

### III.1.Introduction

Le but de ce chapitre consiste à présenter et interpréter les résultats de simulation des caractéristiques électriques tension/courant et de la distribution du courant de décharge à la pression atmosphérique dans l'argon(Ar) .Ces plasmas sont créés dans des décharges alternatives (DC) dans le cas d'une configuration géométrique bidimensionnelle (2D).

L'utilisation d'une méthode numérique par l'intermédiaire d'un logiciel s'est avérée être une des meilleures solutions.

En effet, la méthode des éléments finis est la mieux adaptée au problème posé. Les logiciels basés sur cette méthode numérique couvrent généralement un domaine plus vaste que le problème étudié et dans certains cas ils ne répondent pas aux exigences spécifiques du problème.

Cependant, ils offrent souvent une interface simplifiant la modélisation du problème (interface de conception et définition des propriétés des matériaux), la résolution du problème (définition des conditions initiales et conditions aux limites, maillage automatique ainsi que différents solveurs) et enfin, la visualisation des résultats (affichage des résultats sous forme de courbes, d'équipotentiels, de vecteurs, etc....).

En effet, Nous allons voir l'influence de certains paramètres tels que la valeur efficace de la tension appliquée, la permittivité relative du diélectrique et l'épaisseur de ce dernier sur les propriétés électriques de la décharge.

### III.2. Choix du logiciel COMSOL Multiphysics[1]

Le COMSOL Multiphysics 4.3b est un outil très employé dans des secteurs divers de recherche, car il facilite les étapes de modélisation et de simulation, soit : la définition de la géométrie, les propriétés physiques des matériaux présents et les conditions aux limites, le maillage, la résolution et l'affichage des résultats. Par ailleurs, l'utilisation de ce logiciel ne demande pas de connaissances approfondies dans les mathématiques ou les analyses numériques.

### III.3.Les méthodes numériques utilisées[2]

Les grandes familles de méthodes numériques de résolution d'équations aux dérivées partielles sont au nombre de quatre:

- La méthode des différences finies (MDF).
- La méthode des volumes finis(MVF).
- La méthode des éléments finis(MEF).
- la méthode des caractéristiques(MC).

Diverses méthodes ont été utilisées pour résoudre l'équation de Poisson et l'équation de conservation de la charge. Le plus souvent deux méthodes numériques différentes sont utilisées pour résoudre les deux équations couplées.

L'équation de Poisson est résolue par: la méthode de différences finies **MDF**, la méthode d'éléments finis **MEF** ou par la méthode de volumes finis **MVF** ; mais la méthode la plus utilisée, c'est la méthode d'éléments finis. L'équation de conservation de la charge est résolue par la méthode des caractéristiques **MC** ou la méthode des volumes finis **MVF**. On présente ici les différentes associations entre les méthodes numériques pour résoudre les deux équations couplées et on montre les idées les plus importantes dans plusieurs travaux. Dans cette partie on s'intéresse à la méthode d'élément finis.

### **III.3.1.La méthode des éléments finis**

La méthode des éléments finis a été initialement développée pour l'analyse des structures mécaniques et, plus généralement pour traiter les problèmes de milieux continus déformables.

Elle repose sur un formalisme qui la rend très flexible et elle a rapidement été appliquée à d'autres domaines tels que la mécanique des fluides, la thermique, l'électromagnétisme...

La méthode des éléments finis repose sur une formulation variationnelle (ou formulation faible) du problème.

### **III.4.Données de base utilisées dans la simulation**

Pour présenter les résultats de simulation temporelle de la tension et du courant, nous sommes amenés à préciser les valeurs de quelques paramètres d'entrée du programme tels que la pression, fréquence d'excitation, permittivité relative du diélectrique, épaisseur des diélectriques ...ex. Les données nécessaires pour l'exécution des calculs de la décharge pour le gaz sont regroupées dans le tableau III-1 :

Gaz vecteur	Argon
Distance inter-électrodes	0.2mm
Amplitude de la tension appliquée	-750 kV
Fréquence d'excitation	50 kHz
Surface et forme des électrodes	Rectangulaires ( $S=0.02 \text{ cm}^2$ )
Permittivité relative du diélectrique	$\epsilon_r=4.2 \text{ F. m}^{-1}$
Epaisseur des diélectriques	0.1 mm
Pression du gaz	P=1 atm Pa
Pas du temps	0.0 1s

Tableau III-1 : Conditions utilisées dans la simulation

### III.4.1. Coefficients caractéristiques[3]

#### III.4.1.1. Mobilité[4]

En l'absence de forces extérieures, aucune direction n'est privilégiée et les particules ionisées ou neutres d'un gaz sont animées d'une vitesse moyenne qui est donnée par l'agitation thermique.

Si nous appliquons un champ électrique constant à cet ensemble de particules, celles-ci vont alors se déplacer collectivement dans la direction de la force induite par le champ électrique.

Ce déplacement collectif provient de ce que, bien que l'ion soit émis dans une direction quelconque après chaque collision, cet ion tend à être ramené par le champ électrique toujours dans la même direction.

La vitesse moyenne avec laquelle le centre de masse de cet ensemble de particules se déplace dans la direction du champ électrique  $E$  est appelée vitesse de dérive. La mobilité  $\mu$  des particules se déduit de la vitesse de dérive au moyen de la relation:

$$w = \mu E \quad (\text{III-1})$$

#### III.4.1.2. Coefficients de diffusion[5]

A l'intérieur d'un gaz, ionisé ou non, les différences de concentration des particules d'une région de l'espace à l'autre créent un déplacement de ces particules des régions de haute concentration vers les régions de basse concentration. Le flux de diffusion  $J_{\text{diffusion}}$  par unité de surface est proportionnel au gradient de densité suivant la relation :

$$\overline{J_{\text{diffusion}}} = -D \nabla n \quad (\text{III-2})$$

La constante de proportionnalité est le coefficient de diffusion. Nous avons donc :

$$\frac{D}{\mu} = \frac{m}{3e} (V)^2 \quad (\text{III-3})$$

Où

$$\frac{D}{\mu} = \frac{kT}{e} \quad (\text{III-4})$$

La relation (III-4) est dite relation d'Einstein.

$m$  Est la masse de l'électron,  $e$  sa charge,  $k$  est la constante de Boltzmann et  $T$  la température en degrés Kelvin.

La définition précédente du coefficient de diffusion  $D$  suppose que le milieu diffuseur est isotrope. Dans ce cas,  $D$  est une grandeur scalaire (ce sera le cas pour la modélisation 2D que nous présenterons dans ce chapitre).

Dans le cas d'un gaz contenant des particules chargées, le milieu est rarement isotrope et le coefficient de diffusion est un tenseur. Ce tenseur se simplifie et devient diagonal lorsque, les forces appliquées étant d'origine électrique, les électrodes sont planes et parallèles. Il existe alors un coefficient de diffusion longitudinal  $DL$ , correspondant à la diffusion dans le sens du champ électrique, et un coefficient de diffusion transversal  $DT$  correspondant à la diffusion dans la direction perpendiculaire (ce cas est pris en considération dans les modélisations bidimensionnelles).

### III.5. Schéma cinétique dans l'argon

Le schéma réactionnel utilisé pour décrire le comportement de la décharge de Townsend dans l'argon est présenté dans les tableaux (II.1) Ce bilan a été établi par S.Lemoing durant ses travaux de thèse [6]. Les espèces prises en compte dans le modèle sont : les électrons, les ions, et ainsi que les niveaux excités.

Les réactions d'ionisation et d'excitation directe par impact électronique considérées dans le modèle sont listées dans le tableau (II-1)[7].

LA REACTION	LA FORMULE	LE TYPE	$\Delta\varepsilon(eV)$
1	$e + Ar \Rightarrow e + Ar$	Elastique	0
2	$e + Ar \Rightarrow e + Ars$	Excitation	11.5
3	$e + Ars \Rightarrow e + Ar$	Superplastique	-11.5
4	$e + Ar \Rightarrow 2e + Ar^+$	Ionisation	15.8
5	$e + Ars \Rightarrow 2e + Ar^+$	Ionisation	4.24
6	$Ars + Ars \Rightarrow e + Ar^+Ar^+$	Ionisation	-
7	$Ars + Ar \Rightarrow Ar + Ar$	Métastable	-

Tableau III-2 : Tableau de collisions et réactions[7].

### III.6. Le maillage utilisé

Le maillage concerne les deux méthodes numériques utilisées pour résoudre : l'équation de Poisson et l'équation de conservation de la charge entre les deux électrodes. Il y a deux types possibles pour le maillage utilisé dans les travaux qui ont été faits dans ce domaine, maillage structuré ou non structuré[8] :

#### III.6.1. Le maillage structuré

L'utilisation d'un maillage structuré est nécessaire pour l'application de la **MDF** et elle facilite l'utilisation de la **MC** pour calculer la densité de charge. Les noeuds du maillage structuré sont toujours définis comme les points d'intersection entre des lignes de champ et des équipotentielles de la solution harmonique. En général ce maillage structuré est conservé pendant toutes les itérations du calcul[9] et la difficulté principale vient de la discrétisation de l'équation de conservation de la charge. Si le maillage structuré est redéfini à chaque itération dans ce cas on peut tenir compte de l'influence de la charge d'espace sur la distribution des lignes de champ et des équipotentielles et simplifier très fortement la résolution de l'équation donnant la densité de charge. *Anagnostopoulos et Bergeles* ont construit un maillage structuré; l'utilisation de ce maillage qui est nécessaire pour déterminer le potentiel par la **MDF** facilite l'application de **MC** pour déterminer la densité de charge. Ils n'ont pas eu besoin d'un grand nombre de noeuds pour obtenir la convergence.

#### III.6.2. Le maillage non structuré

Le maillage non structuré est toujours obtenu par la triangulation de *Delaunay et, sauf* dans un cas reste le même pendant toutes les itérations. Ce maillage est utilisé pour calculer le potentiel par la **MEF**. L'utilisation de la **MC** pour déterminer la densité de charge est plus difficile et plus compliquée avec un maillage non structuré. Dans la plupart des travaux, *les polygones de Voronoi* (le maillage *dual de Delaunay*) sont utilisés pour déterminer la densité

de charge par la MVF. Parfois des volumes sont construits sur les centres des triangles de Delaunay et la MVF est appliquée sur ces volumes. *Levin et Hoburg* utilisent la triangulation de *Delaunay* pour la MEF. Ils ont utilisé les polygones de Voronoi associés aux triangles de *Delaunay* pour la MVF. *Meroth et al.* Ont construit un maillage non structuré pour appliquer MEF dans la configuration plan-plan.

### III.6.3. Configuration d'électrodes utilisées

Pour la simulation de la décharge à barrière diélectrique dans l'argon, nous avons choisi une configuration plan-plan figure (III-1).

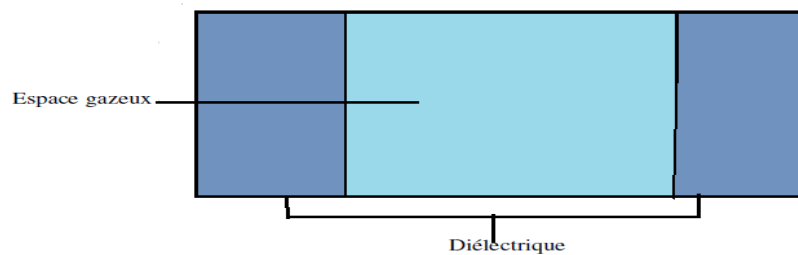


Figure III-1 : Géométrie utilisée

### III.7. Domaine de calcul et maillage

Le domaine de calcul a été conçu en se basant sur la configuration de base qui comprend deux électrodes planes et parallèles de distance  $0,01\text{mm}$  espacées de  $0,02\text{mm}$  (domaine de plasma). On peut donc définir un domaine de calcul à deux dimensions dans un plan perpendiculaire à l'axe des électrodes planes pour simuler l'expérience de décharge.

*COMSOL* propose un maillage adéquat qui est plus dense autour des formes de petite dimension et un maillage moins dense ailleurs. Les dimensions de maillage peuvent aussi être modifiées manuellement selon le choix de l'utilisateur. La nature du gaz est évidemment essentielle. On a utilisé un maillage triangulaire. Ce type de maillages est le mieux adapté à l'utilisation du logiciel *COMSOL Multiphysics* contrairement aux maillages rectangulaires qui auraient donné certes de meilleurs résultats, mais qui ne sont pas pris en compte par le logiciel.

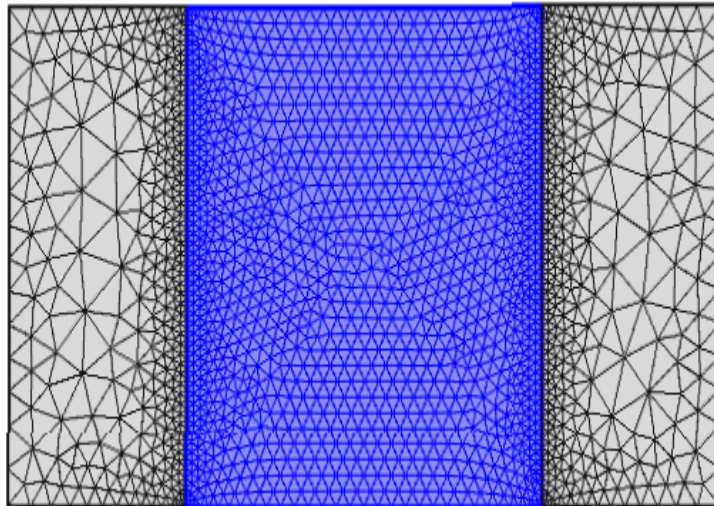


Figure III-2: Maillage structuré à proximité de l'électrode.

Sur la base des considérations concernant les interactions entre les différentes espèces d'un plasma et les surfaces diélectriques, il est nécessaire de construire les conditions aux limites pour toutes les espèces en présence sur la surface diélectrique.

### III.8. Présentation des résultats de simulation

Dans cette partie, on a étudié l'influence de différents paramètres de la décharge tels que la tension appliquée, la permittivité du matériau diélectrique et l'épaisseur de ce dernier sur le comportement de la décharge.

La figure (III.3) montre l'évolution du courant de la décharge et la tension appliquée, on peut voir que le courant de décharge est formé d'une impulsion unique par alternance.

Le courant obtenu confirme le démarrage lent de la décharge (claquage de Townsend), suivi d'une première impulsion de courant très brève (dizaine de secondes), Le courant de décharge est plus faible au début puis augmente brusquement sous forme d'un pic quand la tension de gaz change de signe, cet effet va se répéter pour tous les alternances qui suivent c'est l'effet mémoire de la DBD.

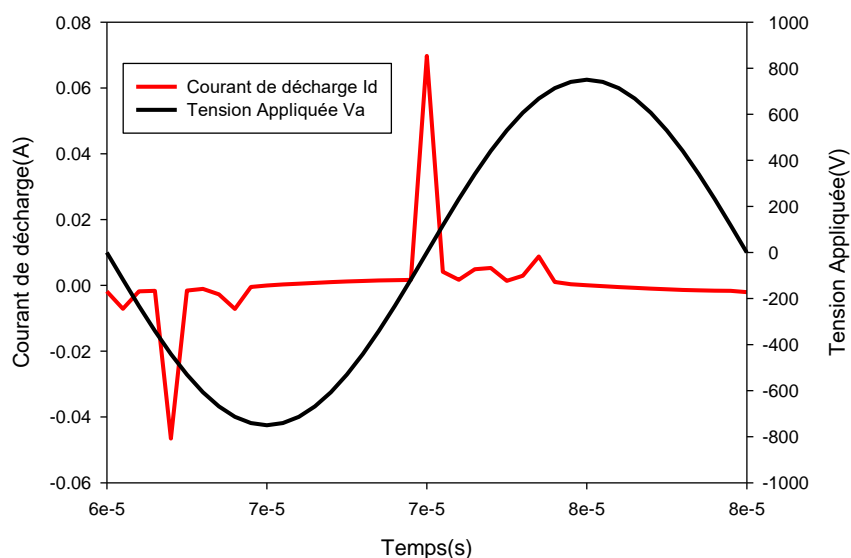


Figure III-3 : la variation de Tension appliquée et le courant.

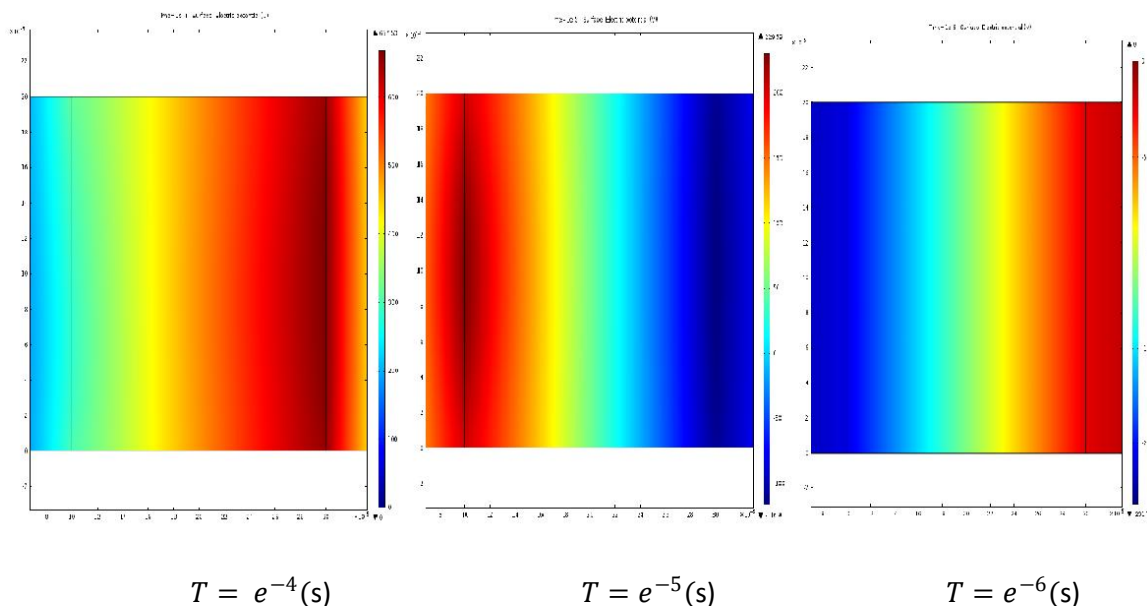


Figure III-4 : l'évolution d'un décharge pour l'instant  $T = e^{-4}(s)$ .

### III.8.1. Etude paramétrique d'une décharge à barrière diélectrique dans l'argon

Pour comprendre les phénomènes de la décharge étudiée et les différents paramètres qui peuvent influencés sur le comportement de la décharge il faut à chaque fois varier l'un des paramètres (Amplitude de la tension appliquée, permittivité du diélectrique et son épaisseur) et fixer les autres.

### III.8.2. l'influence de la tension appliquée

Pour voir l'influence de la tension appliquée sur le courant de décharge nous avons appliqué des tensions différentes : (-800kV, -650kV et -750kV)



La distance inter-électrodes est égale à **0,02mm**. La fréquence d'excitation est égale à 50 kHz. La pression atmosphérique est fixée à 1 atm pa et La permittivité du diélectrique vaut 4.2 F/ m.

Le courant de décharge et le nombre de décharges par unité de temps augmentent avec L'augmentation de la tension d'alimentation.

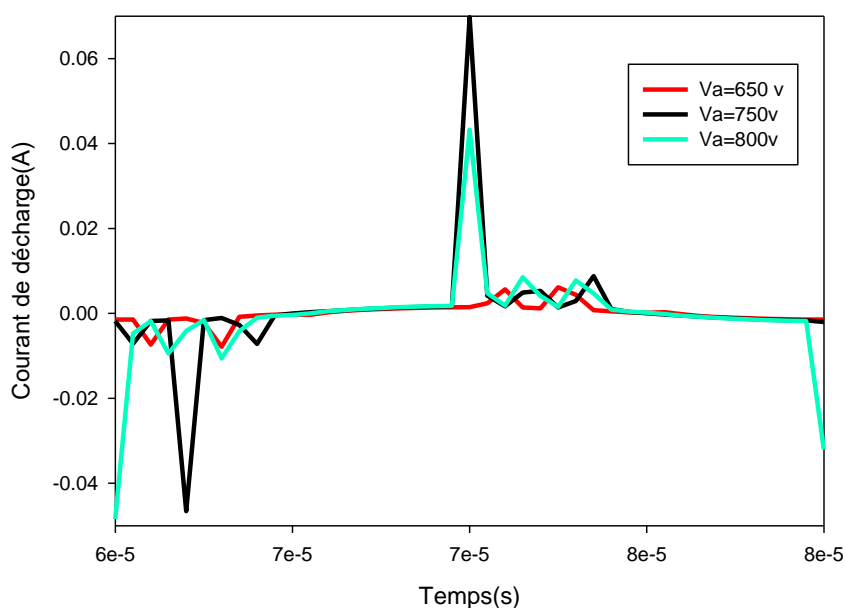


Figure III -5: variation du courant en fonction de temps pour différents valeurs de la tension appliquée.

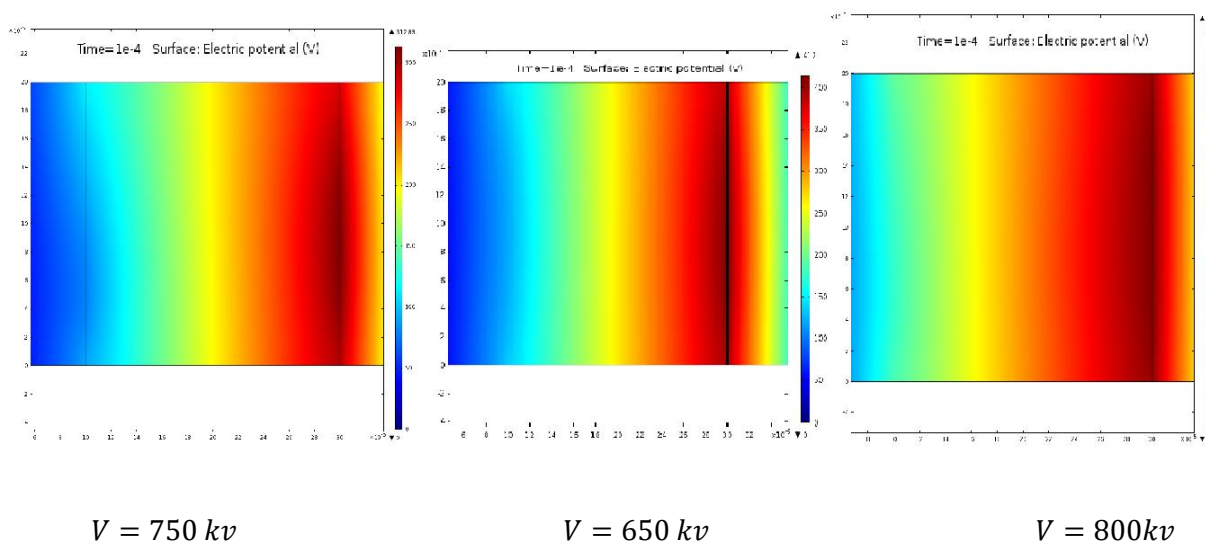


Figure III-6 : l'évolution d'une décharge pour déférent valeur de la tension appliquée à l'instant  $T = 1e^{-4}(s)$ .

### III.8.3. Influence de la permittivité du diélectrique

De la même manière, pour voir l'influence de la permittivité du matériau sur la décharge, on changera le matériau. On a utilisé trois matériaux de permittivité relative différents :  $4.2 \text{ F/m}$  pour *Plexiglas* et  $3.2 \text{ F/m}$  pour le *Nylon* et  $5 \text{ F/m}$  pour le *verre*. L'amplitude de la tension appliquée est fixée à  $-750 \text{ kV}$ . La fréquence d'excitation est égale à  $50 \text{ kHz}$ . La pression atmosphérique est fixée à  $1 \text{ atm Pa}$ . La figure (III-7) montre l'effet de la permittivité du diélectrique sur la distribution temporelle du courant de la décharge.

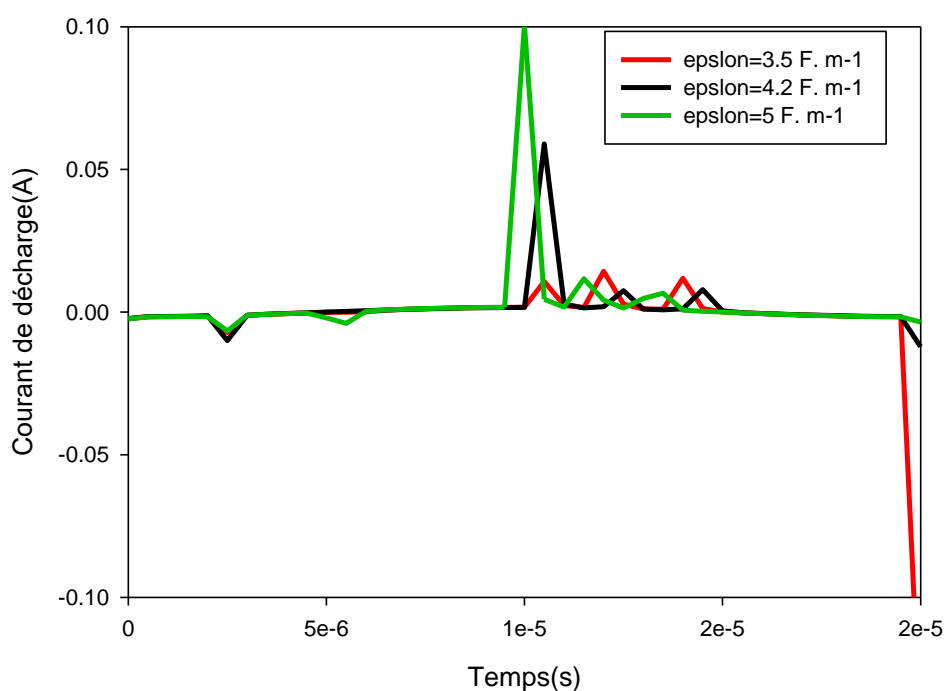
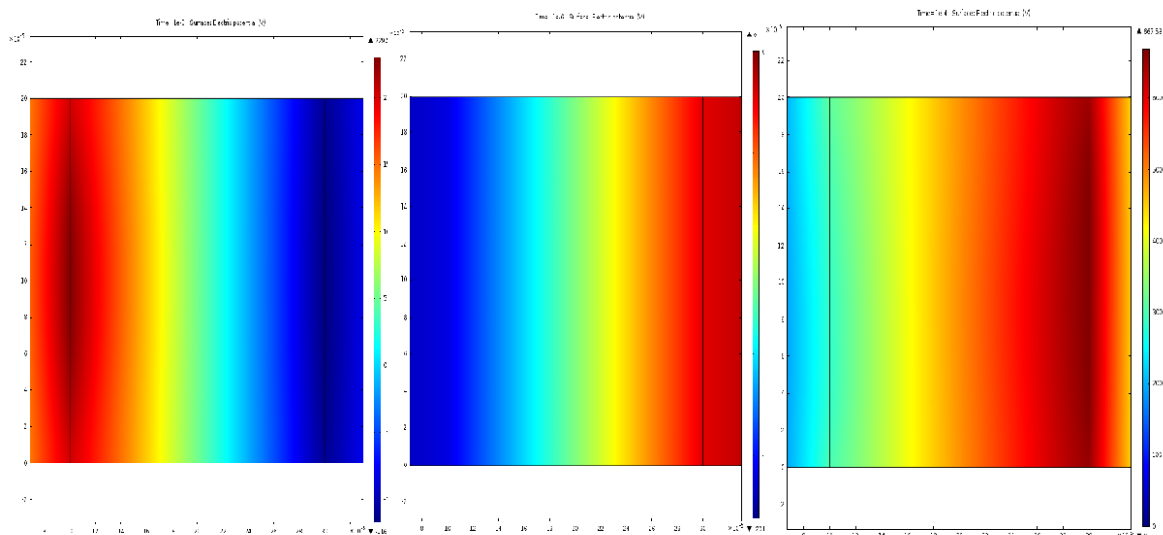


Figure III-7 : les variations de courante on fonction du temps et déférent valeur de La permittivité relative

On remarque que le courant de la décharge augmente avec l'augmentation de la permittivité.



$$\epsilon_r = 4.2 \text{ f.m}^{-1}$$

$$\epsilon_r = 3.5 \text{ f.m}^{-1}$$

$$\epsilon_r = 5 \text{ f.m}^{-1}$$

Figure III- 8: l'évolution d'un décharge pour différentes valeurs de la permittivité relative de diélectrique à l'instant  $T = 1e^{-4}$ (s).

### III.8.4. Influence de l'épaisseur du diélectrique

Après avoir étudié l'influence de la tension appliquée et la permittivité du diélectrique sur le courant, on passera maintenant à voir l'influence de l'épaisseur du matériau sur la décharge.

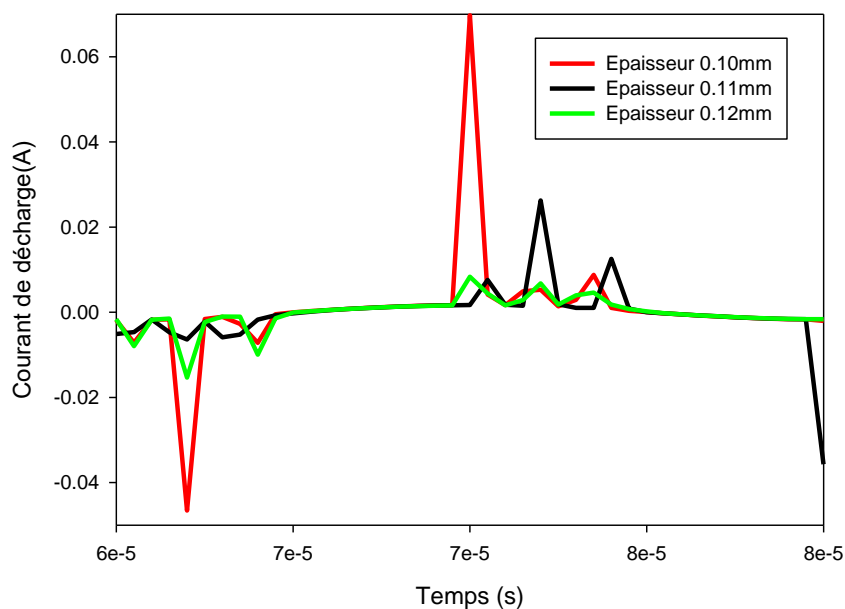


Figure III-9: variation de courant pour différentes valeurs de l'épaisseur du diélectrique (mais pour une même valeur de la permittivité égale à 4.2)

A partir de la figure (III-10) On constate que le comportement de la décharge dépend fortement de l'épaisseur du diélectrique.

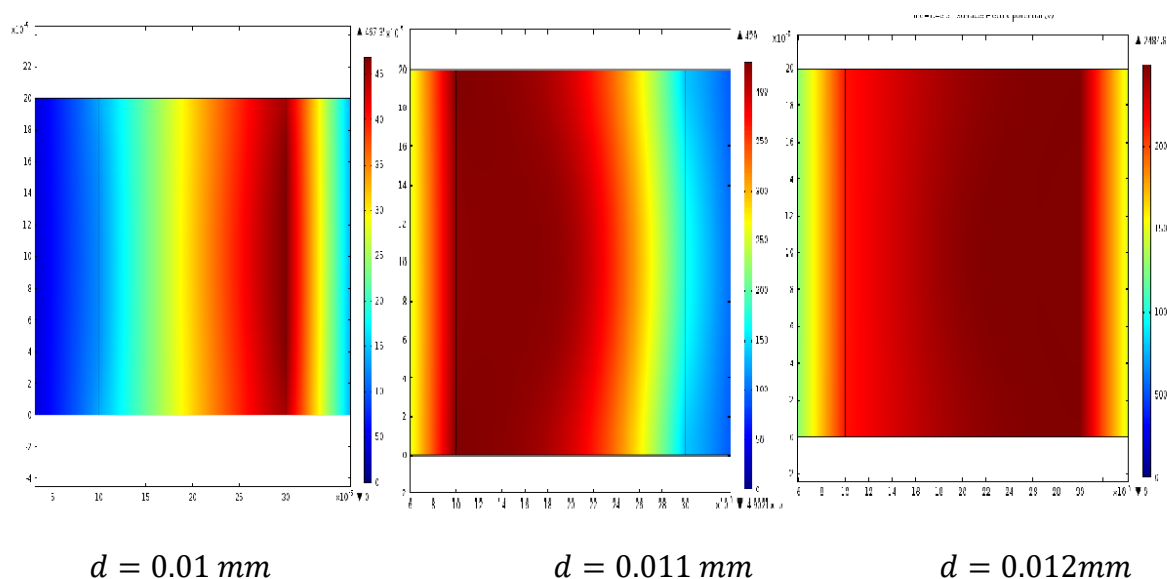


Figure III- 10: l'évolution d'un décharge pour différentes valeurs de l'épaisseur de diélectrique à l'instant  $T = 1e^{-4}(s)$

### III.9. Conclusion

On a présenté dans ce chapitre les résultats de simulation en considérant un modèle fluide auto-cohérent. Nous avons traité le cas de gaz atomiques l'argon (Ar). Les résultats de simulation sont illustrés en termes de variation en temps de la tension et du courant et la variation dans l'espace inter électrodes du potentiel, des courants à partir de la présentation de modèle mathématique utilisé pour décrire le comportement d'une décharge de Townsend à la pression atmosphérique, dans l'argon.

L'étude de ces résultats, corrélée avec les observations expérimentales dans les articles permettra, dans le chapitre II, de mieux comprendre la physique de la décharge à barrière diélectrique dans une atmosphère

Ce chapitre est divisé en deux parties. Tout d'abord, nous présenterons les équations mathématiques qui régissent le mouvement des particules dans la décharge. La seconde partie du chapitre sera consacrée à la présentation des données nécessaires à la simulation, c'est à dire les données de base caractérisant le transport des particules, ainsi que la cinétique chimique dans l'atmosphère de la décharge considérée.