



HAL
open science

PROPRIÉTÉS DES PLASMAS THERMIQUES DANS DES MÉLANGES ARGON-HYDROGÈNE-CUIVRE

Yann Cressault

► **To cite this version:**

Yann Cressault. PROPRIÉTÉS DES PLASMAS THERMIQUES DANS DES MÉLANGES ARGON-HYDROGÈNE-CUIVRE. Physique [physics]. Université Paul Sabatier - Toulouse III, 2001. Français. NNT: . tel-00278927

HAL Id: tel-00278927

<https://theses.hal.science/tel-00278927>

Submitted on 14 May 2008

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.

**UNIVERSITE PAUL SABATIER
TOULOUSE III**

THESE

Présentée pour obtenir le grade de

DOCTEUR DE L'UNIVERSITE PAUL SABATIER

Spécialité : Physique des Plasmas

par

Yann CRESSAULT

**PROPRIETES DES PLASMAS THERMIQUES DANS DES
MELANGES ARGON-HYDROGENE-CUIVRE.**

Présentée et soutenue le 29 novembre 2001 devant la commission d'examen :

Président :

M. Jean-Louis TEYSSIER Professeur, Université Paul Sabatier (CPAT)

Rapporteurs :

M. Jean-François COUDERT Professeur, Université de Limoges (SPCTS)
M. Anouar SOUFIANI Directeur de recherche au CNRS (EM2C), Ecole Centrale Paris

Examineurs :

M. Pascal ANDRE Maître de conférence, Université Blaise PASCAL (LAEPT)
M. Georges CAILLIBOTTE Ingénieur AIR LIQUIDE, Centre Claude DELORME, Jouy en Josas
M. Alain GLEIZES Directeur de Recherche au CNRS, Université Paul Sabatier (CPAT)
M. Philippe TEULET Maître de conférence, Université Paul Sabatier (CPAT)

Remerciements

Tout d'abord, j'exprime ma profonde reconnaissance à Monsieur *Jean-Louis TEYSSIER*, Professeur à l'Université Paul Sabatier qui m'a fait l'honneur de présider le jury de ma thèse.

Je voudrais exprimer ma gratitude à Monsieur *Jean-François COUDERT*, Professeur à l'Université de Limoges (SPCTS) et Monsieur *Anouar SOUFIANI*, Directeur de recherche au CNRS à l'Ecole Centrale Paris pour l'intérêt qu'ils ont porté à cette étude et pour avoir accepté de juger mon travail en tant que rapporteurs.

J'exprime également ma sympathie à Monsieur *Pascal ANDRE*, Maître de conférence à l'Université Blaise PASCAL (LAEPT), et Monsieur *Georges CAILLIBOTTE*, Ingénieur AIR LIQUIDE au Centre Claude DELORME à Jouy en Josas pour leur présence lors de ma soutenance de thèse et l'attention qu'ils ont porté à ce travail.

Monsieur *Alain GLEIZES*, directeur du Centre de Physique des Plasmas de Toulouse et de leurs Application (CPAT) m'a accepté dans son équipe, m'a soutenu et guidé dans ma recherche avec toute son attention et sa disponibilité. Au cours de ces trois ans, j'ai pu apprécier sa gentillesse et sa patience pour mon travail. Je lui témoigne toute ma reconnaissance pour sa grande expérience scientifique, ses conseils avisés, ses explications fructueuses, ainsi que ses encouragements.

Je tiens à remercier l'ensemble des chercheurs et enseignants-chercheurs du groupe « Physico-chimie des plasmas d'arc » dirigé par Monsieur Alain GLEIZES : Monsieur *Jean-Jacques GONZALEZ* Chargé de Recherche au CNRS pour sa bonne humeur, son soutien et ses précieux conseils, Monsieur *Manitra RAZAFINIMANANA* Professeur à l'Université Paul Sabatier pour ses connaissances expérimentales, Monsieur *Jacques ROLLAND* Ingénieur CNRS pour sa gentillesse, ses connaissances culinaires et son aide précieuse à la mise en place de l'expérience, Monsieur *Philippe TEULET* Maître de Conférence à l'Université Paul Sabatier pour son soutien journalier et ses encouragements. Qu'ils trouvent ici toute ma sympathie pour leurs explications théoriques ou pratiques nécessaires à l'évolution de mes travaux de recherche.

Un grand merci également à Monsieur *Pierre FRETON*, Monsieur Frédéric LAGO, Monsieur *Antonio MERCADO*, Mademoiselle *Marquidia PACHECO* et Mademoiselle *Laurence GIRARD*, étudiants du groupe, pour leur apport personnel dans la réalisation de mes travaux et les nombreux moments de divertissement passés en leur compagnie.

Enfin, je remercie tous les autres membres du CPAT, notamment Monsieur *Jean-Marie BARRACHET* pour la réalisation matérielle de ce mémoire et sa participation dans d'autres travaux, Monsieur *Jacques SALON* pour la réalisation d'une carte PC et d'un logiciel utiles aux traitements de données expérimentales, et le personnel du secrétariat Madame *Maryse CLAUZOLLES* et *Myriam DZIADOWIEC* pour leur sympathie et leur aide au niveau administratif.

Auteur : Yann CRESSAULT

Titre : Propriétés des plasmas thermiques dans des mélanges argon - hydrogène - cuivre.

Spécialité : Physique des Plasmas

Directeur de Thèse : Alain GLEIZES, Université Paul Sabatier, CPAT-UMR 5002 CNRS, 118 route de Narbonne, Bât 3R2, 31062 Toulouse cedex 4

Laboratoire de recherche : Centre de Physique des Plasmas et de leurs Applications de Toulouse, Université Paul Sabatier, UMR-5002 CNRS, 118 route de Narbonne, Bât 3R2, 31062 Toulouse cedex 4

Résumé :

Dans le cadre d'un projet sur un procédé de projection de cuivre sur des matériaux composites par torche plasma, l'objectif de ce travail est de calculer les propriétés radiatives et de transport pour un mélange Ar/H₂/Cu, pour des températures comprises entre 300K et 25000K, et à la pression atmosphérique. En supposant l'*ETL*, le calcul préalable de la composition permet de déterminer les coefficients de transport et les propriétés radiatives suivant trois méthodes :

- le coefficient d'émission nette pour un milieu homogène et isotherme constituant une assez bonne approximation du rayonnement émis par les régions les plus chaudes.

- le 'coefficient moyen d'absorption' basé sur un découpage préliminaire de l'ensemble du spectre en quelques intervalles, la valeur du coefficient d'absorption étant supposée constante dans chacun d'eux pour une température donnée. Cette méthode est intéressante pour trois raisons : sa cohérence avec les valeurs du coefficient d'émission nette dans les régions chaudes ; le calcul explicite de l'absorption du rayonnement dans les régions tièdes du plasma ou dans le gaz froid environnant ; l'utilisation de ces données dans des codes de calcul de mécanique des fluides appliqués aux plasmas thermiques.

- la méthode de Chapman-Enskog utilisée pour déterminer les coefficients de transport et basée sur la résolution de l'équation intégral-différentielle de Boltzmann. Une étude critique des intégrales de collision a permis de sélectionner un jeu cohérent de valeurs permettant le calcul original des coefficients de transport pour notre mélange ternaire.

Enfin, une étude expérimentale du jet de plasma a été également menée dans le cadre de cette thèse. A partir de méthodes de diagnostics par spectroscopie d'émission, le principal objectif consiste à caractériser l'état d'un plasma Ar/H₂ en présence de cuivre et à déterminer les paramètres fondamentaux de la décharge (température, densités des diverses espèces).

Mots Clés :

Plasmas	Equilibre Thermodynamique	Vapeurs métalliques
Argon	Hydrogène	Cuivre
Propriétés de transport	Propriétés radiatives	Diagnostic spectroscopique

Author : Yann CRESSAULT

Title : Thermal plasmas properties in argon - hydrogen – copper mixtures.

Speciality : Plasma physics

Director of search : Alain GLEIZES, University Paul Sabatier, CPAT-UMR 5002 CNRS, 118 route de Narbonne, Bât 3R2, 31062 Toulouse cedex 4

Laboratory of search : Centre de Physique des Plasmas et de leurs Applications de Toulouse, Université Paul Sabatier, UMR-5002 CNRS, 118 route de Narbonne, Bât 3R2, 31062 Toulouse cedex 4

Summary :

Under a project on a method of copper spraying on composite materials by torch plasma, the aim of this manuscript is to calculate the radiative properties and the transport properties for Ar/H₂/Cu mixtures, temperatures ranging between 300K and 25000K, and at atmospheric pressure. Assuming LTE, the preliminary calculation of the composition allows to determine the transport coefficients and the radiative properties using three methods:

- the net emission coefficient for a homogeneous and isothermal medium constituting a rather good approximation of the radiation emitted by the hottest regions.

- the ' mean absorption coefficient ' based on a preliminary division of the whole spectrum in some intervals, the value of absorption coefficient being supposed constant in each one of them for a given temperature. This method is interesting for three reasons: its consistency with the values of the net emission coefficient in the hot regions; calculation of radiation absorption in the tepid regions of plasma or surrounding cold gas; the use of this data in computer codes of fluid engineering applied to thermal plasmas.

- method of Chapman-Enskog used to determine the transport coefficients and based on the resolution of the intégro-differential equation of Boltzmann. A critical study of the collision integrals made it possible to select a coherent set of values allowing the original calculation of the transport coefficients for our ternary mixture.

Lastly, an experimental study of the jet of plasma was also undertaken within the framework of this thesis. From methods of diagnoses by emission spectroscopy, the main aim consists to characterise the Ar/H₂ plasma in the presence of copper and to determine the fundamental parameters of the discharge (temperature, number densities of the various species).

Keywords :

Plasmas

Argon

Transport properties

Thermodynamic Equilibrium

Hydrogen

Radiative properties

Metallic Vapours

Copper

Spectroscopic Diagnoses

INTRODUCTION GENERALE	1
-----------------------------	---

<p>CHAPITRE I</p> <p>INTRODUCTION AU RAYONNEMENT THERMIQUE</p> <p>ET AUX PHENOMENES DE TRANSPORT</p>

I – DEFINITIONS ET LOIS DU RAYONNEMENT THERMIQUE	9
--	---

1.1 – INTRODUCTION	9
1.2 – GRANDEURS PHYSIQUES	9
1.2.1 – La luminance	10
1.2.2 – Coefficient d'émission	11
1.2.3 – Coefficient d'absorption	11
1.2.4 – Flux de rayonnement	12
1.2.5 – Autres grandeurs	12
1.3 – EQUATION DU TRANSFERT RADIATIF	12
1.4 – LOIS DU RAYONNEMENT D'EQUILIBRE	14
1.4.1 – Corps noir	14
1.4.2 – Loi de Planck	14
1.4.3 – Lois de Wien	15
1.4.4 – Loi de Stefan-Boltzmann	15
1.4.5 – Loi de Kischhoff	16

II – INTRODUCTION AUX PHENOMENES DE TRANSPORT	17
---	----

2.1 – INTEGRALES DE COLLISION	19
2.1.1 – Intégrales de collision effectives	19
2.1.2 – Intégrales de collision réduites	20
2.1.3 – Moyenne pondérée	20
2.2 – CLASSIFICATION DES POTENTIELS ET TABLES D'INTEGRALES ASSOCIEES ...	22
2.2.1 – Potentiels puissance	22
α – Cas général	22
β – Potentiel de polarisation	22
2.2.2 – Potentiels exponentiels	22
α – Zone répulsive	23
β – Zone attractive	23
2.2.3 – Potentiel de Morse	23
2.2.4 – Potentiel de Lennard-Jones ou potentiel de Mie	24
2.2.5 – Potentiel de Sphères Rigides	25
2.2.6 – Potentiel de Coulomb	26

2.2.7 – Autres potentiels	26
2.3 – <i>TYPE D'INTERACTION ET INTEGRALES DE COLLISION</i>	27
2.3.1 – Les interactions neutre-neutre	28
2.3.2 – Les interactions électron-neutre	28
2.3.3 – Les interactions ion-neutre	28
α – Les collisions élastiques	28
β – Le transfert de charge	29
2.3.4 – Les interactions chargé-chargé	30

CHAPITRE II
COMPOSITION ET PROPRIETES THERMODYNAMIQUES

I – GENERALITES	33
1.1 – <i>EQUILIBRE THERMODYNAMIQUE COMPLET (ETC)</i>	33
1.2 – <i>EQUILIBRE THERMODYNAMIQUE LOCAL (ETL)</i>	33
II – FONCTION DE PARTITION	34
2.1 – <i>GENERALITE</i>	34
2.2 – <i>FONCTION DE PARTITION TOTALE</i>	34
2.3 – <i>FONCTION DE PARTITION DE TRANSLATION</i>	35
2.4 – <i>FONCTION DE PARTITION INTERNE</i>	36
2.4.1 – Cas monoatomique	36
2.4.2 – Cas diatomique	37
2.5 – <i>FONCTION DE PARTITION INTERNE DE L'ELECTRON</i>	39
III – CALCUL DE LA COMPOSITION	40
3.1 – <i>CHOIX DES ESPECES</i>	40
3.2 – <i>METHODES DE CALCUL</i>	41
3.3 – <i>ABAISSMENT DU POTENTIEL D'IONISATION</i>	42
3.4 – <i>CORRECTION DE DEBYE-HÜCKEL</i>	43
IV – CALCUL DES PROPRIETES THERMODYNAMIQUES	44
4.1 – <i>DENSITE DE MASSE</i>	44
4.2 – <i>DENSITE DE PARTICULES PAR KG DE MELANGE</i>	44
4.3 – <i>FONCTION DE PARTITION TOTALE DU SYSTEME</i>	44

4.4 – POTENTIEL DE HELMHOLTZ	45
4.5 – ENERGIE DE GIBBS OU ENTHALPIE LIBRE	45
4.6 – ENTROPIE	45
4.7 – ENTHALPIE	45
4.8 – ENERGIE INTERNE	46
4.9 – CHALEUR SPECIFIQUE A PRESSION CONSTANTE	46
V – RESULTATS ET DISCUSSIONS	48
5.1 – ABAISSEMENT DU POTENTIEL D'IONISATION	48
5.2 – FONCTIONS DE PARTITION INTERNES	48
5.3 – DENSITES DE PARTICULES	49
5.4 – CHALEUR SPECIFIQUE C_p A PRESSION CONSTANTE.....	52

<p>CHAPITRE III</p> <p>BASES DE CALCUL DU RAYONNEMENT THERMIQUE</p>

I – INTRODUCTION	57
II – MECANISMES D'EMISSION DU RAYONNEMENT CONTINU	57
2.1 – TRANSITION LIBRE-LIE	58
2.1.1 – Recombinaison radiative	58
2.1.2 – Attachement radiatif	59
2.2 – TRANSITION LIBRE-LIBRE	60
2.2.1 – Rayonnement de freinage électron-ion	60
2.2.2 – Rayonnement de freinage électron-atome neutre	61
2.3 – CONTRIBUTION MOLECULAIRE A BASSE TEMPERATURE	62
2.4 – INTERPRETATION DES RESULTATS	63
2.4.1 – Variations suivant la température	63
2.4.2 – Contributions des phénomènes	64
2.4.3 – Contributions des espèces	68
III – MECANISMES D'ELARGISSEMENT D'UNE RAIE	68
3.1 – TYPES D'ELARGISSEMENTS	69
3.1.1 – Elargissement Doppler	69
3.1.2 – Elargissement de pression	70
3.1.3 – Elargissement Stark	70
3.1.4 – Elargissement de Van der Waals	71
3.1.5 – Elargissement de résonance	71

3.1.6 – Profil total d’élargissement	72
3.2 – <i>EPAISSEUR OPTIQUE</i>	72
3.2.1 – Cas d’un profil gaussien (Doppler)	73
3.2.2 – Cas d’un profil lorentzien	73
3.2.3 – Cas d’un profil de Voigt	73
3.3 – <i>FACTEUR DE FUITE</i>	74
3.3.1 – Cas d’un profil gaussien	75
3.3.2 – Cas d’un profil lorentzien	76
3.3.3 – Cas d’un profil de Voigt	76

CHAPITRE IV
METHODES DE CALCUL DU RAYONNEMENT THERMIQUE

I – INTRODUCTION	81
II – METHODE DU COEFFICIENT D’EMISSION NETTE	81
2.1 – <i>APPROXIMATIONS</i>	81
2.1.1 – Profil isotherme	81
2.1.2 – Calcul sur l’axe d’un cylindre isotherme de hauteur infini	82
2.1.3 – Calcul au centre d’une sphère isotherme	83
2.1.4 – Conclusion	84
2.2 – <i>METHODE DE CALCUL</i>	84
2.2.1 – Emission nette du continuum	84
2.2.2 – Emission nette des raies	84
α – Raies non autoabsorbées	85
β – Raies autoabsorbées	85
2.2.3 – Emission nette totale	87
2.3 – <i>RESULTATS ET COMMENTAIRES</i>	87
2.3.1 – Influence du rayon du plasma	88
α – Gaz ou vapeurs purs	88
β – Mélanges Argon-Hydrogène-Cuivre	90
2.3.2 – Contribution des composantes du coefficient d’émission total	91
α – Gaz ou vapeurs purs	91
β – Mélanges Argon-Hydrogène-Cuivre	96
2.3.3 – Influence des vapeurs métalliques	99

2.3.4 – Comparaison avec la littérature pour les gaz purs	100
III – METHODE DU COEFFICIENT MOYEN D’ABSORPTION	103
<i>3.1 – PRINCIPE DE L’ETUDE</i>	<i>103</i>
<i>3.2 – METHODE DE CALCUL</i>	<i>104</i>
3.2.1 – Détermination des bandes spectrales	104
3.2.2 – Contribution du continuum	106
3.2.3 – Contribution des raies atomiques	107
α – Raies non autoabsorbées	107
β – Raies autoabsorbées	107
3.2.4 – Coefficient moyen d’absorption total	108
<i>3.3 – RESULTATS ET COMMENTAIRES</i>	<i>109</i>
IV – CONCLUSION	112

CHAPITRE V
CALCUL DES COEFFICIENTS DE TRANSPORT

I – INTRODUCTION	117
<i>1.1 – LA CONDUCTIVITE THERMIQUE</i>	<i>117</i>
1.1.1 – La conductivité thermique de translation	118
1.1.2 – La conductivité thermique de réaction	119
1.1.3 – La conductivité thermique interne	120
<i>1.2 – LA VISCOSITE</i>	<i>121</i>
<i>1.3 – LA CONDUCTIVITE ELECTRIQUE</i>	<i>122</i>
II – APPLICATION AUX PLASMAS Ar/H₂/Cu	125
<i>2.1 – CRITERES DE CHOIX</i>	<i>125</i>
<i>2.2 – LES INTERACTIONS NEUTRE-NEUTRE</i>	<i>125</i>
<i>2.3 – LES INTERACTIONS ELECTRON-NEUTRE</i>	<i>128</i>
<i>2.4 – LES INTERACTIONS ION-NEUTRE</i>	<i>129</i>
<i>2.5 – LES INTERACTIONS CHARGE-CHARGE</i>	<i>133</i>
<i>2.6 – COEFFICIENTS DE TRANSPORT</i>	<i>133</i>
2.6.1 – Conductivité thermique totale	133
2.6.2 – Viscosité du plasma	134
2.6.3 – Conductivité électrique	135

2.6.4 – Comparaison avec la littérature137

CHAPITRE VI
ETUDE EXPERIMENTALE

I – DISPOSITIF EXPERIMENTAL143

1.1 – LE MONTAGE ELECTRIQUE143
1.2 – LA TORCHE A PLASMA144
1.3 – L'INJECTEUR DE POUDRE145
1.4 – LE DISPOSITIF SPECTROSCOPIQUE145

II – METHODES DE DIAGNOSTIC ET CONDITIONS OPERATOIRES147

2.1 – PARAMETRES D'ACQUISITION ET DES CONDITIONS OPERATOIRES147
2.2 – SELECTION DES RAIES SPECTRALES148
2.3 – ETALONNAGE149
2.4 – DETERMINATION DE LA TEMPERATURE DU PLASMA149
 2.4.1 – Méthode basée sur l'intensité absolue149
 2.4.2 – Méthode de l'intensité relative de deux raies d'une même espèce ...150
 2.4.3 – Incertitudes sur la température152

2.5 – DETERMINATION DE LA DENSITE ELECTRONIQUE153
 2.5.1 – Recombinaison radiative : étude du fond continu153
 2.5.2 – Elargissement Stark de la raie H α 154
 2.5.3 – Incertitudes sur la densité électronique155
 α – Méthode du fond continu155
 β – Méthode utilisant l'élargissement Stark156

2.6 – ETUDE DE LA PENETRATION D'AIR156
 2.6.1 – Incertitudes sur le pourcentage d'azote157

III – RESULTATS ET COMMENTAIRES158

3.1 – ETUDE DE LA PENETRATION D'AIR DANS LE JET158
3.2 – ETUDE DU PROFIL DE TEMPERATURE T(r)159
3.3 – ETUDE DE LA DENSITE ELECTRONIQUE160

IV – CONCLUSION162

CONCLUSION GENERALE163
REFERENCES169

ANNEXES

ANNEXE A1 : *AUTRES GRANDEURS DU RAYONNEMENT*185
ANNEXE A2 : *INDICE DE REFRACTION*187
ANNEXE A3 : *EQUATION DU TRANSFERT RADIATIF*189
ANNEXE A4 : *METHODE DE CALCUL DE LA COMPOSITION A BASSES
TEMPERATURES*191
ANNEXE A5 : *COEFFICIENTS DE LISSAGE DES FONCTIONS DE PARTITION INTERNE*
.....195
ANNEXE A6 : *ETUDE DES METHODES D'INTEGRATION POUR LE CALCUL DE
L*.....197
ANNEXE A7 : *VALEURS NUMERIQUES DU FACTEUR DE FUITE*201
ANNEXE A8 : *TABLES D'INTEGRALES DE COLLISION CHOISIES POUR LE CALCUL DES
COEFFICIENTS DE TRANSPORT*211
ANNEXE A9 : *RAPPELS SUR LA METHODE DE L'INVERSION D'ABEL*217

INTRODUCTION

La majorité des études sur les arcs électriques est motivée par leurs applications industrielles actuelles et potentielles telles que le traitement métallurgique (soudure, réchauffage de bains métalliques, métallurgie extractive...) et le traitement ou l'élimination des déchets toxiques, les lampes et les disjoncteurs. Parmi les différentes technologies existantes, la projection par plasma prend de plus en plus d'ampleur. Son principe consiste à injecter dans un plasma des métaux ou matériaux céramiques sous forme de poudres qui sont fondues et accélérées durant leur séjour dans le jet avant de venir « s'écraser » sur un substrat préalablement préparé. Le développement d'un tel procédé débuta en France dans les années 50 avec la société *SNECMA* dont le but était de réaliser un revêtement sur les tuyères de fusées. Pour cela, plusieurs essais furent effectués et permirent la mise au point d'une torche de projection refroidie par eau et garantissant une durée de fonctionnement d'environ 200 heures sans que les électrodes aient besoin d'être changées. Le brevet fut déposé par la *SNECMA* en 1963 puis exploité par la société *PLASMA TECHNIK*. Durant la même période, aux Etats Unis, la société *METCO* fournit dans les années 60 à l'industrie aéronautique des installations permettant de revêtir manuellement les chambres de combustion de moteurs d'avion tandis qu'en 1958, *THERMAL DYNAMICS* commercialisa une installation de projection par plasma pour faire des revêtements métalliques ou céramiques [PI-1]. Les revêtements prennent alors une place considérable dans le domaine des plasmas et tout particulièrement de la projection par plasma. Les industriels souhaitant un dépôt reproductible, de bonne qualité et respectant certains critères bien définis, apparaissent dans les années 70 les premiers robots de projection assurant ainsi une parfaite reproductibilité des dépôts.

Aujourd'hui, nous recensons deux grands procédés utilisés pour effectuer des dépôts. Le plus répandu est la projection sous pression atmosphérique ou dans l'air. Appelée APS (Atmosphéric Plasma Spraying), il présente l'avantage d'être peu coûteux, très rapide et très pratique dans son utilisation. De plus, avec l'évolution de la robotisation, la taille des pièces à traiter n'est plus un problème délicat. Cependant, le principal inconvénient de ce procédé reste la présence d'air refroidissant rapidement le plasma et modifiant les propriétés de ce dernier. Le VPS (Vaccum Plasma Spraying) est une autre technique s'affranchissant de la présence d'air, la projection s'effectuant cette fois-ci sous basse pression dans une enceinte adéquate. Elle présente beaucoup d'avantages comme une diminution du taux de porosité, une baisse de la pollution au niveau du dépôt puisque la quasi totalité des oxydes est éliminée, une bonne qualité de l'atmosphère entraînant une meilleure adhérence et homogénéité du revêtement sur le substrat. Ce procédé est néanmoins très coûteux et très délicat, encore plus coûteux lorsqu'il s'agit d'entreprendre des revêtements sur des pièces de très grandes dimensions où le premier procédé lui est préféré.

Depuis les années 80, la projection par plasma thermique est en plein essor dans bon nombre de domaines comme l'aéronautique, le nucléaire, la mécanique ou le domaine médical. Pour le revêtement, les applications sont nombreuses et portent essentiellement sur des traitements protecteurs contre l'usure (réparation ou reconstruction locales de zones usées, usure due à l'abrasion, l'érosion ou au frottement) et contre la chaleur (due aux gaz corrosifs, à l'érosion des électrodes, aux métaux fondus ou aux atmosphères oxydantes). Nous retrouvons également beaucoup de revêtements à propriétés électriques comme les blindages radiofréquences, les dépôts diélectriques et ceux assurant une bonne conductivité du matériau traité.

Malheureusement, cette technologie nécessite la connaissance d'un grand nombre de paramètres liés aux transferts de chaleur et de quantité de mouvement entre les particules et le plasma (débits, puissance, injection des poudres, nature du plasma...). On estime que la qualité d'un revêtement peut être influencée par plus de 50 paramètres. De plus, comprendre les phénomènes intervenant lors d'une projection par plasma demande une vaste étude (création de l'arc dans la torche, propriété du jet et de l'interaction particule/plasma, étude du dépôt, de l'injection des particules et de la géométrie de la torche, modification de l'écoulement du plasma due aux injections...).

Le besoin des technologies de métallisation compatible avec le contexte industriel de la construction aéronautique est à l'origine de l'étude que nous proposons dans le cadre de cette thèse. Ce projet concerne la métallisation des matériaux composites à base de polymère. Ces matériaux utilisés pour la voilure des avions et moins conducteurs que les métaux nécessitent une métallisation afin d'évacuer les charges électriques créées notamment par les impacts de la foudre que subissent les aéronefs. En effet, en moyenne, un avion de tourisme subit la foudre une fois par an tandis qu'un avion militaire autorisé à voler dans des zones spéciales et pour des altitudes différentes en subit beaucoup plus. Les conséquences sont néfastes pour l'industriel, la restauration des pièces détériorées par les impacts demandant des réparations onéreuses, longues, manuelles et minutieuses. A l'heure actuelle, la protection consiste à déposer une grille autour des rivets où s'accumulent les charges permettant la continuité de l'écoulement des charges et évitant ainsi les points d'échauffement. Destiné à réduire le temps et la complexité de l'intervention, le dépôt d'une fine bande de cuivre par projection plasma thermique atmosphérique semble donc une solution industrielle potentielle pour métalliser ces matériaux composites tout en conservant les propriétés mécaniques du matériau. En effet les premières mesures réalisées montrent qu'aucune perte de performance mécanique n'est constatée et que l'adhérence du dépôt de cuivre semble satisfaisante.

Ce projet soutenu par le conseil régional Midi Pyrénées regroupe plusieurs laboratoires, organismes et industriels de la région tels que *EADS* de Toulouse, la laboratoire de Génie Electrique de Toulouse pour l'analyse des propriétés électriques des composites métallisés, l'école des Mines d'Albi-Carmaux pour l'analyse des propriétés mécaniques de ces derniers [Be-3], l'université Paul Sabatier et l'Institut National Polytechnique. Le *CPAT* participe à ce projet avec pour objectif le travail présenté dans cette thèse consistant à calculer les propriétés du plasma et à caractériser une torche de projection dont le plasma est un mélange Ar/H₂ en présence de vapeurs de cuivre. La difficulté essentielle consiste à contrôler le transfert d'énergie au substrat pour éviter de détériorer ce dernier. Pour cela, une bonne quantification des propriétés et des transferts d'énergie est nécessaire. La qualité du dépôt passe donc par une meilleure connaissance du jet de ce plasma, de son rayonnement et des propriétés thermodynamiques et de transport des particules dans celui-ci. De nombreux travaux ont été faits sur le rayonnement et les propriétés de transport des gaz purs tels l'argon, l'hydrogène [Au-1][Bo-1] ou le cuivre [Mo-6]. De même, la littérature propose un grand nombre de résultats sur les coefficients de transport du mélange binaire Ar/H₂ [Au-1][Bo-1] mais peu concernant son rayonnement, à l'inverse du mélange Ar/Cu [Bo-1][Ch-5]. Quant au mélange ternaire Ar/H₂/Cu, les données recensées dans la littérature concernent essentiellement les plasmas stellaires nettement plus chauds.

Cette thèse se présente sous la forme de six chapitres regroupant deux aspects : le plus important est théorique et concerne le calcul des propriétés radiatives et de transport du plasma

pour une pression atmosphérique et des températures comprises entre 300K et 25000K ; le second expérimental est basé sur des caractérisation d'un jet de plasma Ar/H₂ en présence de poudres de cuivre.

Le premier chapitre présente d'une manière générale le rayonnement thermique et les phénomènes de transport dans les plasmas d'arc. De nombreuses définitions de grandeurs radiatives ainsi que les principales lois d'équilibre du rayonnement y sont introduites. Pour les propriétés de transport, nous présentons rapidement la méthode de Chapman-Enskog utilisée pour le calcul des coefficients de transport. Enfin, nous mettons l'accent sur les différentes interactions et collisions binaires responsables du transport de masse, de quantité de mouvement et d'énergie (autre que le rayonnement) dans le plasma.

Le calcul et les résultats de la composition et des propriétés thermodynamiques font l'objet du chapitre II. La principale difficulté concerne le calcul des fonctions de partition de toutes les espèces qui dépend de leurs structures électroniques. Seuls quelques résultats les plus caractéristiques sont présentés montrant en particulier l'influence du cuivre, les mélanges argon-hydrogène ayant été largement étudiés dans la littérature.

L'étude du rayonnement est présentée sur deux chapitres. Le chapitre III traite des bases de calcul du rayonnement, c'est à dire la description et le calcul des phénomènes physiques responsables de l'émission et de l'absorption du rayonnement dans une très large gamme spectrale s'étendant de l'infra-rouge à l'ultra-violet très lointain. Les divers élargissements des raies ainsi que les différents types de continua y sont également présentés. Basés sur des études antérieures, plusieurs travaux spécifiques ont été développés dans cette partie portant notamment sur le choix des banques de données de la littérature et sur le calcul de l'auto-absorption des raies dans un milieu homogène et isotherme. Cette dernière est étudiée via l'introduction d'un facteur de fuite dont la valeur dépend de l'intensité et de la forme de la raie.

A partir des données du chapitre III, nous développons dans le chapitre IV deux méthodes permettant de calculer le transfert radiatif dans des plasmas. La première consiste à calculer le coefficient d'émission nette, c'est à dire la puissance émise par le plasma corrigée de l'auto-absorption du rayonnement dans le plasma lui-même (divergence du flux radiatif). Le calcul pratique de ce coefficient est effectué pour un milieu homogène et isotherme. En dépit de cette hypothèse apparemment très restrictive, ce type de coefficient est majoritairement utilisé dans les modélisation d'arcs et de plasmas thermiques pour deux raisons : sa facilité d'utilisation et le fait que ce coefficient constitue une assez bonne approximation de la puissance nette rayonnée par les régions les plus chaudes du plasma dans lesquelles les gradients de température sont relativement faibles. Ce coefficient a en outre l'avantage de prendre en compte de façon directe l'influence des différents composants dans des plasmas établis dans des mélanges comme c'est le cas dans nos conditions d'étude.

La deuxième méthode relative au transfert radiatif et présentée au cours du chapitre IV, est le calcul des coefficients moyens d'absorption. Dans cette méthode, nous considérons que le rayonnement total du plasma peut être traité comme celui d'un corps gris par intervalles spectraux. Pour cela, nous effectuons un découpage préliminaire de l'ensemble du spectre en quelques intervalles (en général moins de 10) judicieusement choisis et fonctions des structures électroniques des espèces, et calculons pour chaque intervalle (et pour chaque valeur de la

température) une valeur moyenne du coefficient d'absorption supposée constante sur cet intervalle. Cette méthode ne donne pas directement la divergence du flux radiatif mais fournit les données nécessaires pour ce calcul. Moins directe que le coefficient d'émission nette, elle reste néanmoins intéressante pour trois raisons : sa cohérence avec les valeurs du coefficient d'émission nette dans les régions chaudes ; le calcul explicite de l'absorption du rayonnement dans les régions tièdes du plasma ou dans le gaz froid environnant ; des méthodes de calcul de transfert radiatif basées sur ces données sont de plus en plus intégrées aux codes industriels ou universitaires de modélisation numérique des arcs.

Le calcul des coefficients de transport fait l'objet du *chapitre V*. Une étude approfondie sur les intégrales de collisions entre toutes les espèces, a été réalisée à partir de données de la littérature. Une étude critique a permis de sélectionner un jeu cohérent d'intégrales de collisions permettant de comparer nos résultats à ceux de la littérature pour les gaz purs et quelques mélanges binaires, et le calcul original des coefficients de transport dans notre mélange ternaire.

Enfin, une étude expérimentale est proposée dans le *chapitre VI* dont le principal objectif consiste à caractériser l'état du plasma Ar/H₂ en présence de cuivre et à déterminer les paramètres fondamentaux de la décharge (température, densités des diverses espèces). Pour cela, nous présentons le dispositif optique ainsi que les différentes méthodes de diagnostic basées sur la mesure des intensités des raies. Quelques profils de température, de densité électronique, estimations de la pénétration de l'air dans le jet et comparaisons sont également présentées. L'ensemble des problèmes inhérents à la métallisation des composites par procédé plasma et notamment le phénomène d'adhérence métal composite n'est pas abordé dans ce sujet de thèse mais a fait l'objet d'études plus approfondies à l'école des Mines Albi-Carmaux [Be-3].

INTRODUCTION

AU RAYONNEMENT THERMIQUE

ET

AUX PHENOMENES DE TRANSPORT

I – DEFINITIONS ET LOIS DU RAYONNEMENT THERMIQUE

1.1 – Introduction

Sous l'effet de diverses excitations, la matière émet des ondes électromagnétiques et peut également en absorber. Cependant, dire qu'un corps émet du rayonnement ne signifie pas obligatoirement qu'il puisse en absorber partiellement ou totalement. C'est pourquoi nous distinguons trois types de corps classés suivant leur capacité à absorber ce rayonnement. Le premier type concerne les corps dits « opaques » ou « épais » lorsque le rayonnement émis par un atome est absorbé dans son voisinage immédiat ou que le rayonnement reçu de l'extérieur est fortement absorbé. Le second type correspond aux milieux semi-transparents dont le rayonnement émis peut parcourir une distance importante avant d'être absorbé (c'est le cas des gaz présentant des bandes d'absorption dans l'infrarouge tels le CO_2 , H_2O , CO , CH_4 , NH_3 ou bien possédant des particules opaques en suspension comme les suies). Enfin, le dernier type représente les corps transparents dont le rayonnement reçu ne subit aucune atténuation lors de la traversée de la matière (cas du vide ou de quelques gaz comme l'air sec et l'azote dans l'infrarouge ou le visible). L'émission et l'absorption de radiations sont donc des phénomènes fondamentaux du rayonnement.

Le rayonnement peut être analysé par une approche ondulatoire ou particulaire. Dans le cas d'une approche particulaire, ce rayonnement est assimilé à un gaz de photons de fréquence ν et d'énergie $h\nu$ auxquels nous appliquons la théorie cinétique des particules en introduisant une fonction de distribution des vitesses. L'émission de tels photons résulte de transitions entre les niveaux supérieurs et les niveaux inférieurs des atomes, le phénomène inverse étant l'absorption. Pour l'approche ondulatoire, l'analyse du rayonnement se fait à l'aide des méthodes de Fourier sous forme d'une superposition d'ondes monochromatiques planes, de vecteur d'onde \vec{k} représenté par une quantité de mouvement $\vec{p} = \hbar\vec{k}$.

Le rayonnement peut donc être décomposé en un spectre de radiations monochromatiques caractérisées par leur fréquence ν ou leur longueur d'onde λ telle que $c = \lambda\nu$ désigne la vitesse de propagation de ces ondes dans un milieu d'indice n . Pour les radiations thermiques que nous traitons, ce domaine de longueur d'onde s'étale de l'ultraviolet ($\lambda \gg 10^{-7} \text{ m}$) à l'infrarouge lointain ($\lambda \gg 10^{-4} \text{ m}$). Nous consacrons cette première partie aux grandeurs et lois essentielles caractérisant le rayonnement thermique et permettant de mieux comprendre les calculs entrepris dans les *chapitres III et IV*.

1.2 – Grandeurs physiques

Dans la physique du rayonnement thermique, de nombreuses grandeurs sont classées suivant deux critères indépendants :

- La composition spectrale où ces grandeurs sont dites **totales** (quand elles sont relatives à l'ensemble du spectre du rayonnement thermique) ou **monochromatiques** (lorsqu'elles se rapportent à un intervalle spectral étroit $d\lambda$ centré sur la longueur d'onde λ), ces grandeurs monochromatiques ou *spectrales* étant différenciées des grandeurs totales par l'ajout d'un indice λ ou ν .

- La distribution directionnelle du rayonnement où ces grandeurs prennent le nom d'**hémisphériques** lorsqu'elles concernent l'ensemble des directions de l'espace selon lesquelles un élément de surface peut émettre ou recevoir du rayonnement ou **directionnelles** lorsqu'elles caractérisent une direction bien définie pour la propagation du rayonnement et la surface considérée.

Pour toutes ces grandeurs et particulièrement la **luminance** considérée comme étant la grandeur de base du rayonnement thermique puisqu'intervenant dans l'équation du transfert radiatif, seuls les termes « totale » et « directionnelle » sont habituellement conservés.

1.2.1 – La luminance

Pour définir le terme essentiel de luminance dans l'étude du rayonnement thermique, considérons un élément stationnaire de surface dS dans son hémisphère de rayon unité :

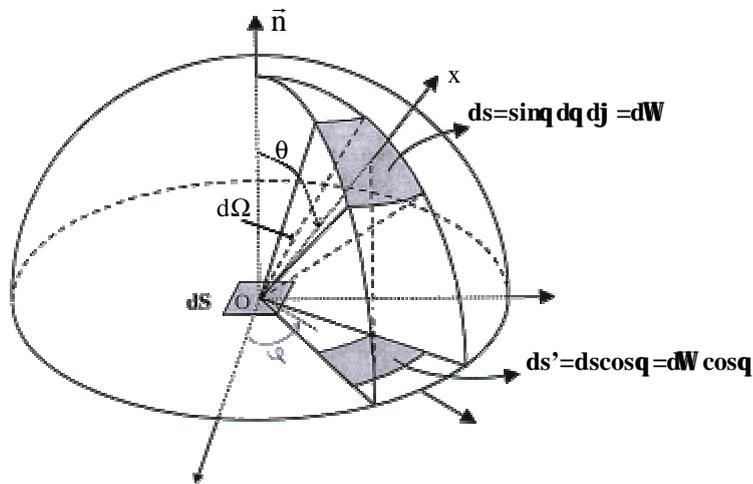


Fig. I-1 : Luminance

Cet élément de surface émet un rayonnement (quantité d'énergie) suivant une direction donnée O_x caractérisée par un angle solide élémentaire $d\Omega$ entourant cette direction inclinée d'un angle θ par rapport à la normale \vec{n} de la surface. Le flux total d'énergie radiative émis peut donc s'écrire :

$$d^4\phi = L(\vec{r}, d\vec{\Omega})d\Omega dS \cos \theta \quad (I-1)$$

On définit la grandeur L caractéristique à l'émetteur comme étant la luminance totale (sous entendue directionnelle puisque dépendant de la direction O_x par l'intermédiaire de l'angle θ). Cette luminance dépend de la température T , de la direction O_x , de la nature physico-chimique et géométrique de la surface et s'exprime en $W/m^2/ster$.

Si le flux est émis pour un intervalle spectral bien précis, celui-ci s'écrira :

$$d^5\phi_\lambda = L_\lambda(\vec{r}, d\vec{\Omega})d\Omega dS d\lambda \cos \theta \quad (I-2)$$

Dans ce cas, nous définissons une luminance spectrale (ou monochromatique) dépendant de la température T , de la direction O_x , de la nature physico-chimique et géométrique de la surface mais également de la longueur d'onde (ou fréquence). Elle s'exprime alors en $W/m^3/ster$. Dans le cas d'un milieu semi-transparent, la luminance spectrale se rapporte plutôt à une fréquence et s'exprime par conséquent en $W.s/m^2/ster$.

Lorsque certaines sources ont une luminance indépendante de la direction O_x , ces dernières sont dites à *émission diffuse-isotrope (ou Lambertienne)* et obéissent à la loi de Lambert. Nous retrouvons parmi celles-ci les surfaces noires émettant selon les lois du corps noir un rayonnement diffus-isotrope et absorbant intégralement le rayonnement qu'elles reçoivent ou qu'elles émettent. Cette hypothèse est utilisée pour simplifier les calculs lorsque les sources ont des émissivités supérieures à 0,9 - 0,95.

1.2.2 – Coefficient d'émission

En un point M d'un milieu rayonnant **fig.I-2**, les coefficients d'émission et d'absorption décrivent les propriétés locales d'émission et d'absorption en ce point. Le coefficient d'émission spectral volumique $\epsilon_\lambda(\vec{u}, \vec{r})$ représente la puissance rayonnée par un élément de volume suivant une direction \vec{u} , par unité d'angle solide $d\Omega$ et par unité de longueur d'onde λ et par unité de volume. Durant notre étude, nous supposons ce coefficient isotrope soit $\epsilon_\lambda(\vec{r})$.

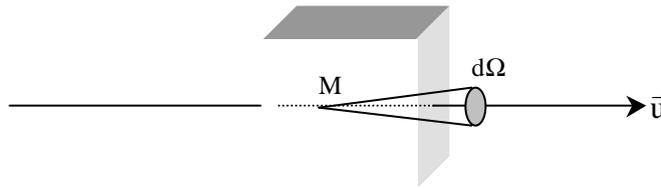


Fig. I-2 : Absorption et Emission

Si l'on considère une transition d'un niveau supérieur (h) vers un niveau inférieur (b), l'émission est isotrope et le coefficient d'émission proportionnel non seulement à la probabilité de transition A_{hb} mais aussi au profil local d'émission $P_h^\lambda(r)$, soit en $(W/m^4/ster)$:

$$\epsilon_\lambda(r) = \frac{hc}{4\pi\lambda_o} A_{hb} n_h P_h^\lambda(r) \quad (I-3)$$

avec λ_o la valeur de la longueur d'onde au centre de la raie (en mètre).

1.2.3 – Coefficient d'absorption

Dans le cas d'une raie correspondant à une transition du niveau inférieur (b) vers le niveau supérieur (h), nous parlons d'absorption. Le coefficient d'absorption exprime alors la fraction de rayonnement absorbé dans un élément de volume. Proportionnel à la probabilité de transition en absorption B_{bh} , à la densité locale du niveau absorbant $n_b(r)$ et au profil local d'absorption $P_b^\lambda(r)$ centré en λ_o , il s'écrit sous la forme suivante :

$$\kappa_\lambda(r) = \frac{h}{\lambda_o} B_{bh} n_b P_b^\lambda(r) \quad (I-4)$$

En tenant compte de l'émission induite considérée dans ce cas comme une absorption négative du niveau bas (b) vers le niveau haut (h) avec pour probabilité de transition B_{hb} , celui-ci s'écrit :

$$\kappa'_\lambda(r) = \frac{h}{\lambda_o} B_{bh} n_b P_b^\lambda(r) - \frac{h}{\lambda_o} B_{hb} n_h P_h^\lambda(r) \quad (I-5)$$

$$\text{soit } \kappa'_\lambda(r) = \frac{h}{\lambda_o} B_{bh} n_b P_b^\lambda(r) \left(1 - \exp\left(-\frac{hc}{\lambda k_b T}\right) \right) \quad \text{avec} \quad \begin{cases} \frac{n_h}{n_b} = \frac{g_h}{g_b} \exp\left(-\frac{hc}{\lambda k_b T}\right) \\ g_b B_{bh} = g_h B_{hb} \end{cases} \quad (I-6)$$

1.2.4 – Flux de rayonnement

Le flux de luminance représente la puissance totale émise à travers la surface et s'obtient par conséquent par intégration de la luminance totale sur toutes les directions possibles et toute la surface. Son unité est donc le Watt.

$$\phi_R(S) = \iint_{\Omega_S} L(\vec{r}, d\vec{\Omega})(d\vec{S} \cdot d\vec{\Omega}) \quad (I-7)$$

Généralement, nous trouvons dans la littérature le flux surfacique de la luminance plus communément appelé flux de rayonnement (W/m^2):

$$F_R(S) = \int_{\Omega} L(\vec{r}, d\vec{\Omega}) d\Omega \cdot \delta\vec{r} \cdot \vec{n} \quad (I-8)$$

1.2.5 – Autres grandeurs

Dans la littérature, nous rencontrons d'autres grandeurs de ce type (relatives à une source émettrice ou réceptrice) généralement reliées à la luminance totale ou spectrale. Parmi celles-ci, nous trouvons régulièrement *l'émittance*, *l'éclairement* et *l'intensité* dont nous donnons les définitions en *annexe A1*.

1.3 – Equation du transfert radiatif

Considérons le volume élémentaire dV de la **figure I-3**, limité en s et $s+ds$ par les surfaces $dS(s)$ et $dS(s+ds)$ normales à la trajectoire :

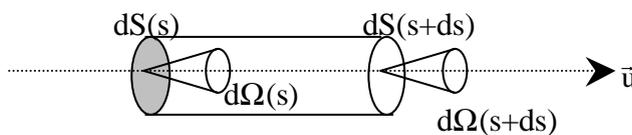


Fig. I-3 : Equation du transfert radiatif

En négligeant la diffusion du rayonnement, en supposant l'ETL, l'indice de réfraction uniforme et valant 1 (trajectoire rectiligne, *annexe A2*) et le milieu à l'état stationnaire, l'équation du transfert radiatif se met sous la forme (détails en *annexe A3*) :

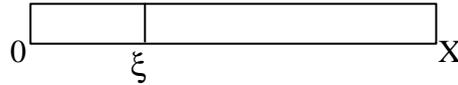
$$\frac{dL_v(s)}{ds} = \underbrace{\kappa'_v(s)L_v^o(T)}_{\epsilon'_v} - \kappa'_v(s)L_v(T) \quad (I-9)$$

Où κ'_v représente le coefficient d'absorption corrigé de l'émission induite et $L_v^o(T)$ la luminance spectrale du corps noir.

Pour une transition d'un niveau supérieur (h) vers un niveau inférieur (b), de longueur d'onde λ_o , l'équation se met sous la forme :

$$\frac{dL_\lambda(s)}{ds} = \frac{hc}{4\pi\lambda_o} A_{hb} n_h P_h^\lambda(r) - \frac{h}{\lambda_o} L_\lambda(T) B_{bh} n_b P_b^\lambda(r) \left(1 - \exp\left(-\frac{hc}{\lambda_o k_b T}\right) \right) \quad (I-10)$$

Pour un trajet rectiligne $[0,X]$, nous obtenons la luminance spectrale au point X par intégration de l'équation (I-9) :



$$L_v(X) = \underbrace{L_v(0) \exp\left(-\int_0^X \kappa'_v(\xi) d\xi\right)}_{\text{Terme I}} + \underbrace{\int_0^X L_v^o(\xi) \kappa'_v(\xi) \exp\left(-\int_\xi^X \kappa'_v(\eta) d\eta\right) d\xi}_{\text{Terme II}} \quad (I-11)$$

- Le terme I, solution homogène de l'équation (I-9), représente la luminance initiale au point 0, c'est à dire l'énergie radiative provenant de l'extérieur dans la direction considérée et absorbée dans l'épaisseur X.
- Le terme II, solution particulière de l'équation (I-9), correspond à l'émission propre du milieu représentant le rayonnement émis en $d\xi$ et absorbé par le milieu d'épaisseur $(X-\xi)$.

Enfin, en supposant que l'extérieur n'émet aucune énergie radiative vers le milieu, la luminance totale en X dépend seulement de l'émission propre du milieu :

$$L(X) = \int_0^X \int_0^X L_v^o(\xi) \kappa'_v(\xi) \exp\left(-\int_\xi^X \kappa'_v(\eta) d\eta\right) d\xi dv \quad (I-12)$$

1.4 – Lois du rayonnement d'équilibre

Nous pouvons compter cinq lois importantes dont quatre régissent l'émission du rayonnement thermique d'équilibre : la loi de Planck, les deux lois de Wien et celle de Stefan-Boltzmann. La dernière loi, la loi de Kirschhoff, lie l'émission à l'absorption d'un corps. Les substances naturelles rayonnent selon des lois différentes d'une espèce à l'autre. Cependant, il est possible de déterminer le maximum d'énergie pouvant être rayonné par la matière à chaque température T et chaque longueur d'onde. Le corps *idéal* pouvant émettre cette énergie est appelé *corps noir* et sert d'étalon de rayonnement.

1.4.1 – Corps noir

Le corps noir définit l'état d'équilibre thermodynamique parfait entre le rayonnement et la matière dans une cavité rayonnante isotherme à la température thermodynamique T. L'une des principales caractéristiques d'un tel corps est d'être totalement opaque (absorption totale du rayonnement qu'il reçoit), totalement isolé et maintenu à température constante, la distribution spectrale de la lumière émise ou absorbée ne dépendant que de la température du milieu. L'énergie émise par les autres corps peuvent donc s'écrire proportionnellement à l'émission du corps noir situé dans les mêmes conditions, les coefficients de proportionnalité étant appelés *émissivités*. Les lois caractérisant l'état de la lumière dans un corps noir ont été établies à la fois expérimentalement et théoriquement :

- La Loi de Planck caractérisant la distribution de la luminance spectrale de la source en fonction de la longueur d'onde (ou fréquence).
- Les lois de Wien fournissant la longueur d'onde pour laquelle la luminance spectrale est maximale.
- La loi de Stefan-Boltzmann donnant la puissance totale rayonnée sur tout le domaine des longueurs d'onde.

1.4.2 – Loi de Planck

La loi de Planck exprime la quantité d'énergie rayonnée par unité de temps, par unité de surface d'un corps noir à la température T dans une direction donnée, par unité d'angle solide et par unité de longueur d'onde au voisinage d'une longueur d'onde donnée. Cette grandeur correspondant à la *luminance spectrale* ne dépend que de la température T et de la longueur d'onde λ (ou fréquence). La loi décrivant la luminance spectrale d'un corps noir à la température T est donnée par Planck (° sert à identifier les grandeurs relatives au corps noir) :

$$L_{\lambda}^{\circ}(T) = \frac{2hc^2}{\lambda^5} \left(\exp\left(\frac{hc}{\lambda k_b T}\right) - 1 \right)^{-1} \quad \text{avec } c = \frac{c_0}{n_{\lambda}} \quad (I-13)$$

où c représente la vitesse de propagation et n_{λ} la partie réelle de l'indice de réfraction.

Pour les gaz, le rayonnement se propage dans un milieu dont l'indice de réfraction est proche de l'unité. La luminance spectrale exprimée en fréquence se met donc sous la forme suivante:

$$B_v^o(T) = L_v^o(T) = \frac{2hv^3}{c_o^2} \left(\exp\left(\frac{hv}{k_b T}\right) - 1 \right)^{-1} \quad (I-14)$$

1.4.3 – Lois de Wien

Lorsque nous représentons graphiquement l'évolution de la luminance spectrale du corps noir en fonction de la longueur d'onde pour différentes températures, nous constatons que cette luminance possède une valeur maximum pour une longueur d'onde λ_m . La relation liant λ_m à la température correspond à la première loi de Wien et s'écrit :

$$\lambda_m T = 2,898.10^{-3} \text{ (m.K)} \quad (I-15)$$

Pour des températures faibles, le maximum du rayonnement s'observe pour de grandes longueurs d'onde, le corps noir émet donc principalement dans l'infrarouge. Pour des température plus élevées, le maximum se déplace vers des longueurs d'onde plus courtes pour se trouver proche du domaine visible quand la température avoisine 6000K. Cette loi permet donc de déterminer la position λ_m pour laquelle la température d'un corps rayonne comme un corps noir.

La seconde loi de Wien fournit l'ordonnée du maximum d'émittance spectrale du corps noir pour une température :

$$M_{\lambda_m}^o(T) = BT^5 \quad (I-16)$$

avec $B=1,287.10^{-11} \text{ (W/m}^2/\mu\text{m/K)}$, la longueur d'onde λ_m s'exprimant en μm et la température en K.

Ces deux lois de Wien sont donc très importantes dans le transfert de chaleur du rayonnement puisqu'elles nous indiquent le domaine spectral où se situe le maximum d'émission et par conséquent nous permettent de choisir le matériel récepteur adéquat pour une gamme de température bien connue.

1.4.4 – Loi de Stefan-Boltzmann

La loi de Stefan exprime la relation entre la puissance totale rayonnée, la température et la surface du corps noir. Elle s'obtient par intégration de la fonction de Planck sur tout le domaine de longueur d'onde (on suppose ici une source lambertienne):

$$M^o(T) = \int_0^{\infty} M_{\lambda}^o(T) d\lambda = \int_0^{\infty} \pi L_{\lambda}^o(T) d\lambda = \frac{2\pi^5 k_b^4}{15c_o^2 h^3} T^4 \quad \text{soit} \quad L^o(T) = \frac{\sigma_s}{\pi} T^4 \quad (I-17)$$

avec σ_S la constante de Stefan-Boltzmann telle que $\sigma_S=5,67.10^{-8}$ (W/m²/K⁴) et $\sigma_S T^4$ l'énergie rayonnée en une seconde par unité de surface de corps noir à la température T.

Cette loi liant la luminance totale (énergie totale émise) à la température montre bien l'importance du rayonnement pour des températures élevées.

1.4.5 – Loi de Kirschhoff

Nous pouvons également définir de façon générale l'absorption et l'émission d'un corps en fonction de la luminance spectrale. En effet, pour un flux incident $d^5\phi_v$ associé à un rayon élémentaire se propageant dans $d\Omega$ en s normalement à la surface élémentaire dS (**fig.I-3**), nous avons pour un milieu semi-transparent (nous prenons ici $\cos\theta=1$) :

$$d^5\phi_v(\vec{r}, d\vec{\Omega}) = L_v dS d\Omega dv \quad (I-18)$$

Ce flux traversant l'élément de volume dV compris entre s et s+ds ($dV=dsdS$) est en partie absorbé d'où

$$d^6\phi_v(s) = -\kappa'_v(s) ds d^5\phi_v = -d^6\phi_v^a(s) \quad (I-19)$$

Or nous savons que tout milieu susceptible d'absorber du rayonnement est également susceptible d'en émettre. Le flux émis dans l'angle solide élémentaire $d\Omega$ dans dV est par définition :

$$d^6\phi_v^e = \epsilon_v(s) dV d\Omega dv \quad (I-20)$$

Lorsque nous sommes à l'équilibre thermique, le flux absorbé est égal au flux émis et la luminance, dans toutes les directions et en tout point, équivaut à celle du rayonnement d'équilibre $L_v^o(T)$ définie par la loi de Planck.

Par conséquent, nous pouvons écrire le coefficient d'émission en fonction du coefficient d'absorption par la relation suivante définissant la loi de Kirschhoff :

$$\epsilon_v(s) = \kappa'_v(s) L_v^o(T) \quad \text{soit} \quad \frac{\epsilon_v(T)}{\kappa'_v(T)} = \frac{2hv^3}{c^2} \cdot \left(\exp\left(\frac{hv}{k_b T}\right) - 1 \right)^{-1} \quad (I-21)$$

II – INTRODUCTION AUX PHENOMENES DE TRANSPORT

La plupart des traitements métallurgiques par plasma dépendent fortement de la capacité du plasma à améliorer les transferts thermiques et à conduire le courant. L'application d'un gradient de concentration, d'un gradient de vitesse, de température ou de potentiel modifie le milieu par l'apparition d'un courant de particules, d'une pression, d'un flux de chaleur ou d'un courant électrique. Ces modifications sont caractérisées par des facteurs de proportionnalité appelés coefficients de transport. Pour évaluer ces différents flux, il est indispensable de connaître les fonctions de distributions $f_i(\vec{r}, \vec{v}_i, t)$ de toutes les espèces i constituant le milieu et décrivant les propriétés d'un gaz. Ces fonctions sont définies comme étant le nombre de particules i à l'instant t contenues dans l'espace $d\vec{r}$ autour de \vec{r} et ayant une vitesse \vec{v}_i avec l'extrémité du vecteur vitesse dans $d\vec{v}_i$ autour de \vec{v}_i .

A l'équilibre, la fonction de distribution est maxwellienne et vérifie l'équation de Boltzmann :

$$f_i^o(\vec{r}, \vec{v}_i, t) = \left(\frac{m_i}{2\pi k_b T} \right)^{3/2} n_i \exp\left(-\frac{m_i \cdot (\vec{v}_i - \vec{v}_o)^2}{2k_b T} \right) \quad (I-22)$$

Hors équilibre, les collisions entraînent des processus de peuplement et de dépeuplement qui ont pour conséquence de faire varier les fonctions de distribution des espèces i . Dans ce cas, leur évolution est décrite par une équation cinétique du type équation de Boltzmann :

$$\frac{\partial f_i(\vec{r}, \vec{v}_i, t)}{\partial t} + \left(\vec{v}_i \cdot \frac{\partial f_i(\vec{r}, \vec{v}_i, t)}{\partial \vec{r}} \right) + \frac{1}{m_i} \left(\vec{X}_i \cdot \frac{\partial f_i(\vec{r}, \vec{v}_i, t)}{\partial \vec{v}_i} \right) = \sum_j J(f_i, f_j) \quad (I-23)$$

où X_i représente la force totale exercée sur la particule i de masse m_i et $J(f_i, f_j)$ la forme bilinéaire représentant la variation de $f_i(\vec{r}, \vec{v}_i, t)$ sous l'effet des chocs avec les particules de type j :

$$J(f_i, f_j) = \left(\frac{\partial f_i(\vec{r}, \vec{v}_i, t)}{\partial t} \right)_{col,j} = \iiint (f_i' f_j' - f_i f_j) \cdot g_{ij} \cdot b db \cdot d\Sigma \cdot d\vec{v}_j \quad (I-24)$$

avec $f_j'(\vec{r}, \vec{v}_j, t)$ la fonction de distribution après la collision, g_{ij} le module de la vitesse relative initiale, b le paramètre d'impact et Σ l'angle azimutal dans le disque d'impact.

Parmi les méthodes développées pour résoudre cette équation intégral-différentielle de Boltzmann, les plus fréquemment utilisées sont la méthode de **Chapman-Enskog** [Ch-1] appliquée aux mélanges complexes et la méthode de **Grad** [Gr-1]. Pour notre étude, nous avons choisi la méthode de Chapman-Enskog, celle de Grad convenant mieux pour des systèmes très éloignés de l'équilibre. Enskog modifia l'équation de Boltzmann (I-23) en divisant le second membre par un paramètre de perturbation ξ de telle façon que la fréquence de collision puisse varier arbitrairement sans affecter le nombre de collisions d'un type particulier de particule. Nous obtenons alors l'équation suivante :

$$\frac{\partial f_i(\vec{r}, \vec{v}_i, t)}{\partial t} + \left(\vec{v}_i \frac{\partial f_i(\vec{r}, \vec{v}_i, t)}{\partial \vec{r}} \right) + \frac{1}{m_i} \left(\vec{X}_i \cdot \frac{\partial f_i(\vec{r}, \vec{v}_i, t)}{\partial \vec{v}_i} \right) = \frac{1}{\xi} \sum_j J(f_i, f_j) \quad (I-25)$$

où $1/\xi$ mesure la fréquence des collisions. Si les perturbations ξ sont très petites, les collisions deviennent plus fréquentes et le milieu tend à se comporter dans des conditions peu éloignées de l'équilibre. La fonction de distribution est alors considérée proche d'une maxwellienne et peut s'exprimer en série de ξ sous la forme :

$$f_i = f_i^{(0)} + \xi f_i^{(1)} + \xi^2 f_i^{(2)} + \xi^3 f_i^{(3)} + \dots + \xi^n f_i^{(n)} \quad (I-26)$$

où (n) représente l'ordre d'approximation. A l'ordre 0, la fonction de distribution $f_i(\vec{r}, \vec{v}_i, t)$ n'est autre que la fonction de distribution maxwellienne $f_i^{(0)}(\vec{r}, \vec{v}_i, t)$ vérifiant les relations de conservation :

$$\int f_i^{(0)}(\vec{r}, \vec{v}_i, t) \cdot d\mathbf{v}_i = n_i$$

$$\sum_i m_i \int f_i^{(0)}(\vec{r}, \vec{v}_i, t) \cdot \vec{v}_i d\vec{v}_i = m_i n_i \langle v_i \rangle \quad (I-27)$$

$$\frac{1}{2} \sum_i m_i \int f_i^{(0)}(\vec{r}, \vec{v}_i, t) \cdot (v_i - \langle v_i \rangle)^2 d\mathbf{v}_i = \frac{3}{2} n_i k_b T$$

Aux ordres supérieurs (n), **Chapman** et **Cowling** [Ch-1] ont montré que l'équation de Boltzmann conduisait à une série d'équations devant vérifier :

$$\int f_i^{(n)}(\vec{r}, \vec{v}_i, t) \cdot d\mathbf{v}_i = 0$$

$$\sum_i m_i \int f_i^{(n)}(\vec{r}, \vec{v}_i, t) \cdot \mathbf{v}_i d\mathbf{v}_i = 0 \quad (I-28)$$

$$\frac{1}{2} \sum_i m_i \int f_i^{(n)}(\vec{r}, \vec{v}_i, t) \cdot (v_i - \langle v_i \rangle)^2 d\mathbf{v}_i = 0$$

Si nous considérons l'approximation au premier ordre, la fonction de distribution peut s'écrire à partir d'une fonction perturbatrice quelconque ϕ_i sous la forme $f_i = f_i^{(0)}(1 + \phi_i)$. **Hirschfelder et al** [Hi-2] démontrent que cette fonction de perturbation ϕ_i dépend de trois termes A_i , B_i et C_i^j , solutions d'équations intégrales obtenues en injectant l'expression de f dans (I-23). On montre également que ces solutions peuvent elles-mêmes être exprimées sous la forme de combinaisons linéaires finies de polynômes de Sonine $S_n^m(x)$ d'ordre n égal à $3/2$ avec x la vitesse réduite de la particule :

$$S_n^m(x) = \sum_{j=0}^m \frac{(-1)^j \cdot \Gamma(m+n+1) \cdot x^j}{\Gamma(n+j+1)j!(m-j)!} \quad (I-29)$$

Une fois ces coefficients A_i , B_i et C_i^j connus et reportés dans l'expression de ϕ_i , nous pouvons finalement en déduire la fonction de distribution f_i . Notons que **Chapman** [Ch-1] exprime ces coefficients du développement de Sonine à l'aide d'intégrales de collision définies au §I-2.1.

A ce jour, l'approximation de la théorie de Chapman-Enskog est l'une des plus utilisées pour décrire les propriétés des gaz denses. Cependant, cette théorie fait appel à des hypothèses et par conséquent présente des limites quant à ses applications, dont les principales sont les suivantes :

- Les phénomènes de transport sont des phénomènes collectifs mais la théorie de base ne fait intervenir que des collisions binaires élastiques.
- L'utilisation de méthodes classiques exclut la prise en compte des phénomènes à basse température dans lesquelles les effets quantiques sont importants.
- Le manque de données dû à la présence de plus en plus de particules. En effet, le calcul se complique par la présence d'une multitude de particules entraînant l'apparition de nouveaux phénomènes collisionnels dont les sections efficaces d'interaction doivent être connues. De même, plus l'ordre d'approximation est élevé dans les calculs, plus le nombre d'intégrales de collision à calculer augmente.

Nous définissons donc dans un premier temps les intégrales de collision. Puis, celles-ci dépendant des sections efficaces et par conséquent des potentiels considérés, nous rappelons les différents types de potentiels rencontrés dans la littérature en joignant leurs tables d'intégrale de collision quand celles-ci existent. Enfin, l'expression de ces potentiels d'interaction variant suivant la nature des particules entrant en collision, nous terminerons cette introduction aux propriétés de transport par l'identification des différentes collisions susceptibles d'intervenir dans un plasma thermique.

2.1 – Intégrales de collision

Le formalisme de calcul des coefficients de transport utilise la définition classique des intégrales de collision.

2.1.1 – Intégrales de collision effectives

Les propriétés de transport sont donc gouvernées par les collisions inter-particulaires qui sont représentées (moyennant un certain nombre d'hypothèses) au travers des intégrales de collisions effectives :

$$\Omega_{ij}^{(\ell,s)} = \left(\frac{k_b T}{2\pi\mu_{ij}} \right)^{1/2} \int_0^\infty \exp(-\gamma_{ij}^2) \cdot \gamma_{ij}^{2s+3} \cdot Q_{ij}^{(\ell)}(\epsilon_r) \cdot d\gamma_{ij} \quad (I-30)$$

avec $\gamma_{ij} = (\epsilon_r/k_b T)^{1/2}$, μ_{ij} la masse réduite, ϵ_r l'énergie cinétique du mobile fictif ($\mu_{ij}g_{ij}^2/2$).

Le nombre de couples (ℓ, s) intervenant dans la relation, c'est à dire le nombre d'intégrales de collision à calculer, est fixé par le niveau d'approximation dans le développement de Sonine [Hi-2]. La section efficace totale de transport $Q_{ij}^{(\ell)}(\epsilon_r)$ est définie par la relation suivante :

$$Q_{ij}^{(\ell)}(\epsilon_r) = 2\pi \int_0^\pi \sigma_{ij}^{\text{diff}}(\chi, \epsilon_r) (1 - \cos^\ell \chi) \sin \chi d\chi \quad (I-31)$$

où $\sigma_{ij}^{\text{diff}}(\chi, \epsilon_r)$ représente la section efficace différentielle de collision (pour deux particules i et j) et χ l'angle de déviation (angle sous lequel sont déviées les particules après la collision) :

$$\chi(b, \epsilon_r) = \pi - 2b \int_{r_m}^\infty \frac{1}{V(r)} \cdot \frac{dr}{r^2} \quad \text{où} \quad V(r) = \left(1 - \frac{b^2}{r^2} - \frac{\phi(r)}{\frac{1}{2}\mu_{ij} \cdot g_{ij}^2} \right)^{1/2} \quad (I-32)$$

avec b le paramètre d'impact, r_m la distance minimale d'approche, $\phi(r)$ le potentiel, v la vitesse relative des particules entrant en interaction et μ_{ij} la masse réduite.

Toute la dynamique des collisions entre dans la description des coefficients de transport à travers les intégrales de collisions, plus particulièrement à travers l'évolution de l'angle χ qui dépend fortement du potentiel d'interaction entre les particules.

2.1.2 – Intégrales de collision réduites

Dans la littérature, les calculs des coefficients de transport utilisent parfois les intégrales de collision réduites notées $\Omega_{ij}^{*(\ell, s)}$ représentant le rapport entre les collisions de particules réelles et les collisions de particules décrites par le modèle de sphères rigides :

$$\Omega_{ij}^{*(\ell, s)} = \frac{\Omega_{ij}^{(\ell, s)}}{\Omega_{ij}^{(\ell, s)} \text{ Sphères Rigides}} \quad (I-33)$$

2.1.3 – Moyenne pondérée

Connaissant la section efficace totale de transport, les coefficients peuvent également s'exprimer en fonction d'intégrales de collision notées $\overline{\Omega}_{ij}^{(\ell, s)}$:

$$\overline{\Omega}_{ij}^{(\ell, s)} = \frac{4(\ell + 1)}{\pi(s + 1) ![2\ell + 1 - (-1)^\ell]} \int_0^\infty \exp(-X) \cdot X^{s+1} \cdot Q_{ij}^{(\ell)}(\epsilon_r) dX \quad (I-34)$$

avec $X = \varepsilon_r / k_b T$, ε_r l'énergie relative des particules et $Q_{ij}^{(\ell)}(\varepsilon_r)$ la section efficace de transport.

Cette intégrale peut être reliée aux intégrales de collision réduites et par conséquent aux intégrales de collision du modèle sphères rigides par la relation suivante (R_i et R_j le rayon des particules i et j assimilées à des sphères) :

$$\overline{\Omega}_{ij}^{(\ell,s)} = (R_i + R_j)^2 \Omega_{ij}^{*(\ell,s)} = (R_i + R_j)^2 \cdot \frac{\Omega_{ij}^{(\ell,s)}}{\Omega_{ij}^{(\ell,s)} \text{ Sphères Rigides}} \quad (I-35)$$

Grâce aux travaux de **Hirschfelder et al** [Hi-2], une relation de récurrence nous permet d'accéder aux valeurs supérieures de s :

$$\overline{\Omega}_{ij}^{(\ell,s+1)} = \overline{\Omega}_{ij}^{(\ell,s)} + \frac{T}{(s+2)} \cdot \frac{\partial \overline{\Omega}_{ij}^{(\ell,s)}}{\partial T} \quad (I-36)$$

Enfin, des collisions entre deux espèces peuvent se faire suivant plusieurs courbes de potentiels correspondant à l'état fondamental ainsi qu'aux tout premier états excités. Dans ce cas, **Gorse** [Go-3] propose une intégrale de collision moyenne définie par l'expression suivante (g_n correspond au poids statistique du $n^{\text{ième}}$ état) :

$$\langle \overline{\Omega}^{(\ell,s)} \rangle = \frac{\sum_n g_n \overline{\Omega}_n^{(\ell,s)}}{\sum_n g_n} \quad (I-37)$$

En conclusion, les intégrales de collision dépendent de l'angle de déviation χ , lui même fonction du potentiel d'interaction. Les intégrales de collision sont donc classées et calculées suivant plusieurs méthodes :

- Soit par intégration numérique de l'équation (I-30), la section efficace $Q_{ij}^{(\ell)}(\varepsilon_r)$ étant connue théoriquement ou expérimentalement. C'est principalement le cas des interactions électron-neutre.
- Soit au moyen de tables lorsque la nature et les données relatives aux potentiels d'interaction décrivant les particules en collision sont connues (collision neutre-neutre, et neutre-ion essentiellement) .
- Soit en considérant les particules comme des sphères rigides où l'on assimile $\Omega_{ij}^{(\ell,s)}$ à $\Omega_{ij}^{(\ell,s)} \text{ Sphères Rigides}$ si aucune donnée n'est connue (cas souvent rencontré pour les interactions entre molécules).

2.2 – Classification des potentiels et tables d'intégrales associées

Dans cette partie, nous distinguons les principaux potentiels d'interaction recensés dans la littérature permettant le calcul des intégrales de collision dont nous donnons parfois les expressions littérales.

2.2.1 – *Potentiel puissance*

a – *Cas général*

Ces potentiels utilisés en zones attractive et répulsive sont de la forme $V = \pm V_o r^{-n}$ où n varie de $n=3$ pour une interaction moléculaire dipolaire à $n=10$ pour une collision quadripôle induit - quadripôle induit. Les intégrales de collision correspondantes sont issues des tables de **Kihara et al** [Ki-1] comme suit :

$$\bar{\Omega}_{ij}^{(\ell,s)} = \frac{4(\ell+1)}{(s+1)![2\ell+1-(-1)^\ell]} \left(\frac{nV_o}{k_b T} \right)^{\frac{2}{n}} \Gamma\left(s+2-\frac{2}{n}\right) A_{(n)}^{(\ell)} \quad (I-38)$$

où Γ est la fonction gamma et les $A_{(n)}^{(\ell)}$ des grandeurs tablées par **Kihara et al** [Ki-1]. Les deux inconnues sont donc V_o et n .

b – *Potentiel de polarisation*

Dans le cas des interactions neutre-chargé, le potentiel puissance correspondant au potentiel de polarisation (type Maxwell) est le plus souvent utilisé :

Dans ce cas, nous avons :

$$\begin{cases} V_o = -\frac{\xi(Ze)^2}{8\pi\epsilon_o} \\ n = 4 \end{cases} \quad (I-39)$$

où ξ est la polarisabilité de la particule neutre, Z le nombre de charge de la particule chargée, e la charge élémentaire et ϵ_o la permittivité du vide.

2.2.2 – *Potentiel exponentiels*

Ils sont de la forme $V = \pm V_o \exp(-Br)$, le signe \pm exprimant le phénomène attractif ou répulsif du potentiel.

a – Zone répulsive

Pour ce type de potentiel, **Monchick** [Mo-2] donne les intégrales de collision suivantes :

$$\left\{ \begin{array}{l} \overline{\Omega}_{ij}^{(\ell,s)} = \frac{2(\ell+1)}{(s+1)![2\ell+1-(-1)^\ell]} \cdot 8 \left(\frac{\alpha}{B} \right)^2 I^{(\ell,s)} \\ \alpha = \ln \left(\frac{V_o}{k_b T} \right) \end{array} \right. \quad (I-40)$$

les coefficients V_o et B sont obtenus expérimentalement, les intégrales $I^{(\ell,s)}$ sont tabulées dans [Mo-2].

b – Zone attractive

A partir des définitions précédentes de α et de $I^{(\ell,s)}$, **Brokaw** [Br-1] donne les intégrales de collision par :

$$\left\{ \begin{array}{l} \overline{\Omega}_{ij}^{(\ell,s)} = \left(\frac{\alpha}{B} \right)^2 J^{(\ell,s)} \\ J^{(\ell,s)} = \frac{16(\ell+1)}{(s+1)![2\ell+1-(-1)^\ell]} \cdot I^{(\ell,s)} \end{array} \right. \quad (I-41)$$

Dans ce cas, les deux inconnues sont V_o et B , les $J^{(\ell,s)}$ étant tabulées.

2.2.3 – Potentiel de Morse

Dans le cas d'une collision pouvant conduire à un état lié, la forme analytique du potentiel doit avoir au minimum deux termes pour représenter la zone d'attraction à grande distance et de répulsion à courte distance. Outre les potentiels de Stockmayer et de Buckingham, les plus utilisés sont les potentiels de Morse sous la forme :

$$V = D_e (1 - \exp(-\beta r + \beta r_m))^2 \quad (I-42)$$

où D_e est la profondeur du puits de potentiel et r_m la distance inter-atomique correspondant à l'équilibre (minimum du potentiel), le potentiel étant nul pour : $r_o = r_m$.

L'obtention des intégrales de collision peut se faire soit par les tables de **Samoilov et Tsitelauri** [Sa-6] appliquant un potentiel de morse corrigé de telle sorte qu'il devienne infini quand $r < 0.3r_o$, soit par celles de **Smith et Munn** [Sm-1] utilisant deux paramètres ($C = \beta r_o$ variant de 1 à 20 et $T^* = k_b T / D_e$ la température réduite variant de 0.004 à 200). Les trois inconnues à déterminer sont alors D_e , β et r_m .

2.2.4 – Potentiel de Lennard-Jones ou potentiel de Mie

Pour ce type de potentiel, les interactions sont du type dipôle-dipôle, dipôle-quadripôle, quadripôle-quadripôle et la particule neutre, qui ne porte pas de charge, n'engendre pas de champ coulombien autour d'elle. Cependant, sous l'effet d'un micro-champ ou de chocs, une réorganisation de la structure interne de l'atome ou de la molécule s'effectue. Il apparaît alors un déséquilibre entre les charges de la particule provoquant l'apparition d'un moment dipolaire ou quadripolaire propre à la particule neutre. A grandes distances, la force est une force de Van der Waals attractive contrairement aux courtes distances où la force d'interaction entre deux particules neutres est répulsive et rapidement variable.

La forme générale de ce potentiel est la suivante :

$$\left\{ \begin{array}{l} V(r) = \frac{6D_e}{n-6} \left[\left(\frac{r_m}{r} \right)^n - \frac{n}{6} \left(\frac{r_m}{r} \right)^6 \right] \\ r_o = r_m \left(\frac{n}{6} \right)^{\frac{-1}{n-6}} \end{array} \right. \quad (I-43)$$

Les intégrales de collision sont alors données par **Hirschfelder et al** [Hi-2] en fonction de $T^* = \varepsilon/k_b T$, où ε représente l'énergie maximale d'attraction. Pour les molécules non sphériques polaires obéissant au potentiel de Lennard-Jones, une valeur approchée de ε est donnée en fonction de la température d'ébullition T_b :

$$\varepsilon = 0,77 \cdot k_b \cdot T_c \quad \text{avec} \quad T_c = 3/2 \cdot T_b \quad (I-44)$$

Dans la plupart des calculs effectués, la forme la plus utilisée est le potentiel 12-6 avec $D_e = 4\varepsilon$, soit :

$$V(r) = 4\varepsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r} \right)^6 \right] \quad (I-45)$$

Pour un mélange, les paramètres ε et σ sont déterminées suivant des lois empiriques [Hi-1]:

$$\left\{ \begin{array}{l} \varepsilon_{ij} = (\varepsilon_i \cdot \varepsilon_j)^{1/2} \\ \sigma_{ij} = \frac{1}{2}(\sigma_i + \sigma_j) \end{array} \right. \quad (I-46)$$

ou $\varepsilon_{ij} \sigma_{ij}^6 = (\varepsilon_i \sigma_i^6 \cdot \varepsilon_j \sigma_j^6)^{1/2}$

Pour les intégrales de collision, nous disposons également de la formule empirique de *Neufeld* [Ne-1]:

$$\left\{ \begin{array}{l} \overline{\Omega}_{ij}^{(\ell,s)} = r_o^2 \left[\frac{A}{T^{*B}} + \frac{C}{\exp(DT^*)} + \frac{E}{\exp(FT^*)} + \frac{G}{\exp(HT^*)} + RT^{*B} \sin(ST^{*W} - P) \right] \\ T^* = \frac{k_b T}{4D_e} = \frac{k_b T}{\varepsilon} \end{array} \right. \quad (I-47)$$

où les valeurs de A à W sont tabulées en fonction de (ℓ, s) , les trois inconnues étant n , ε et σ .

2.2.5 – Potentiel de Sphères Rigides

Ce potentiel est souvent utilisé pour décrire une interaction lorsque les données sont manquantes. Cette méthode consiste à prendre un potentiel nul en dehors de la particule et infini à l'intérieur. Dans le cas présent, les intégrales de collision s'expriment simplement en fonction des rayons des constituants :

$$\overline{\Omega}_{ij}^{(\ell,s)} \text{ Sphères Rigides} = (R_i + R_j)^2 \quad (I-48)$$

$$Q_{\text{tr}}^{(\ell)} \text{ Sphères Rigides} = \left[\frac{2\ell + 1 + (-1)^\ell}{2(\ell + 1)} \right] \cdot \pi \overline{\Omega}_{ij}^{(\ell,s)} \text{ Sphères Rigides} \quad (I-49)$$

$$\Omega_{ij}^{(\ell,s)} \text{ Sphères Rigides} = \left(\frac{k_b T}{2\pi\mu_{ij}} \right)^{1/2} \cdot \frac{(s+1)!}{2} \cdot \frac{[2\ell + 1 - (-1)^\ell]}{2(\ell + 1)} \cdot \pi \overline{\Omega}_{ij}^{(\ell,s)} \text{ Sphères Rigides} \quad (I-50)$$

Pour les molécules complexes du type $A_n B_m$, le rayon se calcule à partir de la formule suivante [Hi-2] :

$$R_{A_n B_m} = (nR_A^3 + mR_B^3)^{1/3} \quad (I-51)$$

2.2.6 – Potentiel de Coulomb

Dans les études antérieures, il fut montré que l'équation de Fokker-Planck donnait approximativement les mêmes résultats que l'équation de Boltzmann avec un potentiel coulombien écranté à la longueur de Debye λ_D . Dans notre cas, nous considérons ce potentiel

pour éviter la divergence des sections efficaces de collision, le potentiel diminue si lentement que même les interactions à grande distance contribuent aux sections efficaces de collision. Avec Z_i et Z_j les nombres de charge des deux particules mises en jeu et ϵ_0 la permittivité du vide, le potentiel se met sous la forme suivante :

$$V = \pm V_0 \exp\left(-\frac{r}{\rho}\right) \quad \text{avec} \quad \begin{cases} \rho = \lambda_D \\ V_0 = \frac{Z_i Z_j e^2}{4\pi\epsilon_0 \lambda_D} = \frac{k_b T}{T^*} \end{cases} \quad (I-52)$$

Nous trouvons dans la littérature les intégrales de collision de **Cohen et al** [Co-1] et **Spitzer et Harm** [Sp-2] obtenues pour un gaz totalement ionisé et calculées en résolvant une équation de Fokker-Planck ne contenant pas de collisions binaires telles que $\Omega_{ij}^{(\ell,s)} = \alpha \ln(2\lambda_D/b_0)$. S'ajoutent à celles-ci les données de **Mason-Muum-Smith** [Ma-7][Mu-2][Sm-2] adoptant un potentiel coulombien écranté à la longueur d'onde Debye λ_D calculée en négligeant l'écrantage des ions tel que $\lambda_D = (k_b T / 4\pi n_e e^2)^{1/2}$, les intégrales de collision en accord avec les résultats de **Liboff** [Li-3] et **Kihara et al** [Ki-1] s'écrivent sous la forme asymptotique $\Omega_{ij}^{*(\ell,s)} = A \ln(BT)/T^2$.

Malgré ces relations, les sources généralement exploitées sont celles issues des données de **Preuss** [Pr-1] et de **Liboff** [Li-3], ce dernier ne différenciant pas les potentiels attractifs des potentiels répulsifs :

$$\begin{cases} \overline{\Omega}_{ij}^{(1,s)} = \frac{4b_0^2 \left(\ln(\Lambda) - \frac{1}{2} - 2\bar{\gamma} + \Psi(s) \right)}{s(s+1)} \\ \overline{\Omega}_{ij}^{(2,s)} = \frac{12b_0^2 \left(\ln(\Lambda) - 1 - 2\bar{\gamma} + \Psi(s) \right)}{s(s+1)} \end{cases} \quad \text{avec} \quad \begin{cases} \Lambda = \frac{2\lambda_D}{b_0} \\ b_0 = \frac{Z_i \cdot Z_j \cdot e^2}{2k_b T} \\ \Psi(s) \approx \sum_{n=1}^{s-1} \frac{1}{n} \quad \text{et} \quad \Psi(1) = 0 \\ \bar{\gamma} = 0,5772 \quad \text{c}^{\text{ste}} \quad \text{d' Euler} \end{cases} \quad (I-53)$$

$$\Omega_{ij}^{(1,s)} = \pi \overline{\Omega}_{ij}^{(1,s)} \left(\frac{k_b T}{2\pi\mu_{ij}} \right)^{1/2} \quad \text{et} \quad \overline{\Omega}_{ij}^{(2,s)} = 3\overline{\Omega}_{ij}^{(1,s)} - \frac{6b_0^2}{s(s+1)} \quad (I-54)$$

2.2.7 – Autres potentiels

Les potentiels cités ci-dessus sont les potentiels les plus souvent rencontrés pour calculer les intégrales de collision. Cependant, après modification ou amélioration de ces derniers, il existe en réalité une multitude de potentiels dont il est parfois difficile de connaître les intégrales de collision (**Aubreton** et **Fauchais** ont établi un récapitulatif de plusieurs

potentiels complexes dans un de leurs articles [Au-1] où les formes analytiques ne permettent pas un calcul direct des intégrales de collision). Nous donnons ici quelques uns des potentiels les plus connus, dont les intégrales de collision sont soit tabulées soit possibles à calculer.

- Dans les potentiels simples admettant des tables d'intégrales, nous trouvons le potentiel de **Buckingham** [Hi-2] approximant la contribution répulsive par un terme exponentiel :

$$V(r) = \frac{D_e}{\alpha - 6} \cdot \left[6 \cdot \exp\left(\alpha - \frac{\alpha r}{r_m}\right) - \alpha \left(\frac{r_m}{r}\right)^6 \right] \quad (I-55)$$

Dans son article, **Mason** [Ma-2] donne une grandeur $Z^{(\ell,s)}$ permettant de calculer les intégrales de collision $\bar{\Omega}_{ij}^{(\ell,s)}$ à l'aide de la relation suivante (α étant le paramètre de forme de la partie répulsive):

$$\bar{\Omega}_{ij}^{(\ell,s)} = r_m^2 \cdot [T^* (1 - 6/\alpha)^{-1/3} \cdot Z^{(\ell,s)}] \quad (I-56)$$

- Le potentiel de Stockmayer qui fait intervenir dans son expression celle de Lennard-Jones et malheureusement peu « maniable ». Les intégrales de collision sont fournies par **Monchick** [Mo-3] pour une température réduite $T^* = k_b T / D_e$ variant de 0 à 100. Ce potentiel n'est valable que dans le cas de collision entre molécules polaires.

$$V(r) = 4D_e \cdot \left[\left(\frac{r_o}{r}\right)^{12} - \left(\frac{r_o}{r}\right)^6 + \delta \left(\frac{r_o}{r}\right)^3 \right] \quad (I-57)$$

avec $\delta = \frac{\mu_{d1}\mu_{d2}}{4D_e r_o^3} (\sin \vartheta_1 \cdot \sin \vartheta_2 \cos \phi - 2 \cos \vartheta_1 \cos \vartheta_2)$ variant de -2,5 à 2,5 dans les tables de

Monchick [Mo-3], μ_{d1} et μ_{d2} étant les moments dipolaires des deux molécules en collision, θ_1 et θ_2 les angles d'inclinaison que font les axes des deux dipôles avec la droite joignant les centres des molécules, ϕ l'angle azimutal entre les deux dipôles. Lorsque les deux moments dipolaires tendent vers zéro, $V(r)$ se réduit au potentiel de Lennard-Jones, les intégrales de collision étant alors connues.

2.3 – Type d'interaction et intégrales de collision

Les potentiels permettent de décrire différents types d'interactions pouvant intervenir entre molécules, atomes, ions ou électrons. Dans ce paragraphe, nous effectuons une synthèse des principales interactions intervenant dans les plasmas.

2.3.1 – Les interactions neutre-neutre

Ce type d'interaction regroupe les collisions entre atomes, entre atomes et molécules et entre molécules de même ou de différentes espèces. Ces collisions entre espèces neutres peuvent être définies par un très grand nombre de formes analytiques de potentiels (forme à un seul ou plusieurs termes : puissance, exponentielle, Morse, Stockmayer, Buckingham, ...).

2.3.2 – Les interactions électron-neutre

Les intégrales de collision effectives pour les interactions électron-neutre sont calculées par intégration de l'équation (I-30). En supposant une diffusion isotrope, la section efficace de collision différentielle $\sigma_{\text{diff}}(\chi, \varepsilon_r)$ est indépendante de l'angle de déviation χ et la section efficace de transport $Q_{ij}^{(\ell)}$ est définie par :

$$\begin{cases} Q_{ij}^{(1)}(\varepsilon_r) = 4\pi\sigma_{ij}^{\text{diff}}(\varepsilon_r) \\ Q_{ij}^{(2)}(\varepsilon_r) = \frac{2}{3}Q_{ij}^{(1)}(\varepsilon_r) \end{cases} \Rightarrow \overline{\Omega}_{ij}^{(1,s)} = \overline{\Omega}_{ij}^{(2,s)} \quad (I-58)$$

L'intégration numérique est effectuée par la méthode de Gauss-Laguerre dont l'équation est la suivante $\int_0^{\infty} e^{-x} \cdot f(x) \cdot dx = \sum_{i=1}^n W_i \cdot f(X_i)$, avec X_i les zéros du polynôme de Laguerre et W_i les facteurs poids tabulés par *Salzer et Zucker* [Sa-5] suivant l'ordre d'approximation n . Il suffit donc de connaître la section efficace de transfert de quantité de mouvement ($\ell=1$) pour déterminer les intégrales de collisions correspondantes à ce type d'interaction.

2.3.3 – Les interaction ion-neutre

Nous considérons ici deux types de processus : les collisions purement élastiques et le transfert de charge. Les intégrales de type viscosité ($\ell=2$) s'obtiennent comme dans le cas des interactions purement élastiques. En revanche, pour les intégrales de collision de type diffusion ($\ell=1$), lors d'un transfert de charge, il est nécessaire de connaître la section efficace de transfert de charge. Notons toutefois que les deux phénomènes peuvent intervenir simultanément. En effet, si l'on considère une réaction $A^+ + A \rightarrow A + A^+$, l'état final laisse supposer une collision élastique. En réalité, le transfert de charge est également possible. Lors du calcul impliquant toutes les collisions élastiques, nous devons donc prendre en compte le processus de transfert de charge dont le rôle est essentiel dans le plasma, la section efficace de transfert de charge étant plus importante que la section efficace élastique.

a – Les collisions élastiques

Dans la littérature, nous retrouvons souvent les expressions du potentiel puissance et du potentiel de polarisation, la particule neutre se retrouvant polarisée par le champ coulombien

issu de l'ion. Dans le cas d'un potentiel de polarisation de type Maxwell et pour des coefficients $A_{(s)}^{(\ell)}$ calculés par **Kihara et al** [Ki-1], la section efficace de transfert se met sous la forme :

$$Q_{tr}^{(\ell)} = \left(\frac{2\pi e^2 \xi}{\varepsilon \cdot \varepsilon_0} \right)^{1/2} A_{(4)}^{(\ell)} \quad \text{avec} \quad A_{(s)}^{(\ell)} = \int_0^\infty [1 - \cos^\ell \chi] \cdot y_0 \cdot dy_0 \quad (I-59)$$

$$A_{(4)}^{(1)} = 0,6547 \quad \text{et} \quad A_{(4)}^{(2)} = 0,3852 \quad \text{et} \quad A_{(4)}^{(3)} = 0,7166 \quad (I-60)$$

avec ξ la polarisabilité de l'espèce neutre considérée.

Les intégrales de collision sont alors obtenues par la relation suivante [Ki-1][Ta-1]:

$$\bar{\Omega}_{ij}^{(\ell,s)} = \left(\frac{z^2 e^2 \xi}{2\pi \varepsilon_0 k_b T} \right)^{1/2} \cdot \left[\frac{\Gamma(s+3/2)}{(s+1)!} \cdot \frac{A_{(4)}^{(\ell)}}{[2\ell+1 - (-1)^\ell]} \right] \quad (I-61)$$

b – Le transfert de charge

Pour le transfert de charge, les collisions de type $A-A^+$, durant lesquelles s'effectue un transfert de charge de l'ion vers l'atome ou la molécule, ont des sections efficaces beaucoup plus élevées que celles d'une collision élastique. Le transfert de charge revient à dévier la particule (ici l'ion) de $(\pi-\chi)$ avec χ l'angle de déviation de l'ion dans une collision élastique. Dans ce cas, la section efficace de transport peut s'écrire [Ma-3]:

$$Q_{tr}^{(n)} = 2\pi \cdot \left[\int_0^\infty (1 - P_{ex}) (1 - \cos^n \chi) \cdot \sin \chi \cdot d\chi + \int_0^\infty P_{ex} (1 - \cos^n (\pi - \chi)) \cdot \sin \chi \cdot d\chi \right] \quad (I-62)$$

P_{ex} est la probabilité d'échange de charge [Ny-1] et n l'indice de la $n^{\text{ième}}$ courbe de potentiel. Cette section efficace est composée de deux termes, le premier représentant la section efficace de collision élastique, le second représentant la section efficace de transport de charge. En effet, si n est pair, les termes contenant P_{ex} disparaissent et la collision devient parfaitement élastique. Dans le cas où n est impair, l'échange de charge s'effectue, la section efficace de transfert étant donnée par **Mason** [Ma-3].

Avec g la vitesse relative des espèces en collision, n la $n^{\text{ième}}$ courbe de potentiel, nous pouvons écrire selon **Dalgarno** [Da-1] la section efficace de transport sous la forme :

$$Q_{tr}^{(n)} = \frac{1}{2} (A_n - B_n \ln(g))^2 \quad (I-63)$$

A_n et B_n étant des coefficients exprimés en Å et obtenus expérimentalement ou théoriquement [Ny-1]. Avec R la constante des gaz parfaits ($R=8,31448J.K^{-1}.mol^{-1}$), $\bar{\gamma}$ la constante d'Euler ($\bar{\gamma}=0,577216$) et M la masse molaire, l'expression des intégrales de collision est alors donnée par **Devoto** [De-5,6] :

$$\left\{ \begin{array}{l} \overline{\Omega}_n^{(\ell,s)} = \frac{1}{\pi} \left\{ A_n^2 - A_n B_n x - \left(\frac{B_n x}{2} \right)^2 + \frac{B_n \xi}{2} (B_n x - 2A_n) + \frac{B_n^2}{4} \left(\frac{\pi^2}{6} - \sum_{n=1}^{s+1} \frac{1}{n^2} + \xi^2 \right) + \right. \\ \left. \frac{B_n}{2} [B_n (x + \xi) - 2A_n] \ln \left(\frac{T}{M} \right) + \left(\frac{B_n}{2} \ln \left(\frac{T}{M} \right) \right)^2 \right\} \\ x = \ln(4R) \\ \xi = \sum_{n=1}^{s+1} \frac{1}{n} - \bar{\gamma} \end{array} \right. \quad (I-64)$$

Les coefficients A_n et B_n étant nos inconnues, leur détermination s'effectue par la différence de potentiel pair-impair (g-u) pour chaque couple de potentiel que traitent différemment **Dalgarno** [Da-1], **Bates** [Ba-3], **Aubreton** [Au-1] et **Mexmain** [Me-1]. Pour ce type de réaction, nous avons choisi les données de **Aubreton** [Au-1] comme indiqué au *chapitre V*.

2.3.4 – Les interactions chargé-chargé

Les interactions entre particules chargées sont décrites par un potentiel de Coulomb écranté à la longueur de Debye dont les tables d'intégrales de collision en fonction de la température réduite sont données par **Mason** [Ma-7] et **Devoto** [De-4,6].

COMPOSITION

ET

PROPRIETES THERMODYNAMIQUES

I – GENERALITES

Les plasmas d'arc sont souvent décrits dans le cadre de l'équilibre thermodynamique local (*ETL*), hypothèse qui permet de simplifier très nettement les calculs et de déterminer plus simplement des grandeurs macroscopiques comme les densités de particules. Sa prise en compte nécessite uniquement la connaissance de deux paramètres thermodynamiques que sont la température et la pression. Nous consacrons donc la première partie de ce chapitre aux rappels des caractéristiques des milieux supposés en Equilibre Thermodynamique Complet (*ETC*) ou en Equilibre Thermodynamique Local (*ETL*). Puis nous abordons brièvement le calcul de la composition d'un plasma Ar/H₂/Cu à la pression atmosphérique. A partir des densités de particules et des fonctions de partition, nous définissons quelques grandeurs thermodynamiques dont certaines sont indispensables au calcul des coefficients de transport. Enfin, nous discuterons dans une dernière partie les différents résultats obtenus pour les divers mélanges étudiés.

1.1 – Equilibre Thermodynamique Complet (ETC)

Dans le cas d'un plasma ayant un gradient de température nul, une seule température caractérise le milieu. Les différentes espèces de particules ont alors la même énergie cinétique moyenne dépendant de la température T . S'ajoute à cette condition un équilibre entre les phénomènes de création et de disparition comme l'ionisation et la recombinaison, l'excitation et la désexcitation ou l'émission et l'absorption de photons. Pour exemple, par unité de temps, le nombre de transitions radiatives de l'état d'énergie E_2 vers l'état d'énergie E_1 est égal au nombre de transitions de l'état d'énergie E_1 vers l'état d'énergie E_2 par absorption du rayonnement. Il doit en être de même pour les transitions dues à des chocs électroniques ou atomiques. Le rayonnement émis est donc entièrement réabsorbé par le plasma. La distribution du rayonnement est alors régie par la loi de Planck et la distribution des atomes sur leurs niveaux d'excitation ou d'ionisation par les lois de Boltzmann et Saha.

En conclusion, quand chaque processus microscopique est exactement contrebalancé par son processus inverse, les termes de micro-réversibilité des processus élémentaires et d'Equilibre Thermodynamique Complet noté *ETC* sont employés pour caractériser le plasma.

Les lois qui en régissent le fonctionnement sont les suivantes :

- la loi de Maxwell donnant la distribution des vitesses des particules
- la loi de Boltzmann donnant la distribution de population des états excités
- la loi de Saha liant les espèces chargées aux espèces neutres et donnant le degré d'ionisation
- la loi de Planck donnant la distribution spectrale du rayonnement par la relation (I-14)

1.2 – Equilibre Thermodynamique Local (ETL)

Dans la réalité, les conditions précédentes ne sont jamais réalisées dans le cas des plasmas d'arc. Nous savons qu'il existe au sein du plasma des gradients de températures non nuls, la température étant plus élevée sur l'axe. Des résultats montrent également que le rayonnement émis n'est pas complètement réabsorbé et qu'un équilibre du rayonnement ne peut exister que

pour un plasma optiquement épais sur toutes les longueurs d'onde étudiées, condition très rarement observée. En effet, celui-ci se comporte le plus souvent comme un plasma optiquement mince aux ailes des profils des raies mais optiquement épais au voisinage immédiat des raies caractéristiques de sorte que chaque élément de volume du plasma émet et absorbe à la fois le rayonnement. Il ne peut donc y avoir micro-réversibilité des processus dus au rayonnement dans la mesure où cet équilibre fait intervenir des échanges à longue distance dans un milieu à température non uniforme. Par conséquent, la distribution spectrale du rayonnement ne suit plus la loi de Planck.

L'hypothèse de l'Equilibre Thermodynamique Complet n'est donc plus valable pour ce type de plasma. Pourtant, si les densités électroniques sont supérieures à 10^{22}m^{-3} pour des températures au dessus de 9000 K, les travaux de **Griem** [Gr-4][Gr-5] nous indiquent que les phénomènes collisionnels électroniques sont prépondérants devant les phénomènes radiatifs, qu'il y a micro-réversibilité des processus collisionnels et que certaines lois sont toujours valables :

- la loi de Maxwell (fonction de distribution des vitesses)
- la loi de Saha (distribution des atomes et degré d'ionisation)
- la loi de Guldberg-Waage (dissociation)

Dans ce cas, nous pouvons supposer que l'Equilibre Thermodynamique est établi localement en chaque point du milieu. Le plasma est alors considéré à l'Equilibre Thermodynamique Local ou **ETL**. En conclusion, lorsque l'équilibre du plasma est entièrement déterminé par les collisions électroniques, le principe de l'**ETL** permet d'obtenir la composition du plasma en utilisant ces lois avec pour température unique T et pour énergie rayonnée celle régie par la loi de Kirchhoff.

II – FONCTIONS DE PARTITION

La détermination des densités, l'étude des propriétés thermodynamiques et des propriétés de transport nécessitent la connaissance des fonctions de partition. Dans les calculs, celles-ci peuvent intervenir directement ou sous forme de dérivées première ou seconde. Par conséquent, le calcul de ces dernières doit se faire de façon minutieuse. Ces fonctions de partition s'obtiennent de différentes façons suivant la nature de l'espèce (atomique ou moléculaire).

2.1 – Généralités

Supposons un ensemble de N_j particules (de type j) identiques en interaction faible contenues dans un volume V constant. Réparties entre les niveaux (i) d'énergie totale $E_{i,j}^{\text{tot}}$ et de dégénérescence $g_{i,j}^{\text{tot}}$, ces particules ont pour énergie interne U (en J) :

$$U = \sum_i N_j E_{i,j}^{\text{tot}}$$

Ce nombre N_j de particules occupant un niveau (i) d'énergie totale $E_{i,j}^{\text{tot}}$ s'écrit suivant la distribution de Maxwell-Boltzmann :

$$N_j(T) = \frac{N}{Q_j^{\text{tot}}(T)} \cdot g_{i,j}^{\text{tot}} \cdot \exp\left(-\frac{E_{i,j}^{\text{tot}}}{k_b T}\right) \quad (II-2)$$

où N est le nombre total de particules et Q_j^{tot} la fonction de partition totale de l'espèce j (grandeur sans dimension) de l'espèce j à la température T , définie par la relation suivante :

$$Q_j^{\text{tot}}(T) = \sum_i g_{i,j}^{\text{tot}} \cdot \exp\left(-\frac{E_{i,j}^{\text{tot}}}{k_b T}\right) \quad (II-3)$$

Si l'on suppose que l'énergie totale $E_{i,j}^{\text{tot}}$ d'une espèce j peut se décomposer en plusieurs énergies, celle-ci peut s'exprimer comme la somme de son énergie de translation $E_{i,j}^{\text{tr}}$ et de son énergie interne $E_{i,j}^{\text{int}}$. L'énergie interne de chaque espèce dépend de ses différents mouvements possibles (rotation, vibration) et de ses principaux constituants (électrons, nucléons). Dans l'hypothèse d'un rotateur rigide, ces mouvements sont considérés comme indépendants les uns des autres permettant la décomposition de cette énergie interne en la somme de trois autres énergies que sont l'énergie nucléaire $E_{i,j}^{\text{nucl}}$, l'énergie électronique $E_{i,j}^{\text{elec}}$ et l'énergie de rotation-vibration $E_{i,j}^{\text{rot-vib}}$. Nous pouvons donc écrire l'énergie totale et l'énergie interne comme indiqué dans le tableau suivant.

	Energie Totale d'un niveau (n)	Energie Interne d'un niveau (n)
Expression	$E_{i,j}^{\text{tot}} = E_{i,j}^{\text{tr}} + E_{i,j}^{\text{int}} \quad (II-4)$	$E_{i,j}^{\text{int}} = E_{i,j}^{\text{nucl}} + E_{i,j}^{\text{elec}} + E_{i,j}^{\text{rot-vib}}$
Dégénérescence du niveau (i)	$g_{i,j}^{\text{tot}} = g_{i,j}^{\text{tr}} \cdot g_{i,j}^{\text{int}}$	$g_{i,j}^{\text{int}} = g_{i,j}^{\text{nuc}} \cdot g_{i,j}^{\text{elec}} \cdot g_{i,j}^{\text{rot}} \cdot g_{i,j}^{\text{vib}}$

2.2 – Fonction de partition totale

En utilisant la relation (II-4) dans l'expression (II-3), la fonction de partition totale d'une espèce j peut s'écrire sous la forme :

$$Q_j^{\text{tot}}(T) = Q_j^{\text{tr}}(T) \cdot Q_j^{\text{int}}(T)$$

avec $Q_j^{\text{tr}}(T)$ la fonction de partition de translation et $Q_j^{\text{int}}(T)$ la fonction de partition interne définies par les expressions suivantes :

$$Q_j^{\text{int}}(T) = \sum_i g_{i,j}^{\text{int}} \cdot \exp\left(-\frac{E_{i,j}^{\text{int}}}{k_b T}\right) \quad \text{et} \quad Q_j^{\text{tr}}(T) = \sum_i g_{i,j}^{\text{tr}} \cdot \exp\left(-\frac{E_{i,j}^{\text{tr}}}{k_b T}\right)$$

2.3 – Fonction de partition de translation

Selon les travaux de Boltzmann, si une particule j de masse m_j est enfermée dans un puits de potentiel à trois dimensions de volume V , et N le nombre total de particules dans celui-ci, nous avons :

$$\left(\frac{2\pi m_j k_b T}{h^2} \right)^{3/2} \cdot \frac{V}{N} \gg 1$$

avec m_j la masse de l'espèce j en kg et V le volume en m^3 .

Dans ce cas, la fonction de partition de translation (sans dimension) s'écrit sous la forme suivante :

$$Q_j^{\text{tr}}(T) = V \cdot \left(\frac{2\pi m_j k_b T}{h^2} \right)^{3/2} = N \cdot \left(\frac{k_b T}{P} \right) \cdot \left(\frac{2\pi m_j k_b T}{h^2} \right)^{3/2} \quad (II-5)$$

où P est la pression en Pascal, soit pour la pression atmosphérique :

$$Q_j^{\text{tr}}(T) = \begin{cases} (3,8314E + 38) \cdot m_j^{3/2} \cdot T^{5/2} & \text{avec } m_j \text{ en kg} \\ (5,6621E + 78) \cdot M_j^{3/2} \cdot T^{5/2} & \text{avec } M_j \text{ en unité de masse atomique} \end{cases}$$

2.4 – Fonction de partition interne

Dans le milieu, les éléments sont libres d'interagir entre eux selon leurs propriétés intrinsèques (masse atomique, charge électrique). Chacun de ces éléments possède des paramètres internes (énergie interne, variable de spin) pouvant prendre différentes valeurs. Ils peuvent également être disposés et orientés dans l'espace selon de nombreuses configurations et sont sujets aux associations suite à l'action des forces (liaisons nucléaires et moléculaires). Dans les plasmas froids, les états nucléaires excités ne sont pas peuplés et la fonction de partition correspondante se réduit à la dégénérescence de l'état fondamental. En effet, l'énergie d'excitation des nucléons implique des températures supérieures à 10^{10} K nettement plus grandes que les nôtres. Les fonctions de partition correspondantes sont donc considérées égales à 1. Par conséquent, la fonction de partition interne se réduit au produit des fonctions de partition électroniques et de rotation-vibration :

$$Q_j^{\text{int}}(T) = Q_j^{\text{elec}}(T) \cdot Q_j^{\text{rot-vib}}(T)$$

2.4.1 – Cas monoatomique

Les espèces monoatomiques n'ont pas de degré de liberté de vibration et leur énergie de rotation est négligeable. Leurs fonctions de partition interne se réduisent donc aux fonctions de partition électroniques établissant un lien entre les coordonnées du système microscopique

et les propriétés macroscopiques thermodynamiques. Pour une espèce j , le calcul se fait par sommation de tous les niveaux électroniques (i) d'énergie connues $E_{i,j}^{\text{elec}}$ (en Joules) en appliquant la relation :

$$Q_j^{\text{int}} = \sum_i g_{i,j}^{\text{elec}} \exp\left(-\frac{E_{i,j}^{\text{elec}}}{k_b T}\right) \quad (\text{II-6})$$

avec $g_{i,j}^{\text{elec}}$ la dégénérescence du niveau électronique (i) donnée par $2J+1$ où J est le moment angulaire du niveau spectral considéré.

Pour des électrons libres, cette série peut diverger quand $i \rightarrow \infty$. Cependant, le rayon de l'orbite lié à l'état quantique i ($r_i = i^2 a_0$) diverge également. Par conséquent, nous pouvons supposer qu'en présence de particules et de parois, cette limite converge. Notons également que la somme converge pour des niveaux inférieurs au niveau d'ionisation. Dans ce cas, l'introduction de l'abaissement du potentiel d'ionisation traité dans ce chapitre permet de limiter cette divergence en diminuant l'énergie du niveau d'ionisation, limitant donc le nombre de niveaux possibles de l'atome et par conséquent le nombre total de niveaux à prendre en compte pour le calcul.

Si l'on tient compte de l'abaissement du potentiel d'ionisation ΔE_{z_j} pour une espèce j (de charge z_j), la sommation s'effectue sur toutes les énergies électroniques $E_{i,j}$ inférieures à l'énergie d'ionisation $E_{\text{ion},j}$ réduite de l'abaissement de potentiel d'ionisation et satisfaisant la condition de **Griem** $E_{i,j} \leq E_{\text{ion},j} - \Delta E_{z_j}$ [Gr-3].

2.4.2 – Cas diatomique

Dans le cas de molécules diatomiques, $Q_j^{\text{elec}}(T)$ se calcule comme pour les espèces atomiques, ce qui donne une plus grande importance au terme de Rotation-Vibration. Dans la littérature, plusieurs méthodes permettent de calculer ce dernier [Ba-5]. Nous avons opté pour la méthode de minimisation du potentiel de Morse qui permet de calculer la fonction de partition interne d'une espèce j par la relation suivante [Ba-1] :

$$Q_j^{\text{int}}(T) = \sum_i^{\text{i max}} g_{i,j}^{\text{elec}} \exp\left(-\frac{T_e(i)}{k_b T}\right) \cdot \left[\sum_v^{\text{v max}} g_{v,j}^{\text{vib}} \exp\left(-\frac{G(v)}{k_b T}\right) \cdot \sum_j^{\text{J max}} g_{J,j}^{\text{rot}} \exp\left(-\frac{F_v(J)}{k_b T}\right) \right] \quad (\text{II-7})$$

avec

$$Q_j^{\text{elec}}(T) \left\{ \begin{array}{l} \text{la fonction de partition électronique } Q_j^{\text{elec}}(T) = \sum_i^{\text{i max}} g_{i,j}^{\text{elec}} \exp\left(-\frac{T_e(i)}{k_b T}\right) \\ g_{i,j}^{\text{elec}} \text{ le poids statistique électronique } g_{i,j}^{\text{elec}} = (2 - \delta_{0,\Lambda}) \cdot (2S + 1) \\ T_e(i) \text{ énergie électronique réduite d'un niveau } T_e(i) = T_o(i) - \frac{\omega_e(i)}{2} + \frac{\omega_e x_e(i)}{4} \end{array} \right.$$

$g_{i,j}^{\text{elec}}$ regroupe la dégénérescence angulaire $(2 - \delta_{0,\Lambda})$ et la dégénérescence de spin $(2S+1)$ de l'état électronique (n). Le symbole δ de Kronecker est tel que $\Lambda=0$ pour un état Σ et $\Lambda \neq 0$ pour les autres états (Π, Δ, \dots). Le symbole S représente le nombre quantique de spin. Nous avons également considéré la différence d'énergie entre le niveau fondamental et le premier niveau de vibration dans l'expression de $T_e(i)$. En effet, l'énergie du niveau fondamental ($J=0, v=0$) doit être nulle. Or à l'état fondamental, l'énergie électronique n'est pas nulle et vaut par conséquent $T_0 = -G(v=0)$. Si nous prenons le niveau fondamental comme référence pour les calculs, il nous faut donc établir une translation de $-G(v=0)$ sur toutes les énergies électroniques. Certains auteurs comme **Herzberg** [He-1] suggèrent d'effectuer sur les niveaux électroniques une translation égale à $-G(T_e, v=0)$ et variant suivant le niveau considéré.

$$Q_j^{\text{vib}}(T) \left\{ \begin{array}{l} \text{la fonction de partition de vibration } Q_j^{\text{vib}}(T) = \sum_v^{\text{vmax}} g_{v,j}^{\text{vib}} \exp\left(-\frac{G(v)}{k_b T}\right) \\ g_{v,j}^{\text{vib}} \text{ le poids statistique de vibration } g_{v,j}^{\text{vib}} = 1 \text{ (niveaux non dégénérés)} \\ G(v) \text{ énergie d'un sous niveau de vibration } G(v) = (v + \frac{1}{2}) \cdot \omega_e(i) - (v + \frac{1}{2})^2 \cdot \omega_e x_e(i) + \dots \end{array} \right.$$

et pour le terme de rotation

$$Q_j^{\text{rot}}(T) \left\{ \begin{array}{l} \text{la fonction de partition de rotation } Q_j^{\text{rot}}(T) = \sum_j^{\text{Jmax}} g_{j,j}^{\text{rot}} \exp\left(-\frac{F_v(J)}{k_b T}\right) \\ g_{j,j}^{\text{rot}} \text{ le poids statistique de rotation corrigé du spin nucléaire } g_{j,j}^{\text{rot}} = \frac{(2J+1)}{\sigma} \\ F_v(J) \text{ énergie de rotation d'un sous niveau } F_v(J) = J \cdot (J+1) B_v - J^2 \cdot (J+1)^2 D_v + \dots \end{array} \right.$$

où σ est assimilé au nombre de symétrie tel que $\sigma=1$ pour les molécules hétéronucléaires et $\sigma=2$ pour les molécules homonucléaires. Quant aux facteurs B_v et D_v , ces derniers représentent respectivement l'énergie d'un rotateur rigide et les termes correctifs tenant compte de l'effet de dilatation causé par les forces centrifuges.

Pour le calcul de ces trois fonctions de partition, les énergies électroniques des niveaux (n) $T_e(n)$ et du niveau fondamental T_0 , les énergies de vibration $G(v)$ et de rotation $F_v(J)$ et la fréquence de vibration d'un oscillateur harmonique ω_e sont exprimées en cm^{-1} . La constante de Boltzmann k_b est cette fois-ci en $\text{cm}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$. Les autres termes $\alpha_e, \beta_e, \omega_e, \omega_e x_e, \omega_e y_e, B_e, D_e$ et R_e sont des constantes moléculaires exprimées en cm^{-1} exceptée R_e en cm . Le problème le plus délicat reste la limitation des nombres quantiques de vibration et de rotation. Le nombre limite de vibration v_{max} correspond au dernier niveau v dont l'énergie est inférieure à l'énergie de dissociation $D_0(i)$ de l'état électronique (i). Le nombre quantique limite de rotation J_{max} correspond au dernier niveau de rotation stable de l'état électro-vibrationnel (T_e, v). Le calcul proprement dit consiste à vérifier qu'il existe une valeur de la distance internucléaire pour laquelle l'équation du potentiel admet une valeur minimale. Il suffit donc de rechercher la valeur pour laquelle la dérivée du potentiel de Morse s'annule et ceci pour chaque niveau électro-vibrationnel (T_e, v) [Ba-1]. Les données (constantes moléculaires,

niveaux d'énergie, énergies, masses, ...) sont issues des tables de la littérature. Notons toutefois que certains auteurs n'infligent aucune limite pour le nombre d'états quantiques de Rotation-Vibration [Mb-1] ce qui revient à sommer uniquement sur les états. D'autres déterminent les couples (v,j) compatibles, le seul problème étant un temps de calcul plus long [St-2].

A partir des formules de **Pekeris** et **Dunhan, Herzberg** [He-1] et **Rosen** [Ro-1] donnent les expressions des termes intervenant dans les relations précédentes :

$B_e = \frac{h}{8\pi^2 c \mu r_e^2}$	$D_e = \frac{4B_e^3}{\omega_e^2}$	$B_v = B_e - \alpha_e(v + \frac{1}{2})$	$D_v = D_e + \beta_e(v + \frac{1}{2})$
$\alpha_e = 6 \frac{\sqrt{\omega_e x_e B_e^3}}{\omega_e} - \frac{6B_e^2}{\omega_e}$		$\beta_e = D_e \left[\frac{8\omega_e x_e}{\omega_e} - \frac{5\alpha_e}{B_e} - \frac{\alpha_e^2 \omega_e}{24B_e^3} \right]$	

2.5 – Fonction de partition interne de l'électron

La fonction de partition de l'électron correspond à la dégénérescence de spin (2S+1) d'un électron soit $Q_e^{\text{int}}(T) = 2$.

III – CALCUL DE LA COMPOSITION

La composition du plasma est une donnée fondamentale pour le calcul des propriétés radiatives et de transport. Par conséquent, il est important de bien choisir les espèces atomiques, ioniques et moléculaires susceptibles d'influencer le comportement du plasma. Le critère d'un tel choix est la température du plasma.

3.1 – Choix des espèces

Pour déterminer la densité propre à une espèce ainsi que sa fonction de partition, nous avons besoin de connaître les énergies d'ionisation (E_i), la valeur de l'affinité électronique (E_a) et certaines constantes physiques en supposant une pression égale à la pression atmosphérique. Pour un plasma composé d'argon, d'hydrogène et de cuivre et des températures comprises entre 300K et 25000K, les espèces (et leurs propriétés) prises en compte sont les suivantes :

Tableau II-1 : Propriétés des espèces choisies

N° espèce	Nom Espèce	Réactions	Energie Réaction (eV)	Masse atomique (en uma)	Rayon de l'espèce (Å) \mathcal{S}
1	Ar		0.00000	39.948	1.56
2	H		0.00000	1.0079	1.0
3	Cu		0.00000	63.546	1.4
4	e ⁻		0.00000	5.486E-04	2.818E-05
5	Ar ⁺	Ar \Leftrightarrow Ar ⁺ + e ⁻	15.75500	39.94745	1.56
6	Ar ⁺⁺	Ar ⁺ \Leftrightarrow Ar ⁺⁺ + e ⁻	27.62000	39.94690	1.56
7	Ar ⁺⁺⁺	Ar ⁺⁺ \Leftrightarrow Ar ⁺⁺⁺ + e ⁻	40.90000	39.94655	1.56
8	Cu ⁺	Cu \Leftrightarrow Cu ⁺ + e ⁻	7.72400	63.54545	1.4
9	Cu ⁺⁺	Cu ⁺ \Leftrightarrow Cu ⁺⁺ + e ⁻	20.29000	63.54480	1.4
10	Cu ⁺⁺⁺	Cu ⁺⁺ \Leftrightarrow Cu ⁺⁺⁺ + e ⁻	36.83000	63.54425	1.4
11	Cu ₂	Cu ₂ \Leftrightarrow Cu + Cu	1.97000	127.092	1.764
12	Cu ⁻	Cu ⁻ \Leftrightarrow Cu + e ⁻	1.22800	63.54655	1.4
13	H ⁺	H \Leftrightarrow H ⁺ + e ⁻	13.59500	1.00739	1.0
14	H ⁻	H ⁻ \Leftrightarrow H + e ⁻	0.75420	1.00849	1.0
15	H ₂	H ₂ \Leftrightarrow H + H	4.47810	2.01588	1.0
16	H ₂ ⁺	H ₂ \Leftrightarrow H ₂ ⁺ + e ⁻ H ₂ ⁺ \Leftrightarrow H + H ⁺	15.42600 * 2.65080	2.01525	1.0
17	H ₂ ⁻	H ₂ ⁻ \Leftrightarrow H + H ⁻ H ₂ ⁻ \Leftrightarrow H ₂ + e ⁻	1.22300 2.50000 *	2.01635	1.0

où * désigne la réaction choisie et ♣ les références [Ha-2] et [Hi-2].

3.2 – Méthode de calcul

Comme nous l'avons dit précédemment, le choix des espèces se fait suivant la température du plasma. Dans notre cas, nous avons considéré une gamme de températures comprises entre 300K et 25000K que nous avons découpée en deux parties, l'une principalement constituée des espèces moléculaires et neutres allant de 300K à 1000K, l'autre tenant compte de la présence des ions pour les températures restantes. Les calculs sont effectués pour un milieu en équilibre thermodynamique local (ETL) et des composés uniquement à l'état gazeux. L'association des lois de l'équilibre (*tableau II-2*) est donc suffisante pour déterminer la composition d'un plasma gazeux. Les variables à fixer sont la température, la pression et les proportions du mélange.

Températures comprises entre 300K et 1000K

A partir du *tableau II-1* identifiant chaque espèce par un numéro, notons p_1 , p_2 et p_3 les proportions totales d'argon, d'hydrogène et de cuivre (proportions en volume). Etudiant le milieu pour des températures très basses (inférieures à 1000K), seules les espèces neutres et moléculaires Ar, H, Cu, H₂ et Cu₂ sont supposées constituer le plasma. Le système d'équations s'écrit alors de la façon suivante :

$$\left. \begin{array}{l} \frac{n_{H_2} + \frac{1}{2}n_H}{n_{Ar}} = \frac{p_2}{p_1} \quad (II-8) \\ \frac{n_{Cu} + 2n_{Cu_2}}{n_{Ar}} = \frac{p_3}{p_1} \quad (II-9) \end{array} \right\} \text{lois de proportionnalité}$$

$$\left. \begin{array}{l} \frac{n_H^2}{n_{H_2}} = F1 \Rightarrow n_H = \sqrt{F1 \cdot n_{H_2}} \quad (II-10) \\ \frac{n_{Cu}^2}{n_{Cu_2}} = F2 \Rightarrow n_{Cu} = \sqrt{F2 \cdot n_{Cu_2}} \quad (II-11) \end{array} \right\} \text{lois de Guldberg - Waage}$$

$$\left. \frac{P}{k_b T} = n_{Ar} + n_H + n_{H_2} + n_{Cu} + n_{Cu_2} \quad (II-12) \right\} \text{loi des gaz parfaits}$$

La résolution mathématique de ce système présentée succinctement en *annexe A4* nous permet d'obtenir dans un premier temps les densités moléculaires n_{H_2} et n_{Cu_2} . De celles-ci et des relations (II-10), (II-11) et (II-12), nous en déduisons facilement les densités des espèces neutres n_{Ar} , n_H , et n_{Cu} .

Températures comprises entre 1000K et 25000K

Pour des températures comprises entre 1000K et 25000K, nous devons tenir compte des espèces ionisées. Les densités recherchées peuvent être déterminées mathématiquement par un système d'équations non linéaires résolu par une méthode itérative pour chaque

température, une pression donnée et suivant les concentrations choisies. Les détails des calculs de la méthode sont exposés dans la thèse de **Benjamin Chervy** [Ch-3]. Nous rappelons ici brièvement les principales lois d'équilibre utilisées.

Tableau II-2 : Lois de l'équilibre thermodynamique local

<i>Lois</i>	<i>Expressions</i>
Saha (II-13)	$\left(\frac{n_e n_i}{n_a}\right) = \frac{2Q_i^{\text{int}}}{Q_a^{\text{int}}} \cdot \left[\frac{2\pi k_b T m_e}{h^2}\right]^{3/2} \cdot \exp\left(-\frac{E_i - \Delta E_z}{k_b T}\right)$
Neutralité électrique (II-14)	$\sum_i Z_i n_i^{Z_i^+} = \sum_i Z_i n_i^{Z_i^-}$
Gaz parfaits (II-15)	$P = \sum_i N_i k_b T - \Delta p$
Guldberg-Waage (II-16)	$\left(\frac{n_a n_b}{n_{ab}}\right) = \frac{Q_a^{\text{int}} \cdot Q_b^{\text{int}}}{Q_{ab}^{\text{int}}} \cdot \left[\frac{2\pi k_b T \cdot M_a \cdot M_b}{(M_a + M_b) \cdot h^2}\right]^{3/2} \cdot \exp\left(-\frac{D_{ab}}{k_b T}\right)$
Distribution de Boltzmann	répartition des atomes entre les divers niveaux d'énergie.

avec

n_e et n_i les densités des électrons et des espèces ionisées

n_a , Q_a^{int} densité (m^{-3}) et fonction de partition interne de l'espèce «a»

n_b , Q_b^{int} densité (m^{-3}) et fonction de partition interne de l'espèce «b»

n_{ab} , Q_{ab}^{int} densité (m^{-3}) et fonction de partition interne de l'espèce moléculaire «ab»

Δp la correction de Debye Hückel (Pa)

ΔE_z l'abaissement du potentiel d'ionisation

E_i l'énergie d'ionisation de l'espèce

D_{ab} l'énergie de dissociation de la molécule «ab»

M_a et M_b les masses atomiques des espèces «a» et «b»

3.3 – Abaissement du potentiel d'ionisation

La correction ΔE_z , appelée abaissement du potentiel d'ionisation (*API*) est introduite dans l'équation de Saha (II-13) pour prendre en considération le léger abaissement du niveau d'ionisation dû aux effets des champs magnétiques et électriques établis par les particules chargées. Elle consiste à diminuer l'énergie d'ionisation par l'introduction d'une perturbation.

En conséquence, le nombre de niveaux dans le calcul de la fonction de partition est limité, entraînant la convergence de celle-ci pour des températures élevées. Cette limitation se fait soit sur des hypothèses énergétiques (par exemple la sommation sur tous les états [Fa-1] tel que $E_{\text{niveau}} \leq E_{\text{ionisation}} - \Delta E_z$), soit en imposant une valeur limite n^* pour le nombre quantique principal [Au-2][Dr-3].

Ayant fait l'objet de diverses études et théories recensées par **Drawin** et **Felenbock** [Dr-2], cet API , proportionnel à la densité électronique, dépend de la charge des particules considérées, de la densité des particules chargées et de la température. Avec λ_D la longueur de Debye obtenue selon l'équation de Poisson et de Maxwell, le potentiel créé par le noyau de charge Ze à une distance r se met sous la forme :

$$V(r) = \frac{Ze}{4\pi\epsilon_0 r} \exp\left(-\frac{r}{\lambda_D}\right) \quad \text{avec} \quad \lambda_D = \sqrt{\frac{\epsilon_0 k_b T}{e^2 \left(N_e + \sum_i N_i Z_i^2\right)}}$$

A partir de la longueur de Debye λ_D et de la théorie de **Ecker** et **Wiesel**, **Drawin** et **Felenbock** [Dr-2] donne l'expression de l'abaissement du potentiel pour une espèce de charge z tel que :

$$\Delta E_z = \frac{(z+1)e^2}{4\pi\epsilon_0 \lambda_D} \quad (II-17)$$

3.4 – La correction de Debye Hückel

La correction au premier ordre de Debye Hückel [Bo-1] intervient dans la loi des gaz parfaits (II-15). Sans le terme correctif Δp , cette relation reste correcte pour des températures moyennes et des pressions inférieures à la pression atmosphérique, mais doit être corrigée pour des températures supérieures. Quand deux particules s'approchent l'une de l'autre, leur comportement est gouverné par le potentiel interactif qui se crée entre elle. En effet, contrairement à la théorie classique des gaz parfaits où l'on ne considère que des interactions élastiques, l'étude d'un plasma nécessite la prise en compte des particules chargées. Ces dernières engendrent autour d'elles un champ coulombien qui crée une énergie d'interaction éloignant le plasma de l'état de gaz parfait.

En considérant la loi des gaz réels :
$$\frac{P}{\sum_i n_i k_b T} = 1 + \beta T + \gamma T^2 + \eta T^3 + \dots$$

nous pouvons considérer la correction de Debye comme une correction au premier ordre de cette loi qui s'écrit alors sous la forme :

$$\begin{cases} P = \sum_i n_i k_b T - \Delta p \\ \Delta p = \frac{k_b T}{24\pi\lambda_D^3} \end{cases} \quad (II-18)$$

avec

n_e et n_i densités des électrons et des espèces ionisées (m^{-3})

λ_D la longueur d'onde de Debye (m)

Δp la correction de Debye Hückel (Pa)

La correction de Debye Δp est donc fonction de la longueur de Debye λ_D , de la température T et des densités de chaque espèce. Par conséquent, celle-ci varie suivant la nature du plasma.

IV – CALCUL DES PROPRIETES THERMODYNAMIQUES

Nous définissons ici quelques grandeurs thermodynamiques indispensables au calcul des coefficients de transport et permettant d'analyser le comportement du plasma. Ces fonctions thermodynamiques notées F , G , S , H et U s'écrivent à partir de la fonction de partition totale du système $Z^{\text{tot}}(T)$, la densité de masse ρ et N_i le nombre de particules par kg de plasma.

4.1 – Densité de masse (kg/m^3)

La densité de masse, que l'on appelle aussi masse volumique, mesure la quantité de masse qui sera contenue dans un m^3 de plasma. En supposant un gaz à l'équilibre thermodynamique constitué de différentes espèces i , de masse m_i (en kg), et de densité n_i (en m^{-3}), nous avons :

$$\rho = \sum_i n_i m_i \quad (II-19)$$

4.2 – Densité de particules par kg de mélange

Cette densité N_i de particules par kg de mélange d'une espèce i représente le nombre de particules de cette espèce i présentes dans 1 kg de mélange total de gaz présent. Nous utiliserons cette grandeur pour calculer les autres fonctions thermodynamiques.

$$N_i = \frac{n_i}{\rho} = \frac{n_i}{\sum_i n_i m_i} \quad (II-20)$$

4.3 – Fonction de partition totale d'un système

La fonction de partition totale d'un système comprenant i particules identiques est donnée par **Hirschfelder, Curtis et Bird** [Hi-2] :

$$Z_i^{\text{tot}}(T) = \prod_i \left(\frac{(Q_i^{\text{tot}}(T))^{N_{ip}}}{N_{ip}!} \exp\left(-\frac{N_{ip} \epsilon_i}{k_b T}\right) \right) \quad (II-21)$$

où $Q_i^{\text{tot}}(T)$ est la fonction de partition totale propre à chaque espèce i , N_{ip} le nombre total de particules i présentes dans le système, ε_i la différence d'énergie entre le niveau fondamental de l'espèce i et le niveau d'énergie pris comme référence [He-2][Hi-2].

4.4 – Potentiel de Helmholtz (J)

A partir de la fonction de partition totale du système, nous pouvons définir le potentiel de Helmholtz à partir duquel nous pouvons écrire toutes les autres fonctions thermodynamiques du système.

$$F = -(k_b T) \cdot \ln Z_i^{\text{tot}}(T) \quad \text{soit} \quad F = -(k_b T) \cdot \sum_i N_{ip} \left(\ln \frac{Q_i^{\text{tot}}}{N_{ip}} + 1 \right) + \sum_i N_i \varepsilon_i \quad (II-22)$$

4.5 – Energie de Gibbs ou Enthalpie libre (J)

La variation totale d'entropie est généralement exprimée en termes d'énergie libre de Gibbs. Cette enthalpie libre standard de réaction peut être calculée sur la base des énergies standard de formation des composés à partir de leurs éléments constitutifs que l'on trouve dans les tables thermodynamiques [Ch-2]. Une réaction tend à se produire spontanément (sans intervention de forces extérieures) lorsque la variation d'enthalpie libre qui l'accompagne devient négative. Celle-ci dépend de la composition du système de réaction. A partir des lois de la thermodynamique statistique, nous avons :

$$G = F + PV \quad \text{soit} \quad G = -k_b T \cdot \sum_i N_{ip} \ln \left(\frac{Q_i^{\text{tot}}}{N_{ip}} \right) + \sum_i N_i \varepsilon_i \quad (II-23)$$

4.6 – Entropie (J/K)

L'entropie mesure le « désordre » engendré par les réactions chimiques dans le plasma. Plus le désordre est grand, plus l'entropie est élevée ce qui la rend dépendante de la température. Lors d'une réaction, la chaleur libérée dans le milieu augmente donc son entropie, tandis que la chaleur absorbée par celui-ci la diminue. Par unité de masse, l'entropie s'écrit sous la forme :

$$S = \left(\frac{\partial G}{\partial T} \right)_{P, N_{ip}} \quad \text{d'où} \quad S = k_b T \sum_i N_{ip} \left(\frac{\partial \ln Q_i^{\text{tot}}}{\partial T} \right)_{P, N_{ip}} + k_b \sum_i N_{ip} \ln \left(\frac{Q_i^{\text{tot}}}{N_{ip}} \right) \quad (II-24)$$

4.7 – Enthalpie (J/kg)

A pression constante, la quantité de chaleur transférée de l'extérieur vers un système ou d'un système vers l'extérieur est égale à la variation d'enthalpie ΔH dudit système. La transformation résultante est dite exothermique dans le cas d'une libération de chaleur ($\Delta H < 0$) et endothermique lorsqu'elle s'accompagne d'une absorption de chaleur ($\Delta H > 0$). Les

variations de cette fonction d'état obéissant au premier principe de la thermodynamique peuvent être mesurées à l'aide de la calorimétrie. Celle-ci, afin d'interpréter un changement de température en termes de transfert de chaleur, se fonde sur la capacité calorifique, c'est à dire sur le rapport existant entre l'absorption de chaleur et l'augmentation de température qui en résulte.

Dans les calculs des propriétés de transport et plus particulièrement de la conductivité thermique de réaction, nous devons connaître l'enthalpie d'une réaction. Cette enthalpie est définie comme étant la différence entre l'enthalpie des produits et l'enthalpie des réactifs de ladite réaction que l'on trouve dans les tables thermodynamiques. On l'exprime en général en considérant les substances dans leur état standard, c'est à dire pur à la pression atmosphérique. Les valeurs sont utilisées pour déterminer la quantité de chaleur libérée au cours d'une réaction, sur la base du nombre de moles de réactifs qui y prennent part. Ces enthalpies de réaction peuvent être calculées également sur la base des enthalpies de formation, c'est à dire des variations d'enthalpie qui accompagnent la formation de composés à partir de leurs éléments constitutifs.

Nous pouvons calculer l'énergie d'un système à partir de deux grandeurs que sont l'énergie interne et l'enthalpie suivant que l'on se place à volume constant ou à pression constante. Pour notre plasma à pression atmosphérique, le calcul de l'enthalpie H par unité de masse de plasma se fonde sur les résultats de la composition et sur les lois de la thermodynamique statistique :

$$H = G + TS \quad \text{soit pour 1kg de gaz} \quad H = \sum_i N_i k_b T^2 \left(\frac{\partial \ln Q_i^{\text{tot}}}{\partial T} \right)_{P, N_i} + \sum_i N_i \varepsilon_i \quad (II-25)$$

avec ε_i l'énergie de référence de l'espèce i.

4.8 – Energie interne (J/kg)

L'énergie se trouve dans la matière sous forme d'énergie cinétique (énergie liée au mouvement des corps) et d'énergie potentielle (qui dépend de la position d'un corps dans l'espace). Etant donnée la conservation de l'énergie totale d'un système, ces deux énergies sont corrélées. L'énergie interne par unité de masse de particule est donnée par :

$$U = H - PV \quad \text{soit} \quad U = H - \sum_i N_i k_b T \quad (II-26)$$

4.9 – Chaleur spécifique à pression constante (J/kg/K)

Cette fonction permet de mesurer le taux de variation de l'enthalpie suivant la température à pression constante :

$$C_p = \left(\frac{\partial H}{\partial T} \right)_P \quad \text{soit finalement} \quad C_p = k_b \sum_i N_i \left(T^2 \left(\frac{\partial^2 \ln Q_i^{\text{Tot}}}{\partial T^2} \right)_{P, N_i} + 2T \left(\frac{\partial \ln Q_i^{\text{Tot}}}{\partial T} \right)_{P, N_i} \right) \quad (II-27)$$

La principale difficulté réside dans le calcul la dérivée seconde de la fonction de partition totale et par conséquent de la fonction de partition interne. Comme il est impossible d'obtenir une expression analytique de cette dérivée, nous devons vérifier la continuité de la dérivée première de la fonction de partition interne avant d'effectuer le calcul de la chaleur spécifique par une dérivée numérique pour chaque température :

$$C_p(T) = \frac{H\left(T + \frac{\Delta T}{2}\right) - H\left(T - \frac{\Delta T}{2}\right)}{\Delta T}$$

avec un pas ΔT petit pour les basses températures où C_p fluctue beaucoup du fait des différentes dissociations et ionisations présentes.

Les expressions données précédemment sont obtenues pour des proportions massiques. Il est également possible de les connaître pour des proportions molaires. Bien souvent, ces expressions tiennent compte de l'état de référence ($T=0K$) contrairement aux tables de *Janaf* [Ch-2] qui les donnent pour $T=298.15K$. Ces relations sont parfois complétées des corrections de Debye-Hückel dont nous donnons également les expressions dans le *tableau II-3*.

Tableau II-3 : Propriétés thermodynamiques pour des proportions molaires

	Enthalpie	Entropie	Chaleur Spécifique
Molaire Pour un gaz monoatomique	$H_T^o - H_o^o = H^{elec} + H^{trans}$ $H^{elec} = RT^2 \frac{\partial \log Q^{int}}{\partial T}$ $H^{trans} = \frac{5}{2} RT$	$S_T^o - S_o^o = R(S^{elec} + S^{trans})$ $S^{elec} = T \frac{\partial \log Q^{int}}{\partial T} + \log Q^{int}$ $S^{trans} = \frac{3}{2} \log M + \frac{5}{2} \log T + \frac{5}{2} C$ $C = \log \left(\frac{k_b}{P} \cdot \left[\frac{2\pi k_b}{N_{av} h^2} \right]^{3/2} \right)$	$C_v^o = \frac{\partial}{\partial T} \left(RT^2 \frac{\partial \ln Q^{int}}{\partial T} \right)$ $C_p^o = R(C_p^{elec} + C_p^{trans})$ $C_p^{elec} = T^2 \frac{\partial^2 \log Q^{int}}{\partial T^2} + 2T \frac{\partial \log Q^{int}}{\partial T}$ $C_p^{trans} = \frac{5}{2}$
	Enthalpie	Entropie	Potentiel de Gibbs
Corrections de Debye-Hückel	$H = H_{idéal} - \Delta H_{correction \text{ Debye Hückel}}$ $H = H_{idéal} - \frac{k_b T}{6\pi\lambda_D^3}$	$S = S_{idéal} - \Delta S_{correction \text{ Debye Hückel}}$ $S = S_{idéal} - \frac{k_b}{24\pi\lambda_D^3}$	$G = G_{idéal} - \Delta G_{correction \text{ Debye Hückel}}$ $G = G_{idéal} - \frac{k_b T}{8\pi\lambda_D^3}$

V – RESULTATS ET DISCUSSIONS

5.1 – Abaissement du potentiel d'ionisation

Drawin et *Felenbock* [Dr-2] ont calculé les fonctions de partition internes de divers atomes et ions pour différentes valeurs de cet abaissement du potentiel d'ionisation. La comparaison avec nos résultats amène quelques remarques :

- Pour certaines espèces atomiques ionisées (Ar^{2+} , Ar^{3+} , Cu^+ , Cu^{2+} et Cu^{3+}), les valeurs de l'abaissement du potentiel d'ionisation n'influent que très faiblement sur les fonctions de partition. Ce phénomène se produit lorsque la différence entre l'énergie d'ionisation et celle du(des) premier(s) niveau(x) est faible, l'API étant alors négligeable. Etant donné le bon accord entre nos résultats et ceux de *Drawin* et *Felenbock* [Dr-2] pour les températures proposées, nous avons calculé les fonctions de partition de ces espèces à partir de leurs données. Malheureusement, les valeurs nous sont parfois données pour un domaine limité en température. Pour les températures extérieures à ce domaine, nous avons donc calculé les fonctions de partition interne selon la relation générale (II-6) dont les niveaux d'énergie sont issus des tables de *Moore* [Mo-4] corrigées par les récentes données du *Nist* [Ni-1] et complétées par celles de *Kurucz* et *Peytreman* [Ku-2].

- Pour d'autres espèces et certaines températures, faire varier les valeurs de l'abaissement de potentiel d'ionisation perturbe considérablement les résultats obtenus pour les fonctions de partition. Une estimation faite de l'abaissement de potentiel d'ionisation le situe au maximum entre les deux séries de valeurs : 0.1eV et 0.25eV. Suivant la valeur du potentiel d'ionisation, nous avons calculé la fonction de partition interne soit à partir de la première série de *Drawin* et *Felenbock* (0.1eV), soit par une interpolation entre les deux séries de la façon suivante :

$$Q_{\Delta E_z}^{\text{int}}(T) = \frac{(Q_{\Delta E_z=0,25}^{\text{int}}(T) - Q_{\Delta E_z=0,1}^{\text{int}}(T)) \cdot (\Delta E_z(T) - 0,1)}{0,15} + Q_{\Delta E_z=0,1}^{\text{int}}(T) \quad (\text{II-28})$$

où pour une température T donnée, $Q_{\Delta E_z}^{\text{int}}(T)$ est la fonction de partition recherchée,

$Q_{\Delta E_z=0,25}^{\text{int}}(T)$ et $Q_{\Delta E_z=0,1}^{\text{int}}(T)$ celles connues pour un API de 0.25eV et de 0.1eV [Dr-2].

5.2 – Fonctions de partition internes

Les calculs ont été faits pour toutes les espèces monoatomiques et moléculaires citées dans le tableau II-1. Les tableaux A5-1 et A5-2 de l'annexe A5 présentent les résultats sous forme de coefficients de lissage en fonction de la température et de la valeur de l'API. Cependant, certains lissages que récapitulent le tableau II-4 ne sont pas valables sur tout le domaine de température étudié, ceci pouvant s'expliquer par des variations rapides et importantes de certaines fonctions de partition. En effet, nous pouvons constater par la relation (II-6) qu'à faibles températures, seuls les tout premier niveaux énergétiques sont importants, l'exponentielle tendant vers 0 pour des énergies supérieures. De même, pour des températures élevées, les niveaux à très hautes énergies jouent un rôle fondamental dans le calcul des

fonctions de partition. C'est pourquoi, pour tenir compte des erreurs que pourraient engendrer ces lissages pour des températures faibles ou très élevées, nous superposons à ces derniers quelques corrections également présentées dans ces tableaux (*annexe A5*)

Tableau II-4 : Type de lissage des Fonctions de Partition Internes

N°	Type du lissage Q(T)
1	$\sum_n a_n T^n$
2	$\sum_n a_n (T/1000)^n$
3	$\exp(\sum_n a_n T^n)$
4	$\exp(\sum_n a_n (T/1000)^n)$

Pour des températures faibles, les résultats montrent que les fonctions de partition des espèces atomiques sont de l'ordre de grandeur du poids statistique du niveau fondamental, leur valeur étant comprise entre 1 et la dizaine. En augmentant la température, nous pouvons constater que la fonction de partition équivaut à la somme des poids statistiques des tous premiers niveaux, l'exponentielle tendant vers l'unité. Les fonctions de partition obtenues pour les molécules sont nettement plus élevées.

5.3 – Densités de particules

A partir des méthodes de calcul présentées ci-dessus, nous avons calculé la composition des trois gaz purs Ar, H₂ et Cu, puis celles des mélanges binaires Ar-H₂ et Ar-Cu. De nombreux travaux sur ces gaz ont été effectués dans notre groupe (**Erraki** pour l'argon [Er-1], **Raynal** pour le cuivre [Ra-2] ou **Riad** pour l'hydrogène [Ri-1]). Nos résultats étant en accord avec ces études antérieures, nous présentons dans ce paragraphe la composition d'un plasma ternaire Ar/H₂/Cu en considérant celui-ci à l'équilibre thermodynamique et à pression atmosphérique. Pour des températures comprises entre 300K et 25000K, nous pouvons constater sur les **figures II-1 à II-8** une évolution de ce plasma suivant trois phases pour lesquelles certaines espèces sont prédominantes par rapport aux autres.

Dans un premier temps et pour des températures inférieures à 5000K (**fig.II-1 à II-4**), le plasma est essentiellement composé de molécules d'hydrogène H₂ et de cuivre Cu₂, d'atomes neutres d'argon Ar, d'hydrogène H et de cuivre Cu. Au niveau moléculaire, la molécule d'hydrogène H₂ se dissociant pour des températures voisines de 3500K, la densité devient rapidement négligeable devant celle des atomes neutres d'hydrogène tout en restant néanmoins importante devant celle des électrons et des ions. Concernant la densité de particules de la molécule Cu₂, cette dernière prend un sens physique à l'état gazeux pour des températures supérieures à 2800K [Ch-2] en dessous de laquelle le cuivre est supposé subsister soit à l'état solide soit à l'état liquide, phases que nous ne prenons pas en compte dans notre étude. Cette densité étant moins importante que celle de la molécule d'hydrogène H₂, nous ne tiendrons pas compte de son influence sur le milieu dans la suite de notre travail. L'atome neutre Cu ayant un potentiel d'ionisation plus faible que l'argon ou l'hydrogène neutre, seuls les électrons et Cu⁺ participent alors à la neutralité pour des températures comprises entre 1000K et 5000K.

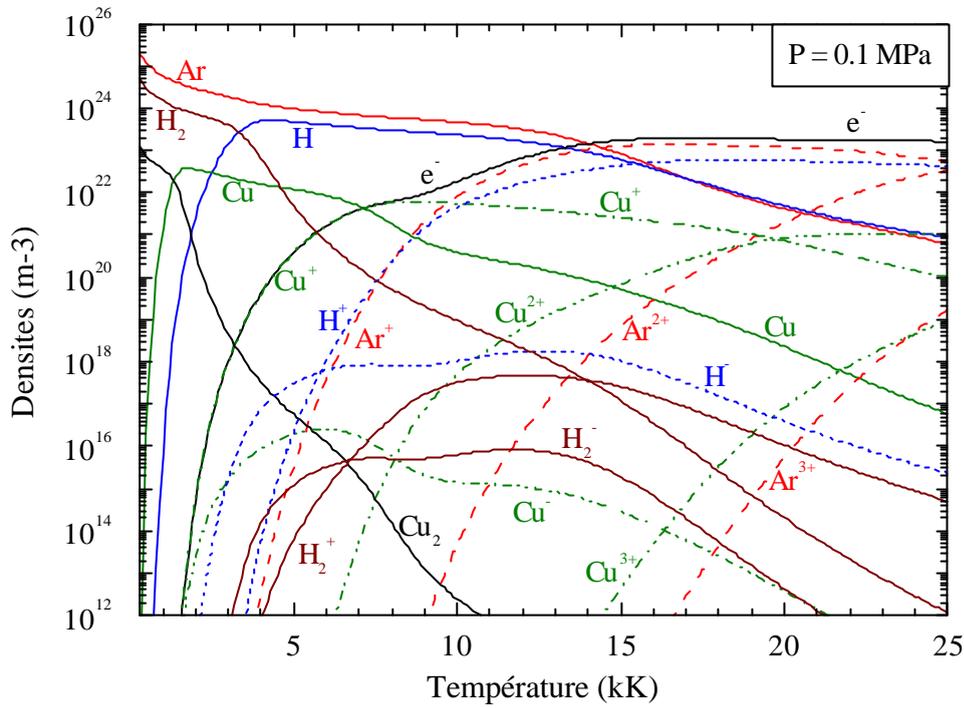


Fig. II-1: Composition pour un mélange 79%Ar-20%H₂-1%Cu

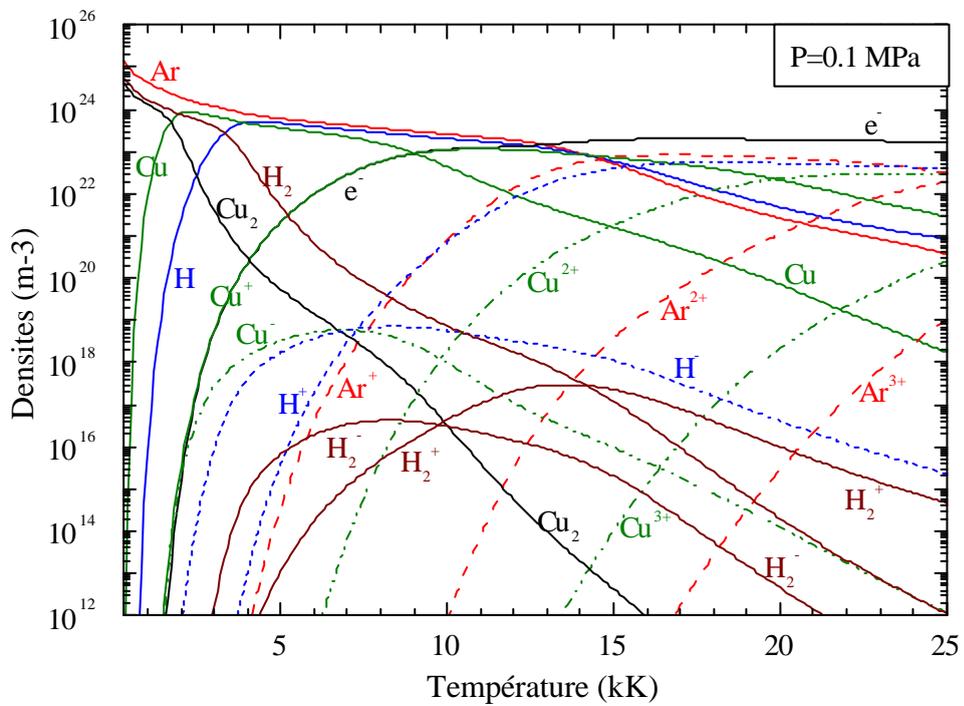


Fig. II-2: Composition pour un mélange 50%Ar-20%H₂-30%Cu

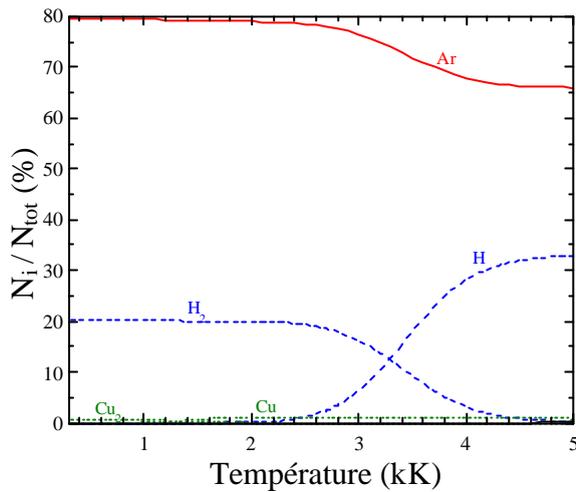


Fig. II-3: Mélange 79%Ar-20%H₂-1%Cu

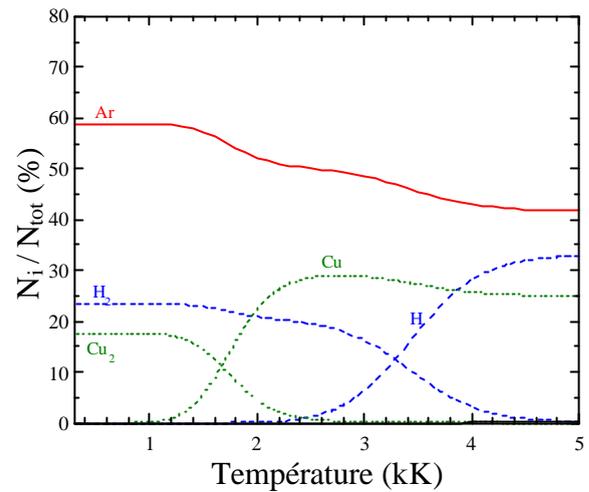


Fig. II-4: Mélange 50%Ar-20%H₂-30%Cu

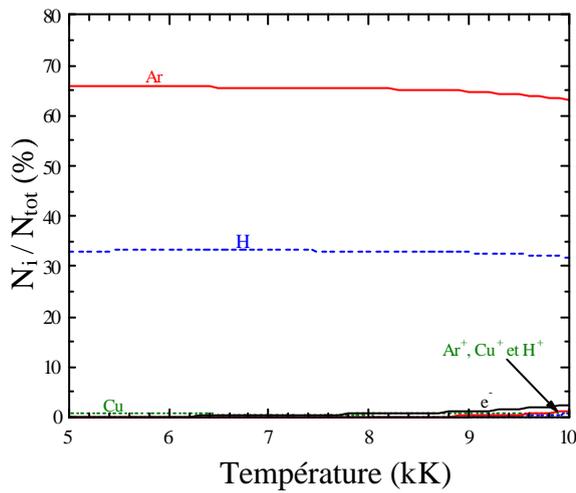


Fig. II-5: Mélange 79%Ar-20%H₂-1%Cu

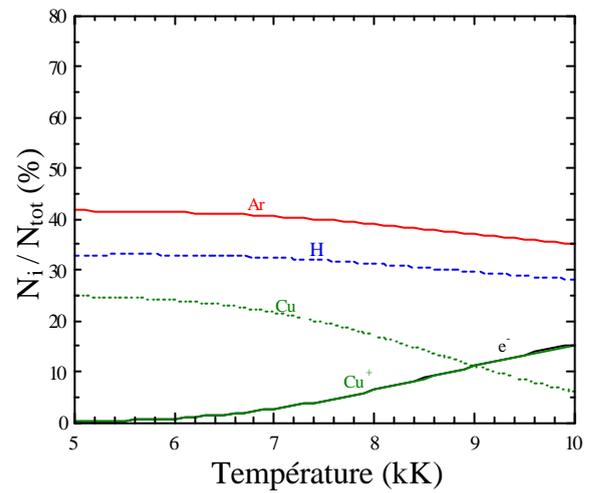


Fig. II-6: Mélange 50%Ar-20%H₂-30%Cu

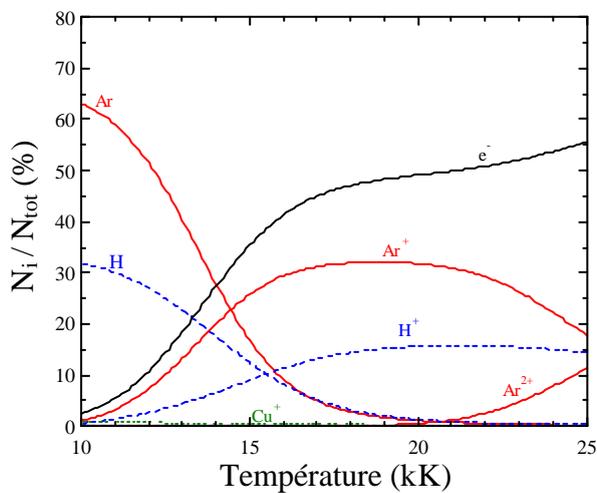


Fig. II-7: Mélange 79%Ar-20%H₂-1%Cu

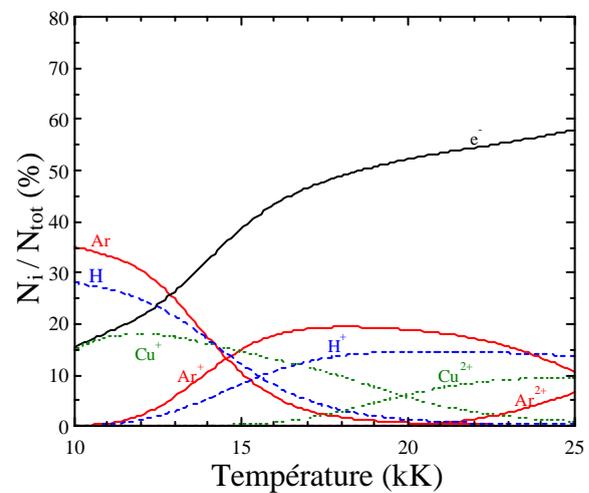


Fig. II-8: Mélange 50%Ar-20%H₂-30%Cu

Dans une deuxième phase comprise entre 5000K et 10000K (*fig.II-1, II-2, II-5 et II-6*), les atomes neutres Ar, H, Cu ainsi que les électrons restent les espèces prédominantes dans le milieu, ces derniers permettant la formation des particules ionisées Ar^+ , H^+ et Cu^+ . Contrairement à la première phase où les molécules d'hydrogène H_2 étaient prépondérantes, celles-ci diminuent rapidement suivant les proportions considérées pour le mélange. Dans la suite de notre travail, nous prendrons en compte la présence de ces molécules uniquement pour des températures inférieures à 10000K. Enfin, la neutralité électrique est toujours assurée par la présence des électrons et des ions positifs Cu^+ . Le potentiel d'ionisation des atomes Ar et H étant plus élevé que celui de l'atome Cu, les ions positifs Ar^+ et H^+ apparaissent plus tardivement avec l'augmentation de la température pour contribuer à leur tour à la neutralité.

Enfin, dans une dernière phase allant de 10000K à 25000K (*fig.II-1, II-2, II-7 et II-8*), les espèces neutres deviennent petit à petit négligeables devant les fortes densités des électrons et des ions positifs Ar^+ , Ar^{2+} , H^+ et Cu^+ , Cu^{2+} . Pour des températures voisines de 25000K, le plasma peut être considéré comme totalement ionisé, la densité des électrons restant quasi-constante. En effet, à pression constante, la densité est inversement proportionnelle à la température suivant la loi des gaz parfaits (*II-15*), la densité électronique se voit donc stabilisée.

En conclusion, les espèces neutres H_2 , Ar, H, Cu et chargées H , Cu^- , e^- et Cu^+ seront les principaux responsables des phénomènes physiques pour les basses températures ($T < 10000\text{K}$) auxquels s'ajouteront les espèces ionisées Ar^+ , Ar^{2+} , Cu^{2+} et H^+ pour des températures supérieures, les seules espèces négativement chargées encore fortement présentes étant les électrons. Les résultats proposés sous forme de fraction molaire permettent d'identifier les espèces principales et peuvent être utilisés dans le but de simplifier certains calculs en tenant compte uniquement des phénomènes majeurs associés à la gamme de température considérée.

5.4 – Chaleur spécifique C_p à pression constante

Nous présentons sur la *figure II-9* la chaleur spécifique d'un plasma d'hydrogène. Les résultats obtenus pour les mélanges Ar/ H_2 /Cu sont proposés *figure II-10* sur laquelle nous avons également reporté la chaleur spécifique d'un plasma d'argon pur et de cuivre pur. Ces résultats montrent de nombreuses variations dues aux diverses réactions identifiables par la présence de pics plus ou moins prononcés suivant le gaz étudié. En effet, pour les plasmas d'hydrogène et de cuivre purs, le premier pic correspond aux dissociations des molécules se situant vers 3500K pour H_2 et 2000K pour Cu_2 , le pic relatif au cuivre étant plus faible et peu représentatif puisque cette espèce devrait être considérée en phase condensée pour ces températures. Les autres pics observés pour les gaz purs représentent les différentes ionisations apparaissant pour des températures voisines de 10000K et 20000K pour le cuivre, 15000K pour l'argon et l'hydrogène. Nous pouvons toutefois remarquer sur la *figure II-9* le bon accord entre nos résultats et ceux de Pateyron-Fauchais [Pa-1], tandis que notre pic d'ionisation se trouve décalé par rapport aux données de Godin [Go-1].

Pour les mélanges Ar/ H_2 /Cu, nous retrouvons également ces pics de dissociation vers 2000K et 3500K. Cependant, l'ajout de cuivre pour des températures supérieures apporte d'autres changements dans le comportement du C_p . En effet, nous constatons une légère diminution en amplitude du pic de dissociation de l'hydrogène, une augmentation des pics d'ionisation pour des températures proches de 10000K et 20000K due respectivement à l'apparition d'ions Cu^+

et Cu^{2+} , enfin une diminution pour des températures voisines de 15000K et 25000K correspondant aux différentes ionisations des espèces argon et hydrogène.

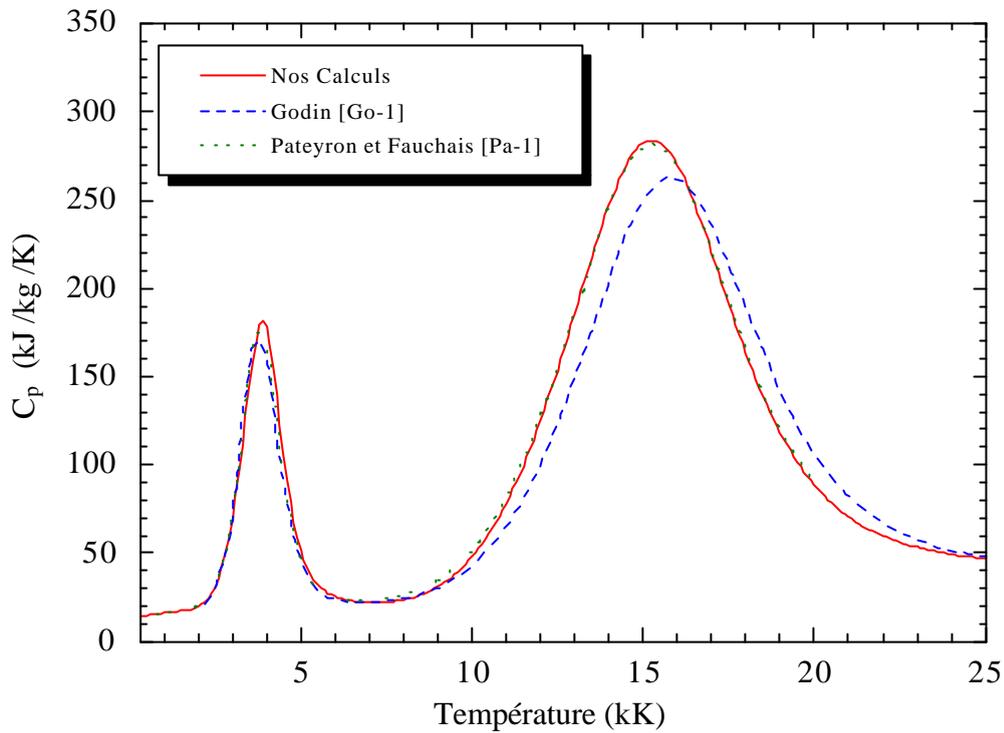


Fig. II-9: Chaleur spécifique pour un plasma d'hydrogène pur

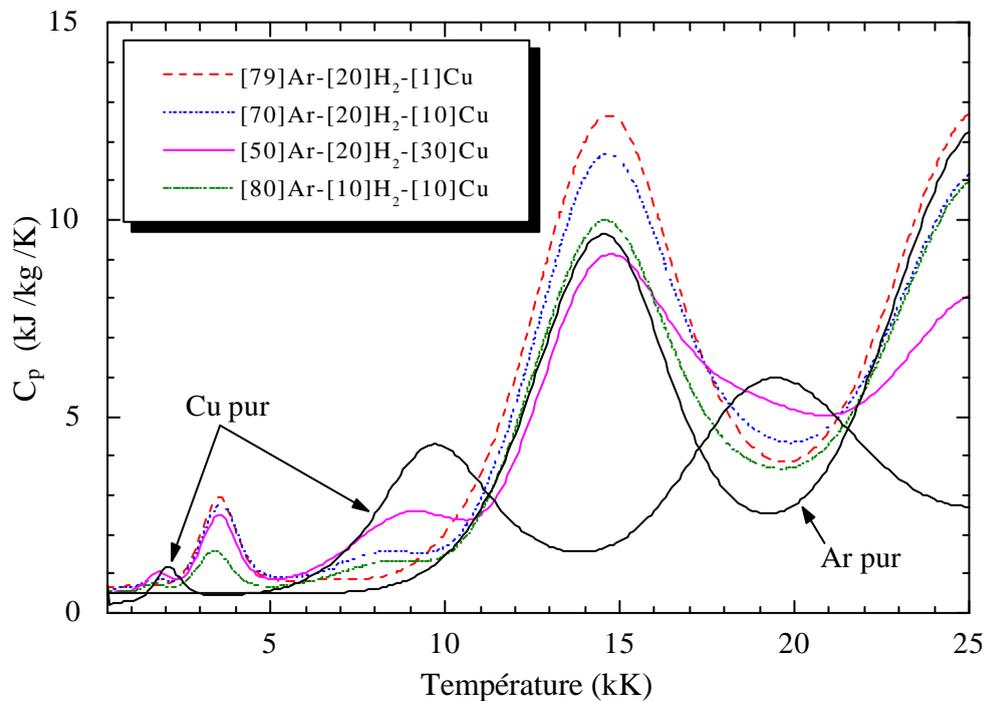


Fig. II-10: Chaleur spécifique pour différents mélanges

BASES DE CALCUL

DU

RAYONNEMENT THERMIQUE

I – INTRODUCTION

D'après le premier chapitre, les phénomènes d'émission et d'absorption sont caractérisés par les coefficients $\epsilon_v(T)$ et $\kappa_v(T)$. En supposant l'équilibre thermodynamique local établi, ces coefficients tiennent compte des différents processus donnant naissance au continuum et aux raies et dépendent fortement de la condition d'existence du plasma, de sa température, de sa composition et de la fréquence. Nous proposons dans ce chapitre d'établir une base de données utilisable par la suite dans les deux méthodes de calcul du rayonnement thermique que nous présentons dans le *chapitre IV*. Cette base se décompose en deux parties. La première partie concerne le calcul du coefficient d'absorption continu $\kappa_v^{\text{continu}}(T)$ et regroupe dans un premier temps les niveaux d'énergie des différentes espèces, leurs dégénérescences et leurs nombres quantiques recensés dans la littérature [Mo-4][Ni-1][Ku-2]. Les transitions formant le spectre continu étant du type libre-lié ou libre-libre, nous avons regroupé les tables des fonctions et des sections efficaces relatives aux divers mécanismes, données indispensables pour le calcul de $\kappa_v^{\text{continu}}(T)$. Enfin, nous présentons plusieurs résultats du coefficient d'absorption continu suivant la température et la fréquence pour mieux comprendre l'influence de ces paramètres ainsi que l'importance des vapeurs métalliques de cuivre ou des différents phénomènes responsables du spectre continu. La seconde partie de cette base porte sur les transitions lié-lié s'effectuant pour une longueur d'onde déterminée entre deux niveaux d'énergie liés de l'atome ou de l'ion et formant le spectre de raies. La majeure partie de cette étude consiste à construire une banque de données complète comprenant, pour chaque transition, les propriétés des niveaux haut et bas, la probabilité de transition et la force oscillateur associée ainsi que les constantes d'élargissement Stark et de Van der Waals caractéristiques des interactions présentes dans le milieu. Pour notre plasma Ar/H₂/Cu, nous avons effectué ce travail pour chaque espèce atomique et ionisée soit un total d'environ 14500 transitions. Après avoir rappelé les mécanismes susceptibles d'élargir un profil de raie, nous rappelons les expressions permettant le calcul de l'épaisseur optique intervenant dans l'équation du transfert radiatif (I-12). A partir de ce paramètre, nous définissons le facteur de fuite Λ_r dont les valeurs calculées sont comparées à la littérature pour des profils de type Gaussien, Lorentzien et de Voigt. Ce facteur est ensuite introduit dans les deux méthodes de calcul du rayonnement détaillées dans le *chapitre IV*.

II - MECANISMES D'EMISSION DU RAYONNEMENT CONTINU.

Deux types de transition constituent le spectre continu et se différencient par l'état dans lequel se trouve l'électron. En effet, un électron non lié se situant dans le continuum au dessus du niveau d'ionisation peut perdre de l'énergie entre un niveau de ce continuum et un niveau d'énergie quantifié : dans ce cas, la transition est dite libre-lié [Go-2], les phénomènes correspondant étant l'attachement radiatif et la recombinaison radiative. Mais l'électron dans le continuum peut également perdre de l'énergie par une transition entre deux niveaux du continuum : la transition est alors du type libre-libre dont les principaux phénomènes sont le rayonnement de freinage électron-ion et électron-atome. Pour les calculs, nous avons considéré les molécules H₂, les espèces ionisées Ar⁺, Ar²⁺, H⁺, H, Cu⁺, Cu²⁺, Cu⁻, les électrons et les espèces neutres Ar, H, Cu dans une gamme de températures comprises entre 300K et 25000K. Les niveaux d'énergie et nombres quantiques recensés dans les tables de *Moore* [Mo-4], corrigés par les récentes données du *NIST* [Ni-1] et complétés par celles de *Kurucz* et *Peytremann* [Ku-2], constituent notre banque de données pour calculer le coefficient d'absorption continu.

2.1 – Transition libre-lié

2.1.1 – Recombinaison radiative

La recombinaison radiative d'un ion atomique de charge Ze avec un électron forme un atome neutre ou ion de charge $(z-1)e$ dans un état quantique i et conduit à l'émission d'un photon dont la fréquence est distribuée de façon continue. Ce mécanisme est souvent prépondérant dans l'émission continue d'un plasma thermique. Le phénomène inverse est la photoionisation d'un atome ou d'un ion de charge $(z-1)e$, dans un état excité i , formant un ion A^{z+} et libérant un électron. En supposant A^{z+} dans l'état fondamental, on a :

$$A^{z+} + e^- \Leftrightarrow A_i^{(z-1)+} + h\nu \quad \text{tel que} \quad h\nu = E_{\text{lim}}^{(z-1)} - \Delta E_z - E_i^{(z-1)} + E_e \quad (III-1)$$

avec i le niveau d'énergie de l'atome ou de l'ion de charge $(z-1)e$, $E_{\text{lim}}^{(z-1)}$ l'énergie limite d'ionisation de l'atome $A^{(z-1)+}$, $E_i^{(z-1)}$ l'énergie d'excitation de l'ion $A_i^{(z-1)+}$ créé, ΔE_z l'abaissement de la limite d'ionisation, E_e l'énergie de l'électron.

Le calcul du coefficient d'absorption dû à la photoionisation des atomes excités dépend de la section efficace de photoionisation correspondante donnée par **Seaton** et **Burgess** [Se-1]. En utilisant la relation de Kirchhoff (I-21) et l'hypothèse de l'ETL, le coefficient d'émission s'écrit sous la forme [Go-2] :

$$\epsilon_v^{\text{rec}}(T) = C_1 \cdot \frac{N_e N^{z+}}{Q_{z^+}^{\text{int}}(T)} \frac{z^2}{\sqrt{T}} \left[1 - \exp\left(-\frac{h\nu}{k_b T}\right) \right] g_i^{z+} \xi_v^{(z-1)}(T) \quad (III-2)$$

où $\xi_v^{(z-1)}(T)$ représente le facteur de Biberman-Schluter de $A^{(z-1)+}$ introduit par **Biberman** et **Norman** [Bi-1][Bi-2] et défini par l'expression suivante :

$$\xi_v^{(z-1)}(T) = \frac{\left(\frac{v}{c}\right)^3 \exp\left(\frac{E_{\infty}^{(z-1)} - \Delta E_z}{k_b T}\right) \left[\sum_i g_i^{(z-1)} \exp\left(-\frac{E_i}{k_b T}\right) \sigma_i(v) \right]}{C_2 z^2 g_1^{z+} \cdot T \cdot \left(\exp\left(\frac{h\nu}{k_b T}\right) - 1 \right)} \quad (III-3)$$

avec pour ces deux relations, $\epsilon_v^{\text{rec}}(T)$ le coefficient d'émission de la recombinaison radiative ($J/m^3/\text{ster}$), N_e et N^{z+} la densité électronique et la densité de l'ion A^{z+} , $Q_{z^+}^{\text{int}}$ la fonction de partition interne de l'ion A^{z+} , g_1^{z+} et $g_i^{(z-1)}$ les poids statistiques du premier niveau de A^{z+} et du niveau i de $A^{(z-1)+}$, $E_{\infty}^{(z-1)}$ la première limite d'ionisation de l'ion ou de l'atome neutre de charge $(z-1)$, et $\sigma_i(v)$ la section efficace de photoionisation du niveau excité i .

Les deux constantes C_1 et C_2 intervenant dans les deux relations précédentes ont pour valeurs $C_1=5,44E-52$ ($J.m^3.K^{1/2}/ster$) et $C_2=6,618E-06$ ($m^{-1}.K^{-1}$) et pour expression littérale :

$$C_1 = \frac{16\pi \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \right)^3}{3c^3 \sqrt{6k_b\pi m_e^3}} \quad \text{et} \quad C_2 = \frac{32k_b\pi^2}{3h^4c^4\sqrt{3}} \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \right)^3 \quad (III-3)$$

Pour l'argon, les valeurs de $\xi_v^{(z-1)}(T)$ utilisées pour les calculs relatifs à l'espèce sont issues de Biberman-Schluter et d'**Hofsaess** [Ho-1]. Ce facteur de Biberman, englobant toutes les difficultés de calcul et corrigeant le modèle classique hydrogénoïde par l'utilisation de la mécanique quantique, se déduit de la sommation des sections efficaces de photoionisation pour tous les niveaux considérés (II-2). L'utilisation du potentiel d'interaction coulombienne est remplacée par le potentiel écranté de Thomas-Fermi permettant ainsi de traiter les interactions courtes et de calculer ces sections efficaces pour les niveaux bas [St-1]. Pour les niveaux hauts des atomes H et Cu, ces dernières sont obtenues selon l'approximation hydrogénoïde proposée par [Ok-1] :

$$\epsilon_v^{rec}(T) = C_3 \cdot N_c N^{z+} \frac{z^4}{c\sqrt{T^3}} \exp\left(-\frac{h\nu}{k_b T} - \frac{z\Delta E_z}{k_b T}\right) \times S \quad (III-4)$$

avec

$$S = \sum_i \frac{g_i^{(z-1)}}{n_i^5} \exp\left(\frac{E_{lim}^{(z-1)} - E_i^{(z-1)}}{k_b T}\right) + \frac{1}{g_o^{(z-1)}} \sum_{n=n_1}^{n_2} \frac{1}{n^3} \exp\left(\frac{z^2 E_{Ryd}}{n^2 k_b T}\right) \quad (III-5)$$

Pour le premier terme de S sans dimension, la somme sur l'indice i n'est possible que pour des niveaux de l'espèce i dont les énergies vérifient $E_i^{(z-1)} \geq (E_\infty^{(z-1)} - \Delta E - h\nu)$. Dans le second terme, les deux indices n_1 et n_2 sont définis par les relations de **Gongassian** [Go-2] :

$$n_1 = z \sqrt{\frac{E_{Ryd}}{\frac{hc}{\lambda} + z\Delta E_z}} \quad \text{et} \quad n_2 = z \sqrt{\frac{E_{Ryd}}{z\Delta E_z}} \quad (III-6)$$

les autres termes intervenant dans ces expressions étant E_{Ryd} l'énergie de Rydberg égale à $109737.3177 \text{ cm}^{-1}$, n_i le nombre quantique principal du niveau d'énergie E_i de l'atome, $g_o^{(z-1)}$ et $g_i^{(z-1)}$ les poids statistiques du niveau fondamental et du niveau i de $A^{(z-1)+}$ et pour finir la constante $C_3 = 5,15E-38$ ($J.m^4.K^{3/2}/ster/s$).

2.1.2 – Attachement radiatif

En présence d'atomes électronégatifs, le rayonnement continu de l'attachement radiatif résulte de la capture d'un électron par un atome neutre pour former un ion négatif et l'émission d'un

photon. Malgré l'influence souvent négligeable de ce phénomène sur la contribution totale du continuum, nous avons tout de même considéré le rayonnement de l'attachement radiatif dû aux espèces négatives Cu^- et H^- présentes dans le milieu.



Le coefficient d'émission spectral se met sous la forme [Go-2] :

$$\epsilon_v^{\text{att}}(\text{T}) = \left(\frac{2h\nu^3}{c^2} \right) \times \exp\left(-\frac{h\nu}{k_b\text{T}} \right) \times N_A^-(\text{T}) \times \sigma_{\text{det}}^-(\nu) \quad (\text{III-8})$$

avec $\epsilon_v^{\text{att}}(\text{T})$ le coefficient d'émission dû à l'attachement radiatif ($\text{J}/\text{m}^3/\text{ster}$), E_e l'énergie cinétique de l'électron, E_a l'affinité électronique ou énergie d'attachement de l'atome A, N_A^- la densité d'ion négatif A⁻ et $\sigma_{\text{det}}^-(\nu)$ la section efficace de photodétachement de l'ion A⁻.

La longueur d'onde maximale du photon émis étant celle d'un électron de vitesse nulle, ce processus ne peut exister que pour des longueurs d'onde inférieures à cette valeur limite, soit :

$$\lambda_{\text{max}} = \frac{hc}{E_a} \quad \text{qui correspond dans notre cas à} \quad \begin{array}{l} \lambda_{\text{max}}^{\text{H}^-} = 1643 \text{ nm} \\ \lambda_{\text{max}}^{\text{Cu}^-} = 1008 \text{ nm} \end{array}$$

Pour des longueurs d'onde vérifiant cette condition, le coefficient d'émission est donc calculé à partir des sections efficaces de photodétachement issues des travaux de **Scheibner** et **Hazi** [Sc-1] pour le cuivre Cu^- et d'un article de **Mc Daniel** [Mc-1] pour l'hydrogène H.

2.2 – Transition libre-libre

2.2.1 – Rayonnement de freinage électron-ion

L'électron qui rayonne est soumis uniquement au champ électrique d'un seul ion, le champ électrique créé par l'ensemble des autres ions étant considéré comme nul. Nous effectuons donc les calculs dans l'hypothèse de collisions binaires.

$$\text{A}^{z+} + [\text{e}^-]_{v_i} \Leftrightarrow \text{A}^{z+} + [\text{e}^-]_{v_f} + h\nu \quad \text{tel que} \quad h\nu = \frac{1}{2} m_e |v_f^2 - v_i^2| \quad (\text{III-9})$$

où V_i et V_f sont les vitesses initiale et finale de l'électron.

Les électrons et les ions étant les seules espèces intervenant dans ce processus, le coefficient d'émission spectrale s'exprime dans l'approximation hydrogénoïde en fonction de leur densité sous la forme [Ca-1] :

$$\varepsilon_v^{ei,z^+}(T) = C_5 \cdot z^2 \frac{N_e N^{z^+}}{T^{1/2}} \exp\left(-\frac{h\nu}{k_b T}\right) \times G^{z^+}(v, T) \quad (III-10)$$

avec $C_5 = 5,44.E-52$ ($J.m^3 \cdot K^{1/2}/ster$) et $G^{z^+}(v, T)$ le facteur correctif de Gaunt jouant un rôle comparable à celui du facteur de Biberman pour la recombinaison radiative.

Ce facteur de Gaunt sans dimension est obtenu via les expressions des sections efficaces des transition libre-libre et des sections efficaces classiques des transitions libre-libre de Kramers [Ka-1]. La section efficace pour l'absorption d'un photon d'énergie $h\nu$ par un électron d'énergie $E_i = \frac{1}{2} m v_i^2$, faisant une transition vers l'état d'énergie $E_f = \frac{1}{2} m v_f^2$, est reliée à la section efficace d'émission d'un photon $h\nu$ par un électron d'énergie E_f [Go-2]. Par la suite, en faisant intervenir des expressions plus complexes relatives aux sections efficaces différentielles et fonctions d'onde [Ka-1], en utilisant des outils mathématiques comme la méthode de quadrature [Ca-1], nous obtenons le facteur de Gaunt par intégration du facteur de Gaunt libre-libre [Go-2] sur une distribution maxwellienne des vitesses :

$$G^{z^+} = \int g_{ff}(y, v, T) e^{-y} dy \quad \text{et} \quad y = \frac{1}{2} \frac{m_e v_f^2}{k_b T} = \frac{1}{2} \frac{m v_i^2}{k_b T} - \frac{h\nu}{k_b T} \quad (III-11)$$

avec

$$g_{ff}(v_i, v_f) = \frac{\sigma_{ff}(v_i, v)}{\sigma_{ff}^K(v_i, v)} \quad \text{et} \quad \sigma_{ff}^K = \frac{64\pi^4 m_e}{3h^6 c \sqrt{3}} \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \right)^5 \frac{z^4}{v^3 n^5} \quad (III-12)$$

où $\varepsilon_v^{ei,z^+}(T)$ correspond au coefficient d'émission dû au rayonnement de freinage électron-ion, N_e et N^{z^+} aux densités des électrons et des ions A^{z^+} , σ_{ff} à la section efficace de la transition libre-libre, σ_{ff}^K à la section efficace classique de la transition libre-libre de Kramers, g_{ff} au facteur de Gaunt libre-libre hydrogénoïde [Go-2].

Pour l'étude de notre plasma, ce facteur de Gaunt G^{z^+} est obtenu par la méthode quadratique de *Cabannes* et *Chapelle* [Ca-1] utilisant les tables de g_{ff} données par *Grant* [Gr-2].

2.2.2 – Rayonnement de freinage électron-atome neutre

Compte tenu du faible potentiel d'interaction électron-atome par rapport aux autres processus collisionnels, cette composante du rayonnement continu s'avère beaucoup moins importante que les deux précédemment étudiées que sont la recombinaison radiative et le rayonnement de freinage électron-ion.

$$A + [e^-]_{v_i} \Leftrightarrow A + [e^-]_{v_f} + h\nu \quad \text{tel que} \quad h\nu = \frac{1}{2} m_e |v_f^2 - v_i^2| \quad (III-13)$$

où V_i et V_f sont les vitesses initiale et finale de l'électron.

En utilisant la théorie semi-classique décrite par *Cabannes* et *Chapelle* [Ca-1], le coefficient d'émission spectrale ($\text{J}/\text{m}^3/\text{ster}$) s'exprime sous la forme :

$$\epsilon_v^{\text{ea}}(T) = \underbrace{\frac{32}{3c_3} \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \right) \left(\frac{k_b}{2\pi m_e} \right)^{3/2}}_{C_7} N_a N_e T^{3/2} \exp\left(-\frac{h\nu}{k_b T}\right) \times G(\nu, T) \quad (\text{III-14})$$

avec $C_7 = 3,42.E-43$ ($\text{J.m}/\text{K}^{3/2}/\text{ster}$), N_a et N_e les densités des électrons et des neutres, et $G(\nu, T)$ exprimé en m^2 et calculé par une procédure de Gauss-Laguerre intégrant la section efficace élastique totale sur une distribution maxwellienne des vitesses électroniques, tel que :

$$G(\nu, T) = \int_0^{\infty} (\sigma(x_0 + y)(x_0 + y)^2 e^{-y} dy \quad \text{et} \quad x_0 = \frac{h\nu}{k_b T} \quad (\text{III-15})$$

Les sections efficaces totales du choc élastique entre l'électron et l'hydrogène utilisées dans le calcul de ce facteur sont tirées de l'article [Ne-1].

2.3 – Contribution moléculaire à basse température.

A basse température, nous devons étudier la complexité du spectre moléculaire que nous pouvons décomposer en deux parties : la première partie formée d'un fond continu moléculaire dont l'émission est due principalement aux transitions libre-lié correspondant à la photodissociation et la photoionisation, un photon avec une énergie de plusieurs eV pouvant « casser » (dissociation) ou ioniser une molécule, la seconde représentée par des bandes moléculaires superposées au fond continu résultant des transitions entre les niveaux électroniques discrets de la molécule, phénomènes que nous avons négligés dans notre calcul.

Très souvent, nous trouvons dans la littérature des données sur le coefficient d'absorption (ou section efficace d'absorption) dans les conditions standard (20°C et 1 atmosphère) en fonction de la longueur d'onde, de la fréquence ou de l'énergie du photon. Les travaux effectués dans notre groupe [Ri-1] sur la molécule H_2 nous permettent d'utiliser ce coefficient d'absorption obtenu dans ces conditions et calculé suivant les sections efficaces de photoabsorption tirées des travaux de *Cook* [Co-3], *Mcnesky* [Mc-2] et [We-1] regroupant plusieurs sources.

Pour calculer les variations du coefficient d'absorption moléculaire en fonction de la température dans notre plasma, nous supposons que la section efficace par particule ne dépend pas de cette température. Les états excités se peuplant quand la température augmente, nous sous-estimons l'absorption continue en appliquant cette hypothèse simplificatrice :

$$\kappa_{\text{mol}}(\nu, T) = \sigma(\nu) \cdot n_{\text{H}_2}(T) \quad (\text{III-16})$$

Connaissant le coefficient d'absorption à 300K pour des fréquences données, nous pouvons en déduire :

$$\kappa_{\text{mol}}(\nu, T) = \frac{\kappa_o(\nu, 300)}{n_{\text{H}_2}(300)} \cdot n_{\text{H}_2}(T) \quad (\text{III-17})$$

2.4 – Interprétation des résultats.

Le coefficient total d'absorption continu $\kappa_{\text{abs}}^{\text{cont}}(\nu, T)$ résulte de la somme des coefficients d'absorption continus des différents processus collisionnels étudiés précédemment. L'essentiel des résultats présentés concerne le mélange 79% Ar-20% H₂-1% Cu.

2.4.1 – Variations suivant la température

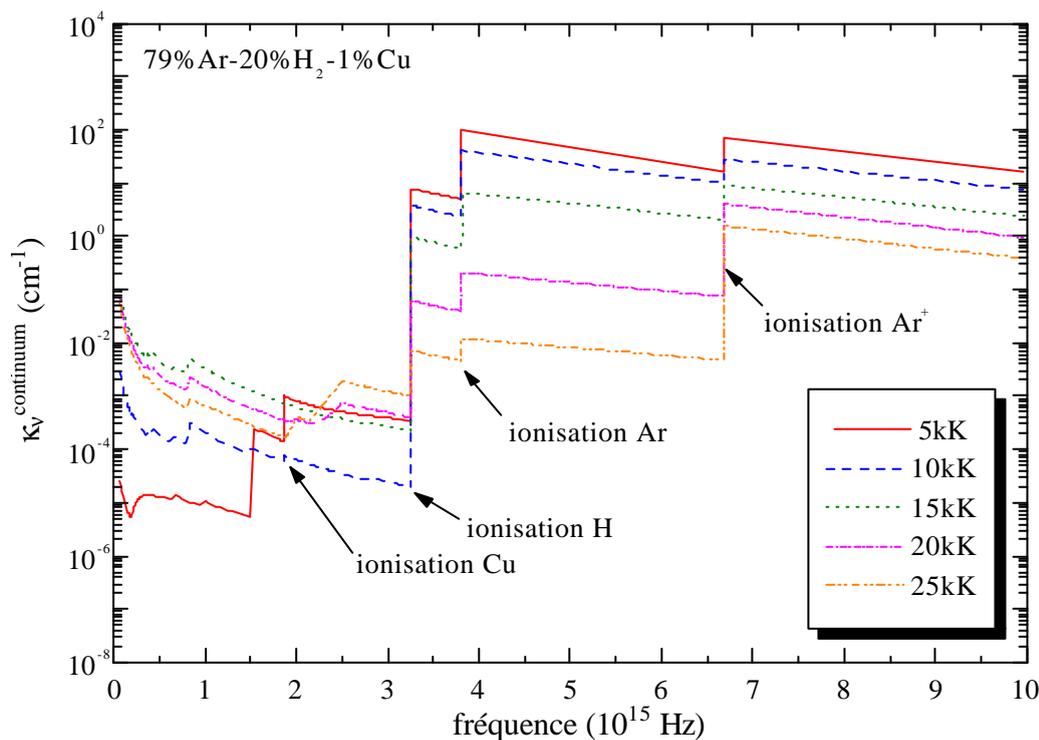


Fig.III-1: Variation du coefficient total d'absorption continu suivant la température

La **figure III-1** propose une allure générale du coefficient total d'absorption continu pour plusieurs températures (10kK, 15kK, 20kK, 25kK, et 5kK pour laquelle s'ajoute au continuum atomique le continuum moléculaire). Nous pouvons remarquer la variation de ce dernier suivant deux paramètres que sont la température et la fréquence.

En effet, pour des fréquences supérieures à $3,28E+15\text{Hz}$, celui-ci diminue quand la température augmente. La recombinaison radiative étant dominante pour cette gamme de fréquences, nous pouvons remarquer d'après les relations (III-2) et (III-4) que ce phénomène sera d'autant plus décroissant que la température sera élevée. Ce phénomène peut également s'expliquer par deux autres effets que sont la diminution des densités totales avec l'augmentation de la température (II-15) et l'absence des espèces trois fois ionisées dans nos calculs. En effet, prendre en compte l'ionisation des espèces Ar^{2+} et Cu^{2+} aurait eu pour conséquence d'augmenter le coefficient d'absorption continu dans cette région.

Concernant les variations suivant les fréquences, la **figure III-1** montre plusieurs « cassures » pour des fréquences ν_i bien définies. Afin de mieux étudier les phénomènes responsables de ces cassures, nous avons découpé notre spectre en trois parties. Dans une première zone définie pour des fréquences inférieures à $0,50E+15\text{Hz}$, le coefficient varie rapidement et de façon similaire pour les cinq températures. La zone intermédiaire comprise entre $0,50E+15\text{Hz}$ et $3,28E+15\text{Hz}$ présente des variations différentes suivant la température étudiée. Enfin, pour des fréquences supérieures à $3,28E+15\text{Hz}$, la dernière zone met en évidence plusieurs « sauts » reproduits pour des fréquences identiques quelque soit la température.

Pour chacune des zones définies précédemment et les cinq températures de la **figure III-1**, nous allons maintenant étudier l'importance de chacun des processus collisionnels sur le comportement du coefficient total d'absorption continu.

2.4.2 – Contributions des phénomènes

Nous présentons ici les coefficients d'absorption des processus collisionnels pour chaque température étudiée dans le but de mieux comprendre l'importance et l'influence de ces derniers sur le coefficient total d'absorption du continuum.

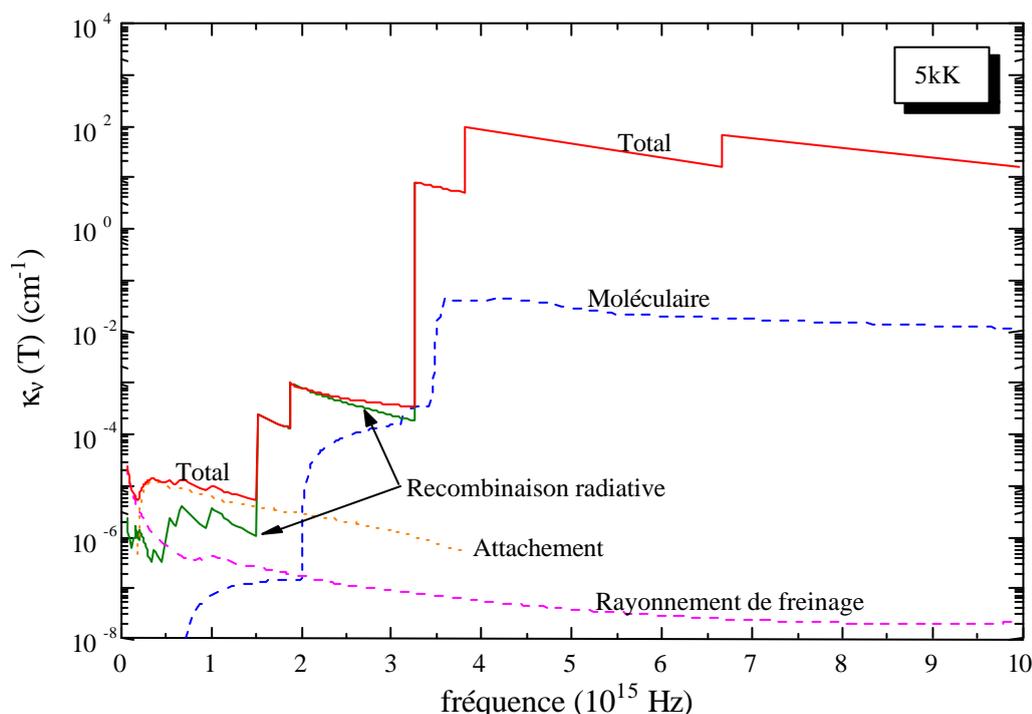


Fig.III-2: Contribution des phénomènes à 5kK

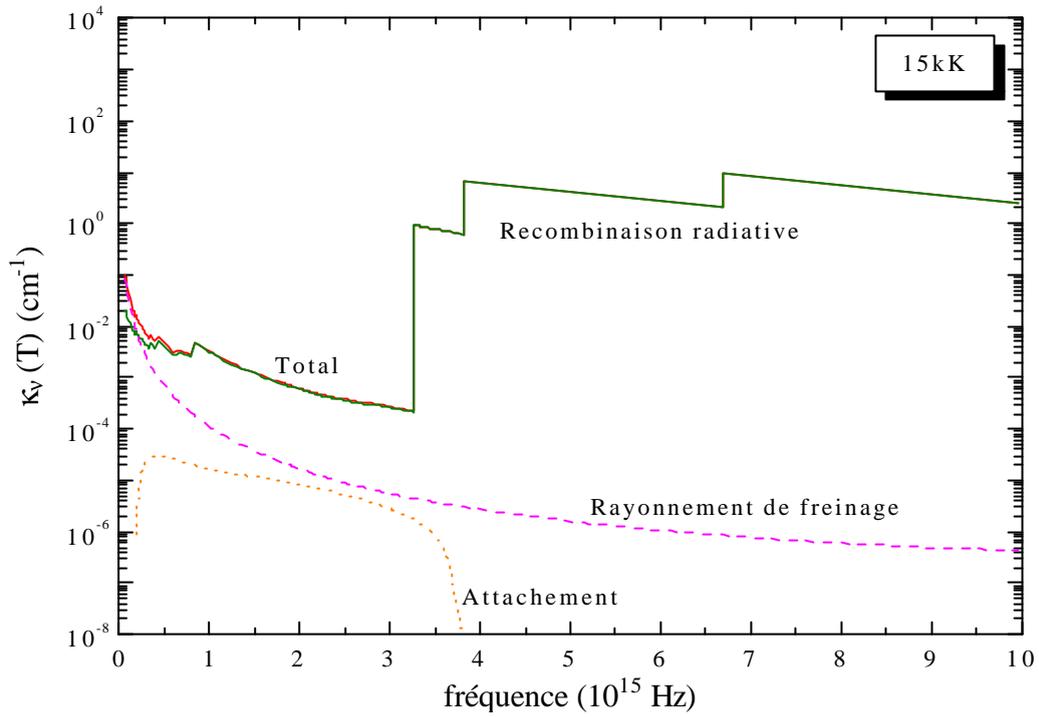


Fig.III-3: Contribution des phénomènes à 15kK

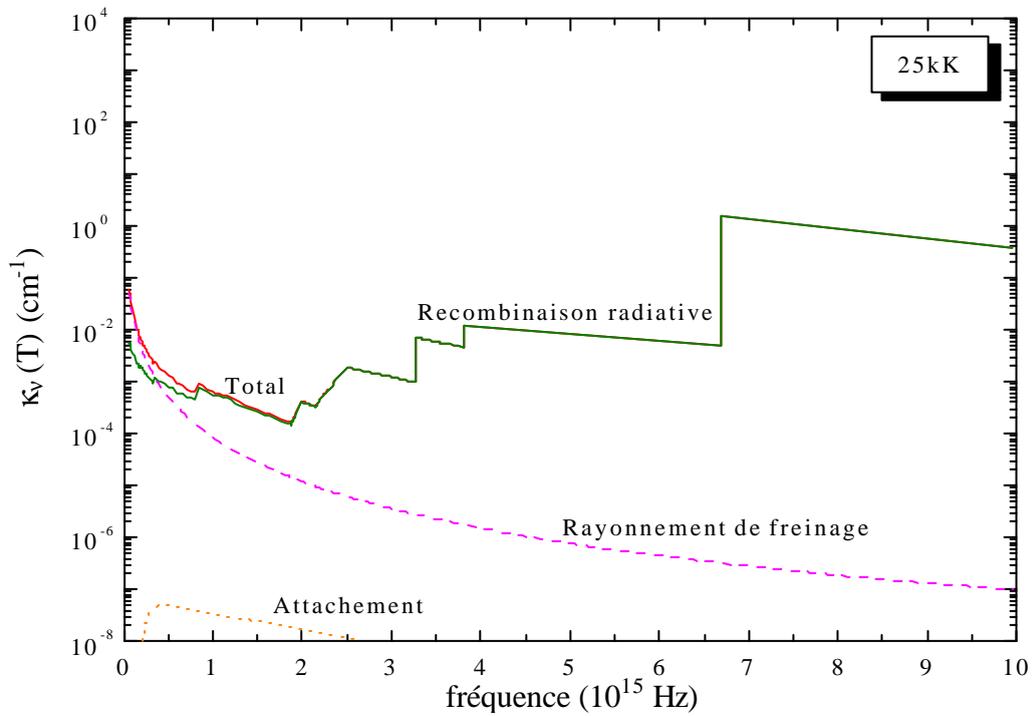


Fig.III-4: Contribution des phénomènes à 25kK.

Pour les faibles fréquences ($\mathbf{n} < 0,50E+15\text{Hz}$) le comportement des coefficients relatifs aux phénomènes collisionnels varie suivant la température. A 5000K, la **figure III-2** nous informe de l'importance des phénomènes collisionnels atomiques, le continuum moléculaire étant totalement négligeable quelle que soit la température. Pour des températures supérieures à 10000K, l'attachement radiatif devient négligeable devant le rayonnement de freinage et la recombinaison radiative qui restent les seuls mécanismes prédominants pour des températures supérieures comme le montrent les **figures III-3,4**.

Dans cette gamme de fréquences, le rayonnement de freinage peut représenter la quasi-totalité du coefficient total d'absorption. En effet ce phénomène est plus important que la recombinaison radiative quand les fréquences sont inférieures à $\sim 0,20E+15\text{Hz}$ pour une température de 5000K et $\sim 0,35E+15\text{Hz}$ pour 25000K. Dans ce cas, l'émission totale du continuum peut se calculer dans la région de l'infrarouge par l'approximation suivante:

$$\epsilon_{\nu}^{\text{continuum}}(T) \cong \epsilon_{\nu}^{\text{ea}}(T) + \epsilon_{\nu}^{\text{ei,z}^+}(T) \quad (\text{III-18})$$

Pour des fréquences intermédiaires ($0,50E+15\text{Hz} < \mathbf{n} < 3,28E+15\text{Hz}$), la contribution de chacun des phénomènes dépend de la valeur de la température pour laquelle les émissions sont calculées. En effet, pour des températures inférieures à 10000K (**fig.III-2**), l'attachement radiatif et la recombinaison radiative sont les deux phénomènes collisionnels atomiques importants auxquels s'ajoute le continuum moléculaire non négligeable dans ce domaine de fréquence. De plus, la **figure III-2** nous permet d'observer deux augmentations soudaines du coefficient total d'absorption dues à la recombinaison radiative. Le deuxième « saut » situé pour une fréquence de $1,86E+15\text{Hz}$ correspond à l'énergie d'ionisation du cuivre (§2.4.3). Pour des températures supérieures (**fig.III-3,4**), les densités des ions négatifs (H^- et Cu^-) et des neutres (Ar , H , Cu) diminuant, l'attachement radiatif et le rayonnement de freinage perdent progressivement de l'importance contrairement au phénomène de recombinaison radiative devenant le principal phénomène collisionnel avec plus de 80% du coefficient total d'absorption du continuum pour une fréquence de $1,00E+15\text{Hz}$.

Enfin pour des fréquences plus élevées ($\mathbf{n} > 3,28E+15\text{Hz}$), le rayonnement de freinage devient négligeable. Le coefficient total d'absorption du continuum résulte essentiellement de l'émission de la recombinaison radiative et du coefficient d'absorption moléculaire quand celui-ci est pris en compte (**fig.III-2**) et ceci quelle que soit la température (**fig.III-3,4**). De plus, dès cette fréquence seuil de $3,28E+15\text{Hz}$, nous pouvons remarquer plusieurs « sauts » reproduits aux mêmes fréquences et pour les cinq températures étudiées. Ces variations rapides du coefficient total d'absorption sont donc issues de la recombinaison radiative et par conséquent des phénomènes d'ionisation et de dissociation comme nous le verrons dans le paragraphe suivant (§2.4.3). Dans la région de l'ultraviolet, l'émission totale du continuum peut donc s'écrire approximativement sous la forme :

$$\epsilon_{\nu}^{\text{continuum}}(T) \cong \epsilon_{\nu}^{\text{rec}}(T) \quad (\text{III-19})$$

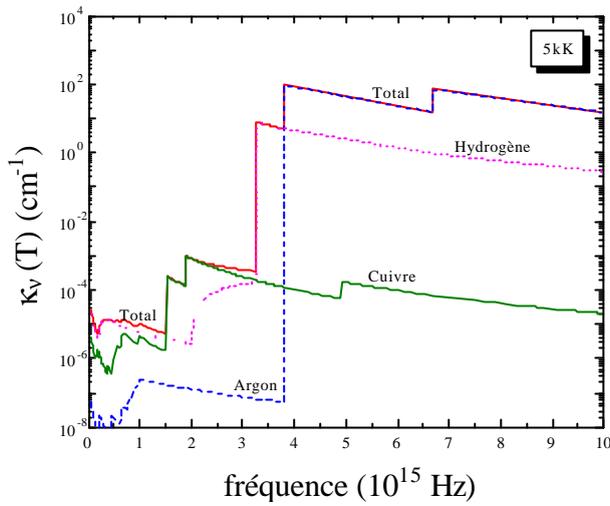


Fig.III-5: Contribution des espèces à 5kK.

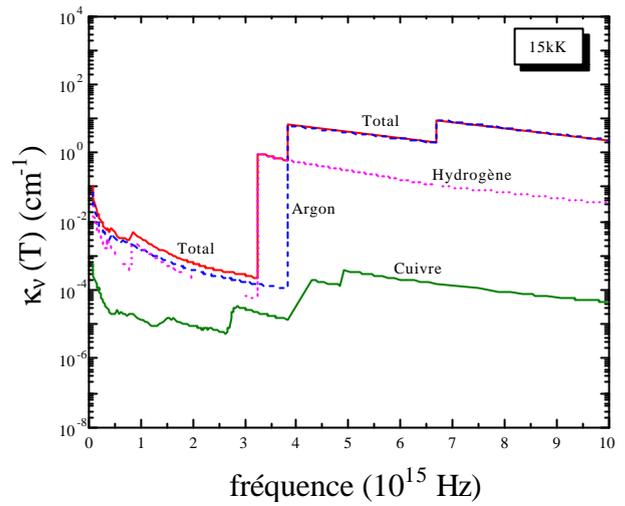


Fig.III-6: Contribution des espèces à 15kK.

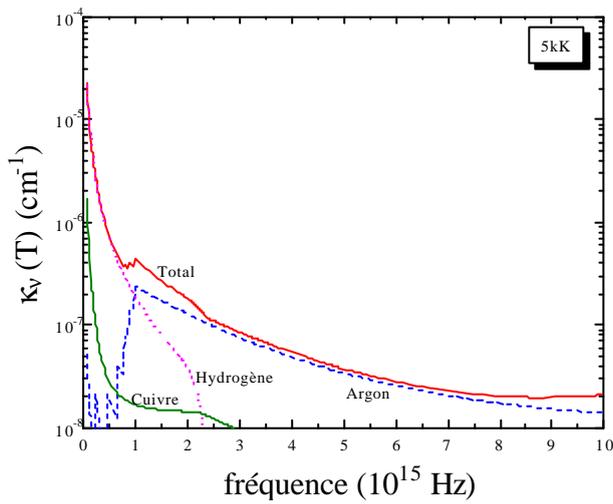


Fig.III-7: Rayonnement de freinage à 5kK.

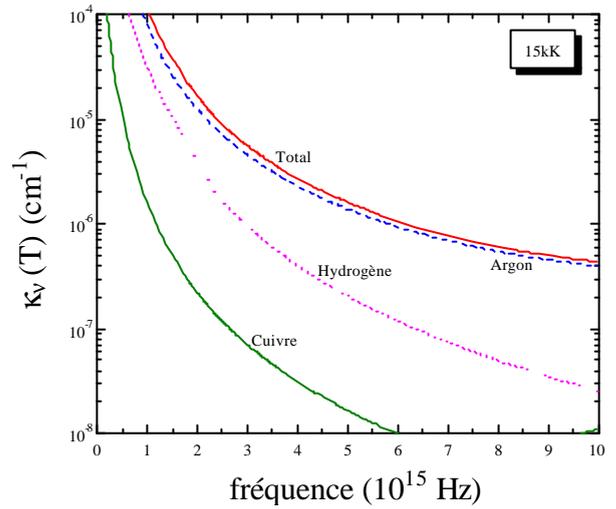


Fig.III-8: Rayonnement de freinage à 15kK

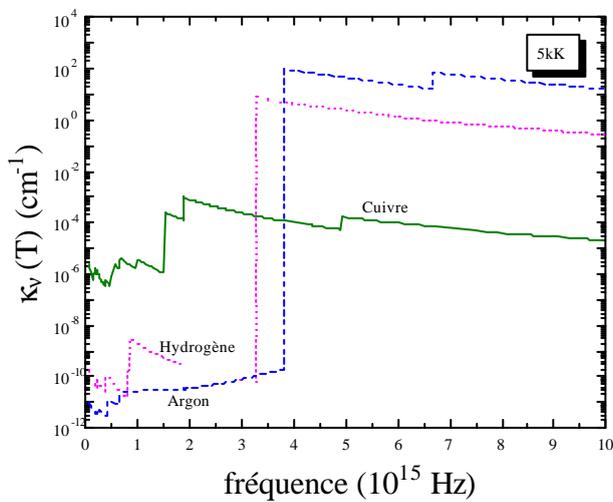


Fig.III-9: Recombinaison radiative à 5kK.

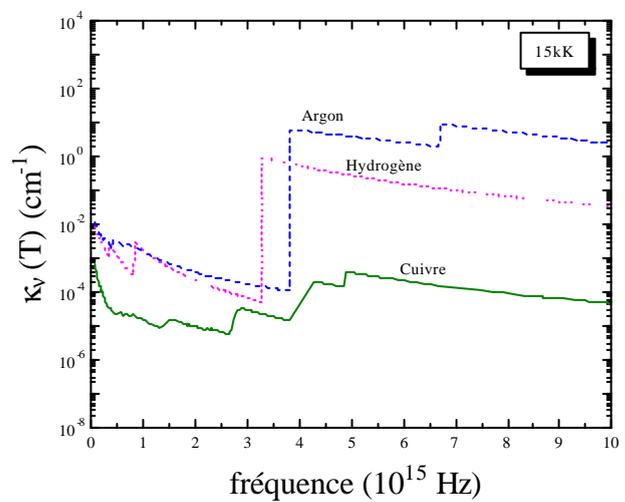


Fig.III-10: Recombinaison radiative à 15kK.

2.4.3 – Contributions des espèces

D'après les résultats présentés précédemment, nous savons quels sont les processus collisionnels responsables des variations du coefficient total d'absorption continu suivant les fréquences et les températures. Les émissions de ces processus étant fonction de la composition du plasma, nous comparons maintenant sur les *figures III-5 à III-10* l'influence du cuivre, de l'hydrogène et de l'argon sur le coefficient d'absorption total pour deux températures caractéristiques d'un milieu constitué essentiellement d'espèces neutres et moléculaires (5000K), puis d'espèces neutres et chargées (15000K). Notons que le nom des espèces utilisés dans les figures suivantes regroupent de façon générale les espèces neutres, ionisées et moléculaires que l'on retrouve dans le *tableau III-1*. Ces résultats nous permettent également d'étudier plus particulièrement les « sauts » issus de la recombinaison radiative et d'en déduire les espèces responsables ainsi que la nature de la réaction. En comparaison avec le *tableau II-1* du second chapitre contenant les énergies de réaction de chaque espèce, nous pouvons en déduire que ces « sauts » correspondent aux seuils de photodissociation (pour les molécules) et de photoionisation (atomes) dont les fréquences sont indiquées dans le *tableau III-1*. Dans ce cas, toute absorption d'un photon ayant une énergie supérieure à l'énergie définie par la fréquence seuil ν_i peut provoquer la dissociation ou l'ionisation de l'espèce i considérée.

Tableau III-1 : Seuils de photodissociation ou de photoionisation des espèces

Espèces	Energie d'ionisation (\mathcal{S}) ou de dissociation (\mathcal{a}) (cm^{-1})	Longueur d'onde (Å)	Fréquence (Hz)
Ar	127109,900 (1) (♣)	786,720	3,8106E+15
Ar ⁺	222820,000 (1) (♣)	448,790	6,6799E+15
Ar ²⁺	329965,800 (1) (♣)	303,060	9,8921E+15
H	109678,758 (♣)	911,753	3,2880E+15
H ₂	36120,345 (♠)	2768,522	1,0820E+15
Cu	62317,200 (♣)	1604,690	1,8682E+15
Cu ⁺	163665,600 (♣)	611,002	4,9065E+15
Cu ²⁺	297100,000 (♣)	336,58	8,9068E+15

III – MECANISMES D'ELARGISSEMENT D'UNE RAIE.

Suivant une certaine probabilité, le passage d'un électron excité d'un niveau d'énergie ε_i vers un niveau inférieur ε_j engendre l'émission d'un photon d'énergie $h\nu_{ij}$ où ν_{ij} est la fréquence de la transition. En théorie, le profil de la raie caractéristique de la transition se traduit par un pic de Dirac en ν_{ij} . Cependant, au niveau expérimental, le profil enregistré présente une largeur $\Delta\nu$ s'expliquant par l'intervention de phénomènes optiques (diffraction, largeur des fentes non nulle) ou par un élargissement réel de la raie (*fig.III-11*). Dépendant des propriétés de

l'atome émetteur, des propriétés du milieu au voisinage de l'atome émetteur et de la fréquence, le profil de raie est la conséquence des phénomènes d'élargissement.

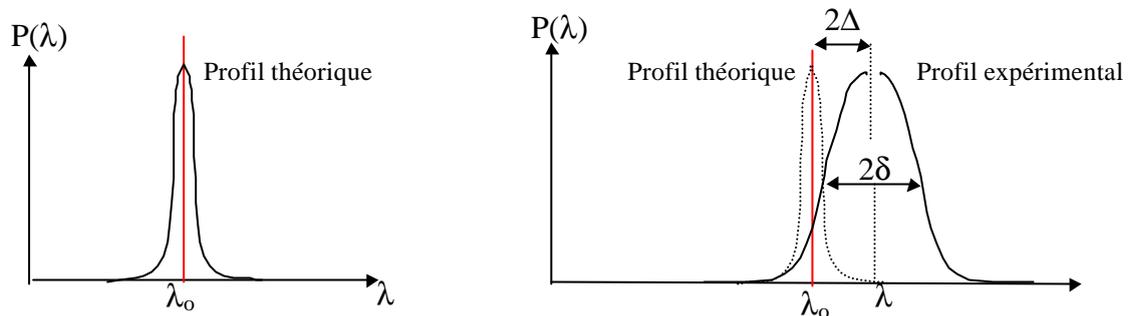


Fig.III-11: Déplacement et élargissement d'une raie

Pour N_i atomes situés sur le niveau excité i à l'instant t , le nombre d'atome passant de l'état i à l'état j par seconde est défini par $N_{i \rightarrow j} = A_{ij} N_i$. Le coefficient d'émission spectrale de cette raie s'écrit alors :

$$\epsilon_{ij}(\nu) = \left(\frac{h\nu}{4\pi} \right) A_{ij} N_i P_{ij}(\nu) \quad (III-20)$$

avec A_{ij} la probabilité d'émission spontanée tirée de la littérature [Mo-4] [Ku-2] [Ni-1], N_i la densité d'atome dans l'état excité i et $P_{ij}(\nu)$ le profil de la raie vérifiant :

$$\int P_{ij}(\nu) \cdot d\nu = 1 \quad (III-21)$$

La forme du profil de la raie a une forte influence sur le transfert radiatif de cette raie. Nous allons présenter successivement les phénomènes responsables des élargissements (§III-3.1), puis les expressions mathématiques des élargissements et de l'épaisseur optique (§III-3.2) et enfin nous introduirons le facteur de fuite au §III-3.3.

3.1 – Types d'élargissements

Dans le cas de plasmas thermiques, les trois principaux élargissements sont principalement provoqués par effet Doppler (agitation thermique) ou par les différents effets de Pression (interaction des particules environnantes incluant l'effet Stark), les autres comme l'élargissement naturel étant considérés comme négligeables.

3.1.1 - Elargissement Doppler

Dans un plasma supposé au repos, les atomes émetteurs qui le composent sont en mouvement, contribuant à l'élargissement des raies par agitation thermique. Pour une raie émise à la longueur d'onde λ_0 , le phénomène d'effet Doppler est dû à la vitesse relative de ces atomes émetteurs par rapport à un observateur. Le profil de la raie est un profil gaussien dont la largeur à mi-hauteur est plus importante pour les éléments légers et des températures élevées [Tr-2]. Enfin, l'effet Doppler n'engendre pas de déplacement du centre de la raie.

3.1.2 – Elargissement de Pression

Dans un plasma, les niveaux des atomes ou des ions sont soumis à des perturbations momentanées dues aux autres particules. L'élargissement de pression, dont le profil est lorentzien [Tr-2], est dû à l'interaction d'un atome émetteur avec les particules environnantes appelées perturbateurs (atomes, ions, électrons). Cette interaction provoque un élargissement et un déplacement de la raie responsable du phénomène de chevauchement des raies. Plus il y a de perturbateurs, plus la pression est élevée et plus cet effet prédomine. En conséquence, l'interprétation de l'élargissement de pression dépend de la distance entre les deux atomes et de la nature des perturbateurs, ceci nous conduisant à deux théories : l'approximation des impacts et l'approximation quasi-statique.

- Si l'on considère que les perturbateurs sont des électrons et par conséquent que le temps entre deux collisions est plus grand que la durée des collisions, que l'effet moyen des collisions est un effet faible, l'approximation des impacts est alors valable [Sa-3]. Cette approche fut tout d'abord étudiée par Lorentz assimilant l'atome à un oscillateur, puis Weisskopf introduisit une approche ondulatoire dans laquelle intervient une modification de la phase de l'onde associée au cours de la collision de deux atomes.
- Par contre, pour les ions, le temps entre deux chocs devient court, les densités deviennent importantes et les énergies faibles (durée de collision augmente), l'approximation des impacts n'est plus applicable. La vitesse des ions étant beaucoup plus faible que celle des électrons, la perturbation est considérée comme constante dans le temps et l'approximation quasi-statique devient valable [Ra-2].

Les élargissements de pression rencontrés dans les plasmas thermiques sont généralement l'élargissement de Van Der Waals, l'élargissement de résonance et l'élargissement Stark bien que ce dernier ne soit pas forcément du aux effets de pression mais à l'intervention d'un champ électrique issu des particules chargées et provoquant l'élargissement des niveaux d'énergie de l'atome émetteur.

3.1.3 – Elargissement Stark

L'interaction entre le champs électrique crée par les particules chargées et l'atome émetteur provoque un élargissement des niveaux d'énergie de l'atome. Le potentiel résultant de cette interaction particules-atomes dépend de la nature de l'atome émetteur.

Pour les atomes d'argon et de cuivre, le déplacement des niveaux d'énergie est proportionnel au carré de l'intensité de la force créée par le champ électrique [Ra-2]. Le potentiel d'interaction existe sous deux formes : quadripolaire en \bar{r}^3 [Sa-2][Sa-3][Sa-1] et dipolaire quadratique en \bar{r}^4 [Gr-6]. La vitesse des électrons étant plus importante que celle des ions, leur comportement vis à vis de l'émetteur et l'élargissement des raies émises par les atomes sont plus difficiles à analyser. L'effet des ions étant souvent faible devant celui des électrons, le profil résultant est de type symétrique et Lorentzien. **Griem** prend en considération l'effet de ces ions en y ajoutant un terme correctif [Gr-6]. Pour pouvoir utiliser ces relations, il nous

faut cependant respecter certaines limites de validité étudiées par **Rahmani** [Ra-1]. En tenant compte des deux types d'élargissement Stark et des différentes espèces présentes dans le milieu, les expressions des largeurs à mi-hauteur et des déplacements sont obtenues par l'approximation des impacts pour les électrons et l'approximation quasi-statique pour les ions [Tr-2].

Pour l'hydrogène, la dégénérescence des niveaux $g_n=2n^2$ (n nombre quantique principal) et la permutation mutuelle des états ayant la même valeur n et des valeurs différentes de ℓ (nombre quantique orbital) provoquent un déplacement des niveaux d'énergie. Les profils des raies d'hydrogène sont bien décrits par les calculs de **Kepple et Griem** [Ke-1][Gr-6] dont l'élargissement dû essentiellement aux ions se fait par effet Stark quadratique ou quadrupolaire [Ra-2]. Son expression analytique n'est plus du type Lorentzien mais plus complexe lorsque la dynamique des ions est prise en compte. Plusieurs études ont été faites sur celle-ci et différentes approches ont été abordées dont voici quelques unes des plus connues :

<i>Approche Utilisée</i>	<i>Observations</i>	<i>Références</i>
Théorie des micro-champs	Prise en compte de la dynamique des ions et de la rotation du champ ionique dans le profil global	[Se-1][Bo-1] [De-1]
Théorie d'impact généralisée Théorie « unifiée »	Meilleurs calculs des profils d'hydrogène	[Ke-1][Sm-3] [Vi-1-4][Vo-1]

Le profil normalisé et utilisé dans notre calcul est déduit des travaux de **Vidal et al** [Vi-1-4] qui s'appuient sur la théorie unifiée et l'application de l'approximation des impacts au centre de la raie et de l'approximation quasi-statique dans les ailes.

3.1.4 – Elargissement de Van Der Waals.

Le potentiel d'interaction est de la forme C_6/r^6 où r représente la distance entre l'atome émetteur et le perturbateur (atome neutre de nature identique ou différente si le niveau supérieur de l'émetteur n'est pas lié au fondamental) et C_6 la constante d'interaction de Van Der Waals obtenue des expressions de [Ka-2]. Pour le plasma Ar/H₂/Cu que nous étudions, seules les espèces argon et cuivre ont été prises en compte dans le calcul de C_6 , les raies d'hydrogène étant fortement élargies par effet Stark et Doppler. Pour un tel élargissement, le profil est de type Lorentzien dont la largeur à mi-hauteur et le déplacement sont donnés par l'approximation des impacts [Ra-2]. Notons que l'interaction de Van Der Waals traitée dans le cas de l'approximation quasi-statique conduit au profil de Holtzmark [Li-1].

3.1.5 – Elargissement de résonance

Lorsque le potentiel d'interaction se comporte en C_3/r^3 , et que le niveau supérieur de la raie émise est couplé au fondamental, l'élargissement est dit de résonance. Contrairement à

l'élargissement Stark, celui-ci n'entraîne aucun déplacement du centre de la raie. Le profil est Lorentzien et la largeur à mi-hauteur est donnée par [Ra-2].

3.1.6 – Profil total d'élargissement

Dans les plasmas thermiques, le profil total résulte de la convolution des élargissements dus aux effets de pression (Lorentzien) et à l'effet Doppler. En considérant les processus indépendants les uns des autres, le profil obtenu est un profil de Voigt [Ra-2] que nous devons considérer dans les expressions (I-3) et (I-5) calculant le coefficient d'absorption et d'émission.

3.2 – Epaisseur optique

Dans l'équation du transfert radiatif (I-9), il est d'usage d'introduire de nouvelles grandeurs que sont l'épaisseur optique τ_ν et la fonction source S_ν telles que l'équation s'écrive sous la forme :

$$\frac{dL_\nu(x)}{d\tau_\nu(x)} = S_\nu(x) - L_\nu(x) \quad \text{avec} \quad \begin{cases} S_\nu(x) = \frac{\epsilon_\nu(x)}{\kappa'_\nu(x)} \\ d\tau_\nu(x) = \kappa'_\nu(x) dx \end{cases} \quad (III-22)$$

Pour une raie étudiée suivant un trajet dans un plasma, l'épaisseur optique s'exprime en fonction des sections efficaces moyennes d'absorption photoniques $\overline{\sigma}_{hb}(\nu)$ définies à la fréquence ν , de la densité moyenne des atomes du niveau excité \bar{n} , et de l'épaisseur du plasma ℓ :

$$\tau_\nu^{hb} = \overline{\sigma}_{hb}(\nu) \cdot \bar{n} \cdot \ell \quad (III-23)$$

D'après la relation de Ladenburg [Tr-2], nous pouvons écrire :

$$\overline{\sigma}_{hb}(\nu) \cdot d\nu = \sigma_{hb} \cdot P_{hb}(\nu) \cdot d\nu \quad \text{avec} \quad \sigma_{hb} = \frac{\pi e_o^2}{m_e c} f_{hb} \quad \text{et} \quad \int P_{hb}(\nu) d\nu = 1 \quad (III-24)$$

Par conséquent, dans le cas d'un plasma homogène et isotrope de dimension R_p , l'épaisseur optique τ_o calculée au centre de la raie peut se mettre sous la forme suivante :

$$\tau_o = \tau_{\nu_o} = \kappa_{\nu_o}^{abs}(T) \cdot R_p = \frac{\pi e_o^2}{m_e c} \bar{n} \cdot f_{hb} \cdot R_p \cdot P_{hb}(\nu_o) \quad (III-25)$$

Dans un domaine spectral où l'absorption est très faible, nous pouvons supposer τ_o nulle. Le milieu est alors dit transparent, simplifiant considérablement le calcul de la divergence du flux radiatif. Pour la suite de notre étude, les profils d'élargissement, les épaisseurs optiques et les facteurs de fuite sont donnés pour une transition d'un niveau haut h vers un niveau bas b .

3.2.1 – Cas d'un profil Gaussien (Doppler)

Supposons un profil de type Doppler $P_d(v)$ centré en v_o , de largeur à mi-hauteur δ_d telle que $\delta_d = 2\Delta v_d \sqrt{\ln 2}$ avec Δv_d la largeur caractéristique Doppler. En posant $\Delta v = (v - v_o)$, le profil considéré s'écrit d'après la relation (III-26).

$$P_d(\lambda) = \frac{1}{\sqrt{\pi}\Delta\lambda_d} \exp\left(-\frac{\Delta\lambda}{\Delta\lambda_d}\right)^2 \quad (III-26)$$

A partir des deux relations (III-25) et (III-26), nous obtenons l'épaisseur optique au centre de la raie ($\Delta v=0$) pour un profil Doppler soit :

$$\tau_{hb}^{\text{Doppler}}(\delta_d) = \sqrt{\pi} \frac{e_o^2}{m_e c} \frac{\overline{n_b \cdot f_{hb}}}{\Delta v_d} \cdot R_p = \sqrt{\pi} \frac{e_o^2}{m_e c} \frac{\overline{n_b \cdot f_{hb}}}{\delta_d} \cdot 2\sqrt{\ln 2} \cdot R_p \quad (III-27)$$

Nous rappelons que $P(v)dv = P(\lambda)d\lambda$. Par conséquent, l'expression en longueur d'onde de l'épaisseur optique se voit multipliée d'un facteur λ^2/c , le terme e_o^2 représentant ici ($e^2/4\pi\epsilon_o$) dans les unités S.I.

3.2.2 – Cas d'un profil Lorentzien

Soit un profil de Lorentz $P^L(v)$ centré en v_o . En posant $\Delta v = (v - v_o)$ et $a_{hb} = \frac{\delta_L}{2}$ la demi largeur à mi-hauteur, le profil s'écrit :

$$P^L(v) = \frac{1}{\pi} \cdot \frac{a_{hb}}{a_{hb}^2 + (\Delta v)^2} \quad (III-28)$$

Au centre de la raie ($\Delta v=0$), l'épaisseur optique se met donc sous la forme :

$$\tau_{hb}^{\text{Lorentz}}(\delta_L) = \sqrt{\pi} \frac{e_o^2}{m_e c} \frac{\overline{n_b \cdot f_{hb}}}{a_{hb}} \cdot R_p = 2\sqrt{\pi} \frac{e_o^2}{m_e c} \frac{\overline{n_b \cdot f_{hb}}}{\delta_L} \cdot R_p \quad (III-29)$$

Notons que la remarque faite sur le passage en longueur d'onde dans le cas d'un profil Doppler est également valable dans ce cas.

3.2.3 – Cas d'un profil de Voigt

Le calcul de l'épaisseur optique dans le cas d'un profil de Voigt centré en v_o est plus délicat. Ce profil résulte de la convolution des deux profils issus des deux mécanismes d'élargissements indépendant (Doppler et Lorentz). L'expression du profil fait donc intervenir une intégrale qui se résout de façon numérique (*annexe A6*). A partir des formules de convolution, le profil de Voigt $P^V(v)$ s'écrit :

$$P^v(v) = \frac{a_{hb}}{\pi\sqrt{\pi}\Delta v_D} \int \frac{\exp\left[-\left(\frac{y}{\Delta v_D}\right)^2\right]}{a_{hb}^2 + (y - \Delta v)^2} dy \quad \text{avec} \quad \begin{cases} \Delta v = v - v_o \\ a_{hb} = \frac{\delta_L}{2} \\ \Delta v_D = \frac{\delta_D}{2\sqrt{\ln 2}} \end{cases} \quad (III-30)$$

A partir des expressions (III-25) et (III-30), l'épaisseur optique s'écrit pour ($v=v_o$) :

$$\tau_{hb}^{\text{Voigt}}(\delta_L, \delta_D) = \frac{e_o^2}{\sqrt{\pi}m_e c} \bar{n} \cdot f_{hb} \cdot R_p \cdot \frac{\alpha_{hb}}{\Delta v_D} \int \frac{\exp(-b^2)}{\alpha_{hb}^2 + b^2} db \quad \text{avec} \quad \begin{cases} \alpha_{hb} = \frac{a_{hb}}{\Delta v_D} = \sqrt{\ln 2} \frac{\delta_L}{\delta_D} \\ b = \frac{y}{\Delta v_D} = \frac{2\sqrt{\ln 2}}{\delta_D} y \end{cases} \quad (III-31)$$

3.3 – Facteur de fuite

Ce facteur de fuite Λ_r représente le rapport entre le flux du rayonnement sortant dans les conditions réelles et le flux qui sortirait sans absorption. Avec τ_o et $P(v_o)$ l'épaisseur optique monochromatique et la valeur du profil au centre de la raie, $P_r(v)$ le profil normalisé de la raie, Λ_r s'exprime sous la forme [Dr-1] :

$$\Lambda_r = \int_0^{\infty} P_r(v) \exp\left(-\bar{n} \cdot P(v) \cdot \sigma_{hb} \cdot R_p\right) dv \quad (III-32)$$

Soit d'après l'expression (III-24) :

$$\Lambda_r = \int_0^{\infty} P(v) \exp\left(-\frac{\tau_o P(v)}{P(v_o)}\right) dv \quad (III-33)$$

Drawin [Dr-1] montre que l'introduction de ce facteur dans la méthode de calcul du coefficient d'émission nette (cf Ch.IV) diminue fortement le temps de calcul. Cependant, utiliser cette approximation revient à négliger le chevauchement des raies en les traitant séparément. Ceci nous conduit alors à surestimer le coefficient d'émission nette dont les valeurs sont toutefois acceptables compte tenu de la précision générale de la méthode. En milieu homogène et isotherme, ce facteur de fuite dépend seulement de l'épaisseur optique au centre de la raie τ_o lorsque le profil $P(v)$ caractéristique de la raie est du type Lorentzien ou Gaussien. Pour un profil de Voigt, Λ_r dépend à la fois de τ_o et du rapport des élargissements Lorentzien et Gaussien. La tabulation par **Drawin** [Dr-1] de ce facteur Λ_r permet donc de calculer rapidement l'émission nette tout en gardant la complexité du spectre et la nature du plasma. Ces valeurs ont été complétées et corrigées par les travaux de **Rahmani** [Ra-1] et **Liani** [Li-1]. Nous précisons cependant qu'il existe quelques erreurs dans ces tables. Nous avons par conséquent calculé de nouveau le facteur de fuite dans le cas du profil de Voigt et discuté les approximations proposées par **Drawin** [Dr-1] dans le cas des profils Lorentzien, Gaussien et de Voigt.

En posant $\Delta v=(v-v_0)$, l'introduction de l'expression du profil (Doppler, Lorentz ou Voigt) dans la relation (III-33) nous permet de calculer le facteur de fuite correspondant dont l'expression dépend du profil considéré. Pour cela, nous avons eu recours à différentes méthodes d'intégration, la méthode des trapèzes étant celle nous paraissant la mieux adaptée pour ce type de calcul. L'annexe A6 nous permet de justifier ce choix en présentant les dangers et les avantages de chacune des méthodes testées.

3.3.1 – Cas d'un profil Gaussien

Nous avons calculé le facteur de fuite d'une raie élargie selon un profil Doppler à partir de l'intégrale (III-36). Pour des valeurs d'épaisseurs optiques τ_{hb} comprises entre 0.1 et 100, les résultats sont en parfait accord avec ceux publiés par Drawin. Toutefois, pour des valeurs d'épaisseurs optiques τ_{hb} supérieures à 100, nous avons constaté une légère différence entre nos récentes données et celles anciennement utilisées dans notre groupe et calculées par l'approximation :

$$\Lambda_{hb}^G(\tau_{hb}^G) = \frac{1.6}{\tau_{hb}^G (\pi \ln \tau_{hb}^G)^{1/2}} \quad (III-34)$$

En effet, la relation (III-34) entraîne une discontinuité du facteur de fuite entre les $\tau_{hb} < 100$ et les τ_{hb} supérieures, « cassure » qui se répercute finalement sur le coefficient d'émission nette de la raie.

Pour simplifier les temps de calcul, Drawin propose l'approximation (III-37) permettant de calculer le facteur de fuite pour des τ_{hb} compris entre 0.1 et 10000. Cependant, l'utilisation de cette approximation pour des $\tau_{hb} < 1$ entraîne une erreur d'environ 5% sur les résultats finals contrairement aux valeurs obtenues pour des $\tau_{hb} > 100$ où la comparaison avec nos calculs est satisfaisante. En conclusion, nous avons calculé le facteur de fuite Λ_{hb}^G suivant (III-36) pour des épaisseurs optiques $\tau_{hb} \leq 100$ et suivant (III-37) pour des τ_{hb} supérieures comme nous le récapitule le tableau III-2. Nous comparons en annexe A7 nos résultats aux valeurs proposées par Drawin.

Tableau III-2 : Facteur de fuite pour un profil Gaussien.

$\tau_{hb}^G < 0.1$	$\Lambda_{hb}^G = 1. \quad (III-35)$
$0.1 \leq \tau_{hb}^G \leq 100.$	$\Lambda_{hb}^G(\delta_D, \tau_{hb}^G) = \frac{1}{\sqrt{\pi} \Delta v_D} \int_0^\infty \exp\left[-\left(\frac{\Delta v}{\Delta v_D}\right)^2\right] \cdot \exp\left[-\tau_{hb}^G \exp\left(-\left(\frac{\Delta v}{\Delta v_D}\right)^2\right)\right] \cdot dv \quad (III-36)$
$\tau_{hb}^G > 100.$	$\Lambda_{hb}^G(\tau_{hb}^G) = \frac{1 + \frac{\tau_{hb}^G}{2 + (\tau_{hb}^G)^2}}{1 + \tau_{hb}^G [\pi \ln(1 + \tau_{hb}^G)]^{1/2}} \quad (III-37)$

3.3.2 – Cas d'un profil Lorentzien

Le facteur de fuite d'une raie élargie selon un profil Lorentzien est obtenu par la relation d'intégration (III-40). Les précédents calculs effectués dans notre groupe utilisait la relation (III-38) donnée par Drawin et s'écrivant de la façon suivante :

$$\Lambda_{hb}^L(\delta_L, \tau_{hb}^L) = \frac{1.115}{(\pi \tau_{hb}^L)^{1/2}} \quad (III-38)$$

Or nous avons pu remarquer les mêmes conséquences que dans le cas du facteur de fuite pour un profil Doppler, à savoir une discontinuité entre les valeurs calculées pour des épaisseurs optiques $\tau_{hb} \leq 100$ et des τ_{hb} supérieures que ne présentent pas nos résultats obtenus par l'intégration directe de la relation (III-40). Drawin propose de calculer le facteur de fuite Λ_{hb}^L pour des épaisseurs optiques τ_{hb} comprises entre 0.1 et 1000 à partir de l'approximation (III-38). Comme dans le cas d'un profil Doppler, cette approximation entraîne des erreurs sur les valeurs pour des $\tau_{hb} < 1$, tandis que nos résultats sont en parfait accord pour des $\tau_{hb} > 100$. Nous avons donc calculé le facteur de fuite à partir de la relation (III-40) pour des épaisseurs optiques $\tau_{hb} \leq 100$ et la relation (III-41) pour des τ_{hb} supérieures afin d'optimiser le temps de calcul. Nous récapitulons dans le *tableau III-3* les expressions considérées pour le calcul de Λ_{hb}^L . Les valeurs numériques sont quant à elles comparées en *annexe A7*.

Tableau III-3 : Facteur de fuite pour un profil de Lorentz.

$\tau_{hb}^L < 0.1$	$\Lambda_{hb}^G = 1. \quad (III-39)$
$0.1 \leq \tau_{hb}^L \leq 100.$	$\Lambda_{hb}^L(\delta_L, \tau_{hb}^L) = \frac{1}{\pi} \int_0^\infty \frac{a_{hb}}{a_{hb}^2 + (\Delta v)^2} \exp \left[-\tau_{hb}^L \cdot \frac{a_{hb}^2}{a_{hb}^2 + (\Delta v)^2} \right] \cdot dv \quad (III-40)$
$\tau_{hb}^L > 100.$	$\Lambda_{hb}^L(\tau_{hb}^L) = \frac{1 + \frac{\tau_{hb}^L}{2 + (\tau_{hb}^L)^2}}{1 + (\pi \tau_{hb}^L)^{1/2}} \quad (III-41)$

3.3.3– Cas d'un profil de Voigt

La calcul de du facteur de fuite d'une raie élargie selon un profil de Voigt a fait l'objet de nombreuses études dans notre groupe. Pour des valeurs α comprises entre 0.5 et 100 ainsi que des épaisseurs optiques τ_{hb} comprises entre 3.E-01 et 1.E+02, la comparaison des résultats de **Liani** [Li-1] et des données publiées par Drawin est satisfaisante. Pour des $\alpha > 0.5$, Drawin suppose que le facteur de fuite Λ_{hb}^V équivaut au facteur de fuite Lorentzien Λ_{hb}^L . Les anciens travaux de notre groupe montrant qu'une valeur limite $\alpha=100$ étant plus juste pour appliquer cette équivalence, nous avons gardée celle-ci pour nos calculs. Par contre, Liani prend comme

valeur inférieure $\alpha_{\min}=1.E-03$ en dessous de laquelle il considère $\Lambda_{hb}^V \equiv \Lambda_{hb}^D$ alors que Drawin propose une valeur $\alpha_{\min}=1.E-04$ qui semble plus correcte. Nous avons donc calculé Λ_{hb}^V à partir des relations indiquées dans le *tableau III-4*, les valeurs numériques pour des α allant de $1.E-04$ à 100 et des τ_{hb} comprises entre $1.E-04$ et $1.E+06$ étant reportés en *annexe A7*.

Tableau III-4 : Facteur de fuite pour un profil de Voigt.

$\alpha < 1.0E-04$	$\Lambda_{hb}^V \equiv \Lambda_{hb}^G \quad (III-42)$
$1.0E-04 \leq \alpha \leq 100.$	$\Lambda_{hb}^V(\alpha_{hb}, \tau_{hb}^V) = \frac{\alpha_{hb}}{\pi\sqrt{\pi}} \int_0^{\infty} \left(\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\exp(-b^2)}{\alpha_{hb}^2 + (b-x)^2} db \right) \cdot \exp \left[-\tau_{hb}^V \frac{\left(\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\exp(-b^2)}{\alpha_{hb}^2 + (b-x)^2} db \right)}{\left(\int_{-\infty}^{+\infty} \exp(-b^2) db \right)} \right] \cdot dx \quad (III-43)$
$\alpha > 100.$	$\Lambda_{hb}^V \equiv \Lambda_{hb}^L \quad (III-44)$

La *figure III-12* nous montre l'influence du choix de la valeur limite α_{\min} sur le coefficient d'émission nette des raies auto absorbées dans le cas d'un plasma d'argon pur à 10^5 Pa, pour un rayon du plasma $R_p=5$ mm.

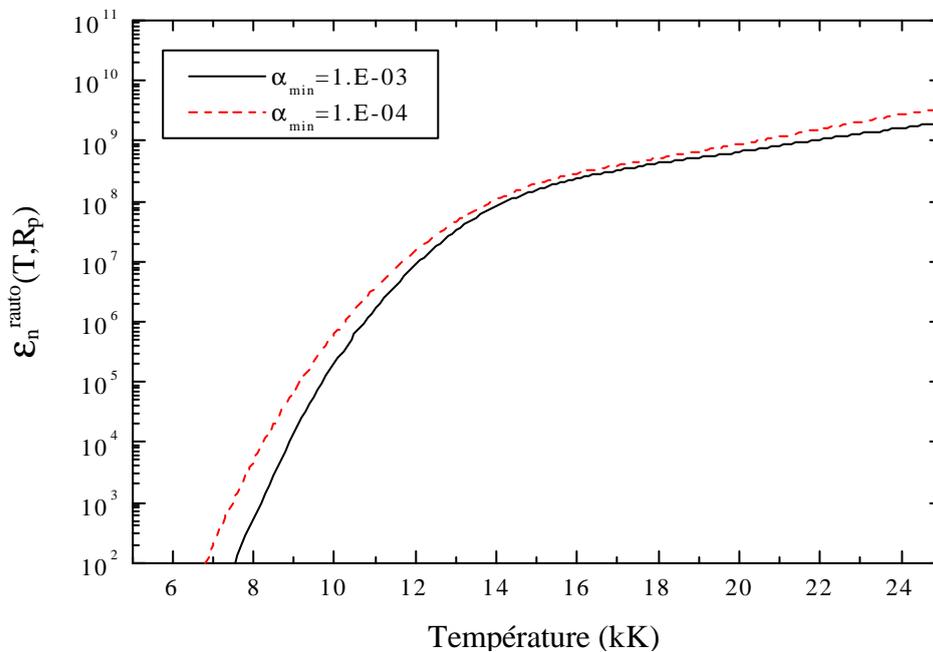


Fig.III-12: CEN des raies auto absorbées pour deux valeurs de α_{\min} et $R_p=5$ mm

L'influence de ce paramètre α est moins important sur le coefficient d'émission nette totale comme nous le montre la *figure III-13* où celui-ci ne modifie pas les résultats pour des températures inférieures à 20000 K. En effet, comme nous le verrons dans le *chapitre IV*, les

émissions du continuum et des raies non auto absorbées pour un tel rayon du plasma sont équivalentes à celle des raies autoabsorbées, masquant ainsi la différence observée sur la **figure III-12**.

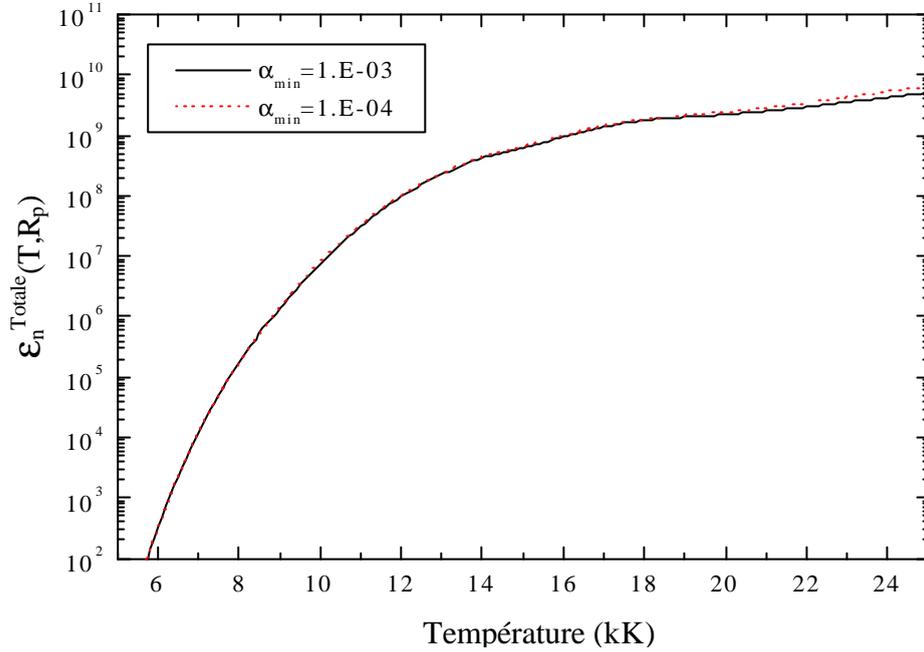


Fig.III-13 : CEN totale pour deux valeurs de α_{\min} et $R_p=5\text{mm}$

Dans le but de réduire les temps de calcul, Drawin donne également pour le cas d'un profil de Voigt une approximation permettant de calculer le facteur de fuite Λ_{hb}^V sans effectuer d'intégration, dont l'expression est la suivante avec $\beta=100$ (expression erronée dans l'article de A. *Essoltani et al* [Es-1]) :

$$\left\{ \begin{aligned} \Lambda_{\text{hb}}^V(\alpha_{\text{hb}}, \tau_{\text{hb}}^V) &= \frac{1 + \frac{\tau_{\text{hb}}^V}{2 + (\tau_{\text{hb}}^V)^2}}{1 + \tau_{\text{hb}}^V [\pi \ln(1 + \tau_{\text{hb}}^V)]^{1/2} + [\pi U_{\text{hb}}(0, \alpha_{\text{hb}})]^{1/2}} \cdot \frac{\alpha_{\text{hb}} \beta \tau_{\text{hb}}}{1 + \beta(\alpha_{\text{hb}}^{1/2} \tau_{\text{hb}} + \alpha_{\text{hb}} \tau_{\text{hb}}^{1/2})} \cdot \frac{1 + \frac{\tau_{\text{hb}}^V}{2 + (\tau_{\text{hb}}^V)^2}}{1 + (\pi \tau_{\text{hb}}^V)^{1/2}} \quad (\text{III-45}) \\ U_{\text{hb}}(0, \alpha_{\text{hb}}) &= \frac{1}{\sqrt{\pi}(1 + \pi \alpha_{\text{hb}}^2)^{1/2}} \left[1 - \frac{\alpha_{\text{hb}}}{\sqrt{\pi}(1 + \pi \alpha_{\text{hb}}^2)^{1/2}} \right] \end{aligned} \right.$$

L'article de Drawin étant notre base d'étude pour le calcul du facteur de fuite, nous informons le lecteur de la présence de deux erreurs dans celui-ci que nous rectifions ici [Dr-1]:

- La relation de Ladenburg s'écrit $\sigma_{\text{hb}} = \frac{\pi e_o^2}{m_e c} f_{\text{hb}}$ et non $\sigma_{\text{hb}} = \frac{\pi e_o^2}{m_e c^2} f_{\text{hb}}$
- Dans le tableau récapitulatif des valeurs numériques du facteur de fuite Λ_{hb}^V , il faut lire :

$$\left\{ \begin{aligned} \mathbf{a}=3.0E-03 \text{ et } \mathbf{t}_{\text{hb}}=3.0E+04 &\hookrightarrow \Lambda_{\text{hb}}^V=2.3E-04 \\ \mathbf{a}=3.0E-03 \text{ et } \mathbf{t}_{\text{hb}}=3.0E+04 &\hookrightarrow \Lambda_{\text{hb}}^V=7.5E-06 \end{aligned} \right.$$

METHODES DE CALCUL
ET RESULTATS DU
RAYONNEMENT THERMIQUE

I – INTRODUCTION

A partir de l'équation du transfert radiatif (I-9), nous pouvons calculer la puissance radiative ou l'énergie transportée par rayonnement dans le plasma. Cependant, l'intervention de grandeurs dépendant de la variable spectrale ν , des variables d'espace, et la superposition de nombreuses raies au fond continu rendent sa résolution difficile. Pour y remédier, nous avons régulièrement recours à deux types d'approximations faisant l'objet de ce chapitre et basées sur la dépendance spectrale et la dépendance envers les conditions du plasma :

- Pour l'approximation suivant la nature du plasma, nous considérons le milieu homogène et isotherme (spatialement) simplifiant la géométrie du problème. La méthode est alors celle du « **coefficient d'émission nette** ».
- Pour la dépendance spectrale, nous supposons que le plasma rayonne comme un « *corps gris* » sur tout le spectre ou par bandes et par conséquent le coefficient d'absorption ne varie plus suivant la fréquence. Cette approximation porte le nom de « *coefficients moyens* » ou « *corps gris* ». Dans notre cas, nous appliquerons la « **méthode du coefficient moyen d'absorption** » qui consiste à découper le spectre en différentes bandes préalablement définies et justifiées dans lequel le coefficient d'absorption sera considéré constant pour une température donnée.

II – METHODE DU COEFFICIENT D'EMISSION NETTE (CEN)

D'après de nombreux travaux effectués dans notre groupe sur le coefficient d'émission nette, cette méthode permet d'estimer assez correctement le rayonnement émis dans les régions chaudes de l'arc. La méthode du coefficient d'émission nette conserve la dépendance spectrale en fonction de la fréquence mais simplifie la dépendance du plasma envers les variables d'espace.

2.1 – Approximations

2.1.1 – Profil isotherme

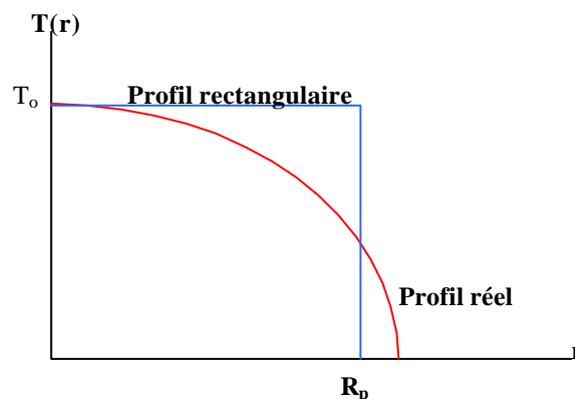


Fig.IV-1 : Profil radial de température

Dans la majorité des cas, les plasmas ne sont pas homogènes et présentent des gradients de température. Cependant, tout milieu inhomogène et anisotherme peut être ramené à des sous ensembles homogènes et isothermes. Généralement, le profil radial de température dans les plasmas d'arc est représenté par une lente décroissance près du centre suivie d'une chute brutale près des bords. Pour simplifier les calculs et la géométrie, **Lowke** propose un profil radial de type rectangulaire [Lo-1]. En comparant ce profil à un profil de type réel, nous constatons que l'hypothèse est satisfaisante pour la région centrale de l'arc où la température est la plus élevée, les gradients les plus faibles et l'émission la plus forte (**fig.IV-1**).

Pour un plasma supposé isotherme, à l'équilibre thermodynamique local, d'indice de réfraction égal à 1 (*annexe A2*) et de géométrie simplifiée, Lowke donne une relation permettant de relier le coefficient d'émission nette à la divergence du flux radiatif [Lo-1]:

$$\epsilon_n = \frac{1}{4\pi} \bar{\nabla} F_R \quad (IV-1)$$

A partir de l'équation du transfert radiatif (I-9), du flux radiatif (I-8) et de la relation (IV-1), nous obtenons pour un milieu homogène et isotherme :

$$\begin{cases} \nabla F_R = \int_{\Omega} \nabla L_v d\Omega \\ \nabla F_R = 4\pi \left(\epsilon_v - \frac{\kappa'_v}{4\pi} \int_{\Omega} L_v d\Omega \right) \end{cases} \text{ soit } \begin{cases} \epsilon_{n_v} = \epsilon_v - \frac{\kappa'_v}{4\pi} \int_{\Omega} L_v d\Omega \\ \epsilon_n^{\text{Totale}} = \int_0^{\infty} \epsilon_{n_v} dv \end{cases} \text{ ou } \begin{cases} \epsilon_{n_v} = \kappa'_v L_v^o(T) - \kappa'_v J_v \\ \text{avec } J_v = \frac{1}{4\pi} \int_{\Omega} L_v d\Omega \end{cases} \quad (IV-2)$$

où J_v est appelée la *luminance moyenne* sur l'angle solide $d\Omega$ pour un intervalle de fréquence donné. D'après la relation (I-11), la luminance L_v dépend de l'épaisseur optique τ_v , du coefficient d'absorption corrigé de l'émission induite $\kappa'_v(T)$ et de la luminance du corps noir $L_v^o(T)$ calculée pour la température T (I-14). Nous proposons de déterminer l'expression de J_v dans le cas d'un plasma cylindrique ou sphérique isotherme, deux configurations régulièrement utilisées pour simplifier les calculs.

2.1.2 – Calcul sur l'axe d'un cylindre isotherme de hauteur infinie

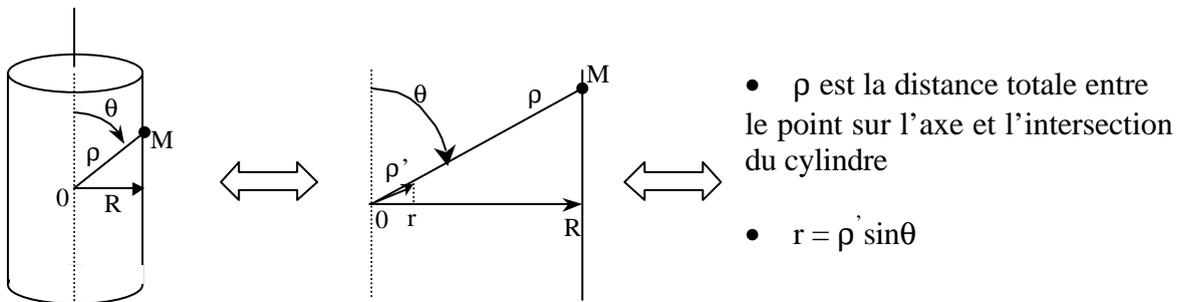


Fig.IV-2 : Cylindre isotherme de longueur infinie

La luminance moyenne sur l'angle solide $d\Omega = \sin \theta d\theta d\varphi$ s'écrit pour la géométrie de la **figure IV-2**, après intégration sur l'angle azimutal φ :

$$J_v(T, R) = \int_0^R \int_{\theta=0}^{\theta=\pi/2} L_v^o \exp\left(-\frac{\kappa'_v r}{\sin \theta}\right) \sin \theta d\theta dr \quad (IV-3)$$

En intégrant sur r et θ , nous obtenons finalement l'expression de J_v et de ε_n , soit :

$$\begin{cases} J_v(T, R) = L_v^o (1 - G_v(\kappa'_v R)) \\ \varepsilon_n(T, R) = \int_0^\infty \kappa'_v L_v^o G_v(\kappa'_v R) dv \end{cases} \quad \text{avec} \quad G_v(x) = \int_{\theta=0}^{\theta=\pi/2} \exp\left(-\frac{x}{\sin \theta}\right) \sin \theta d\theta \quad (IV-4)$$

2.1.3 – Calcul au centre d'une sphère isotherme

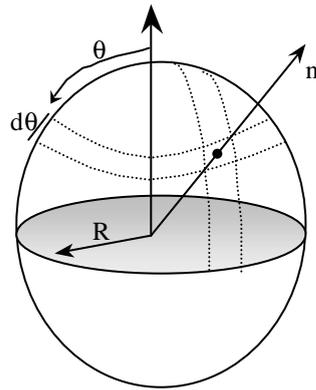


Fig.IV-3 : Sphère isotherme

Nous avons pour la géométrie représentée sur la **figure IV-3** :

$$J_v(T, R) = \frac{1}{4\pi} \int_{r=0}^R \int_{\theta=0}^{\theta=\pi} \int_{\varphi=0}^{2\pi} \kappa'_v L_v^o \exp\left(-\int_0^r \kappa'_v dr'\right) \sin \theta d\theta d\varphi dr \quad (IV-5)$$

et finalement pour le coefficient J_v et le coefficient d'émission nette ε_n :

$$\begin{cases} J_v(T, R) = L_v^o (1 - \exp(-\kappa'_v R)) \\ \varepsilon_n(T, R) = \int_0^\infty \kappa'_v L_v^o \exp(-\kappa'_v R) dv \end{cases} \quad (IV-6)$$

2.1.4 – Conclusion

L'expression du coefficient d'émission nette calculé au centre d'une sphère homogène isotherme que nous utilisons par la suite dans nos calculs se rapproche fortement de celle obtenue pour l'axe d'un cylindre isotherme infini puisque G_v varie également exponentiellement. **Liebermann** et **Lowke** [Li-2] ont montré que le cylindre isotherme pouvait être assimilé à une sphère isotherme avec une précision supérieure à 90%, ce qui reste convenable compte tenu des approximations faites par la suite dans nos calculs. La principale difficulté réside dans l'étude du coefficient d'absorption variant avec la fréquence en tenant compte des mécanismes relatifs à l'émission du continuum et des raies (cf Ch.III). Pour simplifier les calculs, nous supposons des raies isolées, c'est à dire que le recouvrement des raies est considéré comme négligeable pour le transfert radiatif total issu de celles-ci. Dans ce cas, chaque raie peut être traitée séparément, le coefficient d'émission nette relatif étant corrigé du facteur de fuite (cf Ch.III) comme nous le verrons dans ce chapitre.

2.2 – Méthode de calcul

Pour calculer le coefficient d'émission nette, nous considérons donc le plasma de géométrie normalement cylindrique comme une sphère homogène et isotherme de rayon R_p ayant la même température à 10% près que le point émetteur qu'elle entoure [Li-2]. Celui-ci est obtenu par la superposition de tous les coefficients d'émission relatifs aux raies du spectre et au continuum.

2.2.1 – Emission nette du continuum

Le coefficient d'émission nette du continuum se calcule par intégration sur les fréquences du produit de la fonction de Planck (I-14) et du coefficient d'absorption continu corrigé de l'émission induite $\kappa'_{c,v}(T)$. L'émission nette est obtenue pour une pression atmosphérique, un rayon du plasma R_p et une température T donnés, soit:

$$\epsilon_n^{\text{cont}}(T, R_p) = \int_0^{\infty} \kappa'_{c,v}(T) \cdot L_v^o(T) \cdot \exp(\kappa'_{c,v}(T)R_p) dv \quad (IV-7)$$

2.2.2 – Emission nette des raies

Pour l'étude du spectre discret, nous avons différencié deux types de raies : les raies auto-absorbées et les raies non-autoabsorbées. Pour effectuer cette sélection, nous nous sommes référés aux niveaux d'énergie donnés par la littérature [Mo-4][Ni-1][Ku-2]. Pour chaque espèce, le *tableau IV-1* donne les énergies limites des niveaux bas des transitions permettant de séparer ces raies en deux catégories tandis que le *tableau IV-2* fournit le nombre total de raies prises en compte dans les calculs ainsi que la part représentée par les raies autoabsorbées.

Tableau IV-1 : Classification des raies selon les énergies des niveaux bas des transitions

Espèce	Auto Absorbées (cm^{-1})	Non Autoabsorbées (cm^{-1})	Espèce	Auto Absorbées (cm^{-1})	Non Autoabsorbées (cm^{-1})
Ar	$\epsilon_{bas} = 0.000$	$\epsilon_{bas} \geq 93143.760$	Cu ⁺	$\epsilon_{bas} \leq 26264.568$	$\epsilon_{bas} \geq 66418.687$
Ar ⁺	$\epsilon_{bas} \leq 1431.580$	$\epsilon_{bas} \geq 108721.530$	Cu ²⁺	$\epsilon_{bas} \leq 2071.800$	$\epsilon_{bas} \geq 60804.900$
Ar ²⁺	$\epsilon_{bas} \leq 33265.700$	$\epsilon_{bas} \geq 113800.700$	H	$\epsilon_{bas} \leq 0.000$	$\epsilon_{bas} \geq 82259.010$
Cu	$\epsilon_{bas} \leq 13245.423$	$\epsilon_{bas} \geq 30535.302$	H ⁺		

Tableau IV-2 : Nombre total de raies par espèce

Espèce	Total	Auto Absorbées	Espèce	Total	Auto Absorbées
Ar	2758	25	Cu ⁺	3744	239
Ar ⁺	5804	129	Cu ²⁺	571	57
Ar ²⁺	843	105	H	230	39
Cu	468	45	H ⁺		

a – Raies non autoabsorbées

Après analyse des forces d'oscillateur de toutes les transitions caractéristiques du plasma, nous constatons que ces nombreuses raies non-autoabsorbées représentent les transitions ayant de faibles f_{ik} . Ces dernières sont donc peu intenses et traversent le milieu sans être absorbées comme si celui-ci était optiquement mince. Par conséquent, le facteur de fuite et le terme d'absorption deviennent négligeables, le rayon du plasma n'étant plus une variable pour le coefficient d'émission nette relatif aux raies non-autoabsorbées.

En utilisant la fonction de Planck, la force d'oscillateur de la transition $b \rightarrow h$ (niveau bas vers niveau haut), et la densité du niveau supérieur \bar{n}_h , le coefficient d'émission nette d'une raie non-autoabsorbée de fréquence ν_o se met sous la forme :

$$\epsilon_n^{non-auto}(T) = L_{\nu_o}^o(T) \frac{\pi e^2}{m_e c} f_{bh} \bar{n}_h \left(1 - \exp\left(-\frac{h\nu_o}{k_b T}\right) \right) \quad (IV-8)$$

b – Raies autoabsorbées

Les raies autoabsorbées sont les raies de résonance ou celles issues des transitions entre les niveaux proches du niveau fondamental. Le terme "auto" signifie que le rayonnement émis par la raie est absorbé dans le plasma par la même raie en absorption (atome identique) du au mécanisme de photoexcitation. Ces raies ont pour principales caractéristiques de retomber essentiellement sur les premiers niveaux excités des atomes et d'avoir de grandes forces oscillateur comprises entre 10^{-1} et 100. Afin d'obtenir le coefficient d'émission des raies autoabsorbées et d'utiliser l'approximation du facteur de fuite, il est nécessaire de connaître les élargissements Lorentzien et Gaussien pour chaque température. En effet, selon les travaux de

Drawin [Dr-1], ce facteur de fuite dépend uniquement de l'épaisseur optique τ_o au centre de la raie quand les élargissements sont du type Lorentzien ou Gaussien à laquelle s'ajoute le rapport α de ces deux élargissements quand le profil de la raie émise par les atomes est un profil de Voigt. Dans le cas d'un plasma Ar/H₂/Cu, nous avons étudié séparément l'hydrogène des deux autres espèces, le profil d'élargissement des raies de l'hydrogène étant de forme particulière contrairement au profil de Voigt des raies du cuivre et de l'argon (*cf Ch.III*).

raies non-hydrogénéoï des (argon et cuivre).

En supposant des raies autres que celles de l'hydrogène et des élargissements Stark et de pression de forme Lorentzienne, le profil utilisé est un profil de Voigt s'exprimant suivant la relation (III-34). Ces élargissements connus, nous déterminons leur rapport α et l'épaisseur optique au centre de la raie τ_o pour en déduire le facteur de fuite selon (III-43,44,45).

Pour des longueurs d'onde supérieures à 200nm, les raies sont moins intenses et plus élargies par effet Stark. Par conséquent ces dernières sont moins absorbées, le terme exponentiel $\exp(-K'_{c,v}(T) \cdot R_p)$ étant voisin de 1. Dans ce cas, l'intervalle d'une raie centrée en ν_o est suffisamment étroit pour supposer les égalités suivantes :

$$\begin{aligned} L'_v(T) \left(1 - \exp\left(-\frac{h\nu}{k_b T}\right) \right) &\equiv L'_{\nu_o}(T) \left(1 - \exp\left(-\frac{h\nu_o}{k_b T}\right) \right) \\ \kappa'_{c,v}(T) &\equiv \kappa'_{c,\nu_o}(T) \left(1 - \exp\left(-\frac{h\nu_o}{k_b T}\right) \right) \end{aligned} \quad (IV-9)$$

Avec α le rapport des largeurs à mi-hauteur des élargissements lorentzien et gaussien, le coefficient d'émission nette pour ces raies s'écrit :

$$\epsilon_n^{\text{auto}}(T, R_p) = L'_{\nu_o}(T) \cdot \kappa'_{c,\nu_o}(T) \cdot \Lambda_r(\alpha, \tau_o) \cdot \left(1 - \exp\left(-\frac{h\nu_o}{k_b T}\right) \right) \exp[-\kappa'_{c,\nu_o}(T) \cdot R_p] \quad (IV-10)$$

raies de l'hydrogène.

L'élargissement d'une raie d'hydrogène peut se faire par effet Doppler ou effet Stark (*cf Ch.III*) suivant la valeur de la densité électronique et par conséquent suivant la température. Dans ce cas, le facteur de fuite ne dépend plus que de l'épaisseur optique.

Pour les basses températures et des densités électroniques N_e inférieures à 10^{12}cm^{-3} , nous avons considéré que le facteur de fuite des raies de résonance de l'hydrogène pouvait être obtenu selon un profil de raies élargies essentiellement par effet Doppler. Pour les températures correspondantes à cette densité limite, les valeurs du facteur de fuite ont été déduits des articles de **Vidal et al** [Vi-1] [Vi-2] [Vi-3] [Vi-4], ces derniers ne traitant pas les profils pour des densité électroniques $N_e \leq 3,162 \cdot 10^{11} \text{cm}^{-3}$.

Pour des densités électroniques $N_e \geq 10^{12} \text{cm}^{-3}$ et des températures plus élevées, l'expression du profil de la raie est déduite des calculs de **Vidal et al** [Vi-4].

Des études ont montré que ces profils de raie dépendent fortement de la densité des électrons et peu de la température [Ri-1]. Les calculs du coefficient d'émission nette des raies d'hydrogène sont basés sur les mêmes hypothèses utilisées par **Riad** [Ri-1] pour un plasma d'hydrogène pur. Le facteur de fuite est alors calculé pour chaque raie par la méthode de Gauss sur chaque intervalle spectral extrêmement petit et ceci jusqu'à la dernière valeur du profil tabulé par Vidal. Le coefficient d'émission nette des raies d'hydrogène est ensuite calculé par l'expression (IV-10).

2.2.3 – Emission nette totale

Le coefficient d'émission nette total est obtenu par la superposition de tous les coefficients d'émission relatifs aux raies du spectre et au continuum. Pour un cylindre isotherme assimilable à une sphère isotherme, ce dernier évolue suivant deux paramètres que sont la température du cylindre et la valeur du rayon du plasma R_p , la pression étant toujours supposée constante et égale à la pression atmosphérique. Représentant la puissance totale rayonnée par unité d'angle solide et par élément de volume, l'émission exprimée en ($W/m^3/ster$) s'obtient par la sommation :

- du coefficient d'émission nette dû aux phénomènes continus (attachement, recombinaison radiative et rayonnement de freinage, contribution moléculaire) $\epsilon_n^{cont}(T, R_p)$
- du coefficient d'émission nette des raies non autoabsorbées $\epsilon_n^{non-auto}(T, R_p)$ caractérisant l'émission des raies traversant le milieu sans être absorbées, ce dernier se comportant alors comme optiquement mince.
- du coefficient d'émission nette des raies autoabsorbées $\epsilon_n^{auto}(T, R_p)$ représentant l'émission des raies partiellement ou totalement absorbées.

2.3 – Résultats et commentaires

Tous les calculs ont été effectués à pression atmosphérique pour des températures comprises entre 300K et 25000K et des rayons du plasma variant de 0mm à 10cm. Dans notre groupe, le calcul du coefficient d'émission nette a fait l'objet de nombreuses recherches non seulement dans le cas de gaz purs comme l'argon [Er-1] ou l'hydrogène [Ri-1], SF₆ [Er-1], mais aussi pour des mélanges binaires Ar-Cu ou SF₆-Cu [Ra-2]. Notre base de donnée construite à partir des niveaux d'énergie, de leur nombres quantiques associés et des nombreuses transitions recensées dans la littérature [Mo-4][Ni-1][Ku-2] étant différente de celles utilisées par les précédents auteurs, nous donnons de nouveau les résultats pour les trois gaz purs dans le but de montrer l'importance du choix de cette base pour les calculs définitifs. Ces résultats nous permettent également de mieux comprendre les variations du coefficient d'émission nette d'un mélange ternaire pour trois valeurs différentes du rayon du plasma (0mm, 1mm et 1cm). Puis, pour les deux premières valeurs, nous détaillons l'importance des différentes contributions ainsi que l'influence des raies de résonance sur le coefficient total. Enfin, nous terminons notre étude en présentant différents résultats pour diverses concentrations de cuivre afin de montrer l'influence des vapeurs métalliques sur l'émission nette totale.

2.3.1 – Influence du rayon du plasma

a - Gaz ou vapeurs purs

D'après les figures IV-4 à IV-6, nous constatons tout d'abord que le rayonnement total pour un plasma thermique varie suivant deux paramètres que sont la température du plasma et son rayon. En effet, suivant la température, le coefficient d'émission nette augmente très rapidement en dessous d'une température limite (15000K pour l'argon et l'hydrogène, 7500K pour le cuivre) à partir de laquelle celui-ci connaît une progression plus lente (fig.IV-4 et IV-6) voire un léger plateau ou une légère diminution (fig.IV-5).

Ensuite, nous remarquons pour les trois gaz purs une diminution de ce coefficient d'émission nette en rapport avec l'accroissement du rayon du plasma mettant en évidence le phénomène d'absorption. Notons que le cas $R_p=0$ mm correspond au cas fictif d'un plasma optiquement mince pour lequel l'absorption est considérée comme nulle. Cette dernière étant fonction croissante de l'épaisseur optique, la plus grande partie du rayonnement est absorbée dès les tout premiers millimètres. Ce phénomène peut s'expliquer par une émission importante des raies de résonance comme nous le verrons lors de l'étude des différentes composantes (§IV-2.3.2).

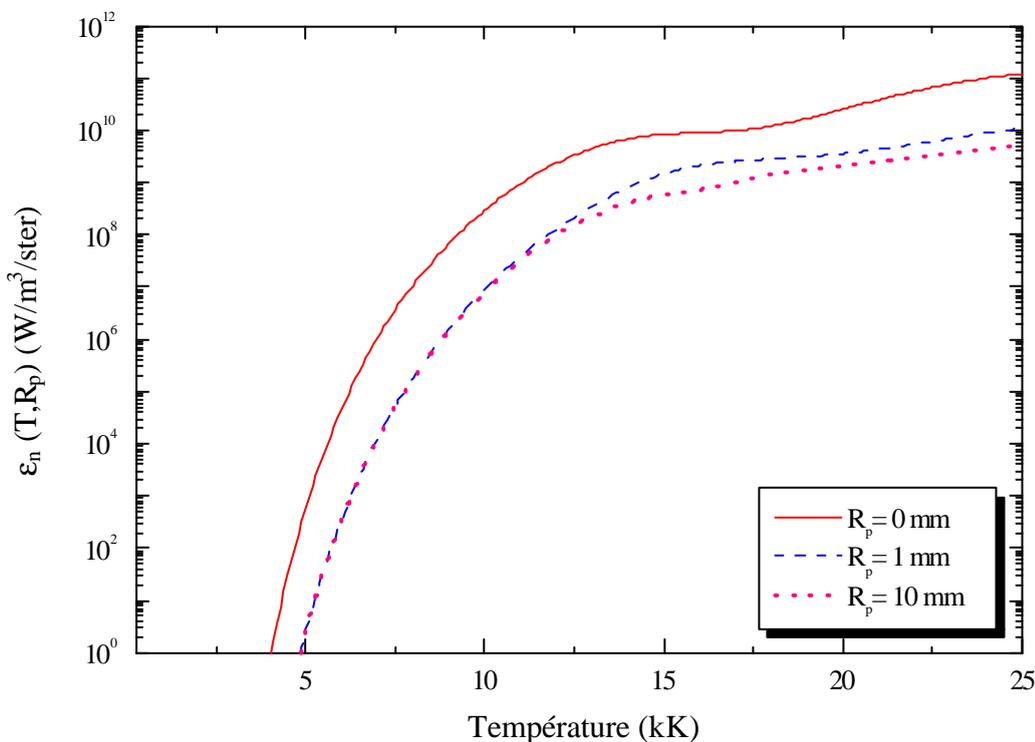


Fig.IV-4: Influence du rayon sur le CEN d'un plasma d'Argon pur

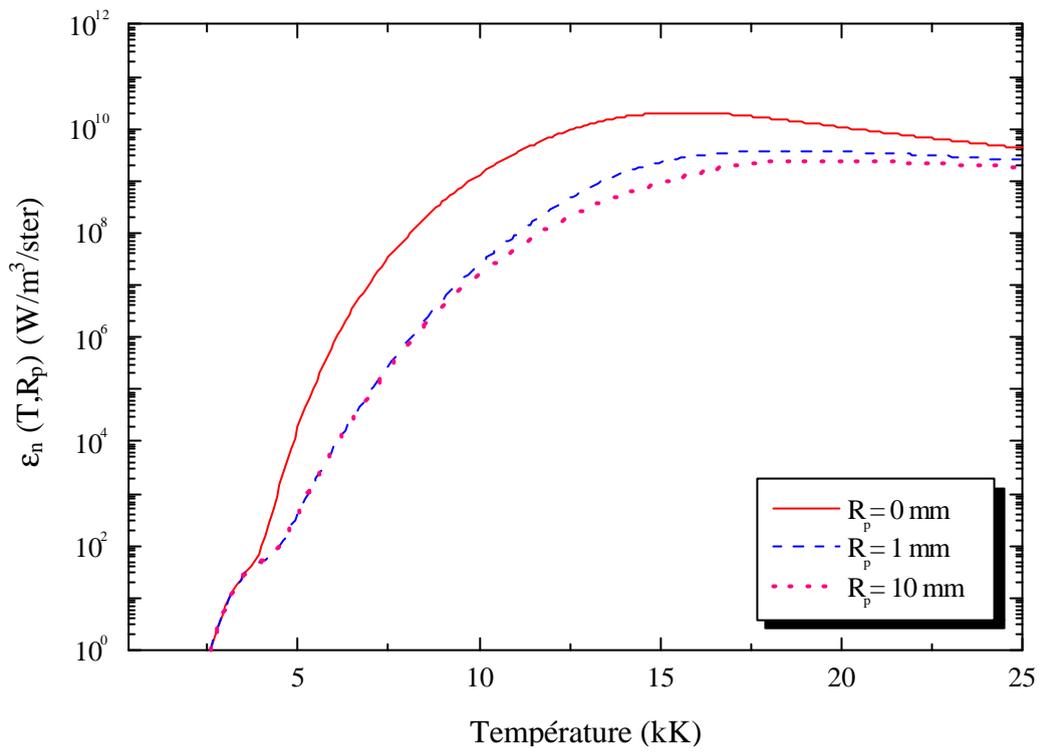


Fig.IV-5: Influence du rayon sur le CEN d'un plasma d'Hydrogène pur

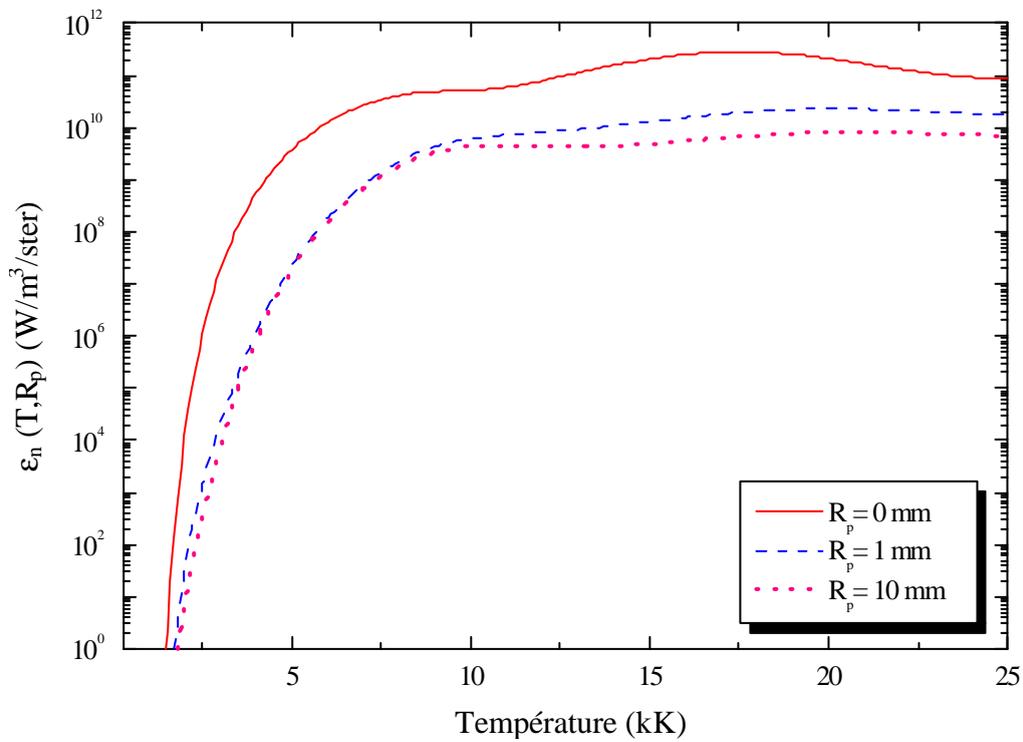


Fig.IV-6: Influence du rayon sur le CEN d'un plasma de Cuivre pur

b- Mélange Argon-Hydrogène-Cuivre

Les observations faites précédemment pour les gaz purs sur le comportement du coefficient d'émission nette suivant le rayon et la température sont également valables dans le cas des deux mélanges ternaires présentés *figures IV-7* et *IV-8*. En effet, nous retrouvons cette forte absorption dès les tout premiers millimètres d'épaisseur.

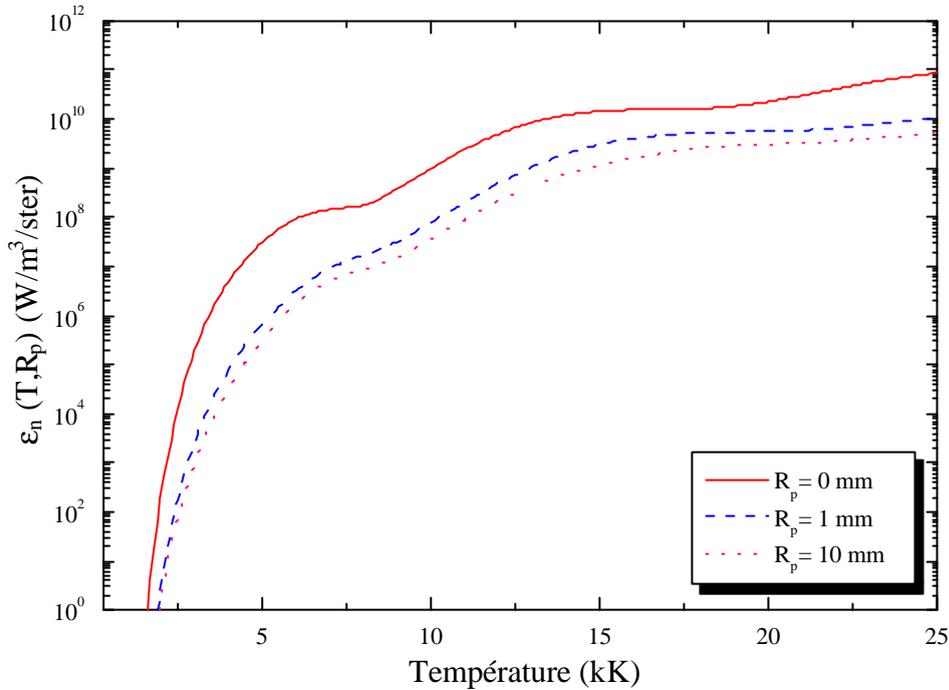


Fig.IV-7 : Influence du rayon sur le CEN d'un plasma 79%Ar-20%H₂-1%Cu

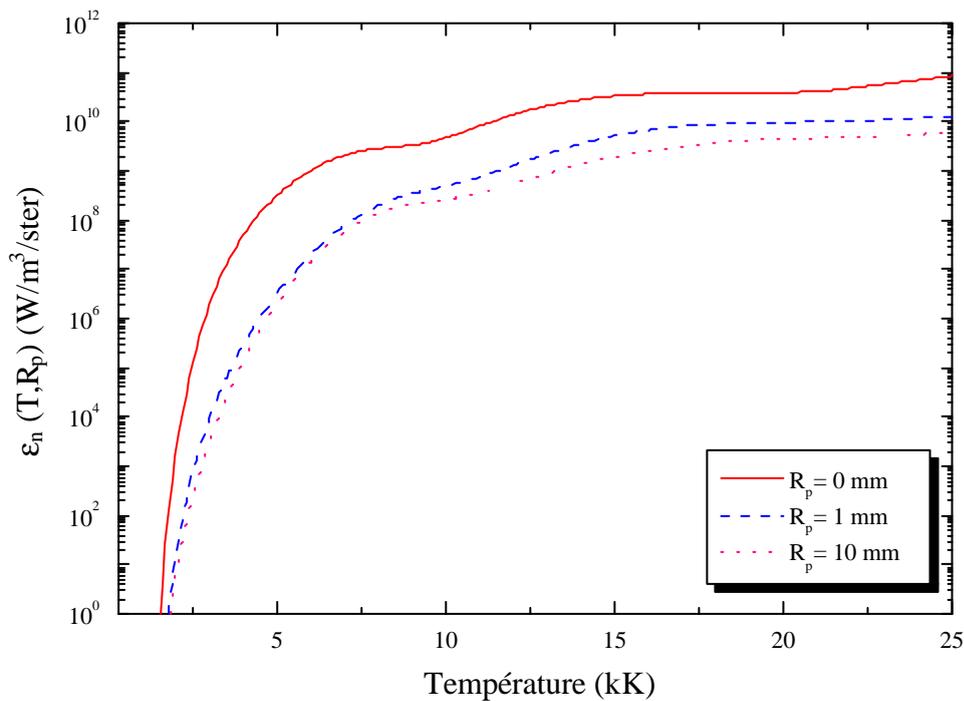


Fig.IV-8 : Influence du rayon sur le CEN d'un plasma 70%Ar-20%H₂-10%Cu

2.3.2 – Contribution des composantes du coefficient d'émission total

a - Gaz ou vapeur purs

Comme nous l'avons cité précédemment, le coefficient d'émission nette s'obtient par la sommation des différents rayonnements issus du continuum, des raies non autoabsorbées et des raies de résonance. Nous présentons donc sur les **figures IV-9** à **IV-20** les différentes composantes du rayonnement total pour les gaz purs et un mélange Ar/H₂/Cu, une pression atmosphérique et deux valeurs du rayon ($R_p=0\text{mm}$ et $R_p=1\text{mm}$).

Cas du rayon $R_p=0\text{mm}$:

Le terme exponentiel de la relation (IV-4) valant 1, ce rayonnement équivaut au terme émissif $L_v^o(T)\kappa_v'(T)$ variant linéairement avec le coefficient d'absorption total $\kappa_v'(T)$ directement proportionnel aux densités des espèces présentes ou au carré de celles-ci (cas du rayonnement de freinage électron-ion). Pour le rayon $R_p=0\text{mm}$ correspondant au cas d'un milieu optiquement mince (sans absorption), le rayonnement total résulte entièrement du rayonnement des raies de résonance comme l'indique les **figures IV-9**, **IV-10** et **IV-11**. Cependant, le coefficient d'émission net d'un plasma d'hydrogène pur présente un maximum pour des températures voisines de 15000K avant de diminuer progressivement. Cette décroissance observée sur la **figure IV-10** peut s'expliquer par la chute dans le milieu du nombre d'atomes neutres H et par l'inexistence des raies de H⁺. A l'inverse, pour l'argon et le cuivre, la présence des raies ioniques accentue le rayonnement total avec l'augmentation de la température (**fig.IV-9 et IV-10**). Pour des températures faibles ($T<3700\text{K}$), les figures montrent une nette différence entre le rayonnement total d'un plasma d'argon ou de cuivre pur et celui d'un plasma d'hydrogène pur. Celle-ci provient du coefficient d'absorption moléculaire qui joue un rôle essentiel et modifie le comportement du coefficient d'émission nette total pour ces températures.

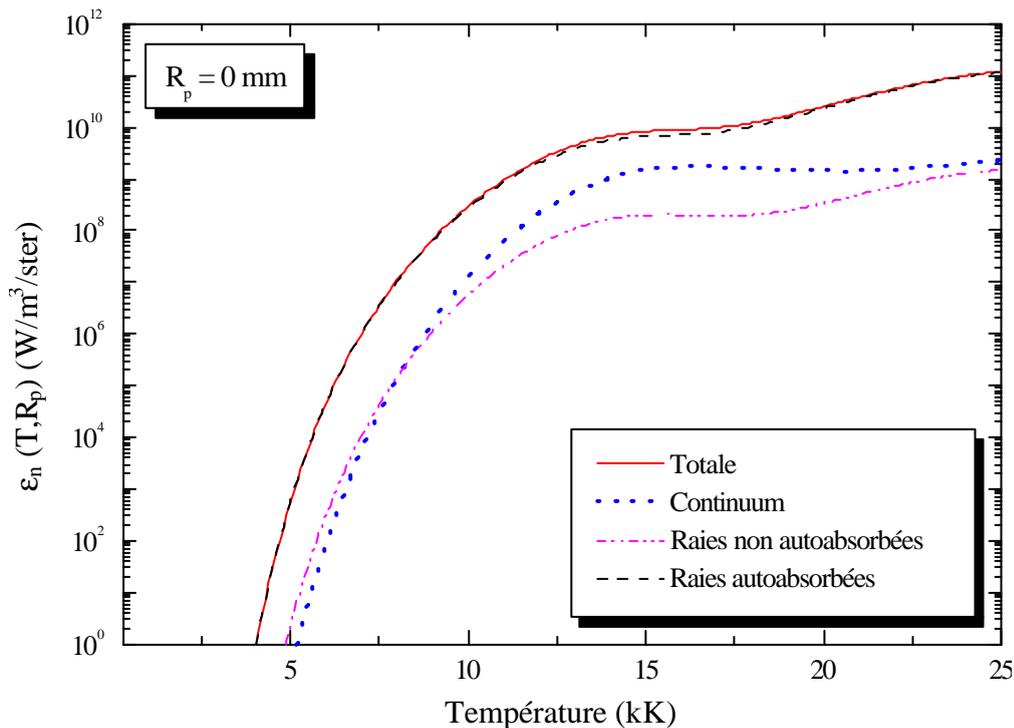


Fig.IV-9: Composantes du CEN d'un plasma d'Argon pur optiquement mince.

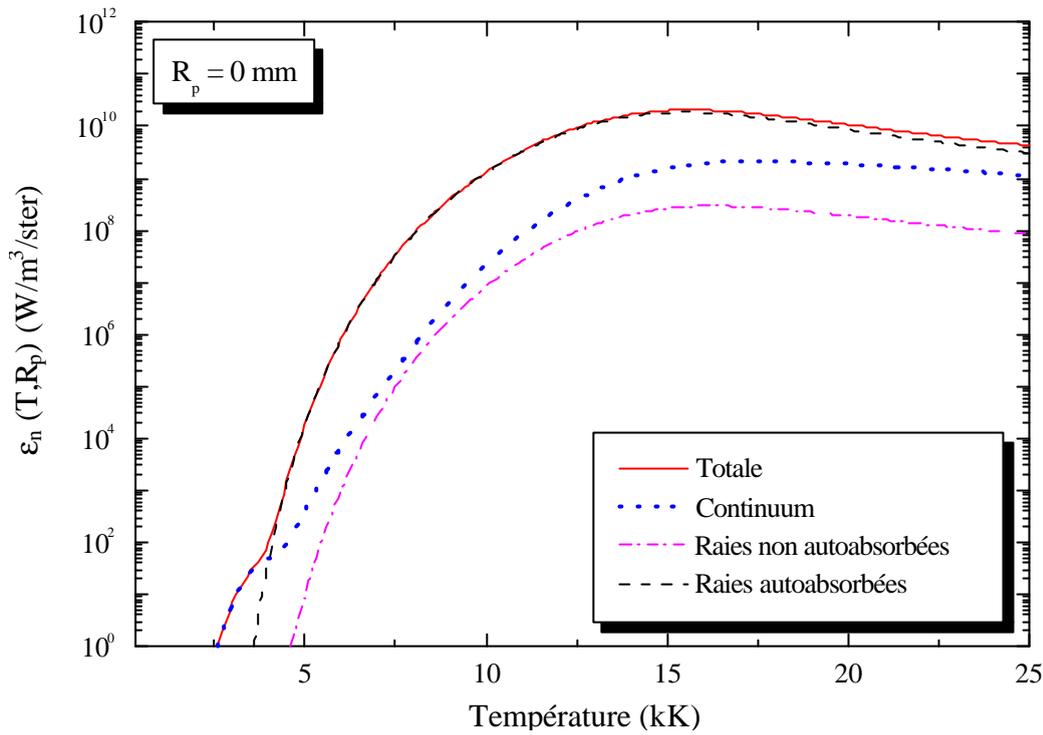


Fig.IV-10: Composantes du CEN d'un plasma d'Hydrogène pur optiquement mince.

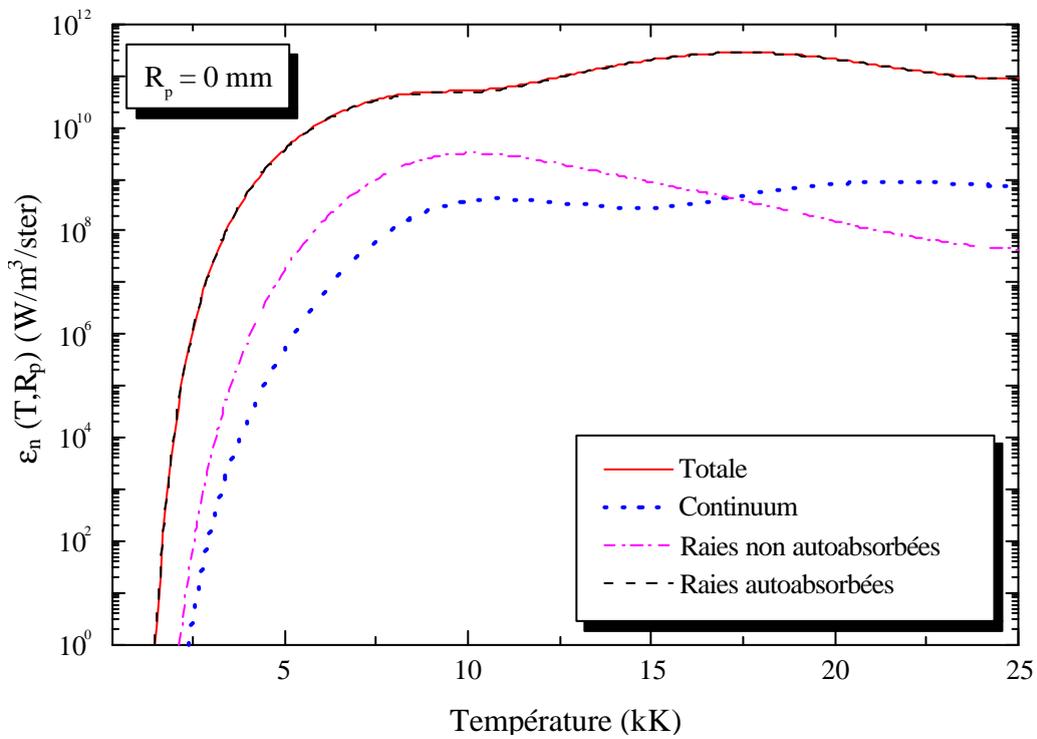


Fig.IV-11: Composantes du CEN d'un plasma de cuivre pur optiquement mince.

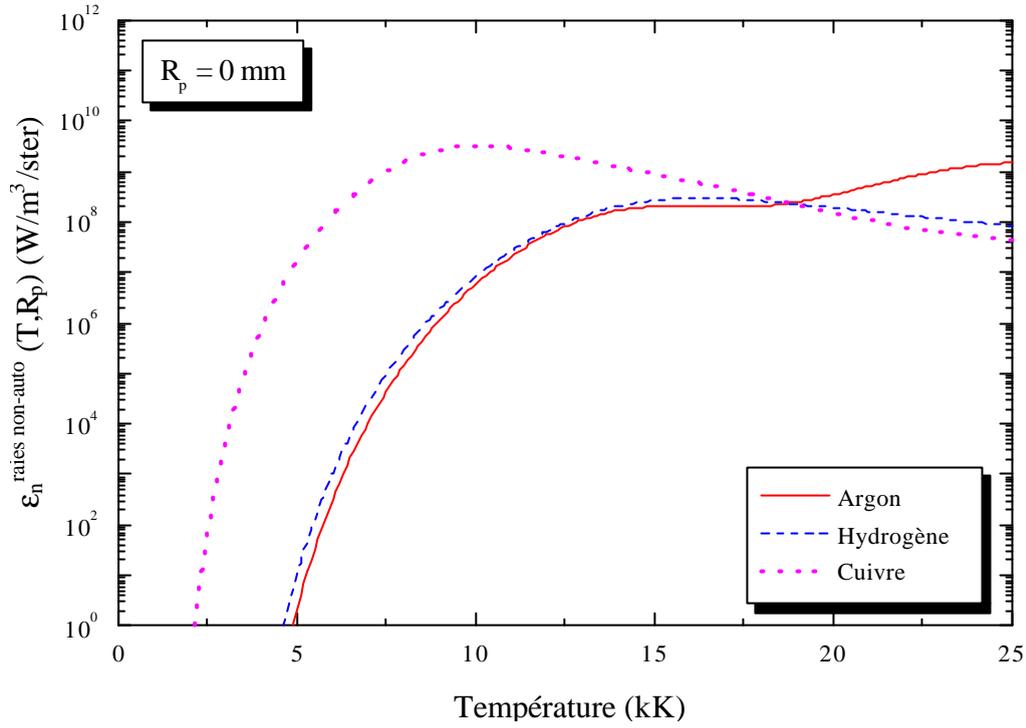


Fig.IV-12: Comparaison du CEN des raies non autoabsorbées des trois gaz purs

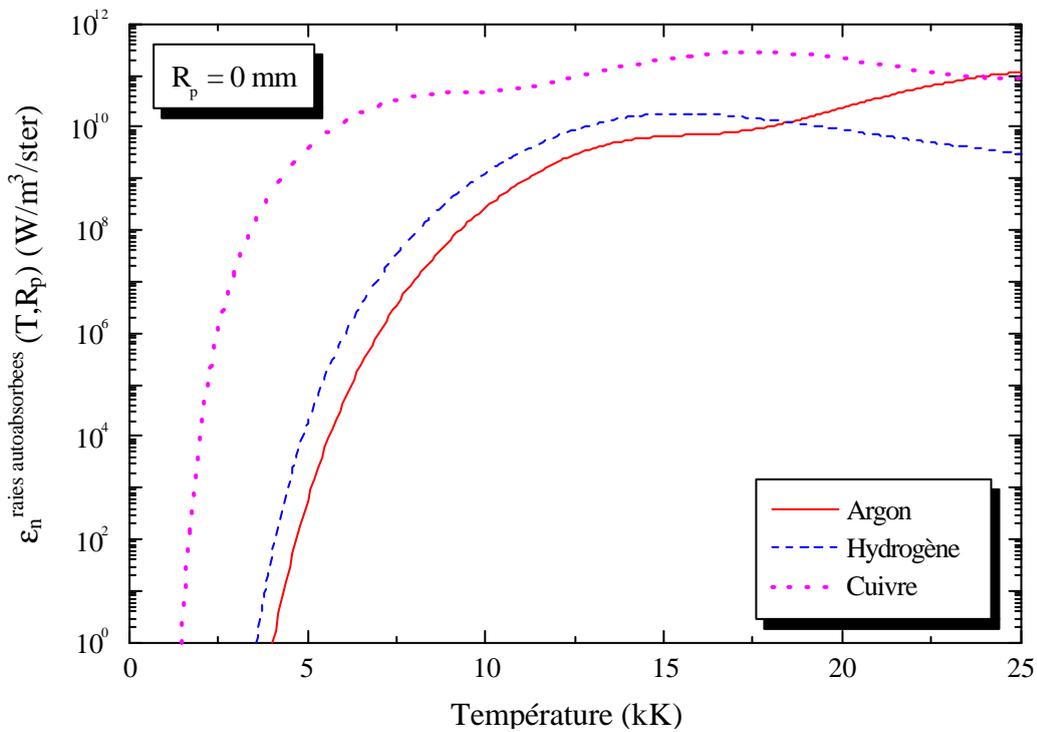


Fig.IV-13: Comparaison du CEN des raies de résonance pour les trois gaz purs

Les *figures IV-12 et IV-13* montrent que le rayonnement du cuivre est le plus important pour des températures inférieures à 20000K. Un tel phénomène s'explique par l'ionisation rapide du cuivre possédant le potentiel d'ionisation le plus faible. Les ions ainsi créés et les transitions associées provoquent alors une forte croissance du coefficient d'émission nette. Pour des températures supérieures, le rayonnement de l'argon devient non négligeable devant celui du cuivre, ceci s'expliquant par une densité d'ions Ar^+ majoritaires et par un spectre beaucoup plus riche et plus complexe (5804 transitions pour Ar^+ et 843 pour Ar^{2+} contre 3744 transitions pour Cu^+ et 571 pour Cu^{2+}). La *figure IV-13* confirme également la chute du rayonnement des raies autoabsorbées de l'hydrogène due à l'inexistence des raies de H^+ .

Cas du rayon $R_p=1\text{mm}$:

Pour ce rayon, nous remarquons sur les *figures IV-14 à IV-16* que le rayonnement des raies de résonance ne représente plus la principale composante du rayonnement total. En effet, ces raies étant fortement absorbées dès les premiers millimètres, le rayonnement du continuum beaucoup moins absorbé et celui des raies non autoabsorbées contribuent de façon non négligeable au rayonnement total et ceci pour les trois types de gaz purs.

Dans le cas de l'argon pur (*fig.IV-14*) et pour des températures inférieures à 10000K, le rayonnement des raies de résonance et du continuum reste négligeable devant celui des raies non autoabsorbées. Pour des températures supérieures, le rayonnement des raies de résonance devient petit à petit majoritaire devant celui des raies non autoabsorbées, le rôle du continuum diminuant pour des températures supérieures à 19000K. Au delà, le coefficient d'émission nette peut être ramené essentiellement à celui des raies de résonance.

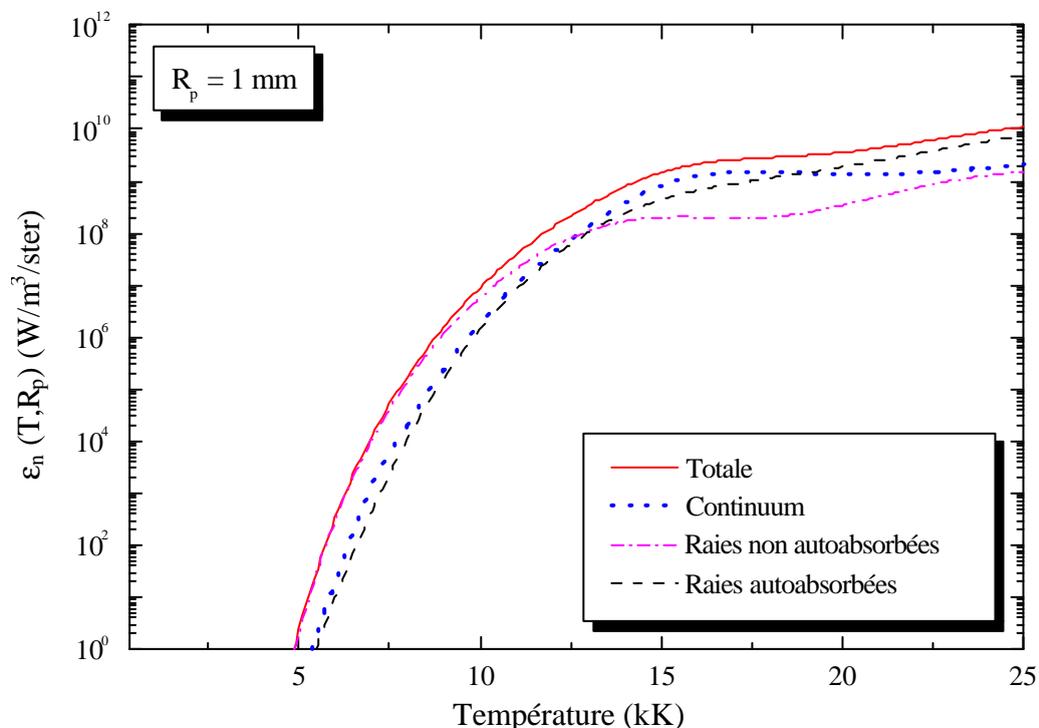


Fig.IV-14: Composantes du CEN d'un plasma d'Argon pur pour $R_p=1\text{mm}$

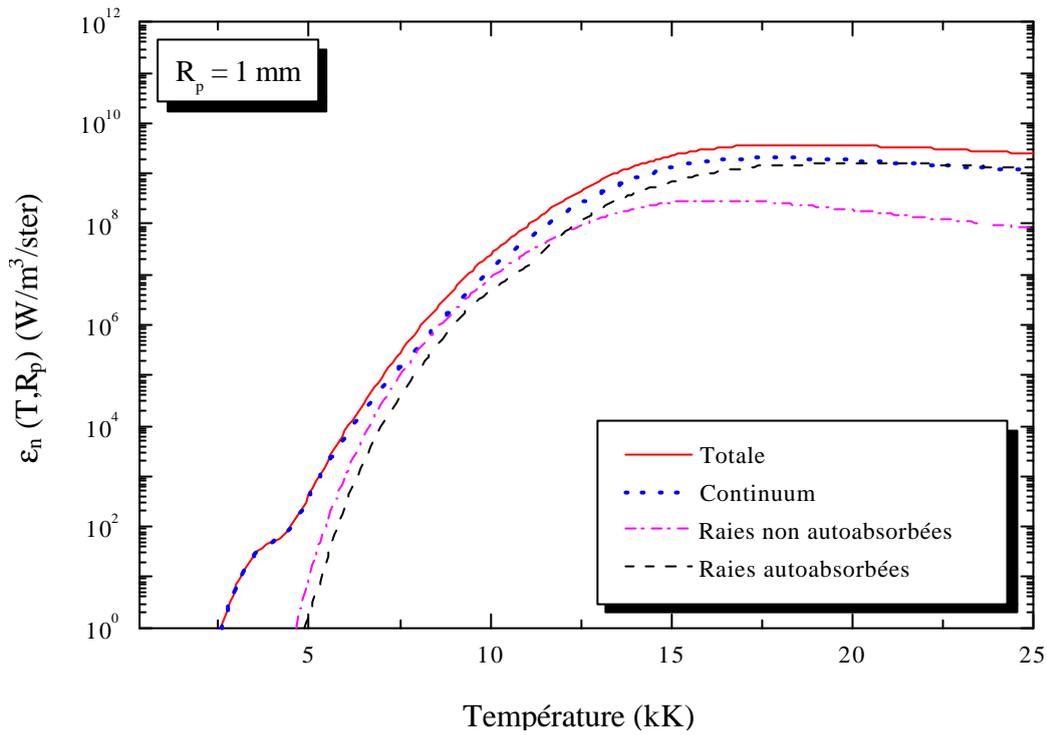


Fig.IV-15: Composantes du CEN d'un plasma d'Hydrogène pur pour $R_p=1\text{mm}$

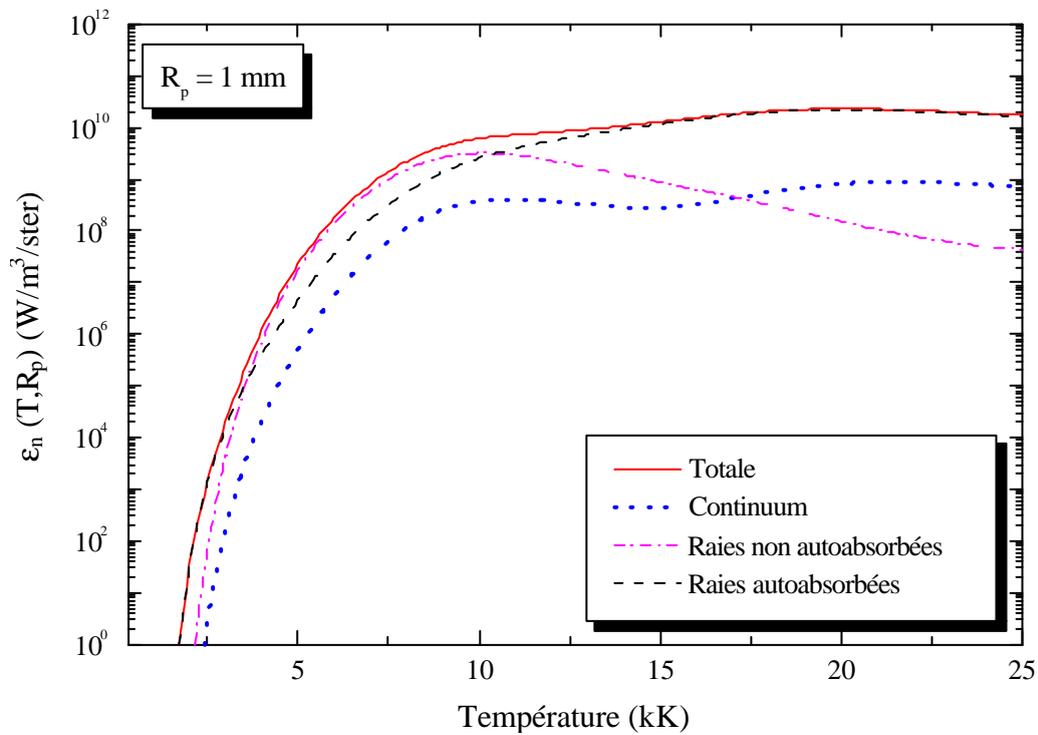


Fig.IV-16: Composantes du CEN d'un plasma de Cuivre pur pour $R_p=1\text{mm}$

Pour l'hydrogène (*fig.IV-15*), les raies de résonance sont tellement absorbées que le continuum est la principale composante du rayonnement total sur la quasi-totalité de la gamme de température étudiée. Le coefficient d'émission nette total est donc équivalent à celui du continuum pour des températures inférieures à 7500K auquel s'ajoutent progressivement celui des raies non autoabsorbées non négligeable pour les températures allant jusqu'à 12500K et celui des raies autoabsorbées pour des températures supérieures. L'autoabsorption devient minimale pour des températures voisines de 15000K où la contribution des raies de résonance des atomes neutres est presque maximale, la densité électronique importante et les raies fortement élargies par effet Stark.

Enfin, pour le cuivre et des températures faibles ($T < 3000\text{K}$), le coefficient d'émission nette résulte essentiellement du rayonnement des raies de résonance (*fig.IV-16*), le continuum ne jouant pas un rôle important à l'inverse d'un plasma d'argon ou d'hydrogène pur. Puis, entre 3000K et 10000K, ces raies sont fortement absorbées laissant une place importante aux raies non autoabsorbées. Pour des températures supérieures à 10000K, le rayonnement des raies de résonance représente de nouveau la part principale du rayonnement total, les raies non autoabsorbées étant très nombreuses mais peu intenses pour les espèces Cu^+ et Cu^{2+} .

A partir de toutes ces observations faites sur les trois coefficients d'émission nette des gaz ou vapeurs purs, nous pouvons donc en conclure que le rayonnement dans les zones chaudes de l'arc est majoritairement dû au rayonnement des raies de résonance dans le cas d'un plasma optiquement mince. Celles-ci sont fortement absorbées pour de faibles épaisseurs du plasma permettant aux deux autres composantes que sont le rayonnement du continuum et des raies non autoabsorbées de devenir non négligeables pour les autres rayons non nuls.

b - Mélanges Argon-Hydrogène-Cuivre

Les *figures IV-17 et IV-18* montrent les résultats du coefficient d'émission nette total et des différentes contributions obtenus pour le mélange 79%Ar-20% H_2 -1%Cu et deux rayons du plasma (0mm et 1mm). Comme dans le cas des plasmas purs, le rayonnement total pour un plasma optiquement mince est totalement dû aux raies de résonance (*fig.IV-17*) alors que les contributions du continuum et des raies non autoabsorbées prennent de l'importance dès que l'épaisseur du plasma augmente, les raies de résonance étant alors fortement absorbées.

Nous avons reporté sur les *figures IV-19 et IV-20* la contribution des raies autoabsorbées de chaque élément sur le coefficient d'émission nette total des raies autoabsorbées $\epsilon_n^{\text{rauto}}(T)$. D'après la *figure IV-19*, ce sont les raies autoabsorbées du cuivre qui représentent la totalité du rayonnement pour un plasma optiquement mince et des températures inférieures à 7500K. Nous observons également ce résultat pour un rayon de 1mm (*fig.IV-20*) et des températures allant jusqu'à 10000K. Puis, c'est au tour des raies d'hydrogène de représenter la majeure partie du rayonnement pour un rayon nul alors qu'elles contribuent plus faiblement pour un rayon de 1mm, phénomène probablement dû à la forte absorption de ces raies. Pour ce mélange et des température supérieures à 20000K, l'émission des raies autoabsorbées reste la seule composante du coefficient d'émission nette totale des raies autoabsorbées. Ce comportement s'explique non seulement par une forte densité d'ions Ar^+ mais aussi par un nombre plus important de raies pour cette espèce.

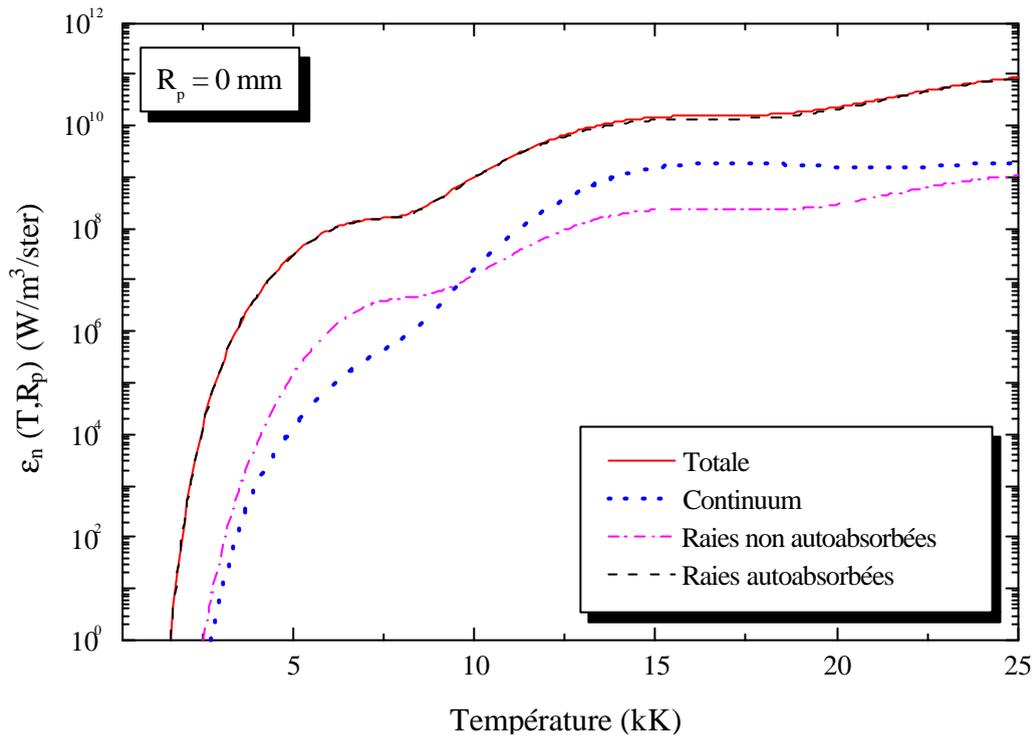


Fig.IV-17: Composantes du CEN d'un plasma 79%Ar-20%H₂-1%Cu optiquement mince

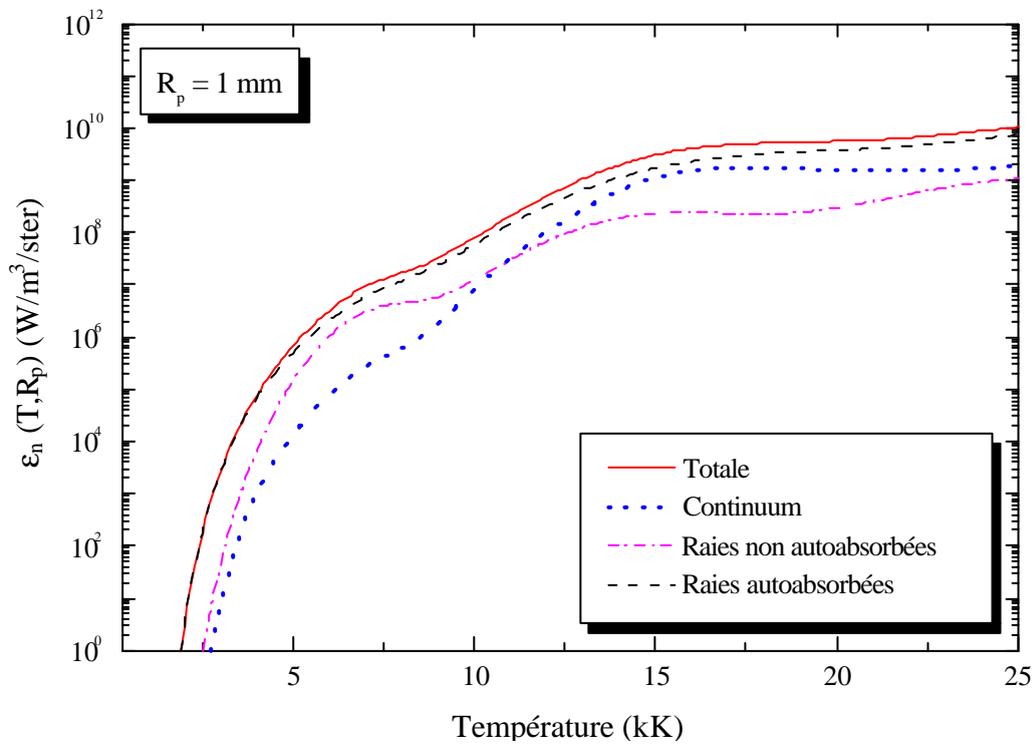


Fig.IV-18: Composantes du CEN d'un plasma 79%Ar-20%H₂-1%Cu pour $R_p=1\text{mm}$

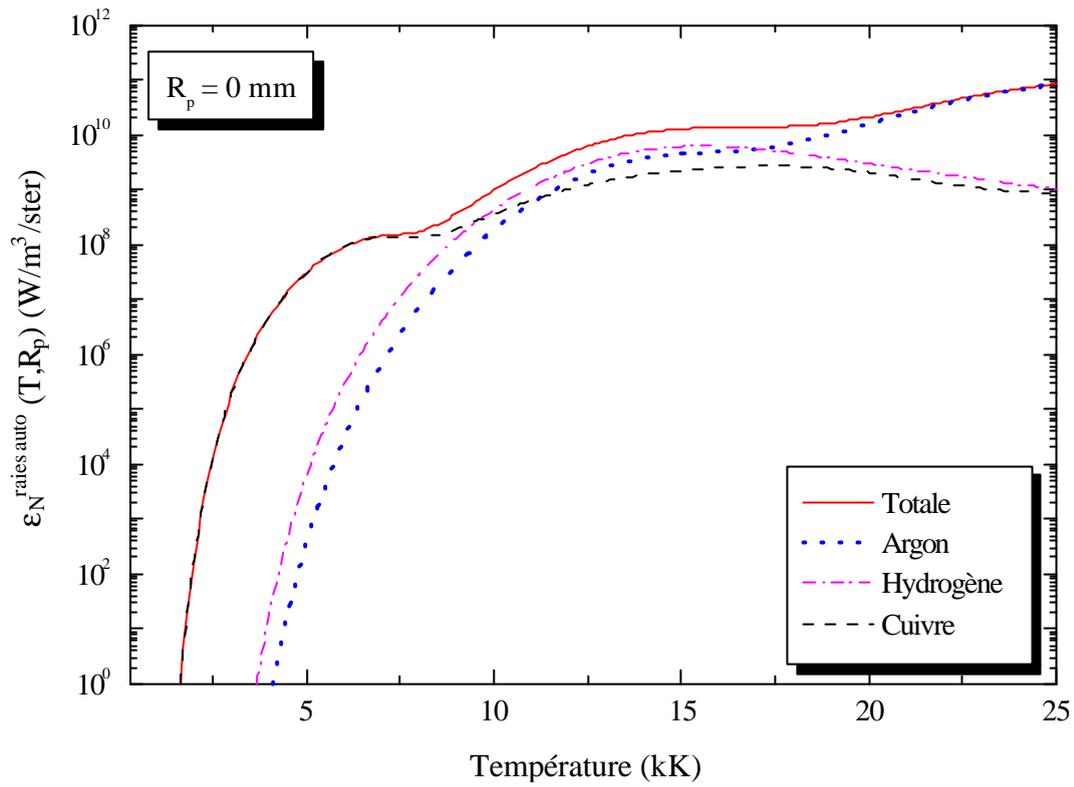


Fig.IV-19: CEN des raies de résonance par espèce 79%Ar-20%H₂-1%Cu et $R_p=0\text{mm}$

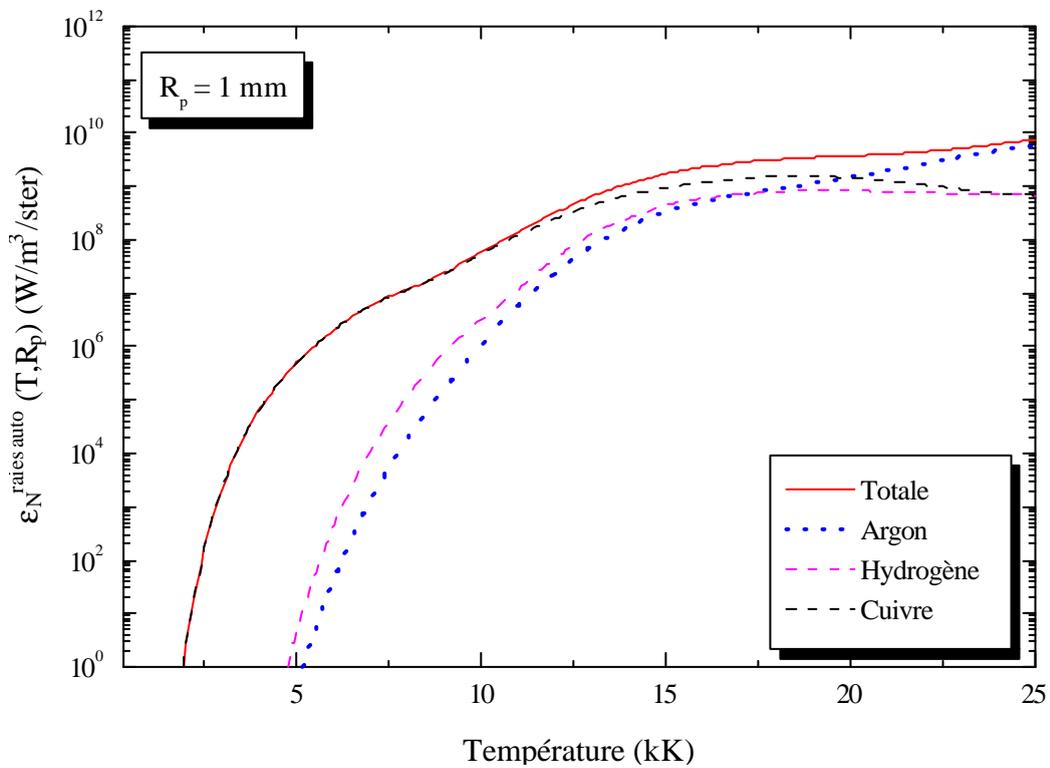


Fig.IV-20: CEN des raies de résonance par espèce 79%Ar-20%H₂-1%Cu et $R_p=1\text{mm}$

2.3.3 – Influence des vapeurs métalliques

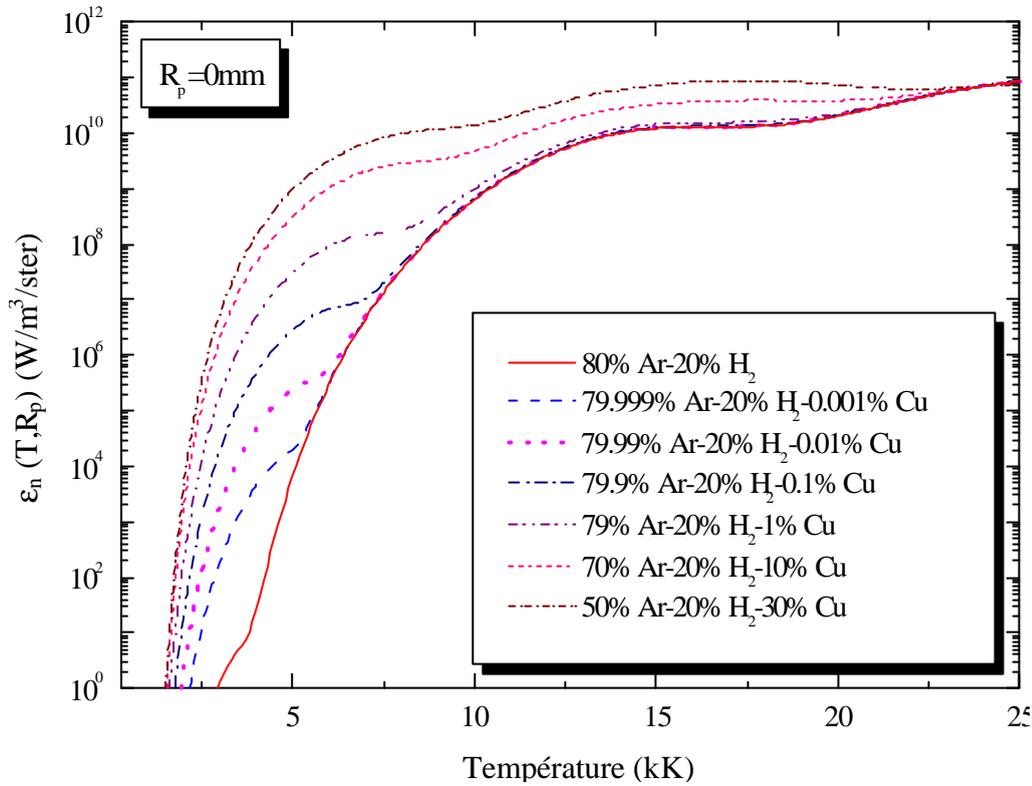


Fig.IV-21: Influence des vapeurs métalliques sur le CEN pour $R_p=0mm$

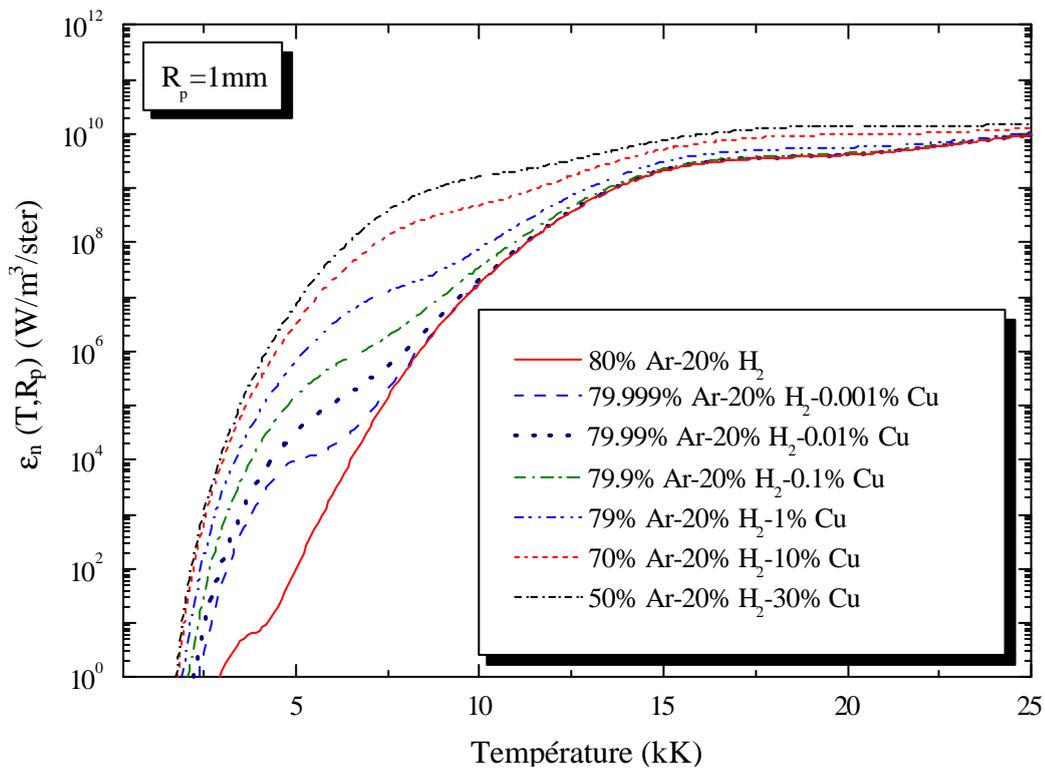


Fig.IV-22: Influence des vapeurs métalliques sur le CEN pour $R_p=1mm$

Les *figures IV-21* et *IV-22* montrent l'influence des vapeurs métalliques de cuivre sur le coefficient d'émission nette. Pour une pression atmosphérique, les résultats du rayonnement sont présentés pour deux épaisseurs du plasma (0mm et 1mm) en fonction de la température, pour plusieurs proportions de cuivre (0%, 0.001%, 0.01%, 0.01%, 1%, 10%, 30%).

Dans les deux cas, nous constatons qu'une faible proportion de cuivre augmente considérablement le rayonnement net à faible température. Ce phénomène s'explique par une forte augmentation de la densité électronique N_e due à l'ionisation du cuivre dont le potentiel d'ionisation est plus faible devant celui de l'argon et de l'hydrogène. Cette variation est également due à la richesse du spectre de cuivre dont les nombreuses raies sont peu absorbées pour ces températures.

2.3.4 – Comparaison avec la littérature pour les gaz purs

En comparant nos résultats avec les travaux antérieurs de notre groupe, nous observons sur les *figures IV-23*, *IV-24* et *IV-25* quelques différences notables.

Argon pur :

En effet, pour un plasma d'argon et un rayon $R_p=0\text{mm}$, *la figure IV-23* nous informe d'une sous estimation du rayonnement par rapport à celui issu des travaux d'*Erraki* [Er-1] et ceci pour des températures supérieures à 12500K. Dans le cas d'un rayon $R_p=1\text{mm}$, le rayonnement obtenu est cette fois-ci moins important pour des températures inférieures à 12500K. De plus, nos résultats diffèrent pour des températures inférieures à 6000K quel que soit le rayon du plasma. D'après les observations faites précédemment, nous savons que le rayonnement dans les parties chaudes du plasma résulte essentiellement des raies de résonance de l'argon et plus particulièrement de l'espèce Ar^+ . En comparant notre banque de raies à celle d'*Erraki*, nous avons trouvé deux transitions de l'argon Ar^+ pour lesquelles les probabilités de transitions sont nettement différentes suivant qu'elles proviennent du *NIST* [Ni-1] ou de *Kurucz et Petremann* [Ku-2]. En effet, pour ces deux raies situées à 91,978 nm et 93,205nm, les valeurs données sont respectivement $0,089.10^8\text{s}$ et $0,088.10^8\text{s}$ pour le NIST (utilisée dans notre banque), $0,165.10^8\text{s}$ et $0,659.10^8\text{s}$ pour Kurucz et Petremann (utilisée par *Erraki*). En remplaçant nos valeurs par celles issues de Kurucz et Petremann, les résultats obtenus sont en accord avec ceux donnés par *Erraki* pour des températures supérieures à 6000K et les rayons étudiés. Par conséquent, l'écart observé pour des températures supérieures à 6000K entre le rayonnement que nous avons calculé et celui donné par *Erraki* provient bien d'une banque de données différente et plus particulièrement des probabilités de transitions de ces deux raies.

Malgré les changements effectués dans notre banque de données pour expliquer les écarts observés, une différence subsiste toujours pour des températures inférieures à 6000K. En effet, après avoir comparé les composantes du rayonnement total, nous avons constaté que cette différence provenait du rayonnement continu. Ne connaissant pas les valeurs du facteur de Biberman en dessous de ces températures, l'approximation faite par *Erraki* pour calculer la recombinaison radiative dans cette gamme de température est la suivante :

$$\kappa'_{c,v}(T < 6000) = \kappa'_{c,v}(T)(6000) \cdot \frac{6000}{T} \quad (IV-11)$$

Dans notre étude, nous avons comparé les valeurs du facteur de Biberman des deux espèces Ar et Ar⁺ pour des températures allant de 6000K à 8000K et des longueurs d'onde comprises entre 300 et 16000Å, les valeurs n'étant pas connues pour des longueurs d'onde supérieures. Nous avons constaté que ce facteur varie très peu suivant la température. Afin de prendre en compte l'importance des phénomènes d'ionisation de l'argon Ar (786,72Å) et Ar⁺ (448,79Å), nous avons donc considéré les hypothèses suivantes :

$$\begin{cases} \text{Pour } \lambda < 786,72\text{Å nous avons } \kappa'_{c,v,Ar}(T < 6000) = \kappa'_{c,v,Ar}(6000) \cdot \frac{6000}{T} \\ \text{Pour } \lambda > 786,72\text{Å nous avons } \xi_{Ar}(v, T < 6000) = \xi_{Ar}(v, 6000) \end{cases} \quad (IV-12)$$

$$\begin{cases} \text{Pour } \lambda < 448,79\text{Å nous avons } \kappa'_{c,v,Ar^+}(T < 6000) = \kappa'_{c,v,Ar^+}(6000) \cdot \frac{6000}{T} \\ \text{Pour } \lambda > 448,79\text{Å nous avons } \xi_{Ar^+}(v, T < 6000) = \xi_{Ar^+}(v, 6000) \end{cases} \quad (IV-13)$$

Lorsque nous utilisons l'approximation proposée par Erraki, nos résultats se superposent aux siens. Par conséquent, nous pouvons en conclure que cet écart pour des températures inférieures à 6000 représenté sur la **figure IV-23** est bien la conséquence des approximations (IV-12) et (IV-13) utilisées dans le calcul du coefficient d'absorption du continuum.

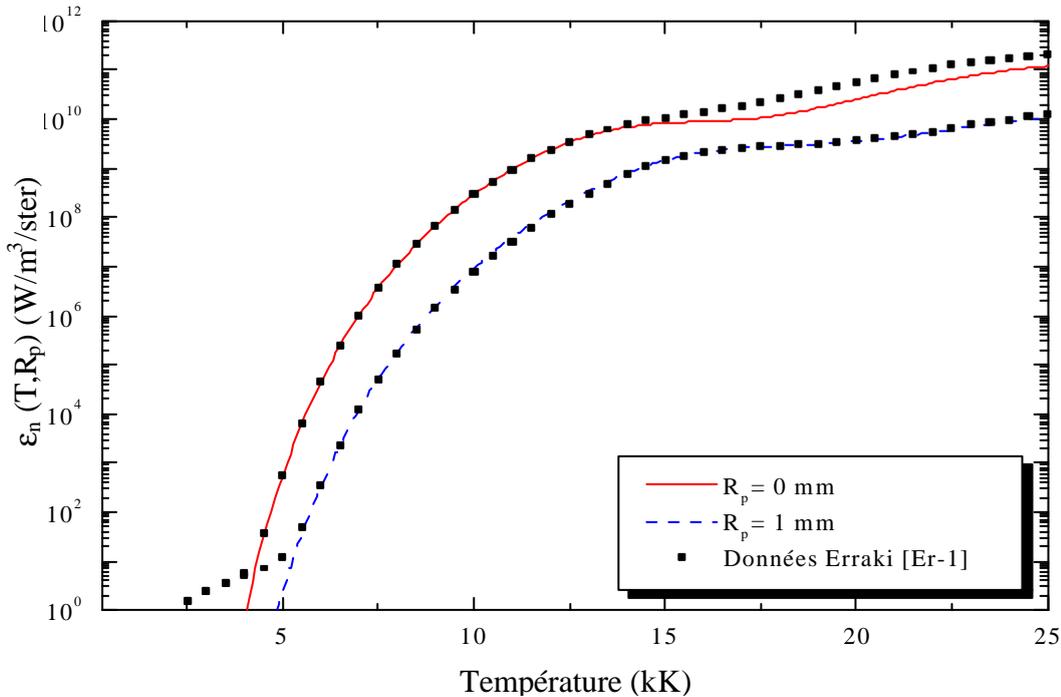


Fig.IV-23: Comparaison du CEN d'un plasma d'Argon pur avec la littérature

Hydrogène pur :

Dans le cas d'un gaz composé uniquement d'hydrogène (*fig.IV-24*), la comparaison effectuée entre les résultats de *Riad* [Ri-1] et les nôtres montre un accord satisfaisant pour des températures supérieures à 3700K ceci quelle que soit la valeur du rayon du plasma étudié. A l'inverse, pour des températures inférieures, nous trouvons un rayonnement total plus important. En comparant une à une les différentes composantes du rayonnement, nous avons constaté que cette différence provenait du rayonnement continu. En effet, tout au long des ses travaux sur l'hydrogène pur, [Ri-1] n'a pas tenu compte de la contribution moléculaire de l'hydrogène moléculaire H_2 . Afin de confirmer l'hypothèse d'un écart dû au continuum moléculaire non négligé dans nos calculs, nous avons calculé ce même coefficient d'émission nette sans la contribution moléculaire. Les résultats présentés sur cette même figure montrent alors un bon accord entre les deux calculs. Par conséquent, prendre en considération le continuum moléculaire dans le coefficient d'absorption total pour des températures inférieures à 3700K augmente de façon considérable le rayonnement total.

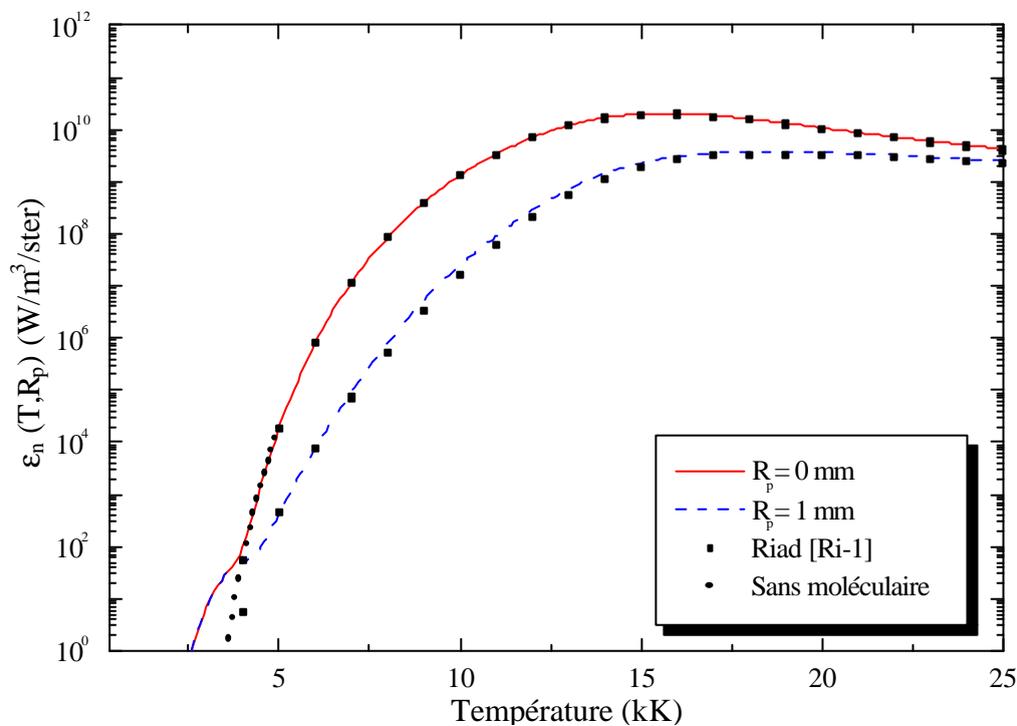


Fig.IV-24: Comparaison du CEN d'un plasma d'Hydrogène pur avec la littérature

Cuivre pur :

Pour un plasma optiquement mince, nos résultats sont en parfait accord avec ceux de *Liani* [Li-1]. Par contre, pour un rayon de 1mm, une grande différence apparaît sur la *figure IV-25*. L'accord satisfaisant obtenu pour $R_p=0$ mm nous indique dans un premier temps que les banques de données se rapprochent fortement. Par conséquent, le désaccord peut s'expliquer par des probabilités de transition différentes pour les raies non autoabsorbées beaucoup plus influentes pour un rayon de 1mm.

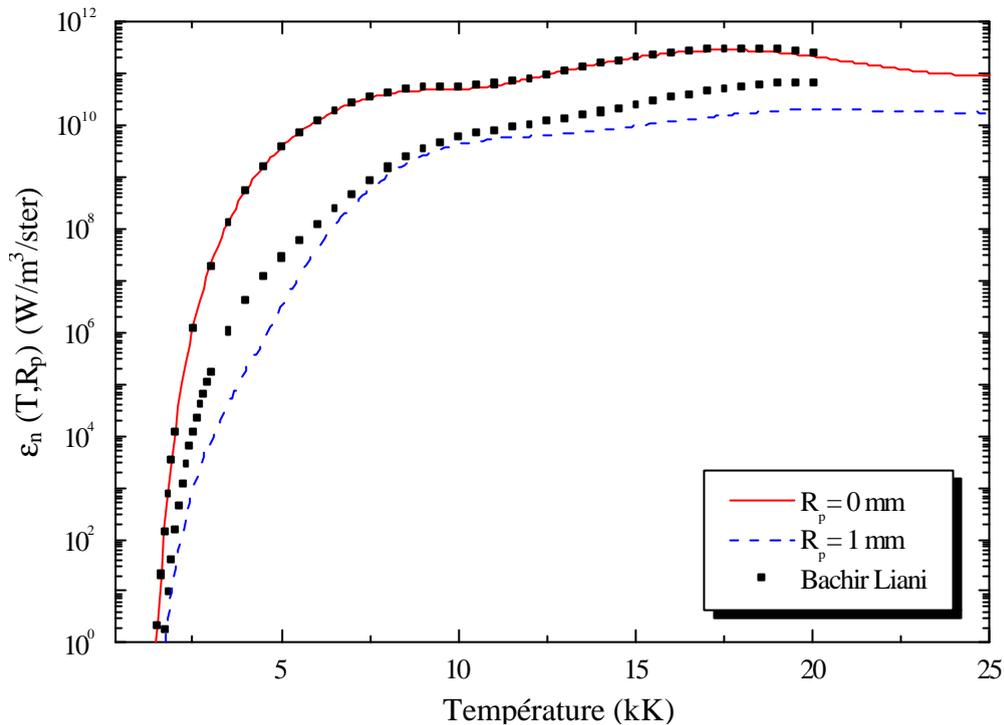


Fig.IV-25: Comparaison du CEN d'un plasma de Cuivre pur avec la littérature

III – METHODE DU COEFFICIENT MOYEN D'ABSORPTION (CMA)

3.1 – Principe de l'étude

La méthode du « coefficient moyen d'absorption » ou « méthode du corps gris » dans différentes bandes de fréquence est fondée sur le découpage du spectre de fréquence en plusieurs bandes (intervalles de fréquence et non transition entre deux niveaux) pour une température donnée. Nous calculons sur chaque bande un coefficient moyen d'absorption en sommant les contributions du continuum et des raies spectrales. Comme dans le paragraphe précédent, nous sommes amenés à traiter des raies spectrales ayant des formes complexes, partiellement ou totalement absorbées et pouvant influencer fortement le rayonnement total. Pour ce type de raie, nous avons multiplié le coefficient d'absorption pour chacune d'elle par le facteur de fuite dépendant grandement des caractéristiques de la raie (force oscillateur et élargissement) et du rayon du plasma. Cette méthode permet d'établir une banque de données des coefficients moyen d'absorption pour les différentes bandes, en fonction de la pression et de la température. Par la suite, l'utilisation de ces résultats dans des modèles permet de mieux comprendre le rayonnement dans les zones froides.

3.2 – Méthode de calcul

3.2.1 – Détermination des bandes spectrales

La base de données utilisée est identique à celle employée pour le calcul du coefficient d'émission nette. Nous avons constaté lors du calcul du coefficient d'absorption continu la présence de plusieurs sauts correspondant aux différentes énergies d'ionisation des espèces présentes. Généralement, entre deux sauts et pour une température donnée, le coefficient total $\kappa_v(T)$ varie peu quelle que soit la fréquence. Ces bandes sont donc principalement définies à partir de la structure électronique et des caractéristiques du continuum et plus particulièrement des énergies d'ionisation et de dissociation des espèces. La première difficulté consiste à caractériser les variations du coefficient d'absorption avec un nombre minimum de bandes pour diminuer le temps de calcul, tout en tenant compte des phénomènes atomiques et moléculaires.

Pour un plasma de type Ar/H₂/Cu et des fréquences allant de l'infrarouge à l'ultraviolet lointain, les bandes spectrales restent inchangées quelle que soit la température et sont définies suivant les variations du coefficient d'absorption continu (*fig.IV-26*) dont les valeurs et les phénomènes associés sont indiqués dans le *tableau IV-3* :

Tableau IV-3 : Bandes de fréquence

	Fréquences en 10^{15} Hz	Longueurs d'onde en Å	Phénomènes
Bande 1	$0.066 < \mathbf{n} < 0.200$	$14989.620 < \mathbf{l} < 45000.000$	①
Bande 2	$0.200 < \mathbf{n} < 0.850$	$3526.970 < \mathbf{l} < 14989.620$	②
Bande 3	$0.850 < \mathbf{n} < 1.868^*$	$1604.690 < \mathbf{l} < 3526.970$	③ * $\nu_{\text{ionisation Cu}}$
Bande 4	$1.868 < \mathbf{n} < 3.288^*$	$911.753 < \mathbf{l} < 1604.690$	④ * $\nu_{\text{ionisation H}}$
Bande 5	$3.288 < \mathbf{n} < 3.810^*$	$786.720 < \mathbf{l} < 911.753$	⑤ * $\nu_{\text{ionisation Ar}}$
Bande 6	$3.810 < \mathbf{n} < 6.680^*$	$448.790 < \mathbf{l} < 786.720$	⑥ * $\nu_{\text{ionisation Ar}^+}$
Bande 7	$6.680 < \mathbf{n} < 9.993$	$300.000 < \mathbf{l} < 448.790$	⑦

① une première bande comprise entre 6,60E+13Hz et 2,00E+14Hz représente la région spectrale d'infrarouge où l'énergie des photons est trop faible pour ioniser les atomes. Les deux fréquences limites de la bande sont relativement arbitraires. Le rayonnement est supposé négligeable pour des fréquences inférieures à 6,60E+13Hz.

② la seconde bande est comprise entre 2,00E+14Hz et 8,50E+14Hz où les espèces sont toujours sous forme atomique ou moléculaire. Cette bande permet de faire une transition entre la rapide décroissance du coefficient d'absorption observée dans la première bande et la première « cassure » apparaissant à la fréquence 8,50E+14Hz pour quasiment toutes les températures étudiées.

③ la troisième bande comprend les fréquences entre 8,50E+14Hz et 1,87E+15Hz dont la borne supérieure correspond à l'énergie d'ionisation du cuivre. Nos calculs étant faits pour des pourcentages d'hydrogène H₂ toujours inférieurs à 20%, nous n'avons pas jugé utile de prendre en compte la dissociation de H₂ par l'ajout d'une nouvelle bande. De même, nous

avons considéré qu'il n'était pas nécessaire de tenir compte au mieux des variations rapides et importantes de la structure électronique du cuivre, ces dernières s'estompant rapidement avec l'augmentation de la température.

④ Cette quatrième bande concerne toutes les fréquences comprises entre la fréquence d'ionisation du cuivre ($1,87E+15\text{Hz}$) et celle de l'hydrogène ($3,29E+15\text{Hz}$), donnant un rôle important aux transitions de l'espèce Cu^+ .

⑤ la cinquième bande est définie pour des fréquences dont la borne inférieure est l'énergie d'ionisation de l'hydrogène ($3,29E+15\text{Hz}$) et la borne supérieure celle de l'argon ($3,81E+15\text{Hz}$).

⑥ la sixième bande comprend les fréquences allant de $3,81E+15\text{Hz}$ (énergie d'ionisation de l'argon) à $6,68E+15\text{Hz}$ (énergie d'ionisation de l'ion Ar^+). Nous pouvons donc étudier dans cette bande l'influence des transitions liées à l'espèce Ar^+ .

⑦ la dernière bande est définie pour des fréquences supérieures à l'énergie d'ionisation de l'ion Ar^+ ($6,68E+15\text{Hz}$). Nous négligeons les fréquences supérieures à 10^{16}Hz représentant une région de forte énergie où la contribution du rayonnement est faible. En effet, pour ces fréquences élevées, la densité du rayonnement à l'équilibre $L_\nu(T)$ est très faible pour des températures élevées et contrebalance les fortes valeurs du coefficient d'absorption $\kappa_\nu(T)$ dans l'expression $\epsilon_\nu(T) = L_\nu(T)\kappa_\nu(T)$.

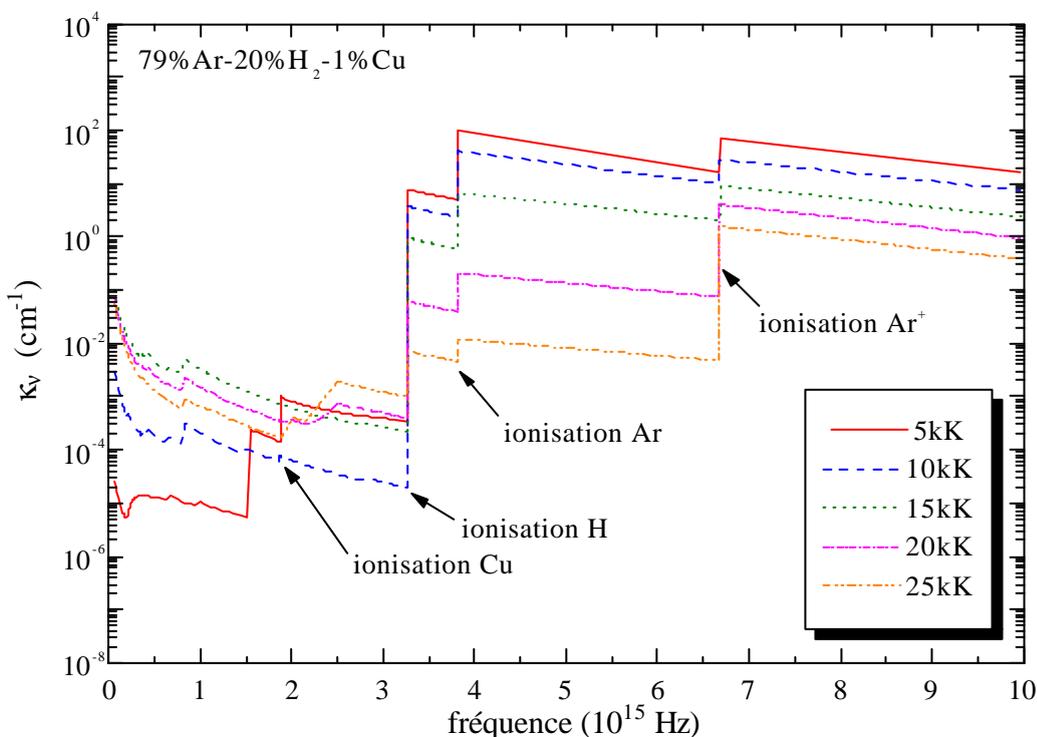


Fig.IV-26: Variation du coefficient total d'absorption continu suivant la température

3.2.2 – Contribution du continuum

Une fois le spectre découpé en plusieurs bandes spectrales distinctes, le coefficient moyen d'absorption du continuum est défini par la relation (IV-14) représentant une moyenne pondérée par la fonction de Planck et considérant l'émissivité locale du milieu.

Pour une bande i donnée, nous avons :

$$\langle \kappa'_{c,v}(T) \rangle_i = \frac{\int_{\nu_i}^{\nu_{i+1}} L_v^o(T) \kappa'_{c,v}(T) dv}{\int_{\nu_i}^{\nu_{i+1}} L_v^o(T) dv} = \frac{1}{\omega_{i,i+1}} \int_{\nu_i}^{\nu_{i+1}} L_v^o(T) \kappa'_{c,v}(T) dv \quad (IV-14)$$

avec $\omega_{i,i+1} = \int_{\nu_i}^{\nu_{i+1}} L_v^o(T) dv$ la fonction poids du rayonnement du corps noir dans l'intervalle de fréquence défini par ν_i et ν_{i+1} et des températures comprises entre 300K et 25000K.

Notons qu'avec σ la constante de Stefan, nous retrouvons la loi de Stefan-Boltzmann (I-17) lors de la sommation des fonctions poids sur tout le spectre (fig.IV-27) :

$$\int_0^{\infty} L_v^o(T) dv = \sum_i \omega_{i,i+1} = \frac{\sigma}{\pi} T^4 \quad (IV-15)$$

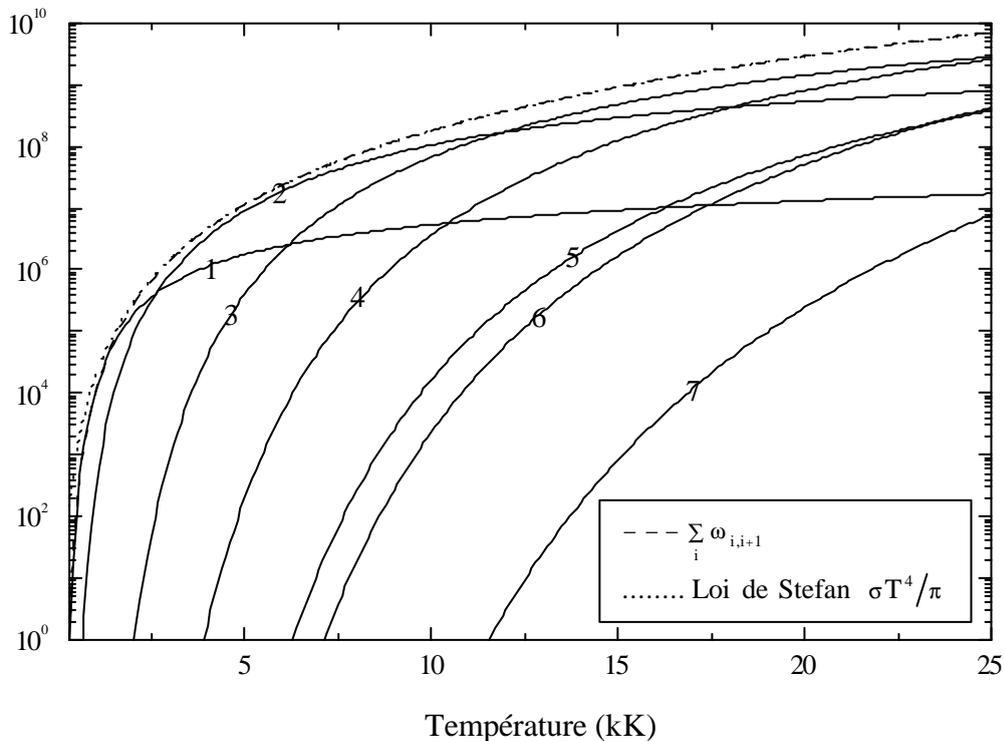


Fig.IV-27: Fonction de Planck intégrée suivant les bandes et vérification de la loi de Stefan

3.2.3 – Contribution des raies atomiques

Nous avons différencié les raies en deux groupes : les raies autoabsorbées (correspondant aux raies aboutissant sur le niveau fondamental ou l'un des tout premier niveaux excités) et les raies non-autoabsorbées (raies traversant le milieu comme un milieu transparent représentant les transitions entre états excités). La sommation en fréquence du coefficient d'absorption total sur tout le profil de la raie est donnée par la loi de Ladenburg :

$$\kappa_{\text{raie}}(T) = \int \kappa_{\nu}(T) \cdot d\nu = \frac{\pi e^2}{m_e c} f_{\text{bh}} \overline{n_b} \quad (\text{IV-16})$$

avec $\overline{n_b}$ la densité moyenne d'atomes excités sur le niveau bas de la raie et f_{bh} la force oscillateur en absorption de la transition. Pour une raie émise à la fréquence ν_o comprise entre ν_i et ν_{i+1} , le coefficient moyen d'absorption de la raie est défini en divisant $\kappa_{\text{raie}}(T)$ corrigé de l'émission induite par l'intervalle $\Delta\nu = \nu_{i+1} - \nu_i$, soit :

$$\langle \kappa'_{\text{raie}, \nu_o}(T) \rangle_i = \frac{\kappa_{\text{raie}}(T) \cdot L_{\nu_o}^o(T)}{\omega_{i,i+1}} \left(1 - \exp\left(-\frac{h\nu_o}{k_b T}\right) \right) \quad (\text{IV-17})$$

a – Raies non autoabsorbées

D'après la définition de la fonction poids reliant la fonction de Planck à l'intervalle $\Delta\nu$, nous pouvons écrire le coefficient moyen d'absorption des raies non-autoabsorbées sous la forme :

$$\langle \kappa'_{\text{non_auto}, \nu_o}(T) \rangle_i = \frac{\frac{\pi e^2}{m_e c} f_{\text{bh}} \overline{n_b} \cdot L_{\nu_o}^o(T)}{\omega_{i,i+1}} \left(1 - \exp\left(-\frac{h\nu_o}{k_b T}\right) \right) \quad (\text{IV-18})$$

b – Raies autoabsorbées

Pour un rayon nul (milieu transparent), le calcul pour ces raies pourrait se faire comme pour les raies non-autoabsorbées. Le coefficient total ainsi calculé conduirait à une forte surestimation de l'absorption de certaines des raies. Sachant qu'une fraction importante des raies de résonance est autoabsorbée sur une faible épaisseur du plasma, introduire un facteur compris entre 0 et 1 réduit cette surestimation du phénomène d'autoabsorption. En effet, le fait d'assimiler le comportement d'une raie à celui d'un fond continu élargi représente un grand danger pour le calcul de l'autoabsorption.

Prenons par exemple deux profils représentant le coefficient d'absorption dans une bande spectrale $[\nu_1, \nu_2]$:



Fig IV-28 : Surestimation du phénomène d'autoabsorption

Dans les deux cas, les deux aires sont identiques. Dans un milieu isotherme, le rayonnement net qui s'échappe du plasma de rayon R_p s'écrit :

$$\varepsilon_N(T, R_p) = \int_{\nu} L_{\nu}^{\circ}(T) \kappa_{\nu}(T) \exp(-\kappa_{\nu}(T)R_p) \quad (IV-19)$$

Dans notre exemple et pour une faible bande spectrale, nous pouvons donc écrire: (IV-20)

$$\begin{aligned} \varepsilon_1(T, R_p) &\cong \overline{\kappa_1}(T) \cdot \overline{L^{\circ}}(T) \cdot \Delta\nu \cdot \exp(-\kappa_1(T)R_p) \\ \text{et } \varepsilon_2(T, R_p) &\cong \overline{\kappa_2}(T) \cdot \overline{L^{\circ}}(T) \cdot \delta\nu \cdot \exp(-\kappa_2(T)R_p) \end{aligned}$$

Or, d'après l'égalité des aires $\overline{\kappa_1}(T) \cdot \overline{L^{\circ}}(T) \cdot \Delta\nu \cong \overline{\kappa_2}(T) \cdot \overline{L^{\circ}}(T) \cdot \delta\nu$, le fait d'avoir $\kappa_2 \gg \kappa_1$ peut nous conduire à des résultats vérifiant $\varepsilon_1 \gg \varepsilon_2$.

Par conséquent, l'introduction dans la relation (IV-16) du facteur de fuite Λ_r inférieur à l'unité compense cette surestimation de l'autoabsorption. Toutefois, selon sa définition, utiliser ce facteur Λ_r revient à considérer indirectement un paramètre supplémentaire qu'est l'épaisseur optique. Calculé pour le coefficient d'émission nette en milieu isotherme, Λ_r est donné pour une température et un rayon fixés (cf Ch.III). L'expression finale du coefficient moyen d'absorption pour ce type de raie partiellement ou totalement absorbée à la fréquence ν_0 comprise entre ν_i et ν_{i+1} est la suivante :

$$\langle \kappa_{\text{auto}, \nu_0}(T) \rangle_i = \frac{\pi e^2}{m_e c} \cdot f_{bh} \overline{n_b} \cdot \left(1 - \exp\left(-\frac{h\nu_0}{k_b T}\right) \right) \cdot \frac{L_{\nu_0}^{\circ}(T)}{\omega_{i,i+1}} \cdot \Lambda_r \quad (IV-21)$$

3.2.4 – Coefficient moyen d'absorption total.

Pour une pression atmosphérique, des températures allant de 300K à 25000K et un rayon du plasma variant de 0 à 10 centimètres, le coefficient moyen d'absorption total $\langle \kappa_{\nu}(T, R_p) \rangle$ est obtenu par la sommation des différentes contributions calculées sur chaque bande de fréquence i :

- Continuum total (moléculaire et atomique) $\langle \kappa_{c,v}(T, R_p) \rangle_i$
- Raies non autoabsorbées $\langle \kappa_{\text{non_auto},v}(T) \rangle_i$ ayant des fréquences entre ν_i et ν_{i+1}
- Raies autoabsorbées $\langle \kappa_{\text{auto},v}(T, R_p) \rangle_i$ ayant des fréquences comprises entre ν_i et ν_{i+1}

Pour valider les valeurs du coefficient moyen d'absorption, les variations du coefficient d'émission nette sont comparées aux variations du terme équivalent obtenu pour le coefficient d'absorption moyen :

$$\varepsilon_n(T, R_p) = \sum_{i=1}^{i_{\text{max}} = \text{nbrebandes}} \omega_{i,i+1} \cdot \overline{\kappa_{i,v}(T, R_p)} \cdot \exp(-\overline{\kappa_{i,v}(T, R_p)} \cdot R_p) \quad (IV-22)$$

avec $\overline{\kappa_{i,v}(T, R_p)}$ le coefficient d'absorption moyen total calculé à la température T pour la bande i définie par des fréquences comprises entre ν_i et ν_{i+1} .

Les résultats obtenus sont en bon accord avec ceux du coefficient d'émission nette. Des études antérieures ont montré que cet accord résultait de la pondération du coefficient par la fonction de Planck [Ri-1].

3.3-Résultats et commentaires

Nous avons représenté sur les *figures IV-29* et *IV-30* les résultats du coefficient moyen d'absorption obtenu par bande, pour trois valeurs du rayon du plasma (0mm, 1mm, 1cm), deux températures (10000K et 20000K) et un mélange de 70%Ar-20%H₂-10%Cu. Les *figures IV-31* et *IV-32* fournissent l'évolution des bandes 3 à 6 en fonction de la température, pour les deux premiers rayons et le même pourcentage. Enfin, le *tableau IV-4* nous donne pour chaque espèce les domaines spectraux dans lesquels se trouvent les raies autoabsorbées.

Tableau IV-4 : Domaines caractéristiques des raies autoabsorbées

<i>Espèces</i>	<i>Fréquences en 10¹⁵ Hz</i>	<i>Longueurs d'onde en Å</i>
Ar	2.80 < n < 3.79	790 < l < 1070
Ar ⁺	3.22 < n < 6.52	460 < l < 930
Ar ²⁺	3.33 < n < 8.56	350 < l < 900
Cu	1.14 < n < 1.48	2020 < l < 2620
Cu ⁺	2.56 < n < 8.10	370 < l < 1170
Cu ²⁺	3.52 < n < 4.61	650 < l < 850
H	2.46 < n < 3.29	910 < l < 1200

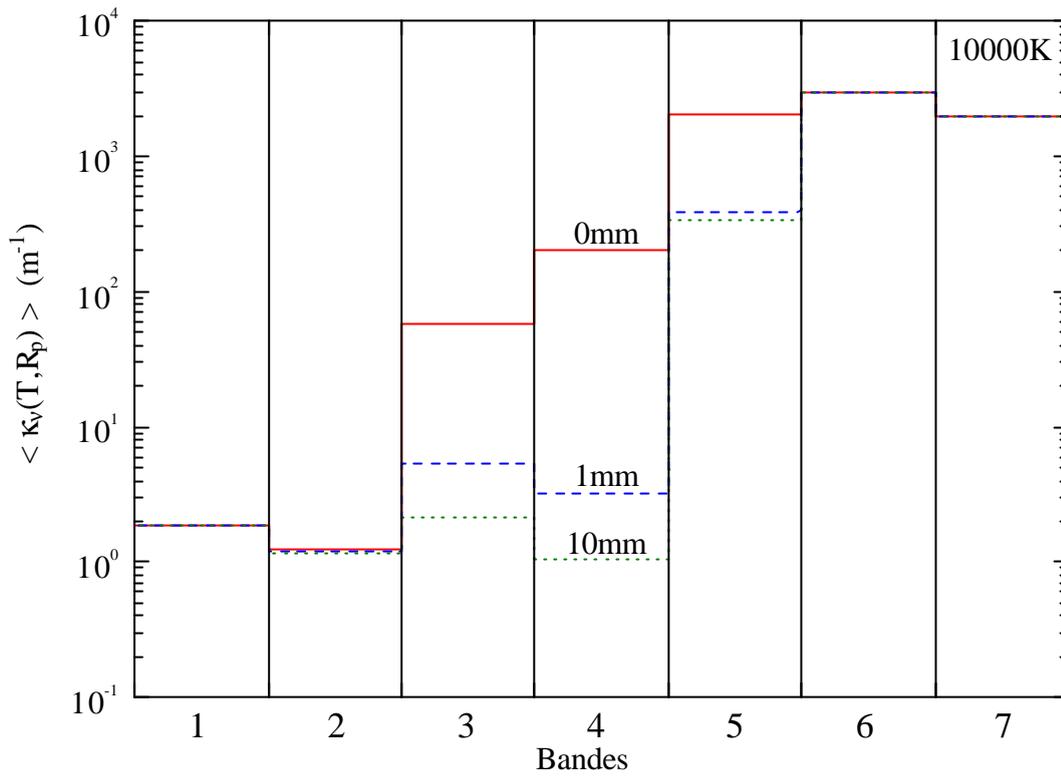


Fig.IV-29: Coefficient moyen d'absorption pour le mélange 70%Ar-20%H₂-10%Cu à T=10000K

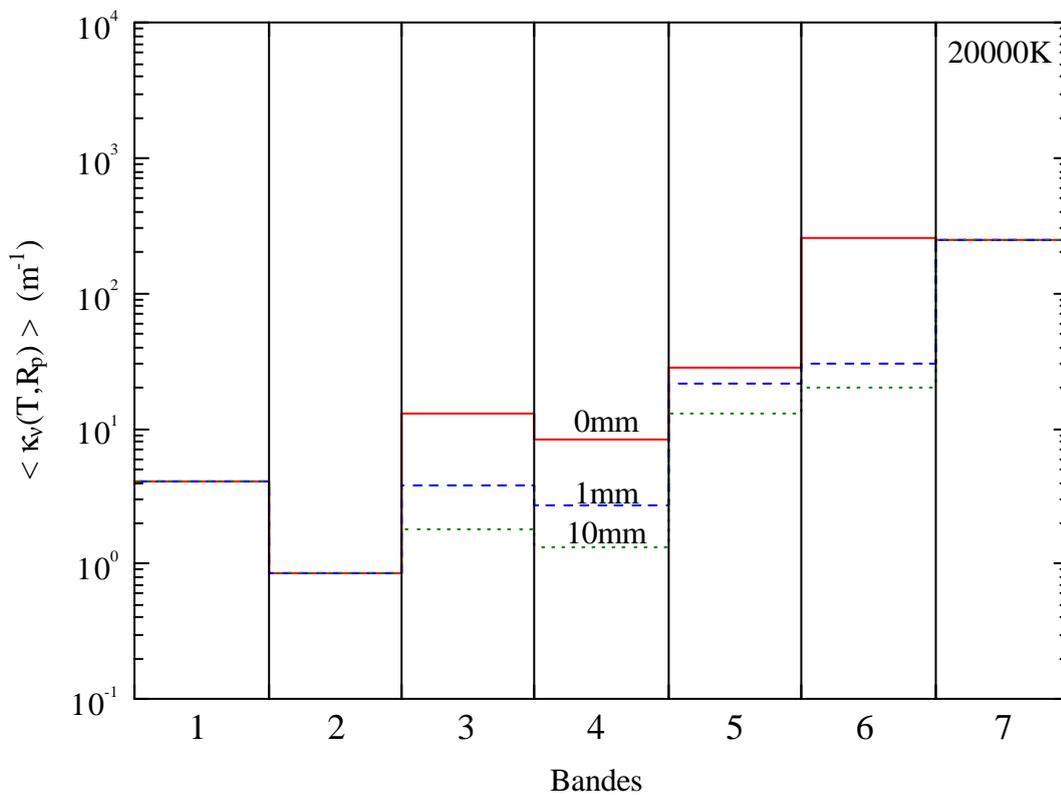


Fig.IV-30: Coefficient moyen d'absorption pour le mélange 70%Ar-20%H₂-10%Cu à T=20000K

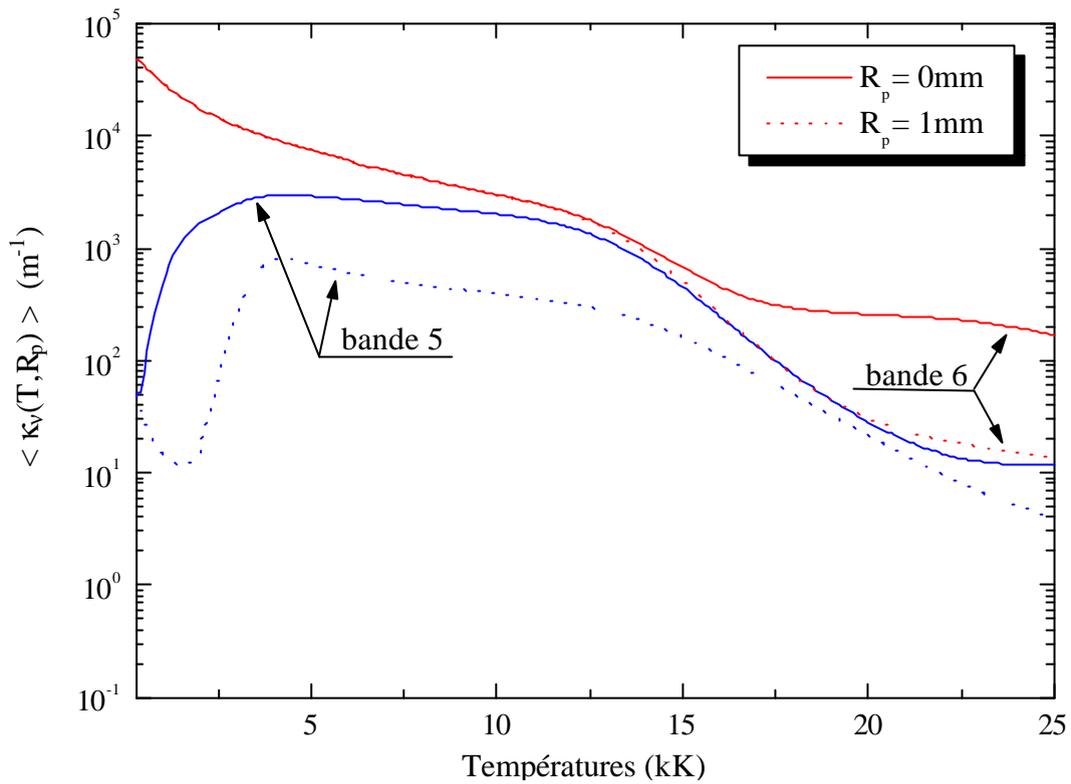


Fig.IV-31: Variation du CMA pour les bandes 5 et 6, le mélange 70%Ar-20%H₂-10%Cu et les deux rayons $R_p=0\text{mm}$ et $R_p=1\text{mm}$

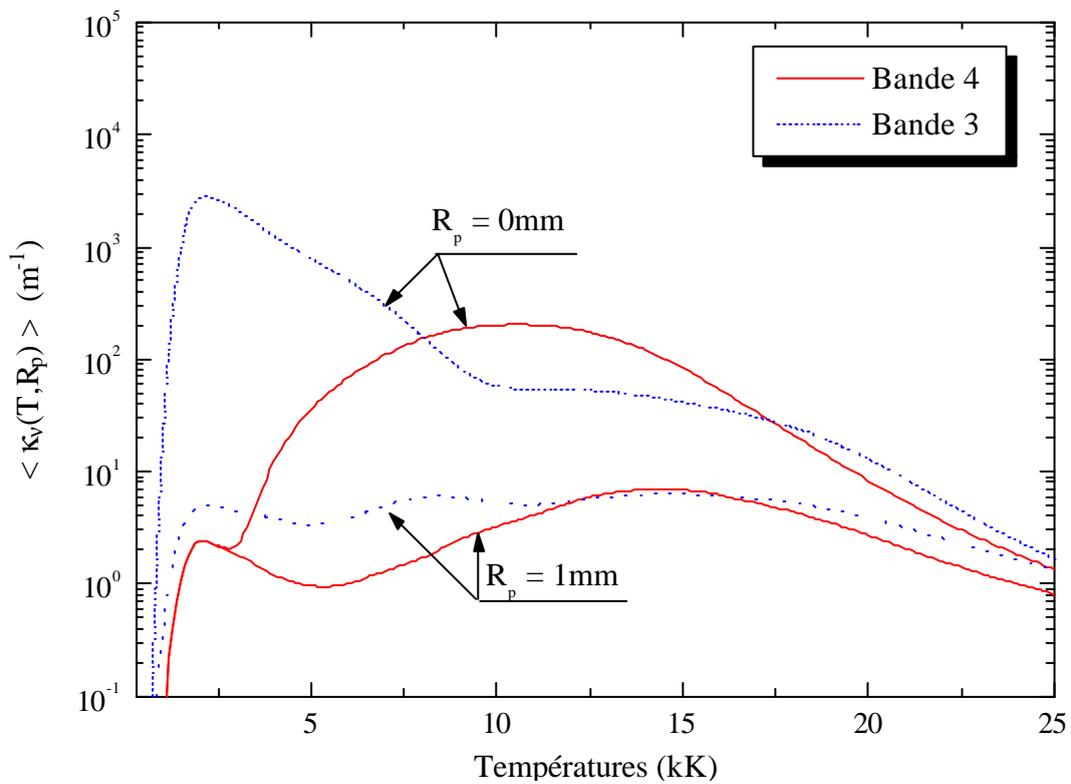


Fig.IV-32: Variation du CMA pour les bandes 3 et 4, le mélange 70%Ar-20%H₂-10%Cu et les deux rayons $R_p=0\text{mm}$ et $R_p=1\text{mm}$

- Nous remarquons dans les bandes 1 et 2 que le coefficient moyen d'absorption ne varie pas avec le rayon du plasma. L'influence des raies est faible devant le continuum. Plusieurs travaux du groupe retrouvent et justifient ce comportement [Er-1][Ri-1].
- Les bandes 3, 4, 5 sont les trois bandes les plus représentatives du phénomène d'absorption (*fig.IV-30 et fig.IV-31*). Dans ces régions (ultraviolet lointain), les raies de résonance des atomes neutres d'argon et d'hydrogène, de l'ion Ar^+ et de l'ion Cu^+ y sont très nombreuses et fortement absorbées. En effet, les bandes 3 et 4 dans lesquelles apparaissent les raies ioniques du cuivre montrent une absorption plus prononcée pour des températures proches de 10000K où la densité de cette espèce y est importante à cause de l'ionisation du cuivre neutre. Pour des températures inférieures à 10000K, nous devons également tenir compte des raies de résonance de l'hydrogène dont la densité croît tant que les molécules H_2 encore existantes se dissocient. Pour la cinquième bande, nous observons une forte absorption sur toute la gamme de température. Pour des températures inférieures à 5000K, celle-ci s'avère plus prononcée probablement à cause du continuum moléculaire. Pour des températures supérieures, la différence observée peut s'expliquer par l'apparition des raies de résonance du cuivre relativement peu absorbées.
- Pour la bande 6, la *figures IV-31* montre une diminution du coefficient moyen d'absorption pour des rayons croissants et des températures supérieures à 12500K. Le *tableau IV-4* nous indique la présence de raies autoabsorbées pour les espèces chargées. De plus, nous savons que le rayon n'a aucune influence sur l'émission des raies non autoabsorbées. Nous pouvons donc supposer que l'absorption du continuum et celle des raies ioniques sont responsables de cette diminution.
- Enfin, pour la dernière bande, nous constatons que le coefficient moyen d'absorption ne varie pas avec l'épaisseur optique. Le continuum représente la principale contribution du coefficient total (recombinaison radiative) et l'autoabsorption des raies est négligeable.

IV – CONCLUSION

Nous venons de calculer l'émission d'un plasma Ar/H₂/Cu à partir de deux méthodes basées sur des hypothèses différentes. Ces études nous ont permis de mettre à jour les anciennes banques de données composées des niveaux d'énergie, poids statistiques et des transitions. Nous avons comparé avec la littérature les résultats obtenus pour les trois gaz purs dans le but de montrer l'importance de ces dernières sur le rayonnement. Calculer le transfert radiatif est un des moyens permettant de mieux comprendre le phénomène d'absorption dans chaque région de l'arc. A partir des tables constituées des valeurs du coefficient d'émission nette et du coefficient moyen d'absorption, nous sommes capables de calculer la divergence du flux radiatif [Bo-1], terme essentiel de perte d'énergie dans l'équation de conservation d'énergie utilisée dans les modèles d'arcs. Représentant la différence entre la puissance émise et la puissance absorbée, son calcul dépend de plusieurs paramètres dont le profil de température et la valeur du rayon du plasma sont les plus importants. En effet, pour un profil plat, le rayonnement émis est absorbé dans les régions proches des bords tandis que les régions proches de l'axe sont plus influentes sur l'absorption pour un profil présentant de forts gradients de température. Dans notre groupe, de nombreux travaux ont été effectués pour une direction donnée (à une dimension) et différents mélanges [Er-1][Na-1][Ri-1][Ra-2]. Les résultats montrent que le rayonnement est estimé convenablement pour les régions chaudes de

l'arc par la méthode du coefficient d'émission nette tandis que la méthode du coefficient moyen d'absorption s'avère plus précise dans les régions tièdes et froides où le rayonnement provenant de ces régions chaudes y est plus ou moins absorbé. Pour une géométrie à trois dimensions, la divergence du flux radiatif est obtenu par la méthode P1 [Mo-1] ou par un calcul sur plusieurs directions aléatoires [Ra-2][Er-1]. Lorsque le profil est bien défini, la difficulté consiste à savoir sur quel paramètre nous devons accentuer notre travail : le nombre de directions ou le rayon du plasma.

*CALCUL DES
COEFFICIENTS DE TRANSPORT*

I – INTRODUCTION

Des gradients de concentration, de vitesse, de température ou de potentiel modifient considérablement le milieu par l'apparition d'un courant de particules, d'une pression, d'un flux de chaleur ou d'un courant électrique. C'est pourquoi le calcul des propriétés de transport des plasmas est capital mais cependant difficile. En effet, la détermination de ces propriétés se base sur la résolution de l'équation intégral-différentielle de Boltzmann par la méthode de Chapman-Enskog appliquée aux mélanges complexes (*Cf Ch.I*). L'application de cette méthode nécessite la connaissance de sections efficaces d'interaction suivant les espèces présentes. Après utilisation de plusieurs approximations dont une méthode de perturbation, les flux deviennent proportionnels aux dérivées premières de la densité, de la vitesse et de la température. Ces facteurs de proportionnalité correspondant aux coefficients de transport que sont la diffusion, la viscosité, la conductivité thermique auxquelles s'ajoute la conductivité électrique, expriment les propriétés globales du milieu. Ces derniers peuvent varier suivant l'ordre d'approximation utilisé lors de la résolution de l'équation de Boltzmann mais également suivant le type de potentiels considérés pour calculer les intégrales de collision. Nous rappelons d'après les bases détaillées au *Chapitre I* que ce niveau d'approximation correspond au nombre de termes retenus dans le développement en polynômes de Sonine pour l'approximation d'Enskog au premier ordre. Ce niveau d'approximation fixe le nombre de paires (ℓ, s) à considérer dans le calcul des intégrales de collision définies également dans ce premier chapitre.

Le *Chapitre I* introduisant les propriétés de transport, nous rappelons rapidement dans la première partie de ce *Chapitre V* les expressions permettant le calcul des coefficients de transport. Puis, après recensement et analyse des interactions intervenant dans notre plasma, nous présentons et discutons les résultats obtenus pour différents pourcentages de cuivre. Enfin, la littérature ne proposant pas de valeurs pour notre mélange Ar/H₂/Cu, nous comparons dans une dernière partie les résultats obtenus pour les mélanges binaires Ar/H₂ et Ar/Cu avec ceux proposés par différents auteurs.

1.1 – La conductivité thermique (W/K/m)

La conductivité thermique totale d'un mélange gazeux est définie par la loi de Fourier $\vec{q} = \kappa \vec{\nabla} T$ avec \vec{q} est le flux de chaleur [Bu-1], $\vec{\nabla} T$ le gradient de la température et κ la conductivité thermique. Par définition, cette conductivité thermique représente la capacité des matériaux ou des mélanges gazeux à conduire la chaleur. Du point de vue énergétique, le transport de chaleur correspond au transfert d'énergie thermique d'une zone chaude vers une zone froide (peu d'agitation). Les atomes « chauds » qui oscillent le plus excitent leurs voisins créant ainsi une agitation thermique. Dans le cas du cuivre pur, il fut montré que ce phénomène représentait près de 99% de la conductivité thermique à température ambiante, les principaux responsables de ce transport de chaleur étant les électrons.

Cette conductivité thermique totale peut s'écrire comme la somme de quatre composantes que sont la conductivité thermique κ_{tr} due à la translation des particules lourdes et des électrons,

la conduction thermique κ_{reac} due aux diverses réactions chimiques, et la conductivité thermique κ_{int} due aux énergies moléculaires internes, soit :

$$\kappa = \kappa_{\text{tr}}^{\text{h}} + \kappa_{\text{tr}}^{\text{e}} + \kappa_{\text{reac}} + \kappa_{\text{int}} \quad (V-1)$$

Pour un gaz pur, **Hirschfelder** [Hi-2] donne $\kappa = \frac{1,989e^{-07}}{\Omega_{ii}^{(2,2)}} \sqrt{\frac{T}{M_i}}$ (cal/cm.deg.sec) ou M_i correspond à la masse de la particule i , T la température et $\Omega_{ii}^{(2,2)}$ l'intégrale de collision associée aux collisions (i-i).

1.1.1 – La conductivité thermique de translation (W/K/m)

Cette composante peut se séparer en deux termes [De-3,5] que sont $\kappa_{\text{tr}}^{\text{h}}$ et $\kappa_{\text{tr}}^{\text{e}}$, représentant respectivement la contribution du mouvement de translation des particules lourdes et des électrons à la conductivité thermique totale. Elle s'obtient en négligeant toutes les réactions chimiques et tous les échanges d'énergie entre les degrés de liberté interne.

La conductivité thermique de translation des lourds (W/K/m):

L'expression de la conductivité thermique des lourds est obtenue par une approximation à l'ordre 2 de la méthode de Chapman-Enskog [De-3,5][Mu-1]:

$$\kappa_{\text{tr}}^{\text{h}} = 4 \cdot \frac{\begin{vmatrix} L_{11} & L_{1\mu} & X_1 \\ \dots & L_{ii} & L_{ij} & \dots \\ L_{\mu 1} & \dots & L_{\mu\mu} & X_\mu \\ X_1 & \dots & X_\mu & 0 \end{vmatrix}}{\begin{vmatrix} L_{11} & \dots & L_{1\mu} \\ \dots & L_{ii} & \dots \\ L_{\mu 1} & \dots & L_{\mu\mu} \end{vmatrix}} \quad (V-2)$$

Pour un milieu composé de μ espèces, les coefficients L_{ij} ont pour expressions [Mu-1]:

$$\bullet L_{ii} = -4 \frac{X_i^2}{K_{ii}} - \sum_{\substack{k=1 \\ k \neq i}}^{\mu} \left(\frac{2X_i X_k}{K_{ik}} \cdot \frac{1}{(M_i + M_k)^2} \cdot \frac{1}{A_{ik}^*} \cdot \left[\frac{15}{2} M_i^2 + \frac{25}{4} M_k^2 - 3M_k^2 B_{ik}^* + 4M_i M_k A_{ik}^* \right] \right) \quad (V-3)$$

$$\bullet L_{ij} = \frac{2X_i X_j}{K_{ij}} \cdot \frac{M_i M_j}{(M_i + M_j)^2} \cdot \frac{1}{A_{ij}^*} \cdot \left[\frac{55}{4} - 3B_{ij}^* - 4A_{ij}^* \right] \quad (V-4)$$

Les termes intervenant dans ces relations sont les fonctions A_{ij} et B_{ij} dépendant de l'intégrale de collision $\overline{\Omega}_{ij}^{(\ell,s)}$ en \AA^2 (particule i - particule j), la masse molaire M_i de l'espèce i en unité de masse atomique ($1u=1,66055E-27$ kg), la fraction molaire X_i de l'espèce i , K_{ii} et K_{ij} respectivement la conductivité thermique d'un gaz pur et celle d'un mélange binaire [Hi-2] :

$$\bullet X_i = \frac{n_i}{\sum_{j=1}^{\mu} n_j} \quad (V-5) \quad \bullet A_{ij}^* = \frac{\overline{\Omega}_{ij}^{(2,2)}}{\overline{\Omega}_{ij}^{(1,1)}} \quad (V-6) \quad \bullet B_{ij}^* = \frac{5\overline{\Omega}_{ij}^{(1,2)} - 4\overline{\Omega}_{ij}^{(1,3)}}{\overline{\Omega}_{ij}^{(1,1)}} \quad (V-7)$$

$$\bullet K_{ij} = 8,3224 \cdot 10^{-2} \frac{\sqrt{T}}{\overline{\Omega}_{ij}^{(2,2)}} \left(\frac{M_i + M_j}{2M_i M_j} \right)^{1/2} \quad (\text{J/m/s/K}) \quad (V-8)$$

$$\bullet K_{ii} = \frac{8,3224 \cdot 10^{-2}}{\overline{\Omega}_{ii}^{(2,2)}} \sqrt{\frac{T}{M_i}} \quad (\text{J/m/s/K}) \quad (V-9)$$

Le mouvement de translation des particules lourdes décrit par κ_{tr}^h est indépendant des propriétés des électrons. En effet, après un choc électron-particule lourde, la quantité de mouvement et la vitesse de cette dernière demeure pratiquement inchangée contrairement à la quantité de mouvement de l'électron variant considérablement. En conséquence, les collisions électron-particule lourde auront peu d'effet sur la fonction de distribution des particules lourdes mais beaucoup plus sur celle des électrons.

La conductivité thermique de translation des électrons (W/K/m):

Pour ces électrons, la conductivité thermique de translation κ_{tr}^e est obtenue par approximation à l'ordre 3 de la méthode de Chapman-Enskog dans le but d'obtenir des résultats satisfaisants [De-3,5]:

$$\kappa_{tr}^e = \frac{75}{8} n_e^2 k_b \left(\frac{2\pi k_b T}{m_e} \right)^{1/2} \frac{q_{ej}^{22}}{q_{ej}^{11} q_{ej}^{22} - (q_{ej}^{12})^2} \quad (V-10)$$

où les $q_{ej}^{(\ell,s)}$ sont exprimés à partir des intégrales de collision $\overline{\Omega}_{ej}^{(\ell,s)}$ ou plus fréquemment dans la littérature en fonction des sections efficaces de transfert de quantité de mouvement $Q_{ej}^{(\ell,s)}$ dont les expressions données par **Devoto** [De-5] sont recensées dans le *tableau V-2*.

1.1.2 – La conductivité thermique de réaction (W/K/m)

Cette composante essentielle de la conductivité thermique totale représente le transport d'énergie par dissociation et recombinaison des molécules ou par ionisation des espèces. La chaleur peut alors être transportée soit par collision élastique soit sous forme d'enthalpie chimique. En effet, à hautes températures, les particules présentes s'ionisent, se dissocient et réagissent chimiquement, contribuant ainsi au transfert d'énergie. Supposant une molécule se dissociant en atomes dans les régions chaudes, ces derniers peuvent alors diffuser vers les

régions froides et s'y recombinaient libérant ainsi leur enthalpie de recombinaison. La nouvelle molécule formée peut donc de nouveau diffuser vers les régions chaudes. Par conséquent, il s'installe une diffusion continue entre les régions chaudes et les régions froides du plasma (la diffusion des électrons étant opposée à celles des molécules).

Supposons un mélange gazeux dans lequel se produisent plusieurs réactions. Afin de ne pas surestimer la conductivité thermique de réaction, nous devons considérer des réactions indépendantes les unes des autres, et par conséquent satisfaire le critère d'indépendance de **Butler** et **Brokaw** [Bu-2]. En conséquence, il nous faut déterminer et écrire les v réactions concernées vérifiant ce critère, soit :

$$\sum_{k=1}^{\mu} a_{ik} B_k = 0 \quad (V-11)$$

où i est l'indice de sommation allant de 1 à v , B_k représente la $k^{\text{ième}}$ espèce chimique et a_{ik} le coefficient stœchiométrique relatif à l'espèce k lors de la $i^{\text{ème}}$ réaction.

La conductivité thermique de réaction est alors obtenue de la théorie de **Butler** et **Brokaw** établie en 1957 [Bu-2], et étendue au cas d'un gaz partiellement ionisé. De plus, ces derniers ayant montré que la symétrie des coefficients de diffusion binaire ($D_{ij}=D_{ji}$) ne pouvant s'effectuer qu'au premier ordre de la méthode de Chapman-Enskog, κ_{reac} s'écrit :

$$\kappa_{\text{reac}} = -\frac{1}{RT^2} \cdot \frac{\begin{vmatrix} A_{11} & \dots & A_{1v} & \Delta H_1 \\ \dots & A_{ii} & A_{ij} & \dots \\ A_{v1} & \dots & A_{vv} & \Delta H_v \\ \Delta H_1 & \dots & \Delta H_{1v} & 0 \end{vmatrix}}{\begin{vmatrix} A_{11} & \dots & A_{1v} \\ \dots & A_{ii} & \dots \\ A_{v1} & \dots & A_{vv} \end{vmatrix}} \quad (V-12)$$

avec

$$\bullet A_{ij} = A_{ji} = \sum_{k=1}^{\mu-1} \sum_{\ell=k+1}^{\mu} \left(\frac{RT}{PD_{k\ell}} \right) X_{\ell} X_k \left[\frac{a_{ik}}{X_k} - \frac{a_{i\ell}}{X_{\ell}} \right] \left[\frac{a_{jk}}{X_k} - \frac{a_{j\ell}}{X_{\ell}} \right] \quad (V-13)$$

$$\bullet D_{ij} = \frac{2,628 \cdot 10^{-2}}{P} \cdot \frac{T^{3/2}}{\bar{\Omega}_{ij}^{(1,1)}} \left(\frac{M_i + M_j}{2M_i M_j} \right)^{1/2} \quad (\text{m}^2/\text{s}) \quad (V-14)$$

$R=8.31448$ J/K/mol la constante des gaz parfaits

P : la pressions du milieu

v : le nombre de réactions chimiques et μ le nombre d'espèces considérées dans le milieu

a_{jk} : les coefficients stœchiométriques de l'espèce k dans la $j^{\text{ème}}$ réaction

X_k : la fraction molaire de l'espèce k définie par (V-5)

$D_{k\ell}$: coefficient de diffusion binaire (espèces k et ℓ), exprimé en (m^2/s) et défini par (V-14)

ΔH_i : la variation de l'enthalpie de la réaction i définie par (V-15)

Cette variation d'Enthalpie pour une réaction $nA+mB \rightarrow \nu C+\mu D$ se calcule à partir des enthalpies de formation de chaque espèce, de la façon suivante :

$$\Delta H_R = \nu \Delta H_c + \mu \Delta H_D - n \Delta H_A - m \Delta H_B \quad (V-15)$$

En considérant les réactions énoncées au premier chapitre dans le *tableau I-1*, nous pouvons calculer les enthalpies pour les réactions de dissociation ou d'ionisation comme indiqué dans le *tableau V-1* :

Tableau V-1 : Enthalpie de formation

Réaction de dissociation	Réaction d'ionisation
$AB \rightleftharpoons A+B$ $\Delta H_d = E_d + (U_A + U_B - U_{AB}) \cdot RT$ avec E_d l'énergie de dissociation	$A \rightleftharpoons A^+ + e$ $\Delta H_i = E_i + (U_{A^+} + U_e - U_A) \cdot RT$ $\Delta H_i = E_i + (U_{A^+} - U_A) \cdot RT + \frac{5}{2} RT$ avec E_i l'énergie d'ionisation
$U_k = \frac{\partial \ln(Q_k^{\text{tot}})}{\partial \ln T} = \frac{\partial \ln(Q_k^{\text{int}})}{\partial \ln T} + \frac{5}{2}$ la dérivée logarithmique de la fonction de partition totale de l'espèce k.	

1.1.3 – La conductivité thermique interne (W/K/m)

Cette conductivité thermique représente la libération ou le stockage d'énergie sous forme d'énergie potentielle, le transport par excitation ou désexcitation des molécules sur des niveaux de rotation et de vibration liée à l'existence des degrés internes de vibration et de rotation des particules constituant le gaz. Elle est nulle dans le cas de mélange ne contenant pas de molécules. Dans notre cas, la présence de molécules H_2 étant négligeable au delà de 10000K, nous considérerons ce phénomène comme nul pour des températures supérieures.

En appliquant à notre mélange la théorie de Hückel établie pour un gaz pur, nous pouvons écrire la conductivité thermique interne en fonction des conductivités internes de tous les constituants $(\kappa_{\text{int}})_i$ et des coefficients de diffusion mutuelles. Au premier ordre d'approximation de la méthode Chapman-Enskog, nous obtenons [Va-2]:

$$\kappa_{\text{int}} = \sum_{i=1}^{\mu} \frac{(\kappa_{\text{int}})_i X_i}{1 + \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^{\mu} \frac{D_{ii}}{D_{ij}} \cdot \frac{X_j}{X_i}} \quad (V-16)$$

$$\bullet \left(\kappa_{int} \right)_i = \frac{PD_{ii}}{RT} \cdot \left(Cp_i - \frac{5}{2} R \right) = PD_{ii} \left[2 \frac{\partial \log(Q_i^{int})}{\partial T} + T \frac{\partial^2 \log(Q_i^{int})}{\partial T^2} \right] \quad (V-17)$$

$$\bullet Cp_i = \frac{\partial \Delta H_i}{\partial T} = \frac{\partial}{\partial T} \left(\frac{5}{2} RT + RT^2 \frac{\partial \log(Q_i^{int})}{\partial T} \right) \quad (V-18)$$

où

$R=8.31448$ J/K/mol la constante des gaz parfaits

Cp_i : la chaleur spécifique de la $i^{\text{ème}}$ espèce

μ : le nombre d'espèces considérées dans le milieu

X_i : la fraction molaire de l'espèce i définie par (V-5)

D_{ij} : coefficient de diffusion binaire (espèces i et j), exprimé en (m^2/s) et défini par (V-14)

ΔH_i : le variation de l'enthalpie de la réaction i définie par (V-15)

Q_i^{int} : la fonction de partition interne de l'espèce i étudiée au *chapitre II*.

1.2 – La viscosité (kg/m/s)

Cette viscosité est reliée au transport de la quantité de mouvement et reste indépendante des propriétés électroniques ($\eta = \eta_e + \eta_h \approx \eta_h$). Pour un mélange complexe faisant intervenir plus de deux espèces, la viscosité se calcule au premier ordre de la méthode de Chapman-Enskog et s'écrit sous la forme [Hi-2] :

$$\eta = - \frac{\begin{vmatrix} H_{11} & \dots & H_{1\mu} & X_1 \\ & H_{22} & H_{ij} & \dots & \dots \\ \dots & \dots & H_{ii} & \dots & \dots \\ H_{\mu 1} & \dots & \dots & H_{\mu\mu} & X_\mu \\ X_1 & \dots & \dots & X_\mu & 0 \end{vmatrix}}{\begin{vmatrix} H_{11} & \dots & \dots & H_{1\mu} \\ \dots & H_{22} & H_{ij} & \dots \\ \dots & \dots & H_{ii} & \dots \\ H_{\mu 1} & \dots & \dots & H_{\mu\mu} \end{vmatrix}} \quad \text{pour } \mu \text{ composants} \quad (V-19)$$

A partir des viscosités des gaz purs η_i et des gaz binaires η_{ij} , les éléments matriciels H_{ii} et H_{ij} s'expriment sous la forme :

$$\bullet H_{ii} = \frac{X_i^2}{\eta_i} + \sum_{\substack{k=1 \\ k \neq i}}^{\mu} \left(\frac{2X_i X_k}{\eta_{ik}} \cdot \frac{M_i M_k}{(M_i + M_k)^2} \cdot \left[\frac{5}{3A_{ik}^*} + \frac{M_k}{M_i} \right] \right) \quad (V-20)$$

$$\bullet H_{ij} = -\frac{2X_i X_j}{\eta_{ij}} \cdot \frac{M_i M_j}{(M_i + M_j)^2} \cdot \left[\frac{5}{3A_{ij}^*} - 1 \right] \quad (V-21)$$

$$\bullet \eta_i = 2,6693 \cdot 10^{-6} \frac{\sqrt{M_i T}}{\bar{\Omega}_{ii}^{(2,2)}} \quad (V-22) \quad \text{et} \quad \bullet \eta_{ij} = 2,6693 \cdot 10^{-6} \frac{\sqrt{2 \left(\frac{M_i M_j}{M_i + M_j} \right) T}}{\bar{\Omega}_{ij}^{(2,2)}} \quad (V-23)$$

avec

$\bar{\Omega}_{ii}^{(\ell,s)}$: l'intégrale de collision (particule i) en \AA^2

M_i : la masse molaire de l'espèce i en unité de masse atomique ($1u=1,66055 \cdot 10^{-27}$ kg)

X_i : la fraction molaire de l'espèce i

h_i : la viscosité d'un gaz pur en (kg/m/s)

η_{ij} : la viscosité d'un gaz binaire en (kg/m/s)

1.3 – La conductivité électrique (S/m)

La conductivité électrique mesure la capacité d'un plasma à conduire le courant et ne tient compte que de la contribution des électrons. Cette approximation se justifie par une densité majoritaire d'électrons dont la mobilité reste toujours supérieure à celle des ions. Elle peut cependant être mise en défaut en présence importante d'ions négatifs. En effet, lorsque ces derniers ont capturé l'ensemble des électrons par attachement, ce sont eux et les ions positifs qui assurent le transport de charge. Dans le cas de notre mélange Ar/H₂/Cu, ce phénomène ne peut se produire que pour des températures très faibles et inférieures à environ 2000K, ces dernières correspondant à une conductivité électrique négligeable. Pour obtenir ce courant électrique, les électrons doivent se mouvoir principalement dans une direction, ceci pouvant se faire sous l'application d'un champ électrique exerçant une force sur les électrons pour les diriger dans une direction préférentielle. En l'absence de champ électrique, les électrons sont certes mobiles, mais leur mouvement se fait au hasard. Pour un électron se déplaçant dans une direction, un autre ira dans la direction opposée, le tout sans déplacement de charge.

La convergence de la méthode de résolution est moins bonne pour les électrons en raison de leur faible masse. Par conséquent, la conductivité électrique s'écrit à partir de l'approximation d'ordre 3 de la méthode de Chapman-Enskog sous la forme [De-3]:

$$\sigma = \frac{3}{2} e^2 n_e^2 \left[\frac{2\pi}{m_e k_b T} \right]^{1/2} \cdot \frac{\begin{vmatrix} q_{ej}^{11} & q_{ej}^{12} \\ q_{ej}^{21} & q_{ej}^{22} \end{vmatrix}}{\begin{vmatrix} q_{ej}^{00} & q_{ej}^{01} & q_{ej}^{02} \\ q_{ej}^{10} & q_{ej}^{11} & q_{ej}^{12} \\ q_{ej}^{20} & q_{ej}^{21} & q_{ej}^{22} \end{vmatrix}} = \frac{3}{2} e^2 n_e^2 \left[\frac{2\pi}{m_e k_b T} \right]^{1/2} \cdot \frac{D_H}{D_B} \quad (V-24)$$

$$\text{avec } \frac{D_H}{D_B} = \frac{q_{ej}^{11} \cdot q_{ej}^{22} - q_{ej}^{12} \cdot q_{ej}^{21}}{q_{ej}^{00} (q_{ej}^{11} \cdot q_{ej}^{22} - q_{ej}^{12} \cdot q_{ej}^{21}) + q_{ej}^{01} (q_{ej}^{12} \cdot q_{ej}^{22} - q_{ej}^{01} \cdot q_{ej}^{21}) + q_{ej}^{02} (q_{ej}^{11} \cdot q_{ej}^{22} - q_{ej}^{12} \cdot q_{ej}^{21})} \quad (V-25)$$

avec $q_{el}^{(\ell,s)}$ les fonctions d'intégrales de collisions données par *Devoto* [De-5] et recensées dans le *tableau V-2*.

Tableau V-2 : fonctions $q_{el}^{(\ell,s)}$ intervenant dans les intégrales de collisions

$q_{ej}^{00} = 8\pi n_e \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq ie}}^{\mu} n_j \overline{\Omega}_{ej}^{(1,1)}$
$q_{ej}^{01} = 8\pi n_e \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq ie}}^{\mu} \left(\frac{5}{2} \overline{\Omega}_{ej}^{(1,1)} - 3 \overline{\Omega}_{ej}^{(1,2)} \right)$
$q_{ej}^{02} = 8\pi n_e \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq ie}}^{\mu} n_j \left(\frac{35}{8} \overline{\Omega}_{ej}^{(1,1)} - \frac{21}{2} \overline{\Omega}_{ej}^{(1,2)} + 6 \overline{\Omega}_{ej}^{(1,3)} \right)$
$q_{ej}^{11} = 8\pi \sqrt{2} n_e^2 \overline{\Omega}_{ee}^{(2,2)} + 8\pi n_e \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq ie}}^{\mu} n_j \left(\frac{25}{4} \overline{\Omega}_{ej}^{(1,1)} - 15 \overline{\Omega}_{ej}^{(1,2)} + 12 \overline{\Omega}_{ej}^{(1,3)} \right)$
$q_{ej}^{12} = 8\pi \sqrt{2} n_e^2 \left(\frac{7}{4} \overline{\Omega}_{ee}^{(2,2)} - 2 \overline{\Omega}_{ee}^{(2,3)} \right) + 8\pi n_e \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq ie}}^{\mu} n_j \left(\frac{175}{16} \overline{\Omega}_{ej}^{(1,1)} - \frac{315}{8} \overline{\Omega}_{ej}^{(1,2)} + 57 \overline{\Omega}_{ej}^{(1,3)} - 30 \overline{\Omega}_{ej}^{(1,4)} \right)$
$q_{ej}^{22} = 8\pi \sqrt{2} n_e^2 \left(\frac{77}{16} \overline{\Omega}_{ee}^{(2,2)} - 7 \overline{\Omega}_{ee}^{(2,3)} + 5 \overline{\Omega}_{ee}^{(2,4)} \right) +$ $8\pi n_e \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq ie}}^{\mu} n_j \left(\frac{1225}{64} \overline{\Omega}_{ej}^{(1,1)} - \frac{735}{8} \overline{\Omega}_{ej}^{(1,2)} + \frac{399}{2} \overline{\Omega}_{ej}^{(1,3)} - 210 \overline{\Omega}_{ej}^{(1,4)} + 90 \overline{\Omega}_{ej}^{(1,5)} \right)$

n_e la densité électronique en m^{-3}

n_j la densité de l'espèce j en m^{-3}

ie l'indice correspondant à l'électron

$\overline{\Omega}_{ej}^{(\ell,s)}$ l'intégrale de collision électron-particule en \AA^2 et valant $\frac{\overline{Q}_{ej}^{(\ell,s)}}{\pi}$

II – APPLICATION AU PLASMA Ar/H₂/Cu.

Pour nos mélanges Ar/H₂/Cu, nous considérons 15 espèces différentes (e⁻, Ar, Ar⁺, Ar²⁺, Ar³⁺, H, H⁺, H⁻, H₂, Cu, Cu⁺, Cu²⁺, Cu³⁺, Cu⁻, Cu₂) soit 120 interactions (nous négligeons les deux espèces H₂⁺, H₂⁻, les densités et les intégrales de collision associées étant négligeables devant les autres). Bien que nous utilisions le plus souvent possible des tables d'intégrales de collision dans nos calculs, nous donnons ici différents potentiels fréquemment rencontrés dans la littérature pouvant servir de bibliographie ou de base de recherche pour le calcul des coefficients de transport dans d'autres mélanges contenant de l'argon, de l'hydrogène ou du cuivre. Les sources étant parfois nombreuses pour une même interaction, nous traitons chaque interaction séparément dans le but de les présenter plus clairement. La littérature ne fournissant pas toutes les intégrales de collision pour notre mélange Ar/H₂/Cu, les $\overline{\Omega}_{ij}^{(\ell,s)}$ manquantes sont obtenues des relations définies dans le *chapitre I* pour un potentiel d'interaction bien défini.

2.1 – Critères de choix

Les données et les sources ont fait l'objet d'une étude approfondie dont les intégrales de collision choisies définitivement pour le calcul des coefficients de transport sont reportées en *annexe A8*. Ces choix ont été effectués pour chaque interaction après avoir superposé graphiquement les différentes valeurs d'intégrales de collision recensées dans la littérature, leurs extrapolations et les valeurs calculées théoriquement. Pour notre mélange, nous avons pris comme sources initiales les données de Chervy [Ch-5] pour les interactions faisant intervenir le cuivre. Pour les autres, Aubreton [Au-1] fournit les intégrales de collision sous la forme de lissage pour le mélange Ar/H₂ et des températures allant de 500K à 15000K, lissages que nous avons par la suite extrapolés à notre gamme de température (300K-25000K).

Certaines extrapolations entraînant une allure irrégulière ou anormale des intégrales de collision, ces dernières furent remplacées par d'autres sources dont les valeurs présentaient une meilleure continuité pour des températures inférieures à 500K et supérieures à 15000K. Nous avons procédé de la même façon pour tous les calculs faisant intervenir la relation de récurrence (I-36) et dont les valeurs obtenues après dérivées semblaient incohérentes.

Pour ces dernières, nous avons donc extrapolé linéairement les valeurs pour les températures inférieures à 500K et considéré certaines intégrales de collision constantes pour des températures supérieures à 15000K (une simple extrapolation linéaire pouvant conduire à des résultats absurdes).

2.2 – Les interactions neutre-neutre

Pour le mélange Ar/H₂/Cu, les espèces neutres sont Ar, H, H₂, Cu, Cu₂, soit 15 interactions. Dans le but d'alléger la présentation des différents potentiels d'interactions recensés dans la littérature, les références [Au-1][Au-2] seront associées aux travaux d'**Aubreton**, [De-3,4,5,6] à ceux de **Devoto**, [Pa-1] à ceux de **Pateyron**, et [Va-2] pour ceux de **Vanderslice**.

Ar-Ar

Nous avons trouvé dans la littérature plusieurs types de potentiels, les plus utilisés pour calculer les intégrales de collision Ar-Ar étant les suivants :

⟨1⟩ [Au-1,2], [Pa-1] et *Sanon* [Sa-7] ont opté pour le potentiel de Morse avec pour caractéristiques : $D_e=0,01208 \text{ eV}$, $r_m=3,760\text{\AA}$ et $b=1,6699 \text{ \AA}^{-1}$

⟨2⟩ Pour des énergies élevées, nous pouvons utiliser les résultats de *Rol* [Az-1] ou les données expérimentales de *Amdur* [Am-1].

Ar-H

⟨3⟩ Les données sont issues de [Au-1,2] calculant les intégrales de collision avec le potentiel de *Brual* [Br-2] en bon accord avec les résultats expérimentaux de *Bassi* [Ba-2]:

$$V_o=138,3 \text{ eV et } B=2,783\text{\AA}^{-1}.$$

Ar-H₂

⟨4⟩ [Pa-1] et [Au-1,2] effectuent le calcul avec un potentiel de polarisation, les intégrales de collision étant proposées par *Gorse* [Go-3] avec pour paramètres :

$$V_o=49,1 \text{ eV}\cdot\text{\AA}^n \text{ et } n=5,965$$

⟨5⟩ *Sanon* [Sa-7] fait quand à lui référence au potentiel de Morse.

⟨6⟩ [Au-1,2] intègrent également le potentiel de *Dunker* [Du-1] pour obtenir un potentiel sphérique de type Morse. Pour ce potentiel noté $V(r, \theta) = V_o(r) + V_2(r)P_2(\cos \theta)$, θ est l'angle d'intégration, $P_2(\cos \theta)$ le polynôme de Lagrange, V_o et V_2 deux potentiels de MSV (Morse-Spline-Van Der waals). Les résultats obtenus sont en bon accord avec ceux de *Colgate* [Co-2] pour des énergies de l'ordre de 1eV mais semblent très éloignés de ceux de *Le Roy* [Le-1] et *Rulis* [Ru-1].

Ar-Cu

⟨7⟩ D'après les données de *Mosthaghimi* [Mo-7], les interactions Ar-Cu sont régies par un potentiel Lennard-Jones tel que $e=0,881E-20 \text{ J}$ et $s=2,88\text{\AA}$.

H-H

Pour les interactions entre espèces neutres d'hydrogène, certaines intégrales de collision peuvent s'obtenir à partir des articles de *Yos* [Yo-1] ainsi que des travaux de *Gorse* [Go-1] et *Aubreton* [Au-1,2], ce dernier ajustant les résultats de *Kolos* [Ko-1,2,3]. L'étude des potentiels fait intervenir deux potentiels issus des états $^1\Sigma$ et $^3\Sigma$ [Ko-1] de la molécule H₂.

⟨8⟩ Pour l'état $^3\Sigma$, [Pa-1], [Au-1,2] et [Va-2] utilisent un potentiel répulsif exponentiel avec des valeurs de V_o et B différentes :

<i>Vanderslice et al</i>	$V_o=60,42 \text{ eV}$ et $B=-3,013 \text{ \AA}^{-1}$
<i>Pateyron et al, Aubreton et al</i>	$V_o=46,02 \text{ eV}$ et $B=2,603 \text{ \AA}^{-1}$ Intégrales de collision données par <i>Monchick</i> [Mo-2]

⟨9⟩ Pour l'état $^1\Sigma$, l'étude se sépare en deux régions : les basses et les hautes énergies. Pour les hautes énergies, [Pa-1], [Au-2] et [Va-2] utilisent un potentiel de polarisation avec comme constantes $V_o=-12,43 \text{ eV} \cdot \text{ \AA}^{-1}$ et $n=4,36$. Les intégrales de collision peuvent être calculées à partir des tables de *Kihara* [Ki-1].

Pour les basses énergies, [Pa-1] et [Au-1,2] appliquent un potentiel exponentiel attractif ($V_o=-177,79 \text{ eV}$ et $B_o=2,824 \text{ \AA}^{-1}$) tandis que [Va-2] préfère un potentiel de polarisation ($V_o=-37,970 \text{ eV} \cdot \text{ \AA}^{-1}$ et $n=6$). Les intégrales de collision dont données par *Brokaw* [Br-1].

H-H₂

⟨10⟩ Selon les travaux de *Gorse* [Go-3], de [Pa-1] et de [Va-2], le potentiel est de type exponentiel répulsif ($V_o=61,5 \text{ eV}$ et $B_o=2,952 \text{ \AA}^{-1}$).

⟨11⟩ *Sanon* [Sa-7] et [Au-1,2] préfèrent le potentiel isotrope de *Gengenback* [Ge-1]. Pour déterminer les intégrales de collision, seule la partie variable est conservée. [Au-1,2] extrapole les valeurs pour des énergies allant jusqu'à 0.2eV, les résultats obtenus semblant en bon accord avec ceux de *Liu* [Li-4]. Les principaux paramètres sont les suivants :

$$V(r) = V_o [e^{-Br} \cdot e^{-Br_o}] \quad \text{pour } r < 3,4 \text{ \AA} \quad \Rightarrow \quad (V_o=55,90 \text{ eV}, B=3,065 \text{ \AA}^{-1} \text{ et } r_o=3,14 \text{ \AA})$$

H₂-H₂

⟨12⟩ [Pa-1], [Au-1,2] et *Sanon* [Sa-7] traitent cette interaction pour toutes les températures par un potentiel de *Ree* [Re-1] transformé en un potentiel exponentiel répulsif dont les caractéristiques sont les suivantes :

$$V_o=252,5 \text{ eV} \text{ et } B_o=2,824 \text{ \AA}^{-1}$$

⟨13⟩ [Va-2] applique deux potentiels suivant la valeur des températures. Pour les basses températures, le potentiel de *Buckingham* [Hi-2] et les paramètres correspondants ($a=14,0$ et $r_m=3,337 \text{ \AA}$, $e/k=37,3 \text{ K}$) sont préférés au potentiel exponentiel répulsif choisi pour les hautes températures ($V_o=116,5 \text{ eV}$ et $B_o=2,859 \text{ \AA}^{-1}$).

⟨14⟩ *Mexmain* [Me-1] utilise le potentiel de Buckingham qui semble en bon accord avec celui proposé par Brunetti sur l'ensemble de la plage d'énergie considérée. Les coefficients sont les suivants : $e_o=0,0114 \text{ eV}$, $r_m=3,85 \text{ \AA}$ et $a=13,772$.

Cu-Cu

«15» *Mostaghimi et Pfender* [Mo-7] appliquent un modèle faisant intervenir un potentiel de Morse modifié avec pour caractéristiques ($\epsilon=2,54E-20$ J, $s=3.20$ Å et $C=9.81$).

«16» *Chervy* [Ch-3] et *Krenek* [Kr-2] utilisent la température réduite mais pour un potentiel de Lennard-Jones ($s=5,058$ Å, $\epsilon/k=2983$ K)

Cu₂-neutres

«17» Le *tableau V-3* fournit les paramètres de Lennard-Jones utilisés dans le calcul des intégrales de collision neutre-neutre, les rayons de chaque élément pouvant servir à calculer les intégrales de collision pour un potentiel de sphères rigides quand aucune donnée n'existe.

Tableau V-3 : Paramètres de Lennard-Jones

Espèces	Ar	H	Cu	H ₂	Cu ₂
ϵ/k (K)	119,7	36,7	2983,0	36,7	2983,0
r_m (Å)	1,560	1,000	1,400	1,000	1,764
σ	3,406	2,959	5,058	2,959	5,058
Source	[Hi-2]	[Hi-2]	[Ch-4]	[Hi-2]	[Hi-2]

2.3 – Les interactions électron-neutre

Les 5 interactions prises en compte sont les suivantes : e-Ar ; e-H ; e-H₂ ; e-Cu ; e-Cu₂. Les termes utilisés pour calculer les propriétés de transport pour de telles interactions sont reportés dans le *tableau V-2*.

e-Ar

«18» Pour calculer les intégrales de collision de ce type d'interaction, nous pouvons soit intégrer numériquement les valeurs de sections efficaces calculées par *Itikawa* [It-1,2] et *Bell* [Be-1], soit extrapoler les résultats obtenus par *Frost* [Fr-1].

e-H

«19» Pour les collisions électron - hydrogène, nous pouvons considérer non seulement les sections efficaces de transfert Q_{tr}^{ℓ} données par *Itikawa* [It-1,2] mais aussi les valeurs publiées dans les autres articles de [Au-1,2], *Capitelli* [Ca-2] et *Spenser* [Sp-1].

e-H₂

«20» [Au-1,2] effectue une interpolation entre les résultats d'*Itikawa* [It-1,2] qui s'arrêtent à 10eV et ceux de *Gupta* [Gu-1] débutant à 100 eV.

e-Cu

Ce type d'interaction a fait l'objet de plusieurs travaux amenant à différents résultats concernant la méthode de calcul employée pour l'obtention des intégrales de collision. D'après les données graphiques présentées par **Chervy** [Ch-3,5], les sections efficaces sont calculées suivant deux gammes d'énergie : les énergies inférieures à 6eV et les énergies supérieures. Les différentes approximations ou méthodes de calcul trouvées dans la littérature sont brièvement citées ci dessous.

⟨21⟩ Pour des énergies supérieures à 6eV, utilisation des sections efficaces mesurées par **Trajmar** [Tr-1], renormalisées par **Msezane et Henry** [Ms-1].

⟨22⟩ Pour des énergies inférieures à 6eV, utilisation des données de **Scheibner** [Sc-2] présentant un pic à 0,3eV pouvant être associé à la résonance de l'ion Cu⁻. Dans cette même gamme d'énergie, nous pouvons également appliquer l'extrapolation effectuée par **Krenek** [Kr-1,2] à partir des résultats de **Trajmar** [Tr-1] telle que :

$$Q_{e-Cu} = (0,03286)e^3 - (3,508E-07)e^7 \text{ avec } e = k_b T/e.$$

⟨23⟩ **Gadaud** [Ga-1] et **Ouajji** [Ou-1] utilisent directement les valeurs des intégrales de collision données par **Abdelhakim** [Ab-1].

⟨24⟩ Enfin, **Sakuta et Takashima** [Sa-4] prennent une valeur constante de $10^{-18} m^2$ tandis que **Shayler et Fang** [Sh-1] utilisent une valeur constante estimée par **Maecker** [Ma-1] et valant $2.10^{-18} m^2$ sur toute la gamme d'énergie.

2.4 – Les interactions ion-neutre

L'étude de ces interactions fait intervenir 14 particules (9 ions et 5 neutres) soit 45 interactions possibles ce qui représente une quantité importante de données à trouver dans la littérature. Pour les neutres, nous avons considéré l'atome Ar, l'atome et la molécule d'hydrogène (H et H₂) et de cuivre (Cu et Cu₂). Pour les ions, nous avons choisi les espèces suivantes : Ar⁺, Ar²⁺, Ar³⁺, H⁺, H⁻, Cu⁺, Cu²⁺, Cu³⁺, Cu⁻ (H²⁻ et H²⁺ étant négligées).

Ar-Ar⁺

L'expression du potentiel résultant de cette interaction est complexe. En effet, celle-ci se fait suivant six courbes de potentiels de l'ion Ar₂⁺ dues au couplage spin-orbite [Au-1,2] et correspondant aux états ²Σ_{1/2}u, ²Σ_{3/2}g, ²Π_{1/2}g, ²Π_{3/2}g, ²Π_{1/2}u, ²Π_{3/2}u, chaque état ayant un poids statistique égal à 2.

⟨25⟩ Certains calculs tirés de la littérature font référence au potentiel sélectionné par [Au-2], issu des données expérimentales de **Moseley** [Mo-5] et des calculs de **Michels** [Mi-1].

Etats	Potentiels	Constantes	Références
$^2\Sigma_{1/2u}$	Morse	$D_e=1,34 \text{ eV}$ $r_m=2,43 \text{ \AA}$ $b=1,69 \text{ \AA}^{-1}$	[Sa-7] [Au-1,2]
$^2\Pi_{3/2g}$	Morse	$D_e=0,21 \text{ eV}$ $r_m=3,077 \text{ \AA}$ $b=1,629 \text{ \AA}^{-1}$	[Sa-7] [Au-1,2]
$^2\Pi_{1/2g}$	Morse	$D_e=0,1 \text{ eV}$ $R_m=3,161 \text{ \AA}$ $b=1,795 \text{ \AA}^{-1}$	[Sa-7] [Au-1,2]
$^2\Pi_{3/2u}$	Exponentiel Répulsif	BT $\begin{cases} V_o=2,685e^6 \text{ eV} \\ B=5,889 \text{ \AA}^{-1} \end{cases}$ HT $\begin{cases} V_o=2,910e^5 \text{ eV} \\ B=4,154 \text{ \AA}^{-1} \end{cases}$	[Sa-7] [Au-1,2]
$^2\Pi_{1/2u}$	Exponentiel Répulsif	$V_o = 1,655e^6 \text{ eV}$ $B=3,88 \text{ \AA}^{-1}$	[Sa-7] [Au-1,2]
$^2\Sigma_{3/2g}$	Exponentiel Répulsif	$V_o = 369. \text{ eV}$ $B=2,031 \text{ \AA}^{-1}$	[Sa-7] [Au-1,2]

«26» Dans le cas d'intégrales de collision de type diffusion ($\ell=1$), le processus de transfert de charge est dominant. En utilisant les relations associées et les données de **Sanon** [Sa-7], [Au-1,2] donne les résultats suivants pour la différence de potentiel pair-impair (g-u) :

$$\begin{cases} |V(^2\Sigma_g) - V(^2\Sigma_u)| = 240,33e^{-1,661\Gamma} \\ |V(^2\Pi_g) - V(^2\Pi_u)| = 167,62e^{-2,254\Gamma} \end{cases} \quad \text{donnant} \quad \begin{cases} A_\Sigma = 26,39\text{\AA} \\ A_\Pi = 18,96\text{\AA} \end{cases} \quad \text{et} \quad \begin{cases} B_\Sigma = 1,12\text{\AA} \\ B_\Pi = 0,83\text{\AA} \end{cases}$$

«27» Les travaux de **Devoto** [De-4,6] sur la même expression de la section efficace conduisent aux résultats suivants : $A=23,9\text{\AA}$ et $B=1,73\text{\AA}$.

Ar-Ar²⁺ et Ar-Ar³⁺

«28» Le potentiel d'interaction est donné par **Devoto** [De-4,6] qui considère ces intégrales de collision équivalentes à celles des collisions Ar-Ar⁺ dans le cas où $\ell=1$.

Ar-Cu⁺ et Ar-Cu²⁺

«29» **Devoto** [De-4,6] propose d'appliquer le modèle de polarisation avec une constante de polarisation de l'argon égale à $\alpha_{Ar}=1,645 \text{ \AA}^3$.

Ar-H⁺

«30» [Pa-1] et [Au-1,2] utilisent comme potentiel initial celui de *Sidis* [Si-1] qui équivaut après approximation au potentiel de Morse avec $D_e=4,1eV$, $b=1,792 \text{ \AA}^{-1}$ et $r_m=1,33 \text{ \AA}$.

H-Ar⁺

«31» Nous disposons dans ce cas de quatre niveaux répulsifs correspondants aux quatre états répulsifs $^3\Sigma, ^1\Pi, ^3\Pi, ^1\Sigma$ [Au-1,2]. Le calcul des intégrales de collision utilise les potentiels d'interaction sélectionnés par *Aubreton* [Au-1,2] d'après les calculs théoriques de *Kuntz* [Ku-1]. Suivant la température choisie, le potentiel peut être sous forme exponentielle répulsive ou puissance répulsive.

<i>Etats</i>	$^3\Sigma$ (g = 3)	$^1\Pi$ (g = 2)	$^3\Pi$ (g = 6)	$^1\Sigma$ (g = 1)
<i>Potentiels</i>	Exponentiel répulsif	Exponentiel répulsif + Puissance	Exponentiel répulsif + Puissance	Exponentiel répulsif
<i>Constantes</i>	$\text{BT} \begin{cases} V_o = 2,685e^6 . eV \\ B = 5,889 \text{ \AA}^{-1} \end{cases}$ $\text{HT} \begin{cases} V_o = 29106 . eV \\ B = 4,154 \text{ \AA}^{-1} \end{cases}$			

H-H⁺

Pour ce type d'interaction, il convient de distinguer les intégrales de collision de type diffusion $\overline{\Omega}^{(1,s)}$ de celles de type viscosité $\overline{\Omega}^{(2,s)}$. Pour ce dernier type de collision, l'interaction H-H⁺ peut se faire suivant deux courbes de potentiel correspondant aux états répulsif $^2\Sigma_u$ et attractif $^2\Sigma_g$ (de même poids statistique) de la molécule H₂⁺. Les potentiels retenus sont ceux utilisés par [Pa-1] et [Au-1,2] se référant aux potentiels de *Kuntz* [Ku-1] et de *Peek* [Pe-1].

«32» Pour l'état $^2\Sigma_u$, nous pouvons ajuster les données de *Peek* [Pe-1] pour un potentiel exponentiel répulsif dont les principales caractéristiques sont les suivantes :

$$V_o = 51,75 . eV \text{ et } B = 1,677 \text{ \AA}^{-1}.$$

«33» Pour l'état attractif $^2\Sigma_g$ sont préférés les potentiels puissance suivant la gamme de température étudiée. A basses températures, nous appliquons le potentiel de *Belov* [Be-2] tel que l'ont ait $V_o = -282 . eV$ et $n = 5,8 \text{ \AA}^{-1}$. A hautes températures, le potentiel puissance a pour constantes $V_o = -18,76 . eV$ et $n = 3,47 \text{ \AA}^{-1}$.

«34» Pour les intégrales de collision de type diffusion, nous exprimons la différence de potentiel nous donnant après résolution [De-6] :

$$\begin{cases} A_{\Sigma} = 28,69\text{Å} \\ B_{\Sigma} = 1,30\text{Å} \end{cases} \quad \text{et} \quad |V(\Sigma_g) - V(\Sigma_u)| = 58,27 \cdot e^{-1,464 \cdot r}$$

Cu-Cu⁺

«35» Pour ce type d'interaction, *Devoto* [De-4,6], *Abdelhakim* [Ab-1] utilisent le modèle de polarisation et son potentiel associé $x_{Cu} = 4,71 \text{Å}^3$.

«36» Nous pouvons également trouver dans la littérature [Mo-7] les constantes A_n et B_n relatives à la section efficace de transfert de charge : $A = 47,4\text{Å}$ et $B = 4,67\text{Å}$.

«37» Enfin, *Hirschfelder et al* [Hi-2] proposent de calculer les intégrales de collision à partir de la relation suivante :

$$\Omega^{(\ell,s)} = \frac{\pi \sqrt{e} \xi}{\mu \pi} \Gamma(s + 3/2) \cdot A_4^{(\ell)}$$

Cu-Cu²⁺ et Cu-Cu³⁺

«38» *Devoto* [De-4] et *Abdelhakim* [Ab-1] traitent ce type d'interactions en considérant les constantes de transfert de charge égales à celles concernant les interactions de type Cu-Cu⁺.

H₂-Chargée

«39» Pour toutes les interactions entre la molécule H₂ et un ion, les contributions sont faibles et sont traitées par un potentiel de polarisation de la forme $V(r) = -5,522 \cdot r^{-4}$ [Au-1,2]. Les intégrales de collision peuvent être obtenues des tables de *Kihara* [Ki-1].

Autres interactions

«40» Par manque de données, les collisions entre les particules restantes sont supposées élastiques, ainsi les intégrales de collision correspondantes peuvent être calculées à partir du potentiel de polarisation. L'expression de ces intégrales nécessite la connaissance de la polarisabilité de chaque espèce neutre (*tableau V-4*) et des valeurs de $A_4^{(\ell)}$. Mais cette méthode ne peut s'appliquer à toutes les espèces présentes. En effet, lors d'une collision entre particule et un ion de même famille (X-X⁺), le transfert de charge est dominant d'où des valeurs d'intégrales de collision de type diffusion plus importantes que celles calculées à partir de la polarisabilité. De ce fait, dans le cas d'interaction X-X⁺, le modèle sphères rigides est utilisé chaque fois que les intégrales de collision de type diffusion ne sont pas connues ce qui reste cependant une approximation risquée.

Tableau V-4 : Constantes de polarisabilité

<i>Espèce</i>	Ar	H	Cu	H ₂
Polarisabilité (Å ⁻³)	1,641	0,667	7,310	0,789
Source	[Ha-2]	[Ha-2]	[Ha-2]	[Hi-2]

2.5 – Les interactions chargé-charge

Nous décrivons ces 55 interactions par des potentiels de Coulomb écrantés à la longueur de Debye. Les intégrales de collision sont déduites des tables de **Mason** [Ma-2] et complétées par **Devoto** [De-4,6] en différenciant les potentiels attractifs des potentiels répulsifs.

2.6 – Coefficients de transport

2.6.1 – Conductivité thermique totale

Nous avons reporté sur la **figure V-1** la conductivité thermique totale obtenue pour différents mélanges. Les **figures V-2** et **V-3** représentent l'influence des différentes contributions pour deux mélanges donnés.

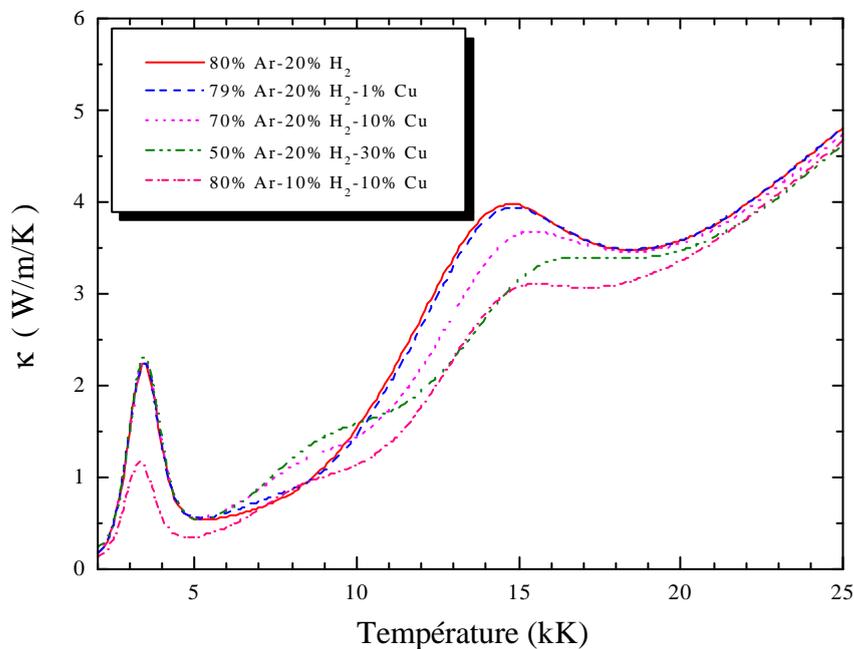


Fig. V-1: Conductivité thermique pour divers mélanges

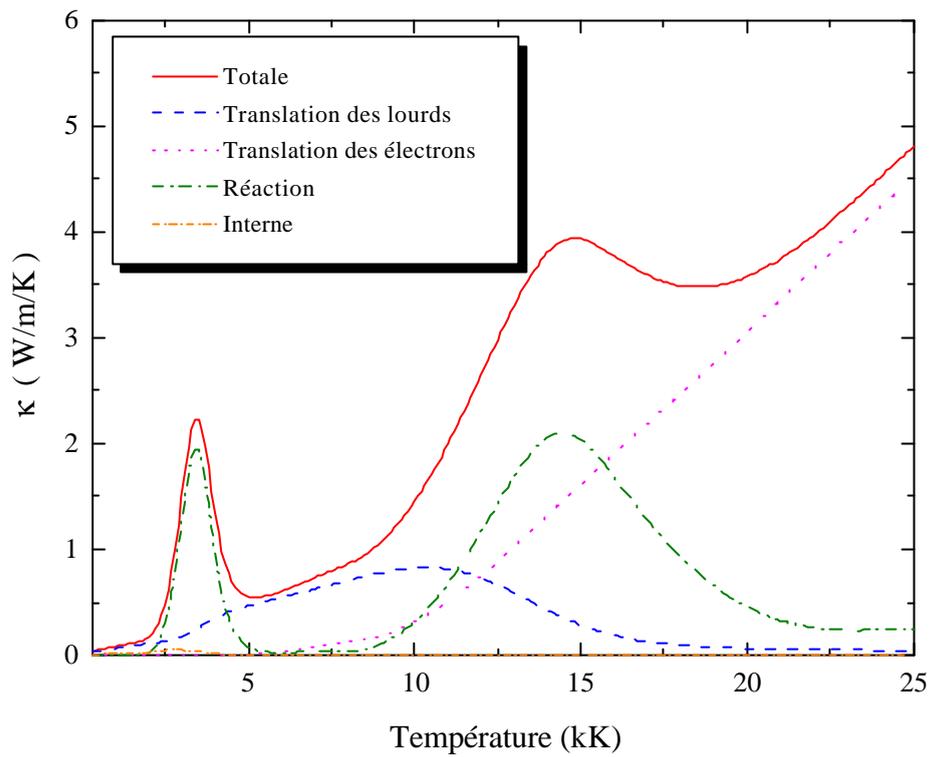


Fig. V-2: Conductivité thermique pour le mélange 79%Ar-20%H₂-1%Cu

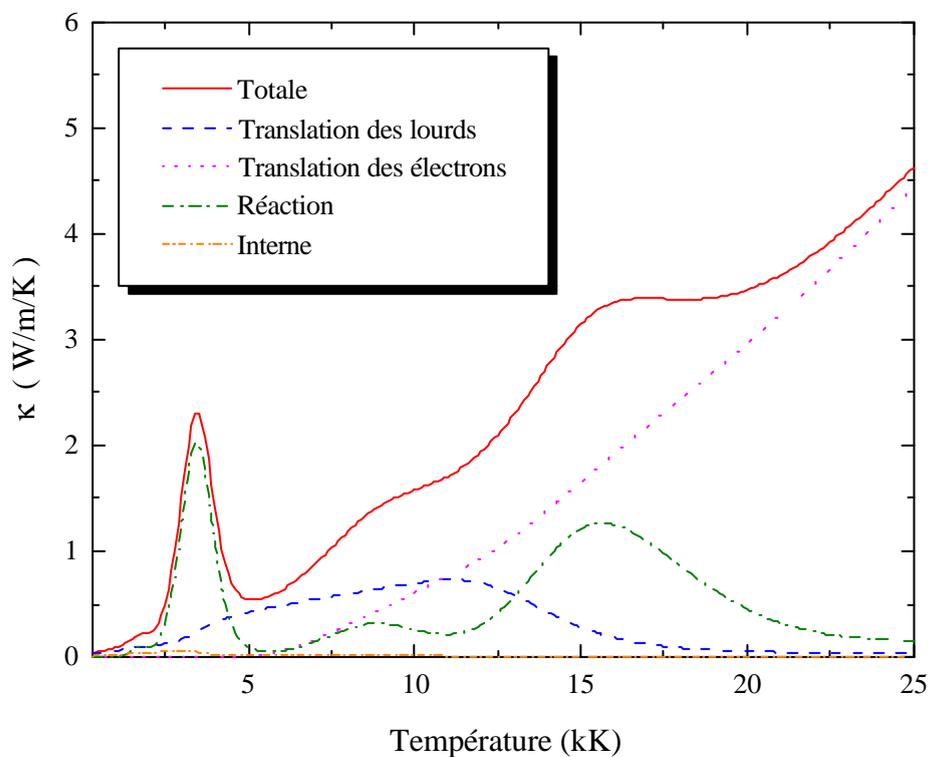


Fig. V-3: Conductivité thermique pour le mélange 50%Ar-20%H₂-30%Cu

D'après les **figures V-1, V-2 et V-3**, nous pouvons définir quatre zones de température pour lesquelles la conductivité thermique totale change de comportement :

- Une première zone comprise entre 300K et 5000K montre un important pic de conductivité thermique. D'après la composition (*fig.II-1 à II-8 du chapitre II*), les espèces principales sont les atomes et molécules d'hydrogène ainsi que les atomes neutres d'argon et de cuivre. Les phénomènes responsables d'un tel pic sont donc les interactions entre particules lourdes. Les composantes de la conductivité thermique totale essentielles pour ces températures sont par conséquent la conductivité thermique de translation des lourds et la conductivité thermique de réaction que nous confirment les **figures V-2 et V-3**. Or nous avons vu que cette conductivité thermique de réaction s'obtenait de la chaleur spécifique C_p dont la *figure II-9 du chapitre II* montre également ce pic pour des températures voisines de 3500K. D'après les commentaires effectués sur le C_p , nous pouvons en conclure que le pic observé pour κ_{reac} et reporté dans κ_{Tot} représente la dissociation des molécules d'hydrogène que nous avons mis en évidence sur la **figure V-1** par un mélange contenant moins d'hydrogène.
- Une seconde zone comprise entre 5000K et 10000K montre une légère augmentation de la conductivité thermique suivant le pourcentage de cuivre considéré. D'après les compositions, nous savons que l'ionisation du cuivre est le phénomène principal pour ces températures, les composantes majoritaires de κ_{Tot} restant la conductivité thermique de translation des lourds et de réaction (**fig.V-2 et V-3**). Cependant, les résultats de la **figure V-1** montrent qu'il faut une importante concentration de cuivre pour modifier nettement cette conductivité thermique totale.
- Une troisième zone comprise entre 10000K et 17000K montre une augmentation de κ_{Tot} . Pour ces températures, le rôle des atomes neutres et des molécules diminue devant l'apparition croissante d'ions et d'électrons. Par conséquent, la conductivité thermique de translation des lourds devient petit à petit négligeable devant la conductivité thermique de translation des électrons et la conductivité thermique de réaction (**fig.V-2 et V-3**). L'augmentation de κ_{Tot} résulte donc des différentes interactions entre électrons, ions et neutres et principalement celles faisant intervenir les particules d'argon en plus grande quantité dans les mélanges que nous étudions.
- Enfin, la dernière zone comprise entre 17000K et 25000K tient compte uniquement des collisions entre particules ionisées majoritaires dans notre plasma. La principale contribution à la conductivité thermique totale est par conséquent la conductivité thermique de translation des électrons.

2.6.2 – Viscosité du plasma

Nous avons représenté sur la **figure V-4** les résultats obtenus pour la viscosité des trois gaz purs et de quelques mélanges ternaires. Nous savons que la viscosité dépend essentiellement des particules lourdes. De même, d'après les relations (V-27) à (V-31), celle-ci varie suivant la racine du produit de la température avec la masse et inversement proportionnel à $\overline{Q}_{ij}^{(2,2)}$ ce qui donne un rôle primordial aux sections efficaces de quantité de mouvement dans le comportement de η . Lorsque la température augmente, la viscosité du plasma est contrôlée dans un premier temps par les interactions entre particules neutres et moléculaires puis entre

particules neutres uniquement lorsque les molécules se dissocient ($\sim 2000\text{K}$ pour Cu_2 , $\sim 3500\text{K}$ pour H_2) et finalement entre les particules chargées pour des températures plus élevées. Cette grandeur qu'est la viscosité reflète donc la transition d'un milieu complètement neutre vers un milieu ionisé. Quand les ions deviennent majoritaires dans le plasma à cause des différentes ionisations ($\sim 10500\text{K}$ pour l'argon et l'hydrogène, 7000K pour le cuivre), la viscosité décroît avec l'accroissement de la température (*fig. V-4*). Cette chute s'explique non seulement par la diminution des termes de diffusion binaire proportionnels à η et $1/\overline{\Omega}_{ij}^{(2,2)}$ mais aussi par des interactions se faisant de plus en plus entre particules chargées (forces coulombiennes) dont les valeurs sont nettement plus élevées. Cependant, en comparant les résultats obtenus pour les gaz purs, cette décroissance s'effectue plus tôt en température dans le cas d'un plasma de cuivre pur. Ce phénomène peut s'expliquer par un potentiel d'ionisation plus faible pour le cuivre provoquant des ionisations pour des températures plus basses et par conséquent une transition plus rapide vers un plasma ionisé.

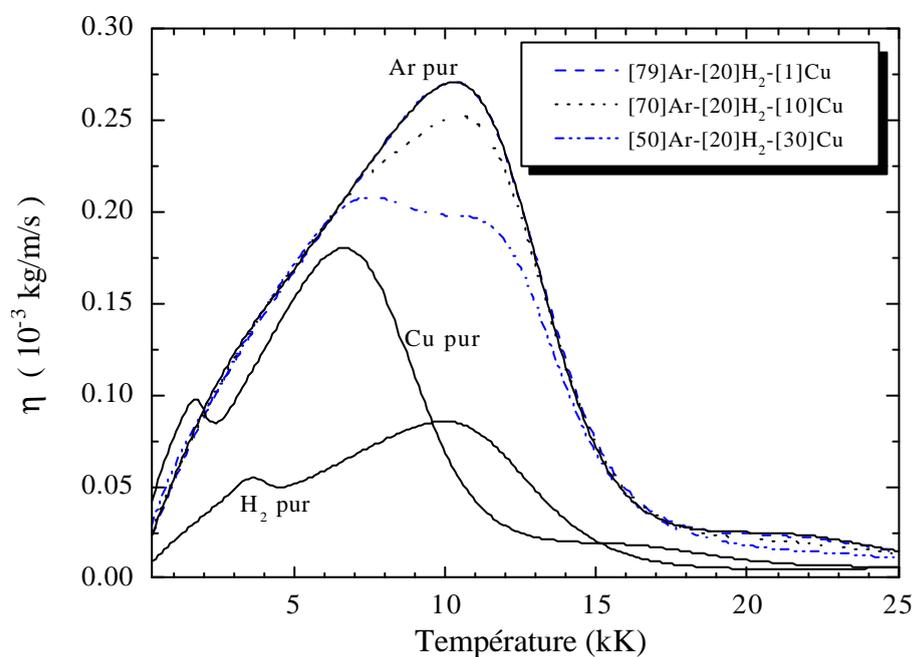


Fig. V-4: Influence du cuivre sur la Viscosité d'un plasma Ar/H₂/Cu

Pour les mélanges Ar/H₂/Cu, une faible présence de cuivre (jusqu'à 1%) ne modifie pas le comportement de la viscosité tandis qu'une forte concentration la diminue très nettement pour des températures comprises entre 6000K et 15000K , de sorte que l'allure générale s'apparente à celle du cuivre (première «bosse» à 7000K) puis celle de l'argon (seconde «bosse» à 10500K). Nous constatons également qu'elle se rapproche de la viscosité d'un plasma d'argon pur pour des températures inférieures à 6000K et supérieures à 15000K en ne variant quasiment plus suivant la nature du plasma. D'après les résultats obtenus pour les différentes compositions, ceci peut s'expliquer par de nombreuses collisions Ar-Ar pour les faibles températures ($T < 6000\text{K}$) et des collisions Ar-Ar, Ar-Ar⁺ et électron-électron pour les températures plus élevées ($T > 15000\text{K}$), les concentrations de ces espèces étant majoritaires dans ces gammes de température (*fig.II-1 à II-8*).

2.6.3 – Conductivité électrique

D'après les compositions présentées dans le *chapitre II*, plus nous ajoutons du cuivre, plus il se crée d'ions Cu^+ et d'électrons à basses températures. Les collisions électrons-neutre ont donc une forte influence sur le comportement de la conductivité électrique que nous avons représentée pour différents mélanges sur la *figure V-5*. Nous constatons en effet que l'ajout de cuivre, même faible, augmente considérablement cette conductivité pour des températures inférieures à 10000K. Pour des températures supérieures, les interactions sont en majorité de type coulombiennes (à longue distance), la densité d'électron stagnante pour un nombre de collision sans cesse décroissant. La conductivité électrique proportionnelle à cette densité subit le même comportement et ne varie plus suivant la nature du plasma ce que confirme **Erwin et Kunc** [Er-2] ajoutant que cette remarque est également valable pour un degré d'ionisation δ voisin de 1.

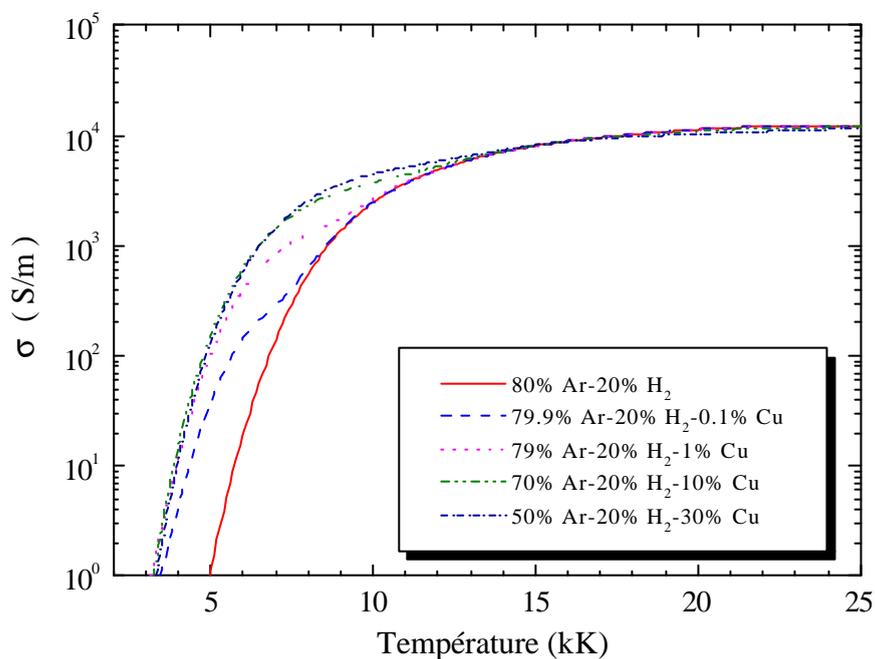


Fig. V-5: Conductivité électrique pour divers mélanges

2.6.4 – Comparaison avec la littérature

Nous proposons dans le *tableau V-5* quelques références permettant de trouver les coefficients de transport pour les gaz ou vapeurs purs.

Tableau V-5 : Sources pour les coefficients de transport des gaz ou vapeurs purs

Espèces	Ar	H ₂	Cu
Références pour les coefficients de transport	[Au-1], [Bo-1], [Ca-3], [Ch-3], [Mo-6,7], [Pa-1], [Sa-7],	[Au-1], [Bo-1], [Ko-4], [Pa-1], [Sa-7]	[Go-1], [Ko-4]

Ces derniers ayant fait l'objet de nombreuses études et nos résultats étant proches de la littérature, nous comparons ici les résultats obtenus pour la viscosité, la conductivité thermique et la conductivité électrique dans le cas de mélanges binaires Ar/H₂ et Ar/Cu. Cette comparaison sert également de validation des résultats présentés précédemment pour le mélange ternaire Ar/H₂/Cu. Tous les calculs ont été faits pour des températures comprises entre 300K et 25000K et une pression atmosphérique.

Mélange 80%Ar-20%H₂ :

Pour ce mélange, les *figures V-6, V-8 et V-10* mettent en évidence les différences entre nos résultats et la littérature [Bo-1][Pa-1] : pour les trois coefficients de transport proposés et des températures supérieures à ~10000K, pour la conductivité thermique seule et des températures voisines de 3700K.

Pour les températures élevées (T>10000K), cette différence s'explique par le nombre d'espèces prises en compte dans nos calculs. En effet, nous avons considéré des espèces jusqu'à trois fois chargées tandis que [Bo-1] et [Pa-1] ont tenu compte uniquement des espèces une fois chargées. Les écarts ainsi observés *figures V-6 et V-10* sont donc essentiellement dus à la présence d'ions Ar²⁺, Ar³⁺, Cu²⁺ et Cu³⁺ dans notre milieu.

Pour les faibles températures (T~3700K), la différence vient de la conductivité thermique de réaction. En effet, nous retrouvons ce léger désaccord dans le cas d'un plasma d'hydrogène pur lorsque nous comparons nos résultats à ceux d'*Aubretton* [Au-1], *Vanderslice* [Va-2] ou [Bo-1]. Après une étude plus approfondie sur le gaz pur, nous avons constaté que la conductivité thermique de réaction et plus particulièrement les valeurs prises pour les intégrales de collision pour caractériser les interactions H-H en étaient la principale cause. Le choix des intégrales de collision pour cette interaction a donc un rôle important sur les résultats finals pour ces températures.

Mélange 95%Ar-05%Cu :

Nos résultats sont comparés à ceux de *Mostaghimi et Pfender* [Mo-7] sur les *figures V-7, V-9 et V-11*. Malheureusement, ces derniers nous donnent peu d'indications sur les valeurs prises par les intégrales de collision utilisées pour ces calculs. Connaître celles-ci nous aurait permis de mieux justifier les différences observées. Nous pensons que des valeurs différentes pour les intégrales de collision caractérisant les interactions électrons - particules pourraient expliquer les désaccords. En effet, une comparaison de chaque composante de la conductivité thermique montre un plus fort effet de l'ionisation du cuivre et de l'argon pour notre conductivité thermique de réaction, une augmentation plus rapide de notre conductivité thermique de translation des électrons pour des températures supérieures à 10000K ainsi qu'une conductivité thermique de translation des lourds légèrement plus élevée pour des températures comprises entre 7500K et 12500K.

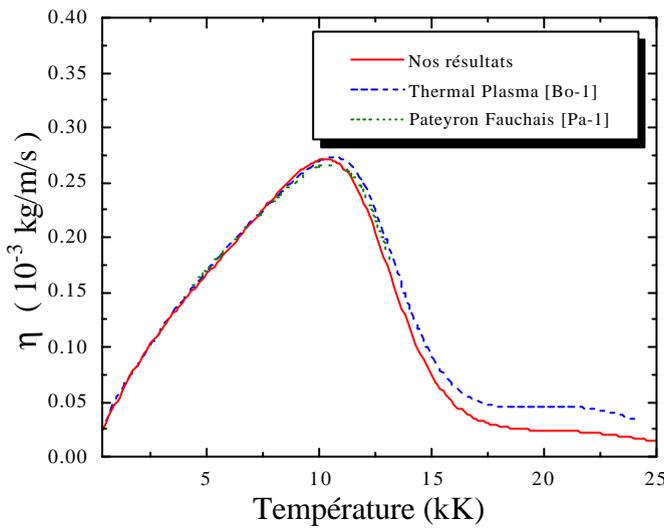


Fig. V-6: Mélange 80%Ar-20%H₂

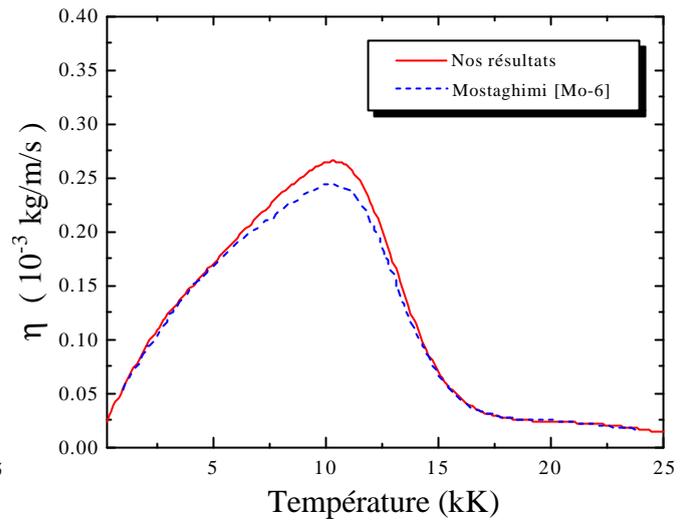


Fig. V-7: Mélange 95%Ar-5%Cu

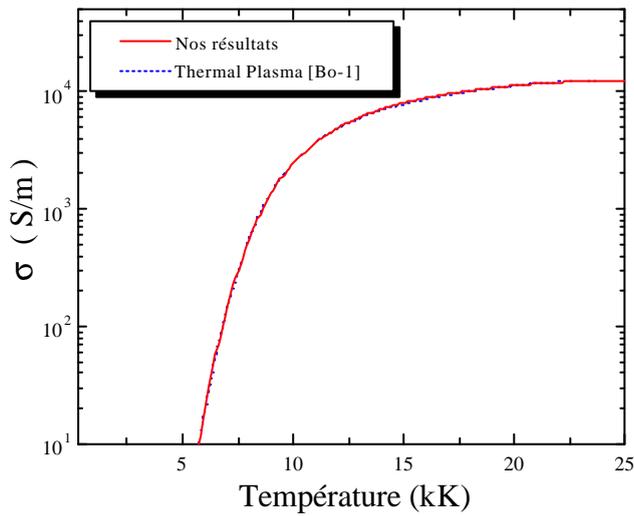


Fig. V-8: Mélange 80%Ar-20%H₂

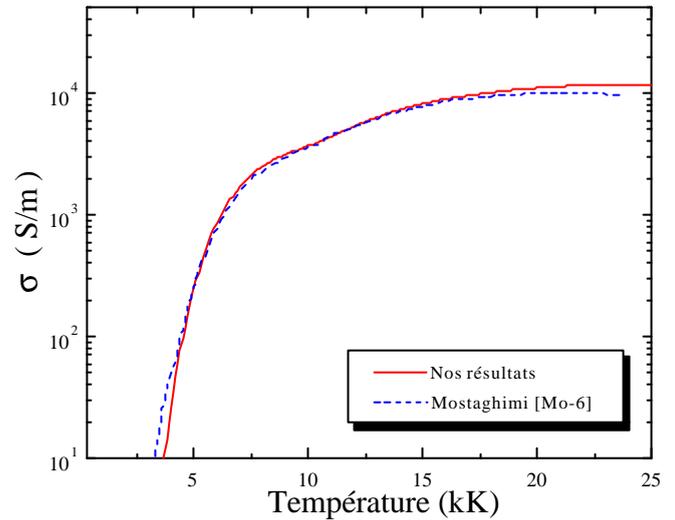


Fig. V-9: Mélange 95%Ar-5%Cu

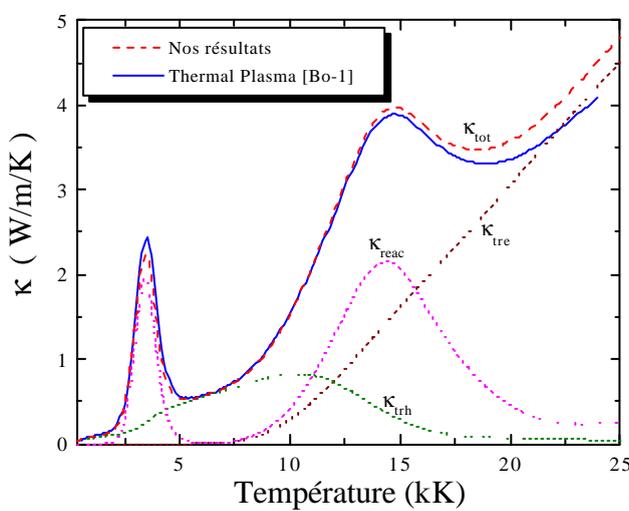


Fig. V-10: Mélange 80%Ar-20%H₂

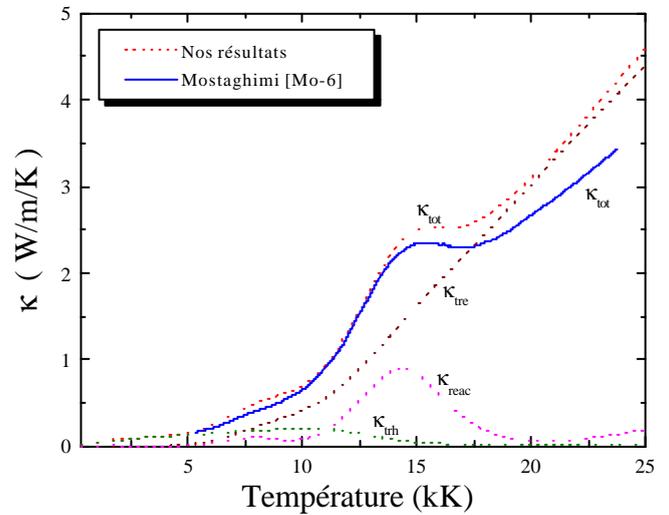
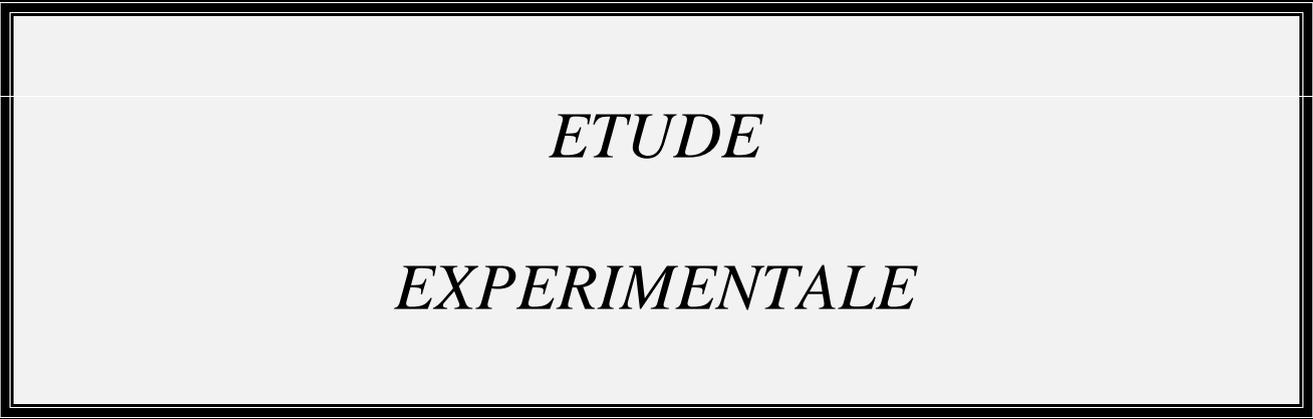


Fig. V-11: Mélange 95%Ar-5%Cu



ETUDE
EXPERIMENTALE

I – DISPOSITIF EXPERIMENTAL

La mise en place du dispositif expérimental de la **figure VI-1** permet l'étude des propriétés de l'arc par spectroscopie d'émission. Nous présentons ici les principaux éléments de ce montage que sont l'installation électrique, la torche à plasma, l'injecteur de poudre, le dispositif de mesure spectroscopique et le système de commandes utilisés pour les mesures. Enfin, nous décrivons rapidement le logiciel d'acquisition installé pour le traitement des données.

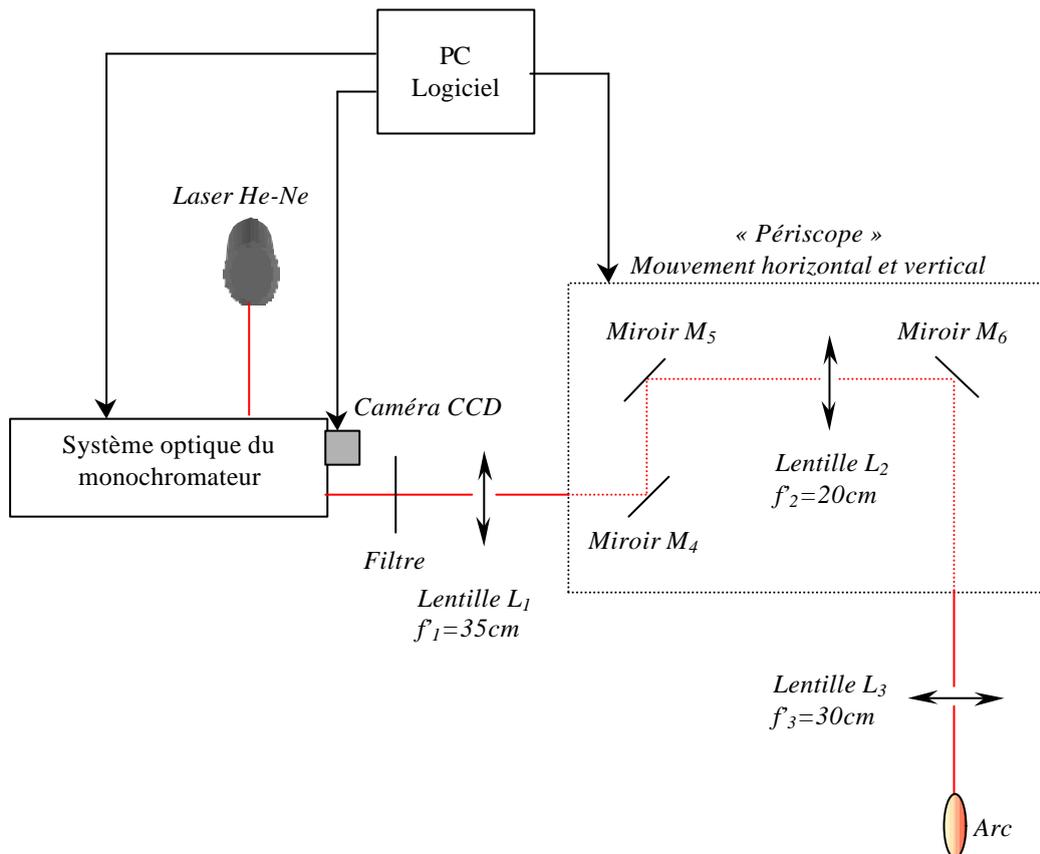


Fig. VI-1 : Dispositif expérimental

1.1 – Le montage électrique

L'alimentation électrique de l'arc est assurée au moyen de six alimentations stabilisées (110V-110A). Ces dernières sont branchées en parallèle et peuvent ainsi délivrer un courant maximum de 650A. Une résistance ballast permet de limiter le courant lors de l'amorçage, un potentiomètre de contrôler le courant de fonctionnement. Un voltmètre branché aux bornes de la torche nous indique la tension d'arc (**figure VI-2**).

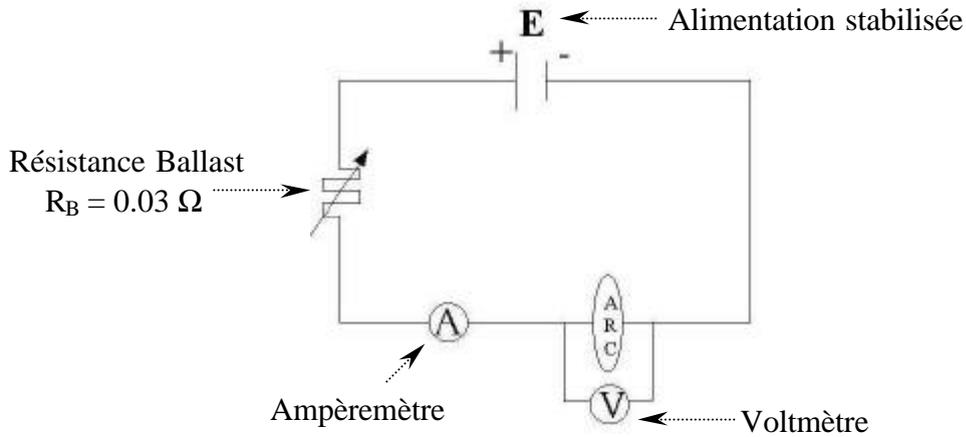


Fig. VI-2 : Montage électrique

1.2 – La torche à plasma

La torche est équipée d'une tuyère anode en cuivre. L'arc est établi entre la cathode en tungstène thoriée et la tuyère anode. Un système de circulation d'eau assure le refroidissement des électrodes. Les caractéristiques géométriques de la torche (dimension et angles) sont présentées sur le schéma de la **figure VI-3**.

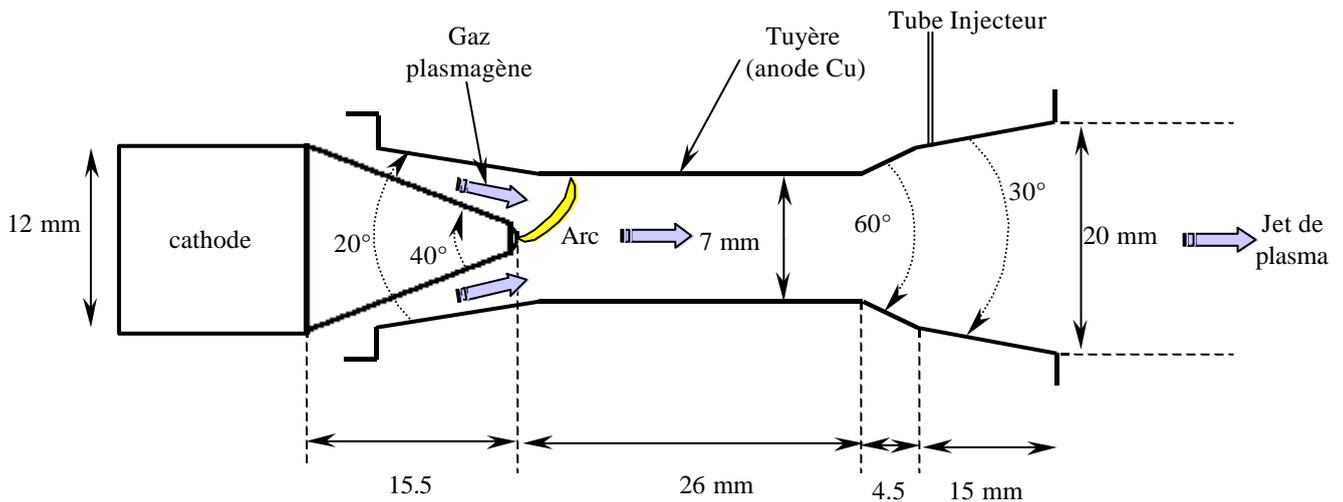


Fig. VI-3 : Caractéristiques géométriques de la torche

1.3 – L'injecteur de poudres de cuivre

Les poudres sont injectées perpendiculairement à l'axe vertical de la torche (**fig.VI-3**) par l'intermédiaire d'un tube injecteur de 1.8mm de diamètre situé à 13mm de la sortie de la tuyère. Le débit de poudre peut varier de quelques grammes/mn à 60g/mn avec un fonctionnement optimal autour de 25g/mn compte tenu des caractéristiques de la torche. La taille des poudres est comprise entre 15 et 50 μ m.

La pénétration des poudres dans le plasma dépend du débit du gaz porteur de cuivre (ici de l'argon) et du débit du gaz plasmagène (mélange Ar/H₂). Un débit de gaz porteur trop faible empêche les poudres de cuivre de pénétrer dans le plasma tandis qu'un débit trop important les ferait littéralement traverser le jet. Pour obtenir une pénétration optimale (donc une qualité de dépôt acceptable), nous devons ajuster le débit de gaz porteur en fonction des autres paramètres du dispositif (densité, taille et granulométrie des poudres, débit du gaz plasmagène, diamètre et position du tube injecteur...). Des travaux antérieurs de modélisation réalisés dans notre équipe nous ont permis d'estimer à priori le débit de gaz porteur [Ba-4].

1.4 – Le dispositif spectroscopique

Le dispositif spectroscopique est constitué de plusieurs éléments optiques (filtres, lentilles et miroirs), d'un monochromateur, d'un «périscope» et d'une caméra CCD, ces trois derniers éléments étant directement contrôlés par un micro-ordinateur.

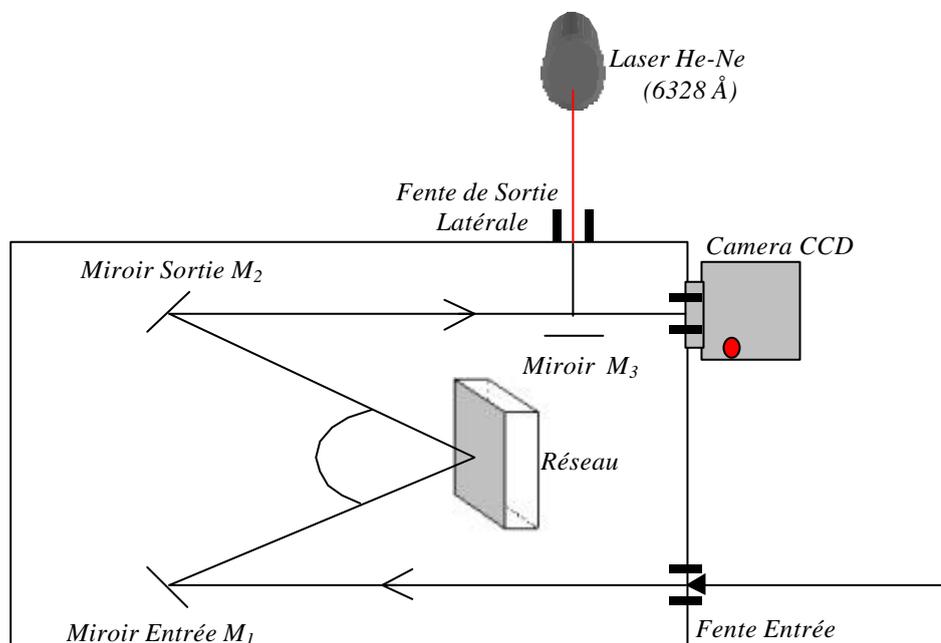


Fig. VI-4 : Schéma optique du monochromateur

Le monochromateur :

Le rayonnement émis par l'arc est focalisé sur l'entrée d'un monochromateur HR1000 Jobin-Yvon représenté sur la **figure VI-4**. Sa configuration est celle de Czerny-Turner avec une focale d'un mètre. Il est équipé d'un réseau holographique monté sur tourelle et comprenant 1200 traits/mm. Le domaine d'utilisation du réseau s'étend de l'ultraviolet à l'infrarouge (300nm-900nm) et sa rotation, nécessaire pour le défilement en longueur d'onde, est assurée par un moteur piloté pas à pas via un PC. Le miroir pivotant M₃ forme l'image de la fente d'entrée soit sur la fente de sortie axiale lors de l'utilisation de la caméra CCD, soit sur la fente latérale pour un autre système de détection comme un photomultiplicateur. L'ouverture et la fermeture des fentes (hauteur et largeur) sont assurées par des vis micrométriques.

La dispersion du monochromateur nous donne l'intervalle spectral qui couvre une diode de la caméra CCD et varie donc suivant la longueur d'onde. Nous déterminons la dispersion moyenne en mesurant le nombre de diodes séparant deux raies de longueur d'onde λ_1 et λ_2 par la relation :

$$D(\lambda) = \frac{\lambda_2 - \lambda_1}{n_{\text{diodes}}} \quad (\text{VI-1})$$

où n_{diodes} est le nombre de diodes séparant les deux raies. Pour le domaine 300nm - 900nm, la **figure VI-5** représente la courbe de dispersion du monochromateur.

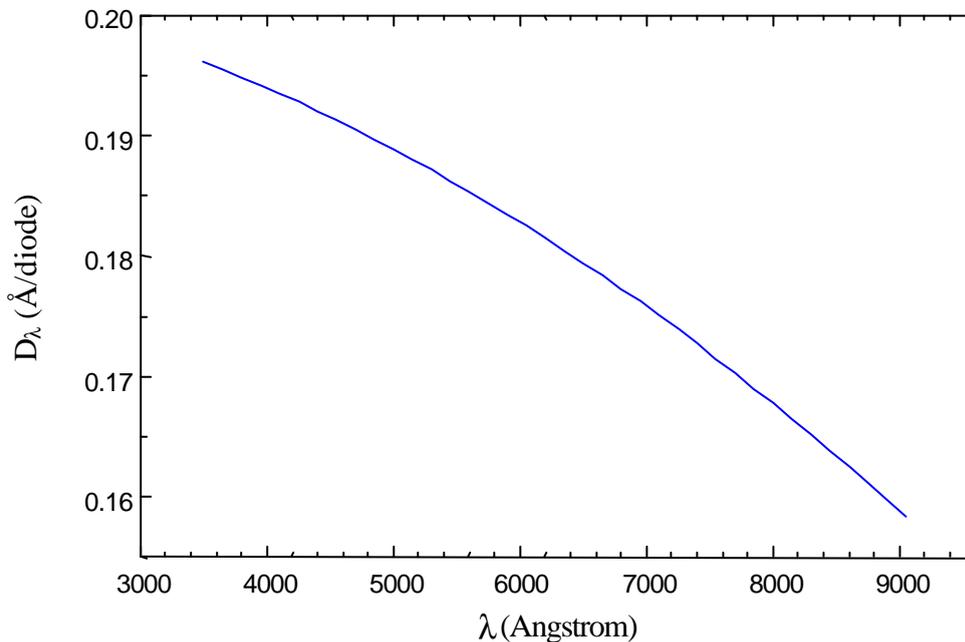


Fig. VI-5 : Dispersion du monochromateur

Le « périscope »

Le « périscope » est constitué d'une lentille L₂ de focale 20mm et de trois miroirs (**fig.VI-1**). L'ensemble du dispositif est géré par une centrale de commandes permettant des déplacements

horizontaux et verticaux du dispositif par l'intermédiaire de deux moteurs pas à pas micrométriques. Ce montage permet d'effectuer des mesures suivant différentes côtes verticales (z) et horizontales (x).

La caméra CCD.

Notre système de détection est une caméra CCD C7040 *Hamamatsu photonics* disposée sur la sortie axiale du monochromateur. Les caractéristiques du récepteur sont fournies par le constructeur [Ha-1]. L'intervalle spectrale couvert par la CCD dépend de sa dimension et de la dispersion du monochromateur. Composée de 1024 photodiodes, la largeur spectrale maximale intégrée par chacune d'elles est de 0.02 nm soit 20,48nm pour la totalité.

La sensibilité de la caméra, c'est à dire la réponse en nombre de coups par seconde de chaque pixel sous l'effet d'un flux de lumière identique, est sensiblement homogène sur toute la surface de la cellule avec une réponse néanmoins plus faible pour les pixels situés aux extrémités de la matrice. L'intensité du signal est proportionnelle au temps d'exposition de la cellule dont l'augmentation permet l'amélioration du rapport signal/bruit.

Lors d'une mesure, l'ouverture de l'obturateur permet au rayonnement émis par le plasma d'atteindre le récepteur. Chaque pixel intègre alors une charge par effet photoélectrique jusqu'à ce que l'obturateur se ferme une fois le temps d'exposition écoulé. La charge accumulée par chaque pixel est ensuite traitée par le logiciel PC et retranscrit à l'écran sous la forme d'un spectre.

Logiciel d'acquisition:

Nous utilisons le logiciel SA1400 conçu dans notre laboratoire pour la société *Hamamatsu*. Ce dernier permet de contrôler un grand nombre de paramètres dont le temps d'acquisition, les propriétés de la caméra CCD, l'enregistrement des résultats des mesures ou le déplacement des moteurs pas à pas.

II – METHODES DE DIAGNOSTIC ET CONDITIONS OPERATOIRES

Le plasma d'arc émet un spectre de raies atomiques et moléculaires caractéristiques des espèces présentes dans le plasma. L'étude de l'intensité des raies, de leur élargissement Stark ou du fond continu permet d'accéder aux profils de température, aux densités des atomes émetteurs ou des électrons.

2.1 – Paramètres d'acquisition et des conditions opératoires.

Toutes les mesures sont effectuées pour deux côtes verticales en sortie de tuyère (z=0mm) et en aval de celle-ci (z=10mm). Pour les côtes horizontales (x), le déplacement du « périscope » (*fig.VI-1*) permet d'effectuer des mesures sur toute la largeur du plasma. Pour tenir compte des

fluctuations de l'arc, chaque acquisition est répétée 5 fois pour chaque côte z et x, le résultat final étant une moyenne des cinq valeurs acquises. Les temps d'exposition sont ajustés suivant les raies du mélange étudié pour éviter toute saturation du détecteur. Pour les raies très intenses, un filtre neutre est ajouté pour atténuer le signal tout en conservant un temps d'exposition suffisamment important pour garder une bonne sensibilité de la caméra CCD.

Les mesures ont été effectuées pour trois débits de gaz plasmagène. Le mélange est formé de 90% Ar et 10% H₂ en volume. Le *tableau VI-1* récapitule l'intensité appliquée lors des mesures, la tension aux bornes de l'arc et les débits des deux gaz purs injectés en amont ainsi que le débit du mélange.

Tableau VI-1 : Débits, courants et tensions mesurés

Mélanges	D(mélanges) (ℓ/mn)	D(Ar) (ℓ/mn)	D(H ₂) (ℓ/mn)	Courant de fonctionnement	Tension de l'Arc
Ar/H ₂	21,0 \pm 2,0	19,0 \pm 1,0	2,0 \pm 0,1	(595 \pm 5) A	(31 \pm 4) V
Ar/H ₂	34,0 \pm 4,0	32,0 \pm 1,5	3,0 \pm 0,2	(592 \pm 5) A	(39 \pm 4) V
Ar/H ₂	52,0 \pm 5,5	48,0 \pm 2,5	4,0 \pm 0,2	(592 \pm 5) A	(50 \pm 4) V
Ar/H ₂ /Cu	52,0 \pm 5,5	48,0 \pm 2,5	4,0 \pm 0,2	(594 \pm 5) A	(53 \pm 4) V

En présence de poudres de cuivre, le débit du gaz porteur (argon) a été fixé à 4 ℓ/mn pour un débit de poudres de 7g/mn. Cette valeur ne correspond pas aux valeurs optimales, notre objectif étant l'étude du comportement et des caractéristiques du jet et non l'obtention d'un dépôt de bonne qualité.

2.2 – Sélection des raies spectrales

Il est important de choisir des raies facilement identifiables, suffisamment intenses, et si possible isolées pour ne pas avoir recours à la déconvolution due au chevauchement de raies voisines. Les probabilités de transition A_{ij} des raies choisies doivent être connues avec une bonne précision. Le *tableau VI-2* regroupe les caractéristiques des raies des différentes espèces chimiques utilisées pour cette étude.

Tableau VI-2 : Caractéristiques des raies étudiées

Valeurs (nm)	Espèce	Energie du niveau émetteur (cm^{-1})	g_i	A_{ij} (s^{-1})	Précision (%)	Source
510,5	Cu	30783.686	4	2.020E+06	10 - 25	[Ni-1]
515,3	Cu	49935.200	4	6.000E+07	10 - 25	[Ni-1]
656,1	H	97492.357	6	6.465E+07	3 - 10	[Ni-1]
727,2	Ar	107496.417	3	1.830E+06	3 - 10	[Ni-1]
746,8	N	96750.840	4	1.930E+07	3 - 10	[Ni-1]

- ◆ La raie d'argon neutre située à 727,2nm nous a permis de déterminer le profil de température $T(r)$ en utilisant la méthode de l'intensité absolue (§2.4.1).
- ◆ La densité électronique N_e s'obtient de l'élargissement Stark de la raie d'hydrogène 656,1nm d'après la théorie de Griem [Gr-5,6] (§2.5.2).
- ◆ L'émissivité de la raie d'azote 746,8nm permet d'étudier la pénétration de l'air dans le jet de plasma (§2.6).
- ◆ Enfin, le rapport des émissivités des deux raies du cuivre 510,5nm et 515,3nm permet également d'obtenir le profil de température $T(r)$ caractéristique de notre plasma (§2.4.2).

2.3 – Etalonnage

Lorsque nous mesurons le profil d'une raie et son intensité, nous obtenons des signaux électriques que nous devons par la suite convertir en terme d'énergie rayonnée par le plasma. Cette conversion ne peut se faire qu'à l'aide d'une source de rayonnement dont nous connaissons l'énergie pour les mêmes conditions de visée que la décharge. Nous avons utilisé une lampe à ruban de tungstène pour calibrer le rayonnement émis par le plasma. Calibrée au préalable pour un point de fonctionnement donné, elle permet un étalonnage dans le domaine spectral que nous étudions ($350\text{nm} < \lambda < 900\text{nm}$).

Pour notre dispositif expérimental, la lampe à ruban de tungstène est étalonnée à 15,7 ampères pour une tension proche de 9V. Le facteur de transmission $t_{\lambda}^{\text{fenêtre}}$ de la fenêtre en quartz de la lampe est de 0,927 et la température vraie T_v de 2856K.

2.4 – Détermination de la température du plasma

2.4.1 – Méthode basée sur l'intensité absolue d'une raie.

Déterminer la température en chaque point du plasma nécessite la connaissance de l'intensité absolue de la raie étudiée. Cette dernière s'obtient une fois connues l'intensité théorique de la lampe à ruban de tungstène et les intensités mesurées pour la lampe et la raie.

L'intensité théorique de la lampe est obtenue de l'émissivité théorique J_{Planck} calculée pour la température de couleur (donnée par le constructeur) à la longueur d'onde λ de la raie, de sa largeur spectrale $\Delta\lambda$, du facteur de transmission $t_{\lambda}^{\text{fenêtre}}$ et du coefficient d'émissivité du tungstène donné par De Vos [De-2] et représenté sur **la figure VI-6** en fonction de la longueur d'onde λ et de la température du filament T_v . Nous obtenons :

$$I_{\text{Lampe_Théorique}} = J_{\text{Planck}} \cdot \Delta\lambda \cdot \alpha_{\lambda} \cdot t_{\lambda}^{\text{fenêtre}} \quad \text{avec} \quad J_{\text{Planck}} = \frac{2hc^2}{\lambda^5} \cdot \frac{1}{\exp\left(\frac{hc}{\lambda k_b T_v}\right) - 1} \quad (\text{VI-2})$$

avec

J_{Planck} la fonction de Planck en $\text{W.cm}^{-3}.\text{sr}^{-1}$

α_λ coefficient d'émissivité du tungstène pour la longueur d'onde étudiée.

λ et $\Delta\lambda$ la longueur d'onde et la largeur spectrale en cm.

Des deux relations (VI-2), nous pouvons déduire l'intensité absolue en W.cm^{-2} pour chaque corde horizontale (x) d'une section droite du plasma et chaque raie λ étudiée à partir de l'expression suivante:

$$I_{\text{Absolue}}(x) = I_{\text{Lampe_Théorique}} \cdot \frac{I_{\text{Raie_Mesurée}}(x)}{I_{\text{Lampe_Mesurée}}} \quad (\text{VI-3})$$

où $I_{\text{Lampe_Théorique}}$ représente l'intensité théorique de la lampe à ruban de tungstène en W.cm^{-2} , $I_{\text{Raie_Mesurée}}$ l'intensité de la raie mesurée en $\text{V.cm}^{-2}.\text{sr}^{-1}$ et $I_{\text{Lampe_Mesurée}}$ l'intensité de la lampe à ruban de tungstène mesurée en $\text{V.cm}^{-2}.\text{sr}^{-1}$.

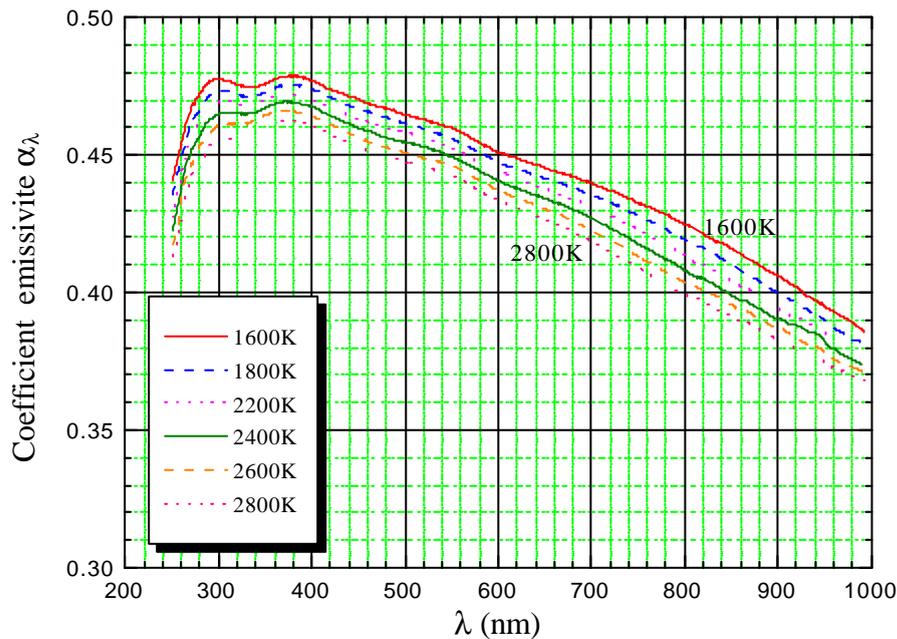


Fig. VI-6 : Coefficient d'émissivité du tungstène de De Vos [De-2].

Une fois $I_{\text{Absolue}}(x)$ connue pour chaque corde de visée, nous déterminons l'émissivité de la raie $J(r)$ en tout point du plasma (localement) par inversion d'Abel dont le principe est brièvement rappelé dans l'annexe A9.

Pour une transition radiative d'un niveau supérieur d'énergie ϵ_n vers un niveau inférieur d'énergie ϵ_m pour laquelle l'émission de photons de fréquence $\nu = (\epsilon_n - \epsilon_m)/h$ n'est pas interdite par les règles de sélection, l'émissivité d'une raie de l'espèce j après inversion d'Abel nous est donnée par la relation suivante :

$$J(r) = n_j(r) \cdot A_{nm} \cdot \frac{h\nu}{4\pi} = n_j(r) \cdot A_{nm} \cdot \frac{1}{4\pi} \cdot \frac{hc}{\lambda} \quad (VI-4)$$

Cette quantité $J(r)$ représente l'énergie rayonnée par un volume de plasma unité, contenant $n_j(r)$ atomes dans l'état d'énergie ε_n se désexcitant spontanément vers le niveau d'énergie inférieure ε_m avec la probabilité d'émission spontanée A_{nm} (s^{-1}), par unité d'angle solide et par unité de temps ($W \cdot m^{-3} \cdot sr^{-1}$).

En supposant le milieu en Equilibre Thermodynamique Local et de composition connue, la loi de Boltzmann reliant la densité du niveau excité d'énergie ε_n à la densité totale de l'espèce j considérée s'écrit alors sous la forme:

$$J(T) = A_{nm} \cdot \frac{1}{4\pi} \cdot \frac{hc}{\lambda} \cdot g_n \cdot \frac{n_j^{tot}(T)}{Q_j^{int}(T)} \cdot \exp\left(-\frac{\varepsilon_n}{k_b T}\right) \quad (VI-5)$$

où $n_j^{tot}(T)$ est la densité totale de l'espèce j (m^{-3}) obtenue par un calcul de composition, g_n la dégénérescence du niveau émetteur et $Q_j^{int}(T)$ la fonction de partition interne de l'espèce j (cf *Ch.II*).

Pour chaque raie étudiée, nous avons donc deux profils d'émission que sont $J(r)$ en fonction de la distance radiale r et $J(T)$ en fonction de la température du plasma. L'égalité $J(r)=J(T)$ nous permet alors de déterminer la température pour chaque distance radiale r . $J(T)$ n'étant pas monotone, nous obtenons deux températures vérifiant $J(r)=J(T)$. L'une d'elle peut être rejetée car située hors du domaine de température correspondant à notre étude ($>15000K$). Cette méthode a été mise en œuvre pour la raie d'argon 727,2nm.

Signalons que la détermination de la température par la méthode de l'intensité absolue d'une raie nécessite la connaissance au préalable de la composition du plasma étudié.

2.4.2 – Méthode de l'intensité relative de deux raies d'une même espèce.

Cette méthode de détermination de la température nécessite également la connaissance de l'émissivité $J(r)$ après transformation d'Abel. Nous avons vu pour la méthode précédente que l'émissivité d'une raie λ dans le cas d'un milieu considéré à l'Equilibre Thermodynamique Local pouvait s'écrire suivant la relation (VI-5). Etant donné qu'à une distance radiale r et pour une température $T(r)$ correspond une émissivité donnée, nous pouvons écrire $J(r)=J(T)$.

Pour deux raies λ_1 et λ_2 , le rapport des émissivités $J_1(r)$ et $J_2(r)$ s'écrit donc :

$$R = \frac{J_1(r)}{J_2(r)} = \frac{\lambda_1}{\lambda_2} \cdot \frac{A_1}{A_2} \cdot \exp\left(-\frac{\varepsilon_1 - \varepsilon_2}{k_b T}\right) \quad (VI-6)$$

avec A_1 et A_2 les probabilités de transition, ϵ_1 et ϵ_2 les énergies des niveaux émetteurs des raies λ_1 et λ_2 .

Mise en œuvre pour les deux raies du cuivre à 510,5nm et 515,3nm, cette méthode présente l'avantage de s'affranchir du calcul de la composition du plasma. Le principal inconvénient reste la recherche d'au moins deux raies d'un même élément ayant des énergies d'excitation éloignées d'au moins 2eV et des probabilités de transition A_{ij} sûres.

2.4.3 – Incertitudes sur la température

Nous indiquons dans ce paragraphe les expressions permettant de calculer l'erreur sur la température suivant la méthode utilisée.

Pour la méthode de l'intensité relative (§2.4.2), la relation suivante fournit l'erreur relative pour deux raies de longueur d'onde λ_1 et λ_2 :

$$\frac{\Delta T}{T} = \left[\frac{\Delta \left(\frac{J_1}{J_2} \right)}{\frac{J_1}{J_2}} + \frac{\Delta \left(\frac{A_1}{A_2} \right)}{\frac{A_1}{A_2}} \right] \cdot \frac{k_b T}{\epsilon_1 - \epsilon_2} \quad (VI-8)$$

Pour la méthode utilisant l'intensité absolue de la raie d'argon 727,2nm (§2.4.1), les incertitudes sur le profil de température proviennent des erreurs commises lors des réglages optiques et des acquisitions mais aussi lors du traitement des données. En effet, s'ajoutent aux « bruits électroniques » des instruments de mesure les erreurs dues à la « symétrisation » du profil à lisser pour l'inversion d'Abel, dues au lissage lui-même et aux autres traitements graphiques et numériques. Pour ces raisons, l'émissivité $J(r)$ est supposée connue avec une grande incertitude variant de 20% sur l'axe [Va-1] à 50% pour des distances radiales voisines de 2mm. Prendre 50% en périphérie s'explique notamment par un lissage avant inversion d'Abel nettement moins précis qu'au centre du plasma. Les incertitudes sur les probabilités de transition étant issues de la littérature [Ni-1], l'erreur relative pour cette méthode est alors donnée par :

$$\frac{\Delta T}{T} = \left[\frac{\Delta J}{J} + \frac{\Delta A_{nm}}{A_{nm}} \right] \cdot \frac{k_b T}{\epsilon_n} \quad (VI-8)$$

Enfin, les travaux de **Lagnoux** [La-1] ont montré qu'une erreur supplémentaire due à la présence d'air dans le jet doit être ajoutée aux incertitudes précédentes. D'après ses résultats (*figure II-19*, p.69 de son manuscrit), nous constatons que cette erreur varie quasi linéairement suivant le pourcentage d'air présent dans le milieu. Connaissant le profil de température et l'évolution du pourcentage d'azote ($N + N^+$) en fonction de la distance radiale r , nous pouvons donc estimer l'erreur correspondante. Par exemple, pour une température de 9000K et 40% d'air, la valeur

calculée avoisine 400K qu'il faut ensuite ajouter à l'erreur obtenue des relations (VI-7) ou (VI-8) suivant la méthode appliquée pour déterminer $T(r)$.

Pour nos mesures, l'incertitude totale sur la température (méthode + présence d'air) varie de 4% sur l'axe à 6% sur les bords du plasma.

2.5 – Détermination de la densité électronique

2.5.1 – Recombinaison radiative : étude du fond continu

La densité électronique peut s'obtenir de l'émission du continuum du plasma étudié. Pour un plasma d'argon pur, nous savons d'après le *chapitre III* que la recombinaison radiative dans le domaine du visible est le principal phénomène responsable de cette émission. Dans ce cas, la densité électronique N_e peut se déduire de la relation de Schulz-Gulde (III-2). Cependant, pour le mélange 90%Ar-10%H₂ que nous étudions, l'utilisation de cette relation nécessite une étude préalable du continuum aux longueurs d'onde considérées afin de vérifier l'importance de la recombinaison radiative de l'argon devant les autres phénomènes, notamment ceux relatifs à l'hydrogène.

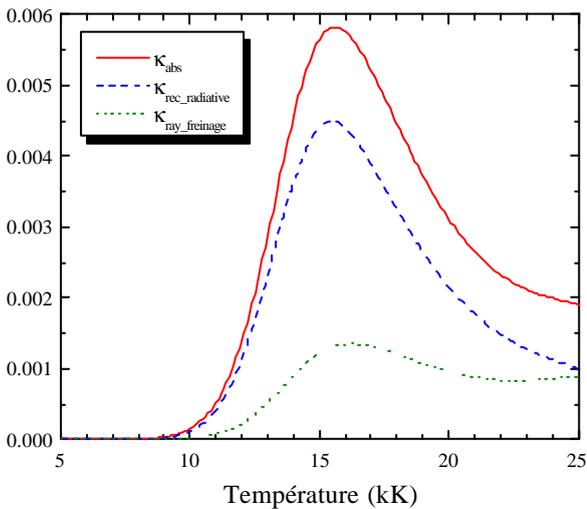


Fig. VI-7 : Contributions des différents phénomènes au coefficient total K_{abs} au voisinage de 727,2nm pour un plasma 90%Ar-10%H₂.

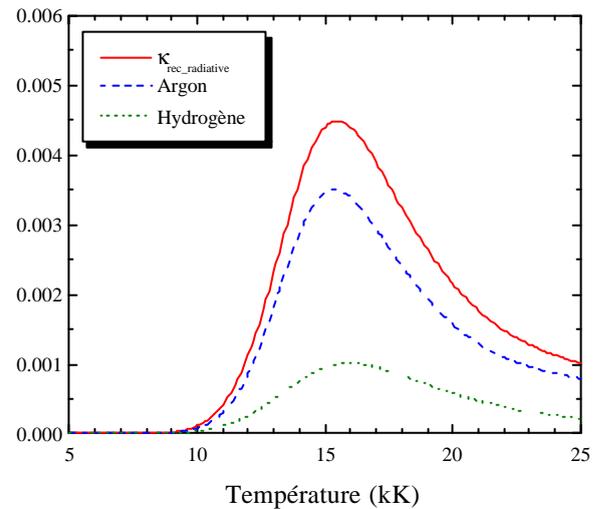


Fig. VI-8 : Comparaison de la recombinaison radiative de l'argon et de l'hydrogène au voisinage de 727,2nm pour un plasma 90%Ar-10%H₂.

Au voisinage de 727,2nm, **les figures VI-7 et VI-8** présentent respectivement les contributions des différents processus d'émission continue au coefficient total d'absorption et comparent la recombinaison radiative de l'argon et de l'hydrogène en fonction de la température. Pour des températures proches de 15000K, nous constatons d'une part que les processus de recombinaison radiative sont bien prédominants par rapport au rayonnement de freinage total et d'autre part, que la recombinaison radiative de l'argon est nettement supérieure à celle de l'hydrogène. Dans notre

cas, les profils de températures typiques obtenus pour un plasma d'argon pur présentent une température sur l'axe du jet d'environ 12000K en sortie de tuyère. Pour un mélange 90%Ar-10%H₂, en faisant l'hypothèse que la recombinaison radiative de l'argon est le seul phénomène contribuant efficacement au continuum, il semble possible de déterminer la densité électronique N_e proche de l'axe du plasma et de la sortie de la tuyère. Toutefois, des erreurs importantes pourraient être commises pour des positions plus éloignées où la température du plasma est nettement inférieure à 12000K. Compte tenu des réserves que nous venons d'exposer, cette technique doit être utilisée avec beaucoup de précautions.

2.5.2 – Elargissement Stark de la raie H_α

La densité électronique du plasma peut être estimée par l'étude de l'élargissement Stark de la raie 656,1nm. En effet, plusieurs méthodes recensées dans la littérature permettent de déterminer N_e à partir de la largeur de la raie H_α [Gr-5,6][Hi-1][Sm-4][Wi-1], celle de Griem ayant été choisie pour notre mélange Ar/H₂. Lors d'une acquisition, le signal enregistré par la CCD donne l'intensité électrique de la raie en fonction des pixels de la caméra pour une corde de plasma et pour chaque position horizontale x_i. L'inversion d'Abel longueur d'onde par longueur d'onde et pour chacune des positions x_i nous permet de reconstituer la raie pour chaque distance radiale r. Une fois J(λ) connue en chaque point r de notre plasma, nous pouvons déduire la largeur à mi-hauteur Δλ(r) et de celle-ci la densité électronique en fonction de la distance radiale r.

Griem utilise un paramètre α reliant la largeur totale à mi-hauteur Δλ (en cm) à la force de champ de Holsmark F₀ :

$$\begin{cases} \alpha = \frac{1}{2} \cdot \frac{\Delta\lambda}{F_0} \\ F_0 = 2,603 \cdot |eZ_i| \cdot n_i^{2/3} \end{cases} \quad (VI-9)$$

avec n_i la densité d'ions et Z_i leur charge. Notre plasma étant électriquement neutre (n_i=n_e), nous obtenons :

$$\begin{cases} F_0 = 1,25 \cdot 10^{-9} \cdot n_e^{2/3} \\ e = 4,803 \cdot 10^{-10} \text{ esu} \\ \Delta\lambda = 2 \times 1,25 \cdot 10^{-9} \cdot \alpha_{1/2} \cdot n_e^{2/3} \end{cases} \quad (VI-10)$$

où n_e est exprimée en cm⁻³ et Δλ en Å, α_{1/2} étant la demi-largeur à mi hauteur théorique dont les valeurs numériques pour la raie H_α sont données en *Annexe III* du livre de **Griem** [Gr-6].

De ces tables, nous pouvons également déterminer la densité électronique à partir d'autres largeurs de raie Δλ_{1/n} dont les valeurs α_{1/n} correspondantes sont également tabulées pour différentes valeurs de n (n=2 : largeur à mi-hauteur, n=4 : largeur au quart de la hauteur...). Pour n=2, un lissage des valeurs associées nous donne la densité électronique sous la forme :

$$\begin{cases} n_e \text{ (m}^{-3}\text{)} = f(\Delta\lambda(\text{\AA})) \\ \log_{10}(n_e) = 21,76305 + 1,23598 \times \log_{10}(\Delta\lambda) \end{cases} \quad (\text{VI-11})$$

Notons que nous n'avons pas pris en compte l'élargissement dû à la fonction d'appareil compte tenu de sa valeur relativement faible ($< 0,1\text{nm}$) devant l'élargissement dû à l'effet Stark.

2.5.3 – Incertitudes sur la densité électronique.

a – Méthode du fond continu

La densité électronique étant obtenue de la relation (III-2) du chapitre III, nous devons prendre en compte les incertitudes sur les valeurs du profil de température $T(r)$ auxquelles s'ajoutent les erreurs sur les mesures des émissivités du fond continu et celles propres au facteur de Biberman ξ_{Ar} pour l'argon neutre.

L'erreur relative sur la densité électronique s'écrit finalement sous la forme :

$$\frac{\Delta(n_e)}{n_e} = \frac{1}{2} \cdot \left(\frac{\Delta(J)}{J} + \frac{\Delta(\xi_{\text{Ar}})}{\xi_{\text{Ar}}} + \frac{\Delta(T)}{T} \left(\frac{1}{2} + C_1(T) \right) \right) \text{ avec } C_1(T) = \frac{hc}{\lambda k_b T} \left(\frac{e^{-\left(\frac{hc}{\lambda k_b T}\right)}}{1 - e^{-\left(\frac{hc}{\lambda k_b T}\right)}} \right) \quad (\text{VI-12})$$

Or, au voisinage de 727,2nm et pour des températures proches de 10000K, le terme $C_1(T)$ vaut environ 0,3. Nous avons donc majoré l'erreur relative telle que :

$$\frac{\Delta(n_e)}{n_e} \approx \frac{1}{2} \cdot \left(\frac{\Delta(J)}{J} + \frac{\Delta(\xi_{\text{Ar}})}{\xi_{\text{Ar}}} + \frac{\Delta(T)}{T} \right) \quad (\text{VI-13})$$

L'erreur sur ξ_{Ar} est prise constante et égale à 10% quelle soit la valeur de r . Les incertitudes des émissivités et de la température sont indiquées dans le paragraphe précédent. Finalement, nous obtenons une erreur relative d'environ 20% sur l'axe et 35% en périphérie du jet.

b – Méthode utilisant l'élargissement Stark

La densité électronique dépend de la valeur prise par la largeur à mi-hauteur $\Delta\lambda$ et du coefficient $\alpha_{1/2}$ (VI-10). L'erreur commise sur la détermination graphique de $\Delta\lambda$ est estimée à 10% pour des distances radiales proches de l'axe et 20% en périphérie du jet. Les valeurs du coefficient $\alpha_{1/2}$ sont fournies par **Griem** [Gr-6] pour une température de 10000K. Puisque les valeurs des températures mesurées sont comprises entre 8000K et 13000K, l'erreur inhérente au coefficient $\alpha_{1/2}$ peut être évaluée à 5%. L'erreur relative est alors donnée par :

$$\frac{\Delta(n_e)}{n_e} = \frac{3}{2} \frac{\Delta(\Delta\lambda)}{\Delta\lambda} + \frac{\Delta(\alpha_{1/2})}{\alpha_{1/2}} \quad (VI-14)$$

Nous devons ajouter à cette incertitude l'erreur due au lissage des données de Griem (VI-11) :

$$\frac{\Delta(n_e)}{n_e} = 1.23598 \cdot \frac{\Delta(\Delta\lambda)}{\Delta\lambda} \quad (VI-15)$$

En majorant l'erreur relative du lissage, l'erreur totale sur la densité électronique s'écrit finalement :

$$\frac{\Delta(n_e)}{n_e} \approx 3 \cdot \frac{\Delta(\Delta\lambda)}{\Delta\lambda} + \frac{\Delta(\alpha_{1/2})}{\alpha_{1/2}} \quad (VI-16)$$

2.6 – Etude de la pénétration d'air dans le jet de plasma

A partir de l'émissivité $J(r)$ de la raie d'azote neutre située à 746,8nm, nous sommes en mesure de calculer la densité du niveau émetteur à partir de la relation (VI-4). De celle-ci, nous pouvons déduire la densité totale d'atomes d'azote présents dans notre milieu via la loi de Boltzmann :

$$n_{Azote}^N(r) = n_{Azote}^{7468}(r) \cdot \frac{Q_{Azote}^{int}(r)}{g_n} \cdot \exp\left(\frac{\epsilon_n}{k_b T}\right) \quad (VI-17)$$

où $n_{Azote}^{7468}(r)$ représente la densité du niveau émetteur (m^{-3}), $Q_{Azote}^{int}(r)$ la fonction de partition interne de l'azote atomique, g_n et ϵ_n la dégénérescence et l'énergie du niveau émetteur de la raie. A partir du profil de température $T(r)$ obtenu suivant l'une des méthodes proposées au §2.4, nous pouvons déterminer la densité d'azote en fonction de la distance radiale r .

La **figure VI-9** représente l'évolution du rapport des densités N/N^+ calculé à l'*ETL* en fonction de la température et pour différents mélanges Ar-H₂-air. Nous constatons que ce rapport décroît avec la température mais reste quasiment inchangé lorsque le pourcentage d'air varie. Dans la gamme de température correspondante à notre étude (cf §III.3.2), la présence d'ions N^+ ne peut pas être négligée contrairement à l'espèce moléculaire N_2 .

Par conséquent, le pourcentage volumique d'azote s'obtient du rapport de la somme des densités des espèces N et N^+ sur la densité totale des espèces du plasma, tel que :

$$\%(n_{Azote}^{tot}) = 100 \cdot \frac{(n_{Azote}^N + n_{Azote}^{N^+})}{P} k_b T \quad (VI-18)$$

la densité d'ions N^+ étant reliée à la densité d'azote atomique par la relation :

$$\text{avec } \log_{10}(n_{\text{Azote}}^{N^+}) = \log_{10}(n_{\text{Azote}}^N) + 3,125 \cdot 10^{-04} \cdot T - 4,5935 \quad (\text{VI-19})$$

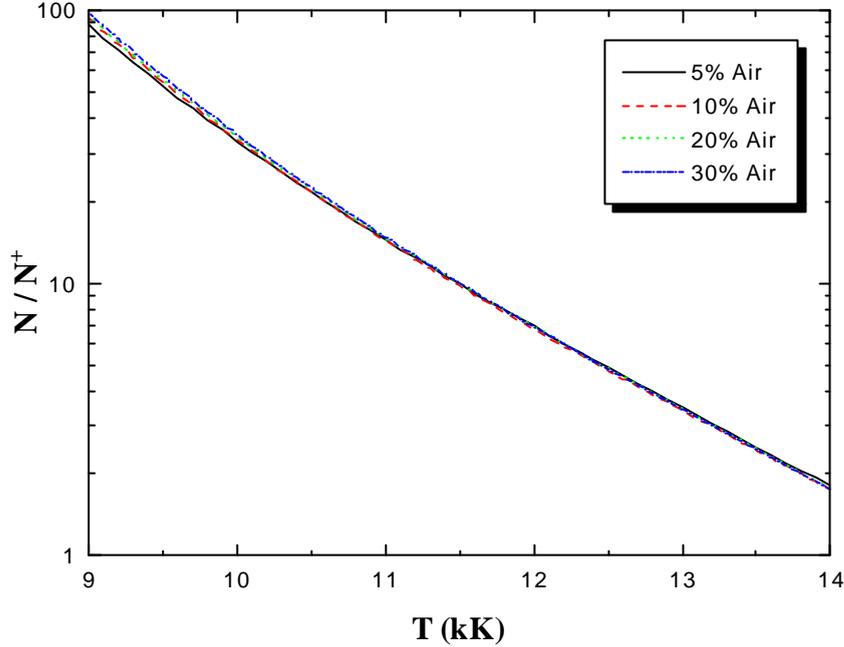


Fig. VI-9 : Variation du rapport N/N^+ en fonction de la température et de la proportion d'air

2.6.1 – Incertitudes sur le pourcentage d'azote

Le pourcentage d'azote est obtenu des relations (VI-14), (VI-15) et (VI-16). L'incertitude sur la densité du niveau émetteur n_{Azote}^{7468} s'écrit sous la forme :

$$\frac{\Delta n_{\text{N}}^{7468}}{n_{\text{N}}^{7468}} = \frac{\Delta A}{A} + \frac{\Delta J}{J} \quad (\text{VI-20})$$

De celle-ci, nous pouvons déduire l'erreur sur la densité totale d'azote n_{Azote}^N puis celle de la densité totale $n_{\text{Azote}}^{N^+}$ de l'ion N^+ :

$$\frac{\Delta n_{\text{N}}}{n_{\text{N}}} = \frac{\Delta n_{\text{N}}^{7468}}{n_{\text{N}}^{7468}} + \left(\frac{\epsilon_n}{k_b T} \right) \frac{\Delta T}{T} \quad \text{et} \quad \frac{\Delta n_{\text{N}^+}}{n_{\text{N}^+}} = \frac{\Delta n_{\text{N}}}{n_{\text{N}}} + \left(3,125 \cdot 10^{-04} \cdot \ln 10 \cdot T \right) \frac{\Delta T}{T} \quad (\text{VI-21})$$

Finalement, l'incertitude sur le pourcentage d'azote entrant dans le plasma est donnée par :

$$\frac{\Delta\%}{\%} = \frac{\Delta n_{N^+}}{n_N + n_{N^+}} + \frac{\Delta n_N}{n_N + n_{N^+}} + \frac{\Delta T}{T} \quad (\text{VI-22})$$

III – RESULTATS ET COMMENTAIRES

La totalité des résultats présentés ont été obtenus pour une intensité de courant approchant les 600A (*tableau VI-1*).

3.1 – Etude de la pénétration d'air dans le jet de plasma

Les travaux de *Lagnoux* [La-1] ont montré que la pénétration d'air dans le jet de plasma dépendait de la géométrie de la tuyère. Or, une tuyère divergente en sortie comme celle utilisée lors de nos mesures (*fig.VI-3*) favorise encore plus l'engouffrement d'air dans le jet. Nous avons représenté sur la *figure VI-10* le pourcentage volumique d'azote ($N + N^+$ car la densité des espèces moléculaires est négligeable) en fonction de la distance radiale r pour un mélange 90%Ar-10%H₂, la côte $z=10\text{mm}$ et deux débits de 21 ℓ/mn et 52 ℓ/mn . Le profil de température $T(r)$ obtenu de l'intensité absolue de la raie d'argon 727,2nm permet la transition température $n(T)$ – distance radiale $n(r)$ en supposant l'*ETL*.

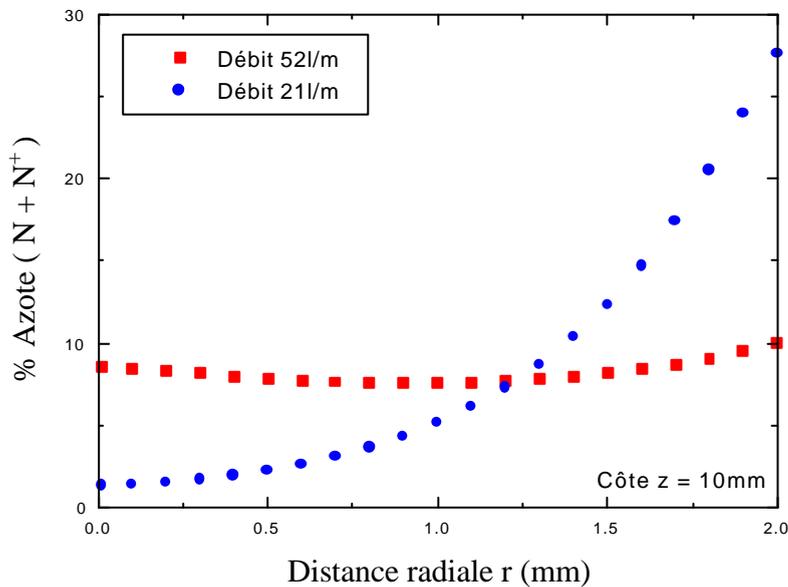


Fig. VI-10 : Variation de la pénétration d'air en fonction du débit pour un plasma 90%Ar-10%H₂ et à la côte $z = 10\text{mm}$.

Lors des mesures, la turbulence était nettement plus marquée pour le débit de 52 ℓ/mn . Or nous savons que l'engouffrement d'air est d'autant plus important que le jet est turbulent. Ce phénomène se confirme dans notre cas pour des distances radiales proches de l'axe (*fig.VI-10*).

Au delà de 1,25mm, les résultats proposés semblent indiquer un entraînement d'air dans le jet plus important pour un débit plus faible. Ce comportement peut paraître surprenant. Toutefois, **Lagnoux** [La-1, *figure II-21 p.69*] a montré qu'un décalage de quelques millimètres du maximum d'intensité $I(x)$ avant inversion d'Abel entraînait de grandes variations sur les résultats et par conséquent d'importantes erreurs en périphérie du jet [La-1, *figure II-22 p.69*]. Néanmoins, l'allure obtenue pour un débit de 52 l/mn reste proche des valeurs moyennes présentées par **Lagnoux** pour un débit voisin (60 l/mn). De plus, la méthode utilisée pour obtenir la densité d'azote s'appuie sur l'hypothèse de l'ETL alors que des écarts à l'équilibre peuvent exister en périphérie du jet comme nous le verrons au §3.2.

Les barres d'erreur n'ont pas été reportées sur la **figure VI-10** car les valeurs des incertitudes issues de la relation (VI-22) se sont révélés très élevées. Par conséquent, ces résultats nous renseignent plus sur une tendance de la pénétration d'air dans le jet que sur une quantification de celle-ci.

3.2 – Etude du profil de température $T(r)$

Nous avons représenté sur la **figure VI-11** l'influence du débit sur le profil de température en fonction de la distance radiale pour un mélange 90%Ar-10%H₂ et la côte $z=0$ mm. La **figure VI-12** montre l'évolution de ce profil lorsque de l'hydrogène et du cuivre sont mélangés au gaz porteur qu'est l'argon. La méthode utilisée pour déterminer $T(r)$ reste l'intensité absolue de la raie d'argon 727,2nm.

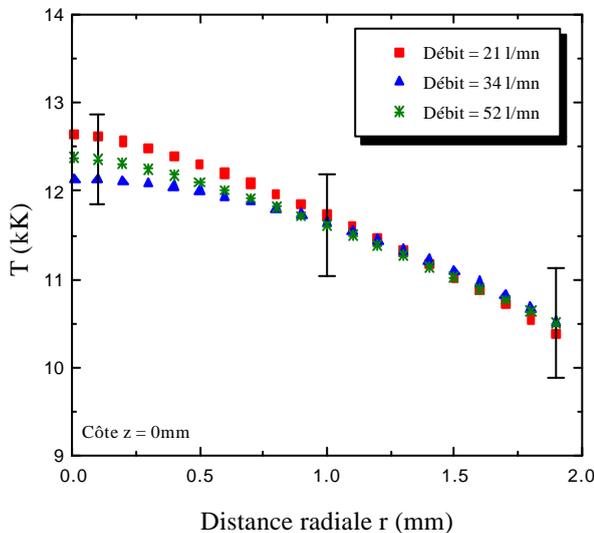


Fig. VI-11 : Influence du débit sur $T(r)$ à la côte $z=0$ mm pour un plasma 90%Ar-10%H₂.

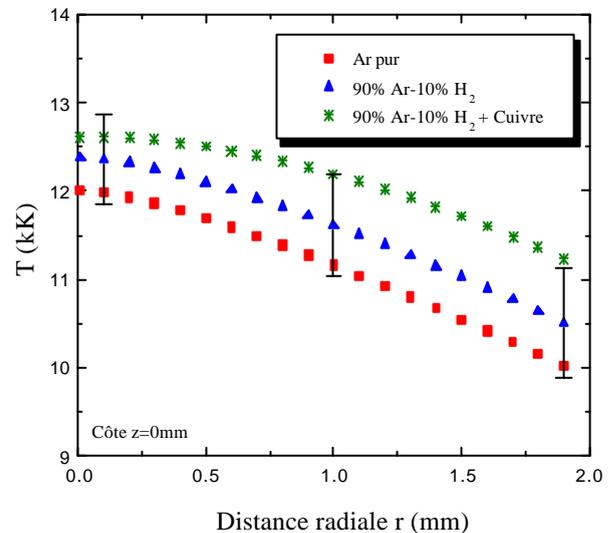


Fig. VI-12 : Comparaison des profils de température pour un débit de 52l/mn et la côte $z=0$ mm.

Les profils de température de la **figure VI-11** sont très similaires. Ce comportement peut s'expliquer par la géométrie de notre tuyère. En effet, pour une tuyère cylindrique, l'augmentation du débit entraîne un gainage plus important du jet conduisant à une élévation de

la température au centre du plasma. La tuyère utilisée pour nos mesures étant divergente en sortie (**fig. VI-3**), la constriction du plasma semble diminuer dès la sortie de la chambre cylindrique. Cette hypothèse pourrait justifier la faible influence du débit sur le profil $T(r)$.

Par rapport à un plasma d'argon pur, la présence d'hydrogène entraîne une élévation de la tension d'arc, c'est à dire de la puissance injectée dans le plasma. Cet effet permet d'expliquer l'augmentation des températures constatée sur la **figure VI-12**.

La **figure VI-12** présente également le profil de température pour un mélange Ar/H₂ en présence de cuivre. Les résultats du *chapitre IV* ont montré que les pertes radiatives augmentaient avec l'ajout de vapeurs métalliques. De plus, la fusion des poudres de cuivre et leur transport au sein du jet nécessite une énergie conséquente. Pour ces raisons, la présence de cuivre devrait entraîner une baisse de la température. Pourtant, les résultats obtenus montrent une élévation de celle-ci quelles que soient les distances radiales étudiées. Ce comportement peut toutefois s'expliquer par une différence de tension d'arc entre les deux séries de mesures avec et sans cuivre, les paramètres opératoires du *tableau VI-1* montrant une tension légèrement supérieure en présence de cuivre. Il semble que la position de l'injecteur de poudres très en amont de la sortie de la buse modifie les propriétés de l'arc et notamment sa position d'accrochage.

Remarque : Nous avons également utilisé l'intensité relative des deux raies du cuivre à 510,5nm et 515,3nm pour déterminer le profil $T(r)$. Nous avons décidé de ne pas présenter ces résultats car la température obtenue sur l'axe du jet avoisinait les 14000K en sortie de tuyère, valeur qui nous semble surestimée. En effet, pour de telles températures, nous aurions dû observer clairement les raies d'argon dont les niveaux émetteurs possèdent une énergie élevée (~115000 à 120000 cm⁻¹). Or nous avons constaté lors de nos acquisitions que ces raies étaient peu intenses ce qui laisse à penser que la température déterminée via les raies du cuivre est erronée. De plus, la répartition inhomogène des poudres ou vapeurs de cuivre dans le jet implique une grande incertitude sur la température mesurée.

3.3 – Etude de la densité électronique $n_e(r)$

Nous présentons dans ce paragraphe les profils de densité électronique pour un mélange 90%Ar-10%H₂, les côtes $z = 0\text{mm}$ et $z = 10\text{mm}$, et les débits 21 l/mn et 52 l/mn. Nous comparons sur les **figures VI-13 à VI-16** les résultats obtenus par trois méthodes : celles du fond continu et de l'élargissement Stark décrites au §2.5, et un calcul de composition à l'Equilibre Thermodynamique Local utilisant le profil de température $T(r)$ de la raie d'argon 727,2nm.

Les **figures VI-13 à VI-16** montrent une densité électronique issue du fond différente de celle obtenue par les deux autres méthodes. Ces résultats ne sont pas surprenants compte tenu des valeurs du profil de température (**fig. VI-12**) qui sont proches des limites d'application de cette méthode, la recombinaison radiative de l'argon n'étant dans ces conditions plus réellement prédominante.

A faible débit (**fig. VI-13** et **fig. VI-14**), les résultats issus de l'élargissement Stark et du calcul de la composition ETL montrent par contre un accord très satisfaisant. Toutefois, pour la côte $z=10\text{mm}$, une légère différence apparaît si l'on s'éloigne de l'axe du jet. Or, la méthode utilisant

l'élargissement de la raie d'hydrogène est indépendante de l'Equilibre Thermodynamique Local. Il semble donc que l'hypothèse de l'ETL soit vérifiée en sortie de tuyère. Pour la côte $z = 10\text{mm}$, l'entraînement d'air (fig. VI-10) ou/et l'émergence d'écart à l'équilibre peuvent expliquer le léger désaccord en périphérie du jet.

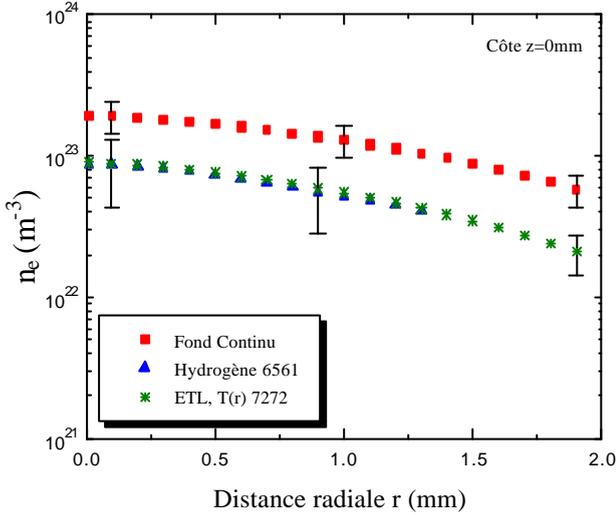


Fig. VI-13 : Variation de la densité électronique $n_e(r)$ pour la côte $z = 0\text{mm}$ et un débit de 21l/mn.

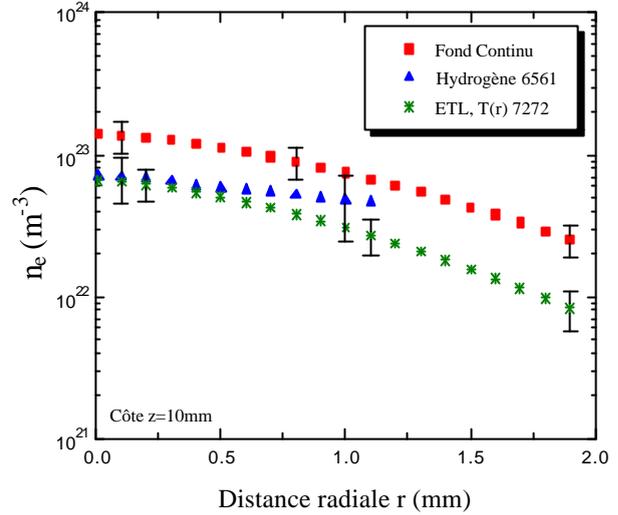


Fig. VI-14 : Variation de la densité électronique $n_e(r)$ pour la côte $z = 10\text{mm}$ et un débit de 21l/mn.

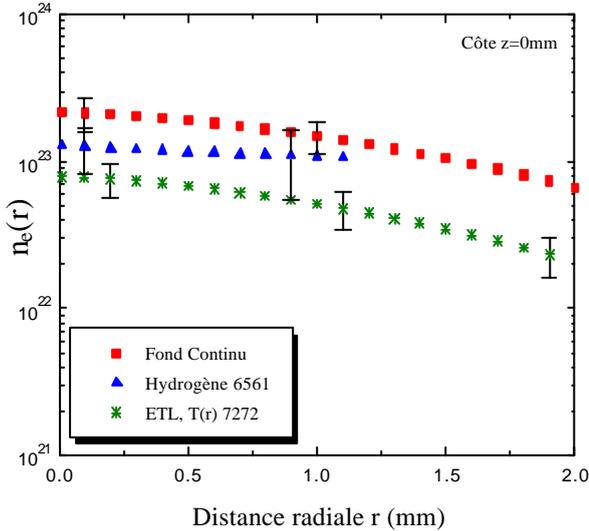


Fig. VI-15 : Variation de la densité électronique $n_e(r)$ pour la côte $z = 0\text{mm}$ et un débit de 52l/mn.

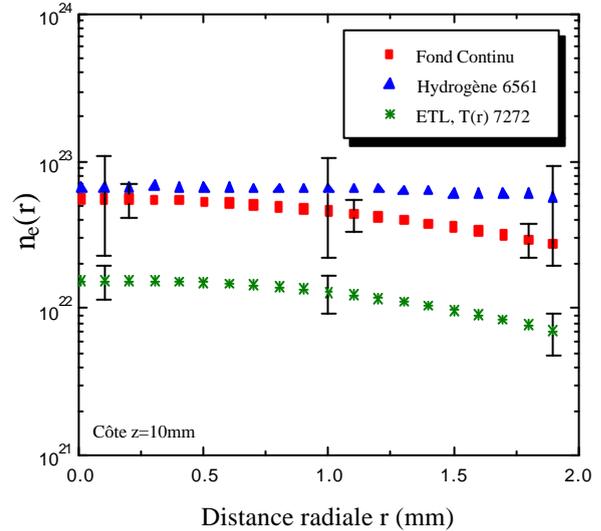


Fig. VI-16 : Variation de la densité électronique $n_e(r)$ pour la côte $z = 10\text{mm}$ et un débit de 52l/mn.

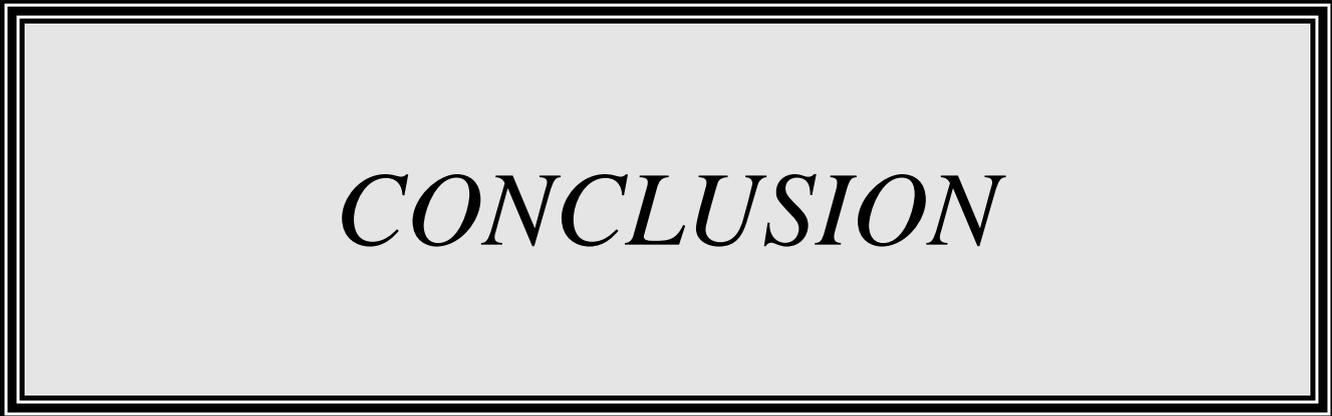
Pour un débit de 52 ℓ /mn (**fig. VI-15** et **fig. VI-16**), l'écart entre ces deux méthodes (*ETL* et Stark) devient plus conséquent, d'autant plus prononcé que l'on s'éloigne de la sortie de la tuyère ou de l'axe du jet. Pour la côte $z = 0$ mm, les résultats montrent un désaccord plus marqué par rapport aux mesures faites à faible débit mais restent néanmoins proches. Par contre, pour la côte $z = 10$ mm, nous savons d'après la **figure VI-10** que la présence d'air est importante même au centre du plasma. Le calcul de la composition à l'*ETL* étant effectué sans tenir compte de la présence d'air, nous pensons que ce phénomène peut être à l'origine des différences observées **figure VI-16**. En effet, si la composition du plasma n'est pas adaptée aux conditions expérimentales, l'utilisation de celle-ci pour déterminer le profil $T(r)$ à partir de la raie d'argon 727,2nm peut mettre en doute le profil de densité électronique *ETL* présenté sur la **figure VI-16**.

IV – CONCLUSION

Lors de cette étude expérimentale, nous avons d'une part mis au point un dispositif de torche de projection et d'autre part mis en place des techniques de diagnostic optique du jet de plasma. Ces techniques fondées sur la spectroscopie d'émission sont très classiques mais ont permis d'obtenir quelques premiers résultats qui permettent de mieux comprendre le fonctionnement de notre torche, à savoir :

- le profil de température est faiblement influencé par le débit de gaz en sortie de buse.
- la géométrie de la buse divergente crée une pénétration d'air dès sa sortie.
- le caractère turbulent du jet de plasma pour un débit de gaz de 52 ℓ /mn induit une présence d'air au niveau de l'axe du jet, phénomène qui se manifeste peu pour un débit de 21 ℓ /mn.
- l'injection de poudres située relativement en amont dans la buse perturbe non seulement les caractéristiques du jet de plasma mais également ceux de l'arc lui-même (augmentation de la tension avec injection de poudres).
- Certains écarts à l'équilibre dans le plasma tendent à se manifester mais ne sont pas clairement établis.

Cependant, notre étude expérimentale a également montré ses limites lorsque nous voulons approfondir les propriétés du jet, en particulier en présence de cuivre. En effet, nous savons d'après [Co-4] que le jet produit par ce type de torche est par essence très fluctuant (fluctuations du pied de l'arc et fluctuations liées à l'injection discontinue de poudres métalliques) de sorte que les mesures moyennées dans le temps ne donnent que des tendances sur les propriétés réelles du plasma qu'il faut analyser avec précaution. Dans certains cas, ce type de mesure peut même donner des résultats aberrants lors de la reconstitution des profils d'intensités lumineuses avant inversion d'Abel dont les points successifs sont mesurés avec des intervalles de temps supérieurs aux constantes de temps caractéristiques des fluctuations. Cela signifie que des mesures fiables doivent être quasi-instantanées et doivent faire l'objet de traitement de signaux. C'est ce type d'étude déjà développée dans notre équipe lors de travaux antérieurs [Si-2,3] que nous comptons appliquer à notre torche de projection.



CONCLUSION

L'objectif initial de la thèse était le calcul des coefficients de transport et des propriétés radiatives des plasmas établis dans des mélanges argon-hydrogène, en présence de cuivre à la pression atmosphérique. Les méthodes de calcul pour obtenir ces deux types de résultats sont complètement différentes, et bien que ces méthodes aient déjà été mises au point dans notre équipe par le passé, ma contribution a porté d'une part sur l'amélioration de différents calculs généraux, et d'autre part, sur l'application rigoureuse de ces méthodes aux mélanges qui nous intéressent. Cet objectif initial a été accompli et nous avons souhaité rajouter une étude expérimentale qui, sans être une validation des banques de données précédentes, constitue une étape supplémentaire dans le projet à long terme du groupe sur l'étude de la projection plasma sur des matériaux composites.

Tous les calculs sont fondés sur l'hypothèse d'un plasma en Equilibre Thermodynamique Local. Elle autorise dans un premier temps le calcul de la composition du plasma à l'équilibre qui a été obtenue en ne considérant que la phase gazeuse. Cette composition est le point de départ nécessaire aux méthodes de calcul des coefficients de transport et des propriétés radiatives. Pour le rayonnement, nous avons travaillé plus particulièrement sur quatre aspects :

- L'amélioration de travaux antérieurs du groupe sur la détermination du facteur de fuite des raies de résonance en fonction des conditions d'élargissement et du profil de raie correspondant.
- Les banques de données de physique atomique concernant toutes les espèces prises en compte : structure atomique (nombres quantiques, énergie et poids statistique des niveaux) et coefficients d'émission spontanée. Notre procédure de choix des données s'appuie d'abord sur les tables du NIST, complétées par les tables de Kurucz et Peytremann accessibles sur le réseau INTERNET. Nous avons également dû rechercher quelques données sur les sections efficaces de photoionisation et photodissociation de l'hydrogène moléculaire.
- Le calcul du coefficient d'émission nette en milieu homogène et isotherme. Malgré les hypothèses restrictives, ce coefficient est souvent utilisé dans les modèles d'arc ou de torche car l'émission nette (c'est à dire l'émission tenant compte de l'autoabsorption dans le plasma) d'un point appartenant aux régions les plus chaudes du plasma est surtout fonction de la composition et de la température en ce point, à condition que les dimensions du plasma soient supérieures (ou de l'ordre de) 1mm environ. Nos résultats ont mis en évidence la forte influence du cuivre sur l'émissivité du plasma à faible température, qui s'explique par l'augmentation du degré d'ionisation du plasma en présence de cuivre, due au faible potentiel d'ionisation du métal. Les variations du coefficient d'émission nette en fonction de la température et de l'épaisseur du plasma obéissent aux tendances générales déjà observées dans la littérature pour d'autres gaz ou mélanges de gaz, avec une petite particularité : l'émissivité globale de l'hydrogène a tendance à diminuer à haute température car il n'y a pas de raies ioniques.
- Le calcul des coefficients moyens d'absorption. Cette méthode suppose que le plasma se comporte comme un corps gris par intervalles spectraux, c'est à dire qu'à l'intérieur d'un intervalle spectral, le coefficient d'absorption ne dépend pas de la fréquence (ou longueur d'onde) et est donc constant (pour des valeurs fixes de la température et des proportions du mélange de gaz). Dans certaines gammes spectrales, cette hypothèse est fautive car les raies

ont une contribution importante, et peut conduire à des erreurs graves. Pour remédier à cet inconvénient, il faut tenir compte d'une certaine réabsorption des raies de résonance, ce qui a été réalisé en considérant une absorption dans un milieu homogène et isotherme. Dans ces conditions, les variations des coefficients d'absorption moyens se déduisent assez facilement des calculs développés pour le coefficient d'émission nette et conduisent à des résultats intéressants car ils sont facilement exploitables dans des codes de calcul de mécanique des fluides appliqués aux plasmas thermiques pour calculer à la fois des pertes locales d'énergie radiative et le transfert radiatif. Les résultats montrent les rôles respectifs des tranches spectrales dans le rayonnement total du plasma : dans l'UV très lointain, le plasma est très émissif mais aussi très absorbant ; la présence de cuivre a tendance à augmenter l'émissivité sans modifier l'absorption dans les régions tièdes ou froides.

Les travaux relatifs aux calculs des coefficients de transport ont nécessité une étude minutieuse de toutes les interactions élastiques binaires entre toutes les espèces présentes dans le plasma. Un grand nombre d'interactions qui nous intéressent a déjà été étudié dans la littérature mais nous les avons quasiment toutes réexaminées pour établir le meilleur choix et tester les extrapolations qui peuvent s'avérer incorrectes. Avant de donner des résultats originaux relatifs au mélange ternaire Ar/H₂/cu, nous avons calculé les coefficients de transport dans les gaz purs et dans les mélanges binaires pour effectuer des comparaisons avec la littérature et ainsi valider nos travaux dans ce domaine. Nos résultats sur le mélange ternaire ont mis en évidence l'influence du cuivre sur la conductivité électrique à basse température (à cause également du faible potentiel d'ionisation du métal), l'influence de l'hydrogène sur la viscosité et enfin, le rôle des phénomènes de dissociation moléculaire et d'ionisation dans la conductivité thermique de réaction.

Enfin, l'étude expérimentale qui ne représente qu'une partie minoritaire de mon travail de thèse a permis de mettre en place quelques méthodes de diagnostics par spectroscopie d'émission qui ont fourni des indications sur le fonctionnement global de la torche de projection que nous avons mise au point : faible rôle du débit sur la pénétration d'air dans le jet de plasma ; influence assez inattendue de l'injection de poudres métalliques sur la puissance électrique dissipée dans l'arc. Notre étude a également montré que le caractère très fluctuant de l'écoulement du jet de plasma et de l'injection de poudres rend certaines mesures moyennées dans le temps inopérantes. Une conclusion importante de cette étude expérimentale est d'indiquer qu'à l'avenir, il faudra développer sur ce type de plasma des mesures quasi-instantanées suivies de traitement de signaux permettant d'extraire des valeurs locales et de décrire les évolutions des caractéristiques du jet.

La banque de données que nous avons établie va maintenant pouvoir être utilisée dans des codes de simulation de torche de projection dans des mélanges Ar/H₂, en présence ou en l'absence de cuivre. Quatre grandes questions restent cependant à se poser ; la validité de l'hypothèse d'Equilibre Thermodynamique Local, la validité des données que nous avons calculées dans le cadre de cette hypothèse ; comment prendre en compte la répartition non uniforme de vapeur de cuivre dans le plasma ? comment traiter la présence d'air qui perturbe les propriétés du plasma ?

- Ecart à l'équilibre. Si ces écarts sont faibles, la banque de donnée reste valide. Si les écarts à l'équilibre sont importants et restent dans le cadre d'un plasma quasi-thermique, il faut considérer deux aspects : d'une part les écarts ne sont importants que si la densité

électronique est faible et dans ces conditions le rayonnement n'a qu'un rôle très faible dans le transfert d'énergie, d'autre part, en présence d'un déséquilibre thermique, la composition du plasma et les coefficients de transport doivent être calculés dans le cadre d'un plasma à deux températures et nos résultats ne sont plus valables.

- Validité de notre banque de données. Deux types de validation peuvent être effectuées : validation par rapport à d'autres valeurs calculées de la littérature ; validation par rapport à l'expérience. La première a été réalisée dans ce travail. La deuxième est très délicate car elle ne peut être faite qu'indirectement à travers des mesures et des calculs de profils de température. Ce type de travail n'a été effectué dans la littérature que pour quelques gaz.
- Répartition de cuivre. Pour calculer cette répartition dans un code numérique, il faut résoudre l'équation de conservation de la vapeur de cuivre dans le plasma qui dépend de trois phénomènes : l'évaporation (ou vaporisation) de cuivre autour de la particule injectée dans le plasma, la convection et la diffusion. Pour traiter ce dernier point, il faut disposer des coefficients de diffusion globaux de la vapeur de cuivre dans le plasma. Pour calculer ces grandeurs, on peut utiliser la théorie des coefficients combinés de diffusion, proposée par Murphy [Mu-3]. Ces coefficients combinés sont des combinaisons de coefficients binaires qui sont des intermédiaires de calcul dans nos méthodes, nous n'avons pas calculé dans ce travail ces coefficients combinés mais nous disposons des bases pour les obtenir, ce qui sera fait à l'avenir.
- Pénétration de l'air. En général, l'air ne pénètre pas ou peu dans les régions les plus chaudes et donc n'influence que très modérément l'émission de rayonnement. En revanche, il peut jouer sur l'absorption du rayonnement et sur la conductivité thermique à des températures inférieures à 8000K. Pour en tenir compte, nous pouvons utiliser la loi de mélange de Wilke pour la conductivité thermique et les valeurs des coefficients moyens d'absorption calculées par Naghizadeh [Na-1] pour le transfert radiatif.

REFERENCES

- [Ab-1] Abdelhakim H., Dinguirard J.P., Vacquie S.
J. Phys. D : Appl. Phys., **13**, 1427, (1980)
- [Am-1] Amdur I., Mason E.A.
J. Chem. Phys., **22**, 670, (1954)
- [Au-1] Aubreton J., Fauchais P.
Rev. Phys. Appl. , **18**, 51, (1983)
- [Au-2] Aubreton J.
« Etude des propriétés thermodynamiques et de transport dans des plasmas thermiques à l'équilibre et hors d'équilibre thermodynamique : applications aux plasmas de mélange Ar-H₂ et Ar-O₂ », Thèse de l'Université de Limoges, (1985).
- [Az-1] Aziz R.A., Chen. H.H.
J. Chem. Phys., **67**, 12, 5719, (1977)
- [Ba-1] Bacri J., Raffanel S.
Plasma. Chem. and Plasma. Proc., **7**, 53, (1987)
- [Ba-2] Bassi D., Dondi M.G., Tomasini F., Torello F.
Phys. Rev. A, **13**, 2, 584, (1976)
- [Ba-3] Bates D.R., Boyd A.H.
Proc. Phys. Soc., London, **80**, 130, (1962)
- [Ba-4] Bauchire J.M, Gonzalez J.J, Proulx P.
J. Phys. D: Appl. Phys., **32**, 675, (1999)
- [Ba-5] Bayard S.
« Contribution au calcul des fonctions de partition des plasmas Azote-Silicium-Aluminium et détermination des températures à partir du fond continu de l'azote », Thèse de l'Université de Limoges, (1974)
- [Be-1] Bell K.L., Scott N.S., Lennon M.A.
J. Phys. B : At. Mol. Phys., **17**, 4757, (1984)
- [Be-2] Belov V.A.
Teplofiz Vys Temp, **5**, 37, (1967)
- [Be-3] Beydon R.
« Adhérence et contraintes thermomécaniques d'élaboration de revêtements métalliques projetés par plasma sur composites à matrice thermodurcissable », Thèse de l'école des Mines d'Albi-Carmaux, (2000)
- [Bi-1] Biberman L.M., Norman G.E.
Opt. Spect., **8**, 230, (1960)
- [Bi-2] Biberman L.M., Norman G.E., Ulyanov K.N.
Opt. Spect., **10**, 5, 297, (1961)

- [Bo-1] Boulos M.I, Fauchais P., Pfender E.
«Thermal Plasmas », Fundamentals and applications, **1**, Plenum, Press New York, (1994)
- [Br-1] Brokaw R.S.
Phys. Fluids, **4**, 8, 944, (1961)
- [Br-2] Brual G., Rothstein S.M.
Chem. Phys. Letter, **61**, 167, (1979)
- [Bu-1] Bu W.H., Fang M.T.C., Guo Z.Y.
J. Phys. D: Appl. Phys., **23**, 175, (1990)
- [Bu-2] Butler J.N., Brokaw R.S.
J. Chem. Phys., **26**, 1636, (1957)
- [Ca-1] Cabannes F. and Chapelle J.
« Spectroscopic plasma diagnostic in reaction under plasma conditions », **1**, Chap. 7, Wiley Interscience, New-York, Ed Venugopalan (1971).
- [Ca-2] Capitelli M., Devoto R.S.
Phys. Fluids, **16**, 1835, (1973)
- [Ca-3] Capitelli M., Gorse C., Fauchais P.
J. Chem. Phys., **7**, 755, (1976)
- [Ch-1] Chapman S., Cowling T.G.
« The Mathematical theory of non uniform gases », Cambridge University Press, (1958)
- [Ch-2] Chase J.M.W, Davies C.A, Downey J.R.Jr, Frurip D.J, McDonald R.A, Syverud A.N
« Janaf thermodynamic tables third edition», Journal of Physical and Chemical Reference Data, U.S. National Bureau of Standards, **14**, (1985)
- [Ch-3] Chervy B.
« Calcul des propriétés de transport et étude du pouvoir de coupure des mélanges hexafluorures de soufre (SF₆) - fluorure de carbone (CF₄ ou C₂F₆) et SF₆-vapeur de cuivre », Thèse de l'Université Paul Sabatier de Toulouse, n°1997, (1995)
- [Ch-4] Chervy B., Gleizes A., Razafinimanana M.
J. Phys. D. : Appl. Phys., **27**, 1193, (1994)
- [Ch-5] Chervy B., Dupont O., Gleizes A., Krenek P.
J. Phys. D. : Appl. Phys., **28**, 2060, (1995)
- [Co-1] Cohen R.S., Spitzer L., Routly P.Mc.R.
Phys. Rev., **80**, 230, (1950)
- [Co-2] Colgate S.O., Jordan J.E., Mason E.A.
J. Chem. Phys., **51**, 3, 968, (1969)
- [Co-3] Cook G.R. and Metzger P.H.
J. Opt. Soc. Am., **54**, 8, 968 (1964)

- [Co-4] Coudert J.F, Planche M.P, Fauchais P.
Plasma Chem. and Plasma Proc., **16**, 1, 211, (1996)
- [Da-1] Dalgarno A.
Phil. Trans. Ray. Soc. London A, **250**, 426, (1958)
- [De-1] Demura A., Lisitsa V. S., Sholin G. V.
12^{ème} ICPIG, 37, Eindhoven (Hollande), Août (1975)
- [De-3] De Vos J. C.
Physica, **20**, 690, (1954)
- [De-3] Devoto R.S.
Phys. Fluids, **9**, 6, 1230, (1966)
- [De-4] Devoto R.S.
Phys. Fluids, **10**, X, 354, (1967)
- [De-5] Devoto R.S.
Phys. Fluids, **10**, 10, 2105, (1967)
- [De-6] Devoto R.S.
Phys. Fluids, **16**, 5, 616, (1973)
- [Dr-1] Drawin H.W. and Emard F.
Beitr Plasma Physik, **13**, 143, (1973)
- [Dr-2] Drawin H.W., Felenbock P.
« Data for plasma in local thermodynamic equilibrium », Gauthier Villars, Paris, 230 (1965)
- [Dr-3] Drellishak R.R.
« Partition functions and thermodynamic properties of high temperature gases », Ph.D., North Western Univ., Illinois.(1963)
- [Du-1] Dunker A.M., Gordon R.G.
J. Chem. Phys., **68**, 2, 700, (1978)
- [Er-1] Erraki A.
« Etude du transfert radiatif dans les plasmas thermiques : Application au SF₆ et au mélange Argon-Fer », Thèse de l'Université Paul Sabatier de Toulouse, n°3447, (1999)
- [Er-2] Erwin D. A., Kunc J. A.
Phys. Fluid, **28**, 11, (1985)
- [Es-1] Essoltani A., Proulx P., Boulos M. I., Gleizes A.
Plasma Chem. and Plasma Proc., **14**, 3, 301, (1994)
- [Fa-1] Fauchais P., Vardelle A., Vardelle M., Grimaud A.
Ann. Phys. Fr., **14**, 261, (1989)

- [Fr-1] Frost L.S., Phelps A.V.
Phys. Rev., **136**, 6A, 1538, (1964)
- [Ga-1] Gadaud R.
« Contribution à l'étude de l'influence des vapeurs métalliques sur le plasma d'un arc électrique brûlant dans l'argon », Thèse de l'Université Paul Sabatier de Toulouse, (1983)
- [Ge-1] Gengenback R., Hahn C., Toennies J.P.
J. Chem. Phys., **62**, 9, 3620, (1975)
- [Go-1] Godin D.
« Calcul de compositions chimiques de plasmas à l'Equilibre Thermodynamique: application à la modélisation de l'ablation dans les disjoncteurs », Mémoire de Maîtrise, Montréal, (1998)
- [Go-2] Gongassian M.
« Etude théorique du rayonnement émis par un plasma d'hexafluorure de soufre », Thèse de l'Université Paul Sabatier de Toulouse, n°67, (1986)
- [Go-3] Gorse C.
« Contribution au calcul des propriétés de transport des plasmas des mélanges argon-hydrogène et argon-azote », Thèse de l'Université de Limoges, n° 75.10, (1975)
- [Gr-1] Grad H.
« On the kinetic theory of rarified gases », communication on pure and applied mathematics, **2**, 331, (1949)
- [Gr-2] Grant I.P
M.N.R.A.S., **118**, 241, (1958)
- [Gr-3] Griem H.R.
« Theory of breakdown wave propagation », Phys. Rev., **128**, 3, 997, (1962)
- [Gr-4] Griem H.R.
Phys. Rev., **131**, 1170, 3, (1963)
- [Gr-5] Griem H.R.
« Plasma Spectroscopy », Mc Graw-Hill, New York, (1964)
- [Gr-6] Griem H.R.
« Spectral lines broadening by plasma », Academic Press, New York, London, (1974)
- [Gu-1] Gupta P., Khare S.P.
J. Chem. Phys., **68**, 5, 2193, (1978)
- [Ha-1] Hamamatsu Photonics KK, CCD Multichannel Detector Heads C7040, C7041, (1998)
- [Ha-2] Handbook of Chem. and Phys., 67th Edition (1986-1987), CRC Press, Inc., Weast R. C. : Editor in chief, Astle R. C. and Beyer W. H. : Associate Editors
- [Ha-3] Handbook of Mathematical Functions With Formulas Graph and Mathematical Tables, U.S Dep. Of Commerce, NBS, ApplMath Serie 55, Ed. M.Abramowitz and Stegun, (1968)

- [He-1] Herzberg G.
« Spectra of diatomic molecules », Van Nostrans Reinhold, Tome I, 2nd Edit., NY, (1950)
- [He-2] Held B.
« Physique des plasma froids », Edition Masson, (1994)
- [Hi-1] Hill
J.Q.S.R.T, **7**, 401, (1967)
- [Hi-2] Hirschfelder J.O., Curtis C.F. , Bird R.B.
Molecular theory of gases and liquids, Wiley, New York, (1964)
- [Ho-1] Hofsaess D.
J.Q.S.R.T, **19**, 339 (1978)
- [It-1] Itikawa Y.
At. Data and Nucl. Data Tables, **14**, 1, (1974)
- [It-2] Itikawa Y.
At. Data and Nucl. Data Tables, **21**, 69, (1978)
- [Ka-1] Karzas W.J. and Latter R.
Astrophys. J. Supp. Ser., **6**, 55, 167, (1961)
- [Ka-2] Karabourniotis D.
« Spectroscopie des décharges dans le mercure en régime alternatif », Thèse de l'Université Paul Sabatier de Toulouse, n°793, (1977)
- [Ke-1] Kepple P. and Griem H.R.
Phys. Rev., **173**, (1968)
- [Ki-1] Kihara T., Taylor M.H., Hirschfelder J.O.
Phys. Fluids, **3**, 5, 715, (1960)
- [Ko-1] Kolos W., Wolniewicz L.
J. Chem. Phys., **43**, 7, 2429, (1965)
- [Ko-2] Kolos W., Wolniewicz L.
J. Chem. Phys., **49**, 1, 404, (1968)
- [Ko-3] Kolos W., Wolniewicz L.
J. Chem. Phys. Letter, **24**, 457, (1974)
- [Ko-4] Kovitya P.
"Physical Propoerties Of High-Pressure Plasmas Of Hydrogen And Copper In Temperature Range 5000-60000K", IEEE Transaction On Plasma Science, Vol. PS-13, n°6, December 1985
- [Kr-1] Krenek P., Nenicka V.
« Calculation of Transport coefficients of gas mixture in the 4th approximation of Enskog-Chapman theory », Acta. Technica CASV, **29**, 420-433, (1984)

- [Kr-2] Krenek P.
Acta. Technica CASV, **37**, 399, (1992)
- [Ku-1] Kuntz P.J., Roach A.C.
J. Chem. Soc. Faraday., Trans II, **68**, 259, (1972)
- [Ku-2] Kurucz R.L. and Peytremann E.
<http://cfa-www.harvard.edu/amp/data/kur23/sekur.html>
- [La-1] Lagnoux O.
« Projection de poudres métalliques par plasma d'arc soufflé à l'air libre, étude de l'entraînement de l'air et de son influence sur l'oxydation des poudres en vol et des dépôts », Thèse de l'Université de Limoges, n°47-1999, (1999)
- [La-2] Larrabee R. E.
J. Opt. Soc. Am., **49**, 619, (1959)
- [Le-1] Le Roy R.J., Conley J.S., Grabenstetter J.E
J. Chem. Soc. Faraday Discuss, **62**, 169, (1977)
- [Li-1] Liani B.
« Calcul du coefficient d'émission nette dans les plasmas thermiques formés de mélanges de gaz et de vapeurs métalliques », Thèse de l'Université Paul Sabatier de Toulouse, n°1103, (1992)
- [Li-2] Libermann R.W., Lowke J.J.
J.Q.S.R.T, **16**, 253, (1976)
- [Li-3] Liboff R.I.
Phys. Fluids., **2**, 40, (1959)
- [Li-4] Liu B.
J. Chem. Phys., **58**, 5, 1925, (1973)
- [Lo-1] Lowke J.J
J.Q.S.R.T, **14**, 111, (1974)
- [Ma-1] Maecker H.
Ann. Phys. Lpz, **18**, 441, (1956)
- [Ma-2] Mason E.A.
J. Chem. Phys., **22**, 2, 169, (1954)
- [Ma-3] Mason E.A., Vanderslice J.T. , Yos J.M.
Phys. Fluids, **2**, 6, 688, (1959)
- [Ma-7] Mason E.A., Munn R.J., Smith F.J.
Phys. Fluids, **10**, 8, 1827, (1967)
- [Ma-8] Masure A., Goldbach C., Nollez G.
Z. Naturforsch, **34A**, 473, (1979)

- [Mb-1] Mc Bride B.J., Gordon S.
« Fortran IV program for calculation of thermodynamic Data », Nasa Tn .D. 4097 (1967)
- [Mc-1] Mc Daniel Earl W.
« Collision Phenomena In Ionized Gases », Chap.8, 413 (1964)
- [Mc-2] Mcnesky J.R. and Okabe M.
J. Chem. Phys., **3**, 157 (1964)
- [Me-1] Mexmain J.
« Coefficients de transport dans un plasma à deux températures, application au mélange Argon-Oxygène », Thèse de l'Université de Limoges, (1983)
- [Mi-1] Michels H.H., Hobbs R.H., Wright L.A.
J. Chem. Phys., **69**, 11, 5151, (1978)
- [Mo-1] Modest M. F.
« Radiative Heat Transfert », Mc Graw-Hill, Mechanical Engineering Series, (1993)
- [Mo-2] Monchick L.
Phys. Fluids, **2**, 6, 695, (1959)
- [Mo-3] Monchick L., Mason E.A.
J. Chem. Phys., **35**, 5, 1676, (1961)
- [Mo-4] Moore C.E.
« Atomic Energy Levels », Nbs Circ N°467, Washington, Vol.1, (1949)
- [Mo-5] Moseley J.T., Saxon R.P., Huber B.A., Cosby P.C., Abouaf R., Tadjeddine M.
J. Chem. Phys., **67**, 4, 1659, (1977)
- [Mo-6] Mostaghimi-Tehrani J.
Thesis, University Of Minnesota (1982)
- [Mo-7] Mostaghimi-Tehrani J., Pfender E.
Plasma Chem. and Plasma Proc., **4**, 2, 129, (1984)
- [Ms-1] Msezane A.Z., Henry R.J.
Phys. Rev., **A33**, 1631, (1986)
- [Mu-1] Muckenfuss C., Curtiss C.F.
J. Chem. Phys., **29**, 6, 1273, (1958)
- [Mu-2] Muun R.J., Mason E.A., Smith F.J.
Phys. Fluids, **8**, 6, 1103, (1965)
- [Mu-3] Murphy A.B.
J. Chem. Phys., **99**, 2, 1340, (1993)

- [Na-1] Naghizadeh-Kashani Y.
« Calcul du transfert radiatif dans un plasma d'air », Thèse de l'Université Paul Sabatier de Toulouse, n°3488, (1999)
- [Ne-1] Neufeld P.D., Janzen A.R., Aziz R.A.
J.Chem. Phys., **57**, 3, 1100, (1972)
- [Ne-2] Neynaber R.H., Marino L.L., Rothe E.W., Trujillo S.M.
Phys. Rev., **124**, 1, 135 (1961)
- [Ni-1] <http://physics.nist.gov/PhysRefData/Elements/index.html>
- [Ny-1] Nyeland C., Mason E.A.,
Phys. Fluids., **10**, 985, (1967)
- [Ok-1] Okuda and al
I.E.E.E. Trans, PS-8, 395, (1980)
- [Ou-1] Ouajji H.
« Etude des propriétés de transport d'un plasma de mélange Air-Cuivre : modélisation de la colonne d'arc », Thèse de l'Université de Clermont Ferrand 2, (1986)
- [Pa-1] Pateyron B., Elchinger M.F., Delluc G., Fauchais P.
Plasma Chem. and Plasma Proc., **12**, 4, 421, (1992)
- [Pe-1] Peek J.M.
J. Chem. Phys., **43**, 9, 3004, (1965)
- [Pl-1] « Les plasmas dans l'industrie », ouvrage réalisé par une équipe d'ingénieur, de professeurs et de chercheurs animée par Gilles Laroche sous la direction de Maurice Orfeuill, Electricité de France, Edition Electra Dopee 85, (1991)
- [Pr-1] Preuss E.
Z. Physik., **239**, 133, (1970)
- [Ra-1] Rahmani B.
« Calcul de l'émission nette du rayonnement des arcs dans l'hexafluorure de soufre (SF₆) et dans les mélanges d'hexafluorure de soufre-Azote », Thèse de l'Université Paul Sabatier de Toulouse, n°994, (1989)
- [Ra-2] Raynal G.
« Calcul du transfert radiatif dans les plasmas thermiques - Applications aux arcs dans les mélanges d'hexafluorure de soufre-Cuivre », Thèse de l'Université Paul Sabatier de Toulouse, n°1903, (1994)
- [Re-1] Ree F.H., Bender L.F.
J. Chem. Phys., **73**, 9, 4712, (1980)
- [Ri-1] Riad H.
« Calcul du transfert radiatif dans des arcs et des plasmas thermiques : Application à l'hydrogène et au méthane », Thèse de l'Université Paul Sabatier de Toulouse, n°2465, (1986)

- [Ro-1] Rosen B.
« Selected constants : spectroscopic data relative to diatomic molecules », Pergamon Press,
New York, (1970)
- [Ru-1] Rulis A.M., Smith K.M., Scoles G.
Can. J. Phys., **56**, 753, (1978)
- [Sa-1] Sahal-Brechot S.
Astron. & Astrophys., **2**, 3, 322, (1969)
- [Sa-2] Sahal-Brechot S. and Van Regemorter H.
Annales d'astrophysique, **27**, 432, (1964)
- [Sa-3] Sahal-Brechot S. and Van Regemorter H.
Annales d'astrophysique, **27**, 739, (1964)
- [Sa-4] Sakuta T., Takashima T.
« Multi-mixing effects of nozzle and electrode materials on transport and thermodynamic
properties of SF₆ under current interrupting condition », Xth Int. Conf. Gas. Disch. Applic.
Swansea, Ed. W. T. Williams, **1**, 110, (1992)
- [Sa-5] Salzer H.E., Zucker R.
Bull. Amer. Math. Soc., **55**, 1004, (1949)
- [Sa-6] Samoïlov E.V., Tsitelauri N.N.
High. Temp., **7**, 155, (1969)
- [Sa-7] Sanon A.
« Contribution au calcul des propriétés thermodynamiques et des coefficients de transport de
plasmas thermiques du mélange Ar-H », Thèse de l'Université de Limoges, (1988)
- [Sc-1] Scheibner K.F., Hazi A.V., Schultz E., Gilde
J. Phys. D. : Appl.Phys, **13**, 793 (1980)
- [Sc-2] Scheibner K.F., Hazi A.V., Henry R.J.
XV ICPEAC, Brighton ed J Geddes et al (Amsterdam), (1987)
- [Se-1] Seaton and Burgess
Rev. Modern. Phys., **30**, 992, (1958)
- [Se-2] Seidel J.
Z. Naturforsch, **37A**, 1195-1206 et 1207-1214, (1977)
- [Sh-1] Shayler P.J., Fang M.T.C.
J. Phys. D : Appl. Phys., **10**, 1659, (1977)
- [Si-1] Sidis V.
J. Phys. B, **5**, 5, 7, (1972)
- [Si-1] Sidis V.
J. Phys. B, **5**, 5, 7, (1972)

- [Si-2] Singh N., Razafinimanana M., J. Hlina
J. Phys. D: Appl. Phys., **33**, 270, (2000)
- [Si-3] Singh N., Razafinimanana M., J. Hlina
J. Phys. D: Appl. Phys., **33**, 275, (2000)
- [Sm-2] Smith F.J., Mason E.A., Munn R.J.
Phys. Fluids, **8**, 1907, (1965)
- [Sm-3] Smith E. W., Vidal C. R., Cooper J.
J. Res. Nat'l. Bur. Std., **73A**, 389, (1969)
- [Sm-4] Smith E. W., Vidal C. R., Cooper J.
Acta Physica Polonica, **A63**, 67, (1983)
- [Sp-1] Spenser F.E., A.V. Phelps A.V.
In. Proc. XVth Symp. Eng, Asp of MHD, Univ Pensylvania, Philadelphia, Los Angeles,
IX.9.1.12, (1976)
- [Sp-2] Spitzer L., Harm R.
Phys. Rev., **89**, 977, (1953)
- [St-1] Stewart J.C. and Rotenberg M.
Phys. Rev., **140**, 1508, (1965)
- [St-2] Stupochenko E.V, Stakhanov I.P., Samuilov E.V., Pleshanov
« Thermodynamic properties of air between 1000K and 1200K and 0.001 and 1000
atmospheres, in physical gas dynamics », Ed. By A.S. Predvoditelev, Pergamon Press, (1961)
- [Ta-1] Tan C.W.
« Thermodynamic and transport properties of non equilibrium partially ionized monoatomic
gases », Ph.D. Thesis, University of Illinois, n°64-6163, (1963)
- [Tr-1] Trajmar S., Williams W., Srivastava S.K.
J. Phys. B : At. Mol. Phys., **10**, 16, 3323, (1977)
- [Tr-2] Traving G.
« Plasma diagnostics », Ch.II, Locjte-Holtgreven, Edition (1968)
- [Va-1] Vacquié S.
« L'arc électrique », Editions Eyrolles et CNRS éditions, (2000)
- [Va-2] Vanderslice J.T., Weissman S., Mason E.A., Fallon R.J.
J. Phys. Fluids, **5**, 2, 155, (1962)
- [Vi-1] Vidal C. R. and al
Z. Naturfosch, **19A**, 947 (1964)
- [Vi-2] Vidal C. R. , Cooper J., Smith W.
J.Q.S.R.T., **10**, 1011, (1970)

[Vi-3] Vidal C .R. , Cooper J., Smith W.
Idid., **11**, 263, (1971)

[Vi-4] Vidal C. R. and al
A.J.S.S., **25**, 214, 37 (1973)

[Vo-1] Voslamber D.
Z. Naturfosch, **24A**, 1458 (1969)

[We-1] <http://espsun.space.swri.edu/spacephysics/resrc/www.atomic.htm>

[Wi-1] Wiese W. L.
« Plasma diagnostic techniques », Ed R.H. Huddleston et S.L. Leonard, New York, (1966)

[Yo-1] Yos J.M.
Rad-T.M-63-7, AVCO/RAD, Wilington M.A, (1963)

ANNEXES

ANNEXE A1
Autres grandeurs du rayonnement

- **L'émittance**

Considérons un flux d'énergie radiative émis par une surface dS dans toutes les directions (émission hémisphérique). Ce flux est donc proportionnel à cet élément de surface dont le coefficient de proportionnalité est noté M et appelé l'émittance telle que :

$$dQ = M dS \quad (A1-1)$$

Portant également le nom de flux surfacique émis, cette grandeur dépend de la température T , de la nature physico-chimique et géométrique de la surface et s'exprime en W/m^2 .

Pour un rayonnement centré sur $[\lambda, \lambda + d\lambda]$, nous définissons une émittance spectrale M_λ dépendant de la température T , de la nature physico-chimique et géométrique de la surface et de la longueur d'onde λ telle que :

$$d^2Q_\lambda = M_\lambda dS d\lambda \quad (A1-2)$$

Cette grandeur s'exprime en W/m^3 . Or l'expression (A1-2) représente le flux émis par une surface élémentaire dS dans un angle solide $d\Omega$ entourant une direction O_x d'où par analogie avec la relation (A1-2), nous pouvons écrire :

$$\begin{cases} M(\vec{r}) = \int_{\Omega=2\pi} L(\vec{r}, d\vec{\Omega}) \cos \theta d\Omega \\ d\Omega = 2\pi \sin \theta d\theta \end{cases} \quad (A1-3)$$

Si l'on considère une émission lambertienne (indépendante de θ), nous avons alors :

$$M(\vec{r}) = \pi L(\vec{r}) \quad (A1-4)$$

- **L'éclairement**

Nous trouvons également dans la littérature des grandeurs relatives à la réception du rayonnement par la surface. Nous savons que la luminance s'applique au rayonnement émis ou reçu par une surface. Pour un rayonnement incident, l'émittance est remplacée par le terme d'éclairement de la surface réceptrice. L'éclairement est donc l'équivalent d'un flux arrivant, c'est à dire un flux reçu par l'unité de surface réceptrice dS venant de toutes les directions possibles. Nous avons alors en (W/m^2) :

$$E = \frac{dQ}{dS} \quad (A1-5)$$

Comme pour l'émittance, l'éclairement du récepteur peut être relié à la luminance de l'émetteur. Considérons deux surfaces élémentaires dS_1 (réceptrice) et dS_2 (émettrice) dont les normales respectives \vec{n}_1 et \vec{n}_2 sont inclinées d'un angle θ_1 et θ_2 par rapport à l'axe xx' . La surface élémentaire dS_2 va émettre un rayonnement dans un angle solide $d\Omega_2$ en direction de la surface réceptrice dS_1 telle que le flux émis par dS_2 s'écrive suivant la relation (I-1) soit:

$$d^2Q_2 = L_2 dS_2 \cos \theta_2 d\Omega_2 \quad (A1-6)$$

En supposant d la distance entre les 2 surfaces, seule une petite fraction du rayonnement va arriver sur dS_1 qui se caractérise par l'angle solide $d\Omega_2$ qui peut s'écrire sous la forme:

$$d\Omega_2 = \frac{dS_1 \cos \theta_1}{d^2} \quad \text{soit} \quad d^2Q_2 = \frac{L_2 \cos \theta_1 \cos \theta_2 dS_1 dS_2}{d^2} \quad (A1-7)$$

D'après la relation (Z), l'éclairement de la surface dS_1 se met donc sous la forme :

$$E = \frac{d^2Q_2}{dS_1} = \frac{L_2 \cos \theta_1 \cos \theta_2 dS_2}{d^2} \quad (A1-8)$$

Une telle grandeur permet donc de déterminer les paramètres distance et angle d'inclinaison pour obtenir un éclairement maximum.

- **L'Intensité**

L'intensité lumineuse $I(\vec{r}, d\vec{\Omega})$ au point $M(\vec{r})$ dans la direction $d\vec{\Omega}$ est la puissance émise ou reçue par l'élément de surface dS par unité d'angle solide $d\Omega$ et s'exprime en (W/ster).

$$I(\vec{r}, d\vec{\Omega}) = \frac{d^2Q}{d\Omega} = L(\vec{r}, d\vec{\Omega}) dS \cos \theta = L(\vec{r}, d\vec{\Omega}) (\vec{n} \cdot \vec{u}) dS \quad (A1-9)$$

Nous pouvons également définir l'intensité lumineuse spectrale I_v par la relation suivante:

$$I_v(\vec{r}, d\vec{\Omega}) = \frac{d^2Q_v}{d\Omega} = L_v(\vec{r}, d\vec{\Omega}) dS \cos \theta = L_v(\vec{r}, d\vec{\Omega}) (\vec{n} \cdot \vec{u}) dS \quad (A1-10)$$

D'après les expressions (A1-9) et (A1-10), nous pouvons donc relier l'intensité par unité de surface $(\vec{n} \cdot d\vec{S})$ à la luminance au point M pour la direction $d\vec{\Omega}$.

ANNEXE A2
Indice de réfraction

Le milieu n'étant pas dans le vide, les ondes se propagent dans celui-ci avec un indice n ne valant pas nécessairement l'unité. Ce dernier intervient donc dans la plupart des équations de conservation et notamment celle du transfert radiatif :

$$\frac{d}{d\tau_v} \left(\frac{L_v}{n_r^2} \right) = \frac{L_v}{n_r^2} - S_v \quad (A2-1)$$

où n_r représente l'indice de réfraction du rayonnement pour une direction donnée [Be-2].

En réalité, si l'on ne tient pas compte de la géométrie du problème, l'indice total du plasma s'écrit sous forme complexe dont la partie réelle représente l'indice de réfraction et la partie imaginaire l'indice d'extinction. En considérant la fréquence des collisions électrons-ions, l'indice se met sous la forme :

$$n^2 = 1 - \frac{1}{\left(\frac{\nu}{\nu_p} \right)^2 + \left(\frac{\nu_{ei}}{\nu_p} \right)^2} + j \frac{\nu_{ei}}{\nu} \frac{1}{\left(\frac{\nu}{\nu_p} \right)^2 + \left(\frac{\nu_{ei}}{\nu_p} \right)^2} \quad (A2-2)$$

où ν_{ei} est la fréquence de collision électron-ion, ν la fréquence d'onde étudiée et ν_p la fréquence plasma définie par $\nu_p = \frac{\omega_p}{2\pi} = \left(\frac{N_e e^2}{4\pi^2 \epsilon_0 m_e} \right)^{1/2}$.

Les travaux antérieurs sur les plasmas thermiques montrent que la partie la plus énergétique du rayonnement se situe dans le visible et l'ultraviolet. Par conséquent, pour une fréquence donnée et une densité électronique suffisamment élevée, nous pouvons écrire $\omega_{ei} \gg \omega_p$ [Ca-1] et $\omega_p \gg \omega$. De plus, dans notre hypothèse géométrique, c'est à dire pour un milieu homogène sans champ magnétique, nous considérons uniquement l'indice de réfraction, dépendant de la fréquence du plasma. En définitive, selon les hypothèses décrites précédemment, nous pouvons supposer l'indice de réfraction voisin de l'unité.

ANNEXE A3
Equation du transfert radiatif

Soit un volume élémentaire dV défini sur la **figure I-3**, limité en s et $s+ds$ par les surfaces $dS(s)$ et $dS(s+ds)$ normales à la trajectoire.

Lorsque nous supposons la diffusion du rayonnement négligeable, l'indice de réfraction uniforme et valant l'unité (trajectoire rectiligne), le milieu à l'état stationnaire, la loi d'évolution du flux incident dans un angle solide élémentaire $d\Omega$ de direction \vec{u} s'écrit :

$$d^6\phi_v^{\text{net}} = d^6\phi_v^{\text{émis}} - d^6\phi_v^{\text{absorbé}} \quad \text{avec} \quad \begin{cases} d^6\phi_v^{\text{émis}} = \epsilon_v(s)d\Omega dV dv \\ d^6\phi_v^{\text{absorbé}} = \kappa'_v(s)L_v(s)d\Omega dV dv \end{cases} \quad (A3-1)$$

où $d^6\phi_v^{\text{émis}}$ représente la puissance introduite par le plasma dans le pinceau lumineux et $d^6\phi_v^{\text{absorbé}}$ la puissance ôtée au pinceau lumineux par le plasma. Or à l'équilibre, la loi de Kirschhoff nous permet d'écrire $\epsilon_v(s) = \kappa'_v(s)L_v^o(T)$ soit :

$$d^6\phi_v^{\text{net}} = \kappa'_v(s)L_v^o(s)d\Omega dV dv - \kappa'_v(s)L_v(s)d\Omega dV dv \quad (A3-2)$$

Ce flux net peut également s'écrire comme la différence entre la puissance émergente et la puissance incidente, soit :

$$\begin{aligned} d^6\phi_v^{\text{net}} &= d^5\phi_v(s+ds) - d^5\phi_v(s) \\ d^5\phi_v(s+ds) &= dS(s+ds)d\Omega(s+ds)L_v(s+ds)dv \end{aligned} \quad (A3-3)$$

En utilisant la loi de Clausius permettant d'écrire la conservation de l'étendue optique du faisceau lumineux par $dS(s+ds)d\Omega(s+ds) = dS(s)d\Omega(s)$, nous pouvons de nouveau écrire :

$$d^6\phi_v^{\text{net}} = [L_v(s+ds) - L_v(s)]dS(s)d\Omega(s) \quad \text{ou encore} \quad d^6\phi_v^{\text{net}} = \frac{dL_v(s)}{ds} dV d\Omega dv \quad (A3-4)$$

A partir de (A3-2) et (A3-4), nous obtenons finalement l'équation du transfert radiatif :

$$\frac{dL_v(s)}{ds} = \underbrace{\kappa'_v(s)L_v^o(T)}_{\epsilon_v} - \kappa'_v(s)L_v(T) \quad (A3-5)$$

ANNEXE A4
Méthode de Calcul de la composition à basses températures

Soit le système présenté au chapitre II dans le calcul de la composition à basses températures :

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{n_{H_2} + \frac{1}{2}n_H}{n_{Ar}} = \frac{p_2}{p_1} \quad (A4 - 1) \\ \frac{n_{Cu} + 2n_{Cu_2}}{n_{Ar}} = \frac{p_3}{p_1} \quad (A4 - 2) \\ \frac{n_H^2}{n_{H_2}} = F1 \Rightarrow n_H = \sqrt{F1 \cdot n_{H_2}} \quad (A4 - 3) \\ \frac{n_{Cu}^2}{n_{Cu_2}} = F2 \Rightarrow n_{Cu} = \sqrt{F2 \cdot n_{Cu_2}} \quad (A4 - 4) \\ \frac{P}{k_b T} = n_{Ar} + n_H + n_{H_2} + n_{Cu} + n_{Cu_2} \quad (A4 - 5) \end{array} \right. \left. \begin{array}{l} \text{lois de proportionnalité} \\ \text{lois de Guldberg - Waage} \\ \text{loi de Dalton} \end{array} \right.$$

- En introduisant les équations (A4-3) et (A4-4) de ce système dans l'équation (A4-5) relative à la loi de Dalton, la densité d'argon peut s'exprimer en fonction des densités moléculaires :

$$n_{Ar} = \frac{P}{k_b T} - \left(\sqrt{F1 \cdot n_{H_2}} + n_{H_2} + \sqrt{F2 \cdot n_{Cu_2}} + n_{Cu_2} \right) \quad (A4-6)$$

- De ce fait, en remplaçant les densités atomiques de l'hydrogène (A4-4), du cuivre (A4-5) et de l'argon (A4-6) dans les équations (A4-1) et (A4-2), nous obtenons les relations suivantes :

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{n_{H_2} + \frac{1}{2} \sqrt{F1 \cdot n_{H_2}}}{\frac{P}{k_b T} - \left(\sqrt{F1 \cdot n_{H_2}} + n_{H_2} + \sqrt{F2 \cdot n_{Cu_2}} + n_{Cu_2} \right)} = \frac{p_2}{p_1} \\ \frac{\sqrt{F2 \cdot n_{Cu_2}} + 2n_{Cu_2}}{\frac{P}{k_b T} - \left(\sqrt{F1 \cdot n_{H_2}} + n_{H_2} + \sqrt{F2 \cdot n_{Cu_2}} + n_{Cu_2} \right)} = \frac{p_3}{p_1} \end{array} \right.$$

Ces deux équations dont les inconnues ne sont plus que les densités moléculaires n_{H_2} et n_{Cu_2} forment alors un nouveau système que l'on peut écrire de la façon suivante:

$$\begin{cases} n_{H_2}(p_1 + p_2) + \sqrt{n_{H_2}} \left\{ \sqrt{F1} \left(\frac{p_1}{2} + p_2 \right) \right\} + n_{Cu_2}(p_2) + \sqrt{n_{Cu_2}} (p_2 \sqrt{F2}) - \frac{P}{k_b T} \cdot p_2 = 0 \\ n_{H_2}(p_3) + \sqrt{n_{H_2}} (p_3 \sqrt{F1}) + n_{Cu_2}(2p_1 + p_3) + \sqrt{n_{Cu_2}} \{ \sqrt{F2} (p_1 + p_3) \} - \frac{P}{k_b T} \cdot p_3 = 0 \end{cases} \quad (A4-7)$$

Ce type de système représenté mathématiquement sous le forme $\begin{cases} f(n_{H_2}, n_{Cu_2}) = 0 \\ g(n_{H_2}, n_{Cu_2}) = 0 \end{cases}$ se résout par la méthode de Newton-Raphson rappelée succinctement ici.

Soit un système du type : $\begin{cases} f(x, y) = 0 \\ g(x, y) = 0 \end{cases}$. En considérant que (x_0, y_0) est une solution la plus proche possible, nous posons :

$$\begin{cases} x = x_0 + \Delta x \\ y = y_0 + \Delta y \end{cases}$$

avec $\begin{cases} f(x, y) = f(x_0, y_0) + \Delta x * \left. \frac{\partial f(x, y)}{\partial x} \right|_{x_0, y_0} + \Delta y * \left. \frac{\partial f(x, y)}{\partial y} \right|_{x_0, y_0} \\ g(x, y) = g(x_0, y_0) + \Delta x * \left. \frac{\partial g(x, y)}{\partial x} \right|_{x_0, y_0} + \Delta y * \left. \frac{\partial g(x, y)}{\partial y} \right|_{x_0, y_0} \end{cases} \quad (A4-8)$

c'est un système linéaire par rapport à Δx et Δy que l'on résout suivant la méthode de Cramer :

$$\begin{cases} \Delta x = \frac{\begin{vmatrix} g(x_0, y_0) \frac{\partial f(x, y)}{\partial y} \Big|_{x_0, y_0} & - f(x_0, y_0) \frac{\partial g(x, y)}{\partial y} \Big|_{x_0, y_0} \\ \frac{\partial f(x, y)}{\partial x} \Big|_{x_0, y_0} & \frac{\partial g(x, y)}{\partial y} \Big|_{x_0, y_0} \end{vmatrix}}{\begin{vmatrix} \frac{\partial f(x, y)}{\partial x} \Big|_{x_0, y_0} & \frac{\partial g(x, y)}{\partial y} \Big|_{x_0, y_0} \\ - \frac{\partial g(x, y)}{\partial x} \Big|_{x_0, y_0} & \frac{\partial f(x, y)}{\partial y} \Big|_{x_0, y_0} \end{vmatrix}} \\ \Delta y = \frac{\begin{vmatrix} f(x_0, y_0) \frac{\partial g(x, y)}{\partial x} \Big|_{x_0, y_0} & - g(x_0, y_0) \frac{\partial f(x, y)}{\partial x} \Big|_{x_0, y_0} \\ \frac{\partial f(x, y)}{\partial x} \Big|_{x_0, y_0} & \frac{\partial g(x, y)}{\partial y} \Big|_{x_0, y_0} \end{vmatrix}}{\begin{vmatrix} \frac{\partial f(x, y)}{\partial x} \Big|_{x_0, y_0} & \frac{\partial g(x, y)}{\partial y} \Big|_{x_0, y_0} \\ - \frac{\partial g(x, y)}{\partial x} \Big|_{x_0, y_0} & \frac{\partial f(x, y)}{\partial y} \Big|_{x_0, y_0} \end{vmatrix}} \end{cases} \quad (A4-9)$$

on obtient ainsi : $\begin{cases} x_1 = x_0 + \Delta x \\ y_1 = y_0 + \Delta y \end{cases}$. On répète ensuite ce processus avec (x_1, y_1) ... jusqu'à

convergence.

$$\text{Dans notre cas, nous avons : } \begin{cases} \frac{\partial f(x, y)}{\partial x} = \frac{\sqrt{F1}}{2\sqrt{n_{H_2}}} \left(\frac{p_1}{2} + p_2 \right) + (p_1 + p_2) \\ \frac{\partial f(x, y)}{\partial y} = \frac{p_2 \sqrt{F2}}{2\sqrt{n_{Cu_2}}} + p_2 \\ \frac{\partial g(x, y)}{\partial x} = \frac{p_3 \sqrt{F1}}{2\sqrt{n_{H_2}}} + p_3 \\ \frac{\partial g(x, y)}{\partial y} = \frac{\sqrt{F2}}{2\sqrt{n_{Cu_2}}} (p_1 + p_3) + (2p_1 + p_3) \end{cases}$$

Le deux densités moléculaires n_{H_2} et n_{Cu_2} étant maintenant connues, nous pouvons en déduire les densités des espèces neutres n_{Ar} , n_H , et n_{Cu} grâce aux relations (A4-3), (A4-4) et (A4-5).

ANNEXE A5
Coefficients de lissage des fonctions de partition interne

Tableau A5-1 : Coefficients de lissage des fonctions de partition interne par espèce.

Espèce	API (eV)	Type de lissage	Coefficients du lissage (a_0 à a_{11})				Conditions (K)
Ar	0,1	1	1,03077764E+00 3,64467446E-15 1,03476070E-32	-8,07663452E-05 -3,48805089E-19 -7,27268375E-38	6,26986644E-08 1,92760515E-23 0,00000000E+00	-2,11859434E-11 -6,10576410E-28 0,00000000E+00	T < 9500K Q ^{int} = 1,0
Ar ⁺	0,1	1	3,74604450E+00 2,12394872E-15 7,88092878E-33	6,03529124E-04 -2,33639274E-19 -5,73068733E-38	-5,77087430E-08 1,36251116E-23 0,00000000E+00	-6,12899835E-12 -4,48821869E-28 0,00000000E+00	T < 500K Q ^{int} = 4,0
Ar ²⁺	0,1	1	4,37522686E+00 -4,67913350E-15 -1,04831966E-33	1,72386379E-03 2,43053734E-19 1,32028236E-39	-3,87071766E-07 -7,59287137E-28 0,00000000E+00	5,49740224E-11 1,32625147E-28 0,00000000E+00	T < 400K Q ^{int} = 5,0
Ar ³⁺	0,1	1	3,99461678E+00 7,75120226E-16 2,65709219E-33	9,00835451E-06 -8,67935686E-20 -1,86903385E-38	-1,01822727E-09 4,94769536E-24 0,00000000E+00	-2,16424676E-12 -1,57164131E-28 0,00000000E+00	T < 700K Q ^{int} = 4,0
Ar	0,25	1	1,00051044E+00 5,40692485E-17 -1,20453366E-34	-1,37650809E-06 -3,85971859E-21 1,34980517E-39	1,08123814E-09 9,42540448E-26 0,00000000E+00	-3,54074892E-13 2,11732678E-30 0,00000000E+00	T < 9500K Q ^{int} = 1,0
Ar ⁺	0,25	1	3,74593333E+00 2,10454436E-15 7,74859231E-33	6,03835208E-04 -2,31373386E-19 -5,62236512E-38	-5,79638602E-08 1,34681562E-23 0,00000000E+00	-6,03282583E-12 -4,42528038E-28 0,00000000E+00	T < 500K Q ^{int} = 4,0
H	0,1	2	7,22613401E-01 2,09751434E-05 0,00000000E+00	2,74877265E-01 0,00000000E+00 0,00000000E+00	-1,62487019E-02 0,00000000E+00 0,00000000E+00	-6,24983509E-05 0,00000000E+00 0,00000000E+00	T < 10500K Q ^{int} = 2,0
H ⁺	0,1	1	1,00000000E+00 0,00000000E+00 0,00000000E+00	0,00000000E+00 0,00000000E+00 0,00000000E+00	0,00000000E+00 0,00000000E+00 0,00000000E+00	0,00000000E+00 0,00000000E+00 0,00000000E+00	
H ⁻	0,1	1	1,00000000E+00 0,00000000E+00 0,00000000E+00	0,00000000E+00 0,00000000E+00 0,00000000E+00	0,00000000E+00 0,00000000E+00 0,00000000E+00	0,00000000E+00 0,00000000E+00 0,00000000E+00	
H ₂	0,1	1	6,84414399E-01 1,08390688E-13 2,69814223E-30	4,48185718E-03 -1,87959950E-17 -5,49627841E-35	8,81941334E-07 1,60500935E-21 6,39497304E-40	-7,57936664E-11 -8,26306819E-26 -3,25260271E-45	T ≤ 2000K Q ^{int} = 0,246 +5,580E-03*T +3,497E-07*T ²
H ₂ ⁺	0,1	1	-1,35961809E+01 -4,24890214E-12 -3,51309269E-29	1,19309519E-01 4,21464693E-16 6,66105721E-34	-5,62905797E-05 -2,73073097E-20 7,36682211E-39	2,49708403E-08 1,19495972E-24 3,61245107E-44	

Tableau A5-2 : Coefficients de lissage des fonctions de partition interne par espèce.

Espèce	API (eV)	Type de lissage	Coefficients du lissage (a_0 à a_{11})				Conditions (K)
H ₂ ⁻	0,1	1	1,05942431E+02 1,33536337E-12 -9,48142175E-30	-1,37635641E-01 -5,77033675E-17 2,68068087E-34	9,27353789E-05 -1,72585808E-22 -3,96596394E-39	-1,53010291E-08 1,66166774E-25 2,45058731E-44	T < 1200 Q ^{int} = 1,950E-01 +2,937E-02*T +5,460E-06*T ² +1,023E-08*T ³ -1,265E-12*T ⁴
H	0,25	2	1,48371642E+00 5,47676175E-06 0,00000000E+00	1,17480529E-01 0,00000000E+00 0,00000000E+00	-8,07464516E-03 0,00000000E+00 0,00000000E+00	9,19433685E-05 0,00000000E+00 0,00000000E+00	
Cu	0,1	2	2,39799956E+00 6,31015428E-04 0,00000000E+00	-4,10832351E-01 -8,41664316E-06 0,00000000E+00	1,25448179E-01 0,00000000E+00 0,00000000E+00	-1,21124178E-02 0,00000000E+00 0,00000000E+00	T < 2800K Q ^{int} = 2,0
Cu ⁺	0,1	2	9,99647965E-01 -2,78783789E-04 0,00000000E+00	2,32505416E-02 5,81639776E-06 0,00000000E+00	-2,19540279E-02 0,00000000E+00 0,00000000E+00	4,87474226E-03 0,00000000E+00 0,00000000E+00	T < 4500K Q ^{int} = 1,0
Cu ²⁺	0,1	1	5,75089556E+00 1,08847431E-14 2,29624558E-32	3,75133382E-04 -9,16056845E-19 -1,59850658E-37	2,05421529E-07 4,63079290E-23 0,00000000E+00	-7,28440386E-11 -1,39261182E-27 0,00000000E+00	T < 600K Q ^{int} = 6,0
Cu ³⁺	0,1	1	8,40949253E+00 3,14865156E-14 6,59504167E-32	8,32828892E-04 -2,65322645E-18 -4,57556667E-37	6,35800354E-07 1,33893727E-22 0,00000000E+00	-2,11040496E-10 -4,01383088E-27 0,00000000E+00	
Cu ₂	0,1	1	-2,09826024E+03 -3,06094898E-10 9,27947698E-27	8,79260612E+00 5,49392958E-16 -2,44532818E-31	1,53736680E-03 2,17348782E-18 3,51298280E-36	2,91484793E-06 -2,01024410E-22 -2,14250845E-41	T < 1200 Q ^{int} = 2,365E+02 +9,361E-01*T +9,345E-03*T ²
Cu ⁻	0,1	2	1,00000000E+00 0,00000000E+00 0,00000000E+00	0,00000000E+00 0,00000000E+00 0,00000000E+00	0,00000000E+00 0,00000000E+00 0,00000000E+00	0,00000000E+00 0,00000000E+00 0,00000000E+00	
Cu	0,25	1	1,97094120E+00 -6,98024311E-15 -1,39462583E-32	1,07577185E-04 6,12168336E-19 9,20683682E-38	-1,12914585E-07 -3,06850594E-23 0,00000000E+00	4,40865357E-11 8,88929737E-28 0,00000000E+00	T < 2800K Q ^{int} = 2,0
Cu ⁺	0,25	2	1,01273238E+00 -2,04310442E-04 0,00000000E+00	-3,18290423E-03 4,24445253E-06 0,00000000E+00	-1,25408307E-02 0,00000000E+00 0,00000000E+00	3,59654723E-03 0,00000000E+00 0,00000000E+00	T < 4500K Q ^{int} = 1,0

Tableau A5-3 : Type de lissage des Fonctions de Partition Internes

n^{\bullet}	Type du lissage $Q(T)$
1	$\sum_{n=0}^{11} a_n T^n$
2	$\sum_{n=0}^{11} a_n (T/1000)^n$
3	$\exp\left(\sum_{n=0}^{11} a_n T^n\right)$
4	$\exp\left(\sum_{n=0}^{11} a_n (T/1000)^n\right)$

ANNEXE A6

Etude des méthodes d'intégration pour le calcul de L

Nous présentons dans ce paragraphe les méthodes d'intégration étudiées pour le calcul du facteur de fuite dans le but de mettre en évidence les possibles erreurs que certaines d'entre elles peuvent engendrer. Nous avons donc testé et comparé la méthode d'intégration des trapèzes, de Simpson, de Gauss (polynôme de Legendre) et de l'Hermite [Ha-3] sur l'intégrale intervenant dans l'expression de l'épaisseur optique (III-31) et du facteur de fuite pour un profil de Voigt (III-43):

$$I(\alpha) = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\exp(-y^2)}{\alpha^2 + y^2} dy \quad (A6-1)$$

D'après la *figure A6-1* sur laquelle nous avons reporté les résultats de (A6-1) suivant le paramètre α , les deux méthodes les mieux adaptées pour calculer cette intégrale sont la méthode des trapèzes et celle de Simpson.

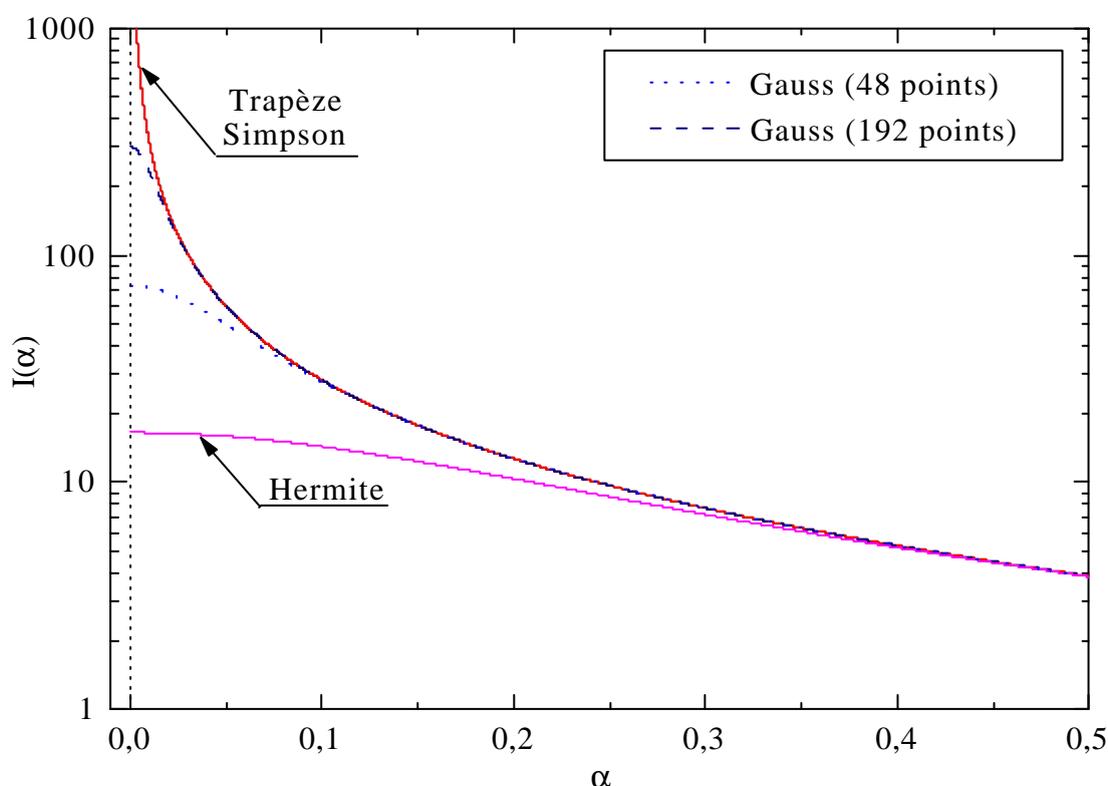


Fig. A6-1 : Intégrale $I(\alpha)$ pour différentes méthode d'intégration

Méthode de Gauss et méthode d'Hermite.

Les méthodes de Gauss et d'Hermite permettent de calculer (A6-1) suivant des coefficients ω_i relatifs aux zéros y_i des polynômes associés. Nous donnons dans le *tableau A6-1* les expressions des deux méthodes d'intégration :

Tableau A6-1 : Méthodes d'intégration et paramètres .

Méthodes	Relation	Paramètres
Gauss	$\int_{-1}^1 f(y)dy = \sum_{i=1}^n \omega_i f(y_i) + R_n \quad (A6-2)$	y_i les zéros des polynômes : Gauss \rightarrow Legendre $P_n(y)$ Hermite \rightarrow Hermite $H_n(y)$
Hermite	$\int_{-\infty}^{\infty} \exp(-y^2) \cdot f(y)dx = \sum_{i=1}^n \omega_i f(y_i) + R_n \quad (A6-3)$	ω_i les poids associés n le nombre de points

Les résultats dépendent par conséquent du nombre de points y_i considérés, la précision augmentant avec le nombre de points. A partir des tables de la littérature, la méthode de Gauss calcule (A6-1) sur le domaine $]-1 ; y_0] \cup [y_0 ; 1]$ pour un nombre de points variant de 4 à 192 tandis que la méthode d'Hermite le fait sur $]-\infty ; y_0] \cup [y_0 ; \infty]$ avec un maximum de 40 points. Le point y_0 représente le premier zéro du polynôme utilisé pour le calcul que nous donnons pour chacune des méthodes dans le *tableau A6-2*.

Tableau A6-2 : Premiers zéros et nombre de points pour chaque méthode.

Méthodes	Premier Zéro	Nombre de Points
Gauss	$y_0 = 0.01627$	192
Gauss	$y_0 = 0.06405$	48
Hermite	$y_0 = 0.24534$	40

Par conséquent, plus le premier zéro est proche de l'origine $y = 0$, plus le calcul de l'intégrale se rapproche des résultats obtenus par la méthode des trapèzes ou de Simpson, comme nous le montre la **figure A6-1** où la méthode de Gauss à 192 points donne de meilleurs résultats, le point y_0 étant celui se rapprochant le plus de l'origine. Cependant, nous remarquons une grande différence pour des α faibles contrairement aux α supérieurs à 0.4 où l'accord est excellent quelle que soit la méthode. Pour expliquer ce phénomène et le choix de la méthode des trapèzes, analysons l'allure générale de la fonction $f(y)$. La valeur sur l'axe ($y=0$) variant énormément pour ces α ($1.E+08$ pour $\alpha=1.E-04$ à 100 pour $\alpha=0.1$), la **figure A6-2** ne donne qu'une allure générale et schématisée de cette fonction sans tenir compte des ordres de grandeurs.

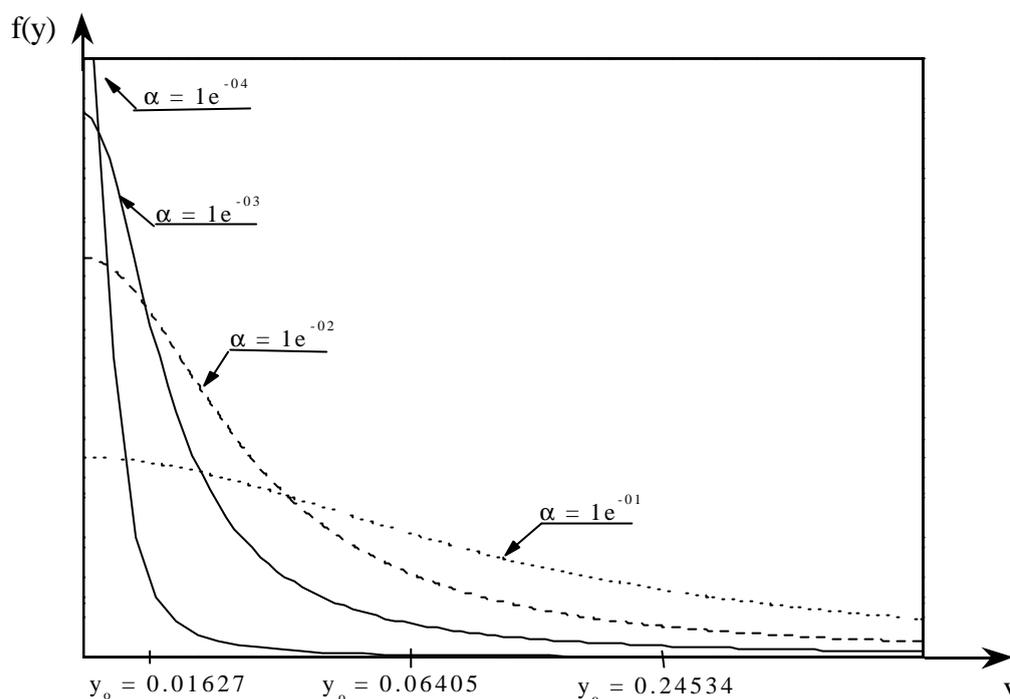


Figure A6-2 : Allure de $f(y)$ pour différentes valeurs de α

Nous rappelons au lecteur que la **figure A6-2** ne reflète pas le calcul exact de (A6-1) mais simplement une allure d'où l'absence d'abscisses et d'origines graduées, les premiers zéros des polynômes y_0 étant indiqués dans le but de mieux comprendre la discussion sur les possibles erreurs de calcul. Nous remarquons une décroissance plus ou moins rapide suivant les valeurs prises par α , ce comportement ayant des conséquences importantes sur le calcul de l'intégrale (A6-1). En effet, la diminution du paramètre α entraîne non seulement une forte augmentation des valeurs prises par la fonction à l'origine ($y=0$), ainsi qu'une décroissance de plus en plus rapide. Par conséquent, l'intégrale augmente, l'aire calculée devenant de plus en plus grande à cause des grandes valeurs de la fonction pour des y avoisinant l'origine. Or les deux méthodes commençant le calcul au premier zéro y_0 , celles-ci ne tiennent pas compte de ces valeurs pour des $y < y_0$, l'intégration sur $[0 ; y_0]$ représentant pourtant la quasi totalité de la valeur finale de (A6-1). Il en résulte une erreur non négligeable sur le résultat final que nous retrouvons sur la **figure A6-1** où sont comparées toutes les méthodes. Pour des α nettement plus élevés, nous remarquons par contre une décroissance beaucoup plus lente de la fonction $f(y)$, celle-ci n'atteignant pas de valeurs conséquentes pour des valeurs y proches de l'origine. La valeur de la fonction au premier zéro du polynôme étant voisine de celle prise à l'origine, l'erreur sur le calcul de l'intégrale se voit donc minimisée et confirmée par la **figure A6-2** où les résultats obtenus par les différentes méthodes pour des valeurs $\alpha > 0.4$ sont en accord.

Bien que les deux méthodes proposent des temps de calcul rapides, nous avons montré qu'elles pouvaient toutefois engendrer des erreurs. Pour utiliser celles-ci, une étude antérieure et approfondie de la fonction est par conséquent nécessaire pour des abscisses inférieures au premier zéro du polynôme concerné. Cette remarque s'applique également aux nombreuses méthodes proposées par le *Mathematical Handbook* [Ha-3] utilisant le même principe de calcul, à savoir calculer l'intégrale d'une fonction à partir des zéros y_i d'un polynôme et des poids ω_i associés.

Méthode des Trapèzes et méthode Simpson.

Le calcul de l'intégrale (A6-1) par ces deux méthodes utilise les relations données par la littérature [Ha-3]. Les résultats du *tableau A6-3* montrent un bon accord entre les deux méthodes pour un pas d'intégration fixé à $1e^{-10}$. Notons cependant qu'un pas de $1e^{-05}$ pour la méthode de Simpson donne les mêmes résultats pour un temps de calcul moins long. Néanmoins, l'application de cette méthode se complique pour le calcul du facteur de fuite dans le cas d'un profil de Voigt (III-43). Pour le calcul de ce facteur, l'intégration peut également se faire par la méthode de Laguerre présentant toutefois les mêmes dangers que les méthodes précédentes en considérant 15 points dont le premier zéro se situe en $y_0 = 0.09330$. Pour les trois profils, nous avons donc choisi la méthode des trapèzes. Le pas d'intégration est choisi faible et variant suivant les valeurs prises par les paramètres d'intégration x et y dans le but de prendre en compte le plus exactement possible le comportement de la fonction pour des α faibles.

Dans le *tableau A6-3* sont reportées les valeurs obtenues pour le calcul de l'intégrale (A6-1) suivant les différentes méthodes d'intégration et les valeurs α étudiées. Pour des α supérieures aux valeurs limites grisées, les méthodes sont cohérentes avec la méthode des trapèzes.

Tableau A6-3 : Valeurs obtenues pour le calcul de la relation (A1)

ALPHA	SIMPSON <i>Pas=1E-10</i>	TRAPEZE <i>Pas variant</i>	GAUSS <i>192 Points</i>	GAUSS <i>48 Points</i>	HERMITE <i>40 Points</i>
1,00E-04	31412,3827	31415,627	299,613434	73,43996	16,5798272
5,00E-04	6279,64213	6279,6474	299,387853	73,43628	16,5797654
1,00E-03	3138,05096	3138,0513	298,685501	73,42477	16,5795725
0,002	1567,25773	1567,2578	295,914758	73,37878	16,5788009
0,003	1043,66207	1043,6621	291,429941	73,30228	16,577515
0,004	781,86580	781,86581	285,415774	73,19549	16,5757152
0,005	624,78929	624,78929	278,104032	73,05871	16,5734018
0,006	520,07265	520,07265	269,752693	72,89233	16,5705751
0,007	445,27593	445,27593	260,625796	72,69683	16,5672359
0,008	389,17917	389,17917	250,976415	72,47274	16,5633847
0,009	345,54904	345,54904	241,034145	72,22069	16,5590223
0,01	310,64555	310,64555	230,997397	71,94137	16,5541496
0,02	153,59663	153,59663	147,110584	67,83947	16,4776141
0,03	101,26701	101,26701	100,627423	62,0813	16,3517133
0,04	75,11689	75,11689	75,0469517	55,68971	16,1788504
0,05	59,43831	59,43831	59,430161	49,42607	15,9622284
0,06	48,99529	48,99529	48,9942963	43,71244	15,7057065
0,07	41,54384	41,54384	41,5437126	38,70844	15,4136357
0,08	35,96197	35,96197	35,9619548	34,41909	15,0906881
0,09	31,62637	31,62637	31,6263626	30,77694	14,7416897
0,1	28,16303	28,16303	28,1630268	27,69061	14,3714663
0,2	12,70805	12,70805	12,7080491	12,70612	10,3711506
0,3	7,69271	7,69271	7,69270637	7,69269	7,21655281
0,4	5,26836	5,26836	5,26835504	5,26835	5,1629889
0,5	3,8685	3,8685	3,8684966	3,86849	3,844702

ANNEXE A7
Valeurs numériques du facteur de fuite

Tableau A7-1 : Valeurs numériques du facteur de fuite Gaussien et Lorentzien

τ_{hb} <i>épaisseur optique</i>	Λ_{hb}^G <i>Calculé</i>	Λ_{hb}^G <i>Drawin</i>	Λ_{hb}^L <i>Calculé</i>	Λ_{hb}^L <i>Drawin</i>
0,01	9,930E-01	9,320E-01	9,929E-01	9,688E-01
0,15	9,001E-01	9,000E-01	9,269E-01	9,183E-01
0,20	8,694E-01	8,694E-01	9,050E-01	8,964E-01
0,25	8,399E-01	8,399E-01	8,838E-01	8,753E-01
0,30	8,116E-01	8,116E-01	8,634E-01	8,549E-01
0,35	7,844E-01	7,844E-01	8,438E-01	8,353E-01
0,40	7,583E-01	7,583E-01	8,248E-01	8,163E-01
0,45	7,332E-01	7,332E-01	8,065E-01	7,984E-01
0,50	7,091E-01	7,091E-01	7,889E-01	7,804E-01
0,55	6,859E-01	6,860E-01	7,719E-01	7,634E-01
0,60	6,636E-01	6,637E-01	7,554E-01	7,470E-01
0,65	6,422E-01	6,423E-01	7,396E-01	7,297E-01
0,70	6,216E-01	6,217E-01	7,243E-01	7,144E-01
0,75	6,018E-01	6,019E-01	7,095E-01	7,018E-01
0,80	5,828E-01	5,829E-01	6,953E-01	6,876E-01
0,85	5,645E-01	5,646E-01	6,815E-01	6,738E-01
0,90	5,469E-01	5,470E-01	6,682E-01	6,606E-01
0,95	5,299E-01	5,293E-01	6,553E-01	6,478E-01
1,00	5,136E-01	5,138E-01	6,429E-01	6,354E-01
1,20	4,544E-01	4,546E-01	5,972E-01	5,909E-01
1,40	4,034E-01	4,037E-01	5,572E-01	5,509E-01
1,60	3,596E-01	3,599E-01	5,220E-01	5,157E-01
2,00	2,891E-01	2,894E-01	4,636E-01	4,573E-01
2,50	2,250E-01	2,252E-01	4,077E-01	4,027E-01
3,00	1,738E-01	1,795E-01	3,653E-01	3,603E-01
3,50	1,463E-01	1,464E-01	3,324E-01	3,274E-01
4,00	1,219E-01	1,220E-01	3,064E-01	3,014E-01
4,50	1,035E-01	1,036E-01	2,853E-01	2,822E-01
5,00	8,941E-02	8,942E-02	2,679E-01	2,646E-01
6,00	6,961E-02	6,954E-02	2,409E-01	2,370E-01
7,00	5,662E-02	5,662E-02	2,207E-01	2,168E-01
8,00	4,755E-02	4,756E-02	2,049E-01	2,017E-01
9,00	4,089E-02	4,094E-02	1,920E-01	1,889E-01
10,00	3,580E-02	3,587E-02	1,814E-01	1,783E-01
20,00	1,564E-02	1,562E-02	1,257E-01	1,231E-01
30,00	9,979E-03	9,773E-03	1,018E-01	9,967E-01
40,00	7,134E-03	7,046E-03	8,766E-02	8,591E-02
50,00	5,404E-03	5,478E-03	7,807E-02	7,665E-02
60,00	4,294E-03	4,465E-03	7,102E-02	6,961E-02
70,00	3,560E-03	3,759E-03	6,555E-02	6,442E-02
80,00	3,059E-03	3,240E-03	6,115E-02	6,002E-02
90,00	2,704E-03	2,844E-03	5,751E-02	5,638E-02
100,00	2,442E-03	2,531E-03	5,444E-02	5,353E-02

Tableau A7-2 : Valeurs numériques du facteur de fuite pour un profil de Voigt

t_{ij} a	100E-03	.200E-03	.300E-03	.400E-03	.500E-03	.600E-03	.700E-03	.800E-03	.900E-03	.100E-02	.200E-02	.300E-02	.400E-02	.500E-02	.600E-02
0,1	.905E+00	.919E+00	.924E+00	.926E+00	.927E+00	.928E+00	.929E+00	.929E+00	.930E+00	.930E+00	.931E+00	.932E+00	.932E+00	.932E+00	.933E+00
0,2	.846E+00	.858E+00	.862E+00	.864E+00	.865E+00	.866E+00	.867E+00	.867E+00	.868E+00	.868E+00	.869E+00	.870E+00	.870E+00	.870E+00	.870E+00
0,3	.792E+00	.802E+00	.805E+00	.807E+00	.808E+00	.809E+00	.809E+00	.810E+00	.810E+00	.810E+00	.811E+00	.812E+00	.812E+00	.812E+00	.813E+00
0,4	.741E+00	.750E+00	.753E+00	.755E+00	.756E+00	.756E+00	.757E+00	.757E+00	.757E+00	.757E+00	.758E+00	.759E+00	.759E+00	.759E+00	.759E+00
0,5	.695E+00	.702E+00	.705E+00	.706E+00	.707E+00	.707E+00	.708E+00	.708E+00	.708E+00	.708E+00	.709E+00	.710E+00	.710E+00	.710E+00	.710E+00
0,6	.651E+00	.658E+00	.660E+00	.661E+00	.662E+00	.662E+00	.663E+00	.663E+00	.663E+00	.663E+00	.664E+00	.664E+00	.665E+00	.665E+00	.665E+00
0,7	.611E+00	.617E+00	.619E+00	.620E+00	.620E+00	.621E+00	.621E+00	.621E+00	.621E+00	.621E+00	.622E+00	.622E+00	.623E+00	.623E+00	.623E+00
0,8	.574E+00	.579E+00	.580E+00	.581E+00	.582E+00	.582E+00	.582E+00	.582E+00	.583E+00	.583E+00	.583E+00	.584E+00	.584E+00	.584E+00	.584E+00
0,9	.540E+00	.544E+00	.545E+00	.546E+00	.546E+00	.546E+00	.547E+00	.547E+00	.547E+00	.547E+00	.548E+00	.548E+00	.548E+00	.548E+00	.549E+00
1	.508E+00	.511E+00	.512E+00	.513E+00	.513E+00	.513E+00	.514E+00	.514E+00	.514E+00	.514E+00	.514E+00	.515E+00	.515E+00	.515E+00	.515E+00
2	.290E+00	.291E+00	.291E+00	.291E+00	.291E+00										
3	.181E+00	.181E+00	.180E+00	.181E+00	.181E+00	.181E+00	.182E+00								
4	.124E+00	.123E+00	.123E+00	.123E+00	.122E+00	.122E+00	.122E+00	.122E+00	.123E+00	.123E+00	.123E+00	.123E+00	.124E+00	.124E+00	.124E+00
5	.906E-01	.901E-01	.899E-01	.903E-01	.906E-01	.910E-01	.913E-01	.917E-01							
6	.705E-01	.701E-01	.700E-01	.699E-01	.699E-01	.699E-01	.700E-01	.700E-01	.700E-01	.700E-01	.704E-01	.707E-01	.711E-01	.715E-01	.718E-01
7	.572E-01	.570E-01	.569E-01	.569E-01	.569E-01	.569E-01	.569E-01	.570E-01	.570E-01	.570E-01	.574E-01	.577E-01	.581E-01	.584E-01	.588E-01
8	.480E-01	.478E-01	.478E-01	.478E-01	.478E-01	.478E-01	.478E-01	.479E-01	.479E-01	.479E-01	.483E-01	.486E-01	.490E-01	.494E-01	.497E-01
9	.413E-01	.411E-01	.411E-01	.411E-01	.411E-01	.412E-01	.412E-01	.412E-01	.413E-01	.413E-01	.416E-01	.420E-01	.424E-01	.427E-01	.431E-01
10	.362E-01	.360E-01	.360E-01	.360E-01	.361E-01	.361E-01	.361E-01	.362E-01	.362E-01	.362E-01	.366E-01	.369E-01	.373E-01	.376E-01	.380E-01
20	.157E-01	.157E-01	.157E-01	.158E-01	.158E-01	.158E-01	.159E-01	.159E-01	.159E-01	.160E-01	.163E-01	.166E-01	.170E-01	.173E-01	.176E-01
30	.986E-02	.986E-02	.989E-02	.992E-02	.995E-02	.998E-02	.100E-01	.100E-01	.101E-01	.101E-01	.104E-01	.108E-01	.111E-01	.114E-01	.117E-01
40	.711E-02	.712E-02	.715E-02	.718E-02	.721E-02	.724E-02	.727E-02	.730E-02	.734E-02	.737E-02	.768E-02	.800E-02	.831E-02	.862E-02	.893E-02
50	.553E-02	.555E-02	.558E-02	.561E-02	.564E-02	.567E-02	.570E-02	.573E-02	.576E-02	.579E-02	.610E-02	.641E-02	.671E-02	.701E-02	.731E-02
60	.451E-02	.453E-02	.456E-02	.459E-02	.462E-02	.465E-02	.468E-02	.471E-02	.474E-02	.477E-02	.507E-02	.538E-02	.567E-02	.597E-02	.626E-02
70	.380E-02	.383E-02	.385E-02	.388E-02	.391E-02	.394E-02	.397E-02	.400E-02	.403E-02	.406E-02	.436E-02	.466E-02	.495E-02	.524E-02	.553E-02
80	.328E-02	.331E-02	.333E-02	.336E-02	.339E-02	.342E-02	.345E-02	.348E-02	.351E-02	.354E-02	.383E-02	.412E-02	.441E-02	.470E-02	.498E-02
90	.288E-02	.291E-02	.294E-02	.296E-02	.299E-02	.302E-02	.305E-02	.308E-02	.311E-02	.314E-02	.343E-02	.372E-02	.400E-02	.428E-02	.456E-02
100	.257E-02	.259E-02	.262E-02	.265E-02	.268E-02	.271E-02	.274E-02	.277E-02	.279E-02	.282E-02	.311E-02	.340E-02	.368E-02	.396E-02	.423E-02
200	.121E-02	.124E-02	.127E-02	.129E-02	.132E-02	.135E-02	.138E-02	.140E-02	.143E-02	.146E-02	.173E-02	.199E-02	.225E-02	.250E-02	.275E-02
300	.790E-03	.816E-03	.842E-03	.868E-03	.894E-03	.921E-03	.947E-03	.973E-03	.999E-03	.103E-02	.128E-02	.153E-02	.178E-02	.202E-02	.226E-02
400	.585E-03	.610E-03	.636E-03	.662E-03	.688E-03	.713E-03	.739E-03	.764E-03	.790E-03	.815E-03	.107E-02	.131E-02	.154E-02	.177E-02	.200E-02
500	.465E-03	.490E-03	.515E-03	.541E-03	.566E-03	.591E-03	.616E-03	.641E-03	.666E-03	.691E-03	.935E-03	.117E-02	.140E-02	.162E-02	.183E-02

t_{ij}	.100E-03	.200E-03	.300E-03	.400E-03	.500E-03	.600E-03	.700E-03	.800E-03	.900E-03	.100E-02	.200E-02	.300E-02	.400E-02	.500E-02	.600E-02
a															
600	.387E-03	.411E-03	.436E-03	.461E-03	.486E-03	.511E-03	.536E-03	.560E-03	.585E-03	.609E-03	.848E-03	.108E-02	.130E-02	.151E-02	.172E-02
700	.331E-03	.356E-03	.380E-03	.405E-03	.430E-03	.454E-03	.478E-03	.503E-03	.527E-03	.551E-03	.785E-03	.101E-02	.122E-02	.143E-02	.163E-02
800	.290E-03	.314E-03	.339E-03	.363E-03	.388E-03	.412E-03	.436E-03	.460E-03	.483E-03	.507E-03	.738E-03	.957E-03	.117E-02	.137E-02	.156E-02
900	.258E-03	.283E-03	.307E-03	.331E-03	.355E-03	.379E-03	.403E-03	.426E-03	.450E-03	.473E-03	.700E-03	.916E-03	.112E-02	.131E-02	.150E-02
1000	.233E-03	.257E-03	.281E-03	.305E-03	.329E-03	.353E-03	.376E-03	.400E-03	.423E-03	.446E-03	.670E-03	.881E-03	.108E-02	.127E-02	.145E-02
2000	.123E-03	.146E-03	.169E-03	.191E-03	.214E-03	.236E-03	.258E-03	.279E-03	.301E-03	.322E-03	.523E-03	.704E-03	.870E-03	.102E-02	.116E-02
3000	.876E-04	.110E-03	.132E-03	.154E-03	.175E-03	.196E-03	.217E-03	.237E-03	.258E-03	.278E-03	.462E-03	.623E-03	.766E-03	.894E-03	.101E-02
4000	.702E-04	.920E-04	.113E-03	.135E-03	.155E-03	.176E-03	.195E-03	.215E-03	.234E-03	.253E-03	.424E-03	.570E-03	.696E-03	.807E-03	.906E-03
5000	.598E-04	.813E-04	.102E-03	.123E-03	.143E-03	.162E-03	.182E-03	.200E-03	.219E-03	.237E-03	.397E-03	.531E-03	.643E-03	.741E-03	.828E-03
6000	.529E-04	.741E-04	.947E-04	.115E-03	.134E-03	.153E-03	.172E-03	.190E-03	.207E-03	.225E-03	.376E-03	.499E-03	.601E-03	.689E-03	.766E-03
7000	.481E-04	.689E-04	.891E-04	.109E-03	.128E-03	.146E-03	.164E-03	.182E-03	.199E-03	.215E-03	.358E-03	.472E-03	.566E-03	.646E-03	.716E-03
8000	.444E-04	.650E-04	.849E-04	.104E-03	.123E-03	.141E-03	.158E-03	.175E-03	.191E-03	.207E-03	.343E-03	.449E-03	.536E-03	.609E-03	.673E-03
9000	.415E-04	.619E-04	.815E-04	.100E-03	.119E-03	.136E-03	.153E-03	.169E-03	.185E-03	.201E-03	.330E-03	.429E-03	.510E-03	.578E-03	.637E-03
10000	.393E-04	.594E-04	.787E-04	.973E-04	.115E-03	.132E-03	.149E-03	.165E-03	.180E-03	.195E-03	.318E-03	.412E-03	.487E-03	.551E-03	.606E-03
20000	.288E-04	.473E-04	.645E-04	.804E-04	.953E-04	.109E-03	.122E-03	.135E-03	.146E-03	.157E-03	.243E-03	.303E-03	.351E-03	.391E-03	.426E-03
30000	.251E-04	.424E-04	.580E-04	.721E-04	.850E-04	.968E-04	.108E-03	.118E-03	.127E-03	.136E-03	.202E-03	.248E-03	.284E-03	.315E-03	.341E-03
40000	.230E-04	.393E-04	.537E-04	.663E-04	.777E-04	.879E-04	.972E-04	.106E-03	.114E-03	.121E-03	.175E-03	.213E-03	.243E-03	.268E-03	.291E-03
50000	.217E-04	.371E-04	.504E-04	.619E-04	.720E-04	.811E-04	.892E-04	.966E-04	.103E-03	.110E-03	.157E-03	.189E-03	.215E-03	.237E-03	.257E-03
60000	.207E-04	.354E-04	.477E-04	.583E-04	.674E-04	.755E-04	.827E-04	.893E-04	.953E-04	.101E-03	.142E-03	.171E-03	.194E-03	.214E-03	.233E-03
70000	.199E-04	.339E-04	.455E-04	.552E-04	.635E-04	.709E-04	.774E-04	.833E-04	.887E-04	.937E-04	.131E-03	.157E-03	.178E-03	.198E-03	.216E-03
80000	.193E-04	.327E-04	.435E-04	.525E-04	.602E-04	.669E-04	.729E-04	.782E-04	.832E-04	.877E-04	.122E-03	.146E-03	.166E-03	.184E-03	.202E-03
90000	.187E-04	.316E-04	.418E-04	.502E-04	.573E-04	.635E-04	.690E-04	.739E-04	.785E-04	.827E-04	.114E-03	.136E-03	.156E-03	.174E-03	.191E-03
1E+06	.182E-04	.306E-04	.402E-04	.481E-04	.547E-04	.605E-04	.656E-04	.702E-04	.744E-04	.783E-04	.108E-03	.129E-03	.148E-03	.165E-03	.182E-03
2E+06	.151E-04	.239E-04	.302E-04	.351E-04	.391E-04	.427E-04	.458E-04	.487E-04	.513E-04	.538E-04	.739E-04	.912E-04	.107E-03	.121E-03	.134E-03
3E+06	.132E-04	.201E-04	.248E-04	.285E-04	.315E-04	.342E-04	.367E-04	.389E-04	.410E-04	.430E-04	.608E-04	.763E-04	.894E-04	.101E-03	.111E-03
4E+06	.119E-04	.175E-04	.213E-04	.244E-04	.269E-04	.292E-04	.313E-04	.332E-04	.351E-04	.370E-04	.536E-04	.671E-04	.781E-04	.876E-04	.960E-04
5E+06	.109E-04	.157E-04	.189E-04	.215E-04	.238E-04	.258E-04	.277E-04	.296E-04	.314E-04	.331E-04	.486E-04	.605E-04	.701E-04	.785E-04	.860E-04
6E+06	.100E-04	.142E-04	.171E-04	.195E-04	.215E-04	.234E-04	.252E-04	.270E-04	.287E-04	.304E-04	.448E-04	.554E-04	.641E-04	.717E-04	.786E-04
7E+06	.933E-05	.131E-04	.157E-04	.179E-04	.198E-04	.216E-04	.234E-04	.251E-04	.268E-04	.284E-04	.417E-04	.514E-04	.594E-04	.665E-04	.728E-04
8E+06	.875E-05	.122E-04	.146E-04	.166E-04	.185E-04	.203E-04	.220E-04	.236E-04	.253E-04	.268E-04	.391E-04	.481E-04	.556E-04	.622E-04	.681E-04
9E+06	.825E-05	.114E-04	.137E-04	.156E-04	.174E-04	.192E-04	.208E-04	.224E-04	.240E-04	.255E-04	.370E-04	.454E-04	.525E-04	.587E-04	.642E-04
1E+07	.782E-05	.108E-04	.129E-04	.148E-04	.166E-04	.183E-04	.199E-04	.214E-04	.229E-04	.243E-04	.351E-04	.431E-04	.498E-04	.557E-04	.609E-04

t_{ij} a	.700E-02	.800E-02	.900E-02	.100E-01	.200E-01	.300E-01	.400E-01	.500E-01	.600E-01	.700E-01	.800E-01	.900E-01	.100E+00	.200E+00	.300E+00
0,1	.933E+00	.933E+00	.933E+00	.933E+00	.933E+00	.934E+00	.934E+00	.935E+00	.935E+00	.935E+00	.936E+00	.936E+00	.937E+00	.940E+00	.943E+00
0,2	.870E+00	.870E+00	.870E+00	.871E+00	.871E+00	.872E+00	.873E+00	.873E+00	.874E+00	.875E+00	.875E+00	.876E+00	.877E+00	.882E+00	.887E+00
0,3	.813E+00	.813E+00	.813E+00	.813E+00	.814E+00	.815E+00	.816E+00	.817E+00	.818E+00	.819E+00	.819E+00	.820E+00	.821E+00	.829E+00	.835E+00
0,4	.760E+00	.760E+00	.760E+00	.760E+00	.761E+00	.762E+00	.764E+00	.765E+00	.766E+00	.767E+00	.768E+00	.769E+00	.770E+00	.779E+00	.787E+00
0,5	.711E+00	.711E+00	.711E+00	.711E+00	.712E+00	.714E+00	.715E+00	.717E+00	.718E+00	.719E+00	.720E+00	.722E+00	.723E+00	.734E+00	.743E+00
0,6	.665E+00	.665E+00	.666E+00	.666E+00	.667E+00	.669E+00	.671E+00	.672E+00	.674E+00	.675E+00	.676E+00	.678E+00	.679E+00	.691E+00	.702E+00
0,7	.623E+00	.624E+00	.624E+00	.624E+00	.626E+00	.628E+00	.629E+00	.631E+00	.633E+00	.634E+00	.636E+00	.637E+00	.639E+00	.652E+00	.664E+00
0,8	.585E+00	.585E+00	.585E+00	.585E+00	.587E+00	.589E+00	.591E+00	.593E+00	.595E+00	.596E+00	.598E+00	.600E+00	.601E+00	.616E+00	.629E+00
0,9	.549E+00	.549E+00	.549E+00	.550E+00	.552E+00	.554E+00	.556E+00	.558E+00	.560E+00	.561E+00	.563E+00	.565E+00	.567E+00	.583E+00	.596E+00
1	.516E+00	.516E+00	.516E+00	.516E+00	.519E+00	.521E+00	.523E+00	.525E+00	.527E+00	.529E+00	.531E+00	.533E+00	.535E+00	.552E+00	.566E+00
2	.292E+00	.292E+00	.292E+00	.293E+00	.296E+00	.299E+00	.302E+00	.305E+00	.308E+00	.310E+00	.313E+00	.316E+00	.318E+00	.342E+00	.361E+00
3	.182E+00	.182E+00	.183E+00	.183E+00	.187E+00	.190E+00	.193E+00	.196E+00	.200E+00	.203E+00	.206E+00	.209E+00	.212E+00	.237E+00	.258E+00
4	.125E+00	.125E+00	.125E+00	.126E+00	.129E+00	.133E+00	.136E+00	.139E+00	.143E+00	.146E+00	.149E+00	.152E+00	.155E+00	.181E+00	.202E+00
5	.921E-01	.924E-01	.928E-01	.932E-01	.968E-01	.100E+00	.104E+00	.107E+00	.110E+00	.114E+00	.117E+00	.120E+00	.123E+00	.149E+00	.169E+00
6	.722E-01	.726E-01	.729E-01	.733E-01	.769E-01	.804E-01	.838E-01	.871E-01	.904E-01	.935E-01	.966E-01	.996E-01	.103E+00	.128E+00	.148E+00
7	.592E-01	.595E-01	.599E-01	.603E-01	.638E-01	.673E-01	.707E-01	.740E-01	.772E-01	.803E-01	.833E-01	.863E-01	.892E-01	.114E+00	.134E+00
8	.501E-01	.505E-01	.508E-01	.512E-01	.547E-01	.582E-01	.615E-01	.648E-01	.679E-01	.710E-01	.740E-01	.769E-01	.797E-01	.104E+00	.123E+00
9	.434E-01	.438E-01	.442E-01	.445E-01	.480E-01	.514E-01	.547E-01	.579E-01	.611E-01	.641E-01	.670E-01	.699E-01	.726E-01	.965E-01	.115E+00
10	.384E-01	.387E-01	.391E-01	.394E-01	.429E-01	.463E-01	.495E-01	.527E-01	.558E-01	.587E-01	.616E-01	.644E-01	.672E-01	.904E-01	.108E+00
20	.180E-01	.183E-01	.186E-01	.190E-01	.222E-01	.253E-01	.282E-01	.310E-01	.338E-01	.364E-01	.389E-01	.413E-01	.436E-01	.628E-01	.766E-01
30	.120E-01	.123E-01	.127E-01	.130E-01	.160E-01	.189E-01	.216E-01	.243E-01	.267E-01	.291E-01	.314E-01	.335E-01	.356E-01	.522E-01	.637E-01
40	.923E-02	.954E-02	.984E-02	.101E-01	.131E-01	.158E-01	.184E-01	.208E-01	.231E-01	.253E-01	.274E-01	.294E-01	.313E-01	.460E-01	.560E-01
50	.761E-02	.791E-02	.820E-02	.849E-02	.113E-01	.139E-01	.164E-01	.187E-01	.209E-01	.229E-01	.249E-01	.267E-01	.284E-01	.418E-01	.506E-01
60	.656E-02	.684E-02	.713E-02	.742E-02	.102E-01	.127E-01	.150E-01	.173E-01	.193E-01	.212E-01	.231E-01	.248E-01	.264E-01	.386E-01	.466E-01
70	.581E-02	.610E-02	.638E-02	.666E-02	.932E-02	.118E-01	.140E-01	.162E-01	.181E-01	.199E-01	.217E-01	.233E-01	.248E-01	.361E-01	.434E-01
80	.526E-02	.554E-02	.582E-02	.609E-02	.869E-02	.111E-01	.133E-01	.153E-01	.172E-01	.189E-01	.205E-01	.220E-01	.235E-01	.341E-01	.408E-01
90	.484E-02	.511E-02	.539E-02	.565E-02	.820E-02	.105E-01	.126E-01	.146E-01	.164E-01	.180E-01	.196E-01	.210E-01	.224E-01	.323E-01	.386E-01
100	.450E-02	.477E-02	.504E-02	.531E-02	.780E-02	.101E-01	.121E-01	.140E-01	.157E-01	.173E-01	.188E-01	.202E-01	.214E-01	.308E-01	.368E-01
200	.300E-02	.324E-02	.348E-02	.371E-02	.586E-02	.771E-02	.933E-02	.108E-01	.120E-01	.132E-01	.142E-01	.152E-01	.161E-01	.223E-01	.261E-01
300	.249E-02	.271E-02	.293E-02	.314E-02	.507E-02	.666E-02	.801E-02	.918E-02	.102E-01	.111E-01	.120E-01	.127E-01	.134E-01	.183E-01	.211E-01
400	.221E-02	.242E-02	.263E-02	.283E-02	.458E-02	.599E-02	.716E-02	.816E-02	.903E-02	.981E-02	.105E-01	.111E-01	.117E-01	.158E-01	.181E-01
500	.204E-02	.224E-02	.243E-02	.262E-02	.424E-02	.551E-02	.654E-02	.742E-02	.818E-02	.886E-02	.947E-02	.100E-01	.105E-01	.140E-01	.160E-01

t_{ij}	.700E-02	.800E-02	.900E-02	.100E-01	.200E-01	.300E-01	.400E-01	.500E-01	.600E-01	.700E-01	.800E-01	.900E-01	.100E+00	.200E+00	.300E+00
a															
600	.191E-02	.210E-02	.229E-02	.247E-02	.397E-02	.513E-02	.606E-02	.685E-02	.753E-02	.814E-02	.868E-02	.917E-02	.963E-02	.127E-01	.144E-01
700	.182E-02	.200E-02	.217E-02	.234E-02	.375E-02	.482E-02	.567E-02	.639E-02	.701E-02	.756E-02	.805E-02	.850E-02	.891E-02	.117E-01	.133E-01
800	.174E-02	.191E-02	.208E-02	.224E-02	.357E-02	.456E-02	.534E-02	.600E-02	.658E-02	.708E-02	.754E-02	.795E-02	.832E-02	.108E-01	.123E-01
900	.167E-02	.184E-02	.200E-02	.216E-02	.341E-02	.433E-02	.507E-02	.568E-02	.621E-02	.668E-02	.710E-02	.748E-02	.783E-02	.101E-01	.116E-01
1000	.162E-02	.178E-02	.194E-02	.208E-02	.327E-02	.414E-02	.483E-02	.540E-02	.590E-02	.634E-02	.673E-02	.708E-02	.740E-02	.957E-02	.110E-01
2000	.129E-02	.141E-02	.152E-02	.163E-02	.243E-02	.300E-02	.344E-02	.381E-02	.412E-02	.440E-02	.464E-02	.486E-02	.507E-02	.666E-02	.797E-02
3000	.111E-02	.121E-02	.130E-02	.138E-02	.201E-02	.244E-02	.278E-02	.306E-02	.330E-02	.351E-02	.371E-02	.389E-02	.406E-02	.554E-02	.666E-02
4000	.994E-03	.108E-02	.115E-02	.122E-02	.174E-02	.210E-02	.238E-02	.261E-02	.281E-02	.300E-02	.317E-02	.334E-02	.350E-02	.489E-02	.582E-02
5000	.905E-03	.976E-03	.104E-02	.110E-02	.155E-02	.186E-02	.210E-02	.231E-02	.249E-02	.266E-02	.283E-02	.299E-02	.315E-02	.442E-02	.522E-02
6000	.835E-03	.898E-03	.955E-03	.101E-02	.141E-02	.168E-02	.190E-02	.209E-02	.226E-02	.243E-02	.259E-02	.275E-02	.290E-02	.406E-02	.477E-02
7000	.778E-03	.835E-03	.887E-03	.935E-03	.129E-02	.154E-02	.174E-02	.192E-02	.209E-02	.226E-02	.241E-02	.257E-02	.271E-02	.377E-02	.442E-02
8000	.731E-03	.783E-03	.830E-03	.874E-03	.120E-02	.143E-02	.162E-02	.180E-02	.196E-02	.212E-02	.228E-02	.242E-02	.256E-02	.353E-02	.414E-02
9000	.690E-03	.738E-03	.782E-03	.823E-03	.113E-02	.134E-02	.153E-02	.170E-02	.186E-02	.201E-02	.216E-02	.230E-02	.243E-02	.333E-02	.390E-02
10000	.655E-03	.700E-03	.741E-03	.779E-03	.106E-02	.127E-02	.145E-02	.161E-02	.177E-02	.192E-02	.206E-02	.219E-02	.232E-02	.317E-02	.370E-02
20000	.457E-03	.485E-03	.511E-03	.535E-03	.731E-03	.899E-03	.105E-02	.119E-02	.130E-02	.141E-02	.150E-02	.159E-02	.166E-02	.225E-02	.260E-02
30000	.365E-03	.387E-03	.408E-03	.428E-03	.603E-03	.753E-03	.878E-03	.983E-03	.107E-02	.116E-02	.123E-02	.130E-02	.136E-02	.183E-02	.210E-02
40000	.311E-03	.331E-03	.350E-03	.368E-03	.531E-03	.662E-03	.767E-03	.855E-03	.932E-03	.100E-02	.107E-02	.113E-02	.118E-02	.157E-02	.179E-02
50000	.276E-03	.294E-03	.312E-03	.330E-03	.481E-03	.596E-03	.687E-03	.766E-03	.835E-03	.898E-03	.955E-03	.101E-02	.106E-02	.139E-02	.158E-02
60000	.252E-03	.269E-03	.286E-03	.303E-03	.444E-03	.546E-03	.628E-03	.700E-03	.763E-03	.820E-03	.872E-03	.919E-03	.963E-03	.126E-02	.142E-02
70000	.233E-03	.250E-03	.267E-03	.283E-03	.413E-03	.506E-03	.582E-03	.648E-03	.707E-03	.759E-03	.807E-03	.849E-03	.889E-03	.115E-02	.130E-02
80000	.219E-03	.236E-03	.251E-03	.267E-03	.387E-03	.474E-03	.545E-03	.607E-03	.661E-03	.710E-03	.753E-03	.793E-03	.829E-03	.107E-02	.121E-02
90000	.208E-03	.224E-03	.239E-03	.253E-03	.366E-03	.447E-03	.514E-03	.572E-03	.623E-03	.668E-03	.708E-03	.745E-03	.778E-03	.100E-02	.114E-02
1E+06	.198E-03	.214E-03	.228E-03	.242E-03	.347E-03	.424E-03	.488E-03	.543E-03	.590E-03	.633E-03	.670E-03	.704E-03	.735E-03	.943E-03	.107E-02
2E+06	.145E-03	.156E-03	.166E-03	.175E-03	.247E-03	.300E-03	.343E-03	.378E-03	.409E-03	.435E-03	.459E-03	.480E-03	.500E-03	.650E-03	.772E-03
3E+06	.120E-03	.128E-03	.136E-03	.143E-03	.201E-03	.243E-03	.276E-03	.303E-03	.326E-03	.346E-03	.365E-03	.382E-03	.398E-03	.538E-03	.642E-03
4E+06	.104E-03	.111E-03	.118E-03	.124E-03	.173E-03	.208E-03	.235E-03	.258E-03	.277E-03	.295E-03	.311E-03	.327E-03	.342E-03	.472E-03	.558E-03
5E+06	.929E-04	.994E-04	.105E-03	.111E-03	.154E-03	.184E-03	.207E-03	.227E-03	.245E-03	.261E-03	.277E-03	.292E-03	.307E-03	.426E-03	.499E-03
6E+06	.849E-04	.907E-04	.962E-04	.101E-03	.140E-03	.166E-03	.187E-03	.205E-03	.222E-03	.238E-03	.253E-03	.268E-03	.282E-03	.390E-03	.456E-03
7E+06	.786E-04	.840E-04	.889E-04	.935E-04	.128E-03	.152E-03	.172E-03	.189E-03	.205E-03	.220E-03	.235E-03	.249E-03	.263E-03	.362E-03	.421E-03
8E+06	.735E-04	.784E-04	.830E-04	.872E-04	.119E-03	.141E-03	.159E-03	.176E-03	.192E-03	.207E-03	.221E-03	.235E-03	.247E-03	.338E-03	.394E-03
9E+06	.692E-04	.738E-04	.781E-04	.820E-04	.111E-03	.132E-03	.150E-03	.166E-03	.181E-03	.196E-03	.210E-03	.222E-03	.235E-03	.319E-03	.372E-03
1E+07	.656E-04	.699E-04	.738E-04	.775E-04	.105E-03	.125E-03	.142E-03	.157E-03	.172E-03	.187E-03	.200E-03	.212E-03	.223E-03	.302E-03	.353E-03

t_{ij} a	.400E+00	.500E+00	.600E+00	.700E+00	.800E+00	.900E+00	.100E+01	.200E+01	.300E+01	.400E+01	.500E+01	.600E+01	.700E+01	.800E+01	.900E+01
0,1	.945E+00	.948E+00	.950E+00	.952E+00	.954E+00	.955E+00	.957E+00	.969E+00	.977E+00	.983E+00	.986E+00	.988E+00	.988E+00	.987E+00	.986E+00
0,2	.891E+00	.894E+00	.898E+00	.900E+00	.903E+00	.905E+00	.907E+00	.922E+00	.931E+00	.937E+00	.940E+00	.941E+00	.941E+00	.940E+00	.939E+00
0,3	.840E+00	.845E+00	.849E+00	.853E+00	.856E+00	.859E+00	.861E+00	.879E+00	.889E+00	.894E+00	.897E+00	.898E+00	.898E+00	.897E+00	.895E+00
0,4	.794E+00	.799E+00	.804E+00	.809E+00	.813E+00	.816E+00	.819E+00	.839E+00	.849E+00	.855E+00	.857E+00	.858E+00	.857E+00	.856E+00	.855E+00
0,5	.750E+00	.757E+00	.763E+00	.768E+00	.772E+00	.776E+00	.780E+00	.801E+00	.812E+00	.817E+00	.820E+00	.820E+00	.820E+00	.818E+00	.817E+00
0,6	.711E+00	.718E+00	.724E+00	.730E+00	.735E+00	.739E+00	.743E+00	.766E+00	.777E+00	.783E+00	.785E+00	.786E+00	.785E+00	.783E+00	.781E+00
0,7	.674E+00	.682E+00	.689E+00	.695E+00	.700E+00	.705E+00	.709E+00	.734E+00	.745E+00	.751E+00	.753E+00	.753E+00	.752E+00	.750E+00	.749E+00
0,8	.639E+00	.648E+00	.656E+00	.662E+00	.668E+00	.673E+00	.678E+00	.704E+00	.715E+00	.721E+00	.723E+00	.723E+00	.721E+00	.720E+00	.718E+00
0,9	.608E+00	.617E+00	.625E+00	.632E+00	.638E+00	.644E+00	.648E+00	.676E+00	.688E+00	.693E+00	.695E+00	.694E+00	.693E+00	.691E+00	.690E+00
1	.578E+00	.588E+00	.597E+00	.604E+00	.611E+00	.616E+00	.621E+00	.650E+00	.662E+00	.667E+00	.668E+00	.668E+00	.666E+00	.664E+00	.663E+00
2	.377E+00	.390E+00	.401E+00	.411E+00	.419E+00	.426E+00	.432E+00	.466E+00	.477E+00	.481E+00	.481E+00	.479E+00	.477E+00	.475E+00	.474E+00
3	.275E+00	.289E+00	.301E+00	.311E+00	.319E+00	.327E+00	.333E+00	.366E+00	.376E+00	.378E+00	.377E+00	.374E+00	.373E+00	.372E+00	.372E+00
4	.219E+00	.233E+00	.245E+00	.255E+00	.263E+00	.270E+00	.276E+00	.307E+00	.315E+00	.316E+00	.314E+00	.312E+00	.311E+00	.310E+00	.311E+00
5	.186E+00	.199E+00	.211E+00	.220E+00	.228E+00	.235E+00	.240E+00	.269E+00	.275E+00	.275E+00	.272E+00	.271E+00	.271E+00	.271E+00	.273E+00
6	.164E+00	.177E+00	.188E+00	.197E+00	.204E+00	.211E+00	.216E+00	.242E+00	.247E+00	.246E+00	.243E+00	.242E+00	.243E+00	.244E+00	.246E+00
7	.149E+00	.162E+00	.172E+00	.180E+00	.187E+00	.193E+00	.198E+00	.222E+00	.226E+00	.224E+00	.222E+00	.222E+00	.223E+00	.225E+00	.226E+00
8	.138E+00	.150E+00	.160E+00	.168E+00	.174E+00	.180E+00	.185E+00	.206E+00	.209E+00	.207E+00	.205E+00	.206E+00	.207E+00	.209E+00	.211E+00
9	.129E+00	.141E+00	.150E+00	.157E+00	.164E+00	.169E+00	.173E+00	.194E+00	.195E+00	.193E+00	.192E+00	.193E+00	.195E+00	.197E+00	.199E+00
10	.122E+00	.133E+00	.142E+00	.149E+00	.155E+00	.160E+00	.164E+00	.183E+00	.184E+00	.182E+00	.181E+00	.183E+00	.185E+00	.187E+00	.189E+00
20	.869E-01	.949E-01	.101E+00	.106E+00	.110E+00	.114E+00	.116E+00	.125E+00	.124E+00	.125E+00	.128E+00	.131E+00	.132E+00	.133E+00	.134E+00
30	.721E-01	.785E-01	.834E-01	.873E-01	.904E-01	.928E-01	.947E-01	.995E-01	.100E+00	.104E+00	.106E+00	.108E+00	.108E+00	.109E+00	.109E+00
40	.632E-01	.685E-01	.727E-01	.758E-01	.783E-01	.802E-01	.816E-01	.848E-01	.875E-01	.910E-01	.927E-01	.934E-01	.938E-01	.939E-01	.939E-01
50	.569E-01	.616E-01	.652E-01	.678E-01	.699E-01	.714E-01	.725E-01	.753E-01	.791E-01	.821E-01	.831E-01	.836E-01	.838E-01	.838E-01	.837E-01
60	.523E-01	.564E-01	.595E-01	.618E-01	.635E-01	.648E-01	.657E-01	.687E-01	.729E-01	.752E-01	.759E-01	.763E-01	.764E-01	.763E-01	.760E-01
70	.486E-01	.523E-01	.551E-01	.571E-01	.586E-01	.596E-01	.603E-01	.638E-01	.680E-01	.697E-01	.703E-01	.706E-01	.706E-01	.704E-01	.700E-01
80	.456E-01	.490E-01	.514E-01	.532E-01	.545E-01	.554E-01	.560E-01	.599E-01	.640E-01	.653E-01	.658E-01	.660E-01	.659E-01	.656E-01	.651E-01
90	.430E-01	.461E-01	.484E-01	.500E-01	.511E-01	.519E-01	.525E-01	.568E-01	.605E-01	.616E-01	.620E-01	.622E-01	.620E-01	.616E-01	.610E-01
100	.408E-01	.437E-01	.458E-01	.472E-01	.482E-01	.489E-01	.495E-01	.542E-01	.575E-01	.584E-01	.589E-01	.589E-01	.587E-01	.582E-01	.576E-01
200	.286E-01	.302E-01	.314E-01	.322E-01	.329E-01	.336E-01	.343E-01	.396E-01	.409E-01	.413E-01	.412E-01	.407E-01	.401E-01	.395E-01	.390E-01
300	.229E-01	.241E-01	.251E-01	.259E-01	.268E-01	.276E-01	.284E-01	.325E-01	.334E-01	.335E-01	.331E-01	.325E-01	.319E-01	.315E-01	.313E-01
400	.195E-01	.206E-01	.216E-01	.225E-01	.234E-01	.243E-01	.250E-01	.282E-01	.289E-01	.287E-01	.282E-01	.276E-01	.272E-01	.271E-01	.272E-01
500	.173E-01	.184E-01	.194E-01	.203E-01	.212E-01	.220E-01	.227E-01	.252E-01	.257E-01	.254E-01	.248E-01	.244E-01	.242E-01	.243E-01	.245E-01

t_{ij}	.400E+00	.500E+00	.600E+00	.700E+00	.800E+00	.900E+00	.100E+01	.200E+01	.300E+01	.400E+01	.500E+01	.600E+01	.700E+01	.800E+01	.900E+01
a															
600	.157E-01	.168E-01	.178E-01	.188E-01	.196E-01	.203E-01	.208E-01	.230E-01	.233E-01	.229E-01	.224E-01	.221E-01	.221E-01	.223E-01	.226E-01
700	.145E-01	.156E-01	.166E-01	.176E-01	.183E-01	.189E-01	.194E-01	.213E-01	.215E-01	.210E-01	.206E-01	.204E-01	.205E-01	.208E-01	.210E-01
800	.136E-01	.147E-01	.157E-01	.166E-01	.172E-01	.177E-01	.182E-01	.199E-01	.200E-01	.195E-01	.191E-01	.191E-01	.193E-01	.196E-01	.198E-01
900	.128E-01	.139E-01	.149E-01	.157E-01	.163E-01	.168E-01	.171E-01	.188E-01	.187E-01	.182E-01	.180E-01	.180E-01	.183E-01	.186E-01	.187E-01
1000	.122E-01	.133E-01	.142E-01	.150E-01	.155E-01	.159E-01	.163E-01	.178E-01	.176E-01	.172E-01	.170E-01	.172E-01	.175E-01	.177E-01	.178E-01
2000	.899E-02	.972E-02	.103E-01	.107E-01	.110E-01	.113E-01	.115E-01	.122E-01	.119E-01	.120E-01	.123E-01	.125E-01	.126E-01	.126E-01	.126E-01
3000	.742E-02	.797E-02	.840E-02	.874E-02	.902E-02	.923E-02	.940E-02	.971E-02	.968E-02	.998E-02	.102E-01	.103E-01	.103E-01	.103E-01	.103E-01
4000	.644E-02	.692E-02	.728E-02	.757E-02	.779E-02	.796E-02	.808E-02	.826E-02	.845E-02	.875E-02	.885E-02	.887E-02	.887E-02	.889E-02	.890E-02
5000	.577E-02	.619E-02	.651E-02	.676E-02	.694E-02	.707E-02	.717E-02	.733E-02	.764E-02	.787E-02	.791E-02	.792E-02	.794E-02	.795E-02	.796E-02
6000	.527E-02	.565E-02	.594E-02	.615E-02	.630E-02	.641E-02	.649E-02	.667E-02	.703E-02	.719E-02	.722E-02	.723E-02	.725E-02	.726E-02	.726E-02
7000	.489E-02	.523E-02	.548E-02	.567E-02	.580E-02	.589E-02	.595E-02	.619E-02	.655E-02	.666E-02	.668E-02	.670E-02	.671E-02	.672E-02	.672E-02
8000	.457E-02	.489E-02	.512E-02	.528E-02	.539E-02	.547E-02	.552E-02	.581E-02	.615E-02	.622E-02	.625E-02	.627E-02	.628E-02	.628E-02	.629E-02
9000	.431E-02	.460E-02	.481E-02	.495E-02	.505E-02	.512E-02	.516E-02	.550E-02	.581E-02	.586E-02	.589E-02	.591E-02	.592E-02	.593E-02	.593E-02
10000	.408E-02	.435E-02	.454E-02	.467E-02	.476E-02	.482E-02	.487E-02	.525E-02	.551E-02	.556E-02	.559E-02	.561E-02	.561E-02	.562E-02	.563E-02
20000	.284E-02	.299E-02	.309E-02	.317E-02	.323E-02	.328E-02	.334E-02	.380E-02	.389E-02	.393E-02	.395E-02	.396E-02	.397E-02	.397E-02	.398E-02
30000	.226E-02	.238E-02	.246E-02	.254E-02	.261E-02	.268E-02	.276E-02	.310E-02	.318E-02	.321E-02	.323E-02	.324E-02	.324E-02	.325E-02	.325E-02
40000	.192E-02	.202E-02	.211E-02	.220E-02	.228E-02	.235E-02	.242E-02	.268E-02	.275E-02	.278E-02	.279E-02	.280E-02	.281E-02	.281E-02	.281E-02
50000	.170E-02	.180E-02	.189E-02	.198E-02	.206E-02	.213E-02	.219E-02	.240E-02	.246E-02	.249E-02	.250E-02	.251E-02	.251E-02	.251E-02	.252E-02
60000	.154E-02	.164E-02	.173E-02	.182E-02	.190E-02	.196E-02	.201E-02	.219E-02	.225E-02	.227E-02	.228E-02	.229E-02	.229E-02	.229E-02	.230E-02
70000	.142E-02	.152E-02	.162E-02	.170E-02	.177E-02	.182E-02	.186E-02	.203E-02	.208E-02	.210E-02	.211E-02	.212E-02	.212E-02	.212E-02	.213E-02
80000	.132E-02	.143E-02	.152E-02	.160E-02	.166E-02	.170E-02	.174E-02	.190E-02	.195E-02	.197E-02	.198E-02	.198E-02	.199E-02	.199E-02	.199E-02
90000	.125E-02	.135E-02	.144E-02	.151E-02	.157E-02	.161E-02	.164E-02	.179E-02	.183E-02	.185E-02	.186E-02	.187E-02	.187E-02	.187E-02	.188E-02
1E+06	.119E-02	.129E-02	.137E-02	.144E-02	.149E-02	.153E-02	.155E-02	.170E-02	.174E-02	.176E-02	.177E-02	.177E-02	.178E-02	.178E-02	.178E-02
2E+06	.867E-03	.933E-03	.982E-03	.102E-02	.105E-02	.108E-02	.110E-02	.120E-02	.123E-02	.124E-02	.125E-02	.125E-02	.126E-02	.126E-02	.126E-02
3E+06	.712E-03	.761E-03	.800E-03	.832E-03	.858E-03	.879E-03	.897E-03	.980E-03	.101E-02	.102E-02	.102E-02	.102E-02	.103E-02	.103E-02	.103E-02
4E+06	.616E-03	.659E-03	.693E-03	.721E-03	.743E-03	.761E-03	.777E-03	.849E-03	.870E-03	.879E-03	.884E-03	.886E-03	.888E-03	.889E-03	.889E-03
5E+06	.550E-03	.589E-03	.620E-03	.645E-03	.665E-03	.681E-03	.695E-03	.759E-03	.779E-03	.787E-03	.791E-03	.793E-03	.794E-03	.795E-03	.795E-03
6E+06	.502E-03	.538E-03	.566E-03	.588E-03	.607E-03	.622E-03	.634E-03	.693E-03	.711E-03	.718E-03	.722E-03	.724E-03	.725E-03	.726E-03	.726E-03
7E+06	.465E-03	.498E-03	.524E-03	.545E-03	.562E-03	.576E-03	.587E-03	.642E-03	.658E-03	.665E-03	.668E-03	.670E-03	.671E-03	.672E-03	.672E-03
8E+06	.435E-03	.466E-03	.490E-03	.510E-03	.525E-03	.538E-03	.549E-03	.600E-03	.616E-03	.622E-03	.625E-03	.627E-03	.628E-03	.628E-03	.629E-03
9E+06	.410E-03	.439E-03	.462E-03	.480E-03	.495E-03	.508E-03	.518E-03	.566E-03	.580E-03	.586E-03	.589E-03	.591E-03	.592E-03	.592E-03	.593E-03
1E+07	.389E-03	.417E-03	.438E-03	.456E-03	.470E-03	.482E-03	.491E-03	.537E-03	.551E-03	.556E-03	.559E-03	.560E-03	.561E-03	.562E-03	.562E-03

t_{ij}	.100E+02	.200E+02	.300E+02	.400E+02	.500E+02	.600E+02	.700E+02	.800E+02	.900E+02	.100E+03
a										
0,1	.985E+00	.976E+00	.978E+00	.981E+00	.982E+00	.983E+00	.982E+00	.980E+00	.978E+00	.976E+00
0,2	.937E+00	.930E+00	.932E+00	.935E+00	.936E+00	.936E+00	.935E+00	.933E+00	.931E+00	.929E+00
0,3	.894E+00	.887E+00	.890E+00	.893E+00	.894E+00	.893E+00	.892E+00	.890E+00	.887E+00	.885E+00
0,4	.853E+00	.848E+00	.851E+00	.853E+00	.854E+00	.853E+00	.852E+00	.849E+00	.847E+00	.844E+00
0,5	.815E+00	.811E+00	.814E+00	.816E+00	.817E+00	.816E+00	.814E+00	.812E+00	.809E+00	.807E+00
0,6	.780E+00	.777E+00	.780E+00	.782E+00	.783E+00	.781E+00	.779E+00	.777E+00	.774E+00	.772E+00
0,7	.747E+00	.745E+00	.748E+00	.750E+00	.750E+00	.749E+00	.747E+00	.744E+00	.741E+00	.739E+00
0,8	.717E+00	.715E+00	.719E+00	.721E+00	.720E+00	.719E+00	.716E+00	.713E+00	.711E+00	.708E+00
0,9	.688E+00	.687E+00	.691E+00	.693E+00	.692E+00	.690E+00	.688E+00	.685E+00	.682E+00	.680E+00
1	.662E+00	.662E+00	.665E+00	.667E+00	.666E+00	.664E+00	.661E+00	.658E+00	.656E+00	.653E+00
2	.474E+00	.479E+00	.483E+00	.482E+00	.479E+00	.476E+00	.472E+00	.470E+00	.467E+00	.466E+00
3	.372E+00	.380E+00	.382E+00	.380E+00	.376E+00	.372E+00	.368E+00	.366E+00	.365E+00	.364E+00
4	.312E+00	.320E+00	.321E+00	.317E+00	.313E+00	.309E+00	.306E+00	.305E+00	.305E+00	.305E+00
5	.274E+00	.281E+00	.280E+00	.276E+00	.271E+00	.268E+00	.266E+00	.266E+00	.266E+00	.267E+00
6	.248E+00	.254E+00	.252E+00	.246E+00	.242E+00	.239E+00	.238E+00	.239E+00	.239E+00	.240E+00
7	.228E+00	.233E+00	.230E+00	.224E+00	.220E+00	.218E+00	.218E+00	.219E+00	.220E+00	.221E+00
8	.213E+00	.216E+00	.212E+00	.207E+00	.203E+00	.202E+00	.203E+00	.204E+00	.205E+00	.205E+00
9	.200E+00	.203E+00	.198E+00	.193E+00	.190E+00	.190E+00	.190E+00	.191E+00	.192E+00	.193E+00
10	.190E+00	.192E+00	.187E+00	.181E+00	.179E+00	.179E+00	.180E+00	.181E+00	.182E+00	.183E+00
20	.134E+00	.131E+00	.125E+00	.124E+00	.126E+00	.127E+00	.128E+00	.128E+00	.128E+00	.128E+00
30	.109E+00	.104E+00	.100E+00	.102E+00	.103E+00	.104E+00	.104E+00	.104E+00	.104E+00	.104E+00
40	.937E-01	.881E-01	.871E-01	.890E-01	.898E-01	.898E-01	.898E-01	.898E-01	.898E-01	.898E-01
50	.833E-01	.778E-01	.784E-01	.800E-01	.803E-01	.802E-01	.802E-01	.802E-01	.802E-01	.802E-01
60	.756E-01	.706E-01	.721E-01	.732E-01	.732E-01	.731E-01	.731E-01	.732E-01	.732E-01	.732E-01
70	.695E-01	.652E-01	.671E-01	.678E-01	.677E-01	.677E-01	.677E-01	.677E-01	.677E-01	.677E-01
80	.645E-01	.611E-01	.630E-01	.633E-01						
90	.604E-01	.578E-01	.596E-01	.597E-01	.596E-01	.596E-01	.596E-01	.596E-01	.596E-01	.596E-01
100	.569E-01	.550E-01	.566E-01							
200	.386E-01	.399E-01	.400E-01							
300	.313E-01	.326E-01								
400	.274E-01	.282E-01								
500	.248E-01	.252E-01								

t_{ij}	.100E+02	.200E+02	.300E+02	.400E+02	.500E+02	.600E+02	.700E+02	.800E+02	.900E+02	.100E+03
a										
600	.228E-01	.230E-01								
700	.212E-01	.213E-01								
800	.199E-01	.199E-01	.199E-01	.200E-01						
900	.188E-01									
1000	.178E-01	.179E-01								
2000	.126E-01									
3000	.103E-01									
4000	.890E-02	.892E-02								
5000	.796E-02	.798E-02								
6000	.727E-02	.728E-02	.728E-02	.728E-02	.729E-02	.729E-02	.728E-02	.728E-02	.728E-02	.728E-02
7000	.673E-02	.674E-02								
8000	.629E-02	.631E-02	.630E-02							
9000	.593E-02	.594E-02	.595E-02	.595E-02	.595E-02	.595E-02	.595E-02	.595E-02	.594E-02	.594E-02
10000	.563E-02	.564E-02								
20000	.398E-02	.399E-02	.398E-02	.398E-02						
30000	.325E-02	.326E-02	.326E-02	.326E-02	.326E-02	.325E-02	.325E-02	.325E-02	.325E-02	.325E-02
40000	.281E-02	.282E-02								
50000	.252E-02									
60000	.230E-02									
70000	.213E-02									
80000	.199E-02									
90000	.188E-02									
1E+06	.178E-02									
2E+06	.126E-02									
3E+06	.103E-02									
4E+06	.890E-03	.890E-03	.890E-03	.890E-03	.890E-03	.889E-03	.889E-03	.889E-03	.888E-03	.887E-03
5E+06	.796E-03	.796E-03	.796E-03	.796E-03	.796E-03	.795E-03	.795E-03	.794E-03	.794E-03	.793E-03
6E+06	.726E-03	.727E-03	.727E-03	.727E-03	.726E-03	.726E-03	.725E-03	.725E-03	.724E-03	.724E-03
7E+06	.672E-03	.673E-03	.673E-03	.673E-03	.672E-03	.672E-03	.671E-03	.671E-03	.670E-03	.669E-03
8E+06	.629E-03	.629E-03	.629E-03	.629E-03	.629E-03	.628E-03	.628E-03	.627E-03	.626E-03	.626E-03
9E+06	.593E-03	.593E-03	.593E-03	.593E-03	.592E-03	.592E-03	.591E-03	.591E-03	.590E-03	.590E-03
1E+07	.562E-03	.563E-03	.563E-03	.562E-03	.562E-03	.561E-03	.561E-03	.560E-03	.560E-03	.559E-03

ANNEXE A8
Tables d'intégrales de collision choisies pour le calcul des coefficients de transport

	Ar-Ar	Ar-Ar ⁺	Ar-Ar ²⁺	Ar-Ar ³⁺	Cu-Cu ₂	Cu-Cu	Cu-Cu ⁺	Cu-Cu ²⁺	Cu-Cu ³⁺	Cu-Cu ⁻	Cu-e	Ar-e
W^(1,1)	300K – 12500K Lissage Pateyron 12500K – 25000K Lennard-Jones	300K – 25000K Lissage Aubreton	300K – 25000K Lissage Aubreton égalité W_{ArAr^+}	300K – 25000K Lissage Aubreton égalité W_{ArAr^+}	" T Sphères Dures	T<2000K [⊗] 13,934 2000K – 25000K Lennard – Jones	300K – 25000K Lissage Chervy	300K – 25000K Lissage Chervy égalité W_{CuCu^+}	300K – 25000K Lissage Chervy égalité W_{CuCu^+}	" T Polarisation	300K – 20000K Lissage Chervy 20000K – 25000K Cste = 14,1454	300K – 25000K Lissage Chervy
W^(1,2)	300K – 17100K Lissage Pateyron 17100K – 25000K Cste = 3,9611	300K – 25000K Lissage Aubreton Récurrence	300K – 25000K Lissage Aubreton Récurrence égalité W_{ArAr^+}	300K – 25000K Lissage Aubreton Récurrence égalité W_{ArAr^+}	" T Sphères Dures	T<2000K [⊗] 11,191 2000K – 25000K Lennard – Jones	300K – 25000K Lissage Chervy	300K – 25000K Lissage Chervy égalité W_{CuCu^+}	300K – 25000K Lissage Chervy égalité W_{CuCu^+}	" T Polarisation	300K – 20000K Lissage Chervy 20000K – 25000K Cste = 9,6421	T < 500K [⊗] 0,0076 500K – 25000K Lissage Chervy
W^(1,3)	300K – 17200K Lissage Pateyron 17200K – 25000K Cste = 3,6722	300K – 25000K Lissage Aubreton Récurrence	300K – 25000K Lissage Aubreton Récurrence égalité W_{ArAr^+}	300K – 25000K Lissage Aubreton Récurrence égalité W_{ArAr^+}	" T Sphères Dures	T<2000K [⊗] 9,777 2000K – 25000K Lennard – Jones	300K – 25000K Lissage Chervy	300K – 25000K Lissage Chervy égalité W_{CuCu^+}	300K – 25000K Lissage Chervy égalité W_{CuCu^+}	" T Polarisation	300K – 20000K Lissage Chervy 20000K – 25000K Cste = 8,2573	300K – 25000K Lissage Chervy
W^(1,4)	300K – 500K Lissage Pateyron 500K – 15000K Lissage Aubreton 15000K – 25000K Cste = 2,5437	300K – 25000K Lissage Aubreton Récurrence	300K – 25000K Lissage Aubreton Récurrence égalité W_{ArAr^+}	300K – 25000K Lissage Aubreton Récurrence égalité W_{ArAr^+}	" T Sphères Dures	" T égalité $\Omega^{(1,3)}$	300K – 25000K Lissage Chervy	300K – 25000K Lissage Chervy égalité W_{CuCu^+}	300K – 25000K Lissage Chervy égalité W_{CuCu^+}	" T Polarisation	300K – 20000K Lissage Chervy 20000K – 25000K Cste = 8,1431	300K – 25000K Lissage Chervy
W^(1,5)	300K – 500K Lissage Pateyron 500K – 15000K Lissage Aubreton 15000K – 25000K Cste = 1,7742	300K – 25000K Lissage Aubreton Récurrence	300K – 25000K Lissage Aubreton Récurrence égalité W_{ArAr^+}	300K – 25000K Lissage Aubreton Récurrence égalité W_{ArAr^+}	" T Sphères Dures	" T égalité $\Omega^{(1,3)}$	300K – 25000K Lissage Chervy	300K – 25000K Lissage Chervy égalité W_{CuCu^+}	300K – 25000K Lissage Chervy égalité W_{CuCu^+}	" T Polarisation	300K – 20000K Lissage Chervy 20000K – 25000K Cste = 8,1245	300K – 25000K Lissage Chervy
W^(2,2)	300K – 17000K Lissage Pateyron 17000K – 25000K Cste = 5,2261	300K – 25000K Lissage Aubreton Récurrence	300K – 25000K Lissage Aubreton égalité W_{ArAr^+}	300K – 25000K Lissage Aubreton égalité W_{ArAr^+}	" T Sphères Dures	T<2000K [⊗] 14,990 2000K – 25000K Lennard – Jones	300K – 25000K Lissage Chervy	" T Polarisation	" T Polarisation	" T Polarisation	300K – 20000K Lissage Chervy 20000K – 25000K Cste = 9,6421	T < 500K [⊗] 0,0076 500K – 25000K Lissage Chervy
W^(2,3)	300K – 17000K Lissage Pateyron 17000K – 25000K Cste = 4,9008	300K – 25000K Lissage Aubreton Récurrence	300K – 25000K Lissage Aubreton Récurrence égalité W_{ArAr^+}	300K – 25000K Lissage Aubreton Récurrence égalité W_{ArAr^+}	" T Sphères Dures	" T égalité $\Omega^{(2,2)}$	300K – 25000K Lissage Chervy	" T Polarisation	" T Polarisation	" T Polarisation	300K – 20000K Lissage Chervy 20000K – 25000K Cste = 8,2573	300K – 25000K Lissage Chervy
W^(2,4)	300K – 600K Lissage Pateyron 600K – 15000K Lissage Aubreton 15000K – 25000K Cste = 5,2932	300K – 25000K Lissage Aubreton Récurrence	300K – 25000K Lissage Aubreton Récurrence égalité W_{ArAr^+}	300K – 25000K Lissage Aubreton Récurrence égalité W_{ArAr^+}	" T Sphères Dures	" T égalité $\Omega^{(2,2)}$	300K – 25000K Lissage Chervy	" T Polarisation	" T Polarisation	" T Polarisation	300K – 20000K Lissage Chervy 20000K – 25000K Cste = 8,1431	300K – 25000K Lissage Chervy

	$\text{Cu}_2\text{-Cu}_2$	$\text{Cu}_2\text{-Cu}^+$	$\text{Cu}_2\text{-Cu}^{2+}$	$\text{Cu}_2\text{-Cu}^{3+}$	$\text{Cu}_2\text{-Cu}^-$	$\text{Cu}_2\text{-e}$	H-H	H-H ₂	H-H ⁺	H-H	H-e	H ₂ -H ₂	H ₂ -H ⁺
$\mathbb{W}^{(1,1)}$	" T Sphères Dures	" T Sphères Dures	" T Sphères Dures	" T Sphères Dures	" T Sphères Dures	" T Sphères Dures	300K – 25000K Lissage Aubreton	300K – 25000K Lissage Aubreton	300K – 25000K Lissage Aubreton	" T Polarisation	300K ⊗ 13,0264 400K ⊗ 12,9000 500K – 25000K Lissage Aubreton	300K – 25000K Lissage Aubreton	300K – 25000K Lissage Aubreton
$\mathbb{W}^{(1,2)}$	" T Sphères Dures	" T Sphères Dures	" T Sphères Dures	" T Sphères Dures	" T Sphères Dures	" T Sphères Dures	300K – 25000K Lissage Aubreton Récurrence	300K – 25000K Lissage Aubreton Récurrence	300K – 25000K Lissage Aubreton Récurrence	" T Polarisation	300K ⊗ 13,0264 400K ⊗ 12,6839 500K – 25000K Lissage Aubreton	300K – 25000K Lissage Aubreton Récurrence	300K – 25000K Lissage Aubreton Récurrence
$\mathbb{W}^{(1,3)}$	" T Sphères Dures	" T Sphères Dures	" T Sphères Dures	" T Sphères Dures	" T Sphères Dures	" T Sphères Dures	300K – 25000K Lissage Aubreton Récurrence	300K – 25000K Lissage Aubreton Récurrence	300K – 25000K Lissage Aubreton Récurrence	" T Polarisation	300K ⊗ 12,8662 400K ⊗ 12,4869 500K – 25000K Lissage Aubreton	300K – 25000K Lissage Aubreton Récurrence	300K – 25000K Lissage Aubreton Récurrence
$\mathbb{W}^{(1,4)}$	" T Sphères Dures	" T Sphères Dures	" T Sphères Dures	" T Sphères Dures	" T Sphères Dures	" T Sphères Dures	300K – 25000K Lissage Aubreton Récurrence	300K – 25000K Lissage Aubreton Récurrence	300K – 25000K Lissage Aubreton Récurrence	" T Polarisation	300K – 16100K Lissage Aubreton 16100K – 25000K Cste = 2,0806	300K – 25000K Lissage Aubreton Récurrence	300K – 25000K Lissage Aubreton Récurrence
$\mathbb{W}^{(1,5)}$	" T Sphères Dures	" T Sphères Dures	" T Sphères Dures	" T Sphères Dures	" T Sphères Dures	" T Sphères Dures	300K – 25000K Lissage Aubreton Récurrence	300K – 25000K Lissage Aubreton Récurrence	300K – 25000K Lissage Aubreton Récurrence	" T Polarisation	300K – 15400K Lissage Aubreton 15400K – 25000K Cste = 1,6923	300K – 25000K Lissage Aubreton Récurrence	300K – 25000K Lissage Aubreton Récurrence
$\mathbb{W}^{(2,2)}$	" T Sphères Dures	" T Sphères Dures	" T Sphères Dures	" T Sphères Dures	" T Sphères Dures	" T Sphères Dures	300K ⊗ 8,7999 400K – 25000K Lissage Aubreton Récurrence	300K – 25000K Lissage Aubreton Récurrence	300K – 25000K Lissage Aubreton Récurrence	" T Polarisation	" T Polarisation	300K – 25000K Lissage Aubreton	300K – 25000K Lissage Aubreton
$\mathbb{W}^{(2,3)}$	" T Sphères Dures	" T Sphères Dures	" T Sphères Dures	" T Sphères Dures	" T Sphères Dures	" T Sphères Dures	300K – 25000K Lissage Aubreton Récurrence	300K – 25000K Lissage Aubreton Récurrence	300K ⊗ 19,9294 400K ⊗ 19,5690 500K – 25000K Lissage Aubreton Récurrence	" T Polarisation	" T Polarisation	300K – 25000K Lissage Aubreton Récurrence	300K – 25000K Lissage Aubreton Récurrence
$\mathbb{W}^{(2,4)}$	" T Sphères Dures	" T Sphères Dures	" T Sphères Dures	" T Sphères Dures	" T Sphères Dures	" T Sphères Dures	300K ⊗ 8,6783 400K ⊗ 8,3777 500K – 25000K Lissage Aubreton Récurrence	300K ⊗ 6,0172 400K – 25000K Lissage Aubreton Récurrence	300K ⊗ 31,4166 400K ⊗ 27,9216 500K – 25000K Lissage Aubreton Récurrence	" T Polarisation	" T Polarisation	300K ⊗ 7,4660 400K – 25000K Lissage Aubreton Récurrence	300K – 25000K Lissage Aubreton Récurrence

	H_2-H	H_2-e	Ar-Cu	Ar-Cu ₂	Cu ₂ -Ar ⁺	Cu ₂ -Ar ²⁺	Cu ₂ -Ar ³⁺	Ar-Cu ⁺	Ar-Cu ²⁺	Ar-Cu ³⁺	Ar-Cu ⁻	Cu-Ar ⁺	Cu-Ar ²⁺	Cu-Ar ³⁺
$W^{(1,1)}$	300K – 25000K <i>Lissage Aubreton</i>	300K ⊗ 2,5807 400K ⊗ 2,6171 500K – 25000K <i>Lissage Aubreton</i>	" T <i>Lennard - Jones</i>	" T <i>Sphères Dures</i>	" T <i>Sphères Dures</i>	" T <i>Sphères Dures</i>	" T <i>Sphères Dures</i>	" T <i>Polarisation</i>						
$W^{(1,2)}$	300K – 25000K <i>Lissage Aubreton</i> <i>Récurrance</i>	300K ⊗ 3,5500 400K ⊗ 3,6122 500K – 25000K <i>Lissage Aubreton</i>	" T <i>Lennard - Jones</i>	" T <i>Sphères Dures</i>	" T <i>Sphères Dures</i>	" T <i>Sphères Dures</i>	" T <i>Sphères Dures</i>	" T <i>Polarisation</i>						
$W^{(1,3)}$	300K – 25000K <i>Lissage Aubreton</i> <i>Récurrance</i>	300K ⊗ 3,6819 400K ⊗ 3,7620 500K – 25000K <i>Lissage Aubreton</i>	" T <i>Lennard - Jones</i>	" T <i>Sphères Dures</i>	" T <i>Sphères Dures</i>	" T <i>Sphères Dures</i>	" T <i>Sphères Dures</i>	" T <i>Polarisation</i>						
$W^{(1,4)}$	300K – 25000K <i>Lissage Aubreton</i> <i>Récurrance</i>	300K ⊗ 3,7523 400K ⊗ 3,8760 500K – 25000K <i>Lissage Aubreton</i>	" T <i>égalité Ω^{1,3}</i>	" T <i>Sphères Dures</i>	" T <i>Sphères Dures</i>	" T <i>Sphères Dures</i>	" T <i>Sphères Dures</i>	" T <i>Polarisation</i>						
$W^{(1,5)}$	300K – 25000K <i>Lissage Aubreton</i> <i>Récurrance</i>	300K ⊗ 3,7893 400K ⊗ 3,9652 500K – 25000K <i>Lissage Aubreton</i>	" T <i>égalité Ω^{1,3}</i>	" T <i>Sphères Dures</i>	" T <i>Sphères Dures</i>	" T <i>Sphères Dures</i>	" T <i>Sphères Dures</i>	" T <i>Polarisation</i>						
$W^{(2,2)}$	300K ⊗ 46,9077 400K ⊗ 41,9455 500K – 25000K <i>Lissage Aubreton</i>	" T <i>Polarisation</i>	" T <i>Lennard - Jones</i>	" T <i>Sphères Dures</i>	" T <i>Sphères Dures</i>	" T <i>Sphères Dures</i>	" T <i>Sphères Dures</i>	" T <i>Polarisation</i>						
$W^{(2,3)}$	300K ⊗ 36,4213 400K ⊗ 32,9216 500K – 25000K <i>Lissage Aubreton</i> <i>Récurrance</i>	" T <i>Polarisation</i>	" T <i>égalité Ω^{2,2}</i>	" T <i>Sphères Dures</i>	" T <i>Sphères Dures</i>	" T <i>Sphères Dures</i>	" T <i>Sphères Dures</i>	" T <i>Polarisation</i>						
$W^{(2,4)}$	300K ⊗ 54,371 400K ⊗ 45,8144 500K – 25000K <i>Lissage Aubreton</i> <i>Récurrance</i>	" TPolarisation	" T <i>égalité Ω^{2,2}</i>	" T <i>Sphères Dures</i>	" T <i>Sphères Dures</i>	" T <i>Sphères Dures</i>	" T <i>Sphères Dures</i>	" T <i>Polarisation</i>						

	Ar-H	Ar-H ₂	Ar-H ⁺	Ar-H	H ₂ -Ar ⁺	H ₂ -Ar ²⁺	H ₂ -Ar ³⁺	H-Ar ⁺	H-Ar ²⁺	H-Ar ³⁺	H-Cu ₂	H ₂ -Cu	H ₂ -Cu ₂
W^(1,1)	300K – 2500K <i>Lissage Aubreton</i>	300K – 1500K <i>Lissage Aubreton</i> Récurrence 15000K – 25000K <i>Cste = 4,2554</i>	300K – 1500K <i>Lissage Aubreton</i> 15000K – 25000K <i>Cste = 6,3785</i>	" T <i>Polarisation</i>	300K – 2500K <i>Lissage Aubreton</i>	300K – 2500K <i>Lissage Aubreton</i>	300K – 2500K <i>Lissage Aubreton</i>	" T <i>Polarisation</i>	" T <i>Polarisation</i>	" T <i>Polarisation</i>	" T <i>Sphères Dures</i>	" T <i>Lennard - Jones</i>	" T <i>Sphères Dures</i>
W^(1,2)	300K – 2500K <i>Lissage Aubreton</i> Récurrence	300K – 1360K <i>Lissage Aubreton</i> Récurrence 13600K – 25000K <i>Cste = 3,9351</i>	300K – 1400K <i>Lissage Aubreton</i> 14000K – 25000K <i>Polarisation</i>	" T <i>Polarisation</i>	300K – 2500K <i>Lissage Aubreton</i> Récurrence	300K – 2500K <i>Lissage Aubreton</i> Récurrence	300K – 2500K <i>Lissage Aubreton</i> Récurrence	" T <i>Polarisation</i>	" T <i>Polarisation</i>	" T <i>Polarisation</i>	" T <i>Sphères Dures</i>	" T <i>Lennard - Jones</i>	" T <i>Sphères Dures</i>
W^(1,3)	300K – 2500K <i>Lissage Aubreton</i> Récurrence	300K – 1280K <i>Lissage Aubreton</i> Récurrence 12800K – 25000K <i>Cste = 3,5774</i>	300K – 1100K <i>Lissage Aubreton</i> 11000K – 25000K <i>Polarisation</i>	" T <i>Polarisation</i>	300K – 2500K <i>Lissage Aubreton</i> Récurrence	300K – 2500K <i>Lissage Aubreton</i> Récurrence	300K – 2500K <i>Lissage Aubreton</i> Récurrence	" T <i>Polarisation</i>	" T <i>Polarisation</i>	" T <i>Polarisation</i>	" T <i>Sphères Dures</i>	" T <i>Lennard - Jones</i>	" T <i>Sphères Dures</i>
W^(1,4)	300K – 2500K <i>Lissage Aubreton</i> Récurrence	300K – 1210K <i>Lissage Aubreton</i> Récurrence 12100K – 25000K <i>Cste = 3,0194</i>	" T <i>Polarisation</i>	" T <i>Polarisation</i>	300K – 2500K <i>Lissage Aubreton</i> Récurrence	300K – 2500K <i>Lissage Aubreton</i> Récurrence	300K – 2500K <i>Lissage Aubreton</i> Récurrence	" T <i>Polarisation</i>	" T <i>Polarisation</i>	" T <i>Polarisation</i>	" T <i>Sphères Dures</i>	" T <i>égalité Ω^(1,3)</i>	" T <i>Sphères Dures</i>
W^(1,5)	300K – 2500K <i>Lissage Aubreton</i> Récurrence	300K – 1140K <i>Lissage Aubreton</i> Récurrence 11400K – 25000K <i>Cste = 2,1470</i>	" T <i>Polarisation</i>	" T <i>Polarisation</i>	300K – 2500K <i>Lissage Aubreton</i> Récurrence	300K – 2500K <i>Lissage Aubreton</i> Récurrence	300K – 2500K <i>Lissage Aubreton</i> Récurrence	" T <i>Polarisation</i>	" T <i>Polarisation</i>	" T <i>Polarisation</i>	" T <i>Sphères Dures</i>	" T <i>égalité Ω^(1,3)</i>	" T <i>Sphères Dures</i>
W^(2,2)	300K – 2500K <i>Lissage Aubreton</i>	300K – 1490K <i>Lissage Aubreton</i> 14900K – 25000K <i>Cste = 5,0456</i>	300K – 1500K <i>Lissage Aubreton</i> 15000K – 25000K <i>Cste = 7,2511</i>	" T <i>Polarisation</i>	300K – 2500K <i>Lissage Aubreton</i>	300K – 2500K <i>Lissage Aubreton</i>	300K – 2500K <i>Lissage Aubreton</i>	" T <i>Polarisation</i>	" T <i>Polarisation</i>	" T <i>Polarisation</i>	" T <i>Sphères Dures</i>	" T <i>Lennard - Jones</i>	" T <i>Sphères Dures</i>
W^(2,3)	300K – 2500K <i>Lissage Aubreton</i> Récurrence	300K – 1380K <i>Lissage Aubreton</i> Récurrence 13800K – 25000K <i>Cste = 4,8169</i>	300K – 1500K <i>Lissage Aubreton</i> Récurrence 15000K – 25000K <i>Cste = 6,1335</i>	" T <i>Polarisation</i>	300K – 2500K <i>Lissage Aubreton</i> Récurrence	300K – 2500K <i>Lissage Aubreton</i> Récurrence	300K – 2500K <i>Lissage Aubreton</i> Récurrence	" T <i>Polarisation</i>	" T <i>Polarisation</i>	" T <i>Polarisation</i>	" T <i>Sphères Dures</i>	" T <i>égalité Ω^(2,2)</i>	" T <i>Sphères Dures</i>
W^(2,4)	300K [®] 9,2711 400K – 2500K <i>Lissage Aubreton</i> Récurrence	300K – 1280K <i>Lissage Aubreton</i> Récurrence 12800K – 25000K <i>Cste = 5,1750</i>	300K – 1340K <i>Lissage Aubreton</i> Récurrence 13400K – 25000K <i>Cste = 8,0961</i>	" T <i>Polarisation</i>	300K – 2500K <i>Lissage Aubreton</i> Récurrence	300K – 2500K <i>Lissage Aubreton</i> Récurrence	300K – 2500K <i>Lissage Aubreton</i> Récurrence	" T <i>Polarisation</i>	" T <i>Polarisation</i>	" T <i>Polarisation</i>	" T <i>Sphères Dures</i>	" T <i>égalité Ω^(2,2)</i>	" T <i>Sphères Dures</i>

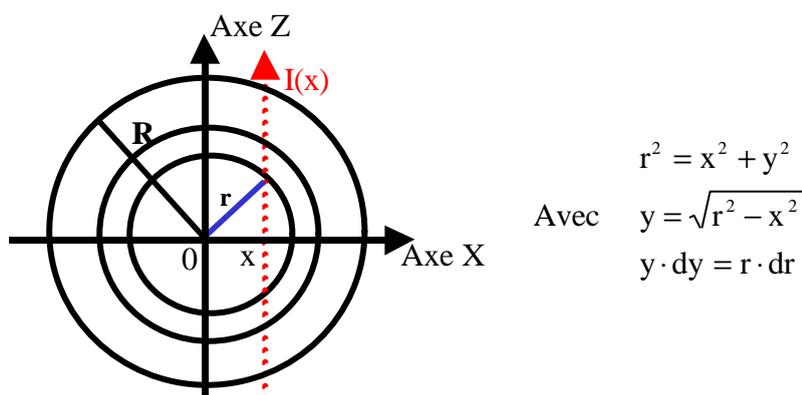
	H-Cu	Cu-H⁺	Cu-H	H-Cu⁺	H-Cu²⁺	H-Cu³⁺	H-Cu⁻	Cu₂-H⁺	Cu₂-H	H₂-Cu⁺	H₂-Cu²⁺	H₂-Cu³⁺	H₂-Cu⁻
W^(1,1)	" T <i>Lennard - Jones</i>	" T <i>Polarisation</i>	" T <i>Sphères Dures</i>	" T <i>Sphères Dures</i>	300K – 25000K <i>Lissage Aubreton</i>	300K – 25000K <i>Lissage Aubreton</i>	300K – 25000K <i>Lissage Aubreton</i>	300K – 25000K <i>Lissage Aubreton</i>					
W^(1,2)	" T <i>Lennard - Jones</i>	" T <i>Polarisation</i>	" T <i>Sphères Dures</i>	" T <i>Sphères Dures</i>	300K – 25000K <i>Lissage Aubreton</i>	300K – 25000K <i>Lissage Aubreton</i> <i>Récurrance</i>	300K – 25000K <i>Lissage Aubreton</i> <i>Récurrance</i>	300K – 25000K <i>Lissage Aubreton</i> <i>Récurrance</i>					
W^(1,3)	" T <i>Lennard - Jones</i>	" T <i>Polarisation</i>	" T <i>Sphères Dures</i>	" T <i>Sphères Dures</i>	300K – 25000K <i>Lissage Aubreton</i>	300K – 25000K <i>Lissage Aubreton</i> <i>Récurrance</i>	300K – 25000K <i>Lissage Aubreton</i> <i>Récurrance</i>	300K – 25000K <i>Lissage Aubreton</i> <i>Récurrance</i>					
W^(1,4)	" T <i>égalité Ω^(1,3)</i>	" T <i>Polarisation</i>	" T <i>Sphères Dures</i>	" T <i>Sphères Dures</i>	300K – 25000K <i>Lissage Aubreton</i>	300K – 25000K <i>Lissage Aubreton</i> <i>Récurrance</i>	300K – 25000K <i>Lissage Aubreton</i> <i>Récurrance</i>	300K – 25000K <i>Lissage Aubreton</i> <i>Récurrance</i>					
W^(1,5)	" T <i>égalité Ω^(1,3)</i>	" T <i>Polarisation</i>	" T <i>Sphères Dures</i>	" T <i>Sphères Dures</i>	300K – 25000K <i>Lissage Aubreton</i>	300K – 25000K <i>Lissage Aubreton</i> <i>Récurrance</i>	300K – 25000K <i>Lissage Aubreton</i> <i>Récurrance</i>	300K – 25000K <i>Lissage Aubreton</i> <i>Récurrance</i>					
W^(2,2)	" T <i>Lennard - Jones</i>	" T <i>Polarisation</i>	" T <i>Sphères Dures</i>	" T <i>Sphères Dures</i>	300K – 25000K <i>Lissage Aubreton</i>	300K – 25000K <i>Lissage Aubreton</i>	300K – 25000K <i>Lissage Aubreton</i>	300K – 25000K <i>Lissage Aubreton</i>					
W^(2,3)	" T <i>égalité Ω^(2,2)</i>	" T <i>Polarisation</i>	" T <i>Sphères Dures</i>	" T <i>Sphères Dures</i>	300K – 25000K <i>Lissage Aubreton</i>	300K – 25000K <i>Lissage Aubreton</i> <i>Récurrance</i>	300K – 25000K <i>Lissage Aubreton</i> <i>Récurrance</i>	300K – 25000K <i>Lissage Aubreton</i> <i>Récurrance</i>					
W^(2,4)	" T <i>égalité Ω^(2,2)</i>	" T <i>Polarisation</i>	" T <i>Sphères Dures</i>	" T <i>Sphères Dures</i>	300K – 25000K <i>Lissage Aubreton</i>	300K – 25000K <i>Lissage Aubreton</i> <i>Récurrance</i>	300K – 25000K <i>Lissage Aubreton</i> <i>Récurrance</i>	300K – 25000K <i>Lissage Aubreton</i> <i>Récurrance</i>					

ANNEXE A9

Rappels sur la méthode de l'inversion d'Abel

Le plasma est considéré optiquement mince et de révolution autour d'un axe vertical. Dans la plupart des situations expérimentales, il n'est pas possible d'obtenir directement les valeurs locales de l'émissivité, seules grandeurs pouvant éventuellement être interprétées physiquement. En effet, si nous observons l'intensité d'une raie spectrale suivant une corde, les grandeurs mesurées correspondent en fait à des sommes de valeurs locales qui caractérisent les points situés sur l'axe de la visée. Or, par un traitement mathématique, nous pouvons remonter aux intensités radiales connaissant la valeur intégrée sur une corde. De plus, pour simplifier les calculs, nous supposons que selon la direction de visée, le plasma est vu depuis l'instrument de mesure sous un angle solide tendant vers zéro ce qui n'est pas toujours le cas dans les montages expérimentaux.

Supposons alors une corde de plasma vue par un observateur selon une direction repérée par la cote x . L'intensité émise $I(x)$ correspond à la somme des énergies des photons suivant cette corde dont la distance au centre du plasma de rayon R est x .



L'intensité $I(x)$ peut s'écrire en fonction de l'intensité radiale $J(r)$ à la distance r du centre sous la forme :

$$I(x) = 2 \int_x^R \frac{J(r) \cdot r \cdot dr}{\sqrt{(r^2 - x^2)}} \quad (A9-1)$$

Etant donné que la valeur recherchée est $J(r)$, en appliquant la transformation mathématique connue sous le nom de la transformation d'Abel, $J(r)$ s'obtient par la relation :

$$J(r) = \frac{-1}{\pi} \int_r^R \frac{I(x) \cdot dx}{\sqrt{(x^2 - r^2)}} \quad (A9-2)$$

Ne connaissant pas $I(x)$ en tout point, il n'est donc pas possible d'en connaître sa dérivée et par conséquent d'obtenir exactement $J(r)$. **Mermet et Robin** proposent alors différentes méthodes de calculs approchés permettant d'obtenir $J(r)$. Après études de celles-ci par ces derniers, il s'avère que les valeurs calculées par les méthodes numériques s'améliorent quand

un lissage préalable des données expérimentales est effectué par la méthode des moindres carrés (technique de Spline). $I(x)$ étant sous forme polynomiale, sa dérivée le sera également, permettant ainsi un calcul plus exact de $J(r)$ par intégration. Une fois les valeurs de $I(x)$ obtenues, nous avons donc lissé ces données sous la forme d'un polynôme du type :

$$I(x) = a_0 + a_1x + a_2x^2 + a_3x^3 + \dots + a_nx^n \quad (A9-3)$$

D'après les études de *Mermet et Robin*, il est préférable de lisser ces valeurs avec un degré de polynôme compris entre $n=4$ et $n=6$. Dans nos calculs, le degré de polynôme sera toujours considéré égal à $n=6$. De plus, du fait de la géométrie cylindrique du plasma, nous devons avoir une tangente nulle sur l'axe. Pour cela, nous imposons une dérivée nulle au centre du plasma en $x = 0$ qui nous donne un coefficient $a_1=0$. Enfin, notre aire calculée devant être symétrique par rapport à l'axe vertical, nous sommes obligés quelque fois d'effectuer une translation dans le but d'obtenir une aire quasi-identique de part et d'autre de l'axe pour ne lisser et n'étudier que la partie droite ou gauche du plasma pour chaque lissage et chaque raie étudiée. Connaissant $I(x)$ sous forme polynomiale, nous pouvons dans ce cas intégrer sa dérivée pour obtenir $J(r)$:

$$J(r) = \frac{-1}{\pi} \int_r^R \frac{2a_2x + 3a_3x^2 + 4a_4x^3 + 5a_5x^4 + 6a_6x^5}{\sqrt{(x^2 - r^2)}} \cdot dx \quad (A9-4)$$

Je rappelle ici les relations d'intégration utiles au calcul de cette intégrale :

$$\begin{aligned} \int \frac{dx}{\sqrt{(x^2 - r^2)}} &= \text{Log}(x + \sqrt{x^2 - r^2}) \\ \int \frac{x}{\sqrt{(x^2 - r^2)}} \cdot dx &= \sqrt{x^2 - r^2} \\ \int \frac{x^2 dx}{\sqrt{(x^2 - r^2)}} &= \frac{x}{2} \sqrt{x^2 - r^2} + \frac{r^2}{2} \text{Log}(x + \sqrt{x^2 - r^2}) \\ \int \frac{x^3 dx}{\sqrt{(x^2 - r^2)}} &= \frac{x^2 + 2r^2}{3} \sqrt{x^2 - r^2} \\ \int \frac{x^4 dx}{\sqrt{(x^2 - r^2)}} &= \frac{x}{4} \left(x^2 + \frac{3r^2}{2} \right) \sqrt{x^2 - r^2} + \frac{3r^4}{8} \text{Log}(x + \sqrt{x^2 - r^2}) \\ \int \frac{x^5 dx}{\sqrt{(x^2 - r^2)}} &= \frac{3x^4 + 4r^2(x^2 + 2r^2)}{15} \sqrt{x^2 - r^2} \end{aligned} \quad (A9-5)$$

En utilisant ces relations dans l'expression (A9-4) et $A = \sqrt{R^2 - r^2}$, nous obtenons finalement:

$$J(r) = \frac{-1}{\pi} \cdot \left(\frac{3}{2} a_3 r^2 + \frac{15}{8} a_5 r^4 \right) \cdot \left(\text{Ln} \frac{R+A}{r} \right) + A \cdot \left[2a_2 + \frac{3a_3}{2} R + \frac{4a_4(R^2 + 2r^2)}{3} + \frac{5a_5 R(R^2 + \frac{3}{2} r^2)}{4} + \frac{2}{5} a_6 (3R^4 + 4R^2 r^2 + 8r^4) \right]$$

