

MODÉLISATION NUMÉRIQUE D'UNE DÉCHARGE LUMINESCENTE A BARRIÈRE DIÉLECTRIQUE ÉTABLIE A LA PRESSION ATMOSPHÉRIQUE

Ahmed SARIDJ, Ahmed Wahid BELARBI et Mohamed MANKOUR

*Laboratoire des Décharges Electriques et de leurs Applications, Département d'Electrotechnique,
Faculté de Génie Electrique, Université des Sciences et de la Technologie d'Oran, MB,
B.P. 1505 El M'Naouer, 31000 Oran, Algérie*

E-mail: saridj_ahmed@yahoo.com

RÉSUMÉ : La décharge lumineuse à barrière diélectrique(DLBD) permet de produire un plasma froid à la pression atmosphérique. Ce type de décharge et à cause de sa structure homogène, offre un intérêt dans un grand nombre d'applications industrielles. Parmi les applications, nous pouvons citer par exemple, l'activation et le traitement homogène de surface. Ce travail concerne le sujet de la modélisation numérique de la (DLBD). Le plasma est généré dans l'hélium sous excitation basse fréquence entre deux électrodes planes et parallèles et isolées par un diélectrique. Cette modélisation numérique est auto-cohérente basée sur un approche macroscopique ou « fluide », en utilisant l'approximation du champ électrique local. La technique de résolution utilisée est basée sur les différences finies avec un schéma implicite. Les densités des différentes particules (chargées ou excitées) prises en compte sont alors décrites par l'équation de convection-diffusion. Les paramètres de transport (vitesse de dérive, coefficient de diffusion) et les coefficients d'ionisation et d'excitation sont fonction du champ électrique local calculé par résolution de l'équation de Poisson. Les résultats du modèle confirment l'existence à la pression atmosphérique d'un régime lumineux homogène identique à celui habituellement obtenu à basse pression. L'étude des variations spatiotemporelles du champ électrique, et des densités des particules a permis d'améliorer la compréhension des phénomènes physiques gouvernant le fonctionnement de ce type de décharge.

MOTS-CLÉS : plasma froid, décharge lumineuse, traitement de surface, pression atmosphérique, modèle fluide, barrière diélectrique

1. Introduction

Les procédés basés sur les plasmas froids à la pression atmosphérique sont largement utilisés dans l'industrie, que ce soit dans le domaine du traitement de surface, de rayonnement ultra violet et le laser CO₂..., ces plasmas sont générés dans les réacteurs industriels à partir de Décharges contrôlées par Barrières Diélectriques (DBD) dans l'air, également appelées décharges « corona ». Un autre régime de décharge à barrière diélectrique a été mis en évidence dans l'hélium il y a quelques années et pourrait être employé comme un substitut aux décharges filamenteuses coronas traditionnelles, c'est le régime de décharge lumineuse [1]. La décharge possède alors une structure proche des décharges lumineuses à basse pression. L'intérêt de ce régime de décharge, est sa structure homogène qui autorise un traitement uniforme de la surface contrairement aux DBD filamenteuses.

En raison de la puissance actuelle des moyens de calculs et du développement de méthodes numériques de plus en plus performantes, la modélisation numérique devient un outil indispensable pour calculer les grandeurs non accessibles par l'expérience telle que les densités des différentes particules (chargées ou excitées) et le champ électrique.

Dans cet article, nous avons développé un modèle numérique monodimensionnel dont le but est d'étudier les propriétés de la (DLBD) et de comprendre les mécanismes physiques fondamentaux qui la régissent.

2. Modèle mathématique

La description théorique la plus fine du comportement des particules qui caractérisent le fonctionnement d'une décharge électrique nécessite la résolution de l'ensemble des équations cinétiques (appelées le plus souvent équation de transport des particules) associées à chacune de ces particules. L'équation fondamentale rendant compte de l'évolution spatiale et temporelle de la densité des particules est l'équation de continuité qui prend globalement la même forme pour les électrons et les ions. On obtient les équations suivantes :

Pour les électrons :

$$\frac{\partial n_e(\vec{r}, t)}{\partial t} + \frac{\partial(\vec{w}_e(\vec{r}, t)n_e(\vec{r}, t))}{\partial \vec{r}} - \frac{\partial}{\partial \vec{r}} \left[\vec{D}_e(\vec{r}, t) \frac{\partial n_e(\vec{r}, t)}{\partial \vec{r}} \right] = S_e(\vec{r}, t) \quad (1)$$

Avec $n_e(\vec{r}, t)$, $w_e(\vec{r}, t)$, $\vec{D}_e(\vec{r}, t)$ et $S_e(\vec{r}, t)$ sont respectivement la densité, la vitesse de dérive, la diffusion et le terme source des électrons.

Pour les ions :

$$\frac{\partial n_p(\vec{r}, t)}{\partial t} + \frac{\partial(\vec{w}_p(\vec{r}, t)n_p(\vec{r}, t))}{\partial \vec{r}} - \frac{\partial}{\partial \vec{r}} \left[\vec{D}_p(\vec{r}, t) \frac{\partial n_p(\vec{r}, t)}{\partial \vec{r}} \right] = S_p(\vec{r}, t) \quad (2)$$

Avec $n_p(\vec{r}, t)$, $w_p(\vec{r}, t)$, $\vec{D}_p(\vec{r}, t)$ et $S_p(\vec{r}, t)$ sont respectivement la densité, la vitesse de dérive, la diffusion et le terme source des ions.

Ces équations permettent de déterminer l'évolution spatio-temporelle des densités électroniques et ioniques moyennant la connaissance des vitesses de dérive, des coefficients de diffusion et des fréquences d'ionisation de chacune des particules chargées.

Les deux équations ci-dessus sont appelées équations de convection-diffusion car elles sont constituées d'un terme convectif (du 1^{er} ordre par rapport à la dérivée spatiale) et d'un terme de diffusion (du second ordre par rapport à la dérivée spatiale).

Dans les décharges luminescentes, la charge d'espace due à la présence d'ions et d'électrons est suffisante pour distordre le champ électrique géométrique. Ce phénomène doit être décrit en couplant les équations de transport électronique et ionique avec l'équation de Poisson pour le champ électrique. L'équation de Poisson s'écrit :

$$\frac{\partial \vec{E}}{\partial \vec{r}} = \frac{e}{\epsilon_0} [n_p(\vec{r}, t) - n_e(\vec{r}, t)] \quad (3)$$

L'équation de Boltzmann couplé à celle de Poisson forme un modèle électrique auto-cohérent de la décharge. Il décrit l'évolution spatio-temporelle de ces valeurs moyennes.

L'équation de convection-diffusion pour les espèces neutres et excitées est donnée par :

$$\frac{\partial \bar{n}_m(\vec{r}, t)}{\partial t} - \frac{\partial}{\partial \vec{r}} \left[\vec{D}_m(\vec{r}, t) \frac{\partial \bar{n}_m(\vec{r}, t)}{\partial \vec{r}} \right] = S_m(\vec{r}, t) \quad (4)$$

$\bar{n}_m(\vec{r}, t)$, $\vec{D}_m(\vec{r}, t)$ et $S_m(\vec{r}, t)$ sont respectivement la densité, la diffusion et le terme source des particules de type m [2].

2. 1. Termes sources des équations de transport

Les expressions des termes sources des électrons, des ions et des espèces neutres et excitées contiennent les taux de réactions et les fréquences d'ionisation et d'excitation ainsi que les différentes densités de particules.

Le terme source pour les électrons et les ions est donné par la relation suivante :

$$S_e(\vec{r}, t) = S_p(\vec{r}, t) = n_e(\vec{r}, t) \alpha_{\text{ionisation}}(\vec{E}) N_{\text{gaz}} \mu_e |\vec{E}| + n_m(\vec{r}, t) n_e(\vec{r}, t) \alpha_{\text{desexcitation}}(\vec{E}) + \alpha_{\text{ionisation-penning}} n_m(\vec{r}, t) n_{\text{impureté}} \quad (5)$$

Le terme source pour les particules neutres et excitées donné par l'expression suivante :

$$S_m(\vec{r}, t) = n_e(\vec{r}, t) \alpha_{\text{excitation}}(\vec{E}) N_{\text{gaz}} \mu_e |\vec{E}| - n_m(\vec{r}, t) n_e(\vec{r}, t) \alpha_{\text{desexcitation}}(\vec{E}) + \alpha_{\text{ionisation-penning}} n_{\text{impureté}} \quad (6)$$

Les fréquences et les taux des réactions apparaissent dans le terme source sont donnés selon les travaux de Saki yama et Graves [3], par les relations suivantes :

$$\begin{cases} \alpha_{ionisation} = 4.75 \times 10^{-16} \cdot \exp(-2,31 \times 10^6 / E) \\ \alpha_{desexcitat\ ion} = 2.02 \times 10^{-13} \cdot \exp(-3,10 \times 10^5 / E) \\ \alpha_{excitation} = 3.88 \times 10^{-16} \cdot \exp(-1,40 \times 10^6 / E) \\ \alpha_{ionisation - penning} = 5 \times 10^{-17} \end{cases} \quad m^3 s^{-1} \quad (7)$$

3. Modèle numérique

Nous résolvons l'équation de continuité à partir de la méthode des différences finies basée sur le schéma de discrétisation de Sharfetter et Gummel. Son principal avantage est lié à sa stabilité, et au fait qu'il peut rendre compte de façon continue de situation où soit le terme de dérive, soit le terme de diffusion des courants de particule chargée est dominant. Ce schéma nous permet de discrétiser l'équation de continuité implicitement.

Les densités de particules chargées sont définies au centre de la cellule (k, i), Figure 1. Dans l'équation de continuité et dans celle de transfert de quantité de mouvement, les flux des particules suivant l'axe des x sont définis entre les points (k, i) et (k, i+1) et (k, i) et (k, i-1) et (k+1, i) et (k+1, i+1) et (k+1, i) et (k+1, i-1) respectivement et donc notés : $\Gamma_{i+1/2}^k$, $\Gamma_{i-1/2}^k$, $\Gamma_{i+1/2}^{k+1}$ et $\Gamma_{i-1/2}^{k+1}$ [4].

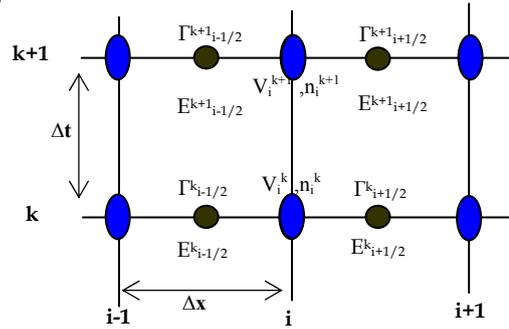


Figure 1 : Maillage du modèle numérique.

La discrétisation d'équations de continuité pour les densités des particules chargées (électrons et ions) et des flux est la suivantes :

$$\frac{n_i^{k+1} - n_i^k}{\Delta t} + \frac{\Gamma_{i+1/2}^{k+1} - \Gamma_{i-1/2}^{k+1}}{\Delta x} = S_i^k \quad (8)$$

$$\Gamma_{i+1/2}^{k+1} = \frac{Y_{i+1}^{k+1} - Y_i^{k+1} \exp\left(\frac{w_{i+1/2}^k}{D_{i+1/2}^{k+1}} \Delta x\right)}{\frac{D_{i+1/2}^{k+1}}{w_{i+1/2}^k} \left(1 - \exp\left(\frac{w_{i+1/2}^k}{D_{i+1/2}^{k+1}} \Delta x\right)\right)} \quad (9)$$

$$\text{Avec} \quad \begin{cases} w_{i+1/2}^k = \mu_{i+1/2}^k \cdot E_{i+1/2}^k \\ Y_{i+1}^{k+1} = n_{i+1}^{k+1} \cdot D_{i+1}^k \\ E_{i+1/2}^k = - \frac{V_{i+1}^k - V_i^k}{\Delta x} \\ Y_i^{k+1} = n_i^{k+1} \cdot D_i^k \end{cases} \quad (10)$$

$$\Gamma_{i+1/2}^{k+1} = \frac{(n_{i+1}^{k+1} \cdot D_{i+1}^k - n_i^{k+1} \cdot D_i^k \exp(T_1)) T_1}{\Delta x^2 (1 - \exp(T_1))} \quad (11)$$

$$T_1 = -s \frac{\mu_{i+1/2}^k}{D_{i+1/2}^k} (V_{i+1}^k - V_i^k) \quad (12)$$

De la même manière on détermine $\Gamma_{i-1/2}^{k+1}$ et T_2 .

$$\Gamma_{i-1/2}^{k+1} = \frac{(n_i^{k+1} \cdot D_i^k - n_{i-1}^{k+1} \cdot D_{i-1}^k \exp(T_2)) T_2}{\Delta x^2 (1 - \exp(T_2))} \quad (13)$$

$$T_2 = -s \frac{\mu_{i-1/2}^k}{D_{i-1/2}^k} (V_i^k - V_{i-1}^k) \quad (14)$$

Sur l'intervalle $[x_i, x_{i+1}]$, on suppose que les coefficients de diffusion et les mobilités sont constantes. L'équation de transport (8) discrétisée est de la forme suivante [5]:

$$n_{i-1}^{k+1} \left[-\frac{D_i \exp(T_2)}{\Delta x^2} \frac{T_2}{\exp(T_2) - 1} \right] + n_i^{k+1} \left[\frac{1}{\Delta t} + \frac{D_i \exp(T_1)}{\Delta x^2} \frac{T_1}{\exp(T_1) - 1} + \frac{D_i}{\Delta x^2} \frac{T_2}{\exp(T_2) - 1} \right] + n_{i+1}^{k+1} \left[-\frac{D_i}{\Delta x^2} \frac{T_1}{\exp(T_1) - 1} \right] = S_i^k + \frac{n_i^k}{\Delta t} \quad (15)$$

L'équation de transport discrétisée pour les particules neutres et excitées est de la forme :

$$n_{i-1}^{k+1} \left[-\frac{D_i^{k+1}}{\Delta x} \right] + n_i^{k+1} \left[-\left(\frac{2 \cdot D_i^{k+1}}{\Delta x^2} \right) + \frac{1}{\Delta t} \right] + n_{i+1}^{k+1} \left[-\frac{D_i^{k+1}}{\Delta x} \frac{1}{\Delta t} \right] = S_i^k + n_i^k \frac{1}{\Delta t} \quad (16)$$

Les équations discrétisées (15) et (16) montre que n_i^k connu à l'instant k est fonction de n_{i-1}^{k+1} , n_i^{k+1} et n_{i+1}^{k+1} inconnus à l'instant $k+1$. Ce système d'équation implicite est de la forme suivante :

$$a_i n_{i-1}^{k+1} + b_i n_i^{k+1} + c_i n_{i+1}^{k+1} = d_i \quad (17)$$

L'équation (17) est donc un système linéaire à matrice tri diagonale qui peut être résolue par l'algorithme de Thomas [6].

La forme discrétisée de l'équation de Poisson est :

$$\frac{-1}{q_c} \left(\frac{V_{i+1}^{k+1} - 2V_i^{k+1} + V_{i-1}^{k+1}}{\Delta x^2} \right) = \left(n_i^{k+1} \Big|_{ions} - n_i^{k+1} \Big|_{électrons} \right) \quad (18)$$

$$\text{Avec } q_c = \frac{\varepsilon_0}{e}$$

4. Conditions initiales et aux limites

Dans notre modèle, la variation des densités ionique et électronique sont supposées égales à zéro sur les électrodes. La température et la pression du système sont constantes et égales respectivement à 300 K et 760 Torr. Les densités initiales électronique et ionique $n_e = n_p = 10^6 \text{ cm}^{-3}$. On suppose que les flux de particules chargées vers les parois du domaine de simulation sont nuls ce que l'on traduit par des conditions aux limites symétriques $\Gamma_e \bar{n} = 0$. Par contre le flux de particules chargées vers le diélectrique a été écrit sous la forme :

$$\Gamma_{e,p} = A n_{e,p} w_{e,p} + \frac{n_{e,p} v_{th-e,p}}{4} \quad (19)$$

$v_{th-e,p}$ est la vitesse d'agitation thermique des particules considérées. A un paramètre égal à 1 si $w_{e,p}$ est dirigé vers la paroi sinon égal à zéro. Le flux électronique à la cathode est proportionnel au flux ionique $\Gamma_e = \gamma_{émission} \cdot \Gamma_p$, $\gamma_{émission}$ est le coefficient d'émission secondaire.

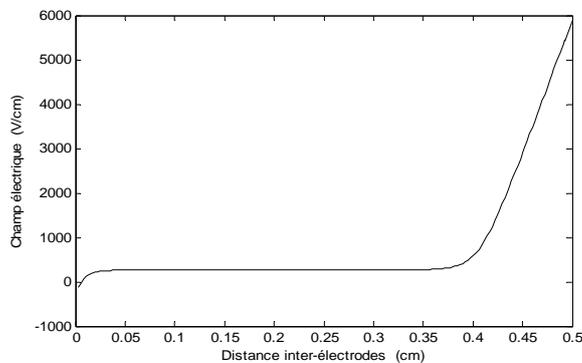
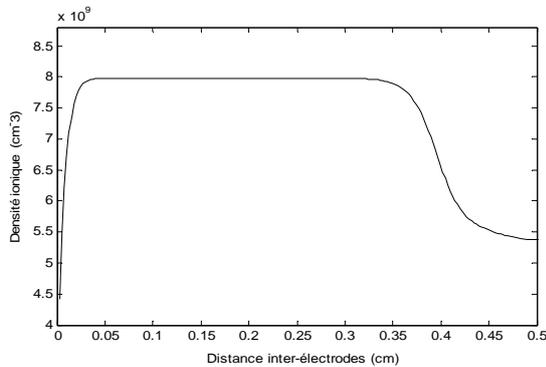
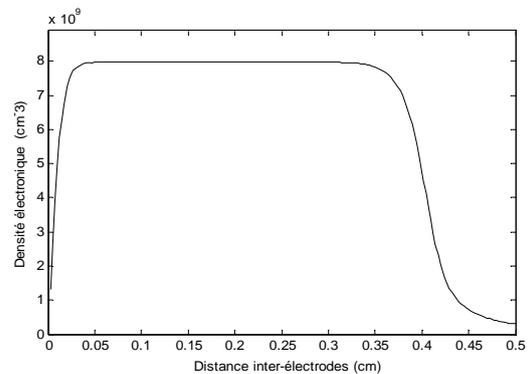
Les paramètres de transport utilisés dans notre code pour l'hélium sont :

Tableau 1 : Paramètres de transport dans l'hélium

| Paramètres de transport | Valeurs | Référence |
|---|--|-----------|
| Mobilité des ions (μ_e) | 987 $\text{cm}^2/\text{V.s}$ | [7] |
| Mobilité des électrons (μ_p) | 14 $\text{cm}^2/\text{V.s}$ | [7] |
| Diffusion électronique (D_e) | $5,43 \cdot 10^{+3} \cdot (E /3040) \text{ cm}^2 \cdot \text{s}^{-1}$ si $E \leq 3040 \text{ V} \cdot \text{cm}^{-1}$ $5,43 \cdot 10^{+3} \text{ cm}^2 \cdot \text{s}^{-1}$ si $E > 3040 \text{ V} \cdot \text{cm}^{-1}$ | [7] |
| Diffusion ionique (D_p) | 0,354 $\text{cm}^2 \cdot \text{s}^{-1}$ | [7] |
| Diffusion des particules excitées (D_m) | 0,6 $\text{cm}^2 \cdot \text{s}^{-1}$ | [7] |

5. Résultats et interprétation

Les résultats ci-dessous, sont les différentes caractéristiques de la décharge lumineuse à la pression atmosphérique, dans l'hélium, à l'instant $10\mu\text{s}$ pour une distance inter-électrodes égale à 0,5 cm.

**Figure 2 : Distribution spatiale du champ électrique.****Figure 3 : Distribution spatiale de la densité ionique.****Figure 4 : Distribution spatiale de la densité électronique.**

La figure 2 représente la distribution spatiale du champ électrique, à partir de cette figure, on distingue trois régions principales, dans la première région, le champ électrique varie beaucoup et sa valeur maximale est de plus de 5,8kV, C'est la gaine cathodique. La deuxième zone occupe la majorité de l'espace inter-électrode (environ 3.75 mm), le champ électrique très faible et constant, c'est la zone de la colonne positive (la région de la formation du plasma, caractérisé par une charge d'espèce électriquement neutre). La troisième zone c'est la gaine anodique, le champ électrique varie mais reste faible.

Les figures 3 et 4 représentent la distribution spatiale des densités ionique et électronique, montrent clairement les trois régions distinctes qui se comportent comme la chute cathodique,

la colonne positive et la région anodique d'une décharge luminescente basse pression classique. La première région est caractérisée par une densité électronique négligeable par rapport à la densité des ions. Il existe en effet une charge d'espace importante dû au fait que les électrons se propagent beaucoup plus rapidement que les ions et s'éloignent de la région cathodique rapidement (leur vitesse de dérive est beaucoup plus importante que celle des ions). La région du plasma ou la colonne positive, est caractérisée par des densités électroniques et ioniques qui sont constantes et quasi égales. Par conséquent, la charge d'espace induite est négligeable. Les figures 5 et 6 représentent respectivement, la distribution spatiale de la densité des espèces excitées et la densité du courant total, on constate que, la distribution de particules excitées est homogène sur l'étendue de l'espace inter-électrodes. La distribution de la densité du courant total est constante dans la zone du plasma.

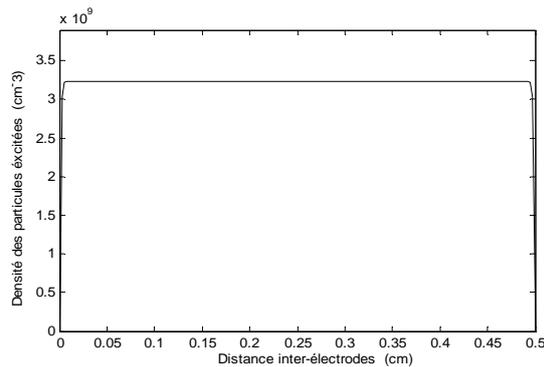


Figure 5 : Distribution spatiale de la densité des particules excitées.

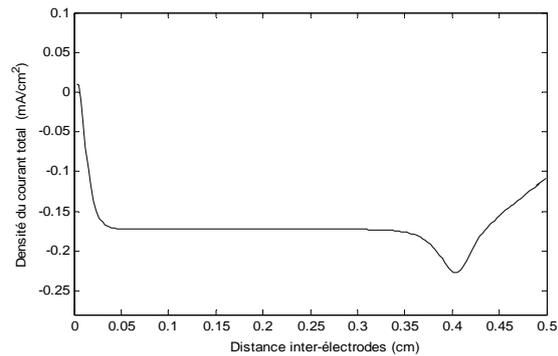


Figure 6 : Distribution spatiale de la densité du courant total.

6. Conclusion

Dans cet article, nous avons présenté, les caractéristiques électriques de la décharge luminescente à la pression atmosphérique dans l'hélium, pour une configuration cartésienne monodimensionnelle. La répartition spatiale des grandeurs calculées correspond parfaitement à celle attendue pour une décharge luminescente classique à la basse pression et confirme l'existence de ce régime à la pression atmosphérique.

Les valeurs maximales des densités de charges (ions, électrons) sont du même ordre de grandeur que celle habituellement données pour une décharge luminescente basse pression, le taux d'ionisation est donc relativement faible, qui permet de produire un plasma froid même à la pression atmosphérique.

Références

- [1] Massines F. et Gadri R. B. ; Experimental and theoretical study of a glow discharge at atmospheric pressure controlled by dielectric barrier ; *J. Appl. Phys.* **83** 2950-2957 (1998).
- [2] Balcon N. ; Atmospheric pressure radio frequency discharges, diagnostic and numerical modelling ; These de Doctorat, Université de Paul Sabatier, Toulouse III (2007).
- [3] Sakiyama Y. and Graves D. B. ; Finite element analysis of an atmospheric pressure RF-excited plasma needle ; *J. Appl. Phys.* **39** 3451-3456 (2006).
- [4] Scharfetter D. L. and Gummel H. K. ; *IEEE Trans. Electron Devices*, ED-16, 64 (1969).
- [5] Hamid A. et Hennad A. ; Modélisation bidimensionnelle d'une décharge luminescente dans l'argon avec un terme source d'ionisation constant ; *Romanian Reports in Physics.* **61** 709-720 (2009).
- [6] Nougier J. P. ; *Méthodes de calcul numérique* ; 2e édition Masson, Paris (1985).
- [7] Radu I. and Bartnikas R. ; Dielectric barrier discharges in helium at atmospheric pressure-experiments and model in the needle-plane geometry ; *J. Appl. Phys.* **36** 1284-1291 (2003).