



HAL
open science

**Modélisation d'une décharge DC pulsée dans l'azote :
simulations numériques à l'aide d'un code couplant la
dynamique des particules chargées à celle du gaz neutre :
comparaisons avec l'expérience**

Emmanuel Guiberteau

► **To cite this version:**

Emmanuel Guiberteau. Modélisation d'une décharge DC pulsée dans l'azote : simulations numériques à l'aide d'un code couplant la dynamique des particules chargées à celle du gaz neutre : comparaisons avec l'expérience. Matière Condensée [cond-mat]. Université Henri Poincaré - Nancy 1, 1998. Français. NNT : 1998NAN10291 . tel-01747110

HAL Id: tel-01747110

<https://hal.univ-lorraine.fr/tel-01747110>

Submitted on 29 Mar 2018

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.



AVERTISSEMENT

Ce document est le fruit d'un long travail approuvé par le jury de soutenance et mis à disposition de l'ensemble de la communauté universitaire élargie.

Il est soumis à la propriété intellectuelle de l'auteur. Ceci implique une obligation de citation et de référencement lors de l'utilisation de ce document.

D'autre part, toute contrefaçon, plagiat, reproduction illicite encourt une poursuite pénale.

Contact : ddoc-theses-contact@univ-lorraine.fr

LIENS

Code de la Propriété Intellectuelle. articles L 122. 4

Code de la Propriété Intellectuelle. articles L 335.2- L 335.10

http://www.cfcopies.com/V2/leg/leg_droi.php

<http://www.culture.gouv.fr/culture/infos-pratiques/droits/protection.htm>



Faculté des Sciences
U.F.R. Sciences et Techniques de la Matière et des Procédés
Ecole Doctorale PROMEMA

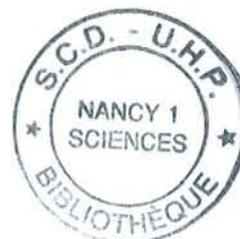
Thèse

Présentée pour l'obtention du titre de

Docteur de l'Université Henri Poincaré, Nancy I

Spécialité : MECANIQUE ET ENERGETIQUE

par Emmanuel GUIBERTEAU



**MODELISATION D'UNE DECHARGE DC PULSEE DANS L'AZOTE :
- SIMULATIONS NUMERIQUES A L'AIDE D'UN CODE COUPLANT LA
DYNAMIQUE DES PARTICULES CHARGÉES A CELLE DU GAZ NEUTRE ;
- COMPARAISONS AVEC L'EXPERIENCE**

Soutenu le 12 novembre 1998 devant la commission d'examen

Président	Pr. M. FABRY	Professeur, U.H.P., Nancy I
Rapporteurs	Dr. L. PITCHFORD	Directeur de Recherche CNRS, Toulouse
	Pr. M. DUDECK	Professeur, Paris VI
Examineurs	Pr. P. BAYLE	Professeur, U.P.S., Toulouse III
	Pr. G. BONHOMME	Professeur, U.H.P., Nancy I
	Pr. M. GUEURY	Professeur, U.H.P., Nancy I
	Pr. M. LÉBOUCHE	Professeur, U.H.P., Nancy I

Laboratoire de Physique des Milieux Ionisés et Applications
Faculté des Sciences, UHP, BP 239 - 54506 Vandoeuvre-lès-Nancy cedex

Ce travail de recherche a été réalisé au Laboratoire de Physique des Milieux Ionisés et Applications de l'Université Henri Poincaré (Nancy I)

J'exprime ma sincère gratitude à son directeur, Monsieur le Professeur M. FABRY, pour l'accueil qu'il m'a réservé dans son laboratoire et pour l'honneur qu'il m'a fait en acceptant de présider le jury de cette thèse.

Je remercie Monsieur le Professeur G. BONHOMME pour avoir accepté d'être le directeur de cette thèse. Je suis sensible à la confiance qu'il m'a largement témoignée tout au long de cette étude. J'ai grandement apprécié la possibilité de toujours pouvoir discuter de mon travail avec lui, et je tiens à lui exprimer ici ma profonde gratitude pour m'avoir fait bénéficier de ces grandes compétences.

J'adresse mes plus vifs remerciements à Madame et Messieurs

Dr. L. PITCHFORD, Directeur de recherche au C.N.R.S. à Toulouse

Pr. M. DUDECK, Professeur à l'Université PARIS VI

Pr. P. BAYLE, Professeur à l'Université P. Sabatier (Toulouse III)

Pr. M. GUEURY, Professeur à l'Université H. Poincaré (Nancy I)

Pr. M. LÉBOUCHE, Professeur à l'université H. Poincaré (Nancy I)

Qui ont aimablement accepté d'examiner ce travail et de se joindre au jury.

Que Monsieur R. HUGON, Maître de conférence à l'Université H. Poincaré de Nancy I, trouve tout particulièrement dans ces quelques lignes le témoignage de ma reconnaissance, pour les encouragements qu'il n'a cessé de me prodiguer tout au long de cette étude. Par sa compétence, son expérience et l'intérêt constant dont il a fait preuve à l'égard de mes travaux, il a su me conseiller de façon efficace.

Je suis également très reconnaissant envers Messieurs G. LECLERT, G. HENRION et S. HEURAUX, membres du L.P.M.I.A. de Nancy, pour leur aide attentive et amicale.

A Melle E. BELIN ainsi qu'à Messieurs M. RICHARD et J.L. BRIANCON, j'adresse ma sincère reconnaissance pour leurs aides précieuses tout au long de cette thèse.

Que tous les membres du laboratoire pour leur présence et leur accueil soient remerciés.

Enfin, j'adresse mes plus affectueux remerciements à l'ensemble de mes proches qui m'ont toujours soutenu, et plus particulièrement à mon épouse à laquelle je dédie ce travail.

SOMMAIRE

INTRODUCTION	1
CHAPITRE A: PRESENTATION GENERALE	4
I - INTRODUCTION	4
II - PROPRIETES DES DECHARGES	6
III - STRUCTURE DE LA DECHARGE	9
IV - DISPOSITIF EXPERIMENTAL	13
4.1 Le réacteur de traitement et d'étude	13
4.2 Les diagnostics	15
4.3 Observations expérimentales	21
V - CONCLUSION	26
<i>Bibliographie du chapitre A</i>	28
CHAPITRE B: MODELISATION DES DECHARGES	29
I - INTRODUCTION	29
II - MODELES ELECTRIQUES	30
2.1 Modèles microscopiques	32

2.1.1 - Résolution directe de l'équation de Boltzmann	32
2.1.2 - Modèles particulières	33
2.2 Modèles fluides	33
2.2.1 - Modèle d'ordre zéro	34
2.2.2 - Modèle d'ordre 1	35
2.2.3 - Modèle d'ordre 2	36
2.2.4 - Modèle à deux populations d'électrons	37
2.3 Modèle hybride fluide – Monte Carlo	38
2.4 Conclusion	38
III - MODELES CHIMIQUE ET THERMIQUE	39
3.1 Modèle chimique	39
3.2 Modèle thermique ou hydrodynamique	39
IV - CONCLUSION	40
<i>Bibliographie du chapitre B</i>	42
CHAPITRE C: MODELE A UNE POPULATION D'ELECTRONS	43
I - INTRODUCTION	43
II - MODELE PHYSIQUE	44
2.1 Equations de conservation de la densité	44
2.2 Equations de conservation de la quantité de mouvement	46
2.3 Equation de conservation de l'énergie	48
2.4 Calcul du champ électrique	50
2.5 Conditions aux limites	50
2.6 Conditions initiales	51
2.7 Méthode numérique de résolution	51
III - RESULTATS ET COMPARAISON AVEC L'EXPERIENCE	51

IV - CONCLUSION	68
<i>Bibliographie du chapitre C</i>	70
CHAPITRE D: MODELE A DEUX POPULATIONS D'ELECTRONS	71
I - INTRODUCTION	71
II - MODELE PHYSIQUE	73
2.1 Equations de conservation de la densité	74
2.2 Equations de conservation de la quantité de mouvement	75
2.3 Equations de conservation de l'énergie	75
2.4 Calcul du champ électrique	76
2.5 Conditions aux limites	77
2.6 Méthode numérique de résolution	77
III - RESULTATS ET COMPARAISON AVEC L'EXPERIENCE	78
3.1 Evolution temporelle du courant de décharge $I(t)$	79
3.2 Evolution spatiale des grandeurs caractéristiques du plasma	81
3.3 Présence d'une inversion de champ électrique	86
3.4 Evolution spatiale du premier système négatif	87
3.5 Evolution spatiale du second système positif	94
IV - ETUDE DE LA LONGUEUR DE LA LUEUR NEGATIVE	95
4.1 Longueur théorique de la lueur négative	95
4.2 Longueur expérimentale de la lueur négative	96
4.3 Longueur de la lueur négative calculée à l'aide du code numérique	96
V - CONCLUSION	99
<i>Bibliographie du chapitre D</i>	100

CHAPITRE E:	ETUDE DE LA DYNAMIQUE DU GAZ PORTEUR	101
I -	INTRODUCTION	101
II -	DEFINITION DU DOMAINE D'ETUDE	102
III -	MODELISATION	103
	3.1 Equation de conservation de la densité	103
	3.2 Equation de conservation de la quantité de mouvement	104
	3.3 Equation de conservation de l'énergie	105
IV -	MISE EN ŒUVRE ET METHODE NUMERIQUE	107
V -	CONDITIONS INITIALES	109
VI -	CONDITIONS AUX LIMITES	110
VII -	VALIDATION DU CODE DE RESOLUTION	112
	7.1 Etude de l'onde de pression	113
	7.2 Etude de l'injection d'énergie	122
	7.3 Conclusion	124
VIII -	ETUDE DU COUPLAGE DES MODELES	
	THERMIQUE ET ELECTRIQUE	124
	8.1 Introduction	124
	8.2 Phase de décharge	126
	8.2.1 Présence d'une onde de pression	126
	8.2.2 Présentation des courbes de courant	127
	8.2.3 Etude des grandeurs électriques	128
	8.3 Phase de post décharge	135
IX -	CONCLUSION	137

Bibliographie du chapitre E 138

CONCLUSION 139

ANNEXE A 141

ANNEXE B 145

ANNEXE C 147

Introduction

Les technologies plasmas connaissent depuis les années 1970/80 un considérable essor dans le domaine des traitements de surface. De nombreuses études réalisées à partir de réacteurs de nitruration ionique ont montré l'intérêt et l'efficacité de tels procédés. Plusieurs laboratoires ont alors développé de nouveaux axes de recherches dans le but de modifier, d'améliorer et surtout d'optimiser ces techniques en vue de leur application industrielle.

Aujourd'hui encore, beaucoup de détails concernant les interactions physico-chimiques dans le plasma ou avec les surfaces ne sont pas bien compris et l'utilisation des procédés plasma s'appuie encore sur une large base de connaissances empiriques. Il est donc nécessaire, dans le but d'optimiser les procédés plasma et de concevoir des réacteurs, d'avoir une meilleure connaissance des mécanismes physiques et chimiques se déroulant dans le plasma de décharge, et de mieux comprendre leur synergie. Mais la complexité des phénomènes nous a montré que les études expérimentales ne pourront, à elles seules, suffire à connaître totalement les processus de base. C'est pourquoi, le recours à une étroite collaboration entre l'expérience et la modélisation s'avère être indispensable à toute recherche dans ce domaine.

Ce travail s'inscrit dans le cadre des recherches menées sur le réacteur installé au laboratoire de physique des milieux ionisés et applications de l'université H. Poincaré de Nancy. Les travaux menés il y a quelques années sur ce réacteur par J. Bougdira et B. Petit ont montré que l'utilisation d'une décharge diode pulsée améliore le traitement de nitruration par rapport au procédé en décharge continue. Un programme de recherches expérimentales développé par G. Henrion et R. Hugon visant à analyser le plasma afin d'obtenir des diagnostics précis et fiables a été engagé depuis plusieurs années. Il est étroitement couplé à une étude numérique sur l'établissement des décharges dans des plasmas froids hors-équilibre. C'est cette étude qui fait l'objet de ce mémoire.

Avant de rentrer plus en détail dans la présentation du travail de modélisation, nous présentons dans le premier chapitre quelques rappels sur les décharges diodes et nous décrivons le système expérimental en place au laboratoire ainsi que les résultats expérimentaux obtenus.

Le but du second chapitre est une comparaison des différents modèles numériques utilisés pour simuler une décharge diode et leurs domaines d'utilisation respectifs y seront notamment précisés.

Le chapitre suivant expose le point de départ de notre étude ainsi que les modifications que nous y avons apportés. Il s'agit d'un modèle fluide monodimensionnel permettant de traiter l'évolution temporelle des plasmas de décharge hors équilibre. Puis nous présentons les premiers résultats que nous avons obtenus à l'aide de ce modèle. Ils fournissent l'évolution spatio-temporelle de la décharge lors de la phase d'amorçage, plus précisément pour des temps allant de 0 à 10 μ s. Une première comparaison avec les résultats expérimentaux exposés dans le premier chapitre terminera ce chapitre.

Compte tenu des problèmes mis en lumière lors de la confrontation entre les résultats expérimentaux et numérique du chapitre précédent, il s'est avéré nécessaire d'améliorer la modélisation des processus d'ionisation au coeur de la décharge. Le quatrième chapitre décrit donc les améliorations apportées au modèle précédent afin de mieux prendre en compte les différents mécanismes d'ionisation. Nous avons donc mis au point un code à deux populations d'électrons:

- des électrons lents présents sous la forme d'une fonction de distribution maxwellienne.
- des électrons très énergétiques présents sous la forme d'un faisceau monoénergétique.

Nous terminons ce chapitre en comparant les résultats expérimentaux et ceux obtenus à l'aide de ce nouveau modèle sur les premiers temps de la décharge.

Dans la plupart des modélisations des décharges basse pression, on considère le gaz porteur homogène en densité et température. Or dans ce type de décharge, l'un des effets importants et longtemps négligé, parce que difficilement observable ou considéré comme peu important de par ces conséquences, est la perturbation du milieu gazeux porteur résultant du transfert

d'énergie thermique des particules chargées vers les particules neutres. Le cinquième chapitre présente le modèle que nous avons développé. Il permet l'étude de la dynamique du gaz porteur couplé au modèle électrique à deux populations d'électrons ce qui fournit une description auto-cohérente de la décharge. Nous montrerons que l'étude des inhomogénéités de température et de densité de gaz montre l'importance de la prise en compte du gaz porteur afin d'obtenir une structure de décharge similaire à l'expérience.

L'ensemble de ces résultats met en évidence les améliorations apportées à la compréhension des plasmas pour la nitruration en régime continu ou pulsé. De plus, ce travail montre la nécessité de poursuivre ces recherches et de les compléter afin d'obtenir une modélisation numérique prenant en compte:

- les interactions plasma-surface.
- l'évolution des différentes espèces actives présentes dans le plasma.

Par ailleurs, le code que nous avons développé est également bien adapté à la modélisation des décharges de type radio-fréquence.

Ces considérations sont développées dans la rubrique "Conclusion et perspectives".

Bibliographie

- [1] J. BOUGDIRA, Thèse d'Université de Nancy I, (1990)
- [2] B. PETAT, Thèse d'Université de Nancy I, (1990)
- [3] R. HUGON, G. HENRION, M.FABRY, Surf. Coatings Technol., 59, 82, (1993)
- [4] R. HUGON, Thèse de l'Université H. Poincaré, Nancy I, (1994)

Chapitre A

PRESENTATION GENERALE

I - INTRODUCTION

La nitruration est un traitement thermo-chimique permettant l'amélioration des propriétés mécaniques des substrats traités (résistance aux frottements, à la corrosion, amélioration de la dureté ...).

Il existe plusieurs procédés de traitement de nitruration:

- la nitruration par bains de sels qui consiste à plonger les pièces à traiter dans un bain de cyanure et d'isocyanure de potassium ou de sodium.
- la nitruration en phase gazeuse obtenue par dissociation catalytique de l'ammoniac.
- la nitruration par voie plasma.

Le troisième procédé, apparu dans les années 70, est maintenant largement utilisé dans les milieux industriels. En effet, les deux premiers types de traitement sont régis par les lois de la thermodynamique des systèmes en équilibre alors que l'avantage premier d'un plasma réside dans son déséquilibre thermodynamique, la température électronique y étant généralement très supérieure à la température des particules neutres ou à celles des ions. La réactivité, c'est à dire la création des espèces actives, est alors plus importante que dans les traitements classiques.

Une étude comparative ^[1] entre les deux premiers procédés et la voie plasma montre que celui-ci présente beaucoup d'avantages:

- une plus grande propreté.

- la possibilité de contrôler le procédé suivant les applications envisagées.
- une faible consommation de gaz.
- une faible production de résidus polluants.

Par contre, le coût encore important représente le principal désavantage de ce type de traitement.

De nombreuses recherches ont été réalisées sur des plasmas d'azote pour nitrurer des échantillons de fer ou de matériaux divers. La nitruration par voie plasma en régime continu présente quelques inconvénients:

- La possibilité de transition locale du régime de décharge anormale vers le régime d'arc, synonyme de destruction de l'échantillon et du traitement réalisé.
- L'échantillon étant placé au potentiel cathodique, il reçoit un flux d'ions accélérés dans la chute cathodique qui pulvérise le substrat (sputtering). Il y a donc compétition entre la phase de nitruration et la pulvérisation.
- La température de l'échantillon est couplée à la puissance plasma: bien que la plasma participe au chauffage de l'échantillon, une température précise de traitement impose, à pression donnée, les conditions électriques (courant-tension), d'où une limitation sur les conditions.

Différentes études ^{[2], [3]} ont permis de mettre en évidence les espèces réactives pour le traitement de nitruration. L'azote atomique N et l'azote moléculaire dans son état électronique fondamental vibrationnellement excité $N_2(X, v)$ sont généralement reconnues responsables de ce type de traitement. L'observation et la mise en évidence de la durée de vie suffisamment longue de ces espèces actives ont permis le développement de nouveaux générateurs fonctionnant en régime de post-décharge spatiale ou temporelle.

Post-décharge spatiale:

La création des espèces actives se fait à l'aide d'une décharge créée entre deux électrodes en régime continu ou par excitation micro-ondes. L'échantillon est placé hors de la décharge, dans le flux du gaz sortant (post-décharge spatiale). Les espèces chargées sont confinées par le champ électrique de la décharge alors que les espèces neutres viennent frapper l'échantillon et participer au traitement.

Les résultats obtenus avec ce type de réacteur sont très intéressants. Toutefois, on peut signaler deux handicaps majeurs pour cette méthode: la transposition de ce type de réacteur à un niveau industriel ne semble pas aisée, surtout pour des traitements de pièces de dimensions assez conséquentes ou de géométries complexes. D'autre part, le chauffage de la pièce à nitrurer étant totalement découplé du plasma, il est nécessaire d'utiliser un chauffage annexe (coût plus important).

Post-décharge temporelle:

Ce réacteur est tout à fait similaire à un réacteur de traitement par plasma continu, ce qui présente l'avantage d'une transposition aisée en milieu industriel. La différence essentielle provient de la polarisation appliquée entre les deux électrodes: dans ce cas, on applique une tension en forme de créneau. Il y a donc alternativement une phase d'allumage (décharge) et une phase d'extinction (post-décharge temporelle). L'idée de base de ce type de traitement est de créer les espèces actives lors de la phase de décharge afin de pouvoir les utiliser pendant la phase de post-décharge, tout en limitant les effets de pulvérisation de l'échantillon.

Il est à noter que l'on peut utiliser une partie de la puissance fournie pendant la décharge pour chauffer l'échantillon.

Il nous paraît nécessaire pour bien comprendre ces différents type de générateurs de rappeler quelques notions fondamentales sur les différents type de décharge et la structure spatiale d'une décharge de type diode.

II - PROPRIETES DES DECHARGES ^{[4], [5], [6], [7]}

Les décharges dans un gaz à basse pression que l'on peut observer lorsqu'on applique une différence de potentiel entre deux électrodes peuvent être répertoriées à partir d'une caractéristique courant-tension (figure A-1). Elle montre les différents régimes stables de la décharge. En agissant sur la différence de potentiel appliquée, on peut faire varier le courant sur des valeurs allant de 10^{-18} à quelques dizaines d'Ampères.

* Les zones I et II correspondent aux décharges non autonomes. La décharge ne peut être entretenue que sous l'effet d'une source extérieure (effet photoélectrique ou thermoélectrique

sur la cathode, rayonnement ...). Si cette source est coupée, la décharge s'éteint. Sous l'effet d'une tension inférieure au seuil V_s , un faible courant électrique (inférieur à 10^{-10} A) circule dans le circuit.

* La zone III constitue la décharge de Townsend. Les espèces chargées peuvent alors se multiplier suivant deux processus :

- Les électrons accélérés par le champ électrique vont créer par collision avec les particules neutres des paires électrons-ions (*émission primaire*). Ce phénomène de multiplication électronique est caractérisé par le premier coefficient de Townsend α .
- Les particules bombardant la cathode ont suffisamment d'énergie pour provoquer l'extraction d'un nouvel électron (*émission secondaire*), caractérisée par le second coefficient de Townsend γ . Le coefficient γ représente la probabilité pour qu'un ion frappant la cathode émette un électron. Il dépend de plusieurs facteurs comme la nature des ions, de la surface de la cathode, de son état de surface, de l'énergie des ions ...

La décharge devient autonome lorsque la relation suivante est vérifiée :

$$\gamma(\exp(\alpha d) - 1) = 1 \quad [\alpha-1]$$

où d est la distance inter-électrodes.

Un électron émis par la cathode donne, grâce à l'émission primaire, $(\exp(\alpha d) - 1)$ ions qui à leur tour produisent par bombardement sur la cathode $\gamma(\exp(\alpha d) - 1)$ électrons, c'est à dire si la relation précédente est vérifiée, un nouvel électron. La décharge est alors autoentretenu et la source extérieure d'ionisation du gaz qui était nécessaire dans les zones I et II n'est plus indispensable à l'entretien de la décharge.

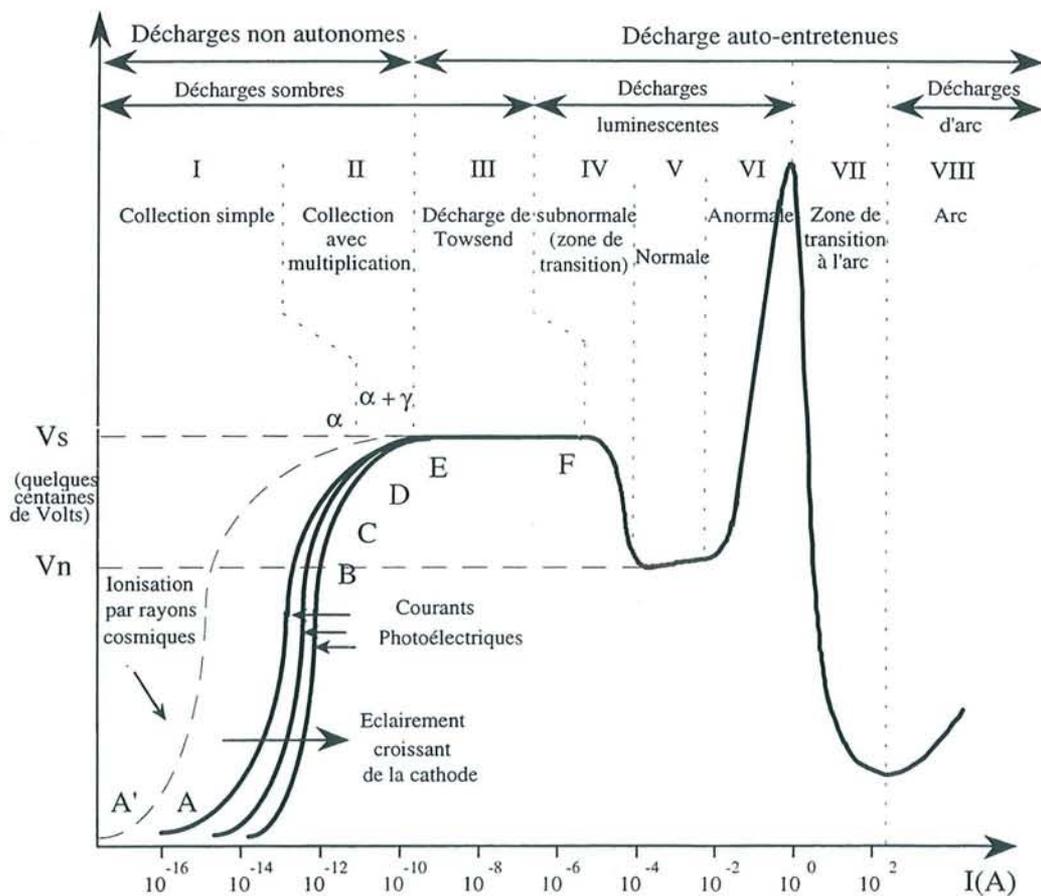
* La zone IV correspond aux décharges subnormales. L'ionisation du gaz devient efficace grâce à l'importance croissante de la charge d'espace. Le champ électrique se confine dans la région cathodique et la tension nécessaire à l'auto-entretien de la décharge diminue.

* La zone V constitue les décharges luminescentes normales. La tension de décharge est quasi constante lorsque le courant augmente. Le phénomène provient de l'augmentation de la surface de la cathode participant à la décharge.

* Lorsque toute la surface de la cathode participe à la décharge, la tension croît en fonction du courant (zone VI), ce qui caractérise les décharges lumineuses anormales.

* Les zones VII et VIII correspondent aux régimes de décharges d'arc. Ces régimes sont caractérisés par l'apparition d'effets thermiques importants: le gaz et les électrodes sont fortement chauffés. Les électrons sont principalement émis par effet thermoionique. La tension nécessaire à l'entretien de la décharge devient très basse (quelques dizaines de Volts).

Pour la nitruration, seules les décharges lumineuses sont intéressantes. Les décharges à plus faible courant manquent de réactivité tandis que les régimes d'arc entraînent généralement une détérioration de l'échantillon. Dans la décharge lumineuse, seule la zone anormale nous permet de contrôler la puissance appliquée dans le plasma.



III - STRUCTURE DE LA DECHARGE ^{[4], [5], [6], [7]}

L'aspect général d'une décharge luminescente (figure A-4) est une succession de zones sombres et lumineuses qui dépendent de la pression, de la tension appliquée et de la nature du gaz. Partant de la cathode, on rencontre dans une décharge anormale les régions suivantes:

- l'espace sombre d'Aston.
- le lueur cathodique.
- l'espace sombre cathodique.
- la lueur négative.
- l'espace sombre de Faraday.
- la colonne positive.
- l'espace sombre anodique.
- la lueur anodique.

L'espace sombre d'Aston est une zone étroite située au contact de la cathode. Elle est caractérisée par la présence d'électrons émis par la cathode ayant une énergie encore trop faible pour permettre l'excitation du gaz, traduisant l'absence de luminosité de cette zone. Ces électrons sont ensuite rapidement accélérés par le champ électrique intense régnant au voisinage de la cathode. Ils gagnent suffisamment d'énergie pour exciter les molécules et les atomes du gaz. Une première zone lumineuse se forme, il s'agit de **la lueur cathodique**. Mais très rapidement l'énergie des électrons, toujours accélérés par le champ électrique, dépasse la valeur associée au maximum de la section efficace d'excitation du gaz. Ils arrivent ainsi dans **l'espace sombre cathodique** où ils acquièrent assez d'énergie pour ioniser le gaz et se multiplier. Ces trois premières zones constituent la chute cathodique et se caractérisent par la présence d'une charge d'espace positive.

La lueur négative, région la plus lumineuse, est une zone où le champ électrique est quasi nul. C'est dans cette zone que les électrons viennent perdre leur énergie, soit par ionisation ou par excitation du gaz. On y distingue ^[8] généralement trois groupes d'électrons suivant leur énergie:

- Les électrons primaires: Emis par la cathode lors du bombardement ionique, ils sont accélérés dans la chute cathodique et n'ont pratiquement pas subi de collisions

inélastiques. Ils possèdent une énergie de l'ordre de eV_c où V_c est la chute de potentiel cathodique.

- Les électrons secondaires: Ils résultent directement de l'ionisation du gaz par les électrons primaires. Leur énergie varie de quelques eV à quelques dizaines d' eV .

- Les électrons ultimes: Ils proviennent de la thermalisation des électrons secondaires par collisions inélastiques. Leur énergie est de l'ordre de quelques dixièmes d' eV à quelques eV . Ce sont les plus nombreux.

Types d'électrons	primaires	secondaires	ultimes
énergie (eV)	250	7.3	0.6
densité électronique (cm^{-3})	5×10^6	5×10^7	4×10^9

Tableau T-1 : Ordres de grandeur de l'énergie et de la densité des électrons dans la lueur négative (Hélium, 1 Torr) ^[9]

Les électrons primaires sont responsables de l'existence et de la longueur de la lueur négative. Sa longueur est à peu près égale à la distance nécessaire pour ralentir les électrons d'énergie eV_c (libre parcours moyen de thermalisation). Elle dépend donc à la fois de cette énergie et de la densité du gaz porteur.

A la fin de la lueur négative, la présence d'un champ électrique croissant dans **l'espace sombre de Faraday** permet de réaccélérer les électrons ayant perdu leur énergie. Ils peuvent ainsi de nouveau exciter et ioniser le gaz: **la colonne positive** apparaît (zone lumineuse de champ électrique constant de valeur beaucoup plus faible que dans la chute cathodique). Dans cette zone, la charge d'espace est nulle. Il y a équilibre entre les différents processus.

En se rapprochant de l'anode, une charge d'espace négative se forme. Elle caractérise **la chute anodique** qui comporte généralement une zone sombre (espace sombre anodique) et une zone faiblement lumineuse (lueur anodique).

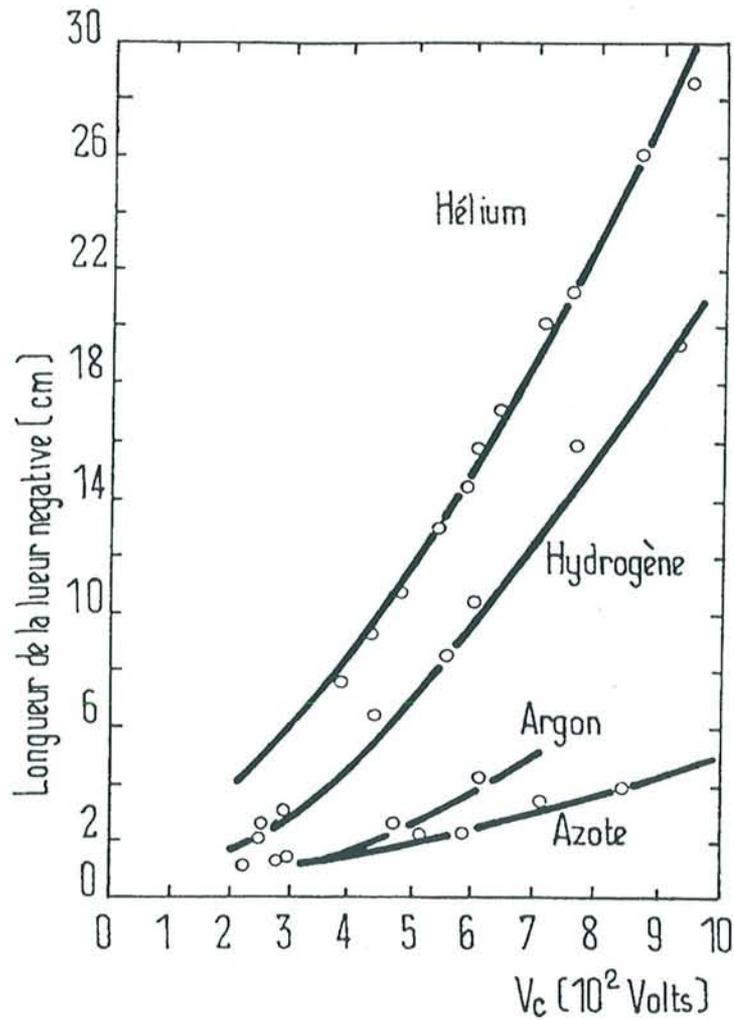


Figure A-2 : Longueur de la lueur négative en fonction du potentiel cathodique ^[10]

L'observation de toutes ces zones ne peut se faire que si l'espace inter-électrodes est assez grand. Si on diminue petit à petit cette distance, on observe la disparition progressive de la chute anodique, de la colonne positive et de l'espace sombre de Faraday. La chute cathodique et la lueur négative sont toujours présentes car elles sont nécessaires à l'entretien de la décharge. Les mêmes phénomènes peuvent être observés si à distance inter-électrodes constante, on diminue la pression.

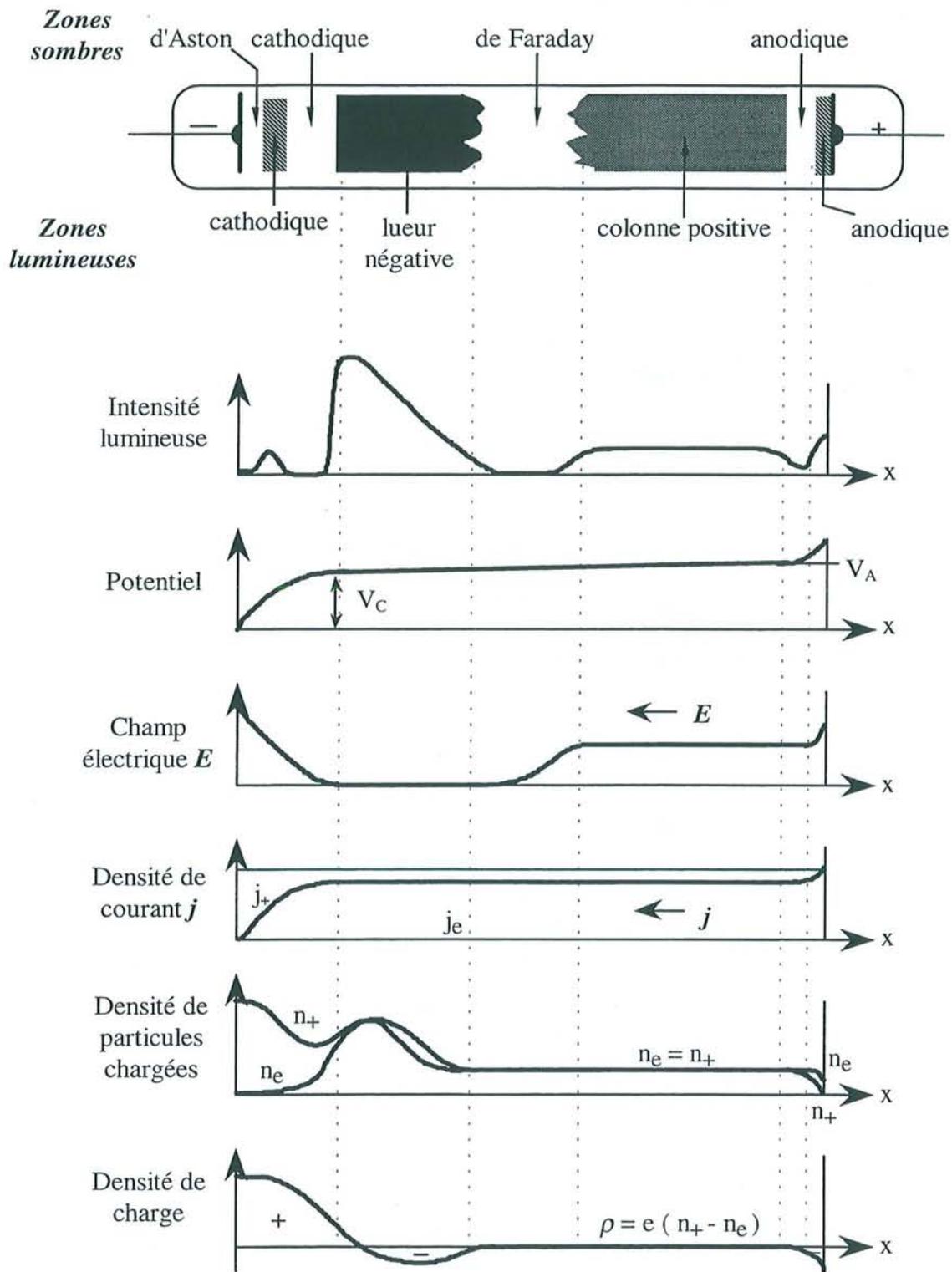


Figure A-3 : Architecture d'une décharge de type diode ^[6]

IV - DISPOSITIF EXPERIMENTAL

Dans ce paragraphe, nous allons décrire l'ensemble du dispositif expérimental mis en place au laboratoire et destiné à produire et caractériser le plasma. Ce dispositif permet une recherche des paramètres optimaux de la nitruration en décharge DC pulsée. La première partie décrit le type de réacteur utilisé tandis que la deuxième indique les différents diagnostics ainsi que leurs résultats.

4.1 - Réacteur de traitement

* L'enceinte à décharge

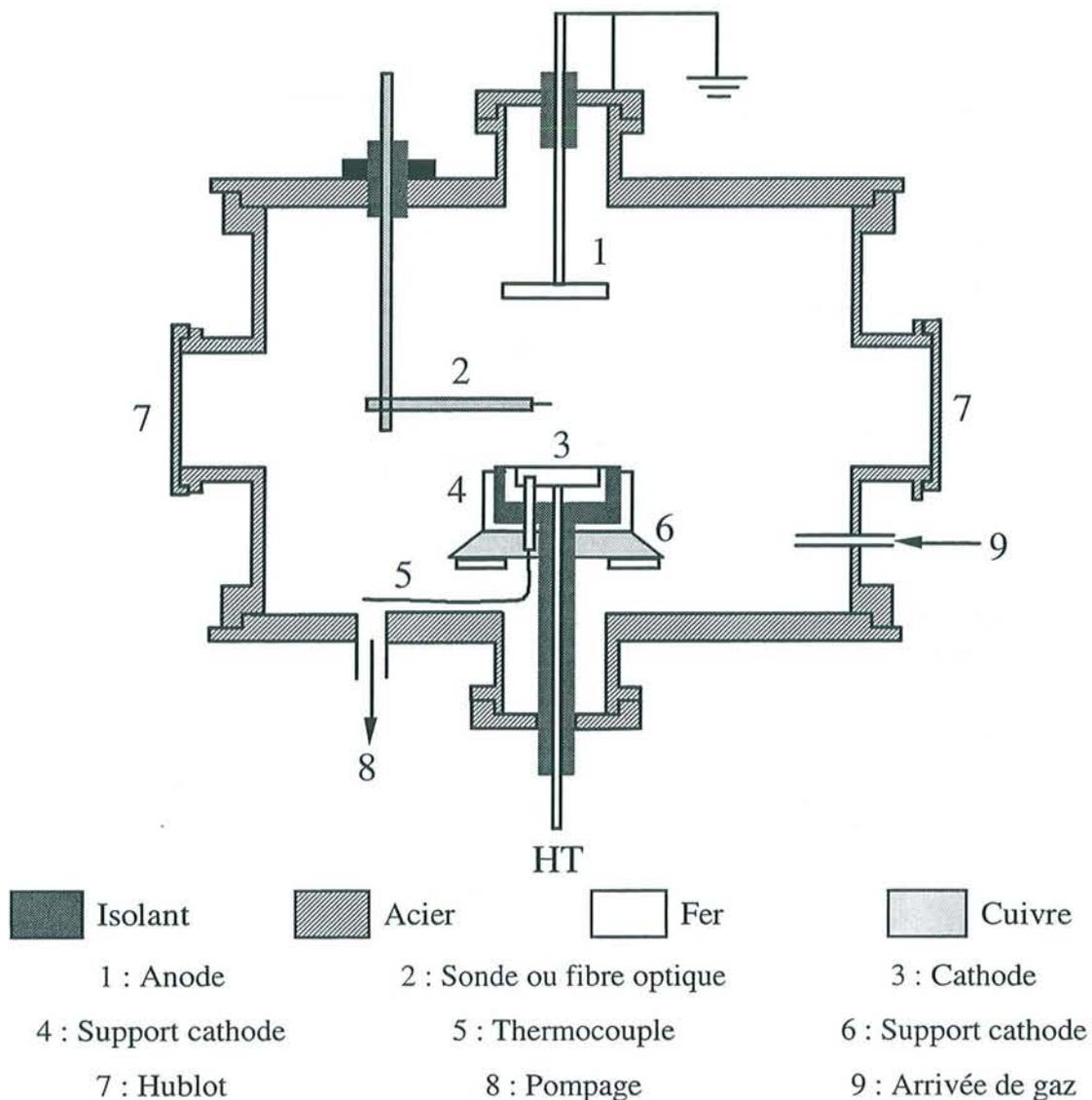


Figure A-4 : Enceinte à décharge

La figure A-4 représente le réacteur utilisé au laboratoire. L'enceinte à décharge est en acier inoxydable, de forme cylindrique de 30 cm de diamètre et 35 cm de hauteur fermée par deux platines. La cathode (3), reliée à la haute tension, est constituée d'un disque en fer pur de 50 mm de diamètre et de 10 mm d'épaisseur. Elle est posée sur une pièce isolante et entourée d'alumine (4). L'ensemble est placé à l'intérieur d'un support inoxydable laissé au potentiel flottant et fixé sur un bouclier conique en cuivre (6). Un trou percé sous l'échantillon permet de loger un thermocouple (5) à un millimètre de la surface de la cathode. Celui-ci est coiffé d'un tube en quartz fermé à son extrémité de manière à l'isoler de la haute tension.

Deux hublots en quartz (7) permettent l'analyse du plasma par spectroscopie d'émission. Un passage coulissant est disposé sur la platine supérieure, il permet l'exploration de toute la zone inter-électrodes de la décharge par une sonde électrostatique (2) ou par une fibre optique pour la spectroscopie d'émission résolue dans l'espace. Le déplacement de ce passage est assuré par deux moteurs pas à pas. Un deuxième passage coulissant supporte l'anode (1). Il permet de relier l'anode à la masse et de modifier la distance entre les deux électrodes.

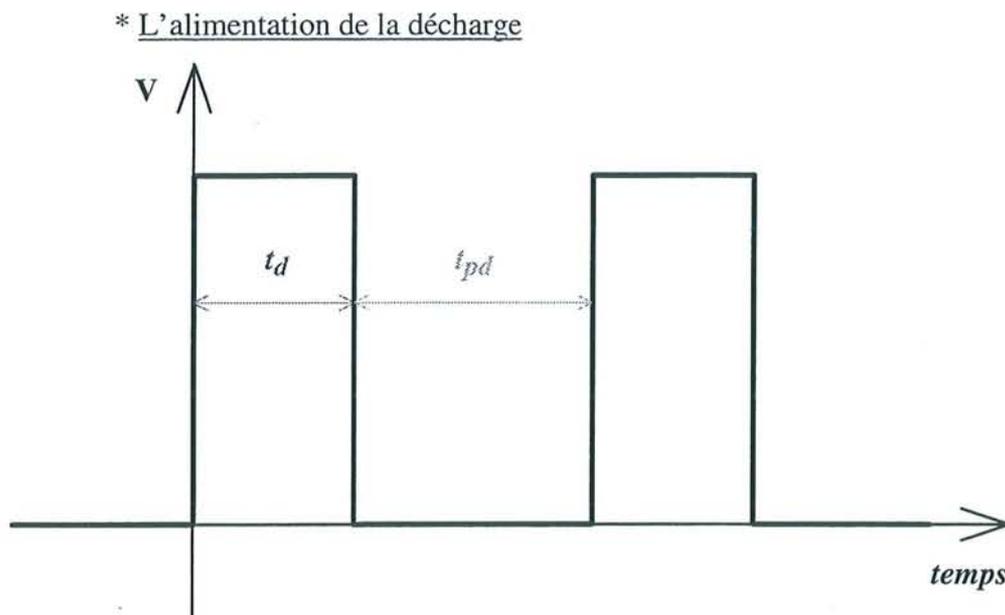


Figure A-5 : Tension appliquée aux électrodes

La cathode étant reliée à la haute tension, le générateur peut délivrer deux types de régimes :

- soit un régime continu pouvant atteindre 2500 Volts au maximum pour un courant de l'ordre de 300 mA.
- soit un régime pulsé (tension de type créneau périodique : figure A-5). Dans ce cas, le générateur fonctionne 'en tout ou rien'. Il délivre pendant un temps t_d , appelé temps de

décharge, une tension continue puis pendant un temps t_{pd} , appelé temps de post-décharge, une tension nulle. Il existe donc alternativement dans le plasma des phases d'allumage où les espèces actives sont créées et des phases d'extinction où les elles sont utilisées (si elles possèdent des durées de vie suffisamment longues). Deux nouveaux paramètres viennent donc s'ajouter aux paramètres habituels d'une décharge diode. Le temps de décharge doit être suffisamment long pour créer assez d'espèces actives, le temps de post-décharge doit être assez long pour réduire la pulvérisation mais est limité afin d'éviter une consommation totale des espèces rendant ainsi le réamorçage plus difficile. Leurs influences respectives sur le traitement de surface ont été étudiés par J. Bougdira^[11] et plus récemment par R. Hugon^[12].

4.2 - Diagnostics

Nous allons maintenant présenter les différents diagnostics qu'il est possible d'utiliser au laboratoire afin de caractériser le plasma pulsé d'azote de ce réacteur. Nous insisterons plus particulièrement sur le diagnostic des grandeurs particulièrement utiles pour la comparaison avec les résultats des différents modèles développés lors de ce travail.

Les moyens de diagnostics utilisés au laboratoire sont les suivants :

- mesures courant-tension de la décharge.
- mesures par sonde électrostatique.
- mesures par spectroscopie d'émission.

Mesures courant-tension de la décharge

La tension est mesurée à l'aide d'une sonde d'oscilloscope ayant une résolution de l'ordre de la micro-seconde. La mesure de courant est réalisée grâce à une sonde à effet Hall. L'emploi de ce système permet une mesure non perturbatrice. Il possède une résolution de 1 μ s.

La figure A-6 montre l'oscillogramme obtenu pour les conditions d'expérience suivantes:

- P = 1,4 Torr, U = 615 Volts
- Fréquence 18.62 Hz
- Temps de décharge 0,5 ms, temps de post-décharge 53,1 ms.

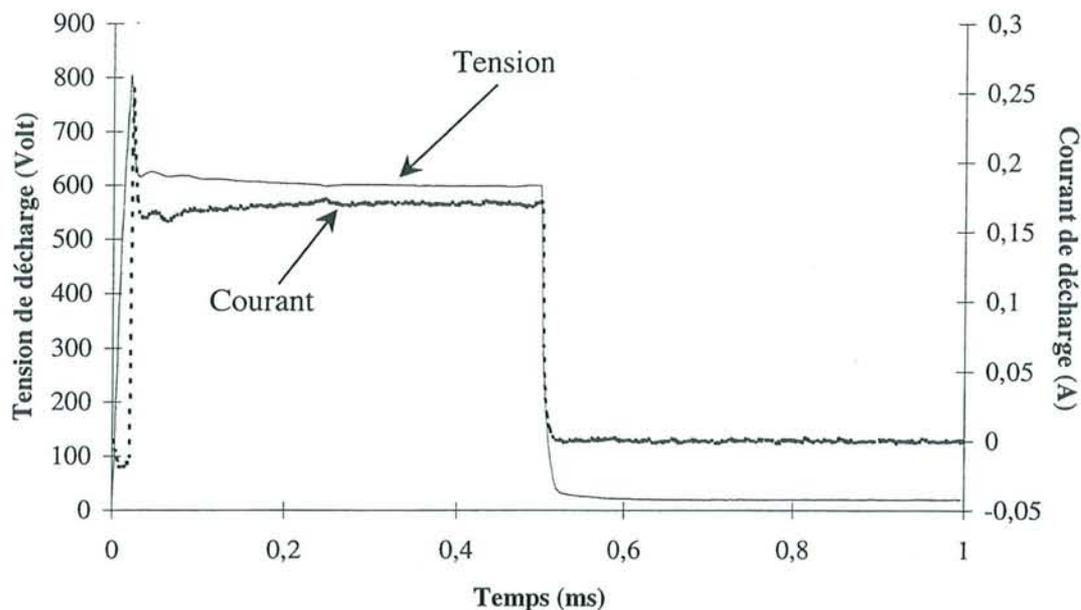


Figure A-6: Oscillogramme

Mesures par sonde électrostatique

Le diagnostic par sonde électrostatique permet d'avoir accès aux variations spatio-temporelles des grandeurs caractéristiques du plasma telle que la densité électronique $n_e(x,t)$ ou la température électronique $T_e(x,t)$.

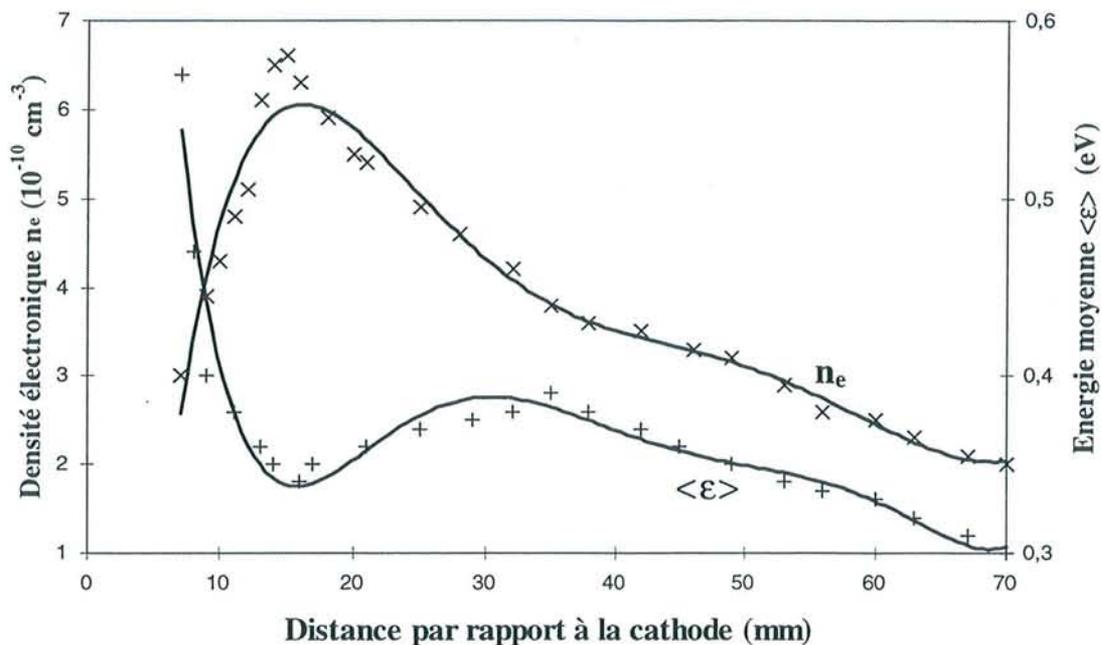


Figure A-7: Evolution de la densité électronique n_e et de l'énergie moyenne des électrons $\langle \mathcal{E} \rangle$ le long de l'axe de la décharge.

La figure A-7 représente l'évolution suivant l'axe de la décharge de la densité électronique n_e et de l'énergie moyenne des électrons $\langle \epsilon \rangle$ pour les conditions suivantes:

- Décharge dans l'azote
- $P = 1$ Torr, $U = 1200$ Volts, $I = 50$ mA
- La cathode constitue l'origine spatiale ($z = 0$) et la distance interélectrodes est de 8 cm.

Mesures par spectroscopie d'émission

Le dispositif expérimental (fibre optique avec déplacement asservi, monochromateur ...) est présenté figure A-8. Il permet d'obtenir l'évolution spatio-temporelle des intensités des raies émises par le plasma avec une résolution spatiale de l'ordre de 3 mm et un pas de temps de 1 μ s.

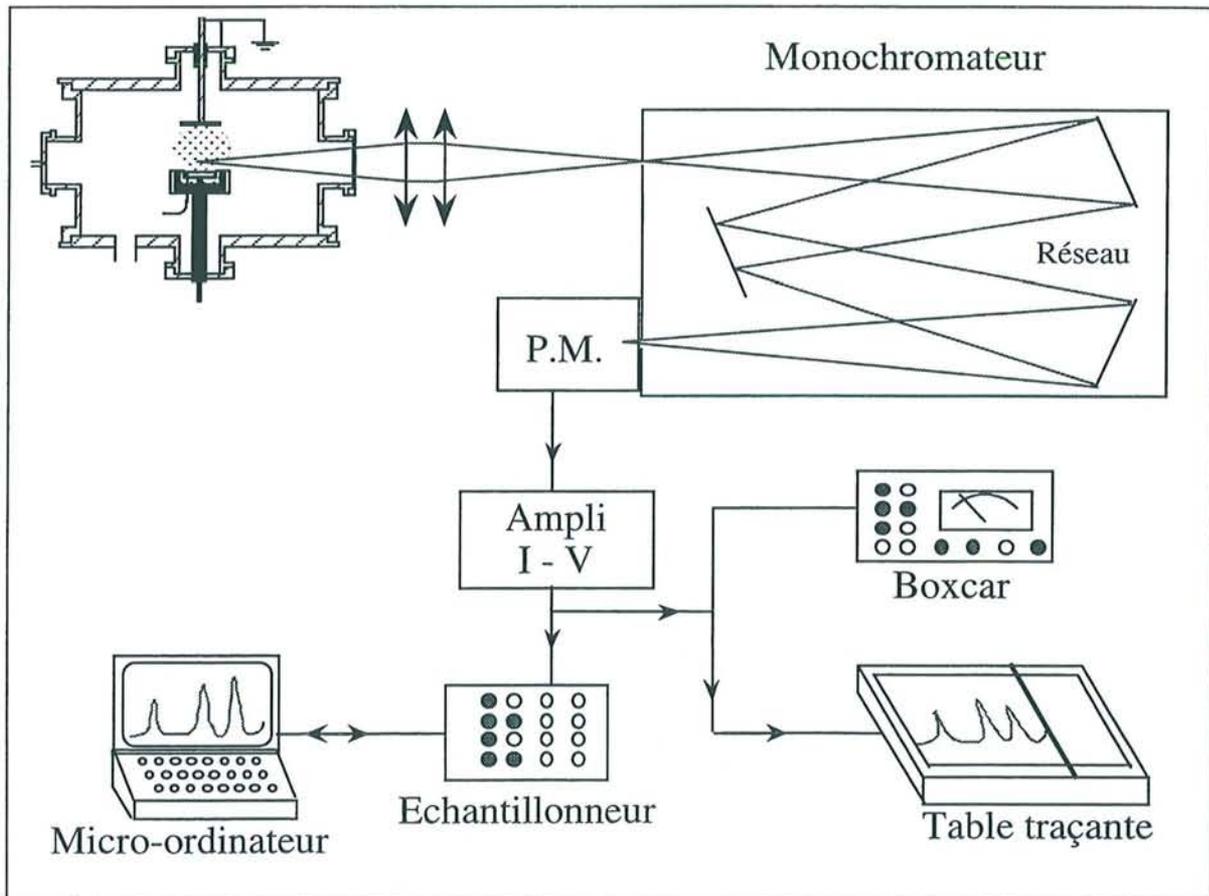
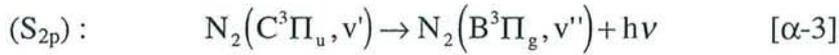
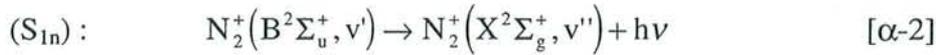


Figure A-8 : Dispositif expérimental pour la spectroscopie d'émission

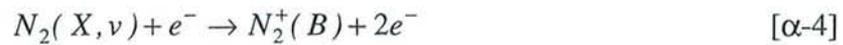
Les raies choisies sont celles émises par le premier système négatif (S_{1n} , raie à 391.4 nm) et le deuxième système positif (S_{2p} , raie à 337.1 nm). Ces deux systèmes correspondent aux transitions suivantes :



Ils proviennent de la désexcitation radiative de l'état B de l'ion N_2^+ pour le premier système négatif et de l'état C de la molécule d'azote pour le deuxième système positif. H. Coitout^[13] a réalisé une synthèse des différents processus conduisant à l'excitation de ces deux états. Nous rappelons ici les peuplements possibles de ces deux états, à savoir C de N_2 et B de N_2^+ .

*** Créations de l'état $N_2^+(B^2\Sigma_u^+)$**

- par excitation électronique de la molécule d'azote



La section efficace de cette réaction est donnée figure A-9. Elle possède un seuil de 18,5 eV.

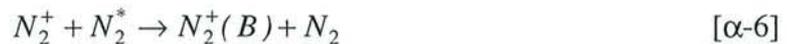
- par excitation de l'ion N_2^+ dans son état fondamental

* par impact électronique



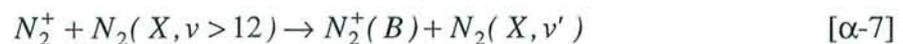
La section efficace de cette réaction est donnée figure A-10. Elle possède un seuil de 3,17 eV.

* par collisions avec les métastables



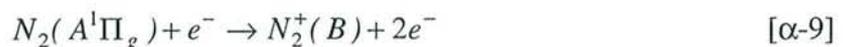
vu le faible taux de métastables, Anketell^[14] considère cette réaction comme négligeable.

* par collisions avec l'azote moléculaire vibrationnellement excité



- A partir d'un état métastable intermédiaire

Par exemple, on peut donner comme réaction de ce type:

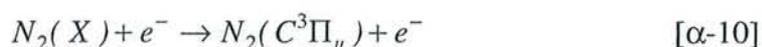


Les seuils de ces deux réactions sont respectivement 12,5 eV et 10,5 eV.

Dans les conditions expérimentales appliquées, l'espace interélectrodes est quasiment rempli par la lueur négative. Donc, en phase de décharge, le peuplement de l'état B de l'ion N_2^+ est dû principalement à l'impact électronique suivant les réactions $[\alpha-4]$ et $[\alpha-5]$. Par contre, en post-décharge, les électrons énergétiques sont rapidement thermalisés et le seuil élevé (18,5 eV) de la réaction $[\alpha-4]$ laisse à croire que ce peuplement devient négligeable. R. Hugon a montré que les deux peuplements possibles en post-décharge sont l'excitation par impact électronique à partir de l'ion N_2^+ $[\alpha-5]$ dans son état fondamental et les collisions entre $N_2^+(X)$ et $N_2^*(X, v > 12)$ $[\alpha-7]$.

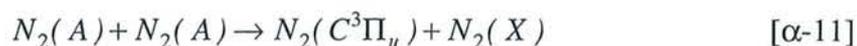
*** Créations de $N_2(C^3\Pi_u)$**

- par excitation électronique de la molécule d'azote



La section efficace de cette réaction est donnée figure A-11. Elle possède un seuil de 11 eV.

- par réaction de pooling



Cette équation montre un fort couplage entre les cinétiques des états A et C.

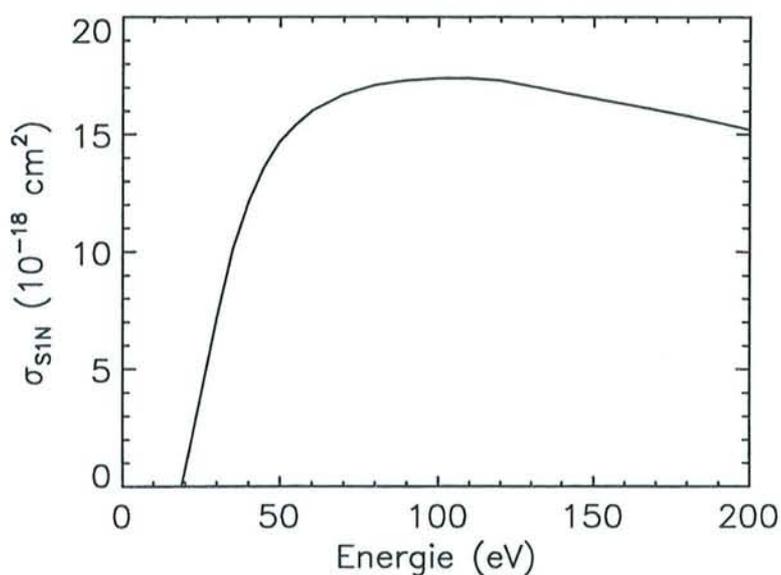
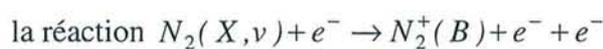


Figure A-9: Section efficace d'excitation ^[15] de $N_2^+(B)$ suivant



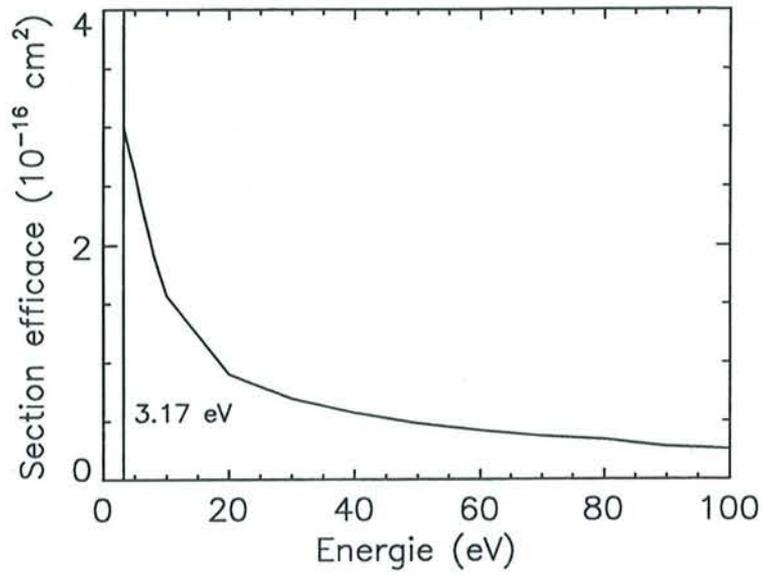


Figure A-10: Section efficace d'excitation^[16] de l'ion N_2^+ suivant
la réaction $N_2^+ + e^- \rightarrow N_2^+(B) + e^-$

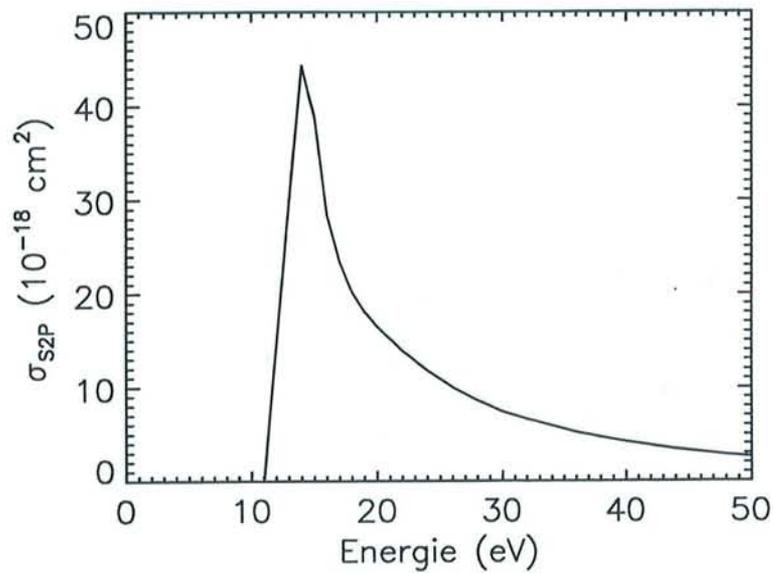


Figure A-11: Section efficace d'excitation^[17] de $N_2(X)$ suivant
la réaction $N_2(X) + e^- \rightarrow N_2(C^3\Pi_u) + e^-$

Le choix de ces deux raies provient de leur intensité importante dans les différentes zones de la décharge. En effet, le premier système négatif émet fortement dans la lueur négative tout en étant quasiment inexistant dans la colonne positive. Ceci est dû principalement à la forme de sa section efficace d'excitation (figure A-9) qui possède un seuil proche de 19 eV avec un maximum pour des énergies allant de 50 eV à 250 eV. La grande majorité des électrons présents dans la colonne positive ont des énergies inférieures au seuil de peuplement du premier système négatif. Ce système est donc très faiblement peuplé dans cette zone. Par contre, le second système positif possède une section efficace (figure A-11) très piquée avec un seuil de peuplement de 11 eV, ce qui permet d'observer ce système en lueur négative (avec une intensité cependant plus faible que pour le premier système négatif) mais également en colonne positive.

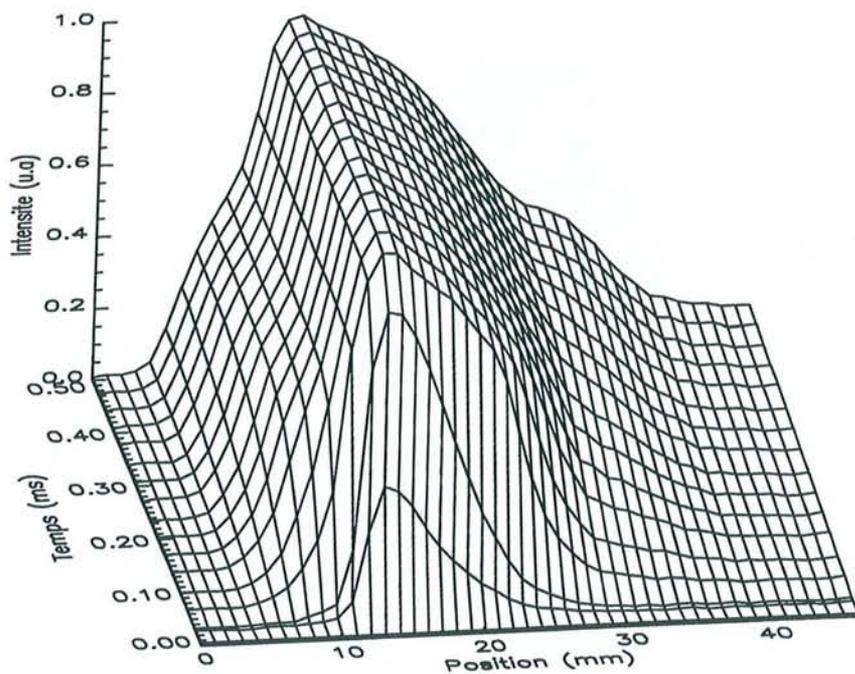
L'observation de ces deux raies permet de bien visualiser les différentes zones présentes dans la décharge, et plus précisément de montrer l'existence ou non d'une colonne positive.

4.3 - Observations expérimentales

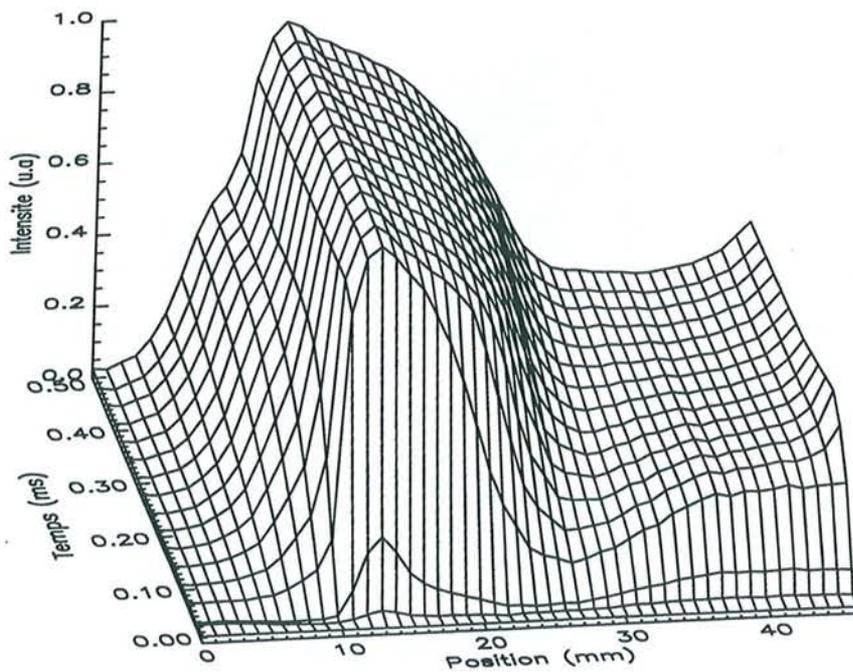
Nous présentons ici les résultats de l'étude de l'évolution de ces raies d'émission en fonction du temps de décharge pour une fréquence fixe de 18.62 Hz (soit $t_d + t_{pd} = 53.6$ ms). La pression du gaz d'azote est fixée à 1.4 Torr (186 Pa). Les temps de décharge prennent les valeurs suivantes : 0.5 ms, 1 ms, 5 ms et 10 ms. Le temps de post-décharge diminue donc lorsque le temps de décharge augmente mais il reste toutefois suffisamment long dans le cas des temps de décharge de 0.5 ms et 1 ms pour obtenir les mêmes conditions de réamorçage à chaque début de cycle.

Fréquence (Hz)	Temps de décharge t_d (ms)	Temps de post-décharge t_{pd} (ms)	Tension (Volts)	Courant (mA)	Température de la cathode (°C)	Courbes
18.62	0,5	53.1	615	165	50	A-12
18.66	1	52.6	608	175	60	A-13
18.66	5	48.6	660	145	110	A-14
18.62	10	43.6	710	112	150	A-15

Tableau T-2

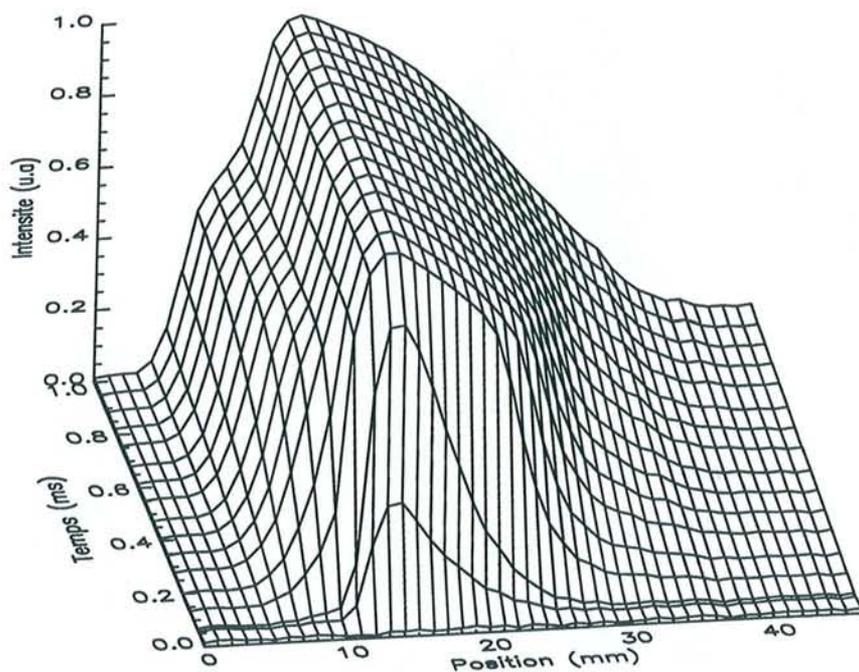


Premier système négatif

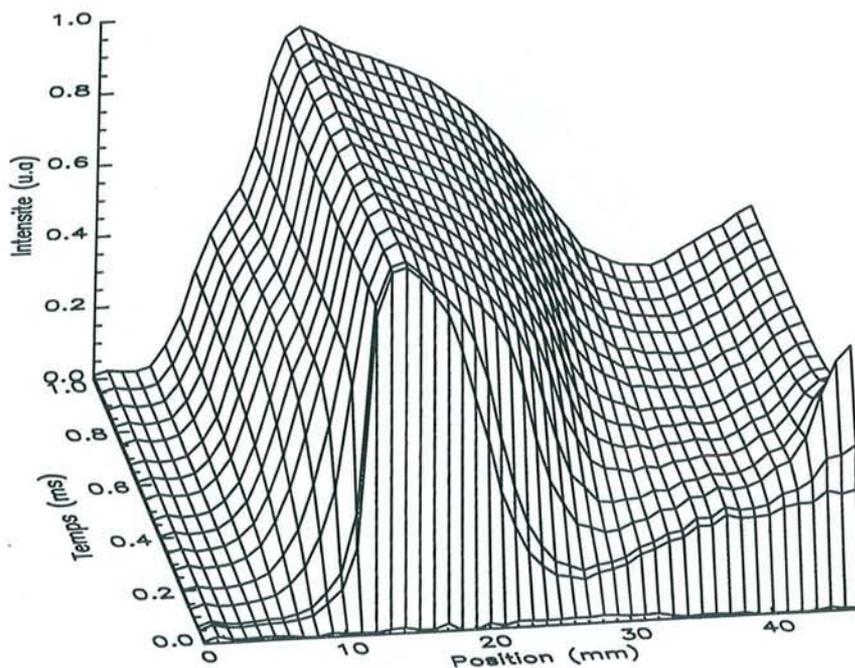


Deuxième système positif

Figure A-12 : Evolution spatio-temporelle des intensités du premier système négatif et du deuxième système positif ($U = 600V$, $P = 1.4$ Torr, $T_d = 0.5$ ms, $T_{pd} = 53.1$ ms)

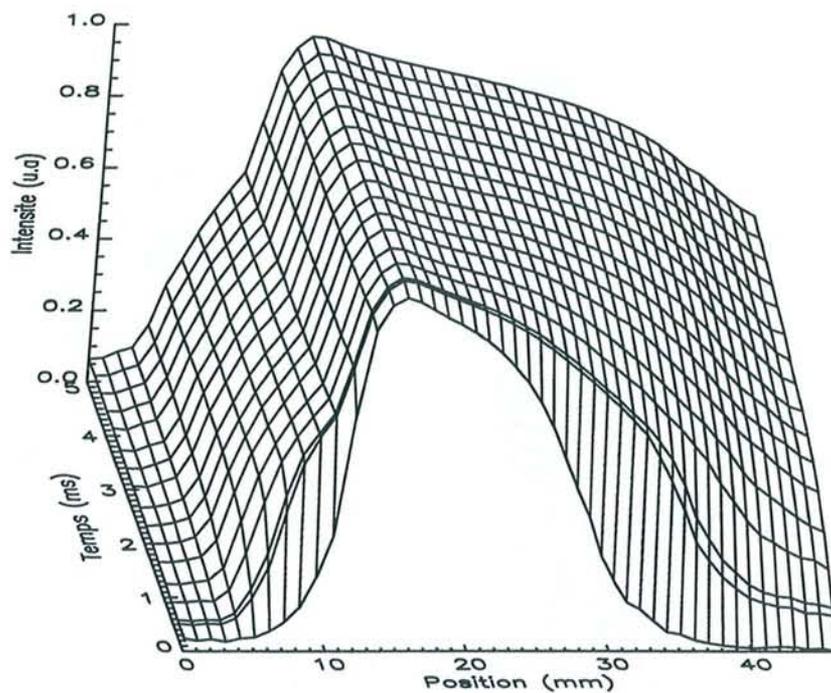


Premier système négatif

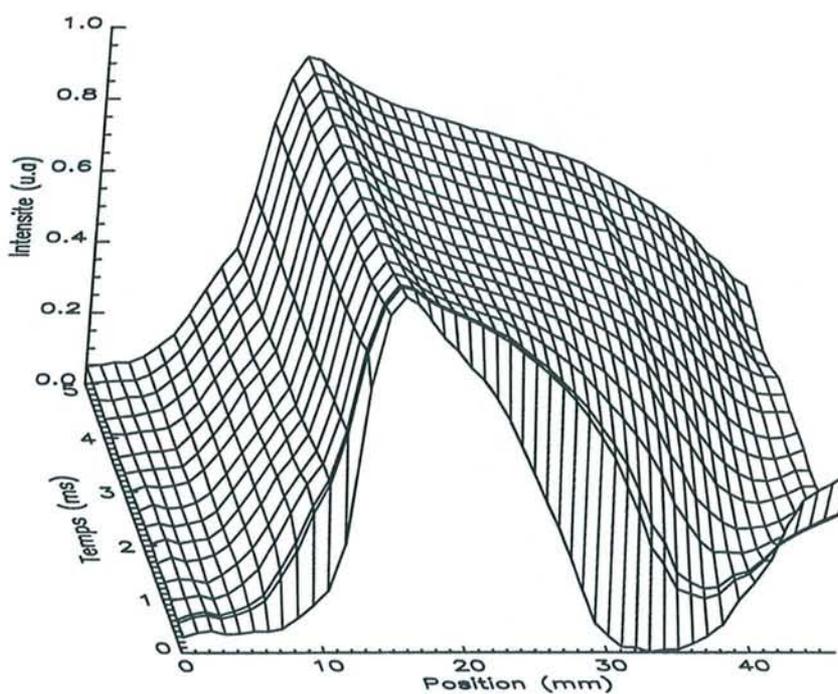


Deuxième système positif

Figure A-13 : Evolution spatio-temporelle des intensités du premier système négatif et du deuxième système positif ($U = 600\text{V}$, $P = 1.4\text{ Torr}$, $T_d = 1\text{ ms}$, $T_{pd} = 52.6\text{ ms}$)

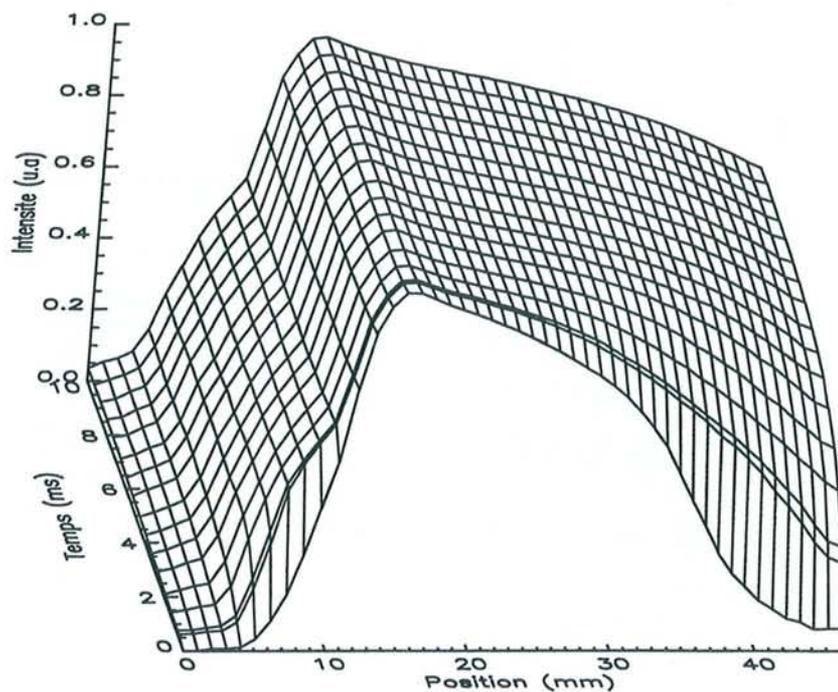


Premier système négatif

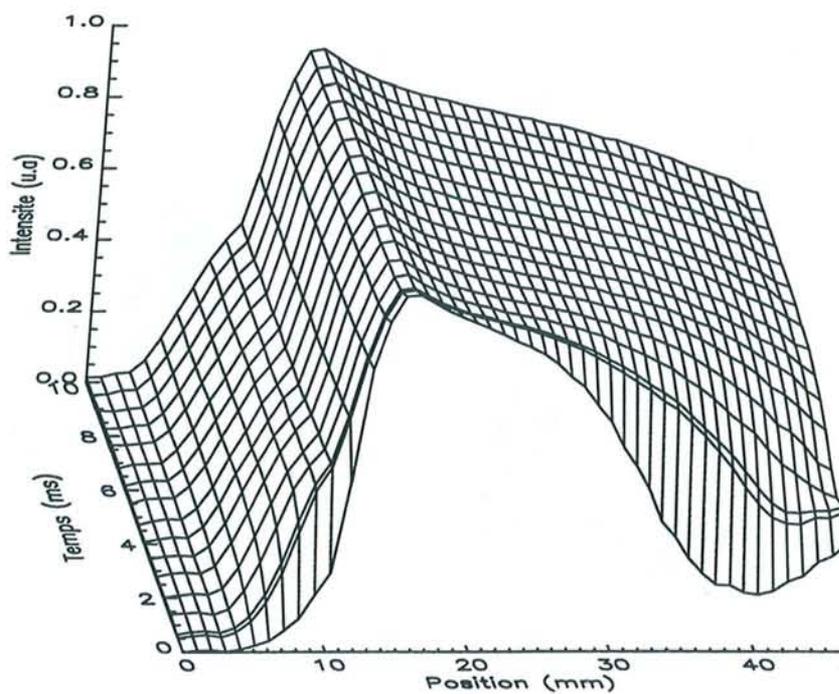


Deuxième système positif

Figure A-14 : Evolution spatio-temporelle des intensités du premier système négatif et du deuxième système positif ($U = 600V$, $P = 1.4$ Torr, $T_d = 5$ ms, $T_{pd} = 48.6$ ms)



Premier système négatif



Deuxième système positif

Figure A-15 : Evolution spatio-temporelle des intensités du premier système négatif et du deuxième système positif ($U = 600V$, $P = 1.4$ Torr, $T_d = 10$ ms, $T_{pd} = 43.6$ ms)

La première remarque que l'on peut faire sur ces résultats expérimentaux est que l'impédance de la décharge $Z = \frac{U}{I}$ augmente avec la durée de la décharge.

Grâce à l'émission du second système positif, on peut visualiser les différentes zones lumineuses de la décharge. En particulier sur la figure A-11, on peut distinguer une zone fortement lumineuse près de la cathode : la lueur négative puis une zone sombre et enfin une zone de plus faible luminosité mais de valeur constante. De plus, proche de l'anode, il existe une remontée de l'intensité.

Quand à elle, la courbe du premier système négatif montre clairement l'expansion de la lueur négative au cours de l'impulsion.

Dans le cas d'une durée d'impulsion égale à 1 ms, les observations faites précédemment sont encore valables.

Pour une durée de décharge de 5 ms (figure A-13), la colonne positive a disparu sous l'effet de l'expansion de la lueur négative vers l'anode.

Enfin pour une durée de décharge de 10 ms, l'espace interélectrodes est essentiellement constitué par la lueur négative.

En conclusion, ces courbes montrent que la structure de la décharge est fortement influencée par la durée de la phase d'allumage. Ceci est dû aux conditions de réamorçage différentes.

V - CONCLUSION

Nous avons tout d'abord présenté les caractéristiques et la structure spatiale d'une décharge utilisée pour la nitruration par voie plasma.

Le dispositif expérimental ainsi que les diagnostics utilisés sont ensuite décrits. Il s'agit essentiellement de la spectroscopie d'émission et de mesure par sondes de Langmuir. Les sondes ont permis l'accès aux paramètres électriques de la décharge (Tension, courant, ...) alors que la spectroscopie nous a permis de mesurer les intensités lumineuses de certaines raies d'émission.

On s'aperçoit rapidement que chercher les conditions optimales pour ce type de réacteur à plasma pulsé n'est pas chose facile. Il est donc nécessaire de coupler à l'expérience une

modélisation numérique de ce réacteur. Le chapitre suivant présente donc tous les modèles numériques existants pouvant simuler une décharge diode.

Les résultats obtenus à l'aide des diagnostics par l'équipe du LPMIA vont être confrontés, dans les chapitres à venir, aux simulations numériques.

Bibliographie du chapitre A

- [1] 'Les plasmas dans l'industrie', Chap. 5, Electra, (1991)
- [2] B. MASSABIEAUX, Thèse de l'université Paris XI, Orsay, (1982)
- [3] J.L. MARCHAND, Thèse de l'I.N.P.L., Nancy, (1988)
- [4] VON ENGEL, "Electric plasmas: their nature and uses", Ed. Taylor & Francis Ltd, Londres (1983)
- [5] E. BADAREU, I. POPESCU, "Gaz ionisés", Ed. Dunod, (1965)
- [6] Y.P. RAIZER, "Gas discharge physics", Ed. Springer-Verlag, Berlin Heidelberg (1991)
- [7] B. CHAPMANN, "Glow discharge processes", Ed. Wiley-Interscience, (1980)
- [8] D.H. PRINGLE, W.E. FARVIS, Phys. Rev., **96**, 536, (1954)
- [9] A.-M. POINTU, "Physique des décharges", dans 'Réactivité dans les plasmas. Applications aux lasers et au traitement de surface', Ecole d'été d'Aussois, Les éditions de physique, (1983)
- [10] C.S. WILETT, 'Introduction to gas lasers : population, inversion, mechanisms', Pergamon Press, (1974)
- [11] J. BOUGDIRA, Thèse de l'Université de Nancy I, (1990)
- [12] R. HUGON, Thèse de l'Université Henri Poincaré, Nancy I, (1994)
- [13] H. COITOUT, Thèse de l'université Paris XI, Orsay, (1993)
- [14] J. ANKETELL, Can. J. Phys., **50**, 4335, (1969)
- [15] W.L. BORST, E.C. ZIPF, Phys. Rev. A, **1**, 834, (1970)
- [16] D.H. CRANDALL, W.E. KAUPPILA, R.A. PHANEUF, P.O. TAYLOR, G.H. DUNN, Phys. Rev. A, **9**, 2545, (1974)
- [17] D.C. CARTWRIGHT, S. TRAJMAR, A. CHUTJIAN, W. WILLIAMS, Phys. Rev. A, **16**, 1041, (1977)



Chapitre B

MODELISATION DES DECHARGES

I - INTRODUCTION

Les travaux de modélisation ^[1] sur les décharges diodes utilisées en traitement de surface sont nombreux, toutefois aucun d'entre eux n'a pu prendre en compte l'ensemble des phénomènes mis en jeu. En effet, une description complète de ce type de réacteur doit reposer sur l'association de plusieurs modèles :

- un **modèle électrique** permettant une bonne description du couplage entre les phénomènes de transport des particules chargées (électrons, ions) et le champ électrique.
- un **modèle thermique ou hydrodynamique** décrivant l'évolution du gaz porteur à l'intérieur de l'enceinte.
- un **modèle chimique** décrivant l'interaction et l'évolution des concentrations des différentes espèces actives présentes dans le plasma.
- un **modèle des réactions de surface** permettant d'évaluer les vitesses de dépôt et de gravure sur l'échantillon.

Le modèle complet, représenté figure B-1, est encore trop complexe à mettre au point. C'est pourquoi, en fonction de l'objectif de la modélisation, on peut retirer un ou plusieurs modèles. Le modèle électrique peut être considéré comme le noyau principal de la modélisation, et beaucoup d'auteurs se sont limités à ce seul modèle pour décrire leur décharge. Les autres modèles peuvent être vus comme des modules supplémentaires afin d'améliorer la modélisation.

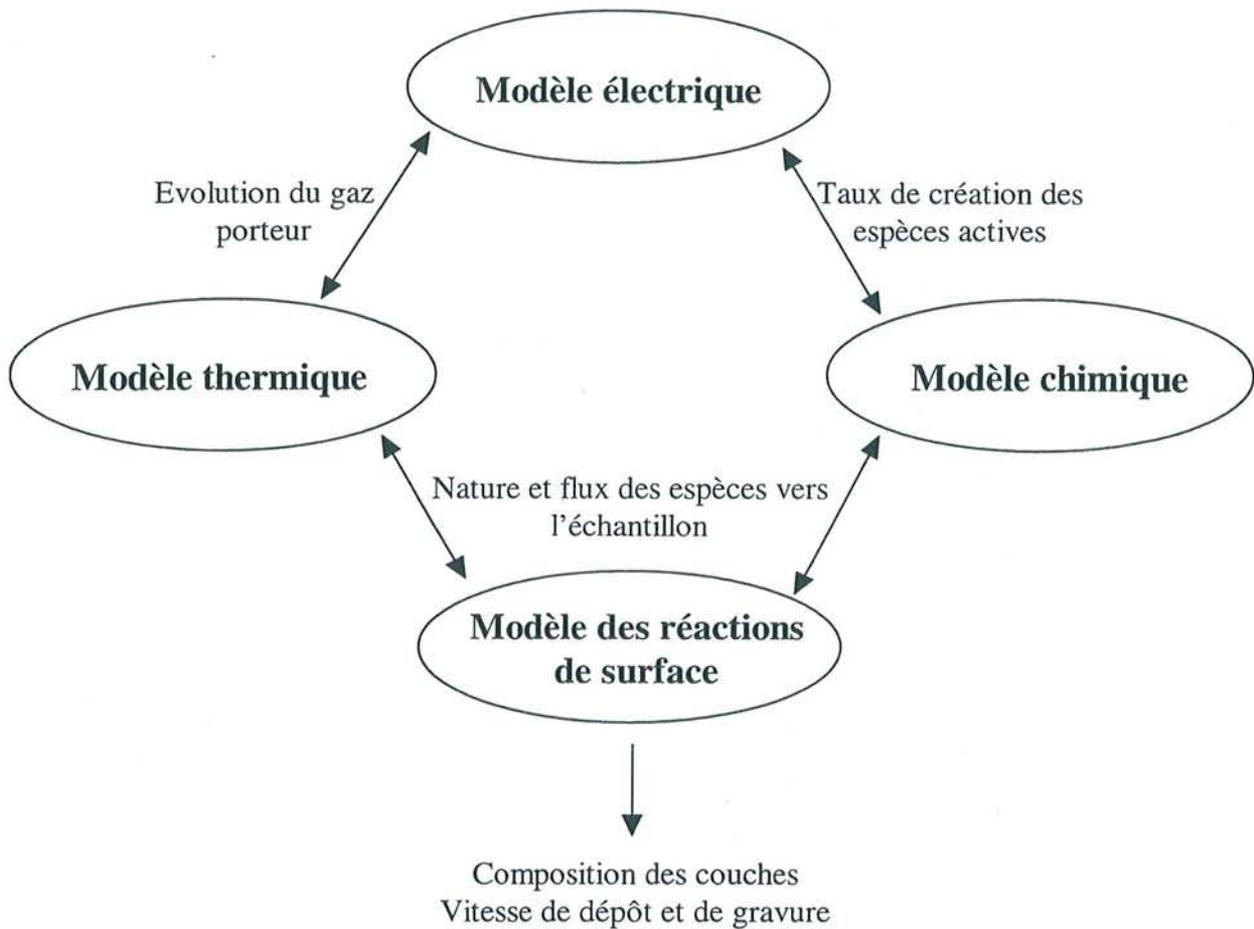


Figure B-1 : Schéma d'un modèle complet de réacteur^[2]

Nous allons étudier tout d'abord les différents modèles électriques existants puis nous décrirons plus brièvement les modèles thermique et chimique. Les modèles des réactions de surface ne faisant pas partie de notre étude, ils ne seront pas développés ici.

II - MODELES ELECTRIQUES

La modélisation électrique d'un plasma hors équilibre thermodynamique dans une décharge luminescente anormale basse pression (de l'ordre du Torr) nécessite de décrire le couplage entre les phénomènes de transport des particules chargées et le champ électrique. En fait, les différents coefficients de transport d'un modèle macroscopique dépendent du champ électrique qui lui dépend directement de la charge d'espace. Il faut donc pour une bonne description avoir autocohérence entre ces différents phénomènes.

Au niveau microscopique, le transport des particules chargées est parfaitement bien décrit par l'équation de Boltzmann :

$$\frac{\partial f}{\partial t} + w \cdot \vec{\nabla}_r f + \vec{a}(r,t) \cdot \vec{\nabla}_w f = \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{collision} \quad [\beta-1]$$

L'équation [\beta-1] est une équation de continuité dans l'espace des phases position-vitesse (r, w) pour les fonctions de distribution $f(r, w, t)$ des différentes particules présentes dans le

plasma sous l'effet :

- des forces extérieures $\vec{a}(r,t) = \frac{e \vec{E}}{m}$
- des collisions électron-neutre ou ion-neutre.

Dans une décharge luminescente, la charge d'espace modifie le champ \vec{E} qui agit sur les fonctions de distributions électronique et ionique. Pour déterminer à chaque instant le champ électrique, on couple aux équations de Boltzmann pour chaque espèce, l'équation de Poisson :

$$\vec{\nabla}_r \cdot \vec{E} = \frac{e}{\epsilon_0} \int (f_i - f_e) dw = \frac{e}{\epsilon_0} (n_i - n_e) \quad [\beta-2]$$

f_i et f_e sont respectivement les fonctions de distribution pour les ions et les électrons.
 n_i et n_e les densités ioniques et électroniques.

Ainsi le modèle idéal pour décrire ce type de décharge serait formé d'une équation de Boltzmann [\beta-1] pour chaque espèce de particule présente dans le plasma couplées à l'équation de Poisson [\beta-2].

Ce qui donnerait le système d'équations suivant:

$$\begin{cases} \frac{\partial f_e}{\partial t} + w_e \cdot \vec{\nabla}_r f_e + \vec{a}(r,t) \cdot \vec{\nabla}_w f_e = \left(\frac{\partial f_e}{\partial t} \right)_{collision} \\ \frac{\partial f_i}{\partial t} + w_i \cdot \vec{\nabla}_r f_i + \vec{a}(r,t) \cdot \vec{\nabla}_w f_i = \left(\frac{\partial f_i}{\partial t} \right)_{collision} \\ \vec{\nabla}_r \cdot \vec{E} = \frac{e}{\epsilon_0} \int (f_i - f_e) dw = \frac{e}{\epsilon_0} (n_i - n_e) \end{cases} \quad [\beta-3]$$

La résolution d'un tel système [\beta-3] est extrêmement difficile et n'est pas toujours nécessaire. C'est pourquoi nous sommes amenés, suivant les conditions et le niveau de précision requis, à

faire des approximations simplificatrices des phénomènes mis en jeu, permettant ainsi de passer à une description macroscopique. Ces approximations conduisent généralement à distinguer deux grandes catégories de modèles physiques : modèles microscopiques, modèles macroscopiques (ou fluides). Nous verrons par la suite que pour la modélisation électrique, le choix entre une approche microscopique et une approche macroscopique dépendra essentiellement de la gamme de pression où l'on se situe.

2.1 - Modèles microscopiques

2.1.1 - Résolution directe de l'équation de Boltzmann

Cette méthode peut être utilisée pour calculer la fonction de distribution électronique et permet en principe la résolution de l'équation de Boltzmann dans l'espace des phases complet (3 dimensions dans l'espace des positions, 3 dans l'espace des vitesses).

Si les variables de position et de vitesse peuvent être séparées, la fonction de distribution ne dépendra plus que de la vitesse (à une position et un temps donnés). Elle pourra ainsi s'écrire sous la forme d'une fonction de distribution en vitesse $F(w)$.

Une technique généralement appliquée en l'absence de champ magnétique est de développer $F(w)$ en une série de polynômes de Legendre.

$$F(w) = \sum_k F_k(w) \cdot P_k(\cos\theta) = F_0(w) + F_1(w) \cos\theta + \dots \quad [\beta-4]$$

où θ reflète l'anisotropie de la fonction de distribution.

L'équation de Boltzmann se transforme alors en une série d'équations dépendant chacune d'un $F_k(w)$. Dans la plupart des cas, on s'arrête aux deux premières qui sont fonction de $F_0(w)$ qui représente la partie isotrope de la fonction de distribution et de $F_1(w)$.

Cette méthode a été utilisée ces dernières années dans le cas de décharge DC par Rockwood S.D.^[3] et Ferreira C.M.^[4]

Pitchford L.C. et Phelps A.V.^[5] ont discuté de l'importance de tous les termes d'ordre supérieur.

2.1.2 - Modèles particuliers

Les modèles particuliers constituent la principale approche microscopique de la modélisation électrique. Dans ce type de modèle, on représente l'ensemble des ions ou des électrons par un nombre fini de super particules. On suit la trajectoire de chacune des particules dans l'espace des phases. D'après l'équation de Boltzmann, le mouvement des particules est influencé par la présence du champ électrique et par les collisions.

L'intégration des équations du mouvement couplées à l'équation de Poisson est effectuée grâce aux méthodes 'Particle in Cell' (PIC)^[6]. La détermination des termes sources dus aux collisions électron-neutre ou ion-neutre est faite à l'aide de la méthode statistique de Monte Carlo^[7].

Ces méthodes ont permis de simuler numériquement de façon très satisfaisante des décharges de type RF ou DC mais elles sont généralement assez gourmande en temps de calcul, ceci pour deux raisons :

- Dans ces types de décharge, les méthodes utilisées sont explicites, ce qui oblige à prendre un pas de temps assez petit devant la période plasma électronique afin de pouvoir réévaluer correctement le profil du champ électrique. Ce problème n'est pas important pour des plasmas de densité moyenne (10^8 à 10^9 cm^{-3}) mais devient inacceptable dans des régions type leur négative où la densité électronique peut atteindre 10^{12} cm^{-3} .
- La méthode de Monte Carlo étant une méthode statistique, sa précision n'augmente qu'en fonction de la racine carrée du nombre d'événements. Il faut donc pour obtenir une statistique correcte traiter un nombre de collisions assez élevé (par exemple il faut simuler quelques millions de collisions par cm.torr de décharge pour obtenir la fonction de distribution en énergie et position).

2.2 - Modèles fluides

Dans un modèle fluide, on ne cherche plus à caractériser les particules présentes dans le plasma par leur fonction de distribution mais par des grandeurs moyennes telles que la densité, la vitesse moyenne ou l'énergie moyenne ... Pour ce faire, on remplace l'équation de Boltzmann par ses premiers moments dans l'espace des vitesses. On obtient ainsi après

multiplications successives par 1 l'équation de continuité, par mw l'équation de transfert de la quantité de mouvement et par $\frac{1}{2}mw^2$ l'équation d'énergie.

Les différents modèles fluides sont obtenus en prenant soit un, deux ou trois moments de l'équation de Boltzmann. Mais il faut cependant faire deux remarques :

- L'équation de Boltzmann étant équivalente à une infinité d'équations de moments, il faut donc faire différentes hypothèses sur les moments d'ordre supérieur pour fermer le système.
- Les termes associés aux collisions entre les différentes espèces de particules sont évalués en supposant connue la forme de la fonction de distribution des particules (maxwellienne, de Druyvesteyn ...). Pour obtenir une bonne description de ces termes, il faudrait pouvoir faire évoluer la fonction de distribution électronique suivant la région où l'on se situe. De façon plus précise elle devrait passer d'une distribution monocinétique dans la région cathodique à une distribution thermique dans la colonne positive.

Nous allons maintenant détailler les différents modèles fluides utilisés pour le gaz d'électrons ainsi que les hypothèses généralement employées. Un modèle d'ordre est généralement suffisant pour les ions.

2.2.1 - Modèle d'ordre zéro

On l'obtient en ne considérant que le premier moment de l'équation de Boltzmann c'est à dire l'équation de continuité pour chaque espèce de particules :

$$\frac{\partial n}{\partial t} + \nabla \cdot n \vec{u} = S \quad [\beta-5]$$

où $n = \int f(r, w, t) dw$ est la densité de particules.

$n \vec{u} = \int \vec{w} \cdot f(r, w, t) dw$ est le flux macroscopique de particules.

$S = \int \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{coll.} dw$ est le terme de collision incluant tous les processus

inélastiques (ionisation, attachement, recombinaison...)

Un grand nombre d'auteurs^{[8], [9]} ont utilisé ce modèle en y joignant des hypothèses complémentaires :

- La diffusion est négligée.
- On suppose qu'il y a équilibre local entre le champ électrique et la cinétique des particules (A.C.L.). C'est à dire que le gain d'énergie des particules sous l'effet du champ électrique est compensé localement (dans l'espace et dans le temps) par les pertes dues aux collisions. Il en résulte que les propriétés de transport des particules (mobilité, coefficient de diffusion, fréquences moyennes de collision ...) ne dépendent que de l'intensité du champ électrique réduit local E/P .
- Le seul terme de création pris en compte est l'ionisation $S = S_{iz}$.

On obtient ainsi que :

$$n \vec{u} = n \vec{V}_{d,eq}(E/P) = n \mu_{eq}(E/P) \vec{E} \quad [\beta-6]$$

$$S_{iz} = n \alpha_{iz,eq}(E/P) V_{d,eq}(E/P) \text{ ou } S_{iz} = n v_{iz,eq}(E/P) \quad [\beta-7]$$

où $V_{d,eq}$, μ_{eq} , $\alpha_{iz,eq}$ et $v_{iz,eq}$ sont respectivement la vitesse de dérive, la mobilité, le coefficient d'ionisation de Townsend et la fréquence d'ionisation de la particule en régime d'équilibre.

Ce type de modèle ne peut pas décrire convenablement le gaz électronique dans des régions de la décharge comme la lueur négative ou la colonne positive, car la diffusion y joue un rôle fondamental.

2.2.2 - Modèle d'ordre 1

Pour rendre plus réaliste ce système, on peut lui adjoindre le second moment de l'équation de Boltzmann (l'équation de bilan de quantité de mouvement) obtenu en l'intégrant dans l'espace des vitesses après multiplication par $m\vec{w}$. Ce qui nous donne :

$$\frac{\partial(nm\vec{u})}{\partial t} + \nabla \cdot (nm\vec{u}\vec{u}) + \nabla \cdot \overline{\overline{\mathbf{P}}} - nq\vec{E} = \int \vec{w} \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{coll.} dw \quad [\beta-8]$$

où $\overline{\overline{\mathbf{P}}}$ est le tenseur de pression cinétique, $\overline{\overline{\mathbf{P}}} = nm \left(\vec{w} - \vec{u} \right) \otimes \left(\vec{w} - \vec{u} \right)$

Pour fermer ce système, il nous faut de nouvelles hypothèses. Les plus couramment utilisées sont :

- on néglige le terme de dérive temporelle $\frac{\partial(nm\vec{u})}{\partial t}$, ce qui implique que la variation du flux par unité de temps doit être très inférieure à la fréquence de collision. Ceci est beaucoup plus valable pour les ions que pour les électrons car leur mobilité est plus faible.
- on néglige l'énergie de dérive devant l'énergie thermique. Cette hypothèse est vraie dans la lueur négative car dans cette zone, l'énergie de dérive est quasiment nulle. Par contre dans la zone cathodique, les électrons primaires (issus du bombardement de la cathode par les ions) sont accélérés dans la gaine par le fort champ électrique et ont donc des vitesses très orientées. L'énergie de dérive de ces électrons est donc du même ordre de grandeur que l'énergie thermique. Cette hypothèse ne peut donc être vérifiée que pour des régimes collisionnels et des variations du champ électrique faibles devant le temps moyen entre deux collisions.

A partir de ces hypothèses, l'équation de transfert de la quantité de mouvement devient :

$$n\vec{u} = n\vec{V}_d - \vec{\nabla} \cdot (n\overline{\mathbf{D}}) \quad [\beta-9]$$

où la vitesse de dérive \vec{V}_d et le tenseur de diffusion $\overline{\mathbf{D}}$ peuvent être obtenus dans le cadre de l'approximation du champ électrique local (A.C.L.)

Bœuf^[10] a utilisé ce modèle en régime stationnaire dans une géométrie bidimensionnelle pour décrire une décharge continue dans l'hélium à une pression de 1 Torr.

Ce type de modèle utilisant l'hypothèse de l'équilibre local ne peut donner une représentation correcte des processus d'ionisation dans la décharge, plus particulièrement l'ionisation due aux électrons primaires qui gagnent leur énergie dans la chute cathodique (où règne un fort champ électrique) et la dépose sous forme de collisions inélastiques dans la lueur négative.

2.2.3 - Modèle d'ordre 2

Pour améliorer cette description des phénomènes d'ionisation, on peut ajouter aux équations de continuité et de transport de la quantité de mouvement une équation de bilan d'énergie, obtenue en multipliant l'équation de Boltzmann par l'énergie totale puis en l'intégrant dans l'espace des vitesses.

$$\frac{\partial n\mathcal{E}}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot (n\mathcal{E}\vec{u}) + \vec{\nabla} \cdot (\overline{\mathbf{P}} \cdot \vec{u}) - nq\vec{E} \cdot \vec{u} = -\vec{\nabla} \cdot \vec{Q} + \int \frac{1}{2}mw^2 \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{coll.} dw \quad [\beta-10]$$

où \vec{Q} est le flux de chaleur

$$\vec{Q} = \frac{m}{2} \int (\vec{w} - \vec{u}) (\vec{w} - \vec{u})^2 f dw$$

Pour fermer ce système, on utilise généralement les hypothèses suivantes^{[11], [12], [13], [14], [15]} :

- le terme de flux de chaleur est négligé $\vec{Q} = \vec{0}$.
- l'énergie thermique est grande devant l'énergie de dérive.
- le tenseur de pression cinétique est isotrope $\overline{\mathbf{P}} = nkT\overline{\mathbf{I}}$. Ceci n'est pas correct pour les électrons présents dans la chute cathodique car ils possèdent dans cette zone des vitesses très orientées.

Le troisième moment de l'équation de Boltzmann va nous permettre d'obtenir l'énergie moyenne des électrons, le terme source d'ionisation de l'équation de continuité ne dépendra plus du champ électrique local E/P mais de l'énergie moyenne des électrons: $S_{iz} = n_e v_{iz}(\mathcal{E})$. Ceci consiste donc à supposer que toutes les grandeurs moyennes ne dépendent que de l'énergie moyenne locale des électrons (Approximation de l'énergie moyenne locale A.E.L.). Cette hypothèse est raisonnable dans la colonne positive d'une décharge luminescente mais n'est plus valable dans la région cathodique. Dans cette zone, l'ionisation dépend principalement de la queue de la distribution et ne peut donc être correctement décrite à l'aide de l'énergie moyenne qui est déterminée principalement par les électrons froids.

2.2.4 - Modèle à deux populations d'électrons

Dans ce type de modèle fluide, la fonction de distribution électronique est divisée en deux parties :

- Les électrons froids du plasma forment le corps de la fonction de distribution et sont traités grâce à l'approximation du champ électrique local ou de l'énergie moyenne locale. Ils sont donc décrits à l'aide des deux ou trois premiers moments de l'équation de Boltzmann.
- Les électrons rapides forment quant à eux un faisceau monoénergétique et sont donc décrits par une équation de continuité et une équation d'énergie.

Ce type de modèle surestime la pénétration des électrons rapides ainsi que leur ionisation dans la lueur négative mais il donne néanmoins des résultats physiquement raisonnables. Ce modèle sera plus amplement décrit dans le chapitre D.

2.3 – Modèle hybride fluide – Monte Carlo

Dans les modèles fluides à une ou deux populations d'électrons, la principale difficulté pour obtenir une bonne modélisation du plasma est de trouver une description réaliste des différents mécanismes d'ionisation. Les différentes approximations A.C.L. ou A.E.L. ne sont physiquement acceptables que dans la colonne positive alors qu'un modèle à deux populations d'électrons a tendance à surestimer l'ionisation dans la lueur négative.

Une solution à ce problème a été développée depuis quelques années. Elle consiste à utiliser un modèle hybride : Le modèle est toujours constitué de deux populations d'électrons mais le terme source d'ionisation des électrons rapides sera calculé à l'aide de la méthode de Monte Carlo, en connaissant l'évolution spatio temporelle du champ électrique grâce à l'équation de Poisson.

Ce type de modèle hybride fluide – Monte Carlo a été utilisé par Dalvie^[16] et par Surendra^[17] afin de décrire une décharge luminescente monodimensionnelle entre deux électrodes planes. Fiala^[18] l'a, quant à lui, utilisé pour la modélisation bidimensionnelle d'une décharge luminescente basse pression dans l'argon.

2.4 - Conclusion

La modélisation électrique de la décharge repose donc sur deux catégories de modèles numériques: les modèles microscopiques et les modèles macroscopiques. On peut aisément choisir entre ces modèles suivant les conditions de la décharge: les modèles microscopiques seront beaucoup mieux adaptés pour des conditions de décharge basse pression (inférieure au dixième de Torr) alors que les modèles fluides seront utilisables pour des pression plus élevées correspondant aux régimes très collisionnels.

III - MODELES CHIMIQUE ET THERMIQUE

3.1 - Modèle chimique

Généralement, un modèle chimique est constitué d'un système d'équations de continuité décrivant chacune l'évolution des concentrations de chaque espèce (i), chargée ou non, présente dans le plasma.

$$\frac{\partial n_i}{\partial t} + \nabla(n_i \vec{V}) = S_i + P_i \quad [\beta-11]$$

où \vec{V} est la vitesse du gaz porteur.

S_i est un terme source incluant la production d'espèce (i) :

- par impact électronique sur une autre espèce.
- par réactions entre deux autres espèces.

P_i est un terme de perte de l'espèce (i) incluant la production d'une autre espèce:

- par impact électronique sur l'espèce (i).
- par réactions entre l'espèce (i) et les autres espèces.

Il faut remarquer que l'ensemble des équations pour les espèces non chargées constitue l'équation de continuité du gaz porteur si l'on couple un modèle chimique avec un modèle thermique.

Capitelli^[19] s'est servi de ce modèle en négligeant le gradient spatial. Il est couplé à une résolution directe de l'équation de Boltzmann pour déterminer la fonction de distribution en énergie des électrons et la densité des états vibrationnels dans un gaz d'azote en supposant le champ électrique réduit E/N constant (similaire à des zones de colonne positive).

3.2 - Modèle thermique ou hydrodynamique

Ce modèle permet de décrire l'évolution du gaz porteur (gaz électriquement neutre) à l'intérieur de l'enceinte. Il se compose généralement des 3 équations de la mécanique des fluides (équations de conservation de la densité, équation de Navier-Stokes et bilan d'énergie) plus une équation d'état (généralement l'équation des gaz parfaits) permettant ainsi de calculer en chaque point et à chaque instant la vitesse d'écoulement, la densité, la température

et la pression du gaz porteur. Dans le cas d'un gaz faiblement ionisé, elles peuvent s'écrire sous la forme :

- équation de conservation de la densité

$$\frac{\partial N}{\partial t} + \nabla \cdot (N \vec{V}) = 0 \quad [\beta-12]$$

- équation de conservation de la quantité de mouvement (équation de Navier-Stokes)

$$\frac{\partial (mN \vec{V})}{\partial t} + \nabla \cdot (mN \vec{V}) \vec{V} = - \nabla \cdot \vec{\mathbf{P}} + \nabla \cdot \vec{\mathbf{T}} + \vec{C} \quad [\beta-13]$$

- équation d'énergie

$$\frac{\partial \mathcal{E}}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathcal{E} \vec{V}) = \nabla \cdot \vec{Q} + \nabla \cdot (\vec{V} \cdot \vec{\mathbf{P}}) + \nabla \cdot (\vec{V} \cdot \vec{\mathbf{T}}) + \Phi_e \quad [\beta-14]$$

$\vec{\mathbf{P}}$ est le tenseur de pression cinétique ($\vec{\mathbf{P}} = NkT\vec{\mathbf{I}}$), $\vec{\mathbf{T}}$ le tenseur des contraintes visqueuses, \vec{C} le terme de transfert de quantité de mouvement des particules chargées vers les particules neutres, \vec{Q} le flux de chaleur résultant du gradient de température et Φ_e le terme source d'injection d'énergie.

Ce type de modèle a été utilisé en régime stationnaire ($\frac{\partial}{\partial t} = 0$) par J.L Marchand^[20] pour modéliser les plasmas diodes dans la nitruration, en post décharge spatiale, des échantillons d'acier. Il couple en effet une description électrique de la décharge (utilisant un modèle fluide d'ordre 1) avec une modélisation de la cinétique chimique (production de N et N₂(X,v)) mais aussi une modélisation thermique sans injection d'énergie.

IV - CONCLUSION

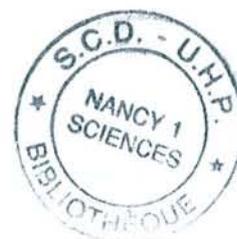
La modélisation d'une décharge basse pression utilisée pour le traitement de surface est très délicate. Il faut pouvoir, suivant les objectifs que l'on s'est fixé, choisir entre les différents modèles (électriques, thermique, chimique, de réaction de surface). Parmi ceux-ci, le modèle électrique est toujours nécessaire, il constitue le noyau fondamental de toute modélisation d'une décharge. Suivant les conditions d'utilisation, on adoptera un modèle microscopique ou macroscopique.

Par rapport aux autres modèles (chimiques ou de réaction de surface) que l'on peut considérer comme des modules optionnels à prendre en compte suivant la finalité de la modélisation, le modèle thermique est, quant à lui, un module nécessaire si l'on veut obtenir une description satisfaisante de la décharge. Le milieu gazeux porteur ne peut plus être considéré comme un gaz homogène en densité et en température. L'évolution des technologies informatiques nous permet maintenant de coupler sans problèmes le modèle électrique (microscopique ou fluide) avec un modèle thermique.

Les conditions d'utilisation du réacteur en place au laboratoire nous imposent de prendre un code fluide pour la modélisation électrique de la décharge. Le chapitre suivant décrit de façon détaillée le modèle utilisée ainsi que les résultats obtenus. Un modèle thermique ainsi que son couplage avec le modèle électrique seront développé dans un chapitre ultérieur.

Bibliographie du chapitre B

- [1] G.G. LISTER, J. Phys. D: Appl. Phys., **25**, 1649, (1992)
- [2] KLINE L.E. et KUSHNER M.J., Critical Reviews in Solid State and Material Science, Vol 16.
- [3] ROCKWOOD S.D., Phys. Rev. A, **8**, 2348, (1973)
- [4] FERREIRA C.M. et LOUREIRO J., J. Phys. D: Appl. Phys., **17**, 1175, (1984)
- [5] PITCHFORD L.C. et PHELPS A.V., Phys. Rev. A, **25**, 540, (1982)
- [6] BIRDSALL C.K., IEEE Trans. Plasma Science, **19**, 65, (1991)
- [7] BOEUF J.P. et MARODE E., J. Phys. D: Appl. Phys., **15**, 2169, (1982)
- [8] WARD A.L., J. Appl. Phys., **33**, 2789, (1962)
- [9] DENGRA A., HERNANDEZ M.A., COLOMER V., Contrib. Plasma Phys., **4**, 283, (1987)
- [10] BŒUF J.P., J. Appl. Phys., **63**, 1342, (1988)
- [11] BARNES M.S., COTLER T.J., ELTA M.E., J. Appl. Phys., **61**, 81, (1987)
- [12] BAYLE P. et CORNEBOIS B., Phys. Rev. A, **31**, 1046, (1985)
- [13] BAYLE P., VACQUIE J., BAYLE M., Phys. Rev. A., **34**, 360, (1986)
- [14] BAYLE P., VACQUIE J., BAYLE M., Phys. Rev. A., **34**, 372, (1986)
- [15] BAYLE P. et PERRIN A., Phys. Rev. E, **47**, (1993)
- [16] DALVIE M., HAMAGUCHI S., FAROUKI R.T., Phys. Rev. A., **46**, 1066, (1992)
- [17] SURENDRA M., GRAVES D.B., PLANO L.S., J. Appl. Phys., **71**, 5189, (1992)
- [18] FIALA A., PITCHFORD L.C., BŒUF J.P., Phys. Rev. E., **49**, 5607, (1994)
- [19] CAPITELLI M., DILONARDO M., GORSE C., Chem. Phys., **56**, 29, (1981)
- [20] MARCHAND J.L., Thèse de l'I.N.P.L. NANCY, (1988)



Chapitre C

MODELE A UNE POPULATION D'ELECTRONS

I - INTRODUCTION

Le premier modèle utilisé au laboratoire pour décrire ce type de décharge a été élaboré à partir du code fluide développé par P. Bayle et son équipe ^{[1], [2], [3], [4]}. P. Bayle a utilisé ce code afin de pouvoir modéliser la chute cathodique et visualiser l'évolution temporelle de celle-ci lors de l'amorçage et de la création de la décharge pour des pressions de l'ordre du Torr dans l'azote et de quelques dizaines de Torr dans le CO₂. Nous l'avons adapté afin de modéliser l'ensemble d'une décharge lumineuse pulsée dans l'azote.

Ce code appartient au groupe des modèles fluides d'ordre 2. Il s'agit d'un modèle unidimensionnel qui décrit le comportement des particules chargées (électrons, ions) dans le champ électrique local. Il se distingue des autres modèles de ce type en essayant de prendre en compte l'état de déséquilibre des électrons en modulant leur fonction de distribution en fonction de leurs positions. Les termes sources d'ionisation et d'excitation dépendent non seulement du champ électrique local E/P mais aussi du gradient spatial de la densité électronique $\frac{\partial n_e}{\partial x}$.

Le traitement des électrons est basé sur la résolution des 3 premiers moments de l'équation de Boltzmann tandis que les ions supposés en équilibre thermodynamique avec le champ, ne satisfont qu'à une équation de continuité et une équation de mobilité. L'ensemble est couplé à l'équation de Poisson pour obtenir le profil de champ électrique.

Le gaz est considéré comme faiblement ionisé (taux d'ionisation de l'ordre de 10^{-6}) et sa température est uniforme et reste constante au cours du temps.

Les équations à résoudre du modèle fluide seront présentées dans la première partie de ce chapitre. La deuxième partie sera consacrée à une comparaison entre les résultats numériques et les mesures spectroscopiques données dans le chapitre précédent.

II - MODELE PHYSIQUE

2.1 - Equations de conservation de la densité

Les équations de continuité pour les électrons et les ions peuvent s'écrire :

- pour les électrons :

$$\frac{\partial n_e}{\partial t} + \frac{\partial n_e u_e}{\partial x} = S_{iz} \quad [\gamma-1]$$

- pour les ions :

$$\frac{\partial n_+}{\partial t} + \frac{\partial n_+ u_+}{\partial x} = S_{iz} \quad [\gamma-2]$$

où S_{iz} est le terme source d'ionisation

u_e et u_+ représentent respectivement les vitesses axiales des électrons et des ions.

Dans ces équations, nous avons négligé les termes de pertes par recombinaison dissociative ainsi que les termes de transport radial. Ces hypothèses seront justifiées par la suite.

Les temps caractéristiques de la diffusion ambipolaire (de l'ordre de quelques dizaines de millisecondes), extrait de RAIZER^[5], sont nettement supérieurs à notre temps d'étude (quelques microsecondes). Nous avons donc négligé les pertes par diffusion ambipolaire dans toutes nos équations.

Dans une situation de non équilibre avec le champ électrique local (A.C.L.), l'énergie gagnée par les électrons n'est pas perdue instantanément par collision. Il existe un temps (ou une longueur) de relaxation pour obtenir l'équilibre entre l'énergie gagnée et les pertes collisionnelles. Cette relaxation est fonction du champ électrique mais aussi des gradients présents dans la décharge. L'hypothèse d'équilibre local avec le champ électrique ne permet plus de déterminer convenablement les coefficients de transport associés aux phénomènes collisionnels.

Le terme source d'ionisation S_{iz} s'exprime par :

$$S_{iz}(T_e, n_e, N) = N n_e \int_0^{\infty} \sigma_{iz}(\varepsilon) w(\varepsilon) f_L(\varepsilon) d\varepsilon \quad [\gamma-3]$$

La section efficace d'ionisation $\sigma_{iz}(\varepsilon)$ de la molécule d'azote est tirée des travaux expérimentaux de L.J. Kieffer^[6]. Elle est représentée figure C-1.

Nous l'avons approchée par quatre segments de droite afin de pouvoir l'intégrer plus facilement.

$$\sigma_{iz}(\varepsilon) = \begin{cases} 0 & \text{si } \varepsilon \leq 15.6 \text{ eV} \\ 2.986 \times 10^{-2}(\varepsilon - 15.6) & \text{si } 15.6 \text{ eV} \leq \varepsilon \leq 100 \text{ eV} \\ -2.675 \times 10^{-3}(\varepsilon - 1042.06) & \text{si } 100 \text{ eV} \leq \varepsilon \leq 500 \text{ eV} \\ -1.06 \times 10^{-3}(\varepsilon - 1867.92) & \text{si } 500 \text{ eV} \leq \varepsilon \leq 1000 \text{ eV} \\ -2.4 \times 10^{-4}(\varepsilon - 4833.33) & \text{si } \varepsilon \geq 1000 \text{ eV} \end{cases}$$

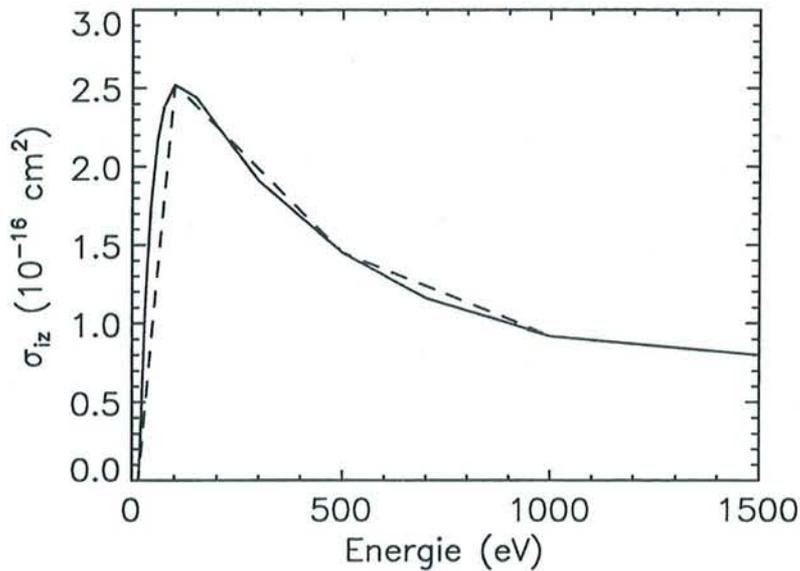


Figure C-1 : Section efficace d'ionisation^[6] de N_2

La fonction de distribution en énergie des électrons $f_L(\varepsilon)$ est celle donnée par Lucas :

$$f_L(\varepsilon) = f_0(\varepsilon) \exp \left[- \int_0^\varepsilon \frac{1}{eE} \frac{1}{n_e} \frac{\partial n_e}{\partial x} d\varepsilon \right] \quad [\gamma-4]$$

où $f_0(\varepsilon)$ est la distribution maxwellienne de température T_e correspondant à la solution stationnaire en l'absence de gradient.

Elle permet de mieux décrire le caractère non hydrodynamique de la décharge pour les électrons car elle inclut, outre une dépendance en T_e , une dépendance en $\frac{1}{n_e} \frac{\partial n_e}{\partial x}$. On obtient

ainsi en utilisant la fonction $f_L(\varepsilon)$ un terme source S_{iz} similaire à celui calculé à l'aide d'une fonction de distribution maxwellienne si l'on remplace dans $f_0(\varepsilon)$ la température électronique T_e par une température effective $T_e' = \frac{T_e}{1 + \frac{T_e}{en_e E} \frac{\partial n_e}{\partial x}}$.

2.2 - Equations de conservation de la quantité de mouvement

Pour les électrons :

L'équation de conservation de la quantité de mouvement est utilisée dans une situation de non équilibre avec le champ électrique local pour calculer la vitesse électronique. Elle est obtenue à partir du second moment de l'équation de Boltzmann :

$$\frac{\partial(m_e n_e u_e)}{\partial t} + \frac{\partial(m_e n_e u_e^2)}{\partial x} = en_e E - \frac{\partial P_e}{\partial x} + \int w \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{coll.} dw \quad [\gamma-5]$$

* P_e représente la pression du gaz d'électrons. Ce gaz étant supposé parfait, P_e vérifie l'équation $P_e = n_e k T_e$ où T_e représente la température électronique.

* $\int w \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{coll.} dw$ représente le terme de transfert de quantité de mouvement par collisions élastiques ou inélastiques.

En injectant l'équation de continuité dans cette équation, elle devient :

$$\frac{\partial u_e}{\partial t} + u_e \frac{\partial u_e}{\partial x} = \frac{eE}{m_e} - \frac{1}{m_e n_e} \frac{\partial P_e}{\partial x} + \frac{1}{m_e n_e} \int w \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{coll.} dw - u_e \frac{S_{iz}}{n_e} \quad [\gamma-6]$$

Expression du terme de transfert de quantité de mouvement par collisions :

Pour déterminer l'opérateur de transfert de quantité de mouvement par collisions, on se sert de son expression dans le cas d'une situation d'équilibre avec le champ électrique local en

remplaçant la température électronique d'équilibre $T_{e,eq}$ par la température calculée à l'aide de l'équation d'énergie.

En considérant cette approximation (A.C.L.), ce terme peut s'écrire sous la forme :

$$\int w \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{coll.} dw = -n_e m_e u_e v_e(E/N)$$

où v_e représente la fréquence de collisions élastiques et n'est fonction que du champ électrique réduit E/N . La contribution des collisions inélastiques est négligeable devant celle des collisions élastiques.

La fréquence de collision v_e est liée à la mobilité électronique μ_e par :

$$v_e(E/N) = \frac{e}{m_e} \frac{1}{\mu_e(E/N)} = \frac{e}{m_e} \frac{1}{\mu_e(\psi(T_{e,eq}))} \quad [\gamma-7]$$

où la relation $E/N = \psi(T_{e,eq})$ est extraite des travaux expérimentaux de Bayle et al^[2].

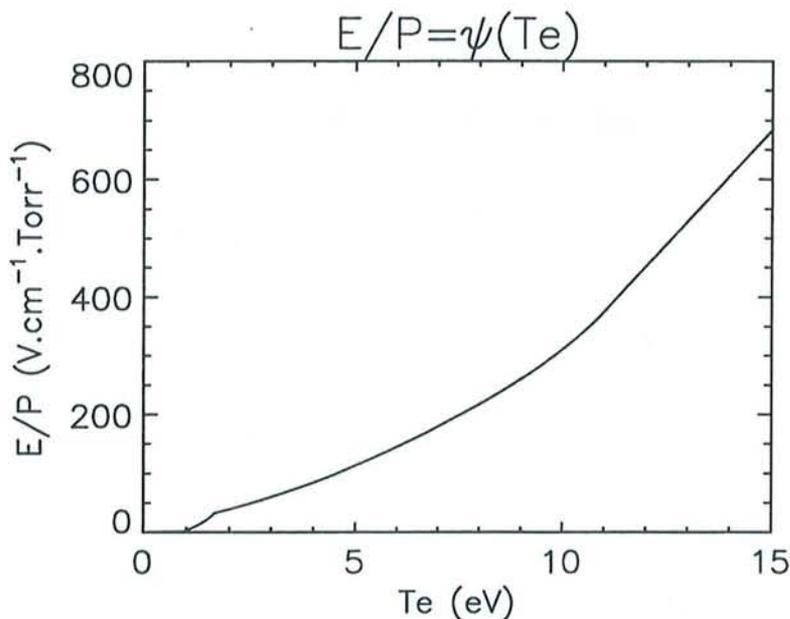


Figure C-2 : Relation entre le champ réduit E/P et la température électronique T_e

Dans notre cas, les électrons ne sont pas en équilibre avec le champ électrique local. Nous utilisons les mêmes expressions en nous servant de la température électronique déduite de l'équation d'énergie. Le terme de transfert de quantité de mouvement par collision devient donc :

$$\int w \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{coll.} dw = -n_e m_e u_e v_e (\psi(T_e))$$

L'équation d'évolution de la quantité de mouvement pour les électrons devient :

$$\frac{\partial u_e}{\partial t} + u_e \frac{\partial u_e}{\partial x} = \frac{e}{m_e} \left[E - \frac{1}{n_e} \frac{\partial n_e T_e}{\partial x} \right] - u_e \frac{S_{iz}}{n_e} - u_e v_e (\psi(T_e)) \quad [\gamma-8]$$

Pour les ions :

Les ions sont supposés en équilibre avec le champ électrique local. Leurs vitesses peuvent donc être calculées à partir du champ électrique :

$$u_+ = \mu_+ \frac{E}{P} \quad [\gamma-9]$$

où μ_+ représente la mobilité réduite des ions positifs ($\mu_+ = 2000 \text{ cm}^2 \text{ V}^{-1} \text{ s}^{-1} \text{ Torr}$)

Il est à noter que nous avons négligé la diffusion des ions dans cette équation. Cette hypothèse sera justifiée par la suite.

2.3 - Equation de conservation de l'énergie

L'équation de conservation de l'énergie se déduit à partir du 3^{ieme} moment de l'équation de Boltzmann.

Pour les électrons, elle s'écrit :

$$\frac{\partial n_e m_e \varepsilon}{\partial t} + \frac{\partial n_e m_e u_e \varepsilon}{\partial x} = e n_e u_e E - \frac{\partial P_e u_e}{\partial x} + \int \frac{1}{2} m w^2 \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{coll.} dw \quad [\gamma-10]$$

* Nous supposons que l'énergie thermique est grande devant l'énergie de dérive donc ε représente l'énergie interne massique du gaz électronique : $\varepsilon = \frac{3}{2} \frac{T_e}{m_e}$

* Le terme de flux de chaleur est négligé : $\vec{Q} = \vec{0}$

* $\int \frac{1}{2} m w^2 \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{coll.} dw$ représente le terme de transfert d'énergie par collisions élastiques ou inélastiques.

En se servant de l'équation de conservation de la densité électronique, cette équation devient :

$$\frac{3}{2} \left[\frac{\partial T_e}{\partial t} + u_e \frac{\partial T_e}{\partial x} \right] = u_e E - \frac{1}{n_e} \frac{\partial (n_e T_e u_e)}{\partial x} + \frac{1}{n_e} \int \frac{1}{2} m w^2 \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{coll.} dw - \frac{3}{2 n_e} T_e S_{iz} \quad [\gamma-11]$$

où la température électronique T_e s'exprime en eV.

Expression du terme de transfert d'énergie par collisions :

Dans le cas d'une décharge uniforme ($\frac{\partial T_e}{\partial x} = 0$ et $\frac{\partial n_e T_e u_e}{\partial x} = 0$) et stationnaire ($\frac{\partial T_e}{\partial t} = 0$), les électrons sont en équilibre avec le champ électrique. L'énergie gagnée par les électrons est instantanément perdue par collisions.

On obtient :

$$\begin{cases} n_e u_e E = \frac{3}{2} T_e S_{iz} - \int \frac{1}{2} m w^2 \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{coll.} dw \\ u_e = V_d (E/N) \end{cases}$$

où V_d est la vitesse de dérive électronique.

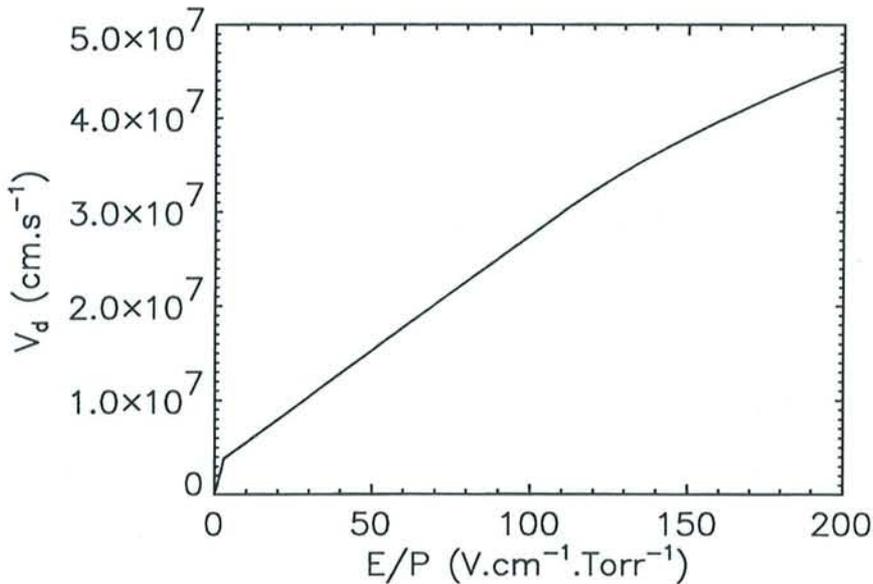


Figure C-3 : Vitesse de dérive électronique V_d en fonction du champ électrique réduit E/P

Le terme de transfert d'énergie par collisions dans une situation d'équilibre avec le champ électrique local s'écrit donc :

$$\int \frac{1}{2} m w^2 \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{coll.} dw = \frac{3}{2} T_e S_{iz} - n_e V_d (E/N) E$$

En opérant d'une manière similaire à celle employée pour le terme de transfert de la quantité de mouvement par collisions, le terme de transfert d'énergie par collisions dans le cas non hydrodynamique est évalué à partir d'une situation d'équilibre en déterminant le champ électrique et la vitesse de dérive en fonction de la température électronique dynamique.

L'équation de conservation de l'énergie s'écrit alors :

$$\frac{\partial T_e}{\partial t} + u_e \frac{\partial T_e}{\partial x} = \frac{2}{3} \left[u_e E - \frac{1}{n_e} \frac{\partial (n_e T_e u_e)}{\partial x} - \psi(T_e) v_d(\psi(T_e)) \right] \quad [\gamma-12]$$

2.4 - Calcul du champ électrique

Le profil du champ électrique dans l'espace interélectrodes est déterminé grâce à l'équation de Poisson :

$$\frac{\partial E}{\partial x} = \frac{e}{\epsilon_0} (n_+ - n_e) \quad [\gamma-13]$$

où le champ électrique E doit vérifier la condition : $V_G = \int_0^d E(x) dx$

avec V_G potentiel appliqué aux électrodes

d distance interélectrodes

2.5 - Conditions aux limites

- A la cathode :

Le bombardement ionique de la cathode provoque l'émission d'électrons. Le flux d'électrons quittant la cathode est donné par la relation:

$$(n_e u_e)_{Cath.} = \gamma_i (n_+ u_+)_{Cath.} \quad [\gamma-14]$$

où γ_i est le coefficient d'émission secondaire de Townsend ($\gamma_i = 5.10^{-2}$)

La température de ces électrons est fixée à 1 eV.

- A l'anode :

L'anode sert de collecteur pour les électrons, aucun ion ne peut l'atteindre donc:

$$n_+^{anode} = 0 \quad [\gamma-15]$$

2.6 - Conditions initiales

La densité des particules chargées est égale à 10^5 cm^{-3} , ce qui correspond approximativement à la densité de ces particules dans le milieu ambiant. Le champ électrique possède un profil constant dans l'espace interélectrodes égale au potentiel divisé par la distance interélectrodes. En l'absence de charge, ce profil se justifie bien.

2.7 - Méthode numérique de résolution

La résolution numérique de ces équations est rendue difficile par l'absence de termes diffusifs. Nous avons donc opté pour un schéma centré aux différences finies utilisant la technique F.C.T. (*Flux Corrected Transport*) proposé par Boris et Book^[7]. Cette méthode permet de supprimer les effets de la diffusion numérique.

La discrétisation des équations, le schéma de transport ainsi que la méthode de correction de flux F.C.T. sont présentés dans les annexes A, B et C.

L'espace inter-électrode ($d = 4 \text{ cm}$) est divisé en N cellules identiques. Dans notre cas, nous avons choisi $N=160$, ce qui correspond à un pas d'espace $\Delta x = 0,25 \text{ mm}$.

Le choix d'une méthode explicite nous impose de prendre un pas de temps Δt suffisamment petit pour satisfaire aux critères de convergence. La condition de stabilité C.F.L. ($u \frac{\Delta t}{\Delta x} \leq \frac{1}{2}$) permet de déterminer ce pas de temps. On obtient $\Delta t = 5.10^{-11} \text{ s}$.

III - RESULTATS ET COMPARAISON AVEC L'EXPERIENCE

Les données accessibles grâce à ce code numérique sont les évolutions spatio-temporelles des grandeurs suivantes:

- le courant de décharge $I(t)$.
- les densités électroniques $n_e(x,t)$ et ioniques $n_+(x,t)$.
- la température électronique $T_e(x,t)$.
- le champ électrique $E(x,t)$.
- les émissions du 1^{er} système négatif $S_{1N}(x,t)$ et du 2nd système positif $S_{2P}(x,t)$.

* Validité des hypothèses faites précédemment

La figure C-4 montre une comparaison entre:

- le terme source d'ionisation S_{iz} .
- les pertes par recombinaison dissociative $S_{diss.} = \alpha n_e n_+$ où α est le coefficient de recombinaison dissociative^[5].

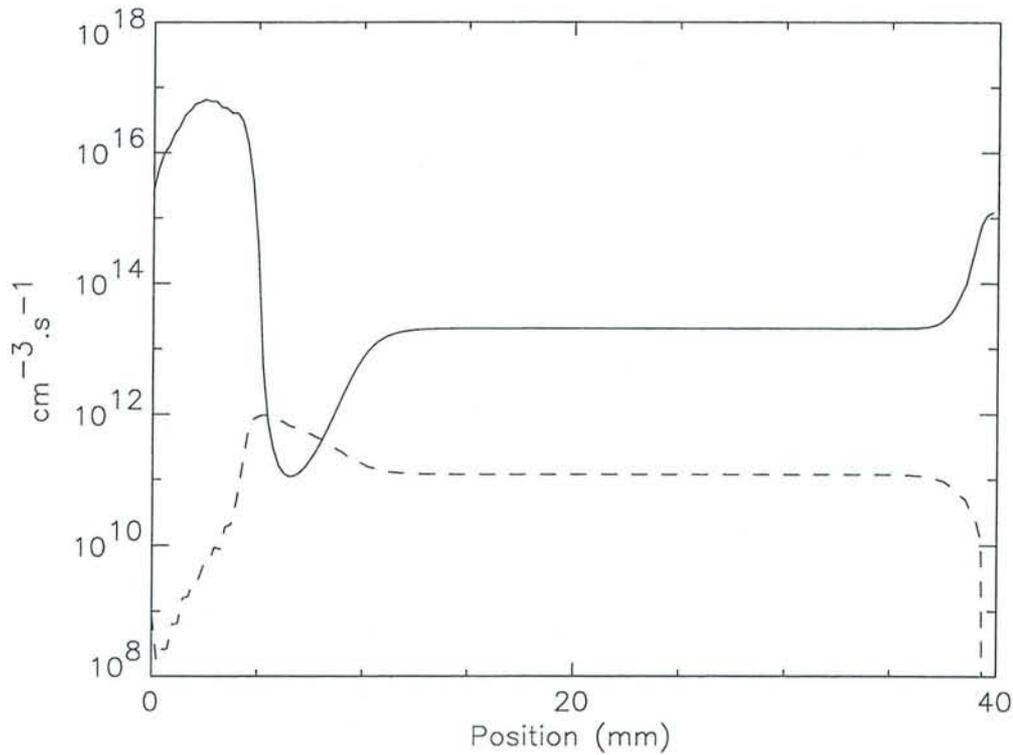


Figure C-4 : Comparaison à $t = 12,5 \mu s$ entre les amplitudes du terme source d'ionisation S_{iz} (courbe continue) et du terme de perte par recombinaison dissociative (courbe en tirets courts) pour $U = 1000$ Volts et $P = 1$ Torr

Comme nous le montre la figure C-4, le rapport entre les pertes par recombinaison dissociative et le terme source d'ionisation est toujours inférieur à 1%, excepté en fin de chute cathodique. De plus, un calcul rapide nous a permis d'estimer le temps caractéristique de ce phénomène. Il est de l'ordre de quelques centaines de microsecondes, ce qui est très supérieur à notre temps d'étude. Il est donc raisonnable vis à vis de ces constatations de négliger ce terme de perte dans nos différentes équations.

* Evolution temporelle du courant de décharge $I(t)$

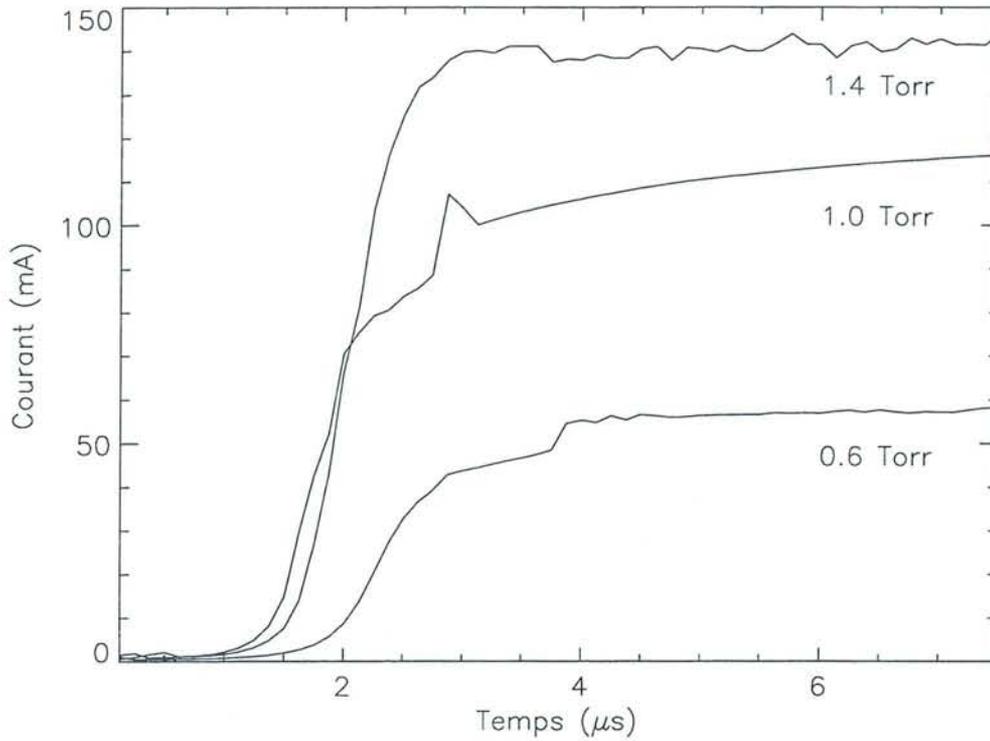


Figure C-5 : Evolution temporelle du courant de décharge $I(t)$ pour $U = 1000$ Volts

La figure C-5 montre l'évolution temporelle sur une durée de $8 \mu\text{s}$ du courant de décharge pour différentes pressions et une tension de 1000 Volts. Au bout de quelques microsecondes, le terme $\frac{\partial n_{e,+}}{\partial t}$ devient relativement faible, ce qui explique la quasi stabilisation du courant.

Ceci ne constitue pas réellement l'état stationnaire de la décharge qui ne peut être atteint qu'au bout de plusieurs centaines de microsecondes en prenant en compte les différents termes de pertes (recombinaison et diffusion). Nous reviendrons plus en détails sur ce point à la fin de ce chapitre.

Pression (Torr)	Courant expérimental (mA)	Courant numérique (mA)*
0.6	110	58
1.0	180	116
1.4	300	144

Tableau T-3 : Comparaison courants expérimentaux / courants numériques

* Le courant total a été évalué en multipliant la densité de courant obtenue dans les simulations par la surface des électrodes ($S = 19,635 \text{ cm}^2$).

Le tableau T-3 présente une comparaison entre les courants mesurés expérimentalement pour des décharges impulsionnelles ($t_d = 0,1$ ms et $t_{pd} = 50$ ms) et ceux obtenus à l'aide du modèle numérique au bout de $7,5 \mu\text{s}$. Il montre une forte disparité, les courants numériques étant nettement inférieurs à ceux obtenus expérimentalement. Cette disparité peut s'expliquer par le fait que les densités des particules chargées déterminées numériquement sont inférieures aux densités expérimentales (cf. figure A-7), le modèle électrique adopté ici ne prenant pas suffisamment en compte les différents mécanismes d'ionisation.

Nous présentons dans les courbes C-6 à C-23 les résultats obtenus lors de la simulation numérique d'une décharge DC pour une tension de 1000 Volts et des pressions de 0.6 Torr, 1.0 Torr puis 1.4 Torr.

Type de traits	Temps	Type de traits	Temps	Type de traits	Temps
·—·—·—·	1 μs	— — —	2 μs	—·—·—·	3 μs
- - - - -	4 μs	5 μs	————	7,5 μs

Tableau T-4 : Légende des figures C-6 à C-23

Les courbes C-7, C-13 et C-19 représentent la valeur réelle de l'opposé du champ électrique dans l'espace interélectrodes.

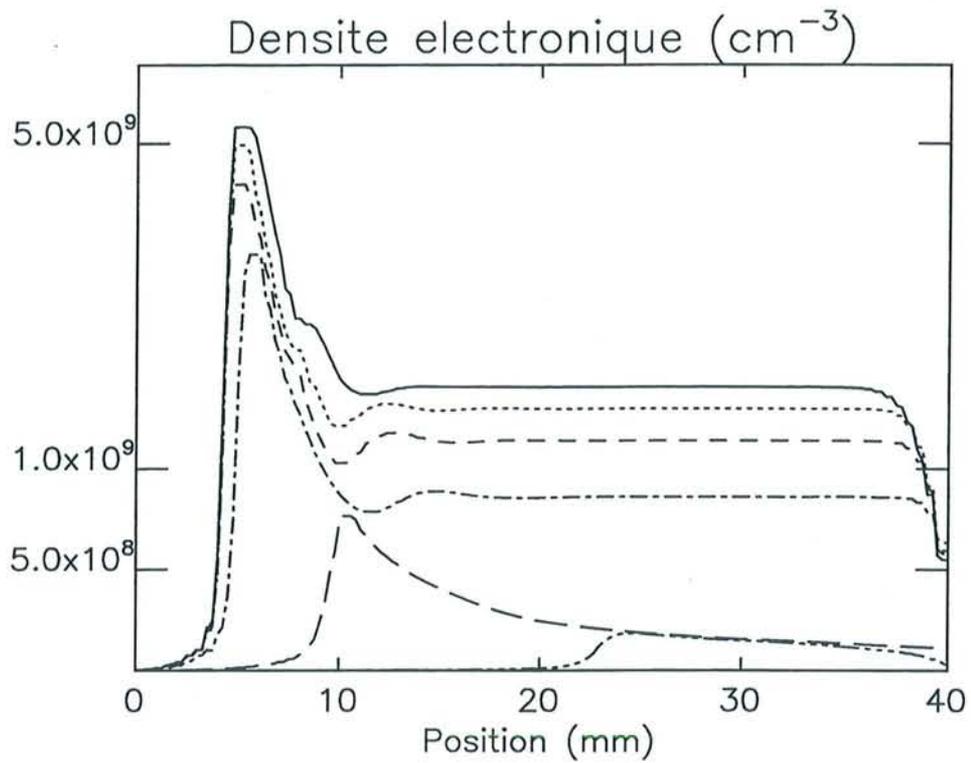


Figure C-6 : Densité électronique ($P = 0.6$ Torr, $U = 1000$ Volts)

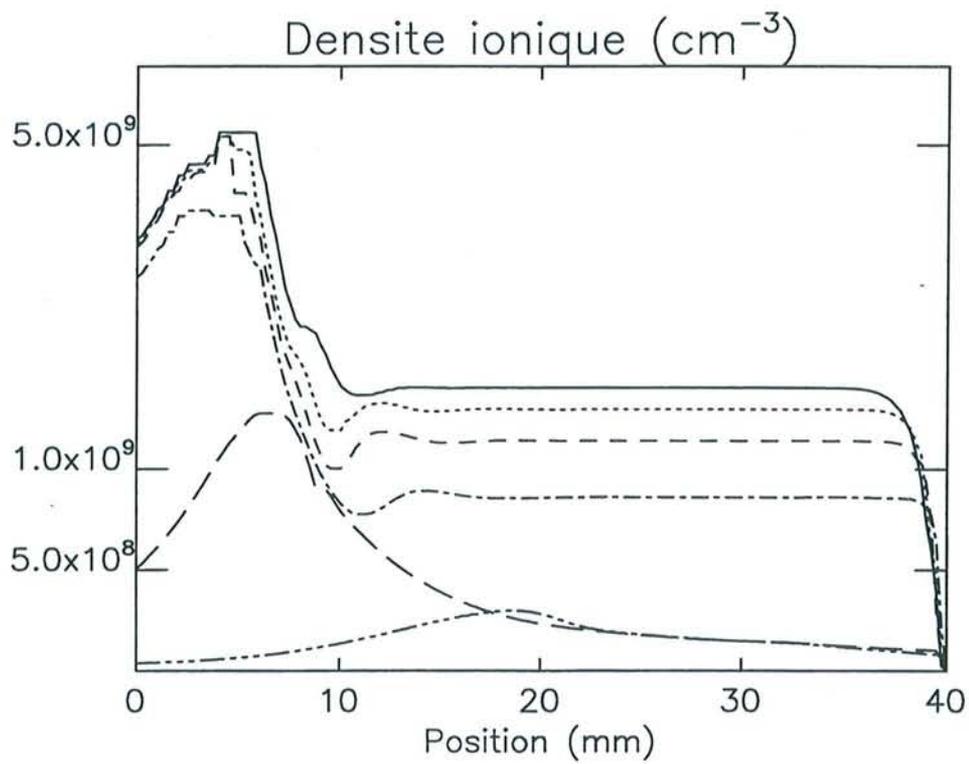


Figure C-7 : Densité ionique ($P = 0.6$ Torr, $U = 1000$ Volts)

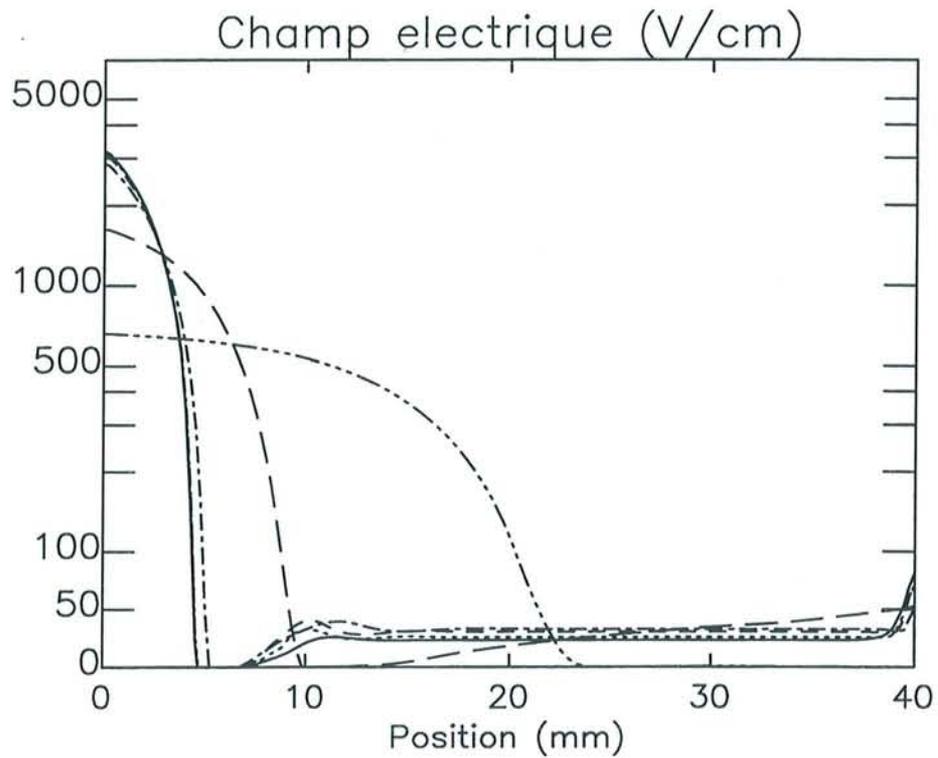


Figure C-8 : Champ électrique (P = 0.6 Torr, U = 1000 Volts)

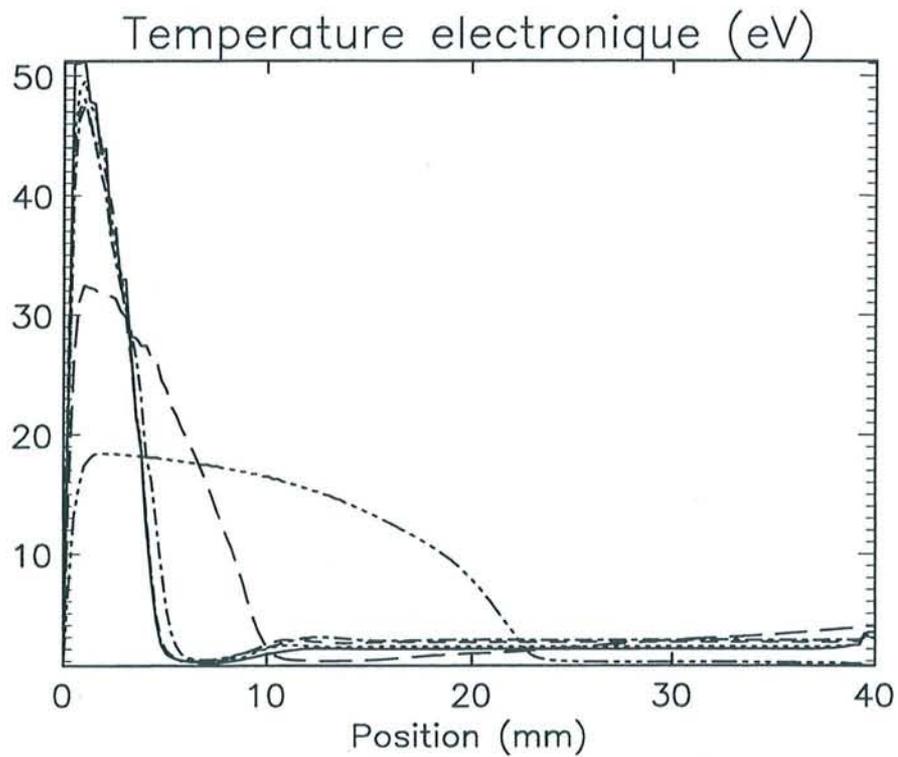


Figure C-9 : Température électronique (P = 0.6 Torr, U = 1000 Volts)

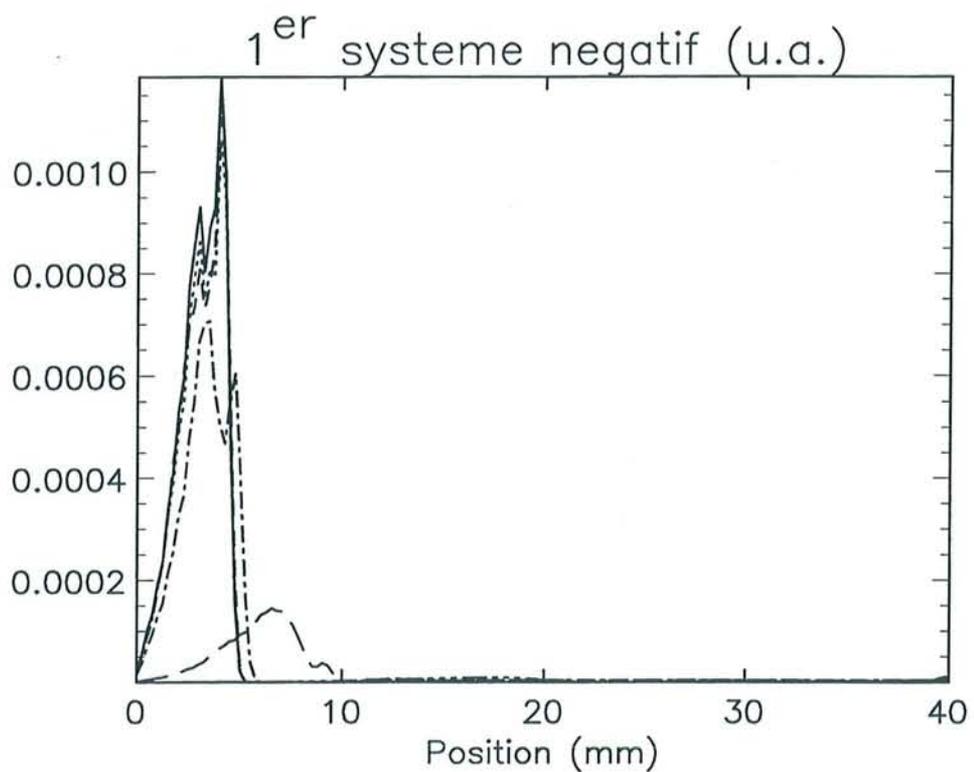


Figure C-10 : 1^{er} système négatif (P = 0.6 Torr, U = 1000 Volts)

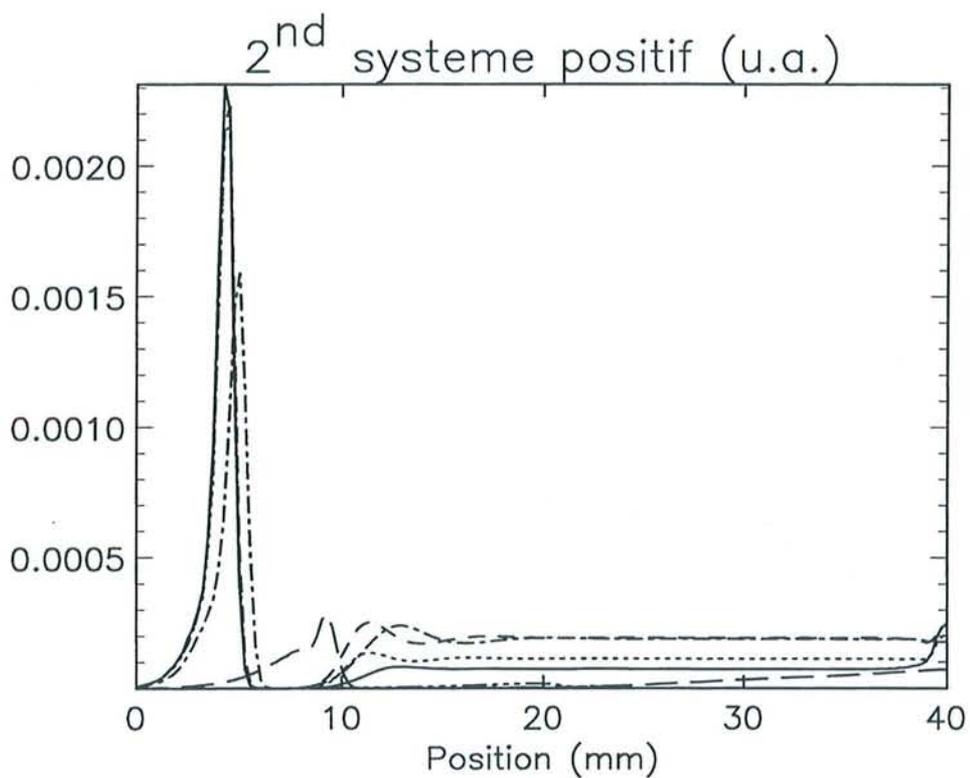


Figure C-11 : 2nd système positif (P = 0.6 Torr, U = 1000 Volts)

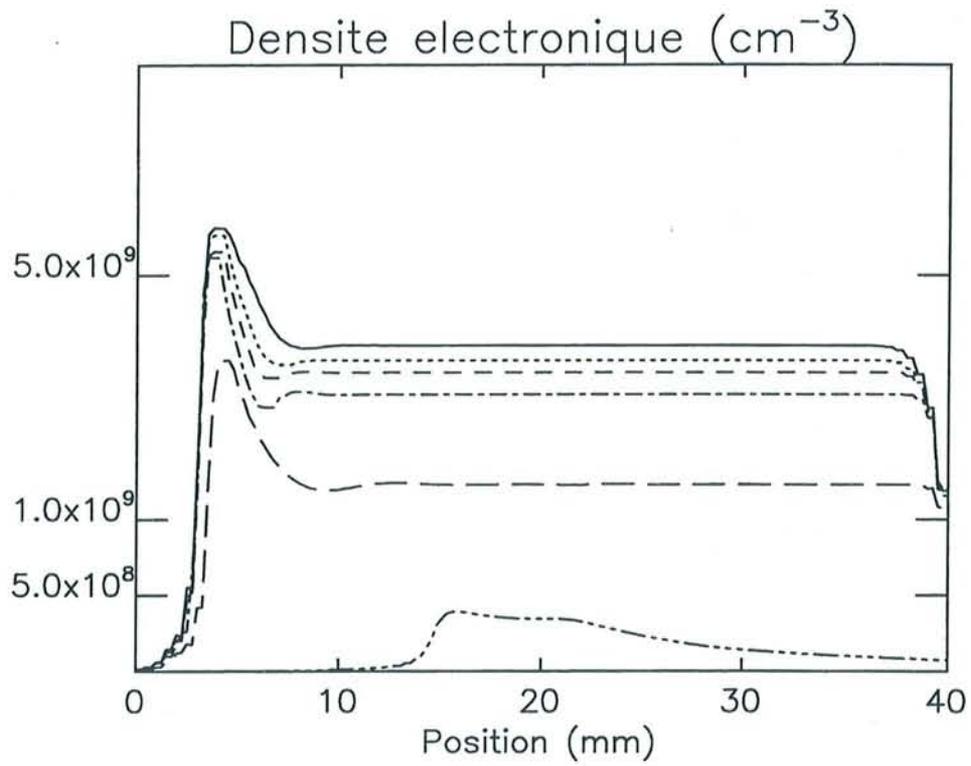


Figure C-12 : Densité électronique ($P = 1.0$ Torr, $U = 1000$ Volts)

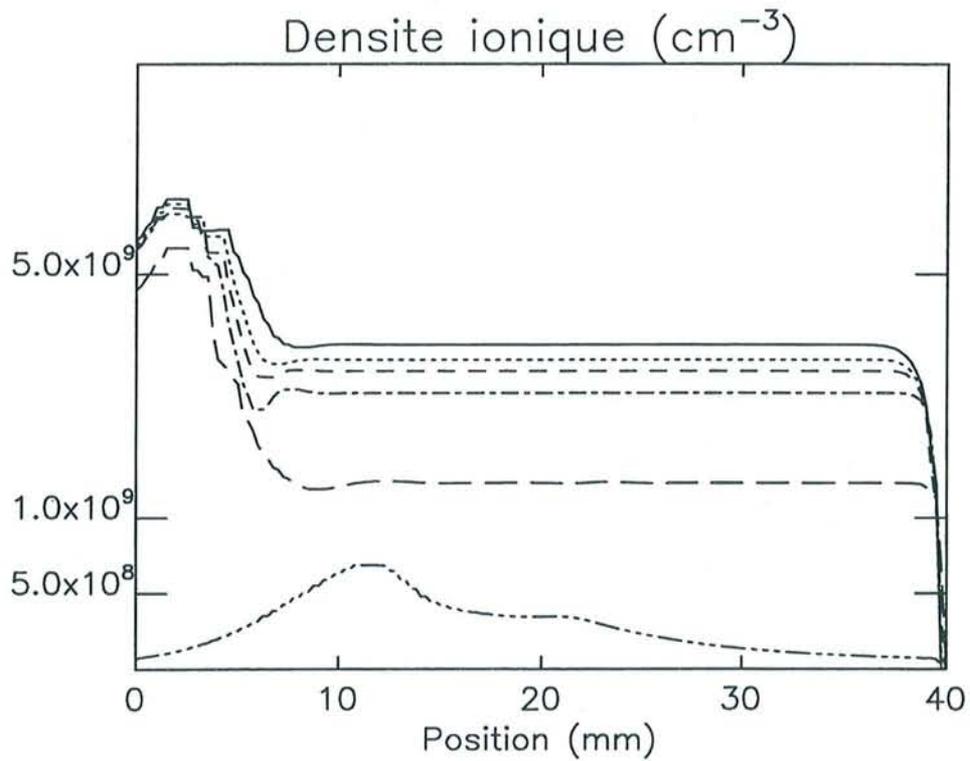


Figure C-13 : Densité ionique ($P = 1.0$ Torr, $U = 1000$ Volts)

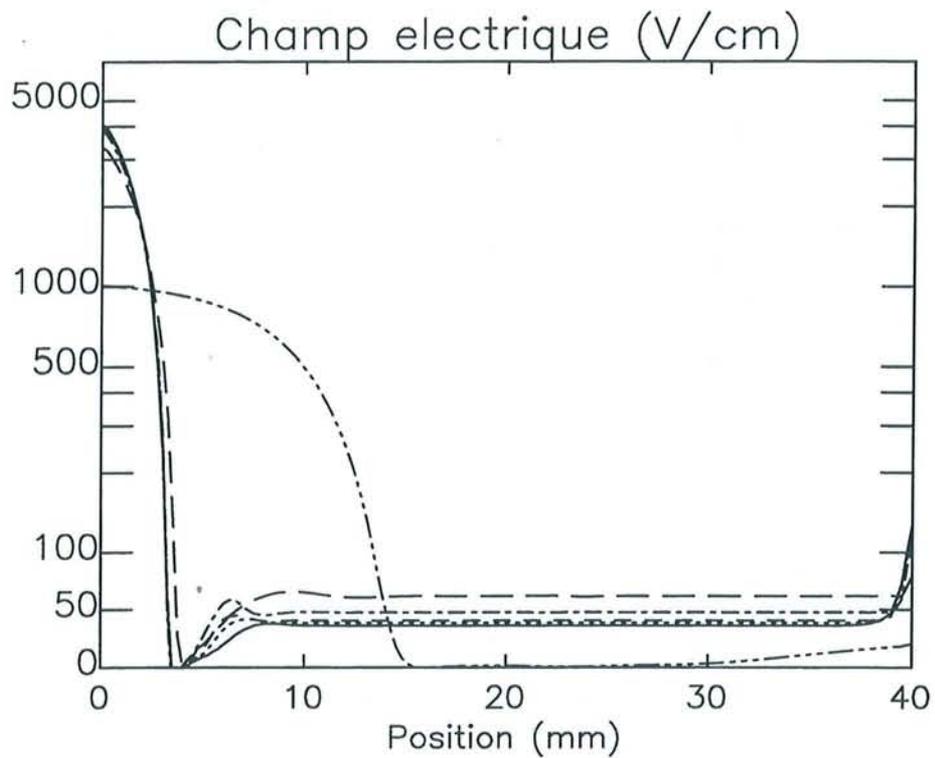


Figure C-14 : Champ électrique ($P = 1.0$ Torr, $U = 1000$ Volts)

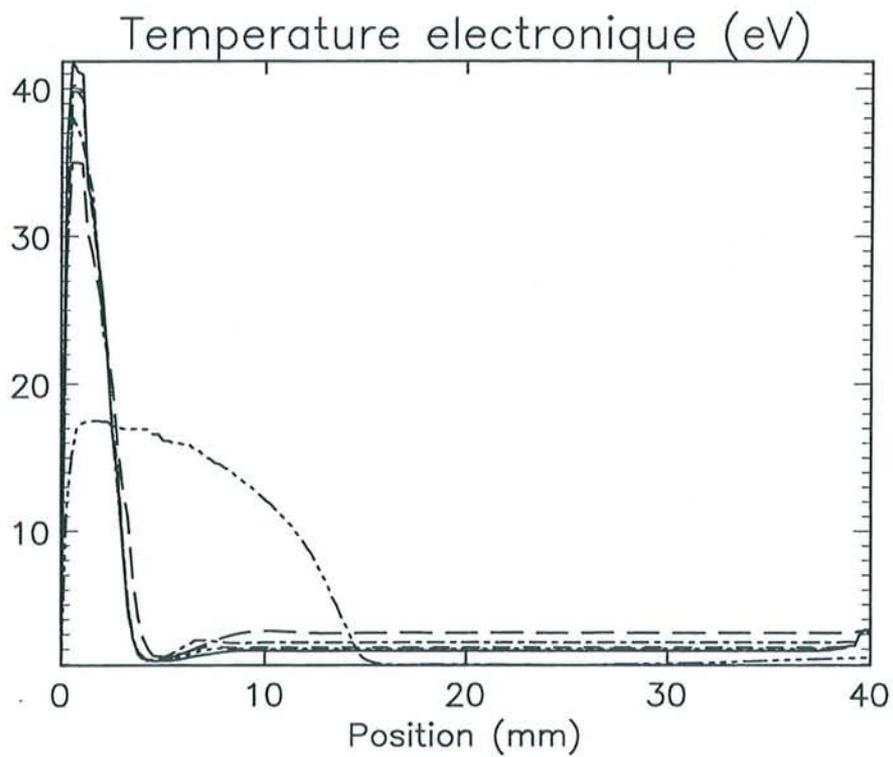


Figure C-15 : Température électronique ($P = 1.0$ Torr, $U = 1000$ Volts)

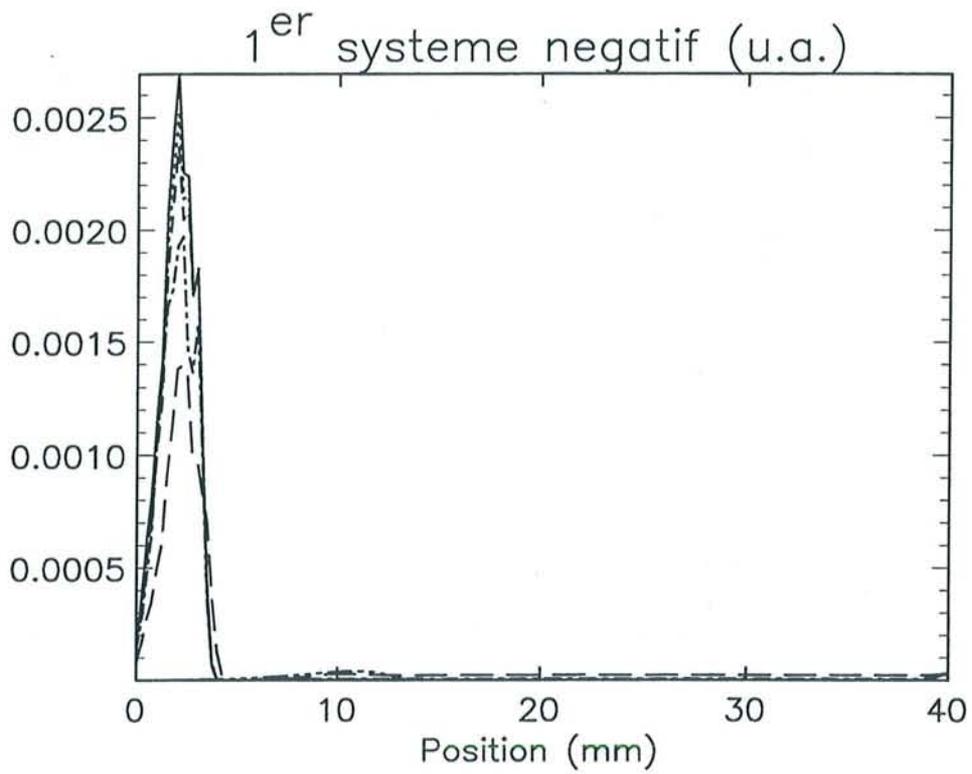


Figure C-16 : 1^{er} système négatif (P = 1.0 Torr, U = 1000 Volts)

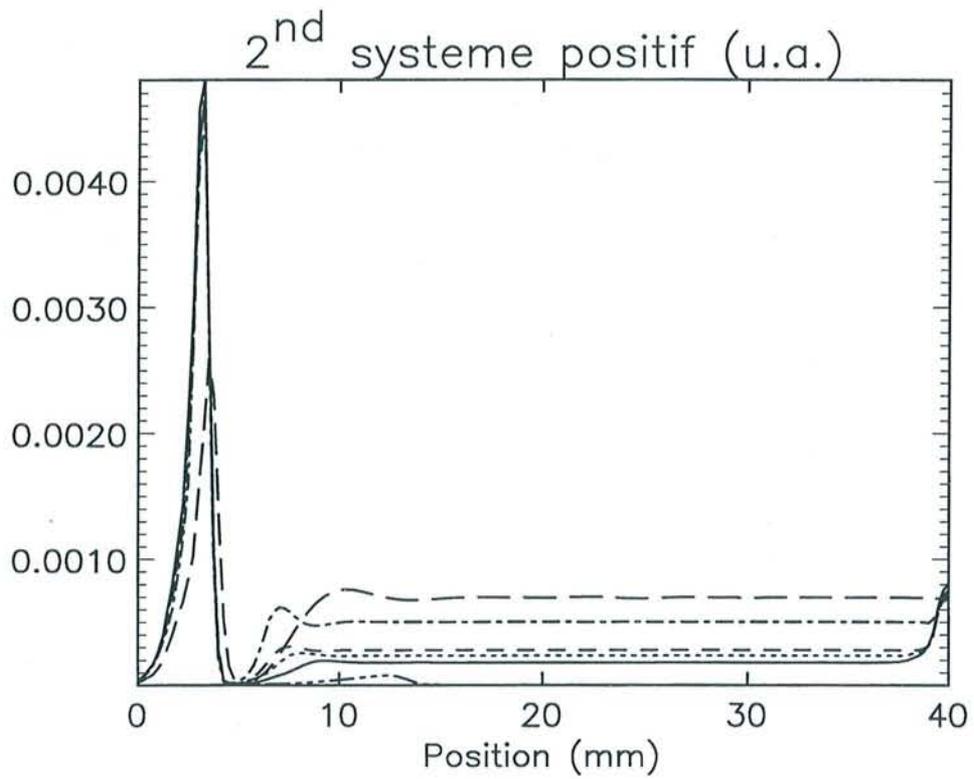


Figure C-17 : 2nd système positif (P = 1.0 Torr, U = 1000 Volts)

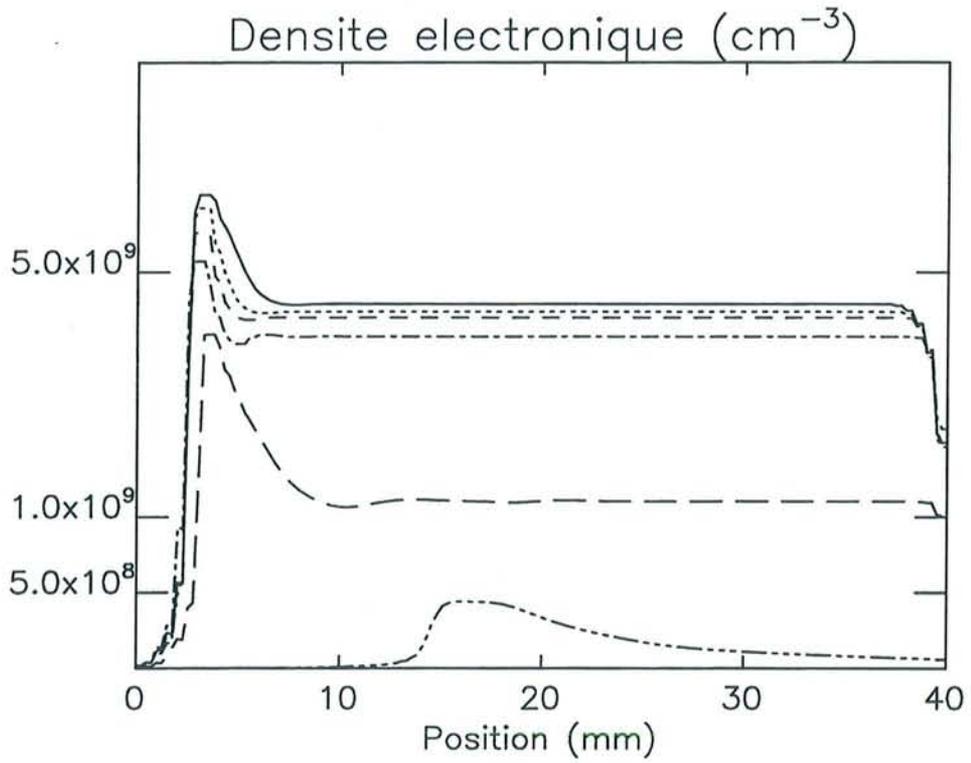


Figure C-18 : Densité électronique ($P = 1.4$ Torr, $U = 1000$ Volts)

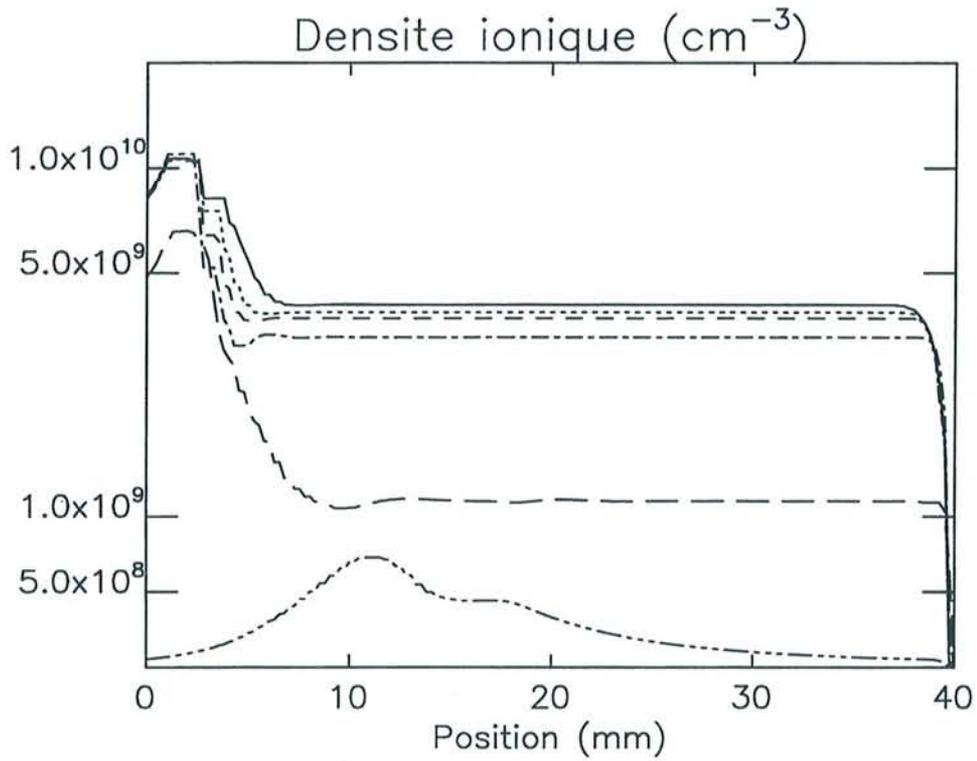


Figure C-19 : Densité ionique ($P = 1.4$ Torr, $U = 1000$ Volts)

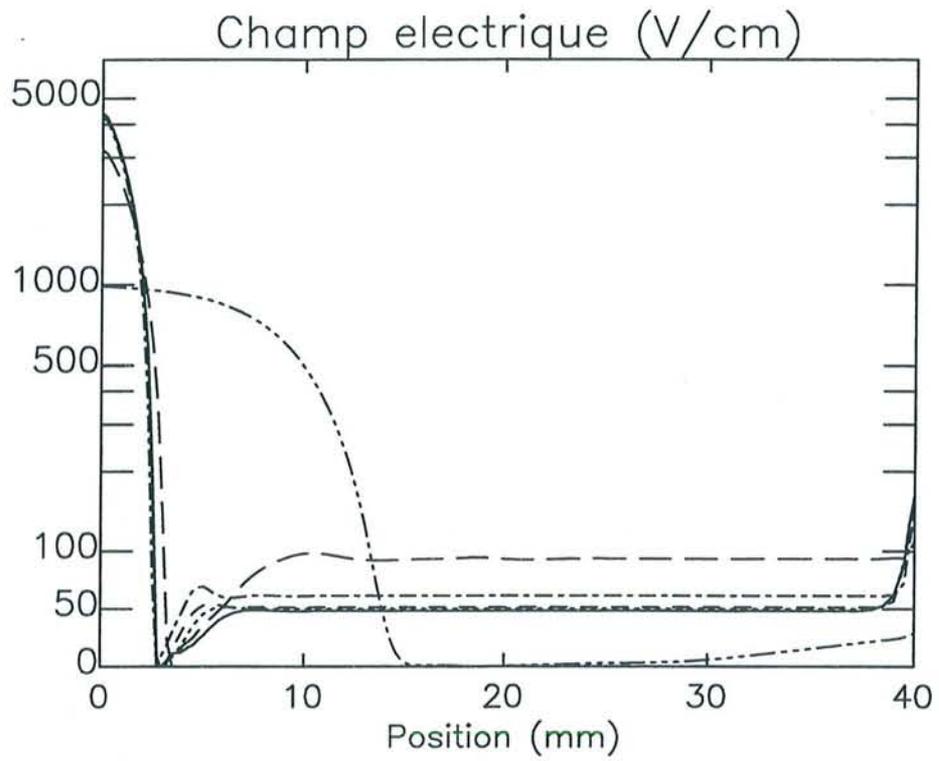


Figure C-20 : Champ électrique ($P = 1.4$ Torr, $U = 1000$ Volts)

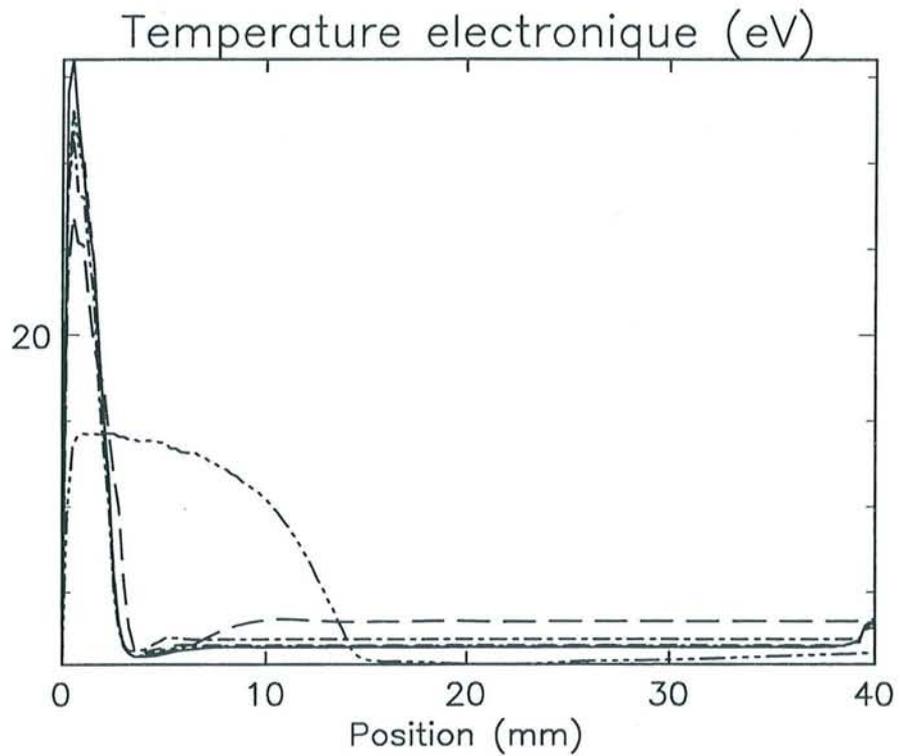


Figure C-21 : Température électronique ($P = 1.4$ Torr, $U = 1000$ Volts)

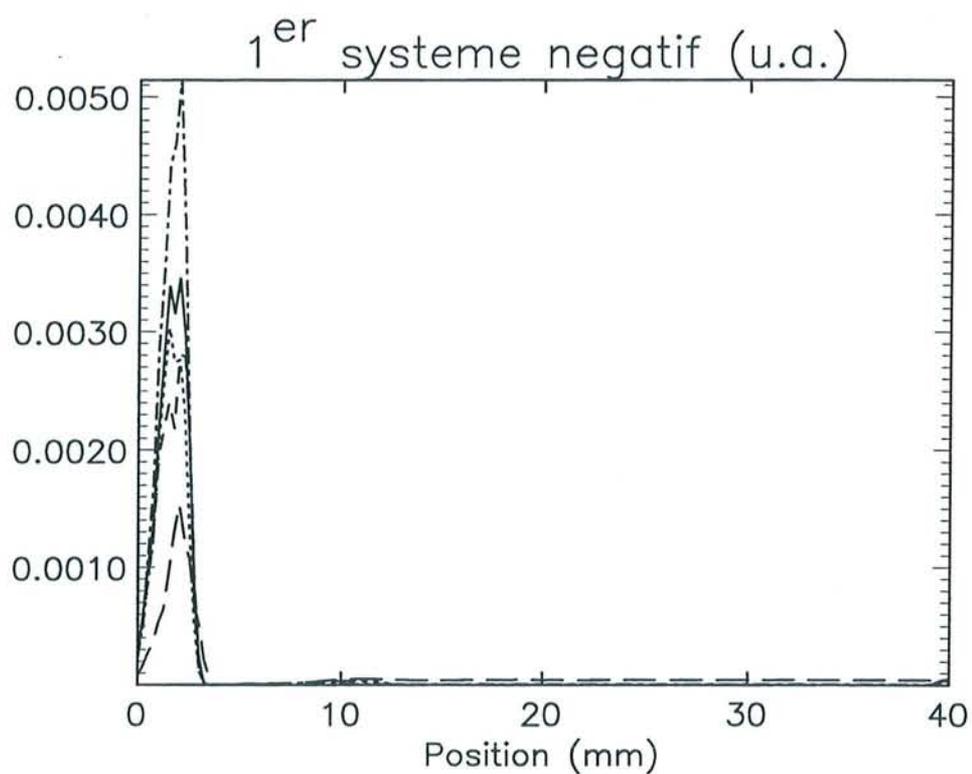


Figure C-22 : 1^{er} système négatif (P = 1.4 Torr, U = 1000 Volts)

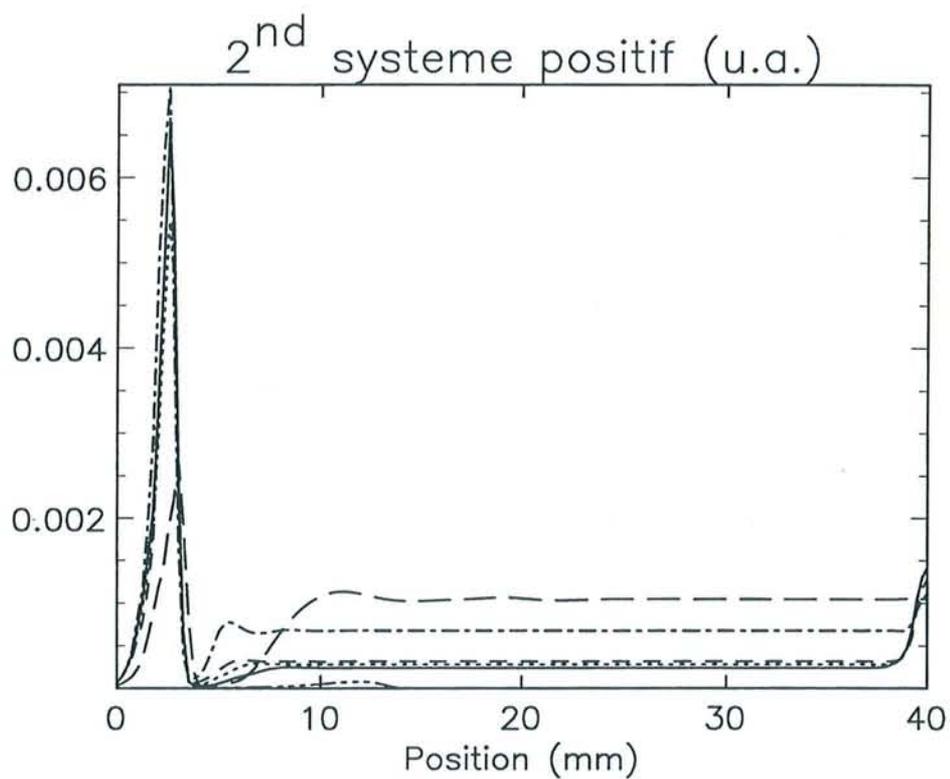


Figure C-23 : 2nd système positif (P = 1.4 Torr, U = 1000 Volts)

Le code utilisé ici donne une description relativement satisfaisante de l'évolution globale de la décharge. Les courbes (C-6 à C-23) montrent clairement l'apparition progressive de pratiquement toutes les zones de la décharge.

** courbes de champ électrique et de température électronique*

Le profil de ces courbes nous indique qualitativement la présence des différentes zones de la décharge. Le champ électrique présente tout d'abord un fort gradient (caractérisant la chute cathodique) pour arriver vers une zone de champ quasi-nul (caractérisant la lueur négative). Les simulations effectuées à l'aide de ce modèle ne permettent pas d'obtenir une inversion de champ dans cette zone. Ensuite ces courbes remontent rapidement vers une zone de champ constant de l'ordre de quelques dizaines de V/cm. Cette zone ne constitue pas réellement une colonne positive au sens classique du terme car les phénomènes de diffusion ambipolaire ne sont pas pris en compte dans cette modélisation. On peut tout de même remarquer que cette zone de champ constant a été également constatée expérimentalement dans les premiers temps d'une décharge impulsionnelle (cf figure A-11). Cette zone permet de raccorder électriquement la fin de la lueur négative à l'anode, tout en conservant le courant de décharge. Les mêmes types de conclusions peuvent être établies lors de l'observation des différentes courbes de température électronique.

** courbes de densités ionique et électronique*

Ces courbes montrent que la gaine ionique est assez bien décrite. Dans cette zone, la densité électronique est très faible devant la densité ionique.

Les électrons ultimes, présents dans la colonne positive, possède une densité de l'ordre de 10^{-9} cm⁻³, ce qui paraît relativement cohérent avec l'expérimentation.

* courbes de terme source d'ionisation

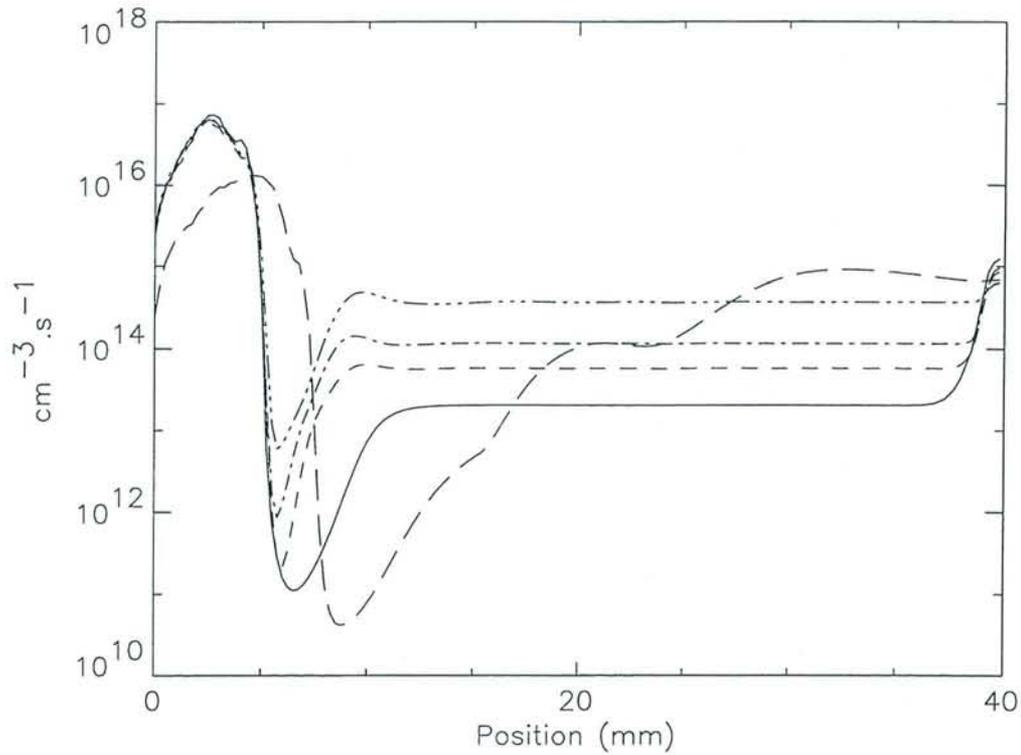


Figure C-24 : Evolution temporelle de terme source d'ionisation S_{ion}

pour $P = 1$ Torr et $U = 1000$ Volts

Type de traits	Temps	Type de traits	Temps	Type de traits	Temps
— — —	2 μ s	· — · — ·	3 μ s	— · — · —	4 μ s
— — — —	5 μ s	————	12,5 μ s		

Tableau T-5 : Légende de la figure C-24

L'observation de la courbe C-24 nous amène à plusieurs conclusions :

- Dans la chute cathodique, le terme source d'ionisation ne présente plus d'évolution à partir de 3 μ s. Ceci provient essentiellement du fait que la densité électronique dans cette zone ne varie plus en fonction du temps, le terme source d'ionisation S_{iz} étant localement compensé par le terme de diffusion $\frac{\partial n_e u_e}{\partial x}$.
- Dans la zone à champ constant, on s'aperçoit qu'après la phase d'amorçage (à partir de 3 μ s) le terme source d'ionisation S_{iz} diminue en fonction du temps. Ce

phénomène s'explique par une augmentation de la densité des particules chargées dans cette zone. En parallèle, cette augmentation s'accompagne par une diminution du champ électrique et de la température électronique (cf. figures C-14 et C-15), la température électronique passant de 2.4 eV pour $t = 3 \mu\text{s}$ à 1.6 eV pour $t = 12.5 \mu\text{s}$, ceci permettant d'obtenir une conservation du courant total dans l'espace interélectrodes.

La figure C-25 représente l'évolution de la fréquence d'ionisation S_{iz}/n_e en fonction de la température électronique. On s'aperçoit que lorsque la température électronique passe de 2.4 eV à 1.6 eV, la fréquence d'ionisation diminue d'environ un facteur 100, justifiant ainsi les ordres de grandeurs donnés sur la figure C-24.

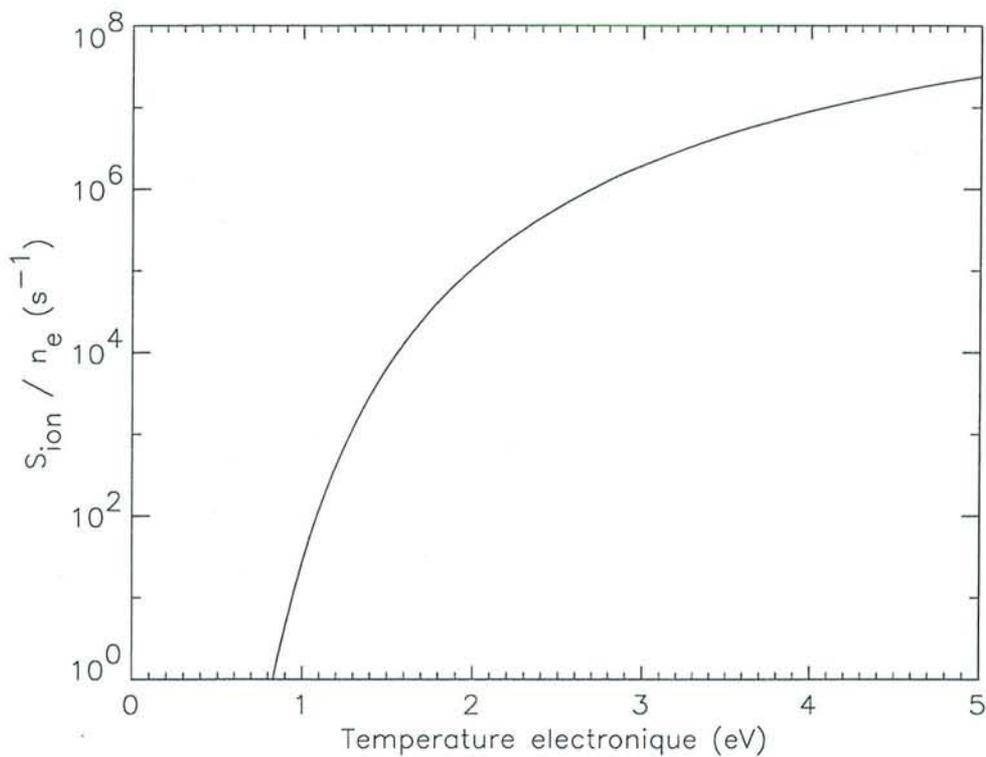


Figure C-25 : Evolution de la fréquence d'ionisation S_{iz}/n_e en fonction de la température électronique T_e

Cette diminution progressive du terme source d'ionisation S_{iz} entraîne la quasi stabilisation du courant de décharge constatée sur la figure C-5.

Il est clair que cet état quasi stationnaire ne correspond pas à l'état stationnaire d'une décharge continue mais il permet de décrire de façon satisfaisante l'amorçage de ce type de décharge sur des temps où les termes de pertes par recombinaison dissociative ou par diffusion ambipolaire sont négligeables.

Si on désire décrire l'évolution d'une décharge jusqu'à l'état stationnaire, la prise en compte de ces phénomènes de perte serait nécessaire. En effet, sur des temps plus longs (de l'ordre de la centaine de microsecondes), les pertes ne seraient plus négligeables. Au cours du temps, le terme source d'ionisation S_{iz} ainsi que la valeur du champ électrique dans la zone de champ constant diminuent pendant que les termes de pertes augmentent. Ce phénomène va se produire jusqu'à obtenir une compensation du terme S_{iz} par ces termes de pertes, permettant ainsi l'apparition d'une réelle colonne positive de l'ordre d'une dizaine de volts par centimètres. Il est à noter que ce type de simulation n'est pas possible à l'aide de notre code, le schéma numérique étant explicite, il ne peut pas simuler des très longs temps de décharge.

** courbes de 1^{er} système négatif et 2^{eme} système positif*

Expérimentalement, on mesure l'intensité lumineuse des raies émises par le premier système négatif et le second système positif. Ces intensités sont respectivement proportionnelles au peuplement de l'état B de l'ion N_2^+ et de l'état C de la molécule d'azote. Nous pouvons donc approximer ces intensités de raies en calculant les différents peuplements à l'aide des grandeurs caractéristiques de la décharge.

Dans le calcul de ces deux systèmes, nous ne considérons dans un premier temps que le peuplement par impact électronique à partir de la molécule d'azote dans son état fondamental suivant les réactions [α -4] et [α -10].

Les termes d'excitation sont calculés à partir de l'expression suivante :

$$S_{1N,2P}(T_e, n_e, N) = N n_e \int_0^{\infty} \sigma_{1N,2P}(\varepsilon) w(\varepsilon) f_L(\varepsilon) d\varepsilon$$

où N représente la densité du gaz neutre, n_e la densité électronique, $w(\varepsilon)$ la vitesse microscopique, $f_L(\varepsilon)$ la fonction de distribution de Lucas^{[8], [9]} et $\sigma_{1N,2P}(\varepsilon)$ les sections efficaces d'excitation par impact électronique données par Hartmann^[10] et présentées sur les figures A-5 et A-6.

La mesure du premier système négatif devrait nous permettre de vérifier la présence d'électrons de haute énergie dans certaines zones de la décharge. Il remplit correctement son rôle dans la chute cathodique mais s'avère inefficace dans la lueur négative.

Quant à lui, le second système positif nous montre effectivement bien la présence d'une colonne positive dans l'espace interélectrodes.

IV - CONCLUSION

La discordance la plus frappante entre l'expérience et la simulation numérique provient de la structure même de la décharge. Dans les conditions expérimentales, la lueur négative remplit en majorité l'espace interélectrodes alors que l'approche numérique montre une lueur négative quasi inexistante et un espace interélectrodes constitué essentiellement d'une zone à champ constant. Cette zone existe expérimentalement en début de décharge pour des temps de décharge faibles devant les temps de post-décharge. Il est donc nécessaire de faire disparaître cette zone qui n'existe pas pour des temps d'impulsions plus longs.

Ces incohérences entre la structure expérimentale de la décharge et la structure obtenue à l'aide de la simulation peuvent provenir de plusieurs phénomènes:

- le modèle adopté ne tient pas assez en compte le phénomène de déséquilibre des électrons. Il décrit assez bien les zones où les particules chargées sont en équilibre avec le champ électrique local, comme par exemple la zone à champ constant. Mais dans des zones de fort déséquilibre comme la lueur négative où le champ électrique est très faible alors que certains électrons possèdent encore une énergie élevée, ce type de modèle se révèle incompetent.
- Les différentes expériences menées au laboratoire nous ont permis d'apercevoir l'apparition d'une colonne positive dans des cas particuliers de décharge (augmentation du temps de post-décharge avec diminution du temps de décharge). Ces conditions permettent d'obtenir des conditions initiales de décharge identiques à chaque début de cycle et de limiter ainsi les effets du chauffage du gaz porteur. Considérer le gaz porteur

comme un thermostat à la température de 293 K s'avère être une hypothèse erronée. Il faut donc, pour obtenir une structure de décharge cohérente, prendre en compte l'évolution dynamique du gaz porteur.

Nous allons décrire dans le chapitre suivant les améliorations apportées au modèle électrique pour obtenir une meilleure description de la décharge. Le nouveau modèle à deux populations d'électrons va nous permettre de mieux tenir compte des zones de fort déséquilibre et des différents mécanismes d'ionisation.

Bibliographie du chapitre C

- [1] BAYLE P. et CORNEBOIS B., Phys. Rev. A, **31**, 1046, (1985)
- [2] BAYLE P., VACQUIE J., BAYLE M., Phys. Rev. A., **34**, 360, (1986)
- [3] BAYLE P., VACQUIE J., BAYLE M., Phys. Rev. A., **34**, 372, (1986)
- [4] BAYLE P. et PERRIN A., Phys. Rev. E, **47**, (1993)
- [5] Y.P. RAIZER, "Gas discharge physics", Ed. Springer-Verlag, Berlin Heidelberg (1991)
- [6] L.J. KIEFFER, G.H. DURM, Rev. Mod. Phys., 38, 1, (1966)
- [7] J.P. BORIS, D.L. BOOK, J. Comp. Phys., **11**, 38, (1973)
- [8] J. LUCAS, Int. J. Electronics, **22**, 529, (1967)
- [9] J. LUCAS, Int. J. Electronics, **29**,465, (1970)
- [10] G. HARTMANN, Thèse de doctorat de l'université PARIS VI, Orsay, (1977)



Chapitre D

MODELE A DEUX POPULATIONS D'ELECTRONS

I - INTRODUCTION

Dans une décharge luminescente, l'ionisation est due à deux phénomènes bien distincts (cf. Introduction) :

- L'ionisation qui s'effectue dans la lueur négative est provoquée par les électrons émis par la cathode (lors du bombardement ionique) qui sont accélérés dans la chute cathodique et déposent leur énergie sous forme de collisions inélastiques dans la lueur négative. Ce processus n'est pas local, l'énergie gagnée dans la gaine est déposée dans la lueur négative.
- Par contre, dans la colonne positive, l'énergie gagnée par les électrons est localement compensée par l'énergie perdue sous forme de collisions. Ce processus peut être traité dans le cadre de l'hypothèse de l'équilibre local.

Il est donc nécessaire, afin de bien modéliser la décharge, de distinguer ces deux mécanismes d'ionisation: l'ionisation par les électrons primaires issus de l'émission secondaire et l'ionisation par les électrons en équilibre avec le champ électrique local.

La figure D-1 représente les variations spatiales de la fonction de distribution des électrons dans la région cathodique d'une décharge luminescente normale continue dans l'hélium ($P = 1$ torr, $U = 150$ Volts, $d = 15$ mm). Elle a été obtenue^[1] par résolution de l'équation de Boltzmann par une méthode de Monte-Carlo en supposant connu le profil du champ électrique (modèle non auto-cohérent). Cette figure nous permet de bien visualiser l'existence de deux groupes d'électrons:

- les électrons rapides, présents dans la gaine sous forme d'un faisceau de haute énergie (quelques centaines d'eV).
- les électrons de faible énergie présents en grand nombre dès la lisière de la lueur négative.

La méthode la plus simple pour inclure ces différents processus d'ionisation consiste à utiliser un modèle fluide à deux populations d'électrons^{[2], [3]}.

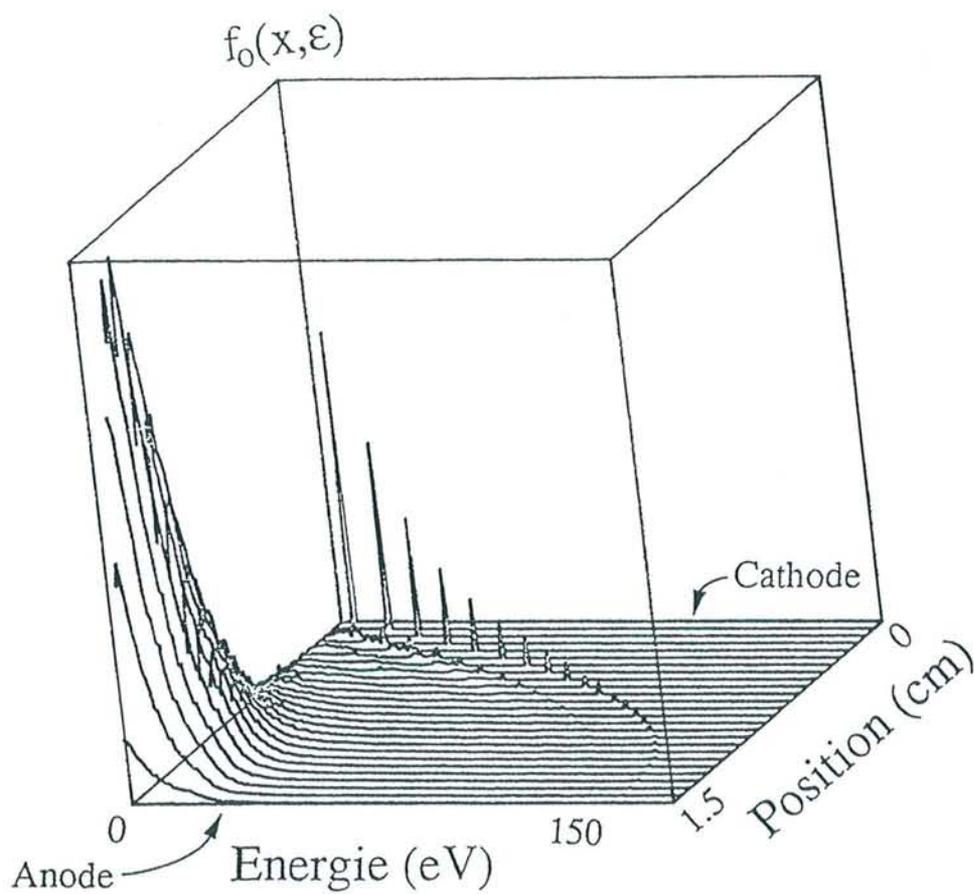


Figure D-1: Variations spatiales de la fonction de distribution en énergie des électrons dans une décharge lumineuse normale continue dans l'hélium ($P = 1.0$ Torr, $U = 150$ Volts)^[1]

II - MODELES A DEUX GROUPE D'ELECTRONS

L'ionisation dans ce régime de décharge est produite selon deux mécanismes bien différents. La manière idéale de les représenter dans un seul modèle serait, comme nous l'avons vu au chapitre B, de résoudre intégralement les équations de Boltzmann pour toutes les particules chargées présentes dans la décharge. Cette modélisation, mise au point à partir de code particulière de type PIC associé à une méthode de Monte Carlo serait beaucoup trop gourmande en temps de calcul, compte tenu de gamme de pression considérée.

Pour remédier à ce problème, Ingold^[4] a tout d'abord tenté d'introduire une fonction de distribution en énergie pour les électrons, présentant une fonction de Dirac pour modéliser les électrons rapides. Les résultats obtenus étaient satisfaisants mais le modèle présentait des problèmes de convergence numérique.

Une approche plus simplifiée serait donc de considérer dans un modèle fluide deux populations distinctes d'électrons. Phelps et al^[5] ont utilisé un modèle analytique pour l'étude de décharges dans l'azote et l'hydrogène avec un champ électrique constant. Ils ont constaté que dans le cas de l'azote, les sections efficaces ont une dépendance en $\frac{1}{\varepsilon} \ln(\varepsilon)$ par rapport à l'énergie ε .

Des modèles numériques considérant deux groupes d'électrons ont été développés dans le cadre des décharges luminescentes continues. Ils s'appuient sur des modèles fluides d'ordre un afin d'obtenir l'état stationnaire d'une décharge dans l'azote pour Surendra^[6] et dans l'Hélium pour Boeuf et Segur^[7].

Plus récemment, ces modèles ont été utilisés^[8] afin de simuler des décharges de type radio fréquence.

Nous avons utilisé ici pour modéliser la décharge un modèle fluide monodimensionnel basé sur les trois premiers moments de l'équation de Boltzmann en séparant les électrons en deux groupes distincts:

- les électrons "rapides" émis par la cathode lors du bombardement ionique de celle-ci et représentés par un faisceau monocinétique.
- les électrons "lents" provenant de l'ionisation dans la lueur négative et la colonne positive. Ils sont représentés par une fonction de distribution maxwellienne à la température électronique T_e donnée par leur équation d'énergie.

Nous allons maintenant donner les équations utilisées dans ce modèle:

2.1 - Equations de conservation de la densité:

- pour les électrons rapides (indice r)

$$\frac{\partial n_r}{\partial t} + \frac{\partial n_r u_r}{\partial x} = S_{iz}^{r \rightarrow r} - S_{el.}^{r \rightarrow l} \quad [\delta-1]$$

- pour les électrons lents (indice l)

$$\frac{\partial n_l}{\partial t} + \frac{\partial n_l u_l}{\partial x} = S_{iz}^{l \rightarrow l} + S_{iz}^{r \rightarrow l} + S_{el.}^{r \rightarrow l} \quad [\delta-2]$$

- pour les ions positifs

$$\frac{\partial n_+}{\partial t} + \frac{\partial n_+ u_+}{\partial x} = S_{iz}^{l \rightarrow l} + S_{iz}^{r \rightarrow l} + S_{iz}^{r \rightarrow r} \quad [\delta-3]$$

Les électrons secondaires créés par ionisation dans la chute cathodique sont supposés rejoindre instantanément le groupe des électrons rapides:

$$S_{iz}^{r \rightarrow r} = \begin{cases} N n_r u_r \sigma_{iz}(\varepsilon_r) & \text{dans la chute cathodique} \\ 0 & \text{dans les autres zones} \end{cases}$$

Lorsque l'ionisation par les électrons rapides se produit dans la lueur négative, les électrons secondaires rejoignent le corps des électrons lents:

$$S_{iz}^{r \rightarrow l} = \begin{cases} 0 & \text{dans la chute cathodique} \\ N n_r u_r \sigma_{iz}(\varepsilon_r) & \text{dans les autres zones} \end{cases}$$

Dès que les électrons rapides n'ont plus suffisamment d'énergie pour ioniser le gaz, c'est à dire lorsque leur énergie ε_r devient inférieure au seuil d'ionisation ε_{iz} , ils perdent leur énergie sous forme de collisions élastiques et se thermalisent pour rejoindre le corps des électrons lents:

$$S_{el.}^{r \rightarrow l} = \begin{cases} 0 & \text{dans la chute cathodique} \\ 0 & \text{dans les autres zones si } \varepsilon_r > \varepsilon_{iz} \\ N n_r u_r \sigma_{el.}(\varepsilon_r) & \text{dans les autres zones si } \varepsilon_r < \varepsilon_{iz} \end{cases}$$

L'ionisation par les électrons lents excités par le champ électrique présent dans la colonne positive est calculée de la même manière qu'au chapitre précédent en remplaçant la fonction de distribution de Lucas par une Maxwellienne:

$$S_{iz}^{l \rightarrow l} = N n_l \int_0^\infty \sigma_{iz}(\varepsilon) w(\varepsilon) f_M(\varepsilon) d\varepsilon$$

En regardant les expressions des différents termes sources pour les équations de conservation de la densité, on constate qu'un des paramètres importants est la frontière entre la fin de la chute cathodique et le début de la lueur négative. Le début de la lueur négative a été fixé^[8] à l'endroit où le champ électrique devient inférieur à 10 V/cm.

2.2 - Equations de conservation de la quantité de mouvement

- pour les électrons rapides

Les électrons rapides étant supposés monocinétiques, l'équation de conservation de la quantité de mouvement et l'équation d'énergie ne forment qu'une seule et même équation. Cette équation sera développée un peu plus bas en tant qu'équation de conservation de l'énergie.

- pour les électrons lents

On reprend la même formulation qu'au chapitre précédent en ne changeant que le terme source d'ionisation provenant de l'équation de conservation de la densité d'électrons lents. Cette équation devient alors:

$$\frac{\partial u_l}{\partial t} + u_l \frac{\partial u_l}{\partial x} = \frac{e}{m_e} \left[E - \frac{1}{n_l} \frac{\partial n_l T_l}{\partial x} \right] - u_l \frac{S_{iz}^{l \rightarrow l} + S_{iz}^{r \rightarrow l} + S_{el}^{r \rightarrow l}}{n_l} - u_l v_l(E) \quad [\delta-4]$$

- pour les ions

Les ions étant toujours supposés en équilibre avec le champ électrique local, l'équation de conservation de la quantité de mouvement se résume à une simple équation de mobilité:

$$u_+ = \mu_+ \frac{E}{N} \quad [\delta-5]$$

2.3 - Equations de conservation de l'énergie

- pour les électrons rapides

Le troisième moment de l'équation de Boltzmann donne, pour des électrons monoénergétiques, l'équation suivante:

$$\frac{\partial n_r \varepsilon_r}{\partial t} + \frac{\partial n_r u_r \varepsilon_r}{\partial x} = e n_r u_r E + \int \frac{1}{2} m w^2 \left(\frac{\partial f_r}{\partial t} \right)_{coll.} dw \quad [\delta-6]$$

expression du terme de transfert d'énergie par collision:

Les électrons rapides étant modélisés par un faisceau monocinétique, ce terme peut s'exprimer sous la forme:

$$\int \frac{1}{2} m w^2 \left(\frac{\partial f_r}{\partial t} \right)_{coll.} dw = N n_r u_r \varepsilon_r \sum_k \varepsilon_k \sigma_k(\varepsilon_r) \quad [\delta-7]$$

où $\sigma_k(\varepsilon)$ est la section efficace correspondant au processus k ($k = iz$ pour l'ionisation) et ε_k l'énergie de seuil de ce même processus.

En se servant de l'équation de conservation de la densité des électrons rapides et de l'expression $\varepsilon_r = \frac{1}{2} m_e u_r^2$, l'équation d'énergie [δ-5] devient:

$$\frac{\partial u_r}{\partial t} + u_r \frac{\partial u_r}{\partial x} = \frac{eE}{m_e} - \frac{N}{m_e} \left[\sum_k \varepsilon_k \sigma_k(\varepsilon_r) + \varepsilon_r \sigma_{iz}(\varepsilon_r) \right] \quad [\delta-8]$$

- pour les électrons lents

L'équation de conservation de l'énergie pour les électrons lents reste inchangée. Elle est donc similaire à l'équation [γ-1] donnée au chapitre précédent:

$$\frac{\partial T_l}{\partial t} + u_l \frac{\partial T_l}{\partial x} = \frac{2}{3} \left[u_l E - \frac{1}{n_l} \frac{\partial (n_l T_l u_l)}{\partial x} - \psi(T_l) v_d(\psi(T_l)) \right] \quad [\delta-9]$$

2.4 - Calcul du champ électrique

L'équation de Poisson nous donne à chaque instant le profil du champ électrique:

$$\frac{\partial E}{\partial x} = \frac{e}{\varepsilon_0} (n_+ - n_l - n_r) \quad [\delta-10]$$

où le champ électrique E doit vérifier la condition : $V_G = \int_0^d E(x) dx$

avec V_G potentiel appliqué aux électrodes

d distance interélectrodes

2.4 - Conditions aux limites

- A la cathode:

- pour les électrons rapides

La cathode est considérée comme une source d'électrons rapides par émission secondaire lors de son bombardement par les ions. Ce qui nous donne la relation:

$$(n_r u_r)_{cath.} = \gamma_i (n_+ u_+)_{cath.} \quad [\delta-11]$$

En supposant que les électrons émis par la cathode possèdent une énergie $\varepsilon_r^{cath.} = 1 \text{ eV}$, on peut déduire de l'expression précédente [δ-10] la densité des électrons rapides à la cathode:

$$n_r^{cath.} = \gamma_i (n_+ u_+) \sqrt{\frac{2}{m_e}} \quad [\delta-12]$$

- pour les électrons lents

La densité d'électrons lents est nulle à la cathode:

$$n_l^{cath.} = 0 \quad [\delta-13]$$

- A l'anode:

L'anode sert de collecteur pour les électrons, aucun ion ne peut donc l'atteindre:

$$n_+^{anode} = 0 \quad [\delta-14]$$

2.5 - Méthode numérique de résolution

Ce nouveau système d'équations est résolu de la même façon qu'au chapitre précédent. Nous avons donc utilisé un schéma centré aux différences finies utilisant la technique de correction de flux F.C.T. (cf. annexes A, B et C).

La présence de plus forts gradients nous impose de réduire le pas d'espace Δx . L'espace interélectrodes a donc été divisé en 320 cellules, correspondant à un pas d'espace $\Delta x = 0,125 \text{ mm}$. Ce qui nous oblige à réduire le pas de temps ($\Delta t = 2,5 \cdot 10^{-11} \text{ sec.}$) afin de respecter la condition de stabilité C.F.L.

III - RESULTATS NUMERIQUES ET COMPARAISON AVEC L'EXPERIENCE

Ce nouveau code numérique nous permet d'obtenir, de façon similaire au code précédent, les évolutions spatio-temporelles des grandeurs suivantes:

- le courant de décharge $I(t)$.
- les densités des électrons rapides $n_r(x,t)$, des électrons lents $n_l(x,t)$
- la densité ionique $n_+(x,t)$.
- la température électronique des électrons lents $T_l(x,t)$.
- l'énergie des électrons rapides $\mathcal{E}_r(x,t)$.
- le champ électrique $E(x,t)$.
- les émissions du 1^{er} système négatif $S_{1N}(x,t)$ et du 2nd système positif $S_{2P}(x,t)$.

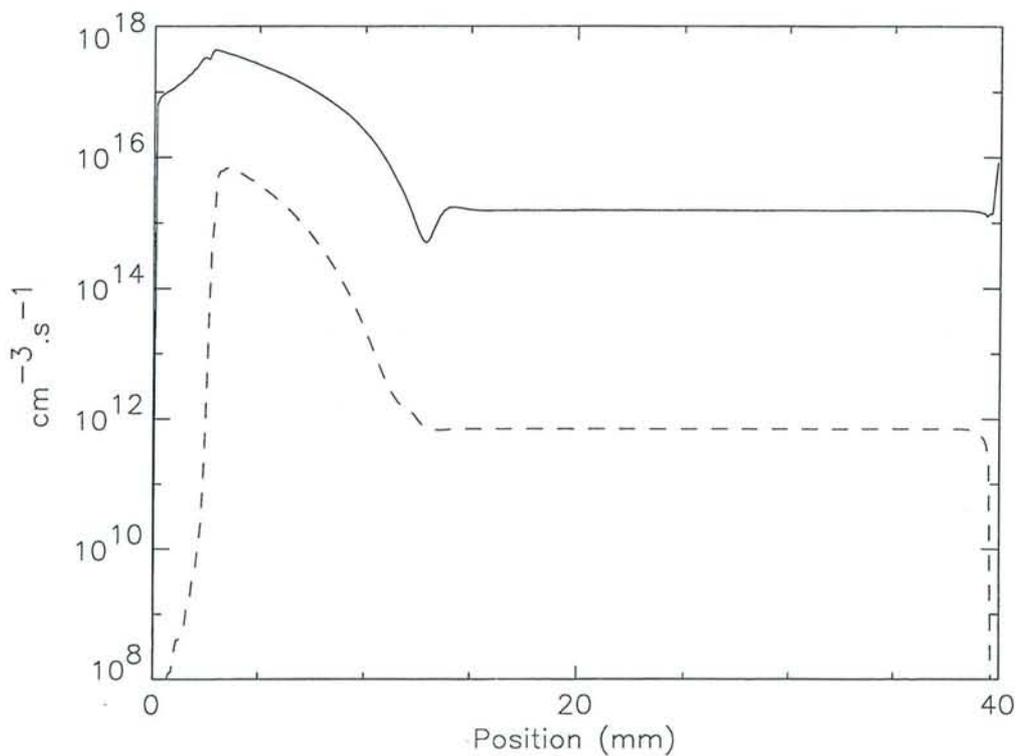


Figure D-2 : Comparaison à $t = 5 \mu\text{s}$ entre les amplitudes du terme source d'ionisation S_{iz} (courbe continue) et du terme de perte par recombinaison dissociative (courbe en pointillés) pour $U = 1000$ volts et $P = 1$ Torr

Comme au chapitre précédent et comme l'indique la figure D-2, le terme de perte par recombinaison dissociative peut être négligé dans les équations de conservation de la densité. Cette approximation est maintenant aussi valable dans les zones de champ électrique faible. Car la prise en compte de deux populations d'électrons a permis de rendre plus réaliste le calcul du terme d'ionisation dans cette zone. L'ordre de grandeur du terme source d'ionisation S_{iz} dans la zone de champ constant est plus élevé (de l'ordre de $10^{15} \text{ cm}^{-3}\text{s}^{-1}$) que celui calculé à l'aide du premier modèle. Ceci provient essentiellement du fait qu'il a été évalué au bout de $5 \mu\text{s}$. En continuant cette simulation sur des temps plus grands, on constate de façon similaire au premier modèle que la température électronique dans cette zone décroît avec le temps, entraînant ainsi une diminution du terme source d'ionisation (cf. figure C-25).

Nous allons maintenant donner l'évolution temporelle du courant de décharge ainsi qu'une comparaison avec les courants obtenus expérimentalement. Nous présenterons ensuite les évolutions spatiales des grandeurs caractéristiques du plasma en fonction de la pression.

3.1 - Evolution temporelle du courant de décharge $I(t)$

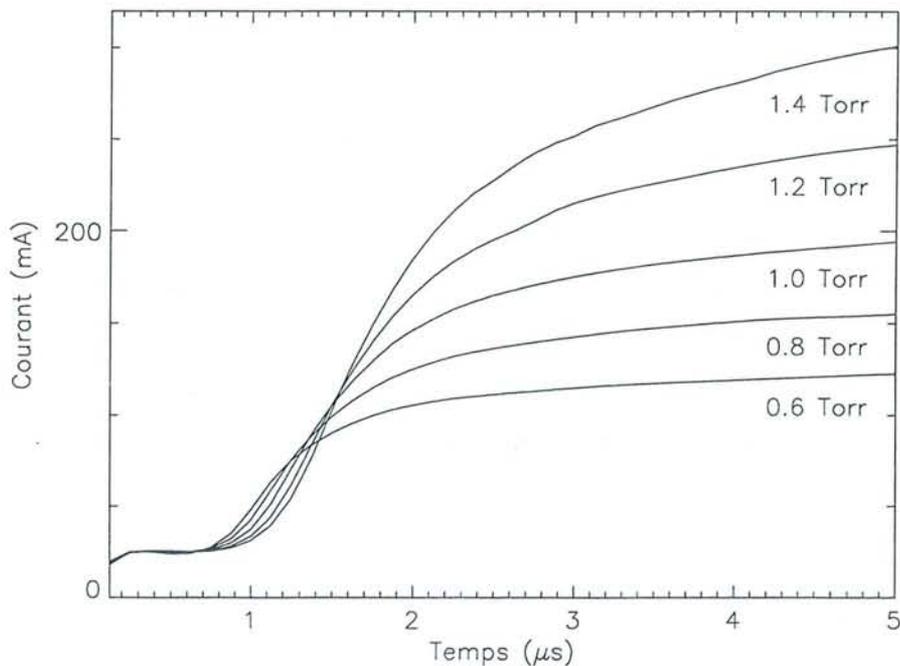


Figure D-3 : Evolution temporelle du courant de décharge $I(t)$ ($U = 1000 \text{ Volts}$)

La figure D-3 présente l'évolution temporelle du courant de décharge pour des pressions variant de 0,6 à 1,4 Torr et une tension de 1000 Volts. L'état «quasi-stationnaire» est atteint plus rapidement qu'avec le modèle précédent (environ 5 μ s). Ceci peut s'expliquer par une meilleure prise en compte des mécanismes d'ionisation. On peut remarquer que si l'on poursuit cette simulation sur des temps plus longs, on obtient une meilleure stabilisation du courant. Le terme source d'ionisation devenant nettement plus faible.

Dans ce nouveau modèle, le coefficient d'émission secondaire γ joue un rôle prépondérant dans les mécanismes d'ionisation. La cathode étant considérée comme une source d'électrons rapides, ce coefficient contrôle le flux entrant d'électrons rapides. Il nous permet, pour une pression donnée, d'obtenir un bon accord quantitatif entre les courants calculés à l'aide du modèle et ceux mesurés expérimentalement. Le tableau T-5 présente les différents coefficients d'émission secondaire γ choisis dans ce modèle en fonction de la pression. Ils ont été évalués de façon à obtenir les mêmes courants pour une tension de 1000 Volts.

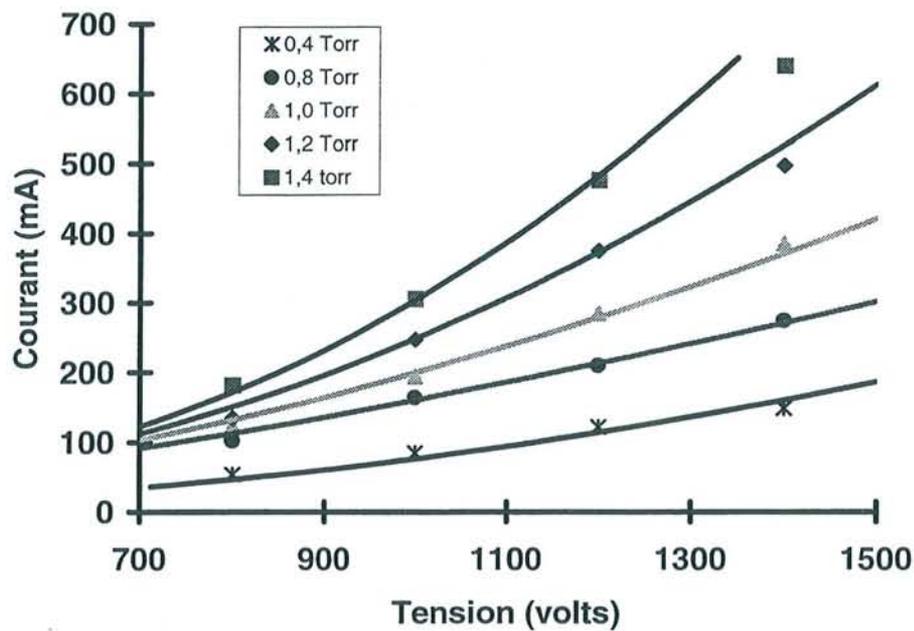


Figure D-4 : Comparaison du courant de décharge entre expérience (courbes continues) et simulation (symboles)

Pression (Torr)	0,4	0,6	0,8	1,0	1,2	1,4
Coefficient d'émission secondaire γ	0,09	0,078	0,067	0,06	0,057	0,055

Tableau T-5: Coefficient d'émission secondaire γ en fonction de la pression

La figure D-4 nous montre alors une comparaison en faisant varier la tension entre les courants de décharge obtenus à l'aide de ce modèle au bout de 5 μ s et ceux obtenus expérimentalement en régime pulsé ($t_d = 0,1$ ms, $t_{pd} = 50$ ms). Les courants numériques sont représentés par des symboles alors que les courbes continues représentent les courants expérimentaux obtenus en régime pulsé.

On s'aperçoit que pour une pression donnée, c'est à dire à coefficient γ constant, le courant numérique et le courant expérimental varient de façon similaire en fonction de la tension. On obtient donc avec ce modèle un très bon accord quantitatif sur les courants lorsque l'on simule des décharges de type impulsionsnelles, c'est à dire avec un bref temps de décharge suivi d'un long temps de post décharge.

3.2 - Evolutions spatiales des grandeurs caractéristiques du plasma

Les courbes D-5 à D-10 présentent les évolutions spatiales des grandeurs caractéristiques du plasma telle que la densité des électrons lents, des électrons rapides, des ions, le champ électrique, la température des électrons lents et l'énergie des électrons rapides. Ces résultats ont été obtenus à l'aide de ce code numérique pour une tension de 1000 Volts et une pression variant de 0.6 Torr à 1.4 Torr. La légende des ces figures est donnée au tableau T-6.

Type de traits	Pression	Type de traits	Pression	Type de traits	Pression
— — —	0.6 Torr	— · — · — ·	1.0 Torr	————	1.4 Torr
· — · — · — ·	0.8 Torr	- - - - -	1.2 Torr		

Tableau T-6 : Légende des figures D-5 à D-10

La figure D-9 représente le profil de champ électrique dans l'espace interélectrodes. Elle montre une nette amélioration de la structure de la décharge par rapport au code précédent. La

prise en considération de deux populations d'électrons a donc permis la création d'une réelle lueur négative. Dans cette zone, le champ électrique est quasi nul et la température des électrons lents (donnée figure D-10) est bien conforme à l'expérience (de l'ordre de quelques dixièmes d'eV).

On peut faire plusieurs remarques sur ces courbes:

- La longueur de la lueur négative augmente lorsque la pression diminue, ce qui est conforme à l'expérience. Lorsque l'on diminue la pression, le nombre de collisions diminue proportionnellement, donc les électrons rapides peuvent acquérir une plus grande énergie dans la chute cathodique. Ils ont donc besoin d'un plus long parcours pour se thermaliser.
- Dans la colonne positive, le champ électrique diminue avec la pression. Le courant de décharge diminue lorsque la pression diminue. Le champ électrique nécessaire au raccordement entre la fin de la lueur négative et l'anode devient donc plus faible.

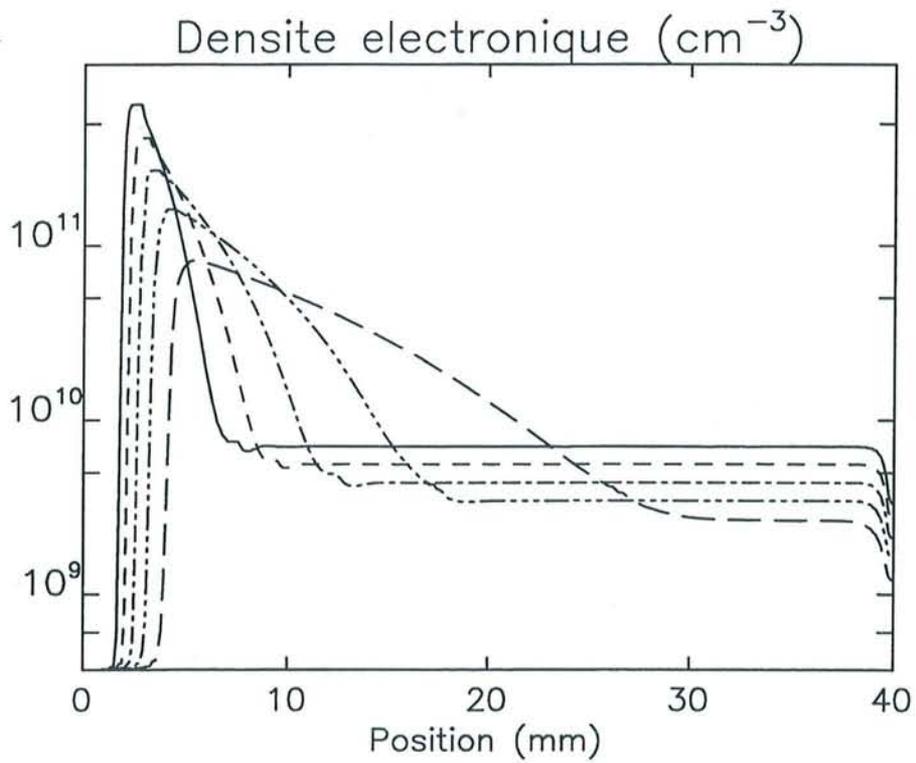


Figure D-5: Densité électronique ($U = 1000$ Volts)

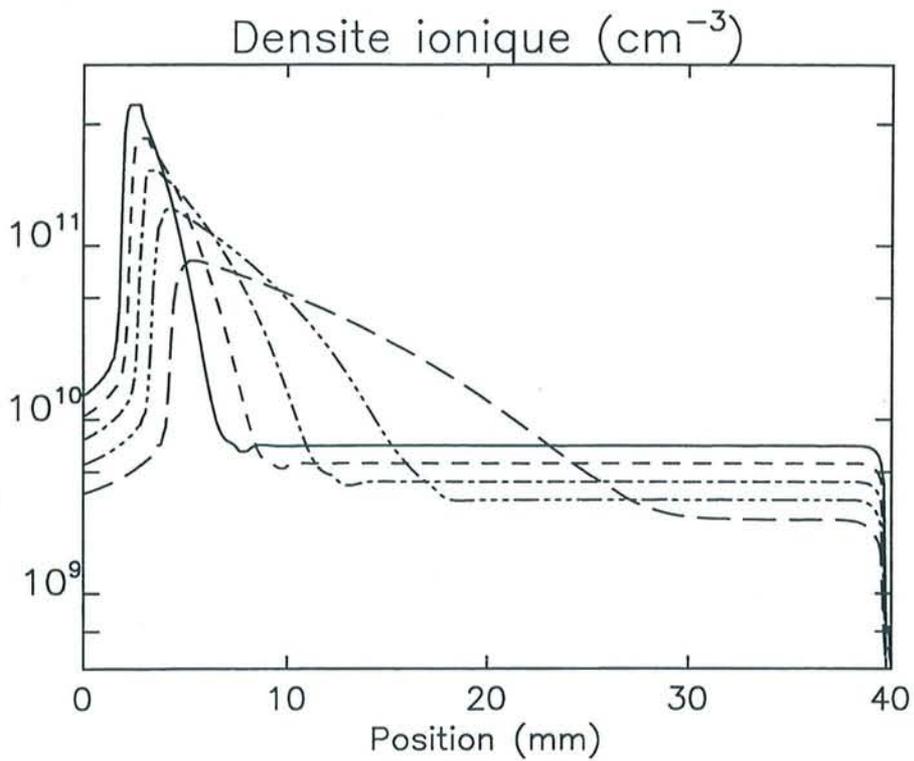


Figure D-6: Densité ionique ($U = 1000$ Volts)

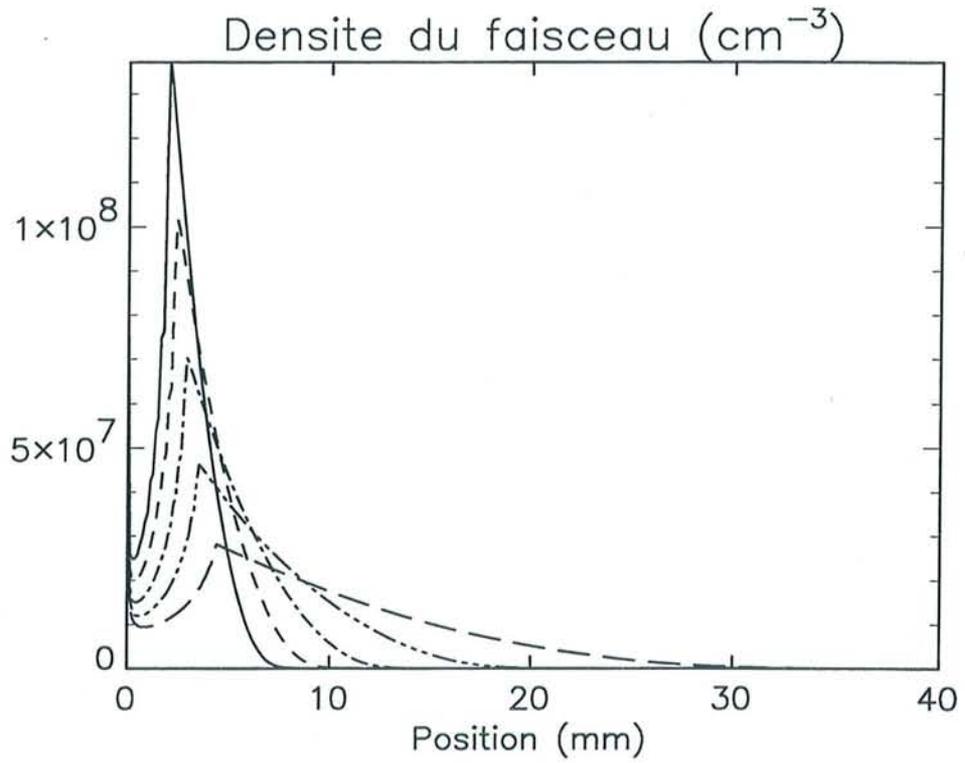


Figure D-7: Densité du faisceau ($U = 1000$ volts)

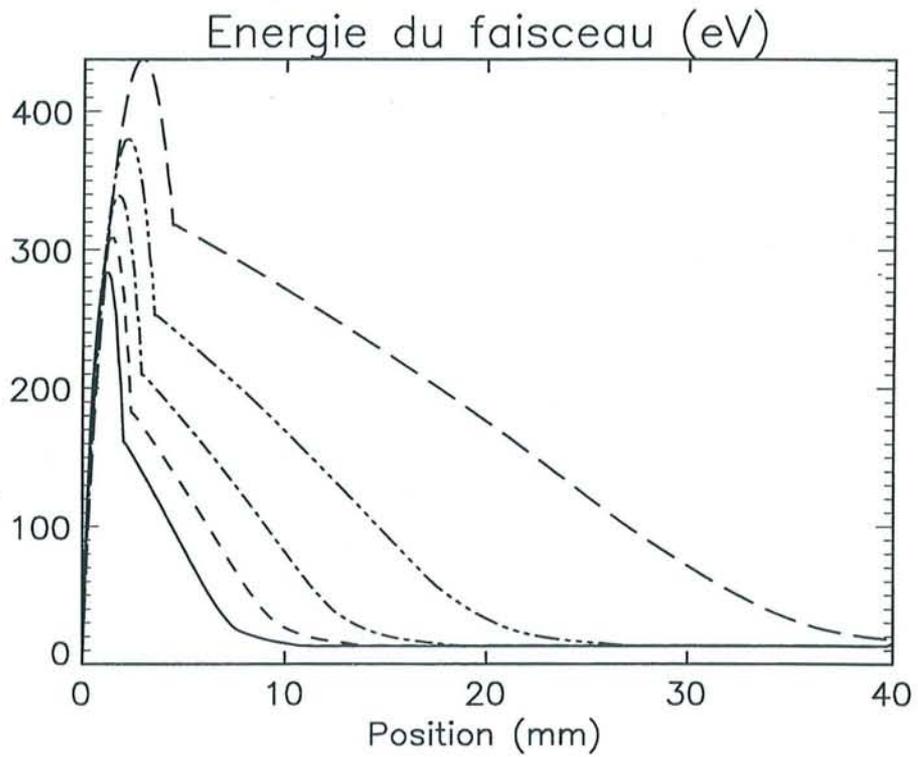


Figure D-8: Energie du faisceau ($U = 1000$ Volts)

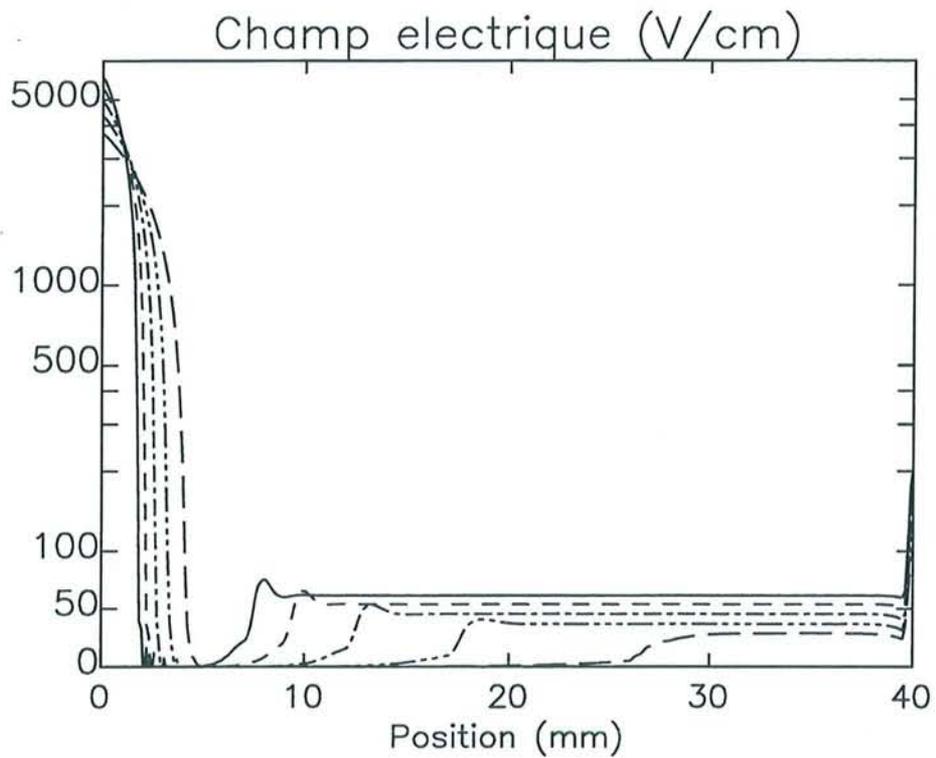


Figure D-9: Champ électrique ($U = 1000$ Volts)

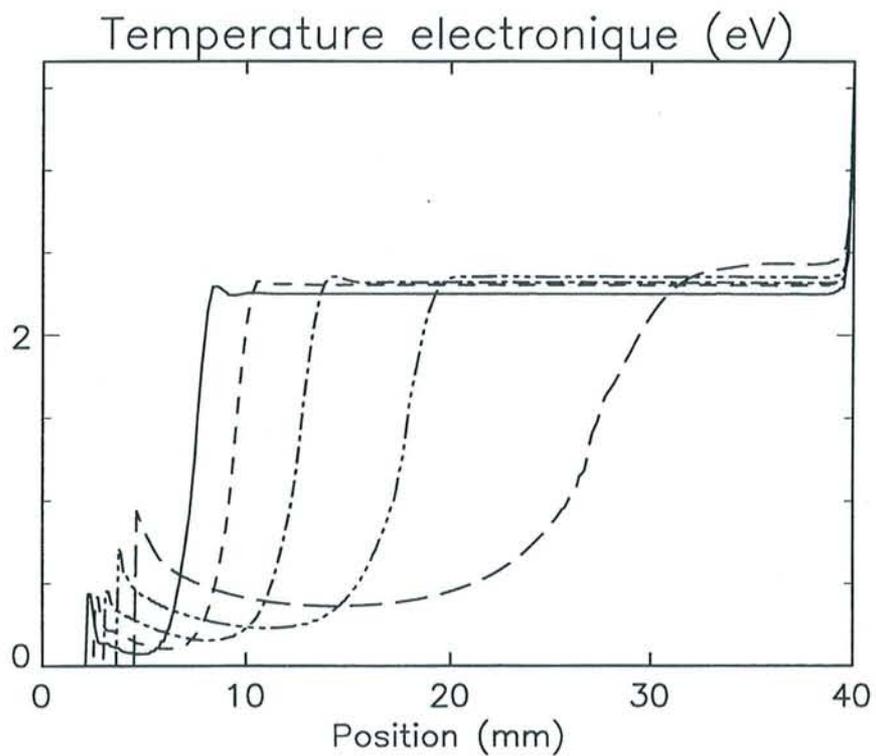


Figure D-10: Température électronique des électrons lents ($U = 1000$ Volts)

3.3 – Présence d'une inversion de champ électrique

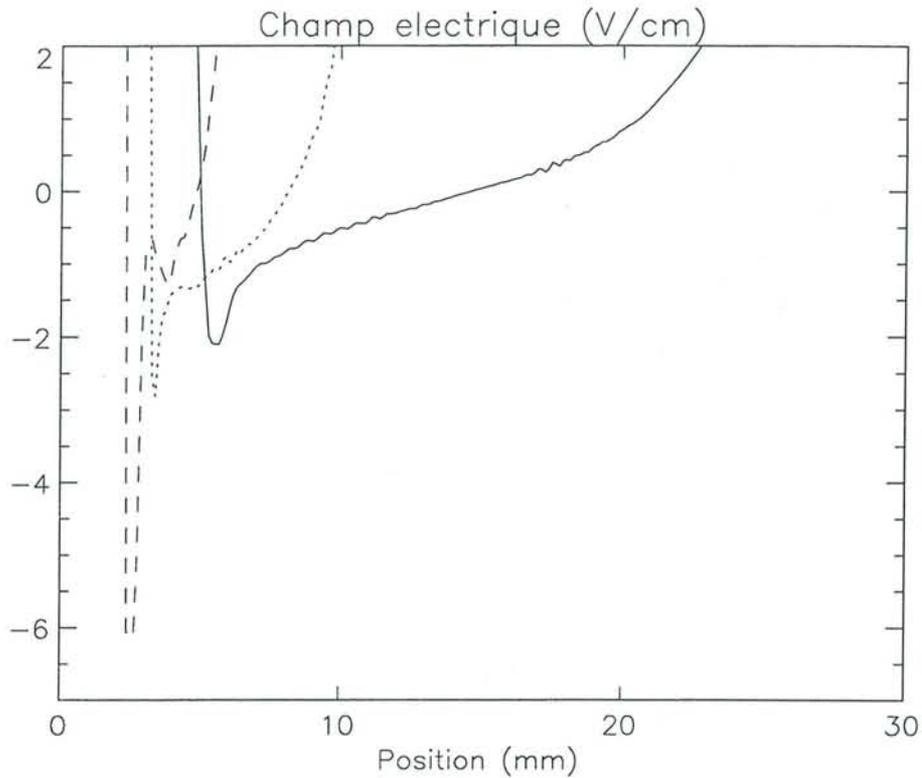


Figure D-11 : Présence d'une inversion de champ électrique dans la lueur négative pour $U = 1000 \text{ V}$

Type de traits	Pression	Type de traits	Pression	Type de traits	Pression
—————	0.6 Torr	-----	1.0 Torr	1.4 Torr

Tableau T-7 : Légende de la figure D-11

Comme le montre la figure D-11, cette modélisation nous a permis d'obtenir une réelle inversion de champ électrique dans la lueur négative. Ceci est possible grâce à l'utilisation de la méthode F.C.T. qui est réversible. Ce phénomène a été déjà constaté expérimentalement par Gottscho^[9] puis confirmé numériquement^{[10], [11]}. N'étant pas dans un état stationnaire, cette double inversion du champ électrique n'est que transitoire, la deuxième inversion devrait se déplacer vers l'anode au cours du temps.

3.4 - Evolution spatiale du premier système négatif

On ne considère dans un premier temps que le peuplement de l'état B de l'ion N_2^+ par impact électronique sur la molécule d'azote dans son état fondamental.

Le terme source d'excitation suivant la réaction [α -4] s'écrit donc:

$$S_{1N}^{(1)} = Nn_l \int_0^\infty \sigma_{1N}^{(1)}(\varepsilon) w(\varepsilon) f(\varepsilon) d\varepsilon + Nn_r \sigma_{1N}^{(1)}(\varepsilon_r) w_r(\varepsilon_r)$$

où n_l représente la densité des électrons lents, n_r la densité des électrons rapides, N la densité du gaz porteur, $w_r(\varepsilon_r)$ la vitesse des électrons rapides en fonction de leur énergie ε_r et $\sigma_{1N}^{(1)}$ la section efficace d'excitation de N_2 suivant la réaction [α -4] donnée figure A-9.

On remarque que l'émission du premier système négatif (courbe D-12) semble proportionnelle à la densité des électrons rapides (courbe D-5). Ce résultat était prévisible d'après le mode de calcul de cette émission (nous n'avons pris en compte que le peuplement direct par impact électronique sur la molécule d'azote suivant la réaction [α -4]) et la forme de la section efficace d'excitation de $N_2(X)$ suivant cette réaction (section efficace à peu près constante pour les énergies élevées).

Dans la chute cathodique, les électrons rapides sont fortement majoritaires. Par contre, dans la lueur négative, ce sont les électrons lents qui sont en plus grand nombre mais leur faible température (de l'ordre de quelques dixièmes d'eV) ne leur permet pas de peupler cet état. On peut donc en conclure que l'émission du premier système négatif dans ces deux zones est principalement dû à la présence des électrons rapides.

Par contre, en colonne positive, les électrons rapides deviennent quasi inexistantes, c'est pourquoi l'intensité de cette raie d'émission dans cette zone, qui est d'un niveau très faible par rapport aux autres zones, provient du peuplement de cet état par les électrons lents.

Nous ne nous sommes intéressés jusqu'à maintenant qu'au peuplement de l'état B de l'ion N_2^+ par impact électronique sur la molécule d'azote. Il est important d'estimer le peuplement de cet état par impact électronique à partir de l'ion N_2^+ dans son état fondamental suivant la réaction [α -5].

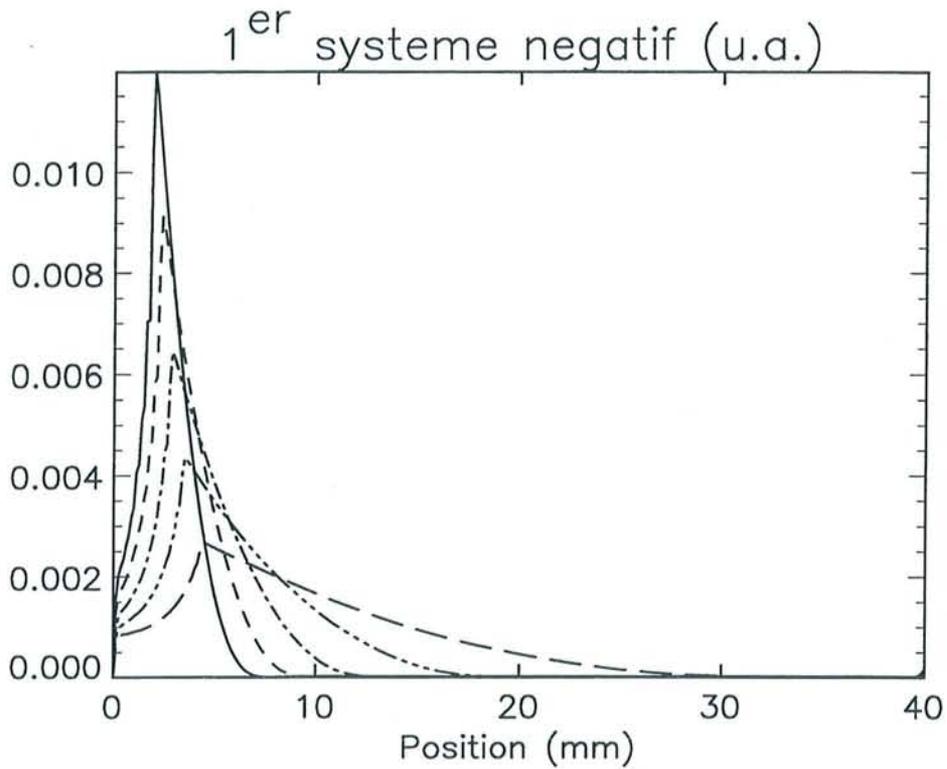


Figure D-12: Premier système négatif (U = 1000 volts)

Le terme d'excitation suivant cette réaction peut alors s'écrire sous la forme:

$$S_{1N}^{(2)} = n_l n_+ \int_0^\infty \sigma_{1N}^{(2)}(\varepsilon) w(\varepsilon) f(\varepsilon) d\varepsilon + n_r n_+ \sigma_{1N}^{(2)}(\varepsilon_r) w_r(\varepsilon_r)$$

où n_l représente la densité des électrons lents, n_r la densité des électrons rapides, n_+ la densité ionique, $w_r(\varepsilon_r)$ la vitesse des électrons rapides en fonction de leur énergie ε_r et $\sigma_{1N}^{(2)}$ la section efficace d'excitation de l'ion N_2^+ suivant la réaction [α -5] donnée figure A-10.

Dans la chute cathodique et la lueur négative

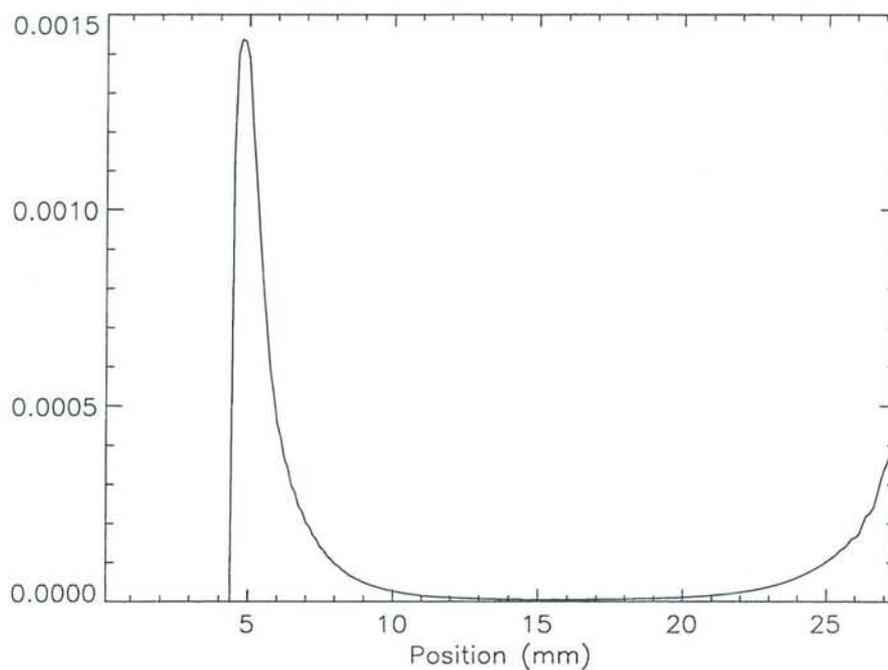


Figure D-13: Rapport $S_{IN}^{(2)} / S_{IN}^{(1)}$ dans la chute cathodique et la lueur négative pour $U = 1000$ Volts et $P = 0.6$ Torr

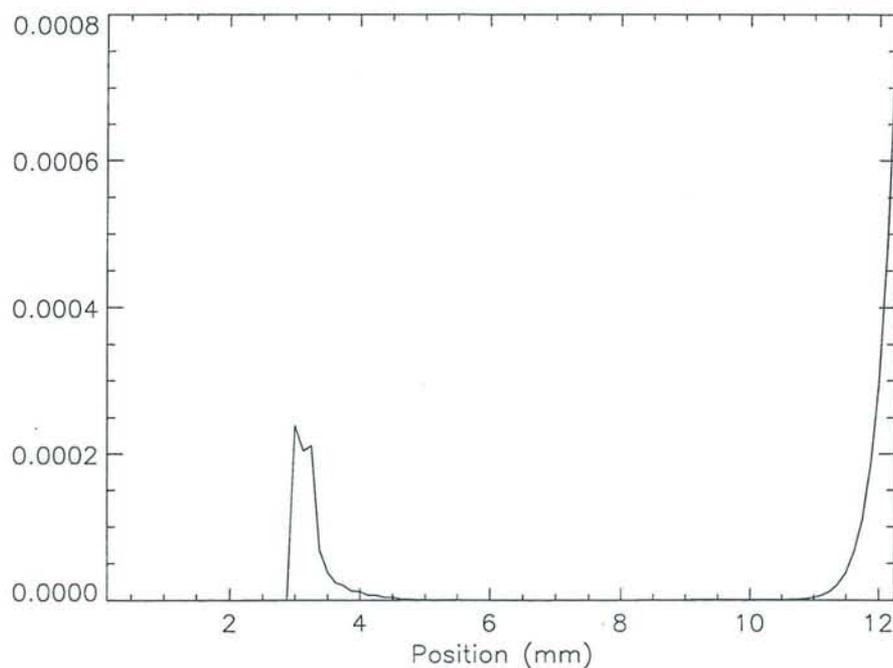


Figure D-14: Rapport $S_{IN}^{(2)} / S_{IN}^{(1)}$ dans la chute cathodique et la lueur négative pour $U = 1000$ Volts et $P = 1.0$ Torr

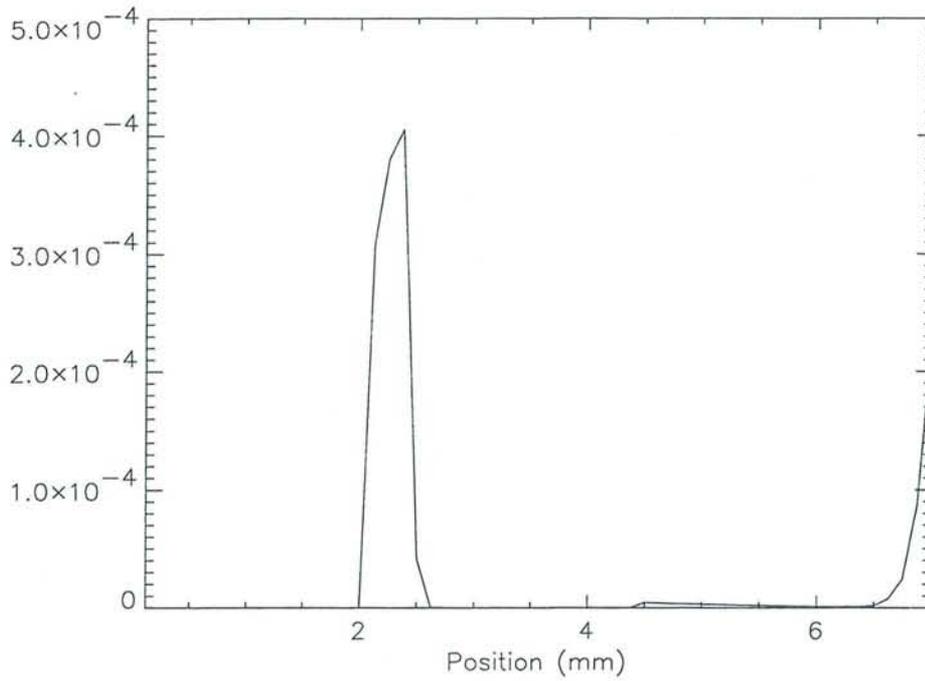


Figure D-15: Rapport $S_{1N}^{(2)} / S_{1N}^{(1)}$ dans la chute cathodique et la lueur négative pour $U = 1000$ Volts et $P = 1.4$ Torr

Dans la colonne positive

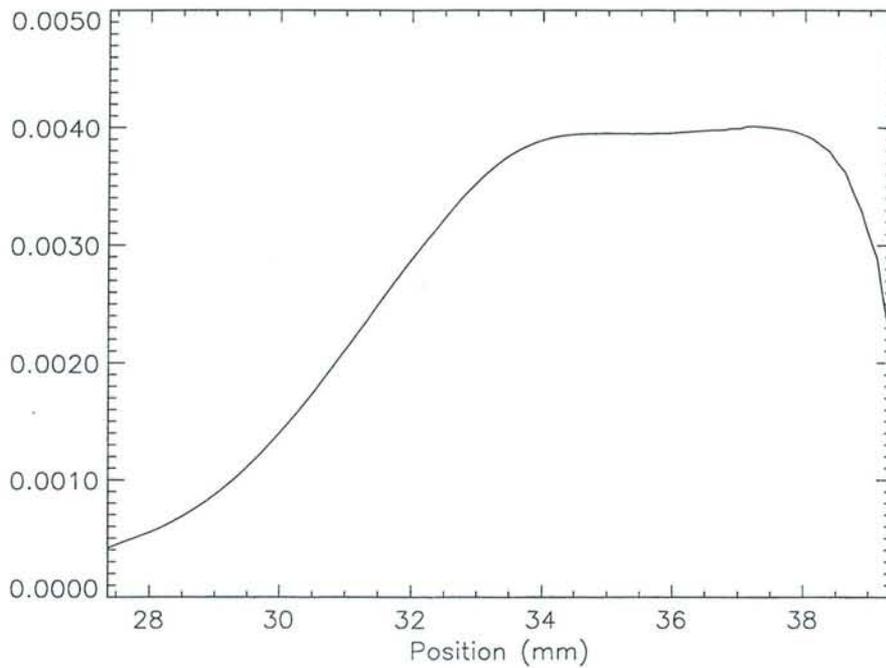


Figure D-16 : Rapport $S_{1N}^{(2)} / S_{1N}^{(1)}$ dans la chute colonne positive pour $U = 1000$ Volts et $P = 0.6$ Torr

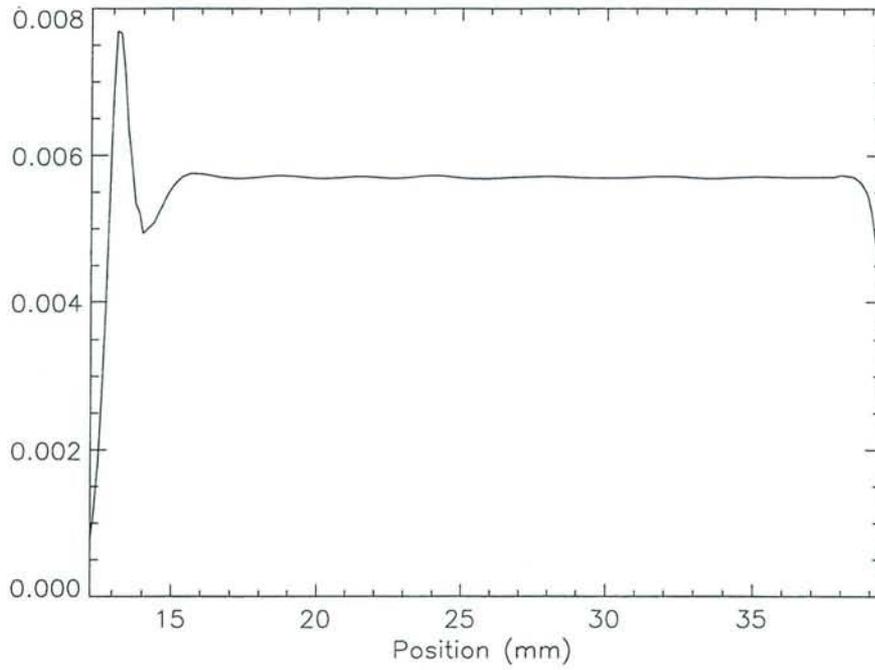


Figure D-17: Rapport $S_{1N}^{(2)} / S_{1N}^{(1)}$ dans la chute colonne positive
pour $U = 1000$ Volts et $P = 1.0$ Torr

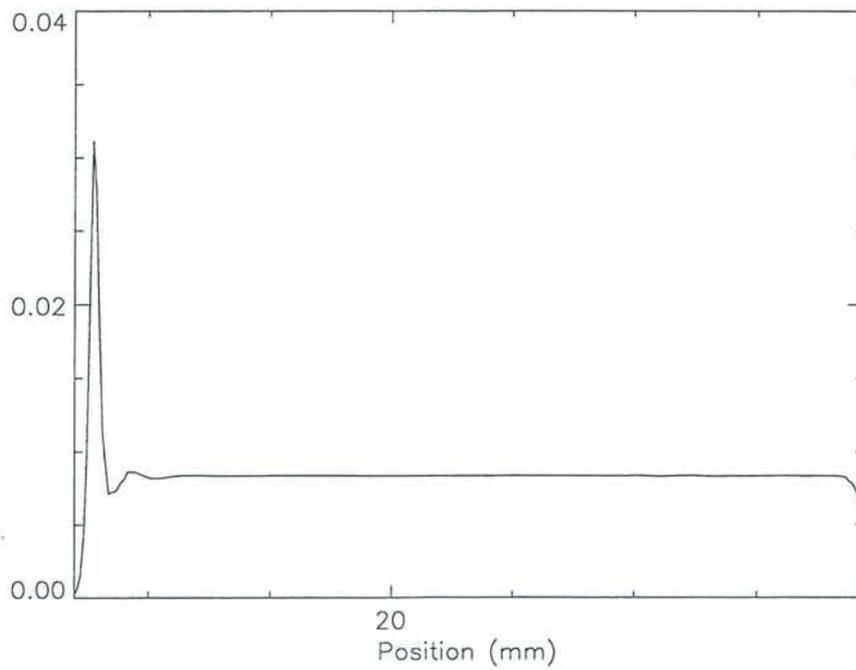


Figure D-18: Rapport $S_{1N}^{(2)} / S_{1N}^{(1)}$ dans la chute colonne positive
pour $U = 1000$ Volts et $P = 1.4$ Torr

Les figures D-13 à D-18 représentent le rapport $S_{1N}^{(2)} / S_{1N}^{(1)}$ du peuplement de l'état B de l'ion N_2^+ par impact électronique sur l'ion N_2^+ dans son état fondamental [α -5] et celui par impact électronique sur la molécule d'azote dans son état fondamental [α -4], suivant les différentes zones de la décharge, pour une tension de 1000 Volts et une pression variant de 0.6 Torr à 1.4 Torr.

Dans la chute cathodique et la lueur négative, le peuplement de l'état B de l'ion N_2^+ se fait principalement grâce aux électrons rapides, qui sont fortement majoritaires dans ces zones. La comparaison entre les différents peuplements suivant les réactions [α -4] et [α -5] ne peut s'effectuer correctement qu'en début de lueur négative. En effet, le modèle choisi ici ne peut tenir compte d'une éventuelle dégradation du faisceau dans la lueur négative. Ceci avantage fortement le peuplement de cet état suivant [α -4] au fur et à mesure que l'on avance dans cette zone. Toutefois, en début de lueur négative, le faisceau ne s'est pas encore dégradé et l'on s'aperçoit tout de même que le peuplement [α -4] est fortement majoritaire devant celui suivant [α -5] (plus de 1000 fois supérieur).

Dans la colonne positive, cette comparaison est beaucoup plus simple. En effet, les électrons rapides ayant quasiment disparus, ces peuplements se font donc principalement grâce aux électrons lents qui sont très bien modélisés dans cette zone. Les figures D-15 à D-17 montrent que là encore, le peuplement suivant [α -4] est largement majoritaire (de l'ordre de 200 fois supérieur).

Il est à noter tout de même que l'émission du premier système négatif reste dans la colonne positive très nettement inférieure à celle de la chute cathodique et de la lueur négative.

Expérimentalement, R. Hugon^[12] a obtenu le même type de conclusion. Il s'est intéressé à l'influence de la durée de la décharge sur l'émission du premier système négatif lors de la phase de post-décharge. La courbe D-18 nous montre la décroissance de cette raie en post-décharge, pour différentes valeurs de temps de décharge.

En début de post-décharge, les électrons énergétiques sont très rapidement thermalisés. Ce phénomène rend donc le peuplement de l'état B de l'ion N_2^+ impossible par impact électronique sur la molécule d'azote suivant la réaction [α -4]. Le seul peuplement de cet état

par impact électronique pouvant rester dans la phase de post-décharge est celui se faisant à partir de l'ion N_2^+ dans son état fondamental [α-5].

En faisant varier le temps de décharge, on s'aperçoit qu'il existe un surpeuplement de cet état en post-décharge par rapport au peuplement par impact électronique [α-5]. M. Capittelli^[13] par simulation et H. Coitout^[14] au niveau expérimental ont montré que l'augmentation du temps de décharge avait pour effet d'augmenter la température vibrationnelle de l'azote moléculaire dans son niveau fondamental $N_2(X, \nu)$. On peut donc penser que ce surpeuplement est lié aux collisions entre N_2^+ et $N_2(X, \nu > 12)$ suivant [α-7].

On s'aperçoit tout de même que pour des temps de décharge faibles, c'est à dire lorsque le peuplement [α-7] est négligeable, le peuplement par impact électronique suivant [α-5] est au moins 500 fois inférieur au peuplement par impact électronique suivant [α-4] (fortement majoritaire dans la phase de décharge).

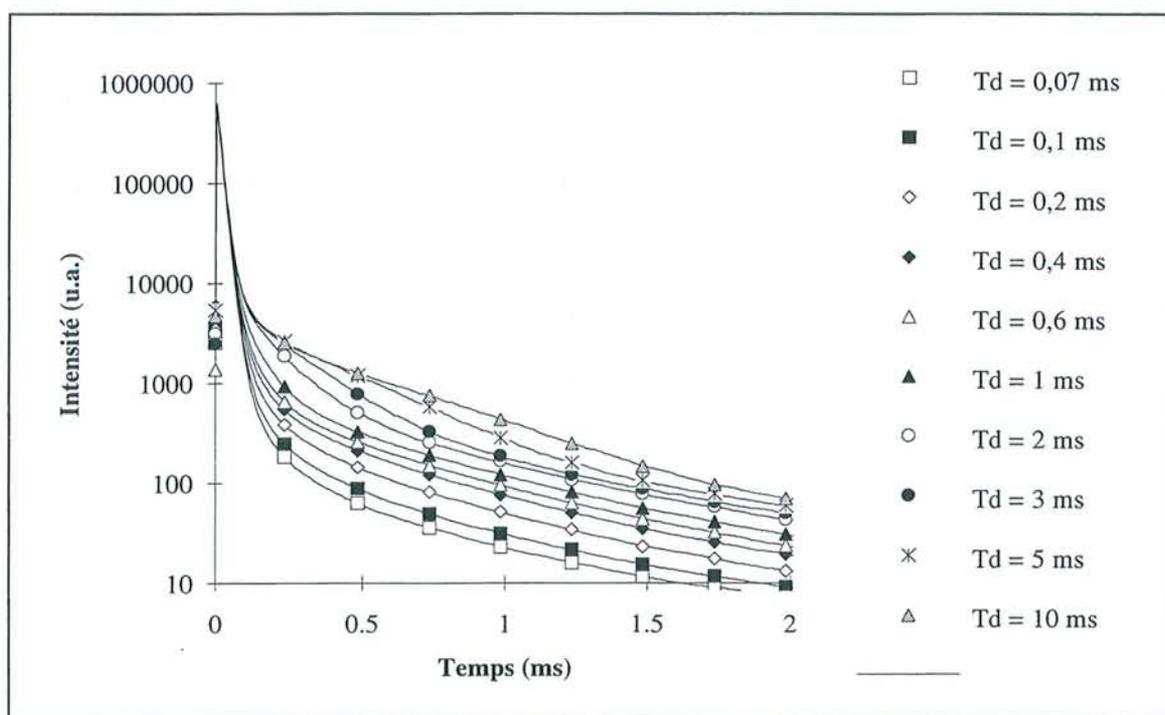


Figure D-19 : Evolution de l'intensité de la raie 391,4 nm en post-décharge pour différents temps de décharge

3.5 – Evolution spatiale du 2^{ème} système positif

Par contre l'émission du second système positif (courbes D-20) n'est pas décrite de façon satisfaisante. Cela peut provenir de plusieurs phénomènes:

- On ne prend pas assez en compte une éventuelle dégradation du faisceau d'électrons rapides dans l'espace interélectrodes. Ceci est d'autant plus sensible que la section efficace d'excitation du second système positif (figure A-11) n'est importante que pour des énergies allant de 10 à 30 eV. Cette gamme d'énergie correspond parfaitement aux électrons secondaires qui sont décrit de manière insatisfaisante dans notre modèle.
- D'autre part, notre modèle ne tient compte que du peuplement direct par impact électronique [α -10]. En particulier, la réaction de pooling [α -11] n'est pas prise en compte.

Il nous permet cependant de connaître l'existence ou non d'une colonne positive pour une pression et une tension données.

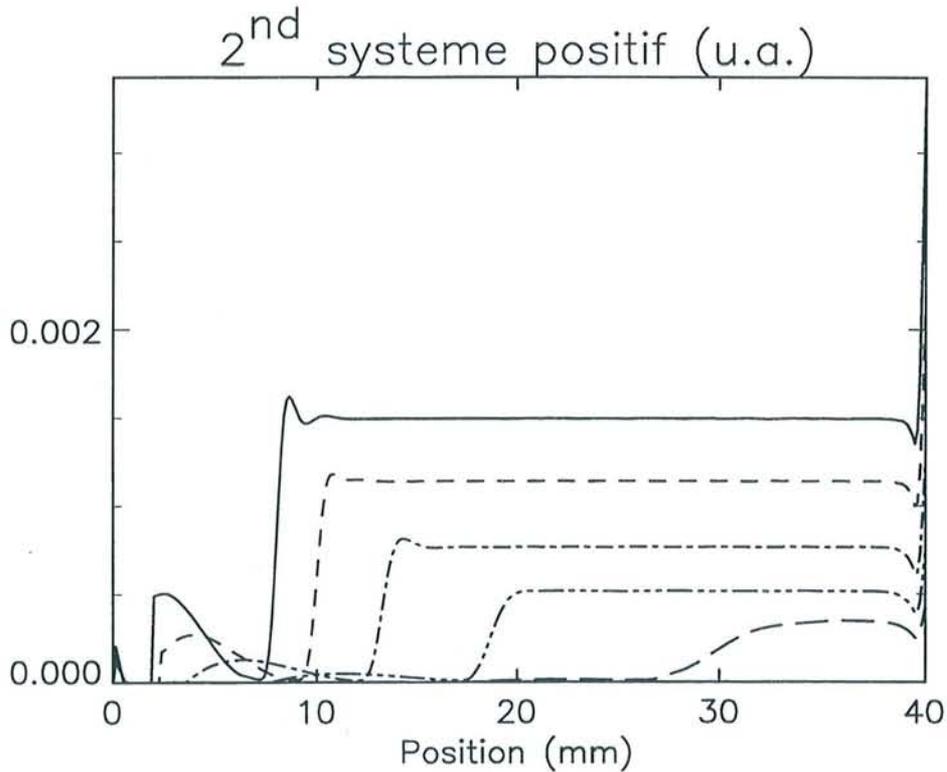


Figure D-20: Second système positif (U = 1000 volts)

IV - ETUDE DE LA LONGUEUR DE LA LUEUR NEGATIVE

4.1 - Longueur théorique de la lueur négative: L_{th} .

Les électrons primaires (issus du bombardement ionique de la cathode) gagnent suffisamment d'énergie pour ioniser le gaz dans la lueur négative. On peut donc considérer cette zone comme étant l'espace où les électrons rapides vont se thermaliser grâce aux collisions ionisantes. On peut donc approximer la longueur théorique de la lueur négative à l'aide de la relation^[14]:

$$L_{th} = \frac{\ln(1+1/\gamma)}{V_C} \int_0^{V_C} l_{iz}(V) dV \quad \text{avec} \quad l_{iz} = \frac{1}{N\sigma_{iz}}$$

où L_{th} est la longueur théorique de la lueur négative.

V_C est potentiel de chute cathodique en eV.

γ est le coefficient d'émission secondaire.

l_{iz} est le libre parcours moyen d'ionisation d'un électron.

N est la densité du gaz porteur.

σ_{iz} est la section efficace d'ionisation.

La figure D-21 nous donne pour différentes valeurs de potentiel cathodique la longueur de la lueur négative dans l'azote sous une pression de 1.0 Torr, calculée par cette méthode par C.S. Willet^[15].

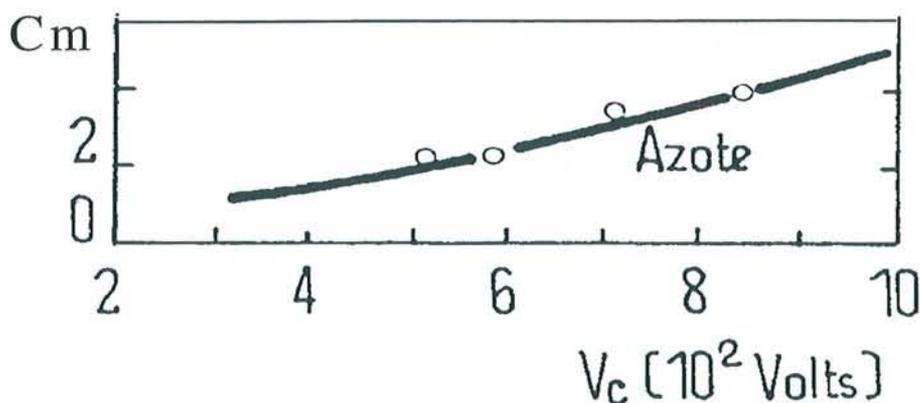


Figure D-21: Longueur théorique de la lueur négative en fonction de la chute de tension cathodique ($P = 1$ Torr)^[14]

4.2 - Longueur expérimentale de la lueur négative: L_{exp} .

Les courbes expérimentales données au premier chapitre (courbes A-12 à A-15) nous indiquent que, sous une pression de 1,4 Torr, la longueur de la lueur négative est toujours supérieure à 2 cm.

4.3 - Longueur de la lueur négative calculée à l'aide du code numérique: L_{num} .

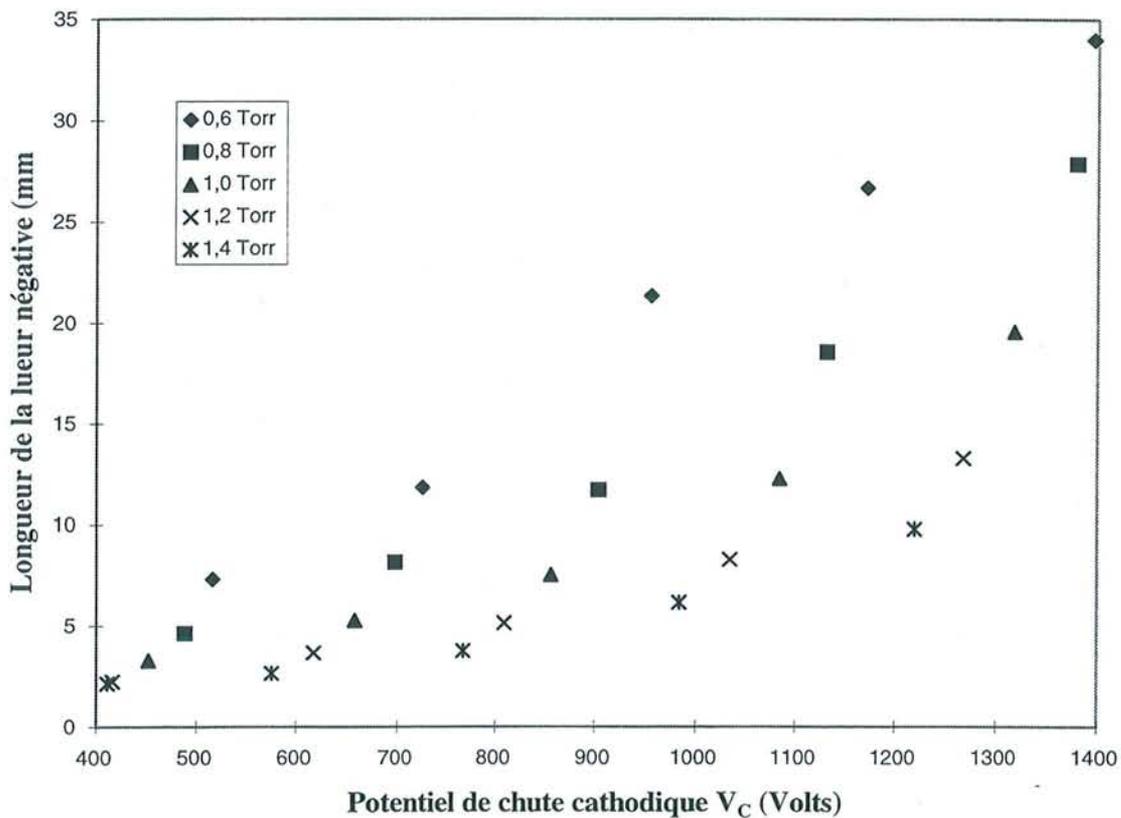


Figure D-22: Longueur de lueur négative calculée à l'aide du modèle en fonction du potentiel cathodique et de la pression

La figure D-22 nous donne les valeurs L_{num} de la longueur de la lueur négative calculées à partir du code numérique. La comparaison entre les valeurs numériques, théoriques et expérimentales nous amène à conclure à une forte disparité. En effet les valeurs théoriques ou expérimentales sont nettement supérieures à celles calculées par le code numérique.

Ceci peut provenir de plusieurs phénomènes:

- La description de la fonction de distribution des électrons rapides n'est pas complète. Ils sont traités à partir d'un faisceau monoénergétique qui ne peut prendre en compte une dégradation à travers l'espace interélectrodes. Une telle dégradation ne peut être correctement prise en compte qu'à l'aide d'un code de type microscopique mais au prix d'une très forte augmentation de l'effort numérique.
- On a jusqu'à maintenant considéré que le gaz porteur se comportait comme un thermostat à la température de 293°K, alors que sa densité pourrait bien varier dans l'espace inter électrodes en fonction du temps.

Les comparaisons avec l'expérience nous montrent assez bien que ce deuxième phénomène est sans doute loin d'être négligeable. On peut obtenir un assez bon accord qualitatif entre les courbes numériques et les courbes expérimentales des mesures courant-tension lorsque celles-ci sont mesurées pour des temps de décharge courts devant les temps de post-décharge. Ceci représente bien un cas où le chauffage du gaz est quasi inexistant.

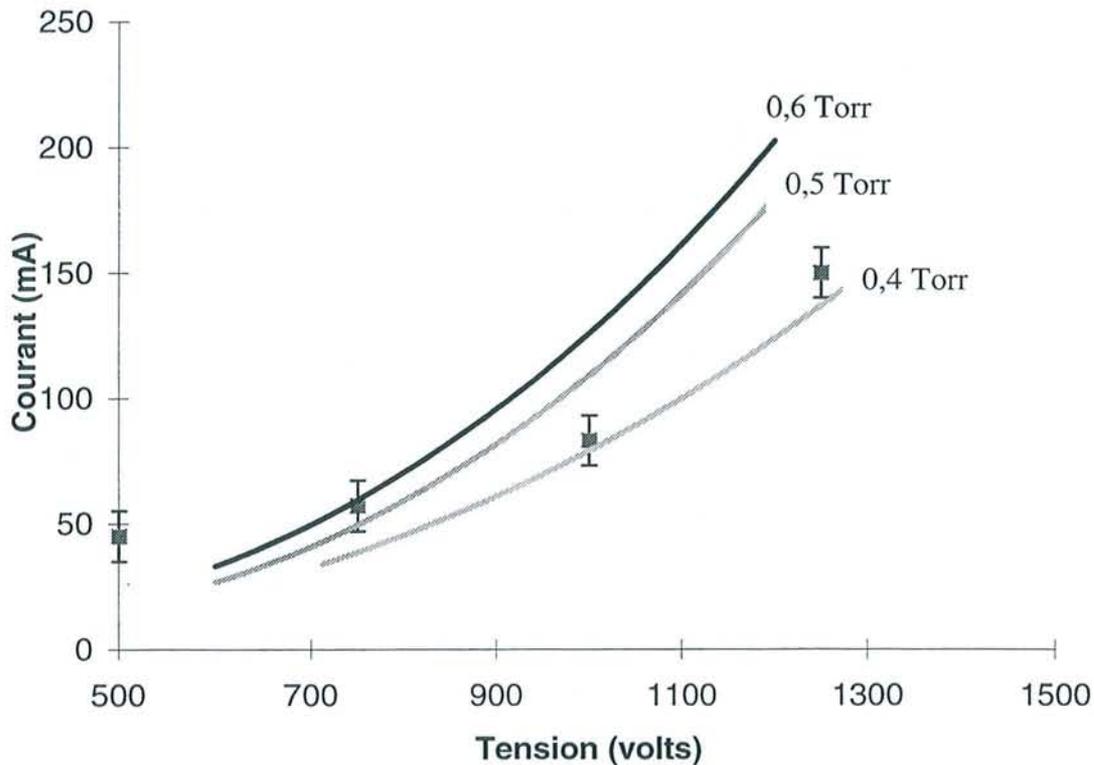


Figure D-23: Comparaison courant/tension pour différentes pressions

La courbe D-23 montre une comparaison courant-tension entre deux types d'expérience : la première (représentée par des symboles) a été effectuée en décharge continue à 1,4 Torr, la deuxième (courbe continue) a été quant à elle effectuée en décharge pulsée ($t_d = 0,1$ ms, $t_{pd} = 50$ ms) sous des pressions allant de 0,4 Torr à 0,6 Torr. On constate dans cet exemple que le chauffage du gaz porteur, non négligeable en régime continu, entraînerait à considérer une pression équivalente 2 à 3 fois plus faible que la pression résidente.

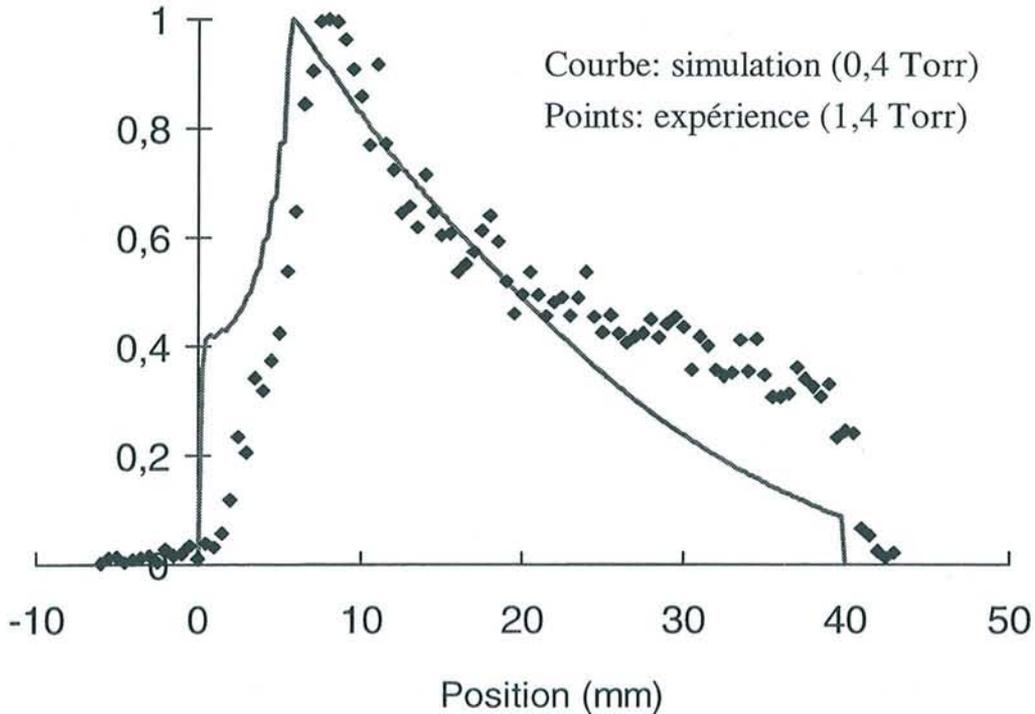


Figure D-24: Comparaison de l'intensité du premier système négatif entre numérique et expérience pour une tension de 1000 Volts

Nous pouvons obtenir le même type de conclusions en nous appuyant sur le figure D-24. Elle représente une comparaison de l'intensité de la raie d'émission du premier système négatif pour une tension de 1000 Volts entre les résultats numériques obtenus à l'aide d'une simulation sous une pression de 0,4 Torr (courbe continue) et les mesures expérimentales obtenues sous une pression de 1,4 Torr (courbes en pointillés). On s'aperçoit qu'il existe un bon accord qualitatif entre ces deux courbes. Toutefois, elle montre quelques disparités:

- Près de la cathode, les deux courbes montrent une totale divergence. Ce phénomène provient principalement de la résolution spatiale de la fibre qui a tendance à lisser les forts gradients.

- Au fur et à mesure que l'on se rapproche de l'anode, la courbe expérimentale devient très nettement supérieure à celle obtenue grâce à la simulation. Ceci provient du fait que nous avons pris en compte une densité de particules neutres constante dans tout l'espace interélectrodes. Dans le cas réel, la densité de particules neutres présente un profil non constant permettant une augmentation de l'intensité du premier système négatif dans cette zone. Ceci sera plus amplement développé au chapitre suivant.

V – CONCLUSION

Dans ce quatrième chapitre, nous avons présenté les résultats obtenus à l'aide de notre modèle à deux populations d'électrons, un faisceau monoénergétique pour les électrons primaires et une distribution maxwellienne pour les électrons ultimes.

Grâce à cela, nous avons pu décrire convenablement toutes les zones de décharges et en particulier la lueur négative. En ce qui concerne la comparaison entre simulation sur quelques microsecondes et expérience, un accord très satisfaisant a été obtenu pour des temps de décharge faibles et des temps de post-décharge longs. Nous avons aussi montré que le peuplement du premier système négatif était dû principalement aux électrons rapides.

Par contre, en régime de décharge continue, on constate pour une pression donnée un désaccord entre les résultats numériques et ceux obtenus expérimentalement. Ce désaccord provient essentiellement du fait que l'on ne prend pas en compte l'échauffement du gaz neutre. En utilisant une pression équivalente plus basse, on obtient alors des résultats satisfaisants. Ces résultats montrent bien l'importance de la dynamique des neutres pour une modélisation correcte des décharges. Ceci est d'autant plus vrai si l'on veut décrire des décharges pulsées avec des successions de phases de décharge où le chauffage du gaz neutre intervient et des phases de post-décharge durant laquelle le gaz se relaxe. Ces différentes remarques et la volonté de décrire des décharges pulsées nous ont amenés à développer un modèle bidimensionnel traitant l'évolution du gaz neutre. Cette étude fera l'objet du chapitre suivant.



Bibliographie

- [1] P. BELENGUER, Thèse de l'université Henri Poincaré, Nancy I, (1990)
- [2] J.H. INGOLD, 'In gaseous electronics', édité par M.N. Hirsh et H.J. Oskam, (Academic, New York), Vol. **1**, p. 19, (1978)
- [3] A.V. PHELPS, B.M. JELENKOVIC, L.C. PITCHFORD, Phys. Rev. A, **36**, 5327, (1987)
- [4] J.H. INGOLD, Phys. Rev. A, **40**, 3855, (1989)
- [5] A.V. PHELPS, B.M. JELENKOVIC, L.C. PITCHFORD, Phys. Rev. A, **36**, 5327, (1987)
- [6] M. SURENDRA, D.B. GRAVES, G.M. JELLUM, Phys. Rev. A, **41**, 1112, (1990)
- [7] J.P. BOEUF, P. SEGUR, 'Interactions Plasmas Froids – Matériaux', Ed. C. Lejeune, Les éditions de physique, 113, (1988)
- [8] P. BELENGUER, J.P. BOEUF, Phys. Rev. A., **41**, 4447, (1990)
- [9] R.A. GOTTSCHO, A.M. MITCHELL, SCHELLER G.R., Y.Y. CHAN, Phys. Rev. A., **40**, 6407, (1989)
- [10] J.P. BŒUF, P. SEGUR, 'Intéactions Plasmas Froids Matériaux', Ed. Lejeune, 113, (1988)
- [11] A. FIALA, L.C. PITCHFORD, J.P. BŒUF, Phys. Rev. E, **49**, 5607, (1994)
- [12] R. HUGON, Thèse de l'université Henri Poincaré, Nancy I, (1994)
- [13] M. CAPITELLI, C. GORSE, A. RICARD, J. Phys. Letters, **44**, L251, (1983)
- [14] H. COITOUT, Thèse de l'université Paris XI, Orsay, (1993)
- [15] A.M. POINTU, "Physique des décharges", dans 'Réactivité dans les plasmas. Applications aux lasers et au traitement de surface', Ecole d'été d'Aussois, Les éditions de physique, (1983)
- [16] C.S. WILETT, 'Introduction to gas lasers : population, inversion, mechanisms', Pergamon Press, (1974)

Chapitre E

ETUDE DE LA DYNAMIQUE DU GAZ PORTEUR

I – INTRODUCTION

Comme il a été démontré au chapitre précédent, une description de la dynamique des neutres est de première importance si l'on veut décrire de façon satisfaisante une décharge en plasma pulsé. En effet, les successions de phases d'amorçage et de post-décharge correspondent à des durées de chauffage et de refroidissement du gaz.

Les plasmas de traitement de surface que l'on veut décrire dans cette étude correspondent à des fréquences de l'ordre de 100 Hz avec un rapport cyclique de 1/2, ce qui correspond à des temps de décharge et de post décharge de 5 ms. Cet ordre de grandeur des temps permet comme nous le verrons de refroidir le gaz pendant la phase de post décharge puis de le réchauffer pendant la phase de décharge. Ceci rend impossible l'adoption d'une pression équivalente constante ou d'un profil linéaire de densité entre la cathode et l'anode.

L'objet de ce dernier chapitre est donc la présentation du code neutre que nous avons développé et le couplage de celui ci avec le modèle électrique à deux populations d'électrons. Après une description des équations et de la technique numérique utilisées, nous présenterons tout d'abord une étude avec injection d'énergie constante afin de valider l'efficacité du code neutre. Puis nous présenterons les résultats obtenus en couplant le modèle électrique décrit au chapitre D avec le code neutre.

II - DEFINITION DU DOMAINE D'ETUDE

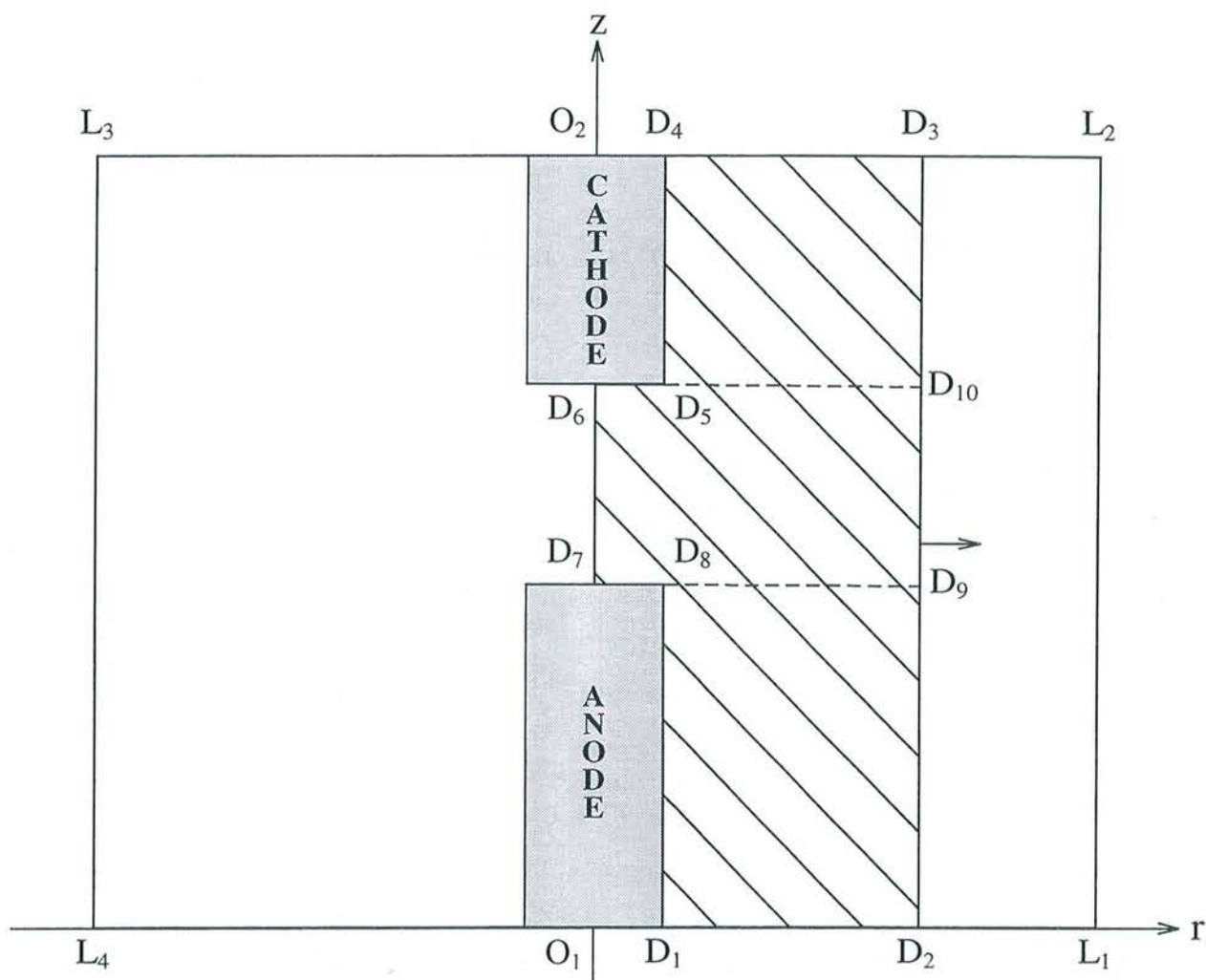


Figure E-1: Définition du domaine d'étude

L'existence d'une symétrie de révolution autour de l'axe de la décharge nous permet de limiter la zone d'étude à la moitié (O_1, L_1, L_2, O_2).

La paroi inférieure de l'enceinte est délimitée par D_1L_1 , sa paroi latérale par L_1L_2 et sa paroi supérieure par L_2D_4 .

Le réseau constituant notre domaine d'étude est composé de 131 points sur l'axe r et de 321 points sur l'axe z .

$\Delta r = 1 \text{ mm}$ est la distance entre 2 points sur l'axe r .

$\Delta z_1 = 1.75 \text{ mm}$ est la distance sur l'axe z entre 2 points situés à la même hauteur qu'une des 2 électrodes (zones $D_1D_2D_9D_8$ et $D_3D_4D_5D_{10}$).

$\Delta z_2 = 0.25$ mm est la distance sur l'axe z entre 2 points situés dans l'espace inter-électrodes (zone $D_6D_7D_9D_{10}$).

La cathode (zone $O_2D_4D_5D_6$) est constituée d'un cylindre de rayon $O_2D_4 = 25$ mm (25 points suivant r) et de hauteur $D_4D_5 = 110$ mm (63 points suivant z). Sa face inférieure est délimitée par D_5D_6 et sa face latérale par D_4D_5 .

L'anode (zone $O_1D_1D_8D_7$) est constituée d'un cylindre de rayon $O_1D_1 = 25$ mm (25 points suivant r) et de hauteur $D_1D_8 = 170$ mm (97 points suivant z). Sa face supérieure est délimitée par D_7D_8 et sa face latérale par D_1D_8 .

L'espace inter-électrodes est donc constitué de 161 points distants de 0.25 mm.

La limite D_2D_3 peut être déplacée librement dans la direction radiale en fonction de la composante radiale V_r de la vitesse des neutres sur cette limite. En effet, à chaque itération, on compare cette composante avec une valeur fixe et choisie au début du programme ($V_{r,lim} = 10^{-2} m.s^{-1}$). Si cette composante est égale ou supérieure à cette vitesse limite, on repousse de Δr la limite du domaine de calcul. Ceci nous permet d'économiser un temps de calcul important au début du programme.

III – MODELISATION

L'évolution du gaz des neutres peut être décrite à partir des équations hydrodynamiques d'un fluide visqueux newtonien et compressible, en prenant en compte les interactions avec les particules chargées.

Nous supposons que l'évolution de la fonction de distribution des vitesses des particules électriquement neutres obéit toujours à l'équation de Boltzmann. Par conséquent, les équations hydrodynamiques sont déduites de ses premiers moments. Le système complet sera fermé à l'aide de l'équation d'état des gaz parfaits.

3.1 - Equation de conservation de la densité (ou équation de continuité)

$$\frac{\partial N}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot (N \vec{V}) = \int \left(\frac{\partial f_n}{\partial t} \right)_{coll.} dw_n$$

où N représente la densité des particules neutres et \vec{V} leur vitesse fluide

f_n est la fonction de distribution des vitesses des particules neutres.

w_n est la vitesse microscopique des particules neutres.

Le gaz étudié étant considéré comme faiblement ionisé (degré d'ionisation inférieur à 10^{-6}), on peut négliger le terme source de la densité des neutres par collisions.

$$\int \left(\frac{\partial f_n}{\partial t} \right)_{coll.} dw_n = 0$$

On obtient donc:

$$\frac{\partial N}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot (N \vec{V}) = 0$$

3.2 - Equation de conservation de la quantité de mouvement (Navier Stockes)

$$\frac{\partial (mN \vec{V})}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot (mN \vec{V}) \vec{V} + \vec{\nabla} \cdot \overline{\overline{\mathbf{P}}} + N \vec{F} = \int m_n w_n \left(\frac{\partial f_n}{\partial t} \right)_{coll.} dw_n$$

* Le gaz étant supposé parfait et isotrope, le tenseur de pression cinétique $\overline{\overline{\mathbf{P}}}$ est égal à:

$$\overline{\overline{\mathbf{P}}} = NkT\overline{\overline{\mathbf{I}}}$$

* Les seules forces extérieures agissant sur l'élément fluide sont les forces de viscosité d'où:

$$N \vec{F} = \vec{\nabla} \cdot \overline{\overline{\mathbf{T}}}$$

où $\overline{\overline{\mathbf{T}}}$ représente le tenseur des tensions visqueuses dont l'expression des composantes en coordonnées cylindriques pour un fluide newtonien est :

$$\begin{cases} \tau_{rr} = -\eta(T) \left(2 \frac{\partial V_r}{\partial r} - \frac{2}{3} \vec{\nabla} \cdot \vec{V} \right) \\ \tau_{zz} = -\eta(T) \left(2 \frac{\partial V_z}{\partial z} - \frac{2}{3} \vec{\nabla} \cdot \vec{V} \right) \\ \tau_{\theta\theta} = -\eta(T) \left(2 \frac{V_r}{r} - \frac{2}{3} \vec{\nabla} \cdot \vec{V} \right) \\ \tau_{rz} = \tau_{zr} = -\eta(T) \left(\frac{\partial V_z}{\partial r} + \frac{\partial V_r}{\partial z} \right) \\ \tau_{r\theta} = \tau_{\theta r} = \tau_{\theta z} = \tau_{z\theta} = 0 \end{cases}$$

où $\eta(T)$ est la viscosité du gaz donnée ^[1] par la figure E-1.

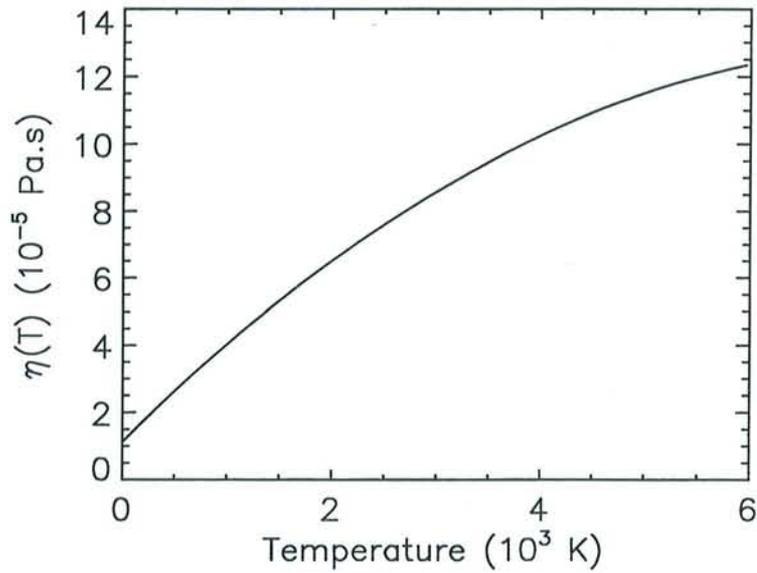


Figure E-1: Viscosité $\eta(T)$ de l'azote^[2] en fonction de la température

* Le gaz est faiblement ionisé donc nous pouvons négliger le terme de transfert de la quantité de mouvement par collisions avec les particules chargées.

L'équation devient:

$$\frac{\partial(mN\vec{V})}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot (mN\vec{V})\vec{V} = -\vec{\nabla} \cdot \vec{P} - \vec{\nabla} \cdot \vec{\tau}$$

Les variations de la quantité de mouvement des particules neutres ne sont dues qu'au gradient de densité et de température, qu'aux tensions visqueuses et qu'au transfert direct de quantité de mouvement par collision avec les particules chargées.

3.3 - Equation de conservation de l'énergie

$$\frac{\partial N\mathcal{E}}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot (N\mathcal{E}\vec{V}) + \vec{\nabla} \cdot \vec{Q} + \vec{\nabla} \cdot (\vec{P} \cdot \vec{V}) + N\vec{F} \cdot \vec{V} = \int \frac{1}{2} m_n w_n^2 \left(\frac{\partial f_n}{\partial t} \right)_{coll} dw_n$$

* \vec{Q} est le flux de chaleur résultant du gradient de température

$$Q = K(T) \nabla T$$

avec $K(T)$ conductivité thermique du gaz donnée figure E-2

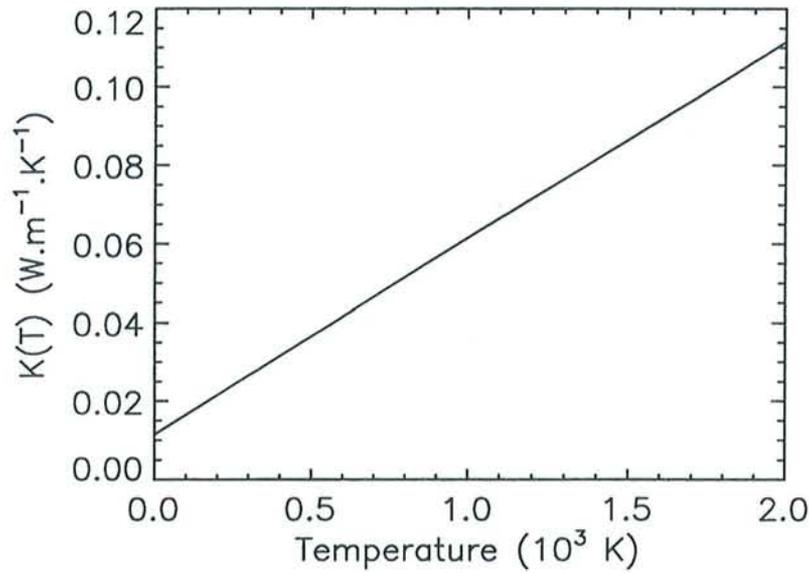


Figure E-2: Conductivité thermique $K(T)$ de l'azote^[3] en fonction de la température

* On ne prend en compte que les forces de viscosité d'où

$$N \vec{F} \cdot \vec{V} = \vec{\nabla} \cdot (\overline{\overline{\boldsymbol{\tau}}} \cdot \vec{V})$$

* Le terme de transfert d'énergie par collision avec les particules chargées ne tient compte que du chauffage du gaz par effet Joule d'où:

$$\int \frac{1}{2} m_n w_n^2 \left(\frac{\partial f_n}{\partial t} \right)_{coll.} dw_n = \vec{J} \cdot \vec{E}$$

avec \vec{J} la densité de courant et \vec{E} le champ électrique.

L'équation devient alors:

$$\frac{\partial N \mathcal{E}}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot (N \mathcal{E} \vec{V}) = -\vec{\nabla} \cdot \vec{Q} - \vec{\nabla} \cdot (\overline{\overline{\mathbf{P}}} \cdot \vec{V}) - \vec{\nabla} \cdot (\overline{\overline{\boldsymbol{\tau}}} \cdot \vec{V}) + \vec{J} \cdot \vec{E}$$

Nous pouvons dire que la variation locale de l'énergie d'un élément fluide provient:

- de l'énergie apportée par conduction $\vec{\nabla} \cdot \vec{Q}$
- de l'échange réversible d'énergie par compression $\vec{\nabla} \cdot (\overline{\overline{\mathbf{P}}} \cdot \vec{V})$
- de l'accroissement irréversible d'énergie par dissipation visqueuse $\vec{\nabla} \cdot (\overline{\overline{\boldsymbol{\tau}}} \cdot \vec{V})$
- du chauffage direct par effet Joule $\vec{J} \cdot \vec{E}$

IV - MISE EN OEUVRE ET METHODE NUMERIQUE

D'après la forme de l'enceinte à modéliser, nous avons choisi d'exprimer ces équations en coordonnées cylindriques. Le système devient donc :

$$\begin{cases} \frac{\partial N}{\partial t} + \frac{1}{r} \frac{\partial r N V_r}{\partial r} + \frac{\partial N V_z}{\partial z} = 0 \\ \frac{\partial N V_r}{\partial t} + \frac{1}{r} \frac{\partial r N V_r^2}{\partial r} + \frac{\partial N V_r V_z}{\partial z} = S_V^r \\ \frac{\partial N V_z}{\partial t} + \frac{1}{r} \frac{\partial r N V_z V_r}{\partial r} + \frac{\partial N V_z^2}{\partial z} = S_V^z \\ \frac{\partial \mathcal{E}}{\partial t} + \frac{1}{r} \frac{\partial r \mathcal{E} V_r}{\partial r} + \frac{\partial N \mathcal{E} V_z}{\partial z} = S_{\mathcal{E}} \end{cases}$$



avec $S_V^r = -\frac{\partial P}{\partial r} - \frac{1}{r} \frac{\partial r \tau_{rr}}{\partial r} + \frac{\tau_{\theta\theta}}{r} - \frac{\partial \tau_{rz}}{\partial z}$

$$S_V^z = -\frac{\partial P}{\partial z} - \frac{\partial \tau_{zz}}{\partial z} - \frac{1}{r} \frac{\partial r \tau_{rz}}{\partial r}$$

$$S_{\mathcal{E}} = \underbrace{J_r E_r + \frac{K(T)}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(\frac{\partial T}{\partial r} \right) - \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \{ r (P + \tau_{rr}) V_r \}}_{S_{\mathcal{E}}^r} - \frac{\partial \tau_{rz} V_r}{\partial z}$$

$$\underbrace{+ J_z E_z + K(T) \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} - \frac{\partial}{\partial z} \{ (P + \tau_{zz}) V_z \} - \frac{1}{r} \frac{\partial r \tau_{rz} V_z}{\partial r}}_{S_{\mathcal{E}}^z}$$

où J_r , J_z et E_r , E_z sont respectivement les composantes radiales et axiales de la densité de courant et du champ électrique.

Pour résoudre numériquement ces équations bidimensionnelles à l'aide d'un schéma centré utilisant la technique de correction de flux F.C.T., on peut choisir entre 2 méthodes :

- soit on utilise un algorithme F.C.T. capable de gérer simultanément les flux d'anti-diffusion dans les deux dimensions. Cet algorithme a été développé par Zalesak ^[4]
- soit on gère séparément le transport dans les 2 directions (axiales et radiales) à l'aide d'un algorithme F.C.T. monodimensionnel. C'est la procédure dite de 'Time Splitting'.

* Procédure de Time-Splitting

La procédure de Time Splitting permet de remplacer l'intégration de l'équation de transport bidimensionnelle d'une grandeur par une succession d'intégrations monodimensionnelles dans chacune des directions de l'espace et du temps.

En coordonnées cylindriques, l'évolution bidimensionnelle de chacune de nos grandeurs $(N, NV_r, NV_z, \mathcal{E})$ est alors séparée en 2 évolutions indépendantes:

- l'une radiale sur une durée Δt .
- l'autre axiale sur une durée Δt .

En utilisant cette méthode, le système d'équations devient donc:

- Pour le transport radial:

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial N}{\partial t} + \frac{1}{r} \frac{\partial r NV_r}{\partial r} = 0 \\ \frac{\partial NV_r}{\partial t} + \frac{1}{r} \frac{\partial r NV_r^2}{\partial r} = S_V^r \\ \frac{\partial NV_z}{\partial t} + \frac{1}{r} \frac{\partial r NV_z V_r}{\partial r} = 0 \\ \frac{\partial \mathcal{E}}{\partial t} + \frac{1}{r} \frac{\partial r \mathcal{E} V_r}{\partial r} = S_{\mathcal{E}}^r \end{array} \right.$$

- Pour le transport axial:

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial N}{\partial t} + \frac{\partial NV_z}{\partial z} = 0 \\ \frac{\partial NV_r}{\partial t} + \frac{\partial NV_r V_z}{\partial z} = 0 \\ \frac{\partial NV_z}{\partial t} + \frac{\partial NV_z^2}{\partial z} = S_V^z \\ \frac{\partial \mathcal{E}}{\partial t} + \frac{\partial N \mathcal{E} V_z}{\partial z} = S_{\mathcal{E}}^z \end{array} \right.$$

Chaque équation sera donc résolue numériquement à l'aide d'un schéma centré aux différences finies utilisant la technique de correction de flux F.C.T. monodimensionnelle décrite dans les annexes A, B et C.

V - CONDITIONS INITIALES

A l'état initial, le gaz porteur est supposé immobile, sa pression varie de 0.6 Torr à 1.4 Torr suivant l'expérience effectuée pour une température de 293 K.

Dans ces conditions, le libre parcours moyen des particules électriquement neutres est de l'ordre de 0.1 mm. Les incréments spatiaux choisis ($\Delta r_{\text{mini}} = 1 \text{ mm}$ et $\Delta z_{\text{mini}} = 0.25 \text{ mm}$) sont bien supérieurs à cette valeur.

La condition de stabilité et de convergence C.F.L. ($V \frac{\Delta t}{\Delta z} \leq \frac{1}{2}$) nous impose un incrément temporel de l'ordre de $\Delta t = 10^{-7} \text{ sec}$.

* Modélisation de l'injection d'énergie $\vec{J} \cdot \vec{E}$

La densité de puissance Joule sur l'axe de la décharge est déterminée à partir du code électrique développé au chapitre précédent. Deux types d'expérience ont été effectuées:

- Pour valider dans un premier temps l'importance du chauffage du gaz porteur par effet Joule, nous avons fait tourner le code en prenant un profil de densité de puissance Joule constant au cours du temps et issu des résultats du code électrique avec deux populations d'électrons pour $P = 1.0 \text{ Torr}$ et $U = 1000 \text{ volts}$.
- A partir de la création d'un code auto-cohérent entre le code neutre et le code électrique, le profil de puissance Joule sur l'axe de la décharge est automatiquement calculé par le code électrique puis injecté directement dans le code neutre.

Pour cette première approche, la totalité du courant a été prise en compte dans le calcul de la puissance Joule. En réalité, seul le courant ionique participe de façon notable au chauffage du gaz neutre. On peut tout de même signaler que dans notre cas, la colonne positive disparaît rapidement, l'espace interélectrodes n'étant plus constitué que d'une chute cathodique et d'une lueur négative. Or dans la chute cathodique le courant électronique est négligeable devant le courant ionique. Dans la lueur négative, le champ électrique étant très faible, il n'existe pas de chauffage du gaz neutre par effet Joule. Dans le cadre d'une première approche, cette approximation reste donc raisonnable.

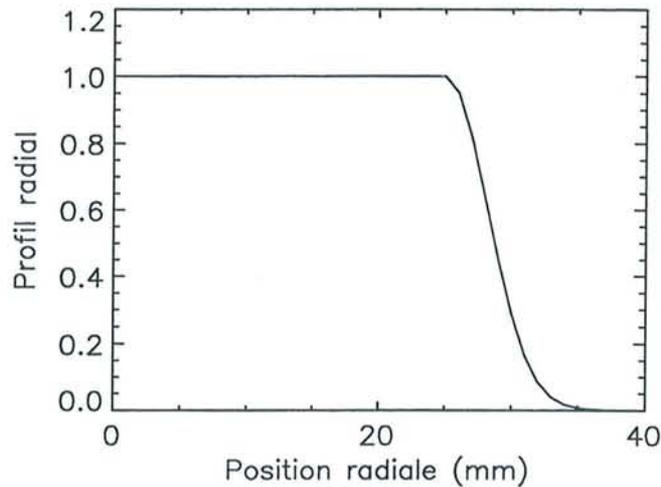


Figure E-3 : Profil radial de la densité de puissance Joule

Le profil radial de la densité de puissance Joule est quant à lui constant dans les deux types de simulation. Il ne dépend que de la valeur de la puissance Joule prise sur l'axe et du profil radial décrit sur la figure E-3. Ce profil a été adopté afin de permettre un raccord moins brutal entre les deux zones, un profil sous forme de créneaux n'étant pas possible avec la méthode numérique utilisée.

VI - CONDITIONS AUX LIMITES

- Le fluide étant supposé visqueux, on considère que la vitesse du gaz neutre est nulle au contact des parois de l'enceinte à décharge et des électrodes.
- La densité du gaz porteur au contact des parois de l'enceinte et des électrodes est calculée par extrapolation sur les valeurs voisines.

A la cathode:

- La température de la face inférieure de la cathode (D_5D_6) est supposée constante et égale à 800 K. Ce qui correspond à la température optimale pour la réalisation de couche de nitrure de fer.

- La température de la face latérale de la cathode (D_4D_5) est constante et égale à 800 K sur une épaisseur de 10 mm à partir du point D_5 puis décroît linéairement jusqu'à atteindre 293 K en D_4 , au contact de la paroi supérieure de l'enceinte à décharge.

A l'anode:

On considère que l'anode chauffe par rayonnement de la cathode, ce qui conduit à imposer que:

- La température de la face supérieure de l'anode (D_7D_8) est supposée constante et égale à 350 K. Ce qui correspond à la température d'équilibre obtenue par rayonnement de la cathode sur l'anode.
- La température de la face latérale de l'anode (D_1D_8) est constante et égale à 350 K sur une épaisseur de 10 mm à partir du point D_8 puis décroît linéairement jusqu'à atteindre 293 K en D_1 , au contact de la paroi inférieure de l'enceinte à décharge.

Sur les parois:

Les parois de l'enceinte à décharge sont supposées froides, par conséquent la température des parois est constante et égale à 293 K.

Sur l'axe de la décharge:

L'existence d'une symétrie de révolution autour de l'axe de la décharge nous impose certaines conditions:

- la vitesse radiale doit être nulle sur l'axe

$$V_r(r=0) = 0$$

- la dérivée suivant la direction radiale de la température et de la densité doivent être nulles sur l'axe:

$$\frac{\partial T}{\partial r}(r=0) = 0 \text{ et } \frac{\partial N}{\partial r}(r=0) = 0$$

Ces conditions nous imposent de recalculer les termes sources sur l'axe de l'équation de conservation de la quantité de mouvement et de l'équation de conservation de l'énergie pour les transports radiaux et axiaux.

- Pour le transport radial:

* La quantité de mouvement NV_r doit être nulle sur l'axe d'où

$$(S_V^r)_{axe} = 0$$

* En calculant la limite de $S_{\mathcal{E}}^r$ quand r tend vers 0, on obtient:

$$(S_{\mathcal{E}}^r)_{axe} = J_r E_r + 2K(T) \frac{\partial^2 T}{\partial r^2} - P \frac{\partial V_r}{\partial r} + \frac{4}{3} \eta(T) \left[\left(\frac{\partial V_r}{\partial r} \right)^2 - \frac{\partial V_z}{\partial z} \frac{\partial V_r}{\partial r} \right]$$

- Pour le transport axial:

On calcule également la limite de S_V^z et $S_{\mathcal{E}}^z$ quand r tend vers 0:

$$(S_V^z)_{axe} = -\frac{\partial P}{\partial z} + \frac{4}{3} \eta(T) \frac{\partial^2 V_z}{\partial z^2}$$

$$(S_{\mathcal{E}}^z)_{axe} = J_z E_z + K(T) \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} - \frac{\partial P V_z}{\partial z} + \frac{4}{3} \eta(T) \left[V_z \frac{\partial^2 V_z}{\partial z^2} + \left(\frac{\partial V_z}{\partial z} \right)^2 - \frac{\partial V_z}{\partial z} \frac{\partial V_r}{\partial r} \right]$$

VII - VALIDATION DU CODE DE RESOLUTION

Afin de tester notre modèle d'étude de la dynamique du gaz porteur, nous avons lancé ce programme avec les conditions suivantes:

- pas de couplage avec le modèle électrique.
- distance inter électrodes de 40 mm
- L'expérience est réalisée dans l'azote à la pression de 1 Torr et à la température initiale de 293 K.
- La quantité d'énergie injectée est constante au cours du temps. Son profil est donné sur les figures E-4.

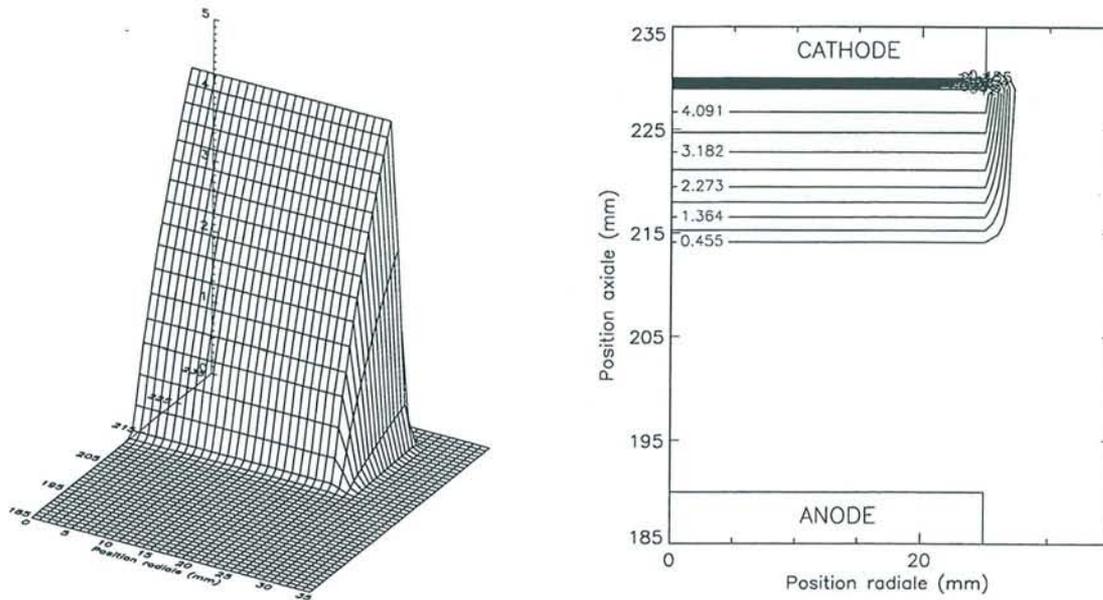


Figure E-4: Profil de densité d'énergie injectée (en J/cm^3)

L'étude d'un tel cas va nous permettre de mieux cerner les différents processus conduisant à la dynamique du gaz neutre à l'intérieur de l'enceinte dans une situation où l'énergie injectée sera dépendante du temps.

Lors de l'évolution du gaz neutre, on peut distinguer deux phénomènes:

- Dans les premiers instants, les conditions aux limites à chaque électrode donnent naissance à deux ondes de pression.
- Ensuite, l'énergie injectée est suffisamment importante pour démarrer un chauffage continu du gaz neutre.

Le faible niveau d'énergie injectée nous permet de découpler dans le temps ces deux phénomènes. Il est à noter ici que si l'injection d'énergie se fait de manière très rapide, elle peut aussi provoquer une onde de pression.

7.1 - Etude de l'onde de pression

Pour étudier le mouvement du gaz neutre dans les directions axiales et radiales, nous avons représenté l'évolution temporelle de la température $T(r, z)$, de la densité $N(r, z)$, de la pression $P(r, z)$ et du module de la vitesse $V(r, z) = \sqrt{V_r^2 + V_z^2}$ pour des points de l'espace

interélectrodes définis par le réseau de la figure E-5. Les différents points d'étude sont localisés par l'intersection:

- des horizontales $z = 5 \text{ mm}$, $z = 15 \text{ mm}$, $z = 25 \text{ mm}$ et $z = 35 \text{ mm}$

($z = 0$ défini la position de la cathode)

- et des verticales $r = 0 \text{ mm}$, $r = 15 \text{ mm}$, $r = 30 \text{ mm}$, $r = 45 \text{ mm}$, $r = 60 \text{ mm}$ et $r = 80 \text{ mm}$

($r = 0$ défini la position de l'axe de révolution)

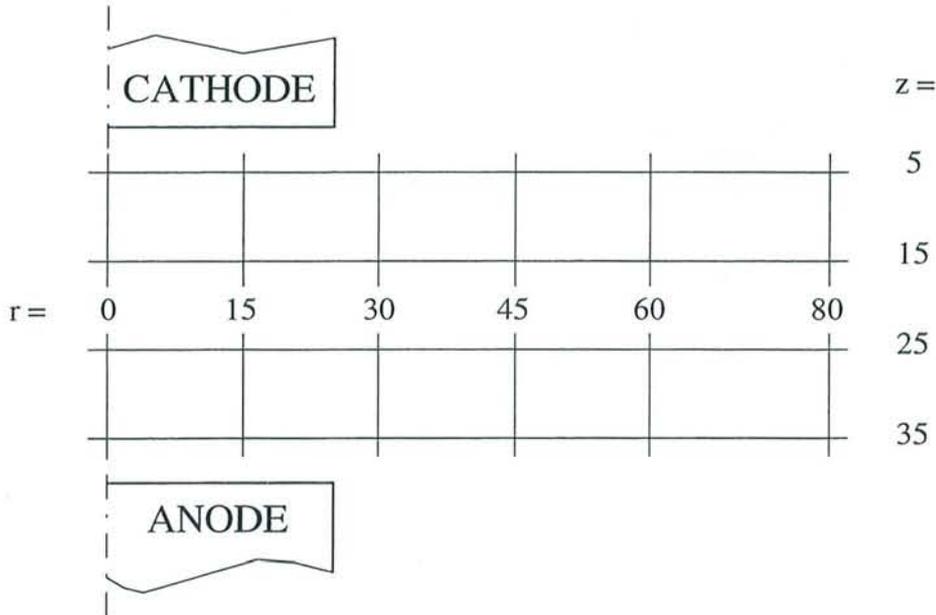


Figure E-5: Définition du réseau d'étude

L'examen des courbes de température et densité (figure E-6 et E-8) nous montre l'existence de ces ondes de pression. En effet, dans ce type de phénomène et contrairement à l'injection progressive d'énergie, une brusque augmentation de température entraîne aussi une augmentation de la densité du gaz neutre. On peut remarquer que cette onde de pression est amortie par rapport à l'onde réelle du fait du choix du profil radial de l'injection d'énergie (cf. figure E-3).

En regardant par exemple l'évolution temporelle de la température et de la densité pour le point de coordonnées ($r = 0$, $z = 35$), on constate l'existence de deux ondes de pression:

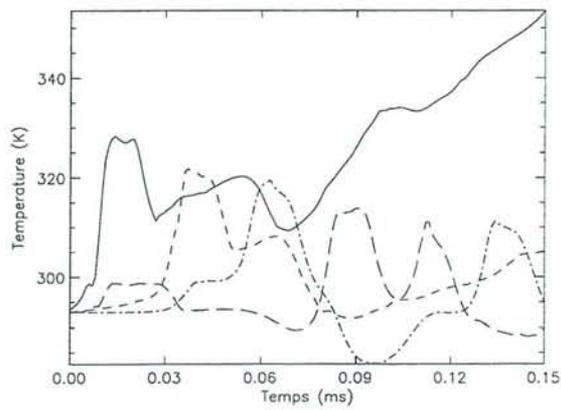
- une provenant de la cathode qui possède la plus grande amplitude et qui atteint ce point vers 0,08 ms.
- une provenant de l'anode, d'amplitude plus faible, qui atteint ce point vers 0,01 ms.

Ces deux ondes entament un mouvement alternatif entre les deux électrodes. Elles possèdent toutes les deux la même vitesse de propagation.

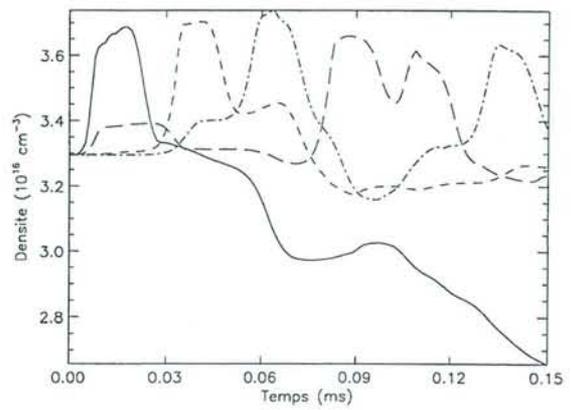
L'examen des courbes de pression montre la formation et le développement axial (figure E-7) et radial (figure E-9) de l'onde de pression issue de la cathode. En effet, l'augmentation brutale de température provoque la propagation de cette onde, entraînant une compression du gaz vers l'avant (jusqu'à 1,25 Torr pour $r = 0$ mm et $z = 5$ mm) et une dépression à l'arrière (jusqu'à 0,925 Torr pour $r = 0$ mm et $z = 25$ mm).

Au fur et à mesure que le temps s'écoule, le maximum de pression diminue puisque cette surpression se propage dans un milieu non perturbé devenant de plus en plus grand. Ce phénomène est beaucoup plus accentué dans la direction radiale.

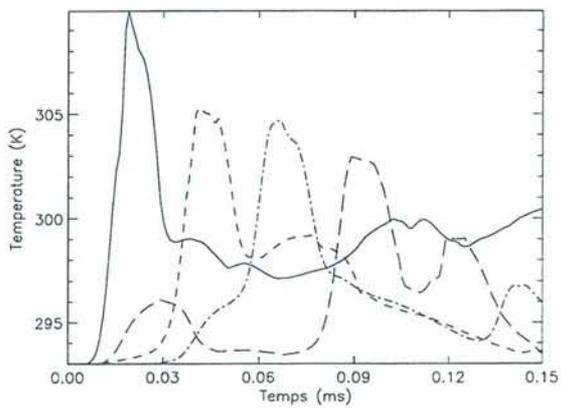
Puisque l'on connaît la position de chaque point de mesure, on peut mesurer la vitesse de propagation de cette onde en mesurant le temps écoulé entre deux pics de densité ou de pression. On obtient alors une valeur de l'ordre de 400 m/s. C'est à dire de l'ordre de la vitesse du son dans le gaz.



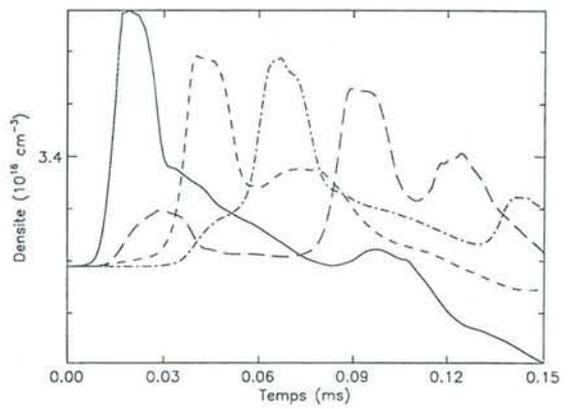
$r = 0$



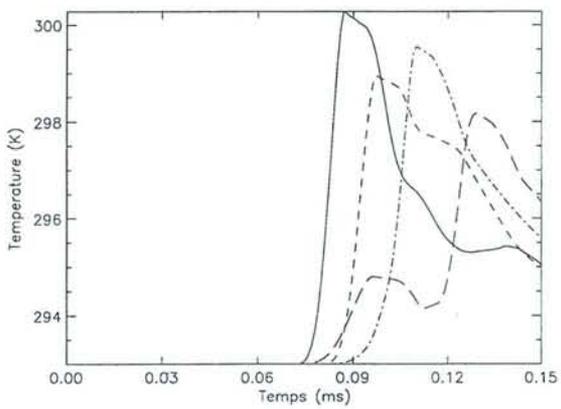
$r = 0$



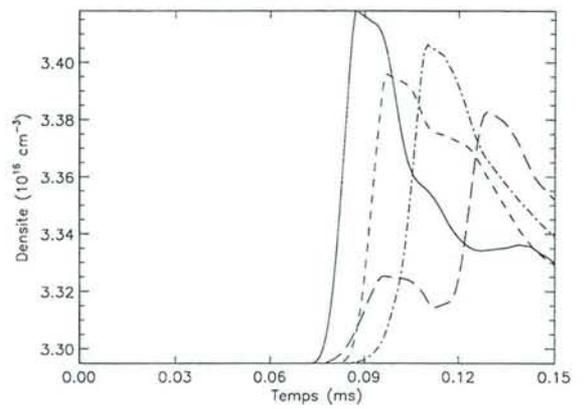
$r = 30 \text{ mm}$



$r = 30 \text{ mm}$

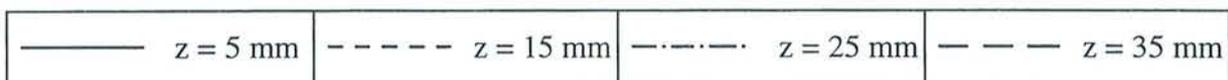


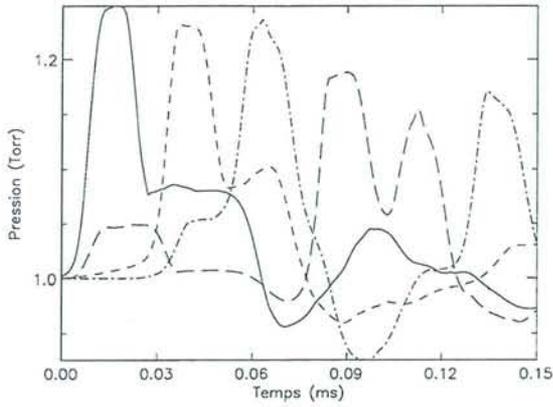
$r = 60 \text{ mm}$



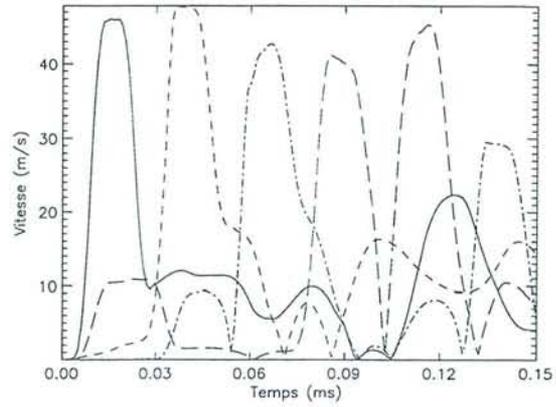
$r = 60 \text{ mm}$

Figure E-6: Evolution de la température $T(z, t)$ et de la densité $N(z, t)$ pour différentes valeurs de r

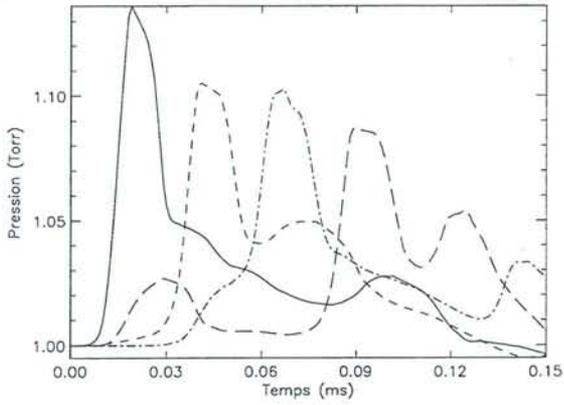




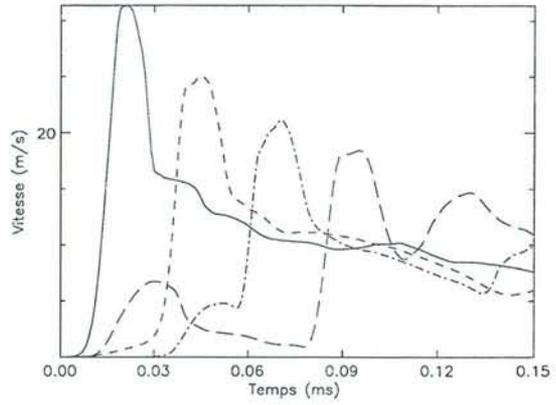
$r = 0$



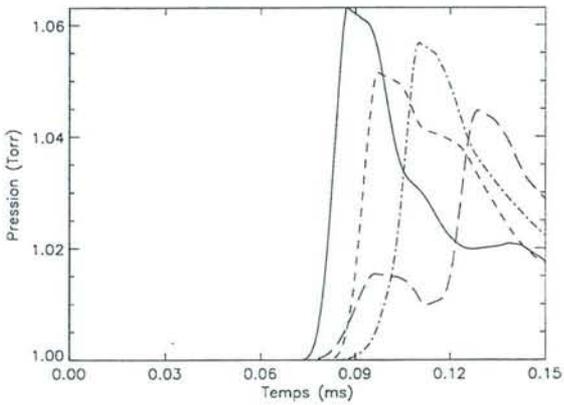
$r = 0$



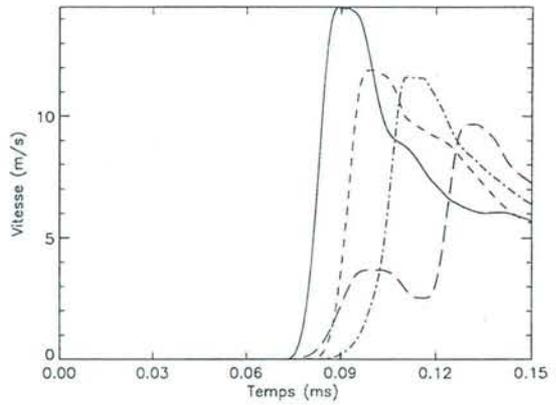
$r = 30 \text{ mm}$



$r = 30 \text{ mm}$

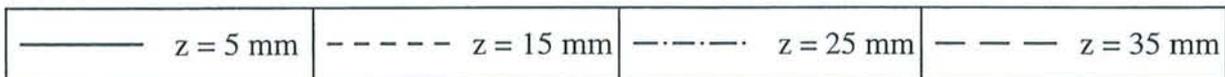


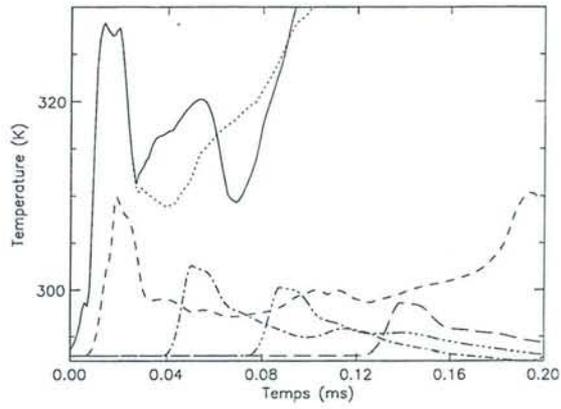
$r = 60 \text{ mm}$



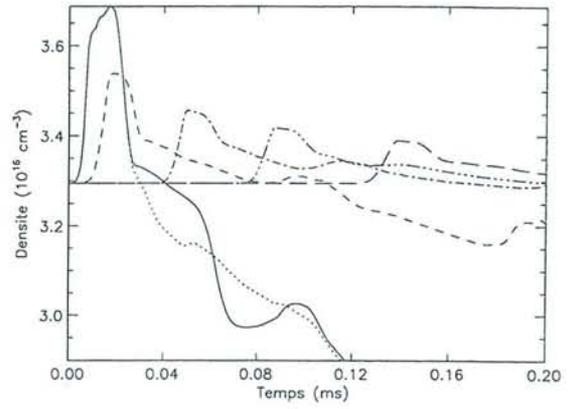
$r = 60 \text{ mm}$

figure E-7: Evolution de la pression $P(z,t)$ et du module de la vitesse $V(z,t)$
pour différentes valeurs de r

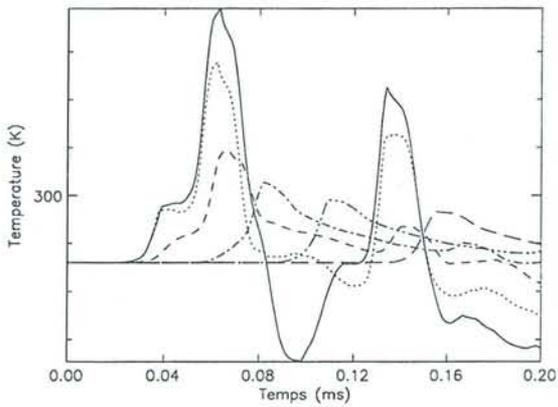




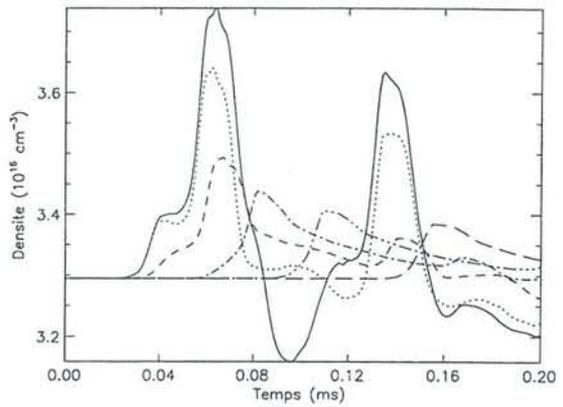
$z = 5 \text{ mm}$



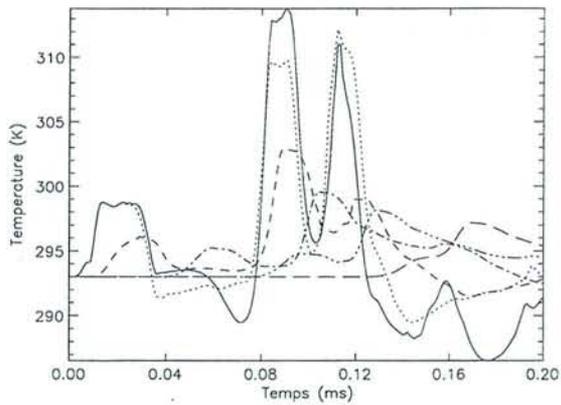
$z = 5 \text{ mm}$



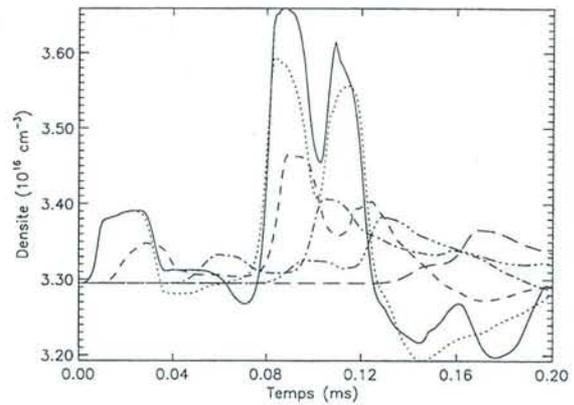
$z = 25 \text{ mm}$



$z = 25 \text{ mm}$



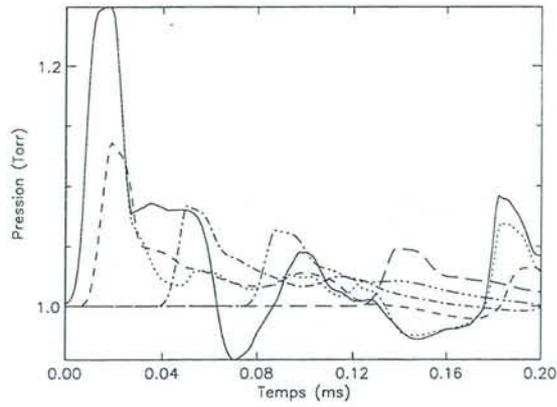
$z = 35 \text{ mm}$



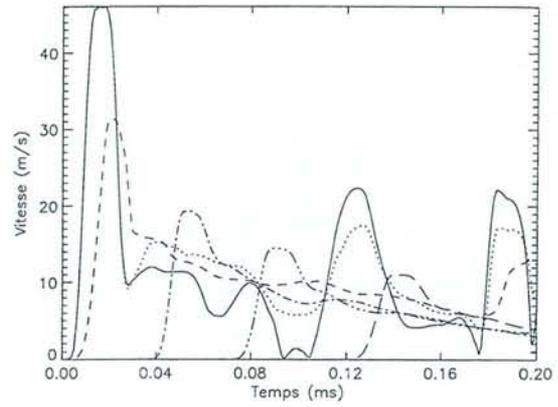
$z = 35 \text{ mm}$

Figure E-8: Evolution de la température $T(r,t)$ et de la densité $N(r,t)$
pour différentes valeurs de z

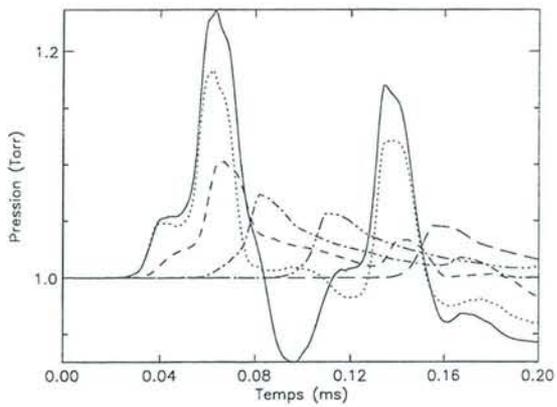
—	$r = 0 \text{ mm}$	$r = 15 \text{ mm}$	- - - -	$r = 30 \text{ mm}$
- · - · - ·	$r = 45 \text{ mm}$	· - - - - ·	$r = 60 \text{ mm}$	- - - -	$r = 80 \text{ mm}$



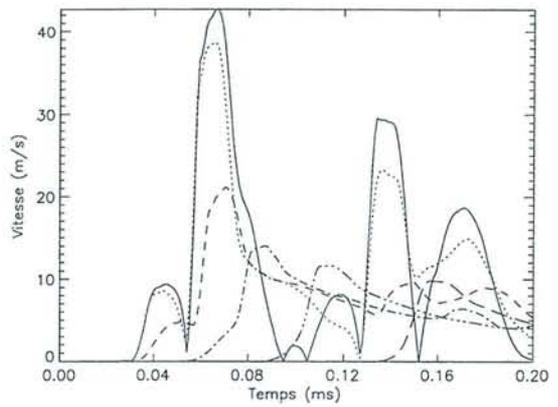
$z = 5 \text{ mm}$



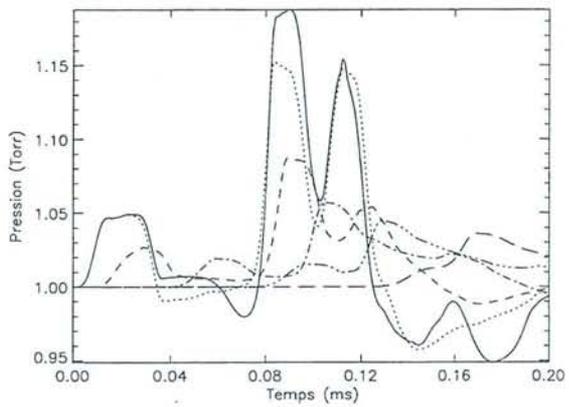
$z = 5 \text{ mm}$



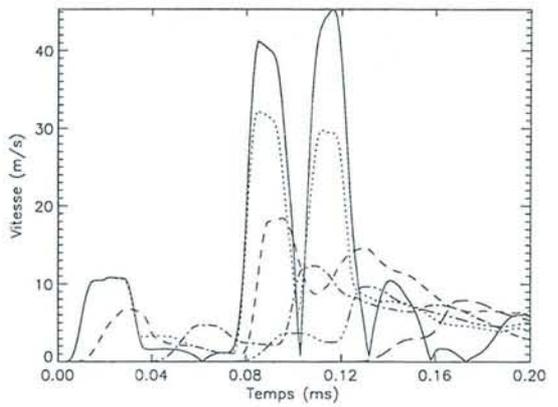
$z = 25 \text{ mm}$



$z = 25 \text{ mm}$



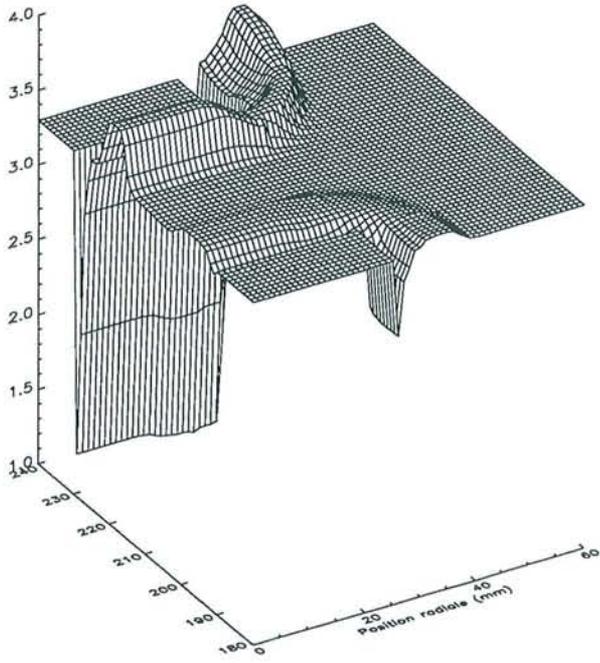
$z = 35 \text{ mm}$



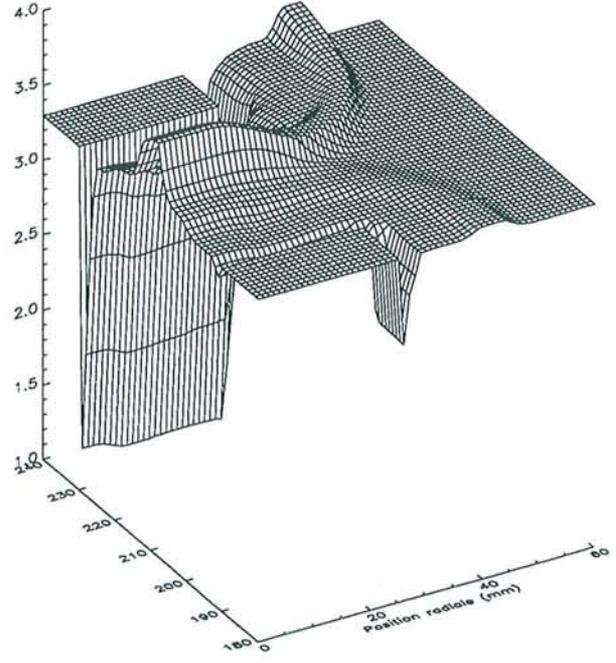
$z = 35 \text{ mm}$

Figure E-9: Evolution de la pression $P(r,t)$ et du module de la vitesse $V(r,t)$ pour différentes valeurs de z

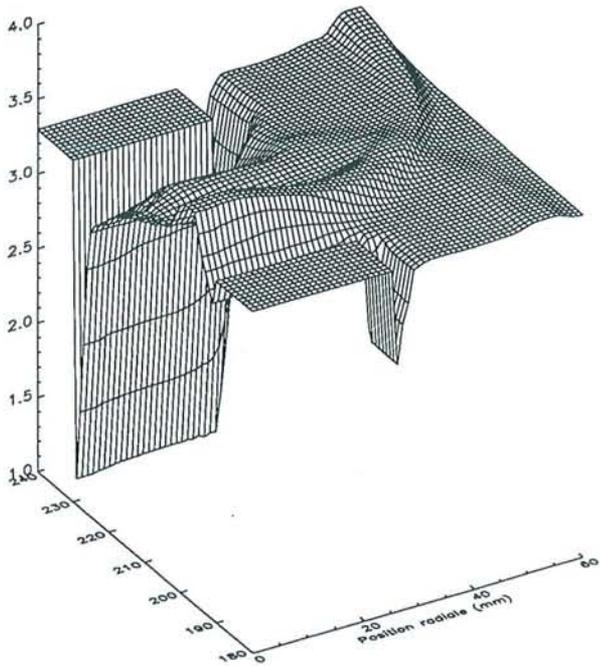
—	$r = 0 \text{ mm}$	$r = 15 \text{ mm}$	- - - -	$r = 30 \text{ mm}$
- · - · - ·	$r = 45 \text{ mm}$	· - · - · - ·	$r = 60 \text{ mm}$	- - - -	$r = 80 \text{ mm}$



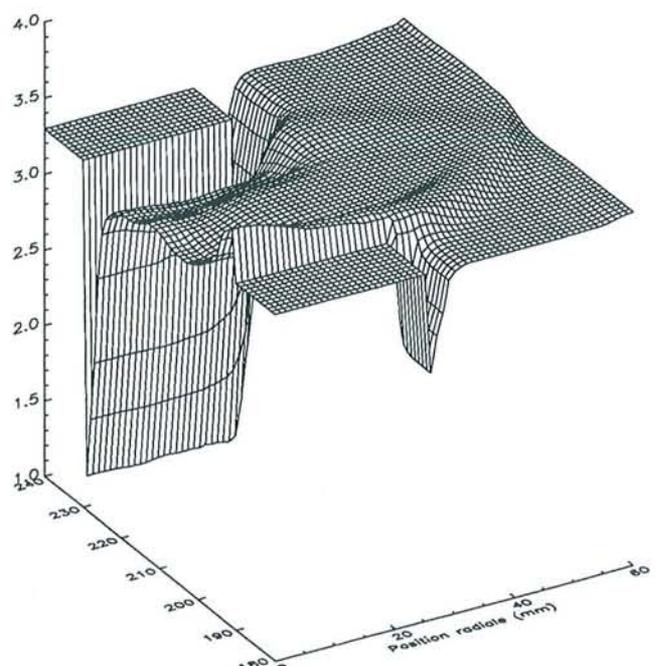
$t = 30 \mu s$



$t = 50 \mu s$

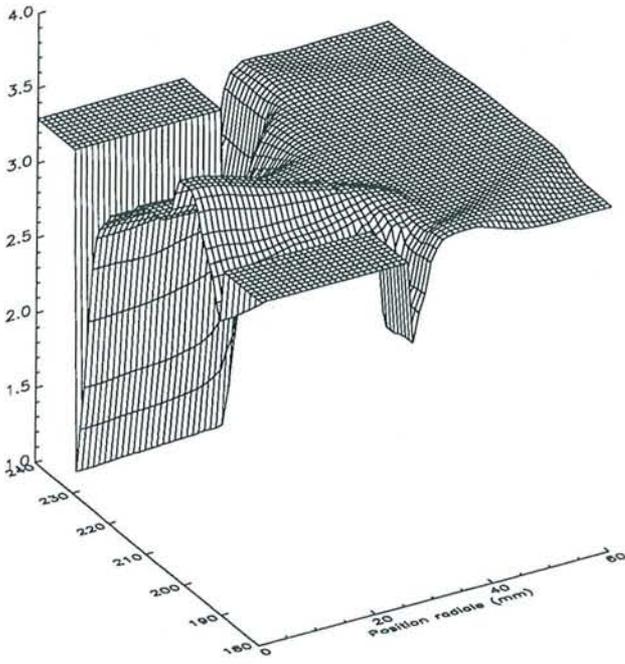


$t = 80 \mu s$

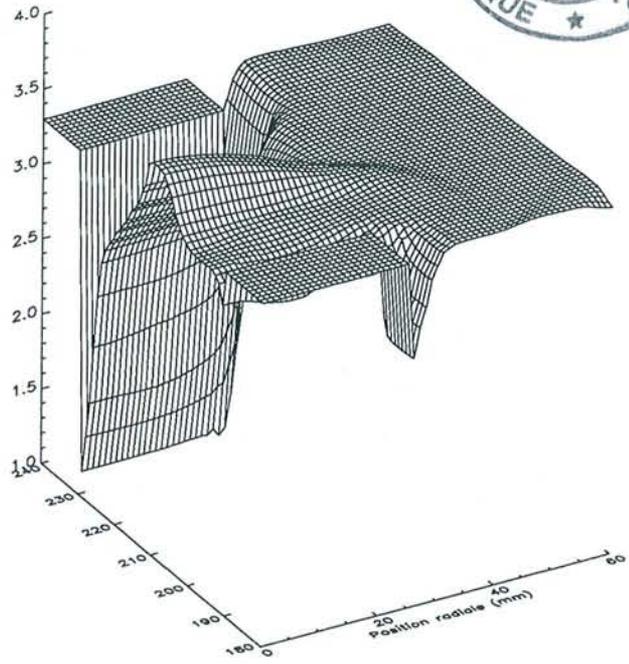


$t = 100 \mu s$

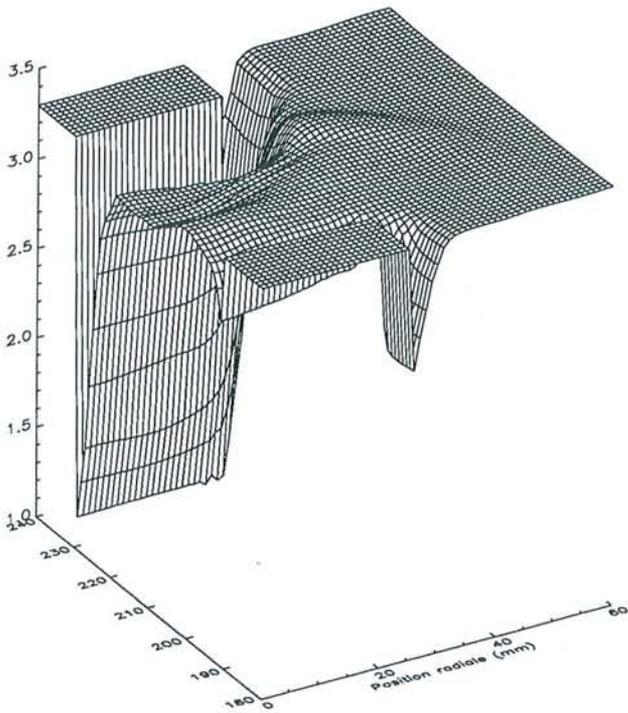
Figure E-10: Evolution spatio-temporelle de la densité de neutre $N(r, z, t)$ en 10^{16} cm^{-3}



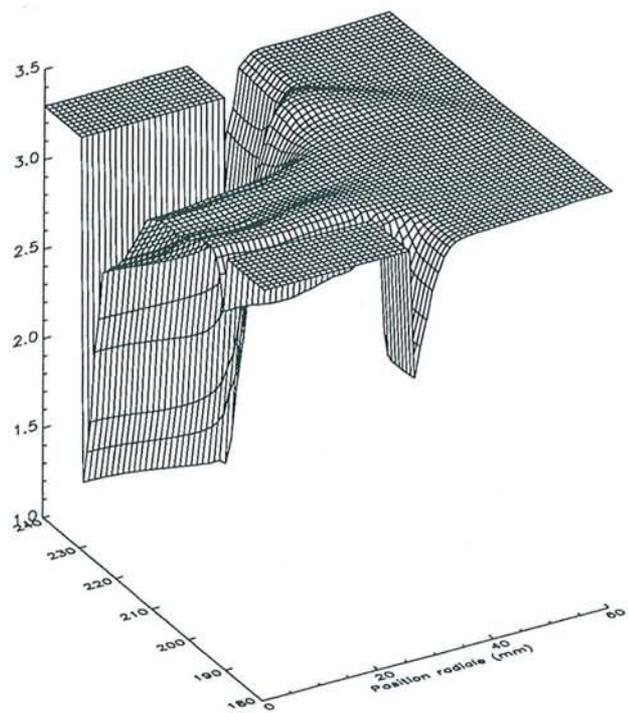
$t = 130 \mu s$



$t = 150 \mu s$



$t = 180 \mu s$



$t = 200 \mu s$

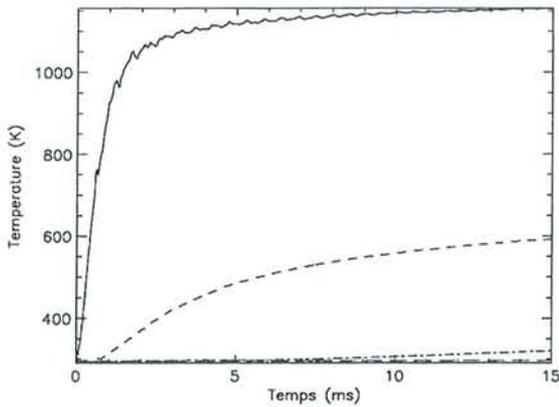
Figure E-11: Evolution spatio-temporelle de la densité de neutre $N(r, z, t)$ en 10^{16} cm^{-3}

Les figures E-10 et E-11 représentent l'évolution en trois dimensions de la densité $N(r, z)$ du gaz neutre pour plusieurs instants ($0 \leq t \leq 0,2 \text{ ms}$). Ceci nous permet d'observer la formation et la propagation des deux ondes de pression. La cathode est symbolisée par la région constante située dans le coin gauche, l'anode par la région constante située dans le coin bas. La première image ($t = 30 \mu\text{s}$) montre la formation de ces ondes. Possédant la même vitesse de propagation, elles se croisent exactement au milieu de l'espace inter électrodes ($t = 50 \mu\text{s}$). Puis elles poursuivent leur propagation jusqu'à l'électrode opposée ($t = 100 \mu\text{s}$). Là, la partie comprise dans l'espace inter électrodes se réfléchit sur l'électrode et repart dans la direction opposée. L'autre partie, qui se trouve en dehors de l'espace inter électrodes poursuit son chemin dans la direction initiale ($t = 130 \mu\text{s}$). La partie de l'onde restant dans l'espace inter électrodes crée un mouvement alternatif entre les deux électrodes, entraînant des vagues régulières hors de cet espace ($t = 200 \mu\text{s}$).

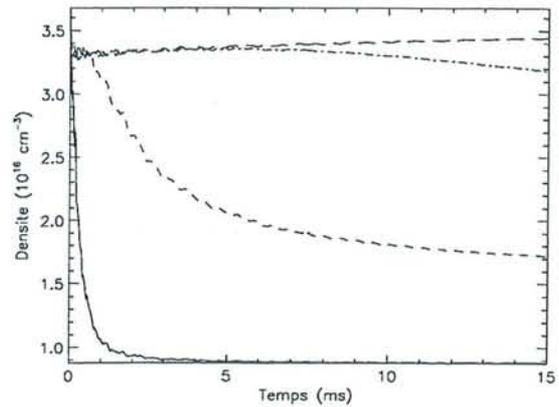
7.2 - Etude de l'injection d'énergie

Les courbes E-12 donnent l'évolution temporelle sur une durée de 15 ms de la température et de la densité pour plusieurs points du réseau défini figure E-5. On constate tout d'abord que cette durée ne suffit pas pour obtenir l'état stationnaire pour tous les points de l'axe de la décharge.

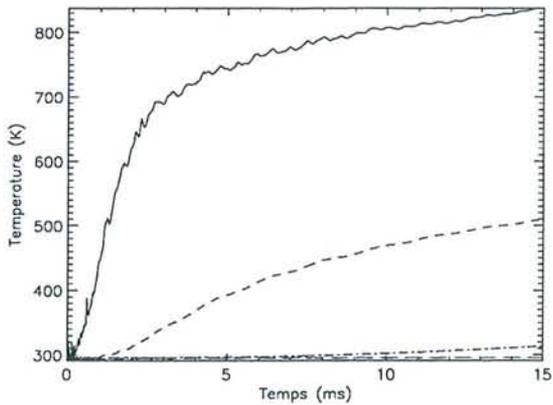
L'examen de cette série de courbes montre que la montée en température est fonction du point considéré. En effet dans les zones proches de la cathode où l'injection d'énergie est maximale, la température croît très rapidement passant par exemple de 293 K à 1150 K pour le point ($r = 0, z = 5$). Ce qui provoque un dépeuplement des particules neutres dans la région cathodique. La densité de gaz neutre diminue dans cette zone, passant de $3,4 \cdot 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ à $0,86 \cdot 10^{16} \text{ cm}^{-3}$. Par contre, ce phénomène entraîne un surpeuplement de particules dans les zones non touchées par le chauffage. En effet, la densité de gaz neutre augmente pour tous les points situés sur le rayon $r = 80 \text{ mm}$.



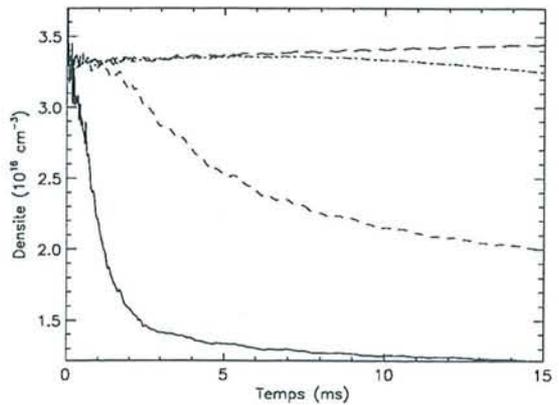
$z = 5 \text{ mm}$



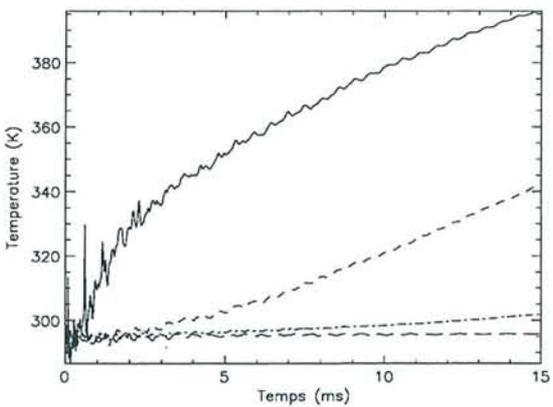
$z = 5 \text{ mm}$



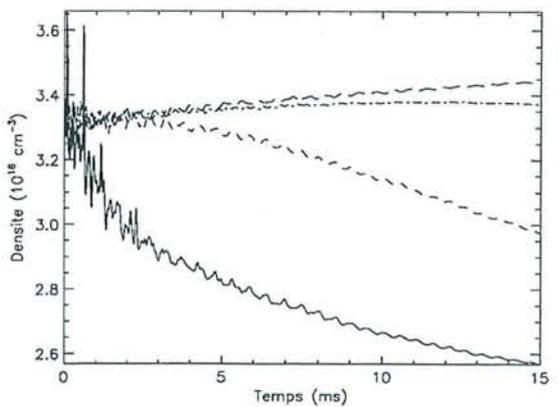
$z = 25 \text{ mm}$



$z = 25 \text{ mm}$

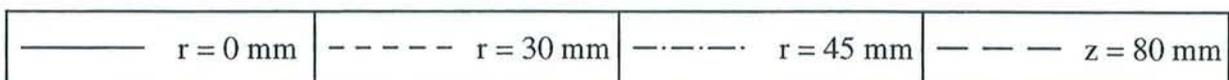


$z = 35 \text{ mm}$



$z = 35 \text{ mm}$

Figure E-12: Evolution de la température $T(r,t)$ et de la densité $N(r,t)$
pour différentes valeurs de z



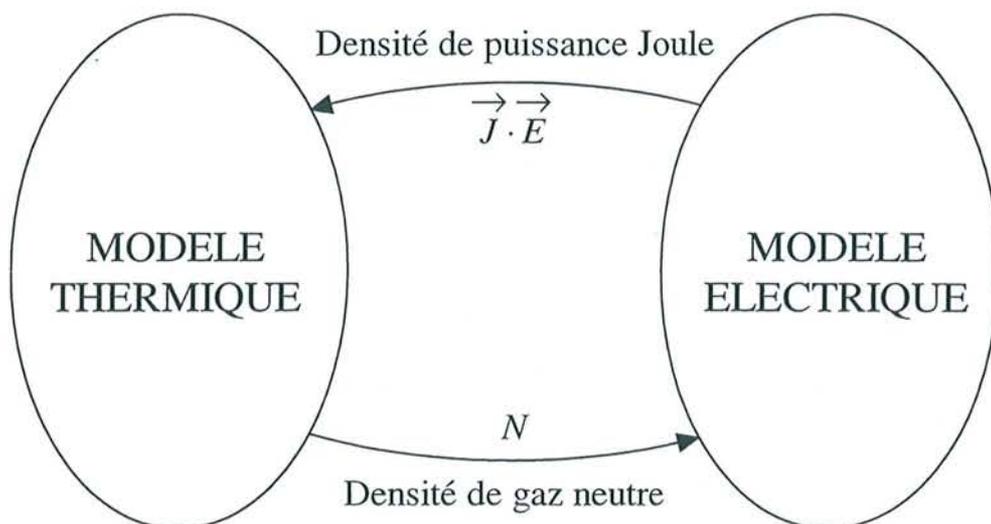


Figure E-13: Schématisation du couplage entre les modèles électrique et thermique

Les particules neutres et les particules chargées ne possèdent pas dans leurs évolutions respectives les mêmes échelles de temps. En effet, pour le gaz neutre, l'état stationnaire ne peut être atteint qu'au bout de plusieurs millisecondes alors que quelques microsecondes suffisent aux particules chargées pour atteindre cet état. Il serait donc absurde de coupler ces deux modèles en utilisant le même pas de temps. C'est pourquoi nous avons utilisé une méthode dite de 'Sub cycling' pour obtenir un couplage satisfaisant entre ces modèles.

Soient Δt_e le pas de temps du modèle électrique et Δt_n celui du modèle thermique. Δt_n est un multiple de Δt_e , on a donc $\Delta t_n = k\Delta t_e$ avec k entier. La méthode de 'sub-cycling' consiste donc à faire k boucles temporelles du modèle électrique pendant que le modèle thermique n'en fait qu'une, les données communes (densités de gaz neutre et de puissance Joule) ne sont introduites que toutes les k itérations.

Le paramètre k dépend essentiellement de l'évolution de chaque particule présente dans le milieu à simuler. Il doit être du même ordre de grandeur que le rapport des vitesses des particules neutres sur celle des particules chargées, tout en respectant les conditions de stabilité et de convergence de chaque modèle. Nous avons choisi $k = 40000$.

Une fois qu'un état d'équilibre a été atteint pour les particules chargées, il n'est plus nécessaire de faire évoluer le modèle électrique tant qu'une variation importante de densité du gaz neutre n'est pas intervenue. C'est pourquoi, le modèle global est constitué d'une succession de périodes où les deux modèles évoluent parallèlement en respectant le rapport d'itération k et de périodes où le modèle thermique évolue seul.

8.2 – Phase de décharge

8.2.1 - Présence d'une onde de pression

Comme dans le cas d'une injection d'énergie constante au cours du temps, on observe bien dans la décharge la création d'une onde de pression (figure E-14). Elle se propage dans le plasma avec une vitesse moyenne d'environ 400 m/s.

L'étude précédente nous a montré que cette onde est très vite 'noyée'. Les inhomogénéités de densité et de température qu'elle produit deviennent rapidement négligeables devant celles issues de l'injection d'énergie.

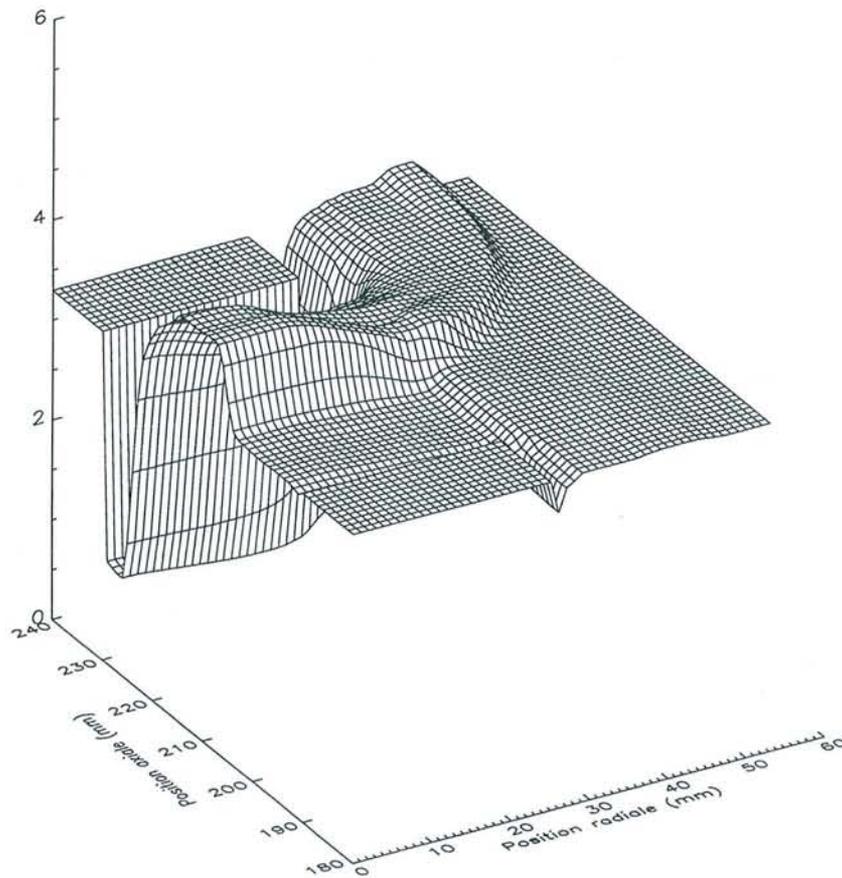


Figure E-14 : Evolution spatiale de la densité de gaz neutre $N(r, z)$ à $t = 30 \mu\text{s}$

(Unité : 10^{16} cm^{-3})

8.2.2 - Présentation des courbes de courant

Evolution temporelle du courant de décharge ($P = 1$ Torr, $U = 1000$ Volts)

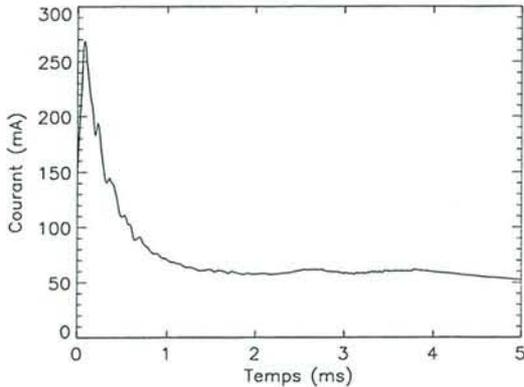


Figure E-15 : Modèle couplé

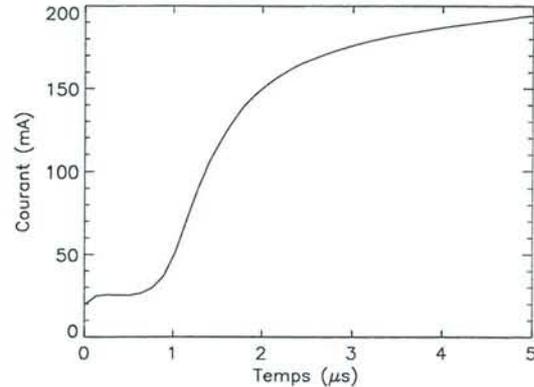


Figure E-16 : Modèle électrique seul

Les figures E-15 et E-16 représentent une comparaison de l'évolution temporelle du courant de décharge dans les conditions suivantes :

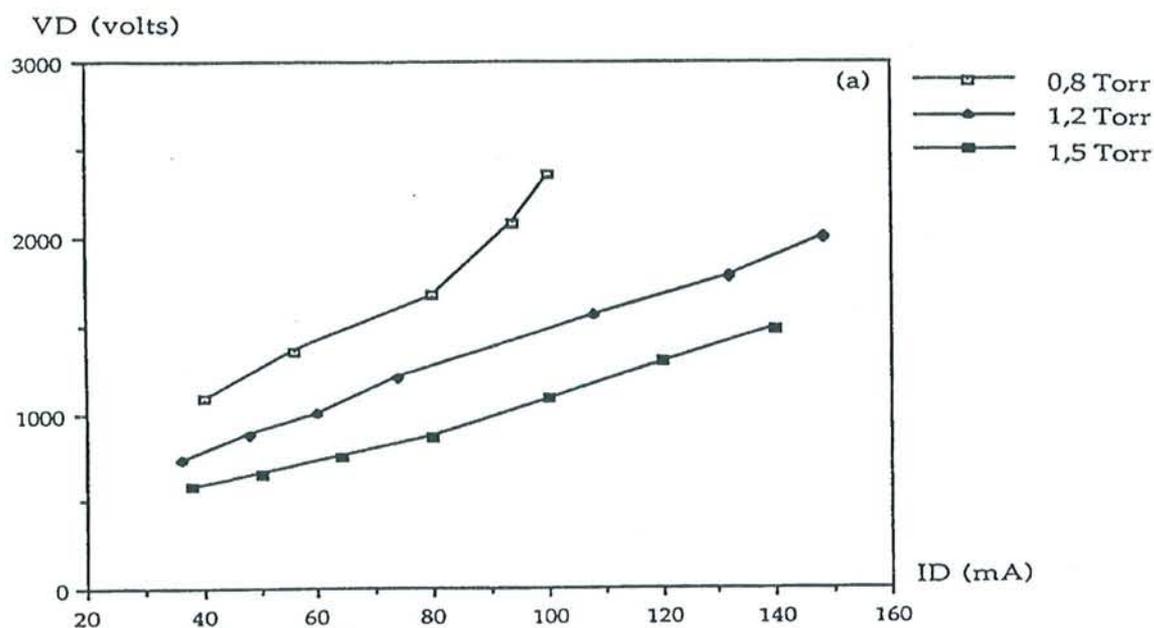
- Couplage entre les modèles électrique et thermique pour la figure E-15.
- Modèle électrique à deux populations d'électrons pour la figure E-16.

On constate que dans le cas du modèle électrique seul, l'état stationnaire est obtenu au bout de quelques micro-secondes. Par contre, dans le cas du modèle couplé, quelques millisecondes sont nécessaires pour obtenir l'état stationnaire. Cet ordre de grandeur est comparable à celui mesuré expérimentalement.

Une des différences marquantes entre les deux évolutions du courant est la présence d'un pic d'amorçage dans le cas du modèle prenant en compte la dynamique des neutres, alors que dans le cas du modèle électrique, le courant augmente de façon régulière jusqu'à sa stabilisation. Comme le montre l'oscillogramme A-6, ce pic d'amorçage est observé expérimentalement. Il est d'autant plus marqué que le temps de décharge est bref et le temps de post décharge est long. Ce qui correspond à des conditions où les variations de température et de densité du gaz neutre sont importantes durant les deux phases.

Le modèle numérique nous a permis de déterminer l'origine de ce phénomène. La détection expérimentale de la présence de ce pic permet donc un contrôle de l'effet de refroidissement du gaz neutre, correspondant à des conditions défavorables pour le traitement de nitruration.

Si l'on ne prend pas en compte les effets de la dynamique des neutres, pour une pression d'un torr et une tension de 1000 Volts, on obtient un courant de décharge à l'état stationnaire de l'ordre de 190 mA. Par contre, lorsque ces effets sont pris en compte, le courant présente un pic d'amorçage d'amplitude 280 mA puis se stabilise aux environs de 50 mA. Les deux simulations réalisées correspondent à la description de deux régimes différents et sont correctes toutes les deux. Comme nous l'avons vu au chapitre précédent, la simulation utilisant le modèle électrique seul fournit des résultats satisfaisants pour des décharges présentant des temps de décharge courts et des temps de post décharge longs. La simulation utilisant le modèle couplé retranscrit bien la cas d'un plasma continu. Les valeurs de courant obtenus sont du même ordre de grandeur que celles obtenues en régime continu par J. Bougdira^[5].



8.2.3 – Etude des grandeurs électriques

Les figures E-18 à E-21 représentent l'évolution spatio-temporelle des différentes grandeurs accessibles grâce au modèle numérique couplé dans les conditions définies au paragraphe précédent. Cette évolution est séparée en deux parties:

- une première partie, appelée 'TEMPS COURTS', représente les grandeurs pour des temps allant de 0 à 500 μs . La légende des figures E-18 et E-19 est donnée dans le tableau T-7.

- une deuxième partie, appelée 'TEMPS LONGS' représente les mêmes grandeurs mais pour des temps allant de 0 à 5 ms. La légende des figures E-20 et E-21 est donnée dans le tableau T-8.

—————	t = 2 μs	t = 100 μs	- - - - -	t = 200 μs
- . - . - .	t = 300 μs	· — · — ·	t = 400 μs	- - - - -	t = 500 μs

Tableau T-7 : Légende des figures E-18 et E-19

—————	t = 2 μs	t = 1 ms	- - - - -	t = 2 ms
- . - . - .	t = 3 ms	· — · — ·	t = 4 ms	- - - - -	t = 5 ms

Tableau T-8 : Légende des figures E-20 et E-21

* Expansion des zones

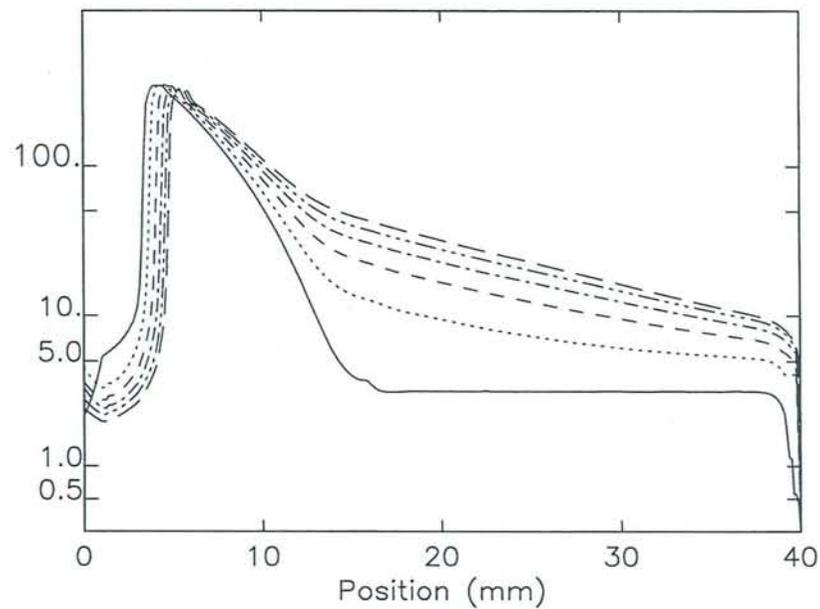
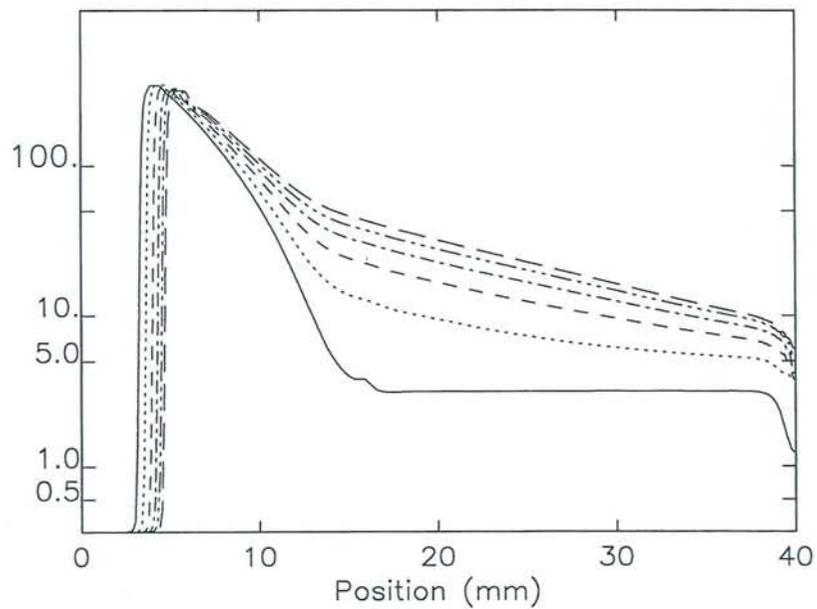
Les courbes de champ électrique et de densité des électrons rapides montrent l'expansion de la lueur négative dans l'espace inter électrodes, entraînant ainsi la disparition progressive de la colonne positive. Au bout de 500 μs , la colonne positive a totalement disparue. L'espace inter électrodes n'est plus constituée que par la lueur négative et la chute cathodique. La longueur de cette dernière augmente aussi au cours du temps. La disparition de la colonne positive et l'expansion de la lueur négative a été également mis en évidence par spectroscopie optique d'émission (figures A-12 à A-15). Le modèle couplé nous a donc permis d'obtenir une description très satisfaisante des différentes zones présentes dans une décharge continue.

* Etude de la température axiale du gaz neutre

Dans les premiers instants de la décharge, la température du gaz neutre croît très rapidement dans la chute cathodique où le dépôt d'énergie par effet Joule est important. Ce chauffage entraîne un dépeuplement des particules neutres dans cette zone. Les électrons rapides sont

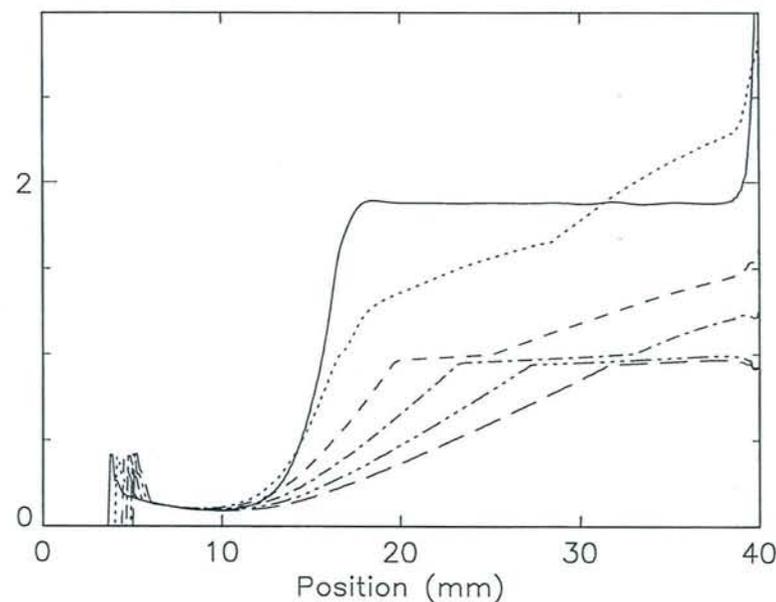
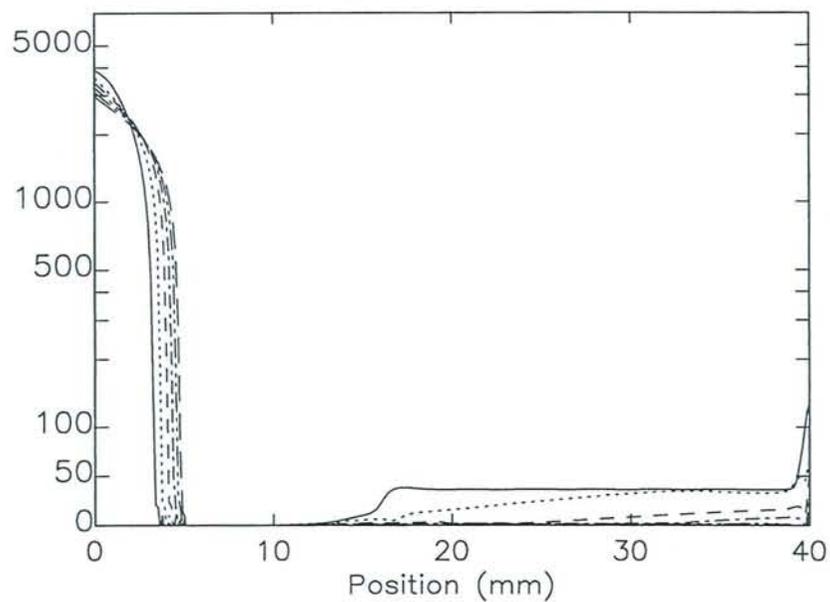
alors soumis à un régime de moins en moins collisionnel conduisant à une augmentation de leur énergie. Ces électrons possèdent alors une énergie plus élevée lors de leur entrée dans la lueur négative et doivent donc parcourir une plus grande distance avant de se thermaliser, permettant ainsi une première expansion de la lueur négative.

Par la suite, le chauffage du gaz s'étend à travers la lueur négative, entraînant un dépeuplement des particules neutres dans cette zone. Le nombre de collisions permettant aux électrons rapides de perdre leur énergie diminue. Ce phénomène permet un libre parcours moyen de ces électrons de plus en plus grand, ce qui justifie l'expansion de cette zone.



Densité des électrons lents (10^9 cm^{-3})

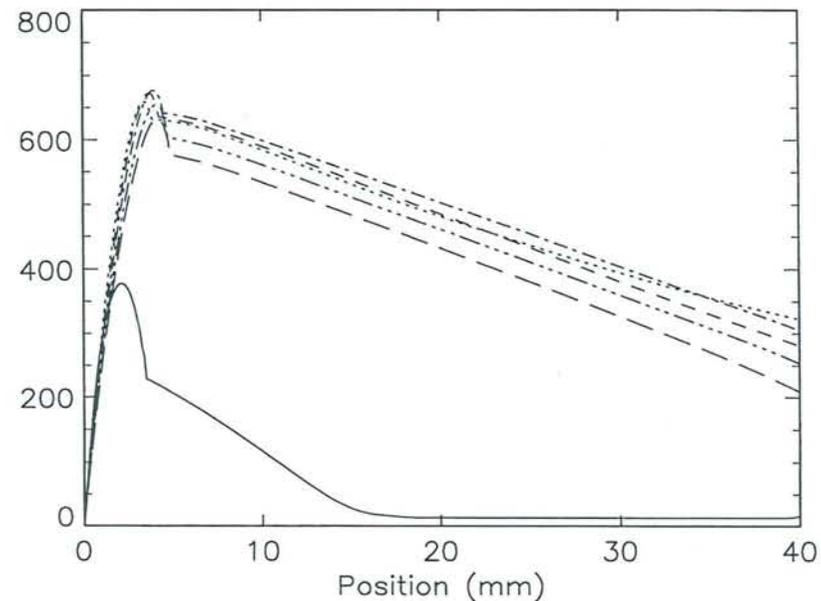
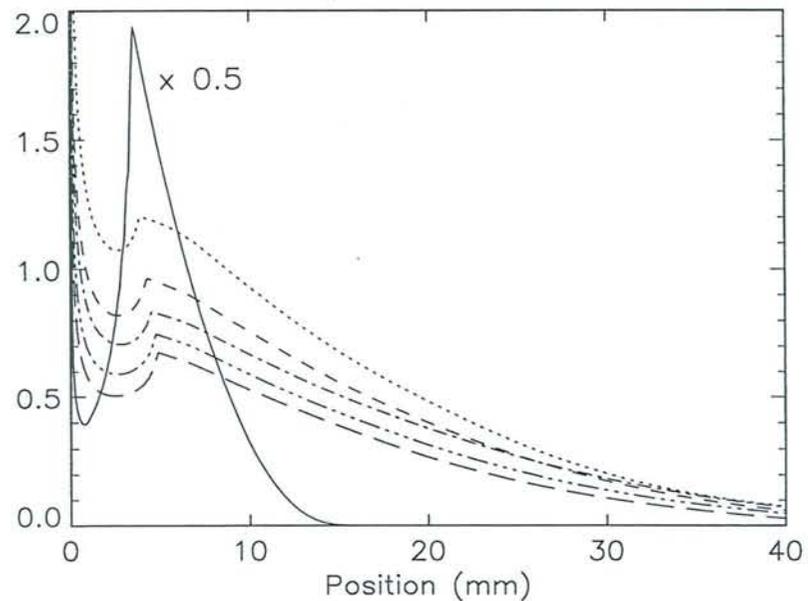
Densité ionique (10^9 cm^{-3})



Champ électrique (V/cm)

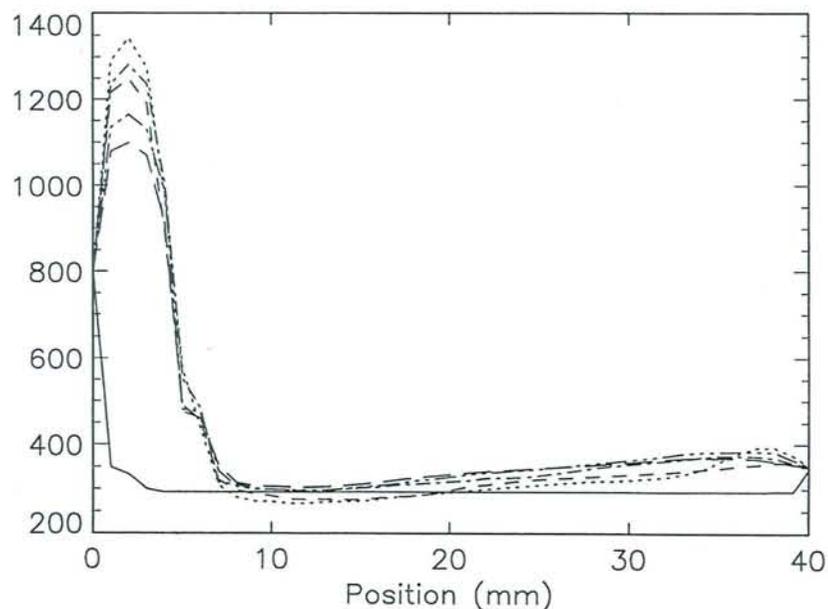
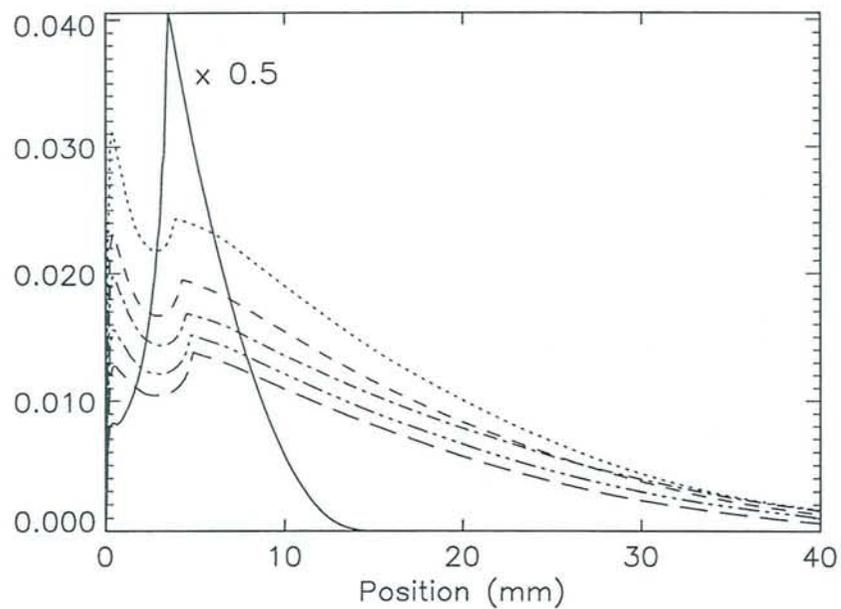
Température des électrons lents (eV)

TEMPS COURTS



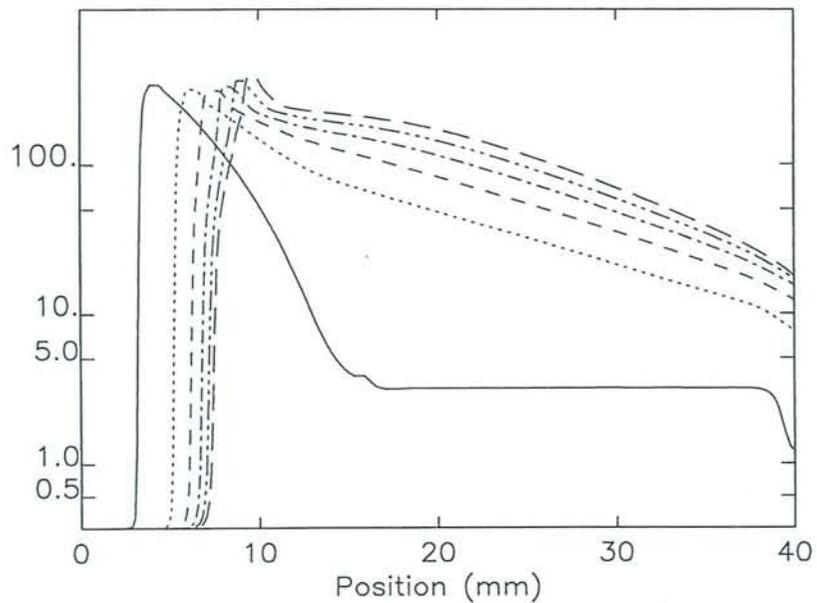
Densité des électrons rapides (10^7 cm^{-3})

Energie des électrons rapides (eV)

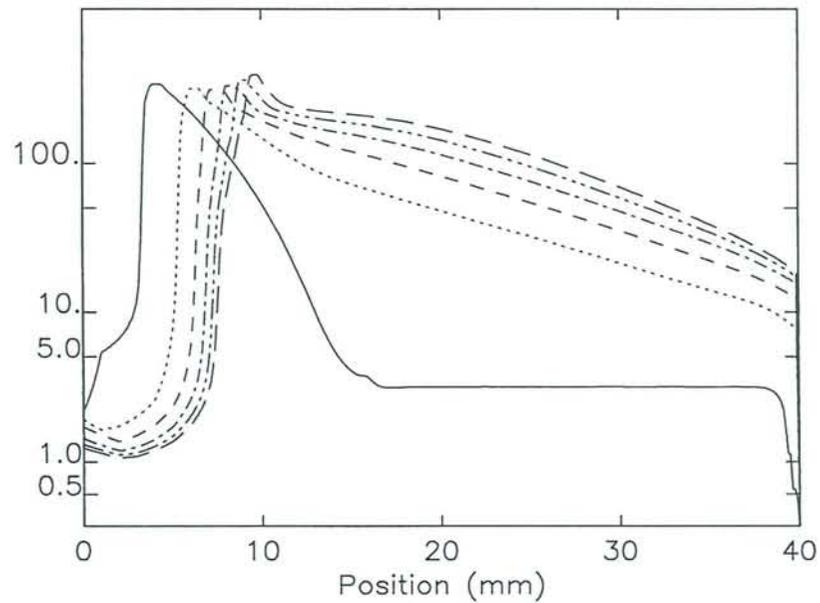


Intensité du 1^{er} système négatif

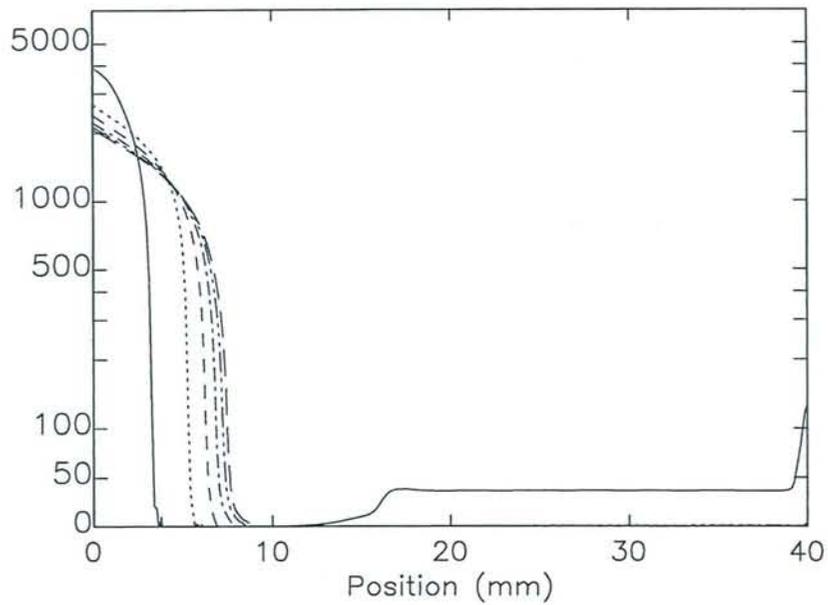
Température axiale des neutres (K)



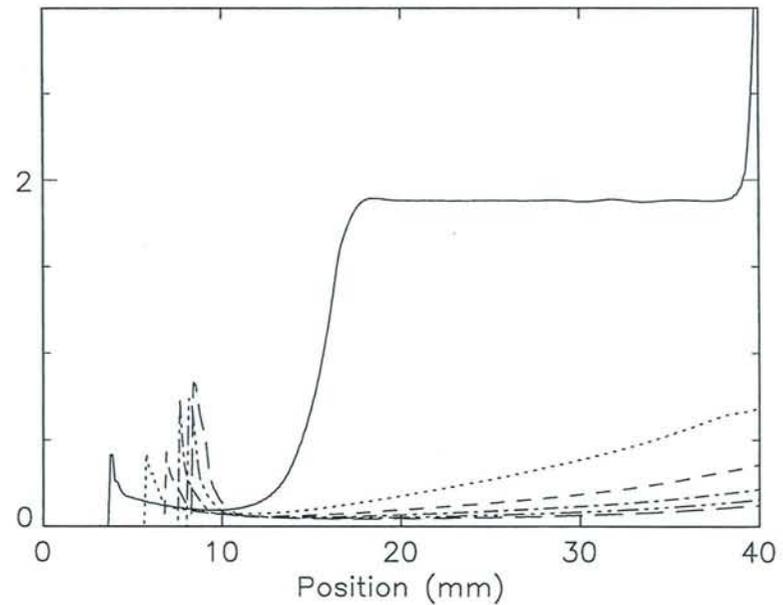
Densité des électrons lents (10^9 cm^{-3})



Densité ionique (10^9 cm^{-3})

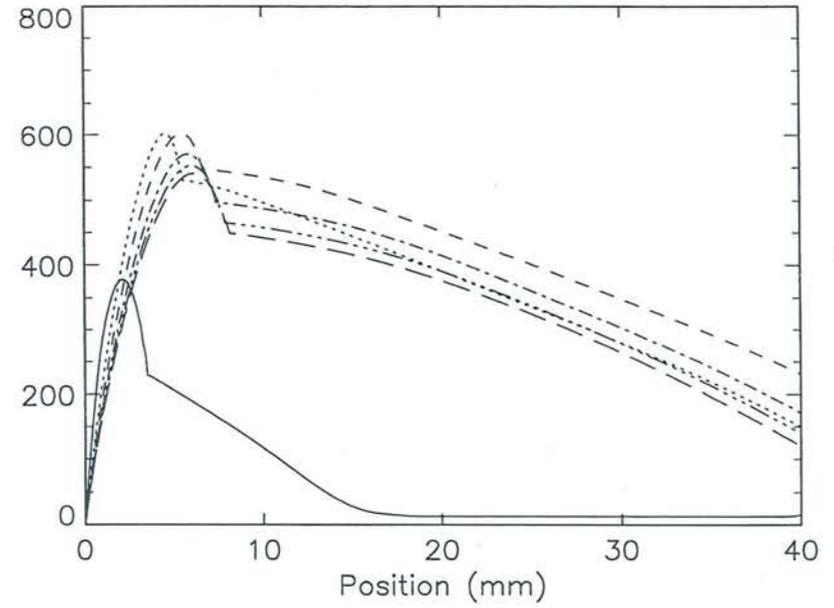
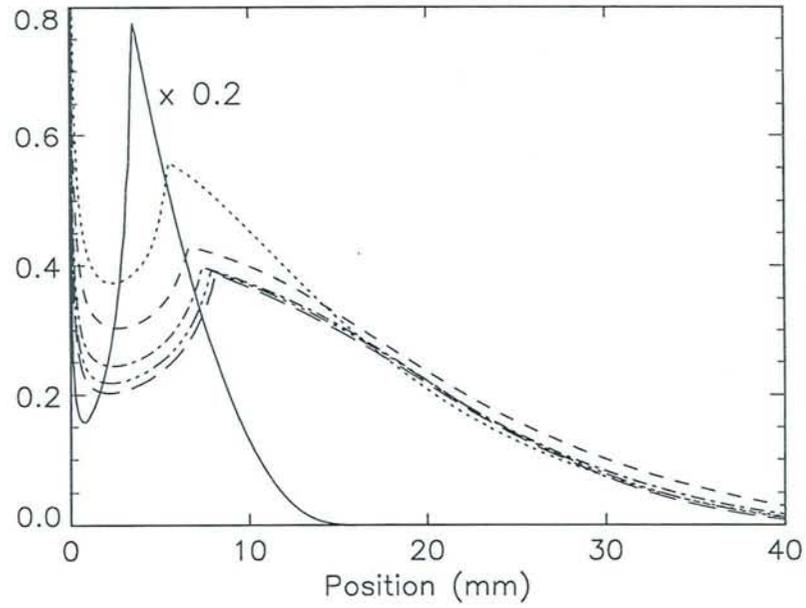


Champ électrique (V/cm)



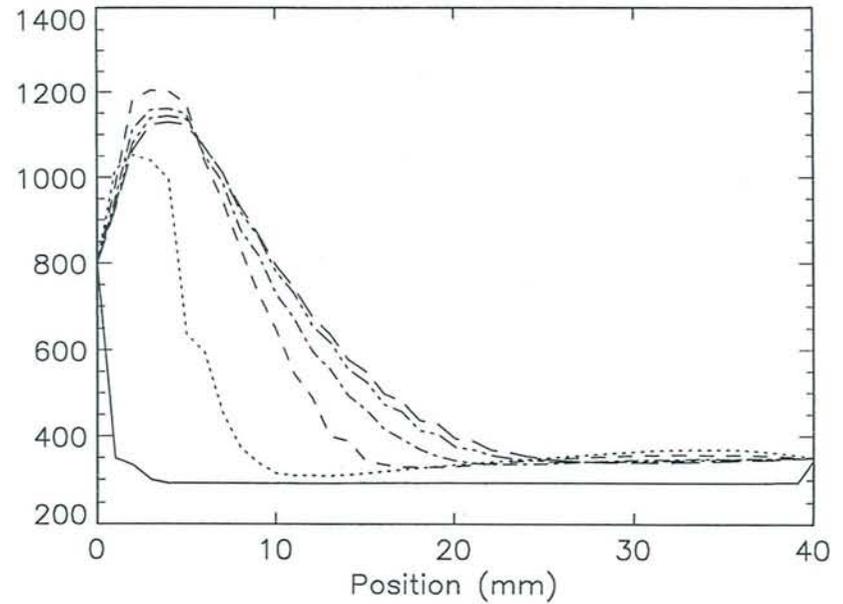
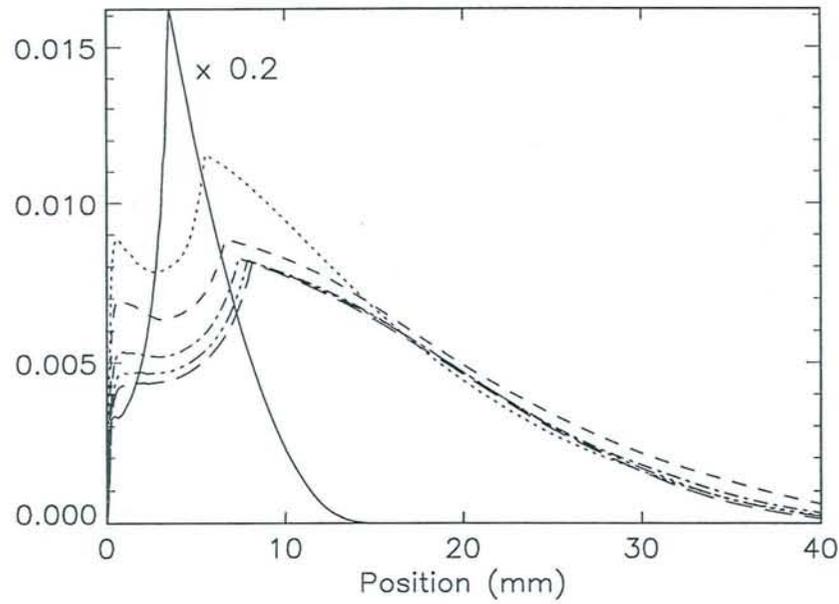
Température des électrons lents (eV)

TEMPS LONGS



Densité des électrons rapides (10^7 cm^{-3})

Energie des électrons rapides (eV)



Intensité du 1^{er} système négatif

Température axiale des neutres (K)

8.3 – Phase de post décharge

Nous allons nous intéresser maintenant à l'évolution des particules neutres dans la phase de post décharge. Au bout de 5 ms de la décharge étudiée au paragraphe précédent, nous avons annulé le terme source d'injection d'énergie par effet Joule et laissé évoluer le gaz neutre pendant 5 ms. Le temps $t = 0$ ms correspond à la coupure de la décharge.

Evolution temporelle de la température et de la densité du gaz neutre en phase de post décharge

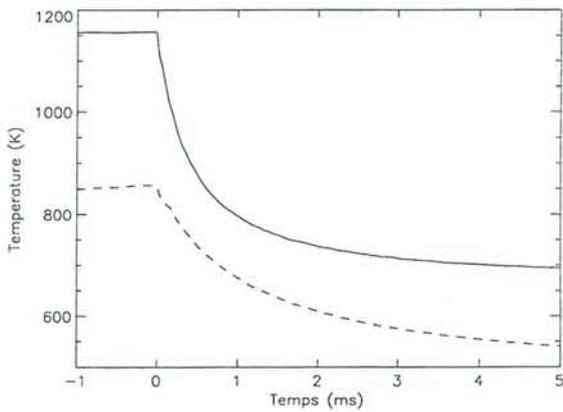


Figure E-22 : Température $T(t)$

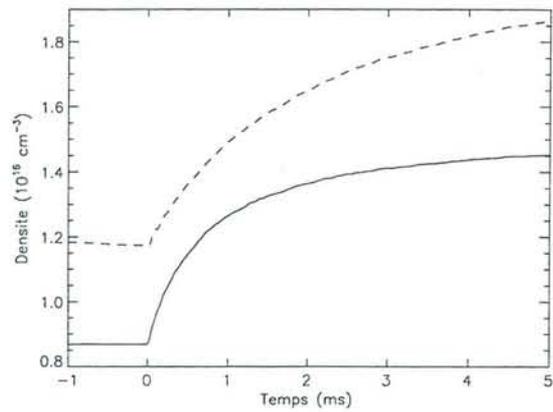


Figure E-23 : Densité $N(t)$

Profil de densité de gaz neutre en début et fin de post-décharge

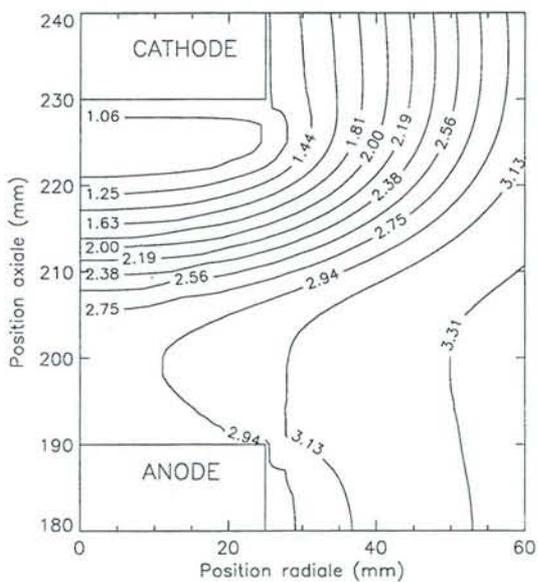


Figure E-24 : $t = 0$ ms

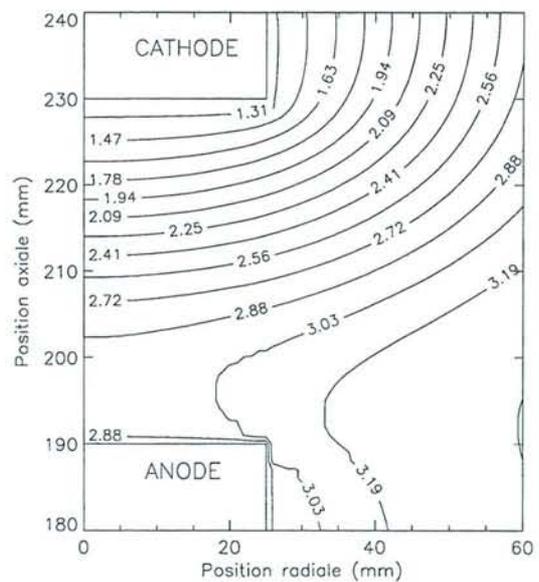


Figure E-25 : $t = 5$ ms

Les figures E-22 et E-23 montrent l'évolution temporelle pendant la phase de post décharge de la température et de la densité du gaz neutre pour deux points situés sur l'axe de la décharge:

- à 5 mm de la cathode pour la courbe continue.
- à 15 mm de la cathode pour la courbe en tirets.

On constate que la température décroît rapidement dans les régions proches de la cathode, passant de 1150 K à 700 K pour le point le plus proche de l'électrode. Ce phénomène entraîne un repeuplement des particules neutres dans cette zone. Leur densité augmente d'environ 70% dans cette zone sur un temps de 5 ms.

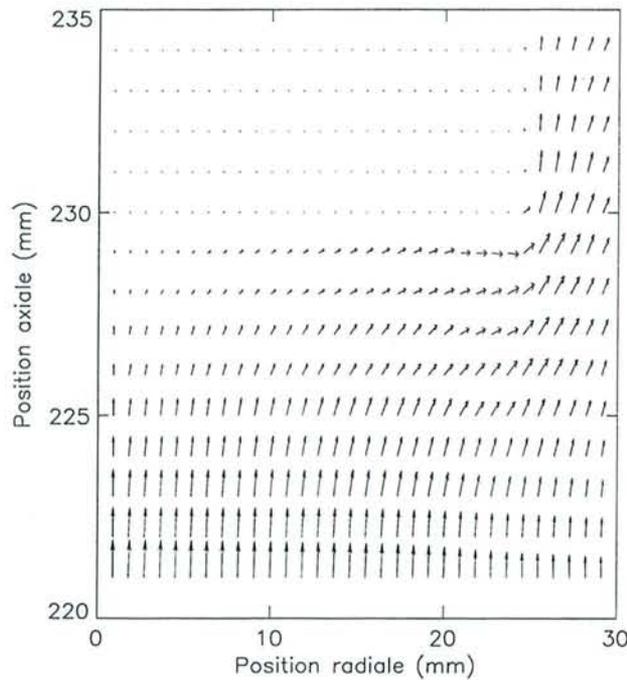


Figure E-26 : Champ de vitesse des particules neutres dans la région proche de la cathode à 0,5 ms

Le champ de vitesse de la figure E-26 montre que les particules neutres tendent à se diriger vers la cathode. Ce qui augmente le flux de gaz neutre arrivant sur l'échantillon constituant l'électrode.

En ce qui concerne le traitement de nitruration, les espèces potentiellement réactives possèdent généralement une durée de vie longue (de l'ordre de quelques centaines de millisecondes pour l'azote atomique N et de l'ordre de la seconde pour $N_2(A)$ et

$N_2(X, \nu)^{[6], [7]}$). Si l'on considère le milieu de l'espace inter électrodes comme une source d'espèces réactives, l'augmentation du flux de gaz neutre vers la cathode entraîne un apport supplémentaire d'espèces nitrurantes sur l'échantillon. Même si en phase de post décharge, le taux global d'espèces actives diminue, ce phénomène peut contribuer à une meilleure distribution de ces espèces pour la nitruration.

Il est clair qu'une analyse plus fine prenant en compte l'injection et le pompage du gaz serait nécessaire pour valider cette hypothèse. On peut toutefois signaler que le temps de séjour des espèces dans le réacteur est de l'ordre de cinq secondes, ce qui représente mille fois la durée d'une post décharge.

Les décharges qui ont été décrites précédemment correspondent à des décharges pulsées ayant des longs temps de post décharge puisque le gaz neutre est supposé au repos et à la température ambiante à chaque début de cycle. Si l'on souhaite décrire des décharges pulsées correspondant à des cas réalistes de traitement, il est nécessaire de considérer plusieurs cycles de décharge et de post-décharge en prenant comme conditions initiales d'un cycle de décharge les conditions finales du cycle de post décharge précédent. En effet, le pic d'amorçage décrit précédemment est symptomatique du brusque chauffage du gaz neutre. En réarmorçant à partir des conditions finales du cycle précédent, plus le temps de post décharge sera bref, plus le profil de densité du gaz neutre se rapproche de celui obtenu en décharge et le pic d'amorçage devrait diminuer comme nous l'avons constaté expérimentalement.

IX – CONCLUSION

Dans ce dernier chapitre, nous avons présenté le couplage entre le modèle électrique à deux populations d'électrons et un modèle thermique décrivant l'évolution dynamique du gaz neutre. Cette simulation nous a permis d'affirmer que la prise en compte des inhomogénéités en température et en densité du gaz neutre était indispensable pour décrire de façon correcte notre décharge diode, et en particulier dans les zones proches de la cathode. Cette remarque est d'autant plus importante dans le cas d'un plasma pulsé où le gaz neutre évolue suivant des phases successives de chauffage et de refroidissement.

Bibliographie du chapitre E

- [1] R.B. BIRD, W.E. STEWART, N.E. LIGHTFOOT, 'Transport phenomena', Ed. John Wiley, New York, (1960)
- [2] D.J. HIRCHFELDER, F.E. CURTISS, R.B. BIRD, 'Molecular theory of gases and liquids', Ed. John Wiley, New York, (1954)
- [3] R.W. POWELL, C.Y. HO, P.E. LILEY, 'Handbook Chemistry and physics', (1973)
- [4] S.T. ZALESK, J. Comp. Phys., **31**, 335, (1979)
- [5] J. BOUGDIRA, Thèse de l'Université de Nancy I, (1990)
- [6] B. MASSABIEAUX, Thèse de l'université Paris XI, Orsay, (1982)
- [7] J.L. MARCHAND, Thèse de l'I.N.P.L., Nancy, (1988)

Conclusion

L'objet de ce travail était la modélisation d'une décharge diode dans l'azote utilisée pour nitrurer des échantillons de fer, d'acier, voire d'aluminium. Dans un premier temps, nous avons adapté le modèle hydrodynamique développé par P Bayle aux conditions de fonctionnement du réacteur utilisé au laboratoire. Ce modèle est constitué par les trois premiers moments de l'équation de Boltzmann pour la description des électrons. Les ions, qui sont en équilibre avec le champ électrique local, sont décrits à l'aide d'une équation de conservation de la densité et une équation de mobilité. L'ensemble de ces équations est couplé à l'équation de Poisson afin d'obtenir le profil de champ électrique.

Afin d'améliorer la description des différentes zones de la décharge et les mécanismes d'ionisation, il a été nécessaire de séparer en deux populations les électrons. Une première population, constituée par les électrons primaires, est décrite à l'aide d'un faisceau monoénergétique. Il est issu de la cathode sous l'effet du bombardement ionique. La seconde population, constituée par les électrons ultimes, est quant à elle décrite à l'aide d'une fonction de distribution maxwellienne. Ce nouveau modèle nous a permis d'obtenir une meilleure description de la décharge. En effet, les comparaisons effectuées entre le premier code et les résultats expérimentaux nous ont montré que les longueurs de lueur négative obtenues numériquement étaient trop faible vis à vis de l'expérience. L'addition d'une nouvelle population d'électrons, à savoir les électrons rapides, a permis à la fois une augmentation de la taille de cette zone ainsi qu'une description en bien meilleur accord avec les résultats expérimentaux. En particulier, le cas de plasma pulsé avec des temps de décharge brefs et des temps de post décharge longs est très bien modélisé par ce nouveau code. Nous obtenons un très bon accord entre expérience et simulation dans la comparaison de l'émission du premier système négatif ainsi que pour la comparaison des courants de décharge à différentes tensions et différentes pressions. Il a été montré que dans la chute cathodique et dans la lueur négative, l'état $N_2^+(B)$ est principalement peuplé par impact des électrons rapides sur la molécule d'azote dans son état fondamental. Par contre, il a été montré que ce type de modèle se révèle

inadapté en régime continu ou en régime pulsé avec des temps de décharge relativement longs. Une étude expérimentale systématique nous a conduit à penser que le désaccord résidait essentiellement dans le fait que le gaz porteur est considéré comme un thermostat à température ambiante.

Pour prendre en compte ces effets d'évolution du gaz neutre, nous avons couplé le modèle électrique précédemment décrit avec un modèle thermique bidimensionnel. Ce modèle permet d'obtenir les évolutions spatio-temporelles de la température, de la densité et de la vitesse du gaz électriquement neutre. Un des résultats importants obtenus à l'aide de ce code est l'observation de l'expansion progressive de la chute cathodique et de la lueur négative, ainsi que la disparition de la colonne positive, au cours de la décharge. Ce phénomène a été également observé expérimentalement lors de l'étude de plasma en régime pulsé ayant de longs temps de post décharge. L'introduction de la dynamique des neutres dans notre modèle permet d'obtenir des courants nettement inférieurs à ceux obtenus à l'aide du modèle électrique seul. Ces courants sont du même ordre de grandeur que les courants expérimentaux obtenus en régime continu. L'utilisation de ce code a permis également de rendre compte du pic d'amorçage observé expérimentalement sur le courant de décharge. L'origine de ce phénomène est le refroidissement du gaz neutre pendant la post-décharge et son échauffement lors de la phase de décharge. Il a pu être montré lors de cette étude l'importance de l'inhomogénéité de la densité du gaz porteur en plasma pulsé dans les zones proches de la cathode. Le code numérique actuel permet donc de décrire de façon très satisfaisante des plasmas pulsés à long temps de post-décharge avec des décharges pouvant atteindre plusieurs millisecondes.

Ce code sera également capable de décrire des décharges à temps de post-décharges plus brefs, pour cela il suffira de simuler plusieurs pulses et de réinjecter la répartition de la densité de particules neutres obtenue en fin de post-décharge dans le modèle global (électrique+neutre). A partir de ce stade, les différents types de plasmas pulsés étudiés expérimentalement seront bien décrits du point vue électrique et thermique. Différentes évolutions sont maintenant possibles :

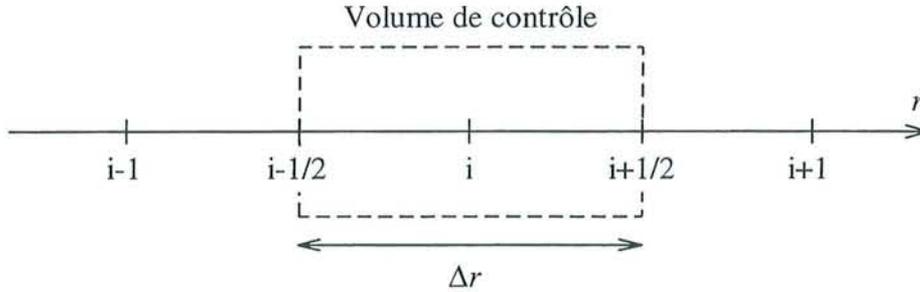
- * une description plus fine du faisceau d'électrons rapides en utilisant un modèle Monté Carlo permettrait de traiter les électrons secondaires.
- * l'introduction de la cinétique chimique permettra une meilleure connaissance de la réactivité de ce type de plasma.

ANNEXE A

Discrétisation par la méthode des volumes finis

Nous présentons ici l'intégration temporelle et l'intégration spatiale de l'équation générale de

transport $\frac{\partial \rho \Phi}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot (\rho \Phi \vec{V} - \Gamma_{\Phi} \vec{\nabla} \Phi) = S_{\Phi}$ sur le volume de contrôle défini ci dessous:



On définit maintenant les quantités suivantes:

- τ_i représente la valeur du volume de contrôle.
- $A_{i-1/2}$ et $A_{i+1/2}$ représentent les valeurs de l'aire de l'interface en $i-1/2$ et $i+1/2$.
- σ_i représente la valeur de l'aire entourant le volume de contrôle.

Ces quantités prennent des valeurs différentes suivant le système de coordonnées choisi:

Forme de la cellule	Parallépipédique	Cylindrique	Sphériques
$A_{i+1/2}$	1	$2\pi h r_{i+1/2}$	$4\pi r_{i+1/2}^2$
τ_i	$r_{i+1/2} - r_{i-1/2}$	$\pi h (r_{i+1/2}^2 - r_{i-1/2}^2)$	$\frac{4}{3} \pi (r_{i+1/2}^3 - r_{i-1/2}^3)$

h étant la hauteur de la cellule

Remarque: On suppose dans toutes la suite que le réseau ne varie pas en fonction du temps, les quantités $A_{i+1/2}$ et τ_i sont donc constantes au cours du temps.

L'intégration spatio-temporelle de l'équation nous donne:

$$\underbrace{\int_t^{t+\Delta t} \int_{(\tau_i)} \frac{\partial \rho \Phi}{\partial t} d\tau_i dt}_{I_1} + \underbrace{\int_t^{t+\Delta t} \int_{(\tau_i)} \left\{ \vec{\nabla} \cdot (\rho \Phi \vec{V} - \Gamma_\Phi \vec{\nabla} \Phi) \right\} d\tau_i dt}_{I_2} = \underbrace{\int_t^{t+\Delta t} \int_{(\tau_i)} S_\Phi d\tau_i dt}_{I_3}$$

où l'on désigne par I_1 , I_2 et I_3 les trois termes de cette équation.

* Calcul du terme I_1 :

Pour le calcul du terme I_1 , on suppose que la quantité $\rho \Phi$ au noeud i est constante sur tout le volume de contrôle τ_i , ce qui nous donne:

$$I_1 = \tau_i \int_t^{t+\Delta t} \frac{\partial \rho \Phi}{\partial t} dt = \tau_i [(\rho \Phi)_i^1 - (\rho \Phi)_i^0]$$

où $(\rho \Phi)_i^0$ représente la grandeur $\rho \Phi$ au noeud i du réseau et à l'instant t .

$(\rho \Phi)_i^1$ représente la grandeur $\rho \Phi$ au noeud i du réseau et à l'instant $t + \Delta t$.

* Calcul du terme I_2 :

Le calcul du terme I_2 s'effectue en transformant l'intégrale de volume en une intégrale de surface, on a ainsi:

$$I_2 = \int_t^{t+\Delta t} \int_{(\tau_i)} \left\{ \vec{\nabla} \cdot (\rho \Phi \vec{V} - \Gamma_\Phi \vec{\nabla} \Phi) \right\} d\tau_i dt = \int_t^{t+\Delta t} \int_{(\sigma_i)} (\rho \Phi \vec{V} - \Gamma_\Phi \vec{\nabla} \Phi) d\sigma_i dt$$

Si l'on considère que nous sommes dans un cas monodimensionnel, l'intégrale I_2 s'écrit alors:

$$I_2 = \int_t^{t+\Delta t} \left\{ \int_{(A_{i+1/2})} \left(\rho \Phi u - \Gamma_\Phi \frac{\partial \Phi}{\partial r} \right)_{i+1/2} d\sigma_i - \int_{(A_{i-1/2})} \left(\rho \Phi u - \Gamma_\Phi \frac{\partial \Phi}{\partial r} \right)_{i-1/2} d\sigma_i \right\} dt$$

où u est la composante de la vitesse \vec{V} suivant l'axe \vec{r} .

En supposant que les quantités $\left(\rho \Phi u - \Gamma_\Phi \frac{\partial \Phi}{\partial r} \right)_{i+1/2}$ et $\left(\rho \Phi u - \Gamma_\Phi \frac{\partial \Phi}{\partial r} \right)_{i-1/2}$ sont constantes

sur les interfaces d'aire $A_{i+1/2}$ et $A_{i-1/2}$, l'intégrale I_2 devient:

$$I_2 = A_{i+1/2} \int_t^{t+\Delta t} \left(\rho \Phi u - \Gamma_\Phi \frac{\partial \Phi}{\partial r} \right)_{i+1/2} dt - A_{i-1/2} \int_t^{t+\Delta t} \left(\rho \Phi u - \Gamma_\Phi \frac{\partial \Phi}{\partial r} \right)_{i-1/2} dt$$

Il faut maintenant faire une hypothèse sur la variation au cours du temps des termes

$\left(\rho \Phi u - \Gamma_\Phi \frac{\partial \Phi}{\partial r} \right)_{i+1/2}$ et $\left(\rho \Phi u - \Gamma_\Phi \frac{\partial \Phi}{\partial r} \right)_{i-1/2}$ afin de pouvoir effectuer leur intégration

temporelle.

L'hypothèse généralement employée est de considérer l'intégrale temporelle $\int_t^{t+\Delta t} Y(t) dt$ (où

$Y(t)$ représente soit $\left(\rho\Phi u - \Gamma_\Phi \frac{\partial\Phi}{\partial r}\right)_{i+1/2}$, soit $\left(\rho\Phi u - \Gamma_\Phi \frac{\partial\Phi}{\partial r}\right)_{i-1/2}$) comme une combinaison linéaire de $Y(t + \Delta t)$ et de $Y(t)$.

D'où $\int_t^{t+\Delta t} Y(t) dt = [\alpha Y(t + \Delta t) + (1 - \alpha)Y(t)]\Delta t$ avec α un nombre variant de 0 à 1.

Trois grands schémas sont issus de cette hypothèse:

- si $\alpha = 0$ on obtient un schéma explicite.
- si $\alpha = 1$ on obtient un schéma implicite.
- si $\alpha = \frac{1}{2}$ on obtient un schéma dit de Crank-Nicholson.

Nous avons opté pour un schéma explicite, ce qui nous donne:

$$I_2 = A_{i+1/2}\Delta t \left(\rho\Phi u - \Gamma_\Phi \frac{\partial\Phi}{\partial r}\right)_{i+1/2}^0 - A_{i-1/2}\Delta t \left(\rho\Phi u - \Gamma_\Phi \frac{\partial\Phi}{\partial r}\right)_{i-1/2}^0$$

où l'exposant 0 nous indique que les valeurs doivent être prises à l'instant t .

Les termes $\left(\Gamma_\Phi \frac{\partial\Phi}{\partial r}\right)_{i+1/2}^0$ et $\left(\Gamma_\Phi \frac{\partial\Phi}{\partial r}\right)_{i-1/2}^0$ s'expriment facilement par:

$$\left(\Gamma_\Phi \frac{\partial\Phi}{\partial r}\right)_{i+1/2}^0 = \Gamma_{\Phi_{i+1/2}} \left(\frac{\Phi_{i+1}^0 - \Phi_i^0}{\Delta r}\right) \text{ et } \left(\Gamma_\Phi \frac{\partial\Phi}{\partial r}\right)_{i-1/2}^0 = \Gamma_{\Phi_{i-1/2}} \left(\frac{\Phi_i^0 - \Phi_{i-1}^0}{\Delta r}\right)$$

Quant aux termes $(\rho\Phi u)_{i+1/2}^0$ et $(\rho\Phi u)_{i-1/2}^0$, leurs expressions vont dépendre des quantités connues localisées aux noeuds du réseau. Plusieurs choix sont possibles suivant le type schéma choisi (centré ou upwind), ils sont exprimés dans l'annexe B.

L'intégrale I_2 devient alors:

$$I_2 = A_{i+1/2}\Delta t \left\{ (\rho\Phi u)_{i+1/2}^0 - \Gamma_{\Phi_{i+1/2}} \frac{\Phi_{i+1}^0 - \Phi_i^0}{\Delta r} \right\} - A_{i-1/2}\Delta t \left\{ (\rho\Phi u)_{i-1/2}^0 - \Gamma_{\Phi_{i-1/2}} \frac{\Phi_i^0 - \Phi_{i-1}^0}{\Delta r} \right\}$$

* Calcul du terme I_3 :

L'intégration de I_3 est immédiate et conduit à:

$$I_3 = S_{\Phi_i}^0 \tau_i \Delta t$$

où $S_{\Phi_i}^0$ représente la valeur de S_{Φ} au noeud i et à l'instant t .

Pour récapituler, après intégration des différents termes, nous obtenons:

$$\begin{aligned} \tau_i [(\rho\Phi)_i^1 - (\rho\Phi)_i^0] + A_{i+1/2} \Delta t \left\{ (\rho\Phi u)_{i+1/2}^0 - \Gamma_{\Phi_{i+1/2}} \frac{\Phi_{i+1}^0 - \Phi_i^0}{\Delta r} \right\} \\ - A_{i-1/2} \Delta t \left\{ (\rho\Phi u)_{i-1/2}^0 - \Gamma_{\Phi_{i-1/2}} \frac{\Phi_i^0 - \Phi_{i-1}^0}{\Delta r} \right\} = S_{\Phi_i}^0 \tau_i \Delta t \end{aligned}$$

On peut donc exprimer les valeurs inconnues $(\rho\Phi)_i^1$ à l'instant $t + \Delta t$ en fonction des valeurs connues à l'instant t :

$$\begin{aligned} (\rho\Phi)_i^1 = (\rho\Phi)_i^0 - \frac{A_{i+1/2} \Delta t}{\tau_i} \left\{ (\rho\Phi u)_{i+1/2}^0 - \Gamma_{\Phi_{i+1/2}} \frac{\Phi_{i+1}^0 - \Phi_i^0}{\Delta r} \right\} \\ + \frac{A_{i-1/2} \Delta t}{\tau_i} \left\{ (\rho\Phi u)_{i-1/2}^0 - \Gamma_{\Phi_{i-1/2}} \frac{\Phi_i^0 - \Phi_{i-1}^0}{\Delta r} \right\} + S_{\Phi_i}^0 \Delta t \end{aligned}$$

ANNEXE B

Algorithmes de transport - Schéma centré - Schéma upwind

Si l'on considère l'équation de conservation monodimensionnel pour la grandeur $\rho\Phi$:

$$\frac{\partial \rho\Phi}{\partial t} + \frac{\partial \rho\Phi u}{\partial r} - \frac{\partial}{\partial r} \left(\Gamma_{\Phi} \frac{\partial \Phi}{\partial r} \right) = S_{\Phi}$$

On peut résoudre numériquement cette équation à l'aide de plusieurs schémas tel que le schéma centré ou le schéma upwind. Nous allons présenter les équations discrétisées en choisissant l'un ou l'autre de ces 2 schémas, le choix d'un de ces 2 schémas sera pris en compte pour le calcul du terme $\frac{\partial \rho\Phi u}{\partial r}$.

Schéma centré

En optant pour un schéma centré, on obtient:

$$(\rho\Phi u)_{i\pm 1/2}^t = \left(\frac{(\rho\Phi)_{i\pm 1}^t + (\rho\Phi)_i^t}{2} \right) \left(\frac{u_{i\pm 1}^t + u_i^t}{2} \right)$$

On obtient donc:

$$\begin{aligned} (\rho\Phi)_i^{t+\Delta t} = & (\rho\Phi)_i^t - \frac{A_{i+1/2}\Delta t}{\tau_i} \left\{ \left(\frac{(\rho\Phi)_{i+1}^t + (\rho\Phi)_i^t}{2} \right) \left(\frac{u_{i+1}^t + u_i^t}{2} \right) - \Gamma_{\Phi_{i+1/2}} \frac{\Phi_{i+1}^t - \Phi_i^t}{\Delta r} \right\} \\ & + \frac{A_{i-1/2}\Delta t}{\tau_i} \left\{ \left(\frac{(\rho\Phi)_i^t + (\rho\Phi)_{i-1}^t}{2} \right) \left(\frac{u_i^t + u_{i-1}^t}{2} \right) - \Gamma_{\Phi_{i-1/2}} \frac{\Phi_i^t - \Phi_{i-1}^t}{\Delta r} \right\} + S_{\Phi_i}^t \Delta t \end{aligned}$$

Schéma upwind

En optant pour un schéma upwind, on obtient pour $u_{i\pm 1/2}^t = \left(\frac{u_{i\pm 1}^t + u_i^t}{2} \right)$:

$$(\rho\Phi u)_{i+1/2}^t = (\rho\Phi)_{i+1}^t u_{i+1/2}^t \quad \text{si } u_{i+1/2}^t > 0 \quad \text{et} \quad (\rho\Phi u)_{i+1/2}^t = (\rho\Phi)_i^t u_{i+1/2}^t \quad \text{si } u_{i+1/2}^t < 0$$

$$(\rho\Phi u)_{i-1/2}^t = (\rho\Phi)_i^t u_{i-1/2}^t \quad \text{si } u_{i-1/2}^t > 0 \quad \text{et} \quad (\rho\Phi u)_{i-1/2}^t = (\rho\Phi)_{i-1}^t u_{i-1/2}^t \quad \text{si } u_{i-1/2}^t < 0$$

On obtient donc:

$$(\rho\Phi)_i^{t+\Delta t} = (\rho\Phi)_i^t - \frac{A_{i+1/2}\Delta t}{\tau_i} \left\{ \left(\frac{(\rho\Phi)_{i+1}^t + (\rho\Phi)_i^t}{2} \right) \left(\frac{u_{i+1}^t + u_i^t}{2} \right) - \Gamma_{\Phi_{i+1/2}} \frac{\Phi_{i+1}^t - \Phi_i^t}{\Delta r} \right\} \\ + \frac{A_{i-1/2}\Delta t}{\tau_i} \left\{ \left(\frac{(\rho\Phi)_i^t + (\rho\Phi)_{i-1}^t}{2} \right) \left(\frac{u_i^t + u_{i-1}^t}{2} \right) - \Gamma_{\Phi_{i-1/2}} \frac{\Phi_i^t - \Phi_{i-1}^t}{\Delta r} \right\} + S_{\Phi_i}^t \Delta t$$

Le choix entre ces différents schémas s'effectue grâce à un coefficient adimensionnel défini comme étant le rapport de l'intensité de la convection sur l'intensité de la diffusion. Ce coefficient s'appelle généralement:

- le nombre de Reynolds (R_e) pour l'équation de conservation de la quantité de mouvement.
- le nombre de Péclet (P_e) pour l'équation de conservation de l'énergie.

Par exemple, on peut démontrer (S.V. Patankar) que le schéma centré ne produit des résultats physiquement acceptables que lorsque la valeur absolue de ce coefficient est inférieure à 2. En particulier, près des forts gradients, on constate la formation d'oscillations parasites dépourvues de signification physique, amenant à la destruction rapide de la positivité de la solution.

Dans notre cas, les processus diffusionnels, associés au terme $\frac{\partial}{\partial x} \left(\Gamma_{\Phi} \frac{\partial \Phi}{\partial x} \right)$ sont complètement écartés du modèle. L'équation à résoudre devient donc:

$$\frac{\partial \rho\Phi}{\partial t} + \frac{\partial \rho\Phi u}{\partial x} = S_{\Phi}$$

Ceci aura pour conséquence:

- de créer localement des oscillations parasites si l'on adopte un schéma centré.
- de créer une diffusion numérique artificielle dans le cas d'un schéma upwind.

On se propose donc de remédier à ces problèmes en adoptant la technique de correction de flux F.C.T. développé par J.P. Boris and D.L. Book que nous développons dans l'annexe C.

ANNEXE C

Méthode de correction de flux F.C.T.

Le principe de base de la méthode F.C.T. consiste à appliquer au profil de $(\rho\Phi)_i^T$, issu du schéma de transport dispersif, une diffusion corrective uniquement dans les régions où des oscillations ont tendance à se produire.

Cette méthode atteint son objectif en deux étapes:

- 1^{ère} étape: Elle applique en tout point du profil une diffusion artificielle dont l'intensité est suffisante pour gommer les oscillations parasites.
- 2^{ème} étape: Elle applique ensuite une antidiffusion pour faire disparaître la diffusion artificielle dans les zones où elle n'était pas nécessaire. Cette diffusion peut provenir soit de l'étape 1 (cas du schéma centré), soit du schéma dispersif (cas du schéma upwind).

Cas du schéma centré: le transport crée des oscillations parasites

$$(\rho\Phi)_i^0 \xrightarrow{\text{Transport}} (\rho\Phi)_i^T \xrightarrow{\text{Diffusion}} (\rho\Phi)_i^{TD} \xrightarrow{\text{Antidiffusion}} (\rho\Phi)_i^1$$

Cas du schéma upwind: le transport ne crée pas d'oscillations parasites mais présente une diffusion artificielle, seule la deuxième étape est nécessaire.

$$(\rho\Phi)_i^0 \xrightarrow{\text{Transport}} (\rho\Phi)_i^{TD} \xrightarrow{\text{Antidiffusion}} (\rho\Phi)_i^1$$

où $(\rho\Phi)_i^0$ représente la grandeur $\rho\Phi$ au noeud i du réseau et à l'instant t .

$(\rho\Phi)_i^T$ représente la grandeur $\rho\Phi$ au noeud i du réseau après le transport dispersif.

$(\rho\Phi)_i^{TD}$ représente la grandeur $\rho\Phi$ au noeud i du réseau après la diffusion

$(\rho\Phi)_i^1$ représente la grandeur $\rho\Phi$ au noeud i du réseau et à l'instant $t + \Delta t$.

Quelque soit le schéma de transport choisi, la grandeur transportée $(\rho\Phi)_i^T$ peut se mettre sous la forme:

$$\tau_i(\rho\Phi)_i^T = \tau_i(\rho\Phi)_i^0 - F_{i+1/2}^T + F_{i-1/2}^T$$

où $F_{i\pm 1/2}^T$ représentent les flux bruts de transport.

Nous allons maintenant présenter plus en détails les 2 étapes de cette méthode: la diffusion et l'antidiffusion.

Diffusion

On applique à la grandeur transportée $(\rho\Phi)_i^T$ des flux bruts de diffusion définis par:

$$\begin{cases} F_{i+1/2}^D = v_{i+1/2} \tau_{i+1/2} ((\rho\Phi)_{i+1}^0 - (\rho\Phi)_i^0) \\ F_{i-1/2}^D = v_{i-1/2} \tau_{i-1/2} ((\rho\Phi)_i^0 - (\rho\Phi)_{i-1}^0) \end{cases}$$

avec $\tau_{i\pm 1/2} = \frac{1}{2} (\tau_{i\pm 1} + \tau_i)$

$v_{i\pm 1/2}$ est le coefficient de diffusion (il sera exprimé un peu plus loin).

Ce qui nous donne:

$$\tau_i(\rho\Phi)_i^{TD} = \tau_i(\rho\Phi)_i^T - F_{i+1/2}^D + F_{i-1/2}^D$$

Cette diffusion est appliquée en tout point du réseau. Il va donc falloir l'annuler aux endroits où elle n'était pas nécessaire. C'est le rôle de l'opération d'antidiffusion.

Antidiffusion

On applique à la grandeur transportée et diffusée $(\rho\Phi)_i^{TD}$ des flux bruts d'antidiffusion définis par:

$$\begin{cases} F_{i+1/2}^A = \mu_{i+1/2} \tau_{i+1/2} ((\rho\Phi)_{i+1}^T - (\rho\Phi)_i^T) \\ F_{i-1/2}^A = \mu_{i-1/2} \tau_{i-1/2} ((\rho\Phi)_i^T - (\rho\Phi)_{i-1}^T) \end{cases}$$

avec $\mu_{i\pm 1/2}$ est le coefficient d'antidiffusion (il sera exprimé un peu plus loin).

Un phénomène indésirable que crée l'application de ces flux bruts d'antidiffusion est la création de nouveaux extremums ou l'accentuation des extrémums déjà existants. Il nous faut donc corriger ces flux à l'aide des limiteurs de flux proposés par J.P. Boris and D.L. Book.

$$F_{i+1/2}^C = S_{i+1/2} \max \left\{ 0; \min \left[\left| F_{i+1/2}^A \right|, S_{i+1/2} \tau_{i+1} \left((\rho\Phi)_{i+2}^{TD} - (\rho\Phi)_{i+1}^{TD} \right), S_{i+1/2} \tau_i \left((\rho\Phi)_i^{TD} - (\rho\Phi)_{i-1}^{TD} \right) \right] \right\}$$

où $S_{i+1/2}$ est le signe de la quantité $\left((\rho\Phi)_{i+1}^{TD} - (\rho\Phi)_i^{TD} \right)$

On peut remarquer que l'application du limiteur de flux n'empêche nullement la création ou l'évolution d'extremums locaux lorsque la physique du phénomène l'exige. Par contre, un extremum ponctuel peut se transformer sous l'effet de la diffusion en un plateau de 3 points sur lequel l'antidiffusion s'avère impuissante: c'est le phénomène de clipping.

Sous l'effet de l'antidiffusion corrigée, la nouvelle valeur $(\rho\Phi)_i^1$ de la grandeur $\rho\Phi$ calculée au noeud i et à l'instant $t + \Delta t$ s'obtient par la relation:

$$\tau_i (\rho\Phi)_i^1 = \tau_i (\rho\Phi)_i^{TD} - F_{i+1/2}^C + F_{i-1/2}^C$$

Remarques:

- Les coefficients de diffusion $v_{i\pm 1/2}$ et d'antidiffusion $\mu_{i\pm 1/2}$ sont ajustés en fonction des particularités du problème étudié.

J.P. Boris et D.L. Book proposent pour obtenir des erreurs de dispersion allant du 2^{eme} au 4^{eme}

ordre (on pose $\varepsilon_{i\pm 1/2} = A_{i\pm 1/2} u_{i\pm 1/2} \frac{\Delta t}{2} \left[\frac{1}{\tau_i} + \frac{1}{\tau_{i\pm 1}} \right]$):

Dans le cas du schéma upwind:

$$\begin{cases} v_{i\pm 1/2} = 0 \\ \mu_{i\pm 1/2} = \frac{\varepsilon_{i\pm 1/2}}{2} (1 - \varepsilon_{i\pm 1/2}) \end{cases}$$

Le coefficient de diffusion $v_{i\pm 1/2}$ est nul car il n'est pas nécessaire d'appliquer de la diffusion artificielle dans ce schéma.

Dans le cas du schéma centré:

$$\begin{cases} \nu_{i\pm 1/2} = \frac{1}{6} + \frac{1}{3}(\varepsilon_{i\pm 1/2})^2 \\ \mu_{i\pm 1/2} = \frac{1}{6} - \frac{1}{3}(\varepsilon_{i\pm 1/2})^2 \end{cases}$$

Le choix de ces coefficients nous permet d'obtenir une antidiffusion dite phoenical car elle compense exactement la diffusion lorsque la vitesse s'annule.

- Afin de préserver la stabilité et la positivité de la solution, la cellule i ne doit échanger qu'avec les cellules qui lui sont contiguës (soient les cellules $i-1$ et $i+1$). De ce fait, la vitesse de transport u_i , le pas spatial Δr et le pas temporel Δt doivent vérifier en tout point i du réseau et à chaque instant t la relation:

$$\left| u_i \frac{\Delta t}{\Delta r} \right| < \frac{1}{2} \text{ pour un schéma centré}$$

$$\left| u_i \frac{\Delta t}{\Delta r} \right| < 1 \text{ pour un schéma upwind}$$



Monsieur GUIBERTEAU Emmanuel

DOCTORAT de l'UNIVERSITE HENRI POINCARÉ, NANCY-I
en MECANIQUE & ENERGETIQUE



VU, APPROUVÉ ET PERMIS D'IMPRIMER

Nancy, le 23 novembre 1998 n° 137

Le Président de l'Université



RESUME :

Ce travail est consacré à la modélisation d'une décharge diode pulsée dans l'azote utilisée pour la nitruration des aciers. L'objectif de ce travail était de mieux comprendre les différents phénomènes mis en jeu dans ce type de décharges afin d'optimiser le traitement.

La première étape de ce travail a consisté en l'adaptation d'un code électrique existant aux conditions de fonctionnement du réacteur de traitement présent au laboratoire. Les premières comparaisons entre les résultats numériques et ceux obtenus expérimentalement par spectroscopie d'émission et par sonde électrostatique ont montré un accord général satisfaisant et ont mis en évidence les limites de ce code.

Deux améliorations ont alors été apportées au modèle de base:

- Une meilleure description de la population électronique à l'aide d'un faisceau monoénergétique.
- Un couplage avec un code décrivant la dynamique du gaz neutre.

La première amélioration a permis de mieux décrire l'ensemble des différentes zones présentes dans la décharge, en particulier la lueur négative et d'obtenir un très bon accord entre numérique et expérience dans le cas de décharges impulsionnelles.

La seconde amélioration a montré l'importance et la nécessité de prendre en compte le chauffage du gaz neutre dans le cas des décharges avec des temps d'allumage supérieurs à quelques centaines de microsecondes.

SUMMARY :

This work deals the modeling of a dc pulsed diode type discharge used for iron and steel nitriding. The present research aimed at a better understanding of the processes occurring in such plasmas in order to attain an optimization of the surface treatment process.

In a first stage we adapted an existing electrical modeling to the experimental results obtained from electrostatic probe and emission spectroscopy measurements. These preliminary results showed a roughly good agreement between the modeling and the experiment and pointed out the limits of this simulation.

Two improvements have thus been made to this basic model:

- a better description of the electron population using a monoenergetic electron beam.
- a coupling with a modeling of the neutral gas dynamics.

The first improvement led to a better description of the various regions of the discharge (in particular the negative glow) and to get an excellent agreement between numerical and experimental results in the case of short duration impulse discharges.

The second improvement showed the importance and the need for taking into account the heating of neutral gas in the case of discharge on-time greater than a few hundreds of microseconds.

MOTS CLES:

Plasmas froids réactifs
Décharges pulsées
Azote
Nitruration

Modélisation
Dynamique des neutres
Lueur négative
Faisceau d'électrons