1007/s11090-016-9704-7.
- [21] S. Gordon et B. McBride, «Computer Program for calculation of complex chemical equilibrium compositions, Rocket Performance Incident and reflected shocks and chapman jouguet detonation,» NASA SP-273, 1976.
- [22] P. André et Z. Koalaga, «Composition of a thermal plasma formed from PTFE with copper in non-oxidant atmosphere Part I Definition of a test case with the SF6,» *High Temperature Material Processes: An International Quarterly of High-Technology Plasma Processes*, vol. 14, n° 3, pp. 279, 2010. Hal-00537755>.
- [23] P. André, «The influence of graphite on the composition and thermodynamic properties of plasma formed in ablated vapour of PMMA, PA6-6, PETP, POM and PE used in circuit breakers,» *J. Phys D: Appl. Phys*, vol. 30, pp. 475-493, 1997. doi: 10.1088/0022-3727/30/3/022.
- [24] D. Rochette, W. Bussière et P. André, «Composition, enthalpy and vaporization temperature calculation of Ag-SiO2 plasmas with air in the temperature range from 1000 to 6000K and for pressure included between 1 and 50 bars,» *Plasma Chemistry and Plasma Processing*, vol. 24, n° 3, pp. 475-492, 2004. doi: 10.1007/s11090-004-2280-2.
- [25] I. E S Microware, *TAPP*, thermochemical and physical properties., Hamilton, OH, USA: ES Microware, 1991.
- [26] A. K. Kagoné, Z. Koalaga et F. Zougmoré, «Calculation of air-water vapor mixtures thermal plasmas transport coefficients,» *IOP Conference Series: Materials Science and Engineering*, vol. 29, n° 1, p. 012004, 2012. doi: 10.1088/1757-899X/29/1/012004.