

N° d'ordre DU: 2719

École doctorale Sciences Fondamentales : n° 872

THÈSE

présentée pour obtenir le grade de docteur d'université délivré par

L'UNIVERSITÉ BLAISE PASCAL, CLERMONT-FERRAND

Laboratoire Arc Électrique et Plasmas Thermiques

Spécialité doctorale "Physique des Plasmas"

présentée par

Ali MAHFOUF

Calcul des coefficients de transport dans des plasmas hors de l'équilibre

Soutenue publiquement le 18/07/2016

Membres du jury

| | | |
|-------------------------------|--------------------------------------|--|
| Président: | Z.AJALTOUNI | Professeur d'Université, Université Blaise Pascal |
| Rapporteurs: | K.HASSOUNI P.TEULET | Professeur d'Université, Université de Paris 13 Professeur d'Université, Université de Toulouse |
| Directeur de thèse: | P.ANDRÉ | Professeur d'Université, Université Blaise Pascal |
| Co-encadrant de thèse: | G.FAURE | Maître de conférences, Université Blaise Pascal |
| Examineurs: | Y.CRESSAULT V.RAT S.LALLÉCHERE | Maître de conférences, Université de Toulouse Chargé de recherche, Université de Limoges Maître de conférences, Université Blaise Pascal |
| Invitée: | M-F.ELCHINGER | Ingénieur d'étude, Université de Limoges |

À mes parents,
À ma femme,
À mes enfants,
À mes frères...

Remerciements

Ce travail a été réalisé au sein du Laboratoire Arc Électrique et Plasmas Thermiques.

Je tiens tout d'abord à remercier Pascal André pour m'avoir accueilli dans son laboratoire et d'avoir dirigé mes travaux de thèse. Je tiens aussi à le remercier pour sa patience, sa confiance, ses remarques et ses conseils.

Je voudrais remercier du fond du cœur Géraldine Faure pour sa disponibilité, son aide précieuse qu'elle m'a apportée tout au long de ce travail. Je tiens aussi à la remercier pour sa gentillesse et pour sa patience.

J'adresse aussi mes sincères remerciements à Marie-Françoise Elchinger pour sa bienveillance, ses conseils et ses remarques.

Je remercie également Sébastien Lalléchère pour sa gentillesse et pour toutes les discussions que nous avons échangées. Je le remercie aussi pour ses corrections et pour sa participation au jury.

Je remercie Ziad Ajaltouni d'avoir présidé le jury d'examen. De même, je le remercie pour les discussions que nous avons échangées, ainsi que le soutien dont il m'a témoigné durant la rédaction de ce manuscrit.

Je souhaite remercier Khaled Hassouni et Philippe Teulet d'avoir accepté le rôle de rapporteur de ce manuscrit, ainsi que Vincent Rat et Yann Cressault pour leur contribution en tant qu'examineurs.

Mes remerciements vont également à mes collègues doctorants Alain et Amaury mais aussi à tout le personnel du LAEPT.

Je suis heureux de remercier tous mes amis, particulièrement mon ami Tahar pour le soutien et l'aide qu'il m'a apportés tout au long de ce travail.

Enfin, mes pensées vont à toute ma famille, à ma mère, à mon père, à mes frères, à ma femme Zohra, à mon fils Idriss et à ma fille Mayssa.

Table des matières

| | | |
|------------|---|------------|
| I | Processus de transport et intégrales de collision | 3 |
| I.1 | Les Plasmas | 4 |
| I.1.1 | Les trois états de la matière | 4 |
| I.1.2 | Le plasma, un quatrième état de la matière? | 5 |
| I.1.3 | Les caractéristiques d'un plasma | 6 |
| I.2 | Bases de la théorie cinétique des gaz | 10 |
| I.2.1 | Introduction | 10 |
| I.2.2 | Hypothèse d'un gaz parfait | 11 |
| I.2.3 | Fonction de distribution | 12 |
| I.2.4 | Le libre parcours moyen | 15 |
| I.2.5 | Phénomène et coefficients de transport | 18 |
| I.3 | Théorie cinétique des gaz | 27 |
| I.3.1 | Équation intégral-différentielle de Boltzmann | 27 |
| I.3.2 | Fonction de distribution des vitesses | 38 |
| I.3.3 | Reformulation des coefficients de transport | 49 |
| I.3.4 | Limite de validité des formules | 75 |
| II | Théorie des collisions et des interactions inter-particulaires | 79 |
| II.1 | Potentiels d'interaction interparticulaires | 80 |
| II.1.1 | Nature des interactions | 80 |
| II.1.2 | Différents types de potentiel | 81 |
| II.2 | Section efficace de collision | 89 |
| II.2.1 | Section efficace différentielle | 90 |
| II.2.2 | Section efficace totale | 90 |
| II.2.3 | Section efficace de transfert de quantité de mouvement | 91 |
| II.3 | Collisions binaires | 91 |
| II.3.1 | Description dynamique d'une collision binaire | 92 |
| II.3.2 | Évaluation de l'angle de déflexion | 97 |
| II.3.3 | Résolution analytique de l'angle de déflexion | 98 |
| II.3.4 | Étude asymptotique d'une collision binaire | 103 |
| III | Approche numérique du processus de collision | 113 |

| | | |
|-----------|--|------------|
| III.1 | Quadrature de Clenshaw-Curtis | 114 |
| III.2 | Évaluation numérique de l'angle de déflexion | 116 |
| III.3 | Calcul numérique de la section efficace | 117 |
| III.3.1 | Première zone d'intégration (Orbiting) | 117 |
| III.3.2 | Deuxième zone d'intégration (Rainbow) | 118 |
| III.3.3 | Troisième zone d'intégration | 119 |
| III.4 | Calcul de l'intégrale de collision | 119 |
| III.5 | Résultats et discussion | 120 |
| III.5.1 | Angle de déflexion | 123 |
| III.5.2 | Section efficace | 124 |
| III.5.3 | Intégrales de collision de l'interaction $O(^3P) - O(^3P)$ | 125 |
| III.5.4 | Potentiel équivalent | 127 |
| III.5.5 | Influence des paramètres du potentiel H-H sur les intégrales de collision | 129 |
| III.5.6 | Comparaison entre un potentiel de Morse avec celui de Hulbert-Hirschfelder | 133 |
| IV | Propriétés thermodynamiques et de transport du plasma d'hélium | 135 |
| IV.1 | Équilibre thermodynamique d'un plasma | 136 |
| IV.1.1 | Équilibre thermodynamique complet | 137 |
| IV.1.2 | Équilibre thermodynamique local | 138 |
| IV.2 | Calcul de composition d'un plasma d'hélium | 140 |
| IV.2.1 | Méthodes de calcul de composition | 140 |
| IV.2.2 | Résultats et discussion | 143 |
| IV.3 | Fonctions thermodynamiques | 146 |
| IV.4 | Coefficients de transport | 149 |
| IV.4.1 | Potentiels d'interaction | 149 |
| IV.4.2 | Résultats de calcul | 154 |
| V | Interaction onde plasma : Application au plasma d'hélium | 163 |
| V.1 | Le modèle théorique | 164 |
| V.1.1 | Les équations de base | 164 |
| V.1.2 | Adimensionnement des équations | 167 |
| V.2 | Le modèle numérique | 168 |
| V.2.1 | Le cas d'un matériau conducteur | 168 |
| V.2.2 | Le cas d'un plasma d'hélium | 171 |
| V.3 | Résultats de la simulation | 171 |
| V.3.1 | Le cas d'un matériau conducteur | 171 |
| V.3.2 | Le cas d'un plasma d'hélium | 173 |
| | Conclusion | 179 |

Introduction générale

Le champ d'applications des plasmas thermiques devient de plus en plus vaste et suscite de nombreux travaux de recherche [1, 2, 3, 4]. Les arcs électriques occupent une place importante dans plusieurs technologies ou procédés, à savoir les appareillages de coupure, les contacteurs électriques, les fusibles [3] et les batteries [4]. Le traitement de déchets, la découpe, le traitement de surface par projection plasma sont également des applications industrielles liées à l'utilisation des plasmas thermiques.

Le Laboratoire Arc Électrique et Plasmas Thermiques (LAEPT) travaille sur les plasmas thermiques afin de mieux comprendre et améliorer les performances des d'appareillages industriels (fusibles, disjoncteurs, batteries...). Des recherches à caractère fondamental ont été menées au sein du LAEPT afin de proposer des modèles théoriques pour le calcul de composition, des propriétés thermodynamiques et des coefficients de transport des plasmas thermiques. Ces données constituent une base indispensable pour l'optimisation et le bon fonctionnement des appareillages industriels mais aussi pour toute modélisation magnéto-hydrodynamique des plasmas.

La résolution de l'équation de Boltzmann par la méthode de Chapman-Enskog [5, 6] permet de calculer classiquement les coefficients de transport (viscosité, coefficient de diffusion, conductivités électrique et thermique). Ces coefficients sont fonctions d'intégrales de collision qui dépendent fortement du choix des potentiels d'interaction entre les particules qui constituent le plasma. Les potentiels d'interaction sont utilisés pour l'obtention des coefficients de transport mais certaines formes de potentiels, sous certaines conditions, peuvent susciter des singularités ("Orbiting", "rainbow" et "Glory") dans le calcul des sections efficaces relatives aux interactions entre particules. Ces singularités font apparaître des instabilités numériques qui rendent le calcul des coefficients de transport ardu.

Le projet de thèse s'inscrit dans le cadre d'une étude théorique des coefficients de transport dans des plasmas thermiques. L'objectif de la thèse est premièrement d'améliorer la méthode d'intégration numérique afin d'obtenir des intégrales de collision précises en tenant compte des singularités citées ci-dessus. Deuxièmement, d'étudier l'influence du choix des potentiels et du choix de la méthode de calcul de composition sur les coefficients de transport avec une application au plasma d'hélium.

Dans ce contexte, le manuscrit de la thèse est subdivisé en cinq chapitres. Outre les généralités, le premier chapitre est consacré à la description des phénomènes de transport et des formules utilisées. Nous présentons donc dans ce même chapitre dans un premier temps les bases de la théorie cinétique des gaz pour illustrer la signification physique des phénomènes de transport et comment retrouver des formules simples à partir du concept

du libre parcours moyen. Dans un second temps, nous présentons la résolution de l'équation de Boltzmann par la méthode de Chapman-Enskog et la reformulation des coefficients de transport, puis la limite de validité des formules.

Le deuxième chapitre porte sur l'étude des phénomènes de collision entre particules afin de mettre en évidence des singularités qui peuvent apparaître dans le calcul des sections efficaces, avec une présentation d'une liste, non exhaustive, des potentiels d'interactions usuellement utilisés dans le calcul des coefficients de transport.

Le troisième chapitre présente la méthode numérique développée pour calculer les intégrales triples de collision qui permettent l'obtention des coefficients de transport, suivie par une étude de l'influence du choix de potentiels sur les résultats numériques.

Le quatrième chapitre porte sur le calcul des propriétés thermodynamiques et des coefficients de transport du plasma d'hélium en fonction de la température pour quelques pressions données. Nous présentons dans ce quatrième chapitre les différentes méthodes de calcul de composition ainsi que leur influence sur les coefficients de transport selon la méthode choisie.

Enfin le dernier chapitre, qui est une application des coefficients de transport, présente une étude d'un modèle simple d'une interaction entre une onde électromagnétique avec un plasma d'hélium.

Chapitre I

Processus de transport et intégrales de collision

Sommaire

| | |
|---|-----------|
| I.1 Les Plasmas | 4 |
| I.1.1 Les trois états de la matière | 4 |
| I.1.2 Le plasma, un quatrième état de la matière? | 5 |
| I.1.3 Les caractéristiques d'un plasma | 6 |
| I.2 Bases de la théorie cinétique des gaz | 10 |
| I.2.1 Introduction | 10 |
| I.2.2 Hypothèse d'un gaz parfait | 11 |
| I.2.3 Fonction de distribution | 12 |
| I.2.4 Le libre parcours moyen | 15 |
| I.2.5 Phénomène et coefficients de transport | 18 |
| I.3 Théorie cinétique des gaz | 27 |
| I.3.1 Équation intégral-différentielle de Boltzmann | 27 |
| I.3.2 Fonction de distribution des vitesses | 38 |
| I.3.3 Reformulation des coefficients de transport | 49 |
| I.3.4 Limite de validité des formules | 75 |

I.1 Les Plasmas

Dans cette partie, des généralités sur les différents états de la matière seront présentées suivie par une description de deux paramètres caractéristiques de l'état plasma, à savoir la longueur de Debye et la fréquence plasma.

I.1.1 Les trois états de la matière

Chaque état de la matière est caractérisé par ses propriétés physiques et/ou chimiques, ainsi on peut parler d'un état solide, liquide ou gazeux si la matière en question est caractérisée par certaines propriétés qui lui permettent d'être classée dans un état ou dans un autre. Si à notre échelle macroscopique cette notion apparaît plus intuitive, il n'en est pas de même à la dimension moléculaire. Certes, en principe toute matière est constituée d'un nombre fini de particules de base, cependant ce qui fait la différence entre les différents états de la matière c'est la nature des interactions et la cohésion entre particules à l'échelle microscopique, mais également le nombre de particules par unité de volume. En effet, la distance moyenne entre particules, renseignée par la densité, donne une indication sur l'aptitude des particules à bouger dans l'espace plus au moins librement. Si la distance moyenne entre particule est très faible, c'est-à-dire de l'ordre de la taille des molécules, alors les forces de cohésion prédominent et les interactions entre particules se font quasiment sans mouvement et sans collision. Un tel état condensé où les particules sont privées de mouvement (les mouvements de vibration ou parfois de rotation sont toujours présents si la température n'avoisine pas le zéro absolu) et qui tendent à se réarranger d'une façon ordonnée est appelé un état solide.

A l'inverse si la distance moyenne entre particule est très importante devant la taille des molécules alors les mouvements des particules se font de plus en plus librement, plus rapidement et d'une façon aléatoire. Les interactions entre particules s'effectuent fréquemment par collision et les forces de cohésion sont pratiquement inexistantes. La tendance au désordre et à l'extension dominerait dans un état dit gazeux, ce qui explique particulièrement le fait que les gaz ne se définissent pas dans une structure fixe, ils évoluent dans l'espace et occupent tout le volume qui les entoure.

Un état liquide est caractérisé par des propriétés qui se situent globalement entre les deux états précédents, un état solide et un état gazeux. Par exemple les particules ne sont pas totalement figées comme le cas d'un solide, et elles n'ont pas non plus une parfaite liberté dans leur mouvement comme le cas d'un gaz, par contre elles peuvent avoir un mouvement d'ensemble conditionné par la contribution collective de chaque interaction inter-particulaire (On retrouve cette caractéristique aussi dans des plasmas en général, et spécifiquement dans des plasmas dits corrélés).

Malgré la simplicité de cette approche microscopique des différents états de la matière, elle permet dans une première approximation de comprendre notamment le passage d'un état vers un autre, ce qu'on appelle une transition de phase, en jouant sur des paramètres physiques (variables d'état), à savoir la distance moyenne entre particules qui est reliée directement à la densité (pression). Les mouvements des particules sont une conséquence de l'agitation thermique reliée à la température. Si un milieu physique est doté d'une

densité faible (ou pression faible) et d'une température relativement élevée ce qui correspond visiblement à un milieu gazeux, alors pour liquéfier ce gaz il suffit de refroidir le milieu gazeux pour contraindre les particules dans leur mouvement, ou bien augmenter la densité en comprimant le gaz pour diminuer la distance moyenne entre particules et favoriser ainsi, les interactions par forces d'attractions intermoléculaires pour aboutir à un corps liquide. Si on continuait à refroidir ou à comprimer le liquide, alors on obtiendrait un état solide, voir le diagramme de Clapeyron I.1, c'est-à-dire les particules sont figées suivant une structure ordonnée et cristallisée avec des forces de cohésion beaucoup plus importantes. Il faut noter que ce mécanisme est réversible dans le sens macroscopique, en d'autres termes, on pourrait liquéfier un solide et ensuite vaporiser¹ le liquide en jouant sur la température ou sur la densité (pression). Dans le sens microscopique, le mécanisme est irréversible, en clair les particules ne pourraient pas retrouver leurs positionnements et leurs vitesses initiales en processus inverse, ce qui est d'ailleurs techniquement impossible à réaliser.

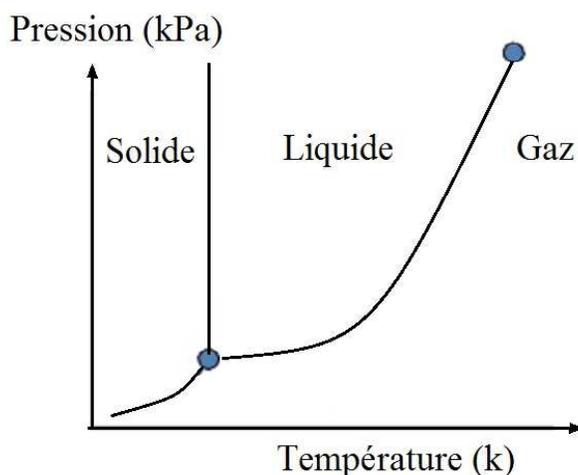


FIGURE I.1 – Diagramme schématisé d'une transition de phase d'un corps pur.

I.1.2 Le plasma, un quatrième état de la matière ?

L'une des caractéristiques des gaz c'est leur nature isolante vis-à-vis de la conduction de l'électricité. Un gaz est électriquement neutre, il ne peut conduire de l'électricité, mais si les particules neutres constituant le gaz perdent un électron ou plusieurs par un mécanisme donné, alors selon le degré d'ionisation, le gaz devient un mélange de particules chargées : des ions, des électrons et des neutres. Le mouvement de ces particules chargées, essentiellement les électrons par leur mobilité, donne au gaz une certaine capacité à conduire de l'électricité. Les particules ioniques étant chargées positivement, elles se repoussent mutuellement ou s'attirent avec les électrons, et cela à très grande portée. Les interactions entre particules ne se font plus deux à deux par collision, la grande portée des forces électromagnétiques donne une aptitude aux particules chargées d'interagir collectivement et à grande distance. Le comportement collectif signifie que le mouvement des

1. La différence entre vapeur et gaz, c'est que le terme vapeur est employé pour désigner une phase gazeuse qui pourrait coexister avec une phase liquide ou solide, exemple des vapeurs d'eau qui peuvent cohabiter avec sa phase liquide, par contre le terme gaz désigne la phase gazeuse sans cohabitation avec aucune autre phase, comme He , N_2 ou O_2 .

électrons et des ions ne dépend pas uniquement des conditions locales mais aussi de l'état du plasma dans sa globalité [7].

Ce nouvel état de la matière, nommé plasma, ne peut être structuré comme un solide ou un liquide et non plus comme un gaz où les molécules interagissent à courte portée. La nature électrique des ions et des électrons rend les plasmas facilement contrôlables par des champs extérieurs qui sont de nature magnétique ou électrique. Les particules constituant le plasma peuvent être dans des états dits excités par effet de collision. Le phénomène d'excitation ou de désexcitation est accompagné par une émission ou une absorption de photons, c'est pourquoi les plasmas sont lumineux.

Souvent un plasma est défini comme étant le quatrième état de la matière par le fait que les propriétés qui le caractérisent ne sont pas semblables aux trois autres états de la matière. La terminologie "quatrième état de la matière" semble peu satisfaisante si on considère que ce qui différencie les trois états est non pas la nature de ses constituants mais plutôt la disposition, le mouvement et la nature des interactions entre particules dans l'espace. Les transitions de phase entre les différents états (solide, liquide et gaz) peuvent avoir lieu en variant le couple température-pression (densité). Un plasma ne peut être obtenu par transition de phase connue habituellement notamment à température constante. Il existe des plasmas très denses qui se rapprochent des solides en densité, voire aussi des plasmas dits "liquides". La terminologie "gaz ionisé" a été longtemps employée pour désigner les plasmas. Sous certains critères, les gaz ionisés peuvent ne pas désigner un plasma. Par conséquent, un état plasma est tellement spécifique qu'il ne peut être classifié simplement comme un quatrième état de la matière.

I.1.3 Les caractéristiques d'un plasma

Il ne suffit pas d'avoir quelques particules chargées dans un gaz pour le classer comme étant un plasma, ce qui fait que certains gaz ionisés ne sont pas considérés comme des plasmas. Dans le paragraphe suivant, nous allons aborder la longueur de Debye qui permet, entre autre, de différencier les plasmas des simples gaz ionisés.

I.1.3.1 La longueur de Debye

Considérant un système constitué de plusieurs types de particules chargées positivement et négativement de densité initiale n_{j0} , on suppose que les ions de type j suivent la distribution de Boltzmann à une température d'équilibre T_j . On suppose également que l'énergie potentielle des charges est faible devant l'énergie thermique $|Z_j eV| \ll kT$, avec V le potentiel électrostatique.

Si ρ_j est la densité de charge de type j alors on peut écrire :

$$\rho_j = Z_j e n_{j0} \exp\left(\frac{-Z_j eV}{kT_j}\right) \quad (\text{I.1.1})$$

Puisque on a supposé que $|Z_j eV| \ll kT$ alors on peut linéariser l'équation ci-dessus (I.1.1) comme ceci :

$$\rho_j = Z_j e n_{j0} \left(1 - \frac{Z_j e V}{k T_j} \right) \quad (\text{I.1.2})$$

Le système étant considéré neutre dans sa globalité (il y a autant de charges positives que de charges négatives), ce qui veut dire :

$$\sum_j Z_j e n_{j0} = 0 \quad (\text{I.1.3})$$

La densité de charge totale s'écrit :

$$\begin{aligned} \rho &= \sum_j \rho_j \\ &= -e^2 V \sum_j \frac{n_{j0} Z_j^2}{k T_j} \end{aligned} \quad (\text{I.1.4})$$

La densité de charge ρ est reliée au potentiel V par l'équation de Poisson :

$$\Delta V = -\frac{\rho}{\epsilon_0} \quad (\text{I.1.5})$$

En coordonnées sphériques, l'équation ci-dessus (I.1.5) devient :

$$\frac{\partial^2 V}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial V}{\partial r} = \left(\frac{e^2}{\epsilon_0} \sum_j \frac{n_{j0} Z_j^2}{k T_j} \right) V \quad (\text{I.1.6})$$

avec ϵ_0 la constante diélectrique du système étudié.

On définit une grandeur qu'on note λ_D comme ceci :

$$\lambda_D^2 = \frac{1}{\left(\frac{e^2}{\epsilon_0} \sum_j \frac{n_{j0} Z_j^2}{k T_j} \right)} \quad (\text{I.1.7})$$

λ_D a la dimension d'une longueur. La solution générale de l'équation (I.1.6) est de la forme :

$$V(r) = A \frac{\exp\left(\frac{-r}{\lambda_D}\right)}{r} + B \frac{\exp\left(\frac{+r}{\lambda_D}\right)}{r} \quad (\text{I.1.8})$$

En appliquant les conditions aux limites à savoir $V(r) \rightarrow 0$ pour des distances r très importantes et aussi pour de faibles distances r on a $V(r) \rightarrow Ze/\epsilon_0 r$. Par conséquent la solution aura l'expression suivante :

$$V(r) = \frac{Ze}{\epsilon_0 r} \exp\left(\frac{-r}{\lambda_D}\right) \quad (\text{I.1.9})$$

On retrouve le potentiel de Coulomb avec un facteur exponentiel qui dépend de la longueur λ_D appelée longueur de Debye-Hückel. Le potentiel $V(r)$ devient rapidement faible pour des distances comparables à λ_D contrairement à un potentiel standard coulombien. Cet effet est souvent désigné par un écrantage, c'est une mesure de la distance

d'un nuage de particules chargées qui entourent un ion donné, c'est-à-dire l'ensemble des particules chargées se réarrangent d'une manière à ce qu'une particule chargée donnée ne ressente plus les effets des particules chargées avoisinantes au delà de la distance de Debye. L'interprétation donnée par Debye-Hückel est celle d'une distance au delà de laquelle la quasi-neutralité est imposée, et les forces électrostatiques sont contrebalancées par les forces cinétiques. Pour des distances inférieures à λ_D la neutralité n'est plus vérifiée et les caractéristiques du système de particules contenues dans une sphère de rayon λ_D ne correspondent pas à celles d'un plasma.

Si la longueur de Debye d'un gaz ionisé est supérieure aux dimensions du système alors le gaz n'est pas considéré comme étant un plasma, donc il ne suffit pas d'avoir des particules chargées pour aboutir à un état plasma.

Si on remplace les particules chargées négativement par les électrons, alors la longueur de Debye relative aux électrons prend l'expression suivante :

$$\lambda_{De} = \sqrt{\frac{\epsilon_0 k T_e}{e^2 n_{e0}}} \quad (\text{I.1.10})$$

et celle relative aux ions :

$$\lambda_{Di} = \sqrt{\frac{\epsilon_0 k T_i}{e^2 n_{i0}}} \quad (\text{I.1.11})$$

Dans un gaz ionisé en équilibre thermique $T_e \approx T_i$ et $n_{e0} \approx n_{i0} \approx n$ alors on peut écrire :

$$\lambda_{De} \approx \lambda_{Di} \approx \sqrt{2} \lambda_D \quad (\text{I.1.12})$$

Pour résumer, l'existence d'un état plasma doit satisfaire a priori trois conditions : La première c'est la quasi-neutralité du système considéré dans sa globalité, c'est-à-dire le nombre de particules chargées positivement est équivalent aux nombres d'électrons. La deuxième condition réside dans la dimension du système L qui doit être beaucoup plus importante que la longueur de Debye λ_D . Finalement, la troisième condition suppose que le nombre des électrons dans la sphère de Debye (sphère dont le rayon est égale à λ_D) est relativement élevé.

Les trois conditions de l'existence d'un état plasma peuvent être formulées mathématiquement comme ceci [7, 8] :

$$\begin{aligned} n_e &= \sum_i n_i \\ L &\gg \lambda_D \end{aligned} \quad (\text{I.1.13})$$

$$n_e \lambda_D^3 \gg 1$$

I.1.3.2 La fréquence plasma

La pulsation plasma est donnée par $\sqrt{\frac{ne^2}{m\epsilon_0}}$ [9, 10]. Nous pouvons retrouver cette relation par un raisonnement simple. C'est-à-dire si on introduit une charge dans un plasma alors un potentiel va être créé localement et les particules chargées constituant le plasma vont vite se réarranger de sorte que le potentiel provoqué par la charge soit écranté afin que le plasma retrouve son équilibre initial. Le retour à l'équilibre est caractérisé par une fréquence propre au plasma $f_p = \omega_p/2\pi$ qui correspond approximativement à l'inverse du temps qu'une particule met pour parcourir une distance de l'ordre de la longueur de Debye dotée d'une vitesse thermique v_{th} , qu'on peut formuler comme ceci :

$$\begin{aligned}\omega_p &= \frac{v_{th}}{\lambda_D} \\ &= \frac{\sqrt{\frac{3kT}{m}}}{\sqrt{\frac{\epsilon_0 kT}{e^2 n}}} \\ &= \sqrt{\frac{ne^2}{m\epsilon_0}}\end{aligned}\tag{I.1.14}$$

La fréquence plasma, appelée aussi fréquence de Langmuir, est indépendante de la température du système. Une formule numérique usuellement utilisée pour la fréquence plasma relative aux électrons est celle-ci :

$$\begin{aligned}f_p &= \frac{\omega_p}{2\pi} \\ &\approx 8.98\sqrt{n_e}\end{aligned}\tag{I.1.15}$$

avec n_e la densité électronique donnée en m^{-3} . Par exemple si la densité électronique d'un plasma est de l'ordre de $10^{18} m^{-3}$ alors la fréquence plasma est de l'ordre de $9 GHz$, ce qui signifie que le temps de réponse des électrons du plasma à toute perturbation est d'environ de quelques nanosecondes. Si on considère une fréquence plasma relative aux ions, la réponse des ions du plasma à toute perturbation est de l'ordre de la microseconde, une différence qui s'explique par la masse des ions qui est beaucoup plus importante que celle des électrons.

Il ne faut pas confondre la fréquence plasma avec la fréquence de collision des particules. Les collisions entre électrons et particules neutres ν_{en} ont tendance à amortir le comportement collectif des oscillations ω du plasma, par conséquent la fréquence de collision ν_{en} doit être faible devant la fréquence plasma. Une quatrième condition de l'existence d'un état plasma, en plus des trois citées dans la section précédente I.1.3.1, peut être exprimée par l'inégalité suivante :

$$\omega\tau > 1\tag{I.1.16}$$

avec $\tau = 1/\nu_{en}$ le temps moyen entre deux collisions e^- – neutre. Si cette condition n'est pas satisfaite alors on parle de "gaz ionisé".

Il existe d'autres paramètres qui caractérisent les plasmas d'une manière générale, mais dans le cadre de notre travail, la longueur de Debye λ_D et la pulsation plasma ω_p sont les deux paramètres qui interviennent dans le calcul des coefficients de transport via les sections efficaces relatives aux interactions entre particules chargées.

I.2 Bases de la théorie cinétique des gaz

Cette partie est consacrée à la présentation des bases de la théorie cinétique des gaz et la description physique des phénomènes de transport. En effet, des notions de base comme l'espace des phase, la fonction de distribution ou le libre parcours moyen vont être abordées afin de mieux comprendre les phénomènes de transport et la démonstration mathématique des formules utilisées.

I.2.1 Introduction

La théorie cinétique des gaz a pour but d'expliquer les propriétés physiques des gaz mais aussi de prédire leur comportement et leur évolution dans l'espace-temps à l'échelle macroscopique à partir de ses constituants microscopiques.

En thermodynamique, les propriétés macroscopiques désignent d'une manière générale des quantités mesurables ou observables qui sont accessibles à notre échelle, à savoir l'enthalpie, la capacité calorifique, la masse volumique (densité volumique), les coefficients de transport (viscosité, conductivité thermique et coefficient de diffusion), etc. La température, la pression ou le volume sont définis comme étant des variables d'état, elles servent notamment à mettre en équation les propriétés macroscopiques auxquelles on pourrait donner des interprétations cinétiques.

L'hypothèse la plus fondamentale en théorie cinétique des gaz voire même des liquides ou des solides, est de considérer la discontinuité de la matière à l'échelle microscopique (échelle atomique ou moléculaire) qui est composée d'un nombre fini de particules identiques d'une même substance. Une autre hypothèse d'une importance capitale [11, 12, 13] d'après laquelle l'énergie thermique d'un gaz qui se manifeste sous forme de chaleur n'est autre chose qu'une conséquence du mouvement désordonné des molécules constituant le gaz.

Compte tenu du nombre important de molécules qui forment le gaz, l'expérience ne permet guère d'apporter des connaissances sur le mouvement individuel de chaque particule, par conséquent les propriétés observables des gaz deviennent des propriétés *moyennes*, autrement dit les actions *simultanées* d'un nombre élevé de molécules plus au moins concordantes [14] définissent l'état et les propriétés physiques de la matière considérée. Le détail de ces mouvements individuels non seulement nous est inconnu mais présente peu d'intérêt pour l'obtention des grandeurs macroscopiques.

Un calcul mathématique est nécessaire consistant non pas à déterminer les 10^{23} équations (De l'ordre du nombre d'Avogadro) de mouvement mais à rechercher des informations statistiques conduisant à des résultats moyens. Cette méthode était appelée autrefois théorie statistique des gaz, mais en réalité il existe deux approches différentes de la théo-

rie cinétique des gaz [15, 12], en plus de la méthode citée ci-dessus, l'autre méthode est nommée [13] théorie dynamique des gaz introduite pour la première fois par Maxwell [11] qui utilise la fonction de distribution des vitesses relative à un gaz en équilibre.

La théorie dynamique des gaz est une méthode qui consiste à analyser plus profondément un cas particulier d'une interaction inter-particulaire (II.3), puis à la généraliser sur tous les cas particuliers semblables en prenant en considération leur probabilité relative. En effet, la théorie dite dynamique des gaz suggère que les conditions initiales relatives aux positions et aux vitesses déterminent le comportement global et final (équilibre) du gaz, contrairement à la méthode purement statistique qui ignore les conditions initiales, et qui sont d'ailleurs parfois très mal connues. La théorie statistique des gaz ne prend en compte que les comportements moyens à chaque instant. Dans la suite de ce travail, nous nous intéresserons à la méthode dynamique des gaz plutôt qu'à l'approche statistique.

Les corrections dues à la mécanique quantique ou à la relativité ne sont pas prises en compte en théorie cinétique des gaz. A l'exception du calcul des sections efficaces ou de la chaleur spécifique où les effets quantiques sont parfois pris en considération [16]. Pour des gaz polyatomiques avec des molécules complexes, une étude de la structure est nécessaire pour déterminer les forces inter-moléculaires, cela se fait généralement à l'aide de la mécanique quantique. La plupart des lois utilisées reste dans le cadre classique obéissant aux principes de Newton.

I.2.2 Hypothèse d'un gaz parfait

A l'origine du développement de la théorie cinétique des gaz, les molécules constituant le gaz étaient considérées comme des points matériels impénétrables, de forme sphérique, de grande élasticité et de grande rigidité, que l'on peut assimiler à des boules de billard. Cette assimilation simplifiait considérablement les calculs et rendait les raisonnements plus faciles.

Ce modèle parfait du gaz supposerait implicitement que les particules éloignées les unes des autres n'exercent aucune interaction entre elles, en revanche si les particules sont au contact les unes des autres, elles vont se repousser avec une force de répulsion infiniment grande, ce qui rend les forces de cohésion totalement absentes. Le mouvement des particules est supposé rectiligne, uniforme, rapide et en tous sens. Les collisions (par contact) entre particules qui sont de nature purement élastique, dévierait les particules les unes des autres en subissant des modifications brusques en direction et en grandeur sur leurs vitesses. La durée de ces chocs est très courte comparée au temps pendant lequel progressent ces particules librement, ce qui est valable pour un gaz dilué, d'une densité faible avec une distance moyenne séparant les particules assez importante devant la taille des molécules. Les énergies mises en jeu sont de nature translationnelle (énergie cinétique), l'énergie de vibration ou de rotation sont à ignorer à cause de la structure des molécules supposée auparavant.

Un gaz parfait est une représentation idéaliste d'un état de la matière qui ne satisfait pas forcément les caractéristiques réelles d'un gaz en général, néanmoins les premiers résultats que pourrait donner ce modèle sont assez satisfaisants pour les gaz monoatomiques tels que les gaz rares (hélium, argon, krypton, xénon).

I.2.3 Fonction de distribution

Les particules ne sont jamais statiques contrairement à ce qu'il pourrait paraître au niveau macroscopique. Les chocs entre particules leur permettent d'avoir des vitesses isotropes extrêmement variées en module et en direction. A un instant donné une particule peut être ralentie, proche du repos, tandis qu'à un autre instant, par le fait d'un enchaînement de collisions adaptées, la particule peut être animée d'une vitesse très élevée comparée à la moyenne des autres particules. Une succession d'un tel processus à chaque instant dans tout l'espace laisse suggérer que toutes les vitesses imaginables (en module et en direction) sont possibles. La seule différence réside dans la probabilité qu'une particule possède une quelconque vitesse. D'une autre manière, les vitesses des différentes particules vont se répartir autour de la vitesse la plus probable avec des probabilités plus au moins importantes. Une question qui s'impose, qu'elle est la fonction mathématique qui régit cette répartition (distribution) des vitesses autour de leur moyenne ?

Avant de répondre à cette question, il faut d'abord satisfaire certaines conditions évidentes. Il faut que la densité des particules dans le gaz soit suffisamment élevée pour que les collisions puissent avoir lieu, il ne faut pas qu'une molécule traverse tout le volume occupé par le gaz sans subir un choc, et en même temps il faut que le gaz soit suffisamment dilué pour que la distance moyenne entre particules soit beaucoup plus importante devant la taille des molécules.

Il est clair que le changement des vitesses est dû uniquement aux collisions entre particules. On pourrait choisir arbitrairement une fonction mathématique à un instant t qui regroupe les différentes vitesses suivant cette fonction, cependant les chocs entre particules auront tendance à modifier cette fonction. En conclusion, si une fonction de distribution des vitesses existe, alors elle doit être indépendante des collisions même après un temps suffisamment long [13].

I.2.3.1 Espace des phases

A chaque instant t , une particule peut être localisée par un vecteur position \vec{r} qui relie l'origine du système des coordonnées au centre de masse de la particule, le vecteur \vec{r} peut s'écrire comme ceci :

$$\vec{r} = x\vec{e}_x + y\vec{e}_y + z\vec{e}_z \quad (\text{I.2.1})$$

\vec{e}_x , \vec{e}_y et \vec{e}_z représentent les vecteurs unités des coordonnées cartésiennes x , y et z , respectivement.

De la même façon, le vecteur vitesse \vec{v} du centre de masse de la particule pourrait être donné par :

$$\vec{v} = v_x\vec{e}_x + v_y\vec{e}_y + v_z\vec{e}_z \quad (\text{I.2.2})$$

tels que : $v_x = \frac{dx}{dt}$, $v_y = \frac{dy}{dt}$ et $v_z = \frac{dz}{dt}$

Dès à présent, on peut considérer qu'une molécule possède six coordonnées, les coordonnées spatiales (x, y, z) plus les composantes de sa vitesse (v_x, v_y, v_z) voir figure I.2.

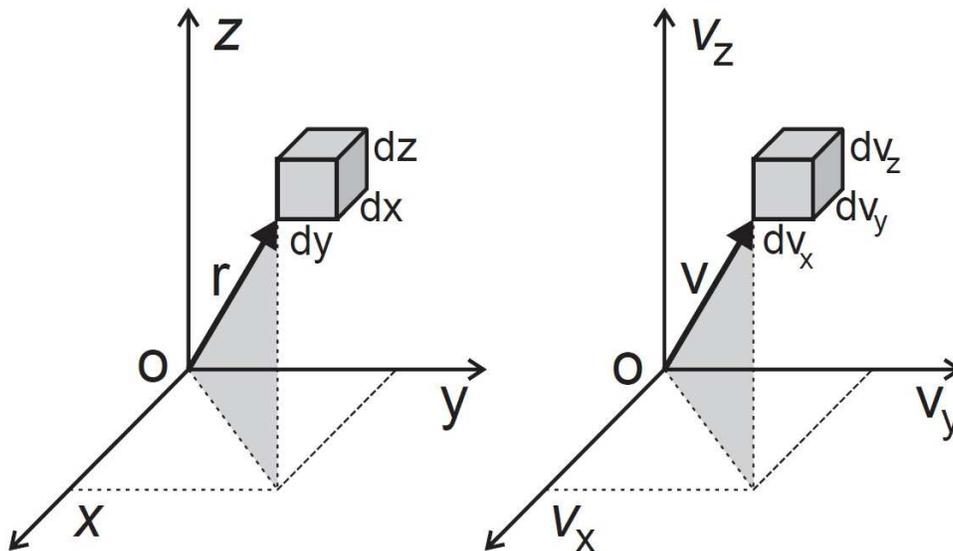


FIGURE I.2 – A gauche espace de configuration de petit élément de volume d^3r à la position r . A droite l'équivalent en espace des vitesses d^3v . L'ensemble constitue l'espace des phases d^3rd^3v .

La mécanique classique permet de décrire la dynamique instantanée d'une particule en spécifiant sa position et sa vitesse. Il revient à dire qu'une particule évolue dans un espace à six dimensions (x, y, z, v_x, v_y, v_z) qu'on appelle espace des phases défini par sa position et sa vitesse. Le mouvement de la particule est représenté par un point qui décrit une trajectoire dans l'espace des phases, et qui a pour coordonnées (\vec{r}, \vec{v}) . Si un gaz possède N particules, alors la dynamique du gaz sera représentée par N points de couple (\vec{r}, \vec{v}) dans l'espace des phases. On pourrait dire aussi sous un autre aspect, qu'un système de N particules décrit par N points de couple (\vec{r}, \vec{v}) est équivalent à un point représenté par une trajectoire qui évolue dans un espace à $6N$ dimensions, $3N$ dimensions relatives à la position $(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N)$ et $3N$ dimensions relatives à la vitesse $(\vec{v}_1, \vec{v}_2, \dots, \vec{v}_N)$.

Dans les conditions standard de pression et de température, le nombre de particules dans une mole est de l'ordre du nombre d'Avogadro ($\approx 6.022 \cdot 10^{23} \text{ mol}^{-1}$). La connaissance des valeurs des (\vec{r}, \vec{v}) correspondant à un tel nombre est impossible, c'est pourquoi l'utilisation des outils statistiques est nécessaire.

On définit un petit élément de volume $d^3r = dx dy dz$ dans l'espace des phases relatif aux positions comme étant une quantité infiniment petite devant le volume qu'occupe le gaz étudié de telle sorte que le petit élément de volume contienne suffisamment de particules, et que le nombre de particules par unité de volume soit homogène. Si on prend par exemple [8] un gaz qui contient 10^{18} molécules/ m^3 , et si on considère le volume $d^3r = 10^{-12} m^3$, qui pourrait paraître un point à l'échelle macroscopique, mais ce petit élément de volume contient 10^6 molécules. Quand une particule est localisée dans le petit élément de volume d^3r à la position \vec{r} , cela voudrait dire que la particule possède des coordonnées spatiales x, y et z qui sont comprises entre $x + dx, y + dy$ et $z + dz$ à l'intérieur du petit élément de volume $dx dy dz$.

Un même raisonnement peut être fait pour l'espace des vitesses. Un petit élément de volume dans l'espace des vitesses qu'on note $d^3v = dv_x dv_y dv_z$, à l'intérieur de ce petit élément de volume, une particule peut avoir une vitesse qui a pour composantes v_x, v_y et v_z qui sont comprises entre $v_x + dv_x, v_y + dv_y$ et $v_z + dv_z$. Si on prend les deux petits éléments de volume d^3r et d^3v dans l'espace des phases global, alors on peut écrire :

$$d^3r d^3v = dx dy dz dv_x dv_y dv_z \quad (\text{I.2.3})$$

Il faut noter qu'à l'intérieur de ce petit élément de volume (6 dimensions) dans l'espace des phases $d^3r d^3v$ le nombre de représentation de point est une fonction qui dépend uniquement de la position et du temps, de plus les variables r et v ne sont pas conjuguées, c'est-à-dire elles sont indépendantes l'une de l'autre.

I.2.3.2 Fonction de distribution

On note $d^6N(\vec{r}, \vec{v}, t)$ le nombre de particules à l'intérieur du petit élément de volume $d^3r d^3v$ dans l'espace des phases à un instant t (à chaque instant, il peut y avoir des particules qui sortent et qui rentrent dans le petit élément de volume par effet de collisions). On définit ensuite une sorte de densité (nombre de point (\vec{r}, \vec{v}) par unité de volume dans l'espace des phases) de points représentatifs des particules dans l'espace des phases comme suit :

$$\frac{d^6N(\vec{r}, \vec{v}, t)}{d^3r d^3v} = f(\vec{r}, \vec{v}, t) \quad (\text{I.2.4})$$

La fonction densité $f(\vec{r}, \vec{v}, t)$ dans l'espace des phases n'est autre que la fonction de distribution, appelée aussi densité de probabilité. On suppose que cette fonction satisfait certains critères, à savoir la continuité à son voisinage, c'est-à-dire la densité ne doit pas varier brusquement à son voisinage. La fonction $f(\vec{r}, \vec{v}, t)$ est positive et finie à chaque instant t . Une autre condition que doit satisfaire cette fonction, est de considérer une limite pour les vitesses. Les vitesses des particules ne doivent pas augmenter indéfiniment par effet de chocs, par conséquent la fonction $f(\vec{r}, \vec{v}, t)$ tend vers zéro pour des valeurs de vitesses très élevées.

Dans un gaz, ou dans un plasma soumis à aucune force extérieure, les interactions inter-particulaires ont tendance à réarranger les particules dans l'espace d'une façon homogène, par conséquent la fonction de distribution ne dépendra plus de la position r $f(\vec{r}, \vec{v}, t) \rightarrow f(\vec{v}, t)$.

La fonction de distribution peut être aussi isotrope dans l'espace des vitesses, c'est-à-dire elle ne dépend pas de l'orientation des vitesses mais seulement de leur module $v = |\vec{v}|$.

Enfin, un plasma en équilibre thermique est caractérisé par une fonction de distribution homogène, isotrope et indépendante du temps, $f(\vec{r}, \vec{v}, t) \rightarrow f(v)$, d'où l'appellation fonction de distribution des vitesses.

Il faut rappeler que toute la théorie de la cinétique des gaz ou des plasmas est basée sur la connaissance et l'utilisation de la fonction de distribution $f(\vec{r}, \vec{v}, t)$. L'ensemble des

propriétés macroscopiques découlent directement de cette fonction de distribution.

On définit $n(\vec{r}, t)$ comme étant une densité de particules représentée par le nombre de particules par unité de volume (à ne pas confondre avec le nombre de point par unité de volume dans l'espace des phases) indépendamment de la vitesse. Si on intègre $d^6 N(\vec{r}, \vec{v}, t)$ par rapport à toutes les vitesses possibles et imaginables (de $-\infty$ à $+\infty$) à l'intérieur du petit élément de volume dans l'espace des phases, et en divisant le résultat par unité de volume $d^3 r$ comme ceci :

$$n(\vec{r}, t) = \frac{1}{d^3 r} \int_v d^6 N(\vec{r}, \vec{v}, t) \quad (\text{I.2.5})$$

en utilisant l'équation (I.2.4), on obtient :

$$n(\vec{r}, t) = \int_v f(\vec{r}, \vec{v}, t) d^3 v = \int_{v_x} \int_{v_y} \int_{v_z} f(\vec{r}, \vec{v}, t) dv_x dv_y dv_z \quad (\text{I.2.6})$$

De la même façon on peut définir une vitesse moyenne $u(\vec{r}, t)$ correspondant au flux de particules qui rentrent ou qui sortent du petite élément de volume dans l'espace des phases :

$$n(\vec{r}, t).u(\vec{r}, t) = \frac{1}{d^3 r} \int_v \vec{v}.d^6 N(\vec{r}, \vec{v}, t) \quad (\text{I.2.7})$$

En combinant cette équation avec l'équation (I.2.4), on aboutit à l'équation suivante relative à la vitesse moyenne :

$$u(\vec{r}, t) = \int_v \vec{v}.f(\vec{r}, \vec{v}, t) d^3 v \quad (\text{I.2.8})$$

Les variables $n(\vec{r}, t)$ et $u(\vec{r}, t)$ sont des quantités macroscopiques qui ne dépendent que de r et de t , il suffit de déterminer la fonction de distribution $f(\vec{r}, \vec{v}, t)$ pour n'importe quel milieu (gazeux ou plasma) pour trouver leurs valeurs correspondantes. D'autres quantités macroscopiques (pression, température, flux de chaleur..etc) peuvent être déterminées avec la même méthode.

L'équation différentielle qui gouverne les variations spatio-temporelle de la fonction de distribution est une équation cinétique connue sous le nom d'équation de Boltzmann (ou équation de Liouville) qu'on abordera par la suite. Les équations qui gouvernent les variations des quantités macroscopiques (densité, quantité de mouvement, température ou pression) sont des équations dites hydrodynamiques et qui sont le résultat de l'intégration des équations cinétiques.

I.2.4 Le libre parcours moyen

En respectant les hypothèses d'un gaz parfait citées dans la section précédente I.2.2, nous allons introduire le concept du libre parcours moyen, ou chemin moyen introduit pour la première fois par Rudolf Clausius en 1858 et le taux de relaxation (ou fréquence de collision) entre molécules qui nous permettra d'appréhender les phénomènes de transport et d'avoir une approche simplifiée des coefficients de transport.

Durant un certain temps suffisamment long une particule peut subir plusieurs collisions avec d'autres particules de même ou d'une autre espèce. La distance parcourue par

la particule entre deux chocs successifs est extrêmement variable d'autant que sa vitesse change continuellement après chaque collision. Pour évaluer cette distance il faut travailler sur des quantités moyennes tout en supposant une forme sphérique pour les molécules, on exclut toute interaction agissant à distance au cours de leur progression. Sinon la distance moyenne parcourue par une molécule ne sera plus représentée comme un segment de droite. Cette distance moyenne appelé libre parcours moyen ou chemin moyen [14] est liée en réalité à deux types de collision : une collision qui se fait entre particules et une collision entre une particule et le mur de l'enceinte où se trouvent l'ensemble des particules. On suppose une enceinte infinie, on ne s'intéressera qu'aux collisions entre particules.

Considérant une espèce de particule de diamètre d qui se déplace en ligne droite avec une vitesse v , la particule ne subit aucun changement de direction du moment qu'elle n'a pas rencontré une autre particule identique. On définit une surface effective de collision (on l'appelle aussi section efficace voir section II.2) donnée par πd^2 pour laquelle une collision ne peut avoir lieu que si le centre d'une autre particule touche cette surface voir la figure I.3. Dans un intervalle de temps dt , la surface de collision $\sigma = \pi d^2$ va balayer un volume (de forme cylindrique) qui correspond à $\pi d^2 v dt$. Si n représente la densité de particules, alors le nombre de particules dont leurs centres pourraient se trouver dans le cylindre est donné par $n \pi d^2 v dt$. Donc, en une seconde ($dt = 1s$) le nombre de collision par seconde que la particule pourrait subir est noté $\nu = n \pi d^2 v$, par conséquent la distance moyenne ou le libre parcours ℓ moyen entre deux collisions successives est donné par :

$$\ell = \frac{v}{\nu} = \frac{1}{n \pi d^2} \quad (\text{I.2.9})$$

La loi des gaz parfaits nous permet d'écrire $n = p/kT$, avec k , p et T représentant la constante de Boltzmann, la pression et la température, respectivement. L'équation (I.2.9) prend l'expression suivante :

$$\ell = \frac{kT}{p \pi d^2} = \frac{kT}{p \sigma} \quad (\text{I.2.10})$$

On voit bien que le libre parcours moyen est inversement proportionnel à la pression, ce qui paraît logique, plus la pression est grande, plus la probabilité de collision entre deux particules est importante et plus le libre parcours moyen diminue. Le même résultat pourrait être obtenu en utilisant le principe de probabilité et les fonctions de distribution [9, 17].

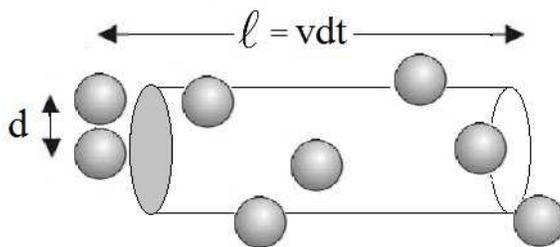


FIGURE I.3 – Illustration du libre parcours moyen en terme de section effective de collision. Le centre de chaque particule qui n'est pas contenu dans le cylindre de volume $\pi d^2 \ell$ ne participe pas aux chocs avec la particule considérée (particule test). Sur la figure schématique on constate que 3 particules ne participent pas aux collisions avec la particule test.

Les vitesses des particules suivent une distribution de Maxwell, voir section I.3.2.1, donc une correction devrait être faite sur la formule du libre parcours moyen en ajoutant un facteur $1/\sqrt{2}$ proposé par Maxwell :

$$\begin{aligned}\ell &= \frac{1}{\sqrt{2}} \frac{kT}{p\sigma} \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} \frac{1}{n\sigma}\end{aligned}\tag{I.2.11}$$

Si on suppose que la vitesse v des particules est identifiable à la vitesse moyenne² déduite de la distribution de Maxwell voir équation (I.3.74), on donne alors la formule de la fréquence de collision comme ceci :

$$\begin{aligned}\nu &= \sqrt{2} \frac{p\sigma}{kT} \sqrt{\frac{8kT}{\pi m}} \\ &= 4p\sigma \sqrt{\frac{1}{\pi m kT}} \\ &= 4n\sigma \sqrt{\frac{kT}{\pi m}}\end{aligned}\tag{I.2.12}$$

On en déduit le temps entre deux collisions τ :

$$\begin{aligned}\tau &= \frac{1}{\nu} \\ &= \frac{1}{4\sigma} \frac{\sqrt{\pi m kT}}{p} \\ &= \frac{1}{4\sigma} \frac{\sqrt{\frac{\pi m}{kT}}}{n}\end{aligned}\tag{I.2.13}$$

Dans un système de particules constitué de plusieurs espèces, le libre parcours moyen ℓ_α correspondant à une espèce quelconque α sera donné par la formule suivante [16] :

$$\ell_\alpha = \frac{1}{\sum_{i=1}^K n_i \sigma_{i\alpha} \sqrt{\frac{m_\alpha + m_i}{m_i}}}\tag{I.2.14}$$

avec $\sigma_{i\alpha} = \pi(d_i + d_\alpha)^2$ la section efficace relative aux particules α et i , de diamètre d_α et d_i , respectivement.

La distance moyenne d_{moy} entre particules dans un gaz de densité N est donnée par :

$$d_{moy} = \frac{1}{N^{1/3}}\tag{I.2.15}$$

2. Le choix de la vitesse moyenne paraît le choix le plus adéquat néanmoins certains auteurs optent pour la vitesse thermique qui correspond à la vitesse quadratique moyenne $v_{th} = \sqrt{3kT/m}$.

Sous les conditions standard de pression et de température, le nombre de molécules par centimètre cube est de l'ordre $2,7 \cdot 10^{19}$ et la distance moyenne entre particules $d_{moy} \approx 3 \cdot 10^{-7} \text{ cm}$. Si on considère une molécule O_2 ou N_2 , leur diamètre moyen est environ $3 \cdot 10^{-8} \text{ cm}$, alors le libre parcours moyen correspondant est de l'ordre de $900 \cdot 10^{-8} \text{ cm}$, 30 fois plus grand que la distance moyenne entre particules. Ainsi, on observe que bien que la distance entre les particules est relativement faible la distance que parcourt une molécule, en moyenne, avant de se heurter avec une autre est beaucoup plus importante. Une autre remarque importante, étant donné que la vitesse des molécules est de l'ordre de $500 \text{ m.s}^{-1} = 5 \cdot 10^4 \text{ cm.s}^{-1}$ voir section I.3.2.3, on constate que la molécule en une seconde subit environ $5 \cdot 10^{11}$ collisions, ce qui explique que la diffusion de certain gaz dans l'espace prend un temps relativement long par rapport au temps entre deux collisions.

Remarque. *Si la densité d'un gaz est très faible au point que le libre parcours moyen devient plus grand que les dimensions du récipient qui contient le gaz, alors les collisions se font contre les parois du récipient et non pas entre deux particules. Une telle situation est identifiée à un gaz dit "gaz de Knudsen".*

I.2.5 Phénomène et coefficients de transport

Le concept élémentaire du libre parcours moyen est un outil d'une importance capitale qui va nous permettre de formaliser les phénomènes de transport et de les mettre en équation.

Le phénomène de collision entre particules est certainement le processus le plus élémentaire qui se passe au sein d'un système gazeux (ou plasma). Toutes les propriétés d'un gaz sont reliées directement ou indirectement à ce processus élémentaire. Une collision entre deux particules permet d'échanger leurs propriétés respectives l'une vers l'autre, on parle notamment de la quantité de mouvement et de l'énergie cinétique, et ce d'une manière continue de proche en proche. Le caractère conservatif, voir section I.3.2.4, de ces quantités transportées va leur servir à être déplacées d'un endroit vers un autre dans l'espace.

La fonction $H(t)$ de Boltzmann ou l'entropie d'un système, qu'on traitera dans la section I.3.2.4 tend souvent, d'une manière monotone, vers une valeur limite (maximale pour l'entropie et minimale pour $H(t)$). Ce qui signifie que quelque soit le système thermodynamique isolé de toute interaction avec le milieu extérieur, il aura toujours tendance à retrouver son état d'équilibre le plus stable au bout d'un certain de temps. Un système soumis à une perturbation qui le force à être dans un état hors équilibre non stable retourne à l'équilibre par un transport de propriétés spécifiques de chaque gaz.

Par exemple, supposant que si initialement le nombre de particules par unité de volume dans un gaz est homogène, régulièrement répartie dans l'espace, constant et indépendant du temps, et si on introduit une surdensité dans un endroit quelconque dans le gaz, alors le système cessera d'être en équilibre. La distance moyenne entre particule (I.1.1) n'est plus homogène dans l'espace. Par conséquent les collisions entre particules vont faire en sorte que cette distance redevienne homogène et équilibrée. Les zones les plus denses peuplent les zones les moins denses. On parle ainsi du phénomène de diffusion caractérisé par un coefficient de diffusion. Avec le même raisonnement, toute propriété conservée

dans le temps est susceptible d'être transportée dans le gaz. Si on remplace la surdensité par une surchauffe (température élevée) alors on obtient un phénomène de transport de chaleur caractérisé par un coefficient de conductivité thermique, de même pour la quantité de mouvement qui se traduit par le phénomène de transport de la quantité de mouvement caractérisé par un coefficient de frottement ou de viscosité.

Pour mettre en équation ces coefficients de transport, on opte pour la méthode dite du libre parcours moyen, pour laquelle deux conditions doivent être satisfaites. La première condition est de considérer que le libre parcours moyen ℓ est très faible devant les dimensions caractéristiques du système étudié (L), ce qui signifie que les variations des quantités macroscopiques devant le libre parcours moyen sont négligeables. Si on note G une quantité macroscopique du système alors la condition peut être formulée comme suit :

$$\left\{ \begin{array}{l} \ell \ll L \\ \frac{1}{L} \equiv \left| \frac{\Delta G}{G} \right| \end{array} \right. \quad (\text{I.2.16})$$

La deuxième condition est relative au développement en série de Taylor de la variation de la quantité macroscopique G . L'expansion en série de Taylor de G en un point arbitraire r_0 dans le gaz doit converger pour des distances comparables avec le libre parcours moyen ℓ . On peut écrire alors [16] :

$$|G(r_0)| \gg \ell |\Delta G(r_0)| \gg \ell^2 |\Delta\Delta G(r_0)| \gg \ell^3 |\Delta\Delta\Delta G(r_0)| \gg \dots \quad (\text{I.2.17})$$

Afin d'examiner comment la grandeur G est transportée d'un endroit vers un autre dans l'espace, pour simplifier le raisonnement, considérant d'abord un plan fictif $P \equiv C^{te}$ sur lequel la grandeur G est déplacée de part et d'autre suivant un axe z perpendiculaire au plan P . Appelons le nombre moyen de particules qui traversent ce plan fictif par unité de surface et de temps nv . On considère que G_+ est la quantité qui traverse le plan dans la direction positive suivant l'axe z et G_- est la quantité qui traverse le plan dans la direction négative suivant le même axe z . On définit alors le flux net Γ_G correspondant à la quantité nette G transportée suivant la direction positive de l'axe z comme ceci :

$$\begin{aligned} \Gamma_G &= \Gamma_{G_+} - \Gamma_{G_-} \\ &= nv [G_+(z - \Delta z)] - nv [G_-(z + \Delta z)] \\ &= -2nv\Delta z \frac{\partial G}{\partial z} \end{aligned} \quad (\text{I.2.18})$$

Les particules qui arrivent vers le plan P , ont subi leur dernière collision à une distance égale à Δz , et d'après la théorie du libre parcours moyen voir section 1.2.4, la distance moyenne entre deux collisions successives correspond bien au libre parcours moyen ℓ , donc en remplaçant Δz par ℓ dans l'équation (I.2.18), on obtient :

$$\begin{aligned} \Gamma_G &= -2nv \ell \frac{\partial G}{\partial z} \\ &= -2nv \ell \nabla_z G \\ &= -\psi \nabla_z G \end{aligned} \quad (\text{I.2.19})$$

$\psi = 2nvl$ représente un coefficient de proportionnalité qui caractérise la quantité transportée, qu'on appelle coefficient de transport.

Les flux qui peuvent se développer dans un fluide gazeux ou plasma sont généralement la masse, la charge, la chaleur et la quantité de mouvement. L'équation (I.2.19) qui relie le flux au gradient de la quantité transportée G est connue sous différentes formes, elle peut prendre la forme de la loi de Fourier pour le transport de la chaleur, la loi de Fick pour la diffusion de la matière et la loi de Newton pour les frottements et la viscosité.

I.2.5.1 Coefficient de diffusion

On a vu dans la section précédente I.2.5 que, si on crée une surdensité dans un gaz initialement en équilibre thermodynamique, alors naturellement il va y avoir une création de gradient et un déplacement effectif (net) de molécules de la zone la plus dense vers les zones les moins peuplées, voir figure I.4, jusqu'à ce que la répartition de particules soit en moyenne équilibrée dans tout le système. La loi qui relie le flux de particules au gradient de densité est donnée par la loi de Fick. Si on remplace la quantité transportée G dans l'équation (I.2.19) par la densité moléculaire n , alors on obtient la loi de diffusion développée par Fick :

$$\vec{\Gamma}_n = -D\vec{\nabla}n \quad (\text{I.2.20})$$

avec D le coefficient de proportionnalité, appelé généralement coefficient de diffusion, qui relie le courant de particules au gradient de densité. Le signe $(-)$ signifie que la migration des particules se fait des régions les plus concentrées aux régions moins peuplées.

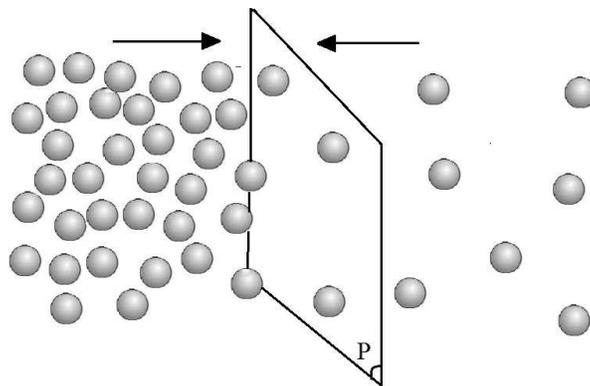


FIGURE I.4 – Représentation schématique d'une surdensité dans un endroit d'un système gazeux et qui crée une migration de particules, en moyenne, d'une zone dense aux zones les moins peuplées.

Avec un raisonnement relativement simple, analogue à celui développé dans la section I.2.5, on peut trouver une première approximation du coefficient de diffusion D . On considère deux espèces de particules de densités différentes n_1 et n_2 qui peuvent varier d'un endroit à un autre dans le mélange gazeux. Soit ℓ_1 le libre parcours moyen relatif à l'espèce de particule n_1 qui a pour vitesse moyenne v_1 et soit ℓ_2 libre parcours moyen relatif à l'espèce de particule n_2 qui a pour vitesse moyenne v_2 . On suppose que la diffusion

se fait parallèlement à l'axe des z perpendiculaire au plan P . On peut écrire dès lors, le système d'équations suivant :

$$\begin{cases} n_1 = \frac{n}{2} + z \frac{dn_1}{dz} \\ n_2 = \frac{n}{2} + z \frac{dn_2}{dz} \\ n = n_1 + n_2 \end{cases} \quad (\text{I.2.21})$$

n est la somme des deux densités, ce qui fait que n est une constante.

On note n'_1 le nombre de particules de la première espèce qui traversent l'unité de surface du plan P par unité de temps en faisant un angle compris entre θ et $\theta + d\theta$ avec l'axe z et qui ont subi une dernière collision dans un plan P' d'ordonnée z' à une distance qui égale au libre parcours moyen ℓ_1 tel que [14] :

$$\begin{cases} dj_1 = \frac{n'_1 v_1}{2} \sin \theta \cos \theta d\theta \\ n'_1 = \frac{n}{2} + z' \frac{dn_1}{dz} \\ z' = z - \ell_1 \cos \theta \end{cases} \quad (\text{I.2.22})$$

La première équation du système (I.2.22) peut être intégrée par rapport à θ de $\theta = 0$ à $\theta = \pi$, pour aboutir au nombre total de particules de première espèce qui traversent le plan P par unité de temps :

$$j_1 = -\frac{\ell_1 v_1}{3} \frac{dn_1}{dz} \quad (\text{I.2.23})$$

De la même façon on trouve le nombre total de particules de deuxième espèce qui traverse le plan P par unité de temps :

$$j_2 = \frac{\ell_2 v_2}{3} \frac{dn_2}{dz} \quad (\text{I.2.24})$$

Par conséquent, le flux de particules de l'espèce 1 déplacées est de la forme suivante :

$$\begin{aligned} \Gamma_1 &= j_1 - (j_1 - j_2) \frac{n_1}{n_1 + n_2} \\ &= -\left(\frac{\ell_1 v_1 n_2 + \ell_2 v_2 n_1}{3(n_1 + n_2)} \right) \frac{dn_1}{dz} \end{aligned} \quad (\text{I.2.25})$$

Par analogie avec l'équation (I.2.20), on aboutit à l'expression fondamentale du coefficient de diffusion relatif à la diffusion d'un gaz dans un autre :

$$\begin{aligned}\Gamma_1 &= -D \frac{dn_1}{dz} \\ D &= \left(\frac{\ell_1 v_1 n_2 + \ell_2 v_2 n_1}{3(n_1 + n_2)} \right)\end{aligned}\tag{I.2.26}$$

L'unité du coefficient D peut être déduite de l'équation (I.2.26), et elle est donnée par : $[m^2 s^{-1}]$. Il faut noter que D est le même pour les deux espèces. Pour un cas d'un système à une seule espèce on trouve l'expression simplifiée de coefficient de diffusion, appelé coefficient d'auto-diffusion ou self-diffusion, en explicitant les formules du libre parcours moyen, équation (I.2.11) et la vitesse moyenne, équation (I.3.74), on obtient donc :

$$\begin{aligned}D &= \frac{\ell \langle v \rangle}{3} \\ &= \frac{1}{3} \frac{1}{\sqrt{2} n \sigma} \sqrt{\frac{8kT}{\pi m}} \\ &= \frac{2}{3} \frac{1}{\sigma \rho} \sqrt{\frac{mkT}{\pi}}\end{aligned}\tag{I.2.27}$$

avec $\rho = mn$ la masse volumique du gaz.

On retrouve la proportionnalité entre la diffusion et la température, plus le gaz est chaud plus l'agitation thermique est importante plus la diffusion est rapide. Contrairement à la densité, la diffusion est inversement proportionnelle au nombre de particules par unité de volume.

I.2.5.2 Viscosité

La particularité de la viscosité par rapport aux autres coefficients est que la quantité transportée est une quantité vectorielle, contrairement à la conductivité thermique ou la diffusion qui sont des quantités scalaires.

L'exemple souvent le plus cité pour illustrer l'effet de la viscosité est une simple expérience qui permet de mettre en évidence le transport de la quantité de mouvement sous forme de frottement. En effet, si on imagine deux plaques parallèles, l'une qui se déplace en mouvement parallèle avec une vitesse v_0 , l'autre qui est supposée au repos suivant l'axe Ox , voir figure I.5. Les deux plaques sont séparées par une couche gazeuse. Initialement on suppose que le mouvement du fluide vers la plaque fixe est au repos dans son ensemble (ce qui n'est pas le cas pour les molécules constituant le fluide, qui sont toujours en agitation perpétuelle, mais qui n'empêche pas que la vitesse particulière puisse être nulle voir section I.3.2.1). Au bout d'un certain temps suffisamment long qui permet d'aboutir à un régime permanent, on peut remarquer que la plaque en mouvement entraîne le gaz dans son mouvement jusqu'à ce que le frottement soit communiqué à la deuxième plaque qui est fixe, avec une intensité plus faible que le frottement d'origine. Expérimentalement on peut vérifier que le fluide adhère aux frottements de la plaque mobile avec des vitesses v_x proportionnelles à la distance suivant l'axe oz perpendiculaire aux deux plaques. On

peut vérifier également que la plaque au repos subit une force de frottement ou d'entraînement parallèle à l'axe Ox dont la valeur absolue est proportionnelle au gradient de vitesse suivant une loi qui est donnée ci-dessous :

$$R = -\eta \frac{dv_x}{dz} \quad (\text{I.2.28})$$

avec η le coefficient de proportionnalité, appelé coefficient de frottement (cisaillement) ou viscosité qui est propre à chaque gaz sous une température et une pression données.

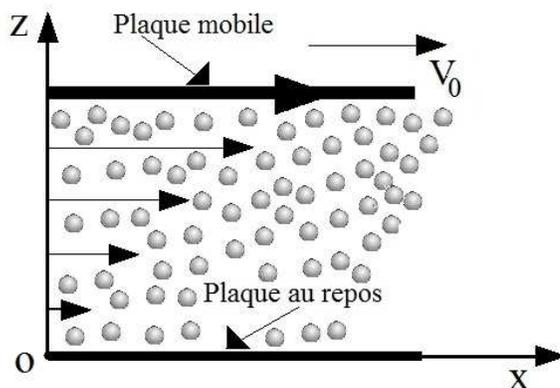


FIGURE I.5 – Représentation schématique de l'effet de la viscosité. Deux plaques parallèles, l'une au repos et l'autre en mouvement séparées par une couche gazeuse. En régime permanent, la plaque fixe est entraînée par la plaque mobile dotée d'une vitesse v_0 , par l'intermédiaire d'un transfert de quantité de mouvement propre à chaque fluide.

Maxwell a été le premier à donner une explication cinétique du phénomène de la viscosité dans les gaz [18]. Par effet des collisions, la quantité de mouvement est transportée incessamment de la région en bas (coté de la plaque fixe) vers la région en haut (coté de la plaque mobile) et inversement du haut vers le bas. L'existence d'un gradient de vitesse (inhomogénéité de la vitesse dans le fluide) fait en sorte que le transport se fait en moyenne d'en haut vers le bas : la quantité de mouvement nette communiquée de la plaque en mouvement vers la plaque au repos rapportée à l'unité de surface et de temps correspond à la force de frottement \vec{R} que subit la plaque fixe.

On considère que la vitesse des molécules est donnée par la vitesse moyenne v . On note ℓ le libre parcours moyen qui est égale à la distance des particules qui les séparent du plan P au plan P' où elles ont subi leur dernière collision. On suppose que θ est l'angle entre des particules et l'axe z perpendiculaire aux deux plaques. On définit ensuite une vitesse v_p comme étant une vitesse parallèle à l'axe Ox qui correspond à la résultante de la contribution de la vitesse thermique v_{th} et de la vitesse d'entraînement dans le plan P' d'ordonnée z' due aux frottements de la plaque mobile, soit $z' \frac{dv_x}{dz}$. On peut écrire alors [14] :

$$\begin{aligned} v_p &= v_{th} + z' \frac{dv_x}{dz} \\ &= v_{th} + (z - \ell \cos \theta) \frac{dv_x}{dz} \end{aligned} \quad (\text{I.2.29})$$

L'agitation thermique des particules dans leur ensemble ne contribue pas au déplacement de la quantité de mouvement, par conséquent la quantité de mouvement effective Q^{vt} transportée au travers du plan P parallèlement à Ox est donnée par :

$$Q^{vt} = m(z - \ell \cos \theta) \frac{dv_x}{dz} \quad (\text{I.2.30})$$

Le nombre de particules qui traverse l'unité de surface du plan P par unité de temps en faisant un angle compris entre θ et $\theta + d\theta$ avec l'axe z et qui ont subi une dernière collision dans un plan P' d'ordonnée z' à une distance qui est égale au libre parcours moyen ℓ est donné par :

$$dj = \frac{nv}{2} \sin \theta \cos \theta d\theta \quad (\text{I.2.31})$$

Finalement, la quantité de mouvement totale effective qui est transportée par unité de surface et par unité de temps est obtenue en intégrant par rapport à θ de $\theta = 0$ à $\theta = \pi$:

$$\begin{aligned} R &= - \int_0^\pi m(z - \ell \cos \theta) \frac{dv_x}{dz} \frac{nv}{2} \sin \theta \cos \theta d\theta \\ &= \frac{nmv\ell}{2} \frac{dv_x}{dz} \int_0^\pi \sin \theta \cos^2 \theta d\theta \\ &= \frac{nmv\ell}{3} \frac{dv_x}{dz} \end{aligned} \quad (\text{I.2.32})$$

avec R la force de frottement ou de viscosité. Par identification avec l'équation (I.2.28), on obtient l'expression de la viscosité ($kg.m^{-1}.s^{-1}$) :

$$\begin{aligned} \eta &= \frac{nmv\ell}{3} \\ &= \frac{nm}{3} \frac{1}{\sqrt{2}n\sigma} \sqrt{\frac{8kT}{m\pi}} \\ &= \frac{2}{3\sigma} \sqrt{\frac{mkT}{\pi}} \end{aligned} \quad (\text{I.2.33})$$

En première approximation, la viscosité d'un gaz peu dense est indépendante de la pression, elle ne dépend que de la température contrairement à ce qu'on pourrait s'attendre. A contrario, pour les gaz dotés d'une densité très élevée, les effets des forces intermoléculaires deviennent plus importantes, et cette approximation n'est alors plus valide.

I.2.5.3 Conductivité thermique

Tout comme la diffusion et la viscosité, la conductivité thermique suit une loi qui relie un flux de chaleur au gradient de température. Cette loi connue sous le nom de loi de Fourier, prend l'expression suivante :

$$\vec{q} = -\kappa \vec{\nabla} T \quad (\text{I.2.34})$$

avec κ le coefficient de conductivité thermique (conductibilité). L'équation (I.2.34) exprime que la chaleur va de la zone la plus chaude vers la zone la plus froide.

On considère que la quantité transportée G abordée dans la section I.2.5 correspond à l'énergie thermique d'une molécule qui traverse le plan P perpendiculaire à l'axe z , et que la température T décroisse avec l'ordonnée z , par conséquent on peut écrire :

$$T = T_0 - z \frac{dT}{dz} \quad (\text{I.2.35})$$

On note c_v la chaleur spécifique à volume constant du système. L'énergie calorifique déplacée par une particule de masse m qui traverse le plan P est donnée par :

$$\begin{aligned} mc_v T &= mc_v \left(T_0 + z \frac{dT}{dz} \right) \\ &= mc_v T_0 + mc_v z \frac{dT}{dz} \end{aligned} \quad (\text{I.2.36})$$

Avec le même raisonnement que pour la diffusion, on définit le transport de la chaleur par unité de surface et par unité de temps comme suit [14] :

$$\Gamma_T = -\frac{nv\ell}{3} mc_v \frac{dT}{dz} \quad (\text{I.2.37})$$

Le deuxième terme de l'équation (I.2.36) est le seul terme qui participe au transport de la chaleur étant donné que le premier terme est une constante. Par analogie avec l'équation (I.2.34) on en déduit l'expression de la conductivité thermique ($J.K^{-1}.m^{-1}.s^{-1}$) :

$$\begin{aligned} \kappa &= \frac{nmv\ell}{3} c_v \\ &= \frac{nm}{3} c_v \frac{1}{\sqrt{2n\sigma}} \sqrt{\frac{8kT}{\pi m}} \\ &= \frac{2c_v}{3\sigma} \sqrt{\frac{mkT}{\pi}} \end{aligned} \quad (\text{I.2.38})$$

Remarque. *L'un des résultats le plus remarquable du développement des coefficients de transport, quantités macroscopiques, est qu'ils sont obtenus en utilisant le concept du libre parcours moyen qui est une quantité microscopique. Les trois grandeurs (I.2.33), (I.2.27) et (I.2.38) peuvent être exprimées l'une en fonction de l'autre voir équation (I.2.39). En conclusion, les différents phénomènes macroscopiques sont une manifestation d'un seul phénomène microscopique sous plusieurs formes à l'échelle macroscopique.*

$$D = \frac{\kappa}{\rho c_v} = \frac{\eta}{\rho} \quad (\text{I.2.39})$$

Le tableau récapitulatif I.1 [6] répertorie les propriétés traitées dans les sections précédentes, données pour quelques gaz (He , Ar et N_2). Les valeurs théoriques sont des valeurs calculées en utilisant les formules (I.2.33), (I.2.27) et (I.2.38). Les valeurs mesurées correspondent aux valeurs expérimentales qui peuvent être trouvées dans [6]. On obtient une bonne concordance des résultats dans la gamme de températures considérées.

TABLE I.1 – Propriétés cinétique de quelques gaz calculées avec la théorie cinétique des gaz [6].

| Gaz | M^1 | σ (\AA) | T (K) | ℓ (\AA) | ν (10^9s^{-1}) | V_{moy}^2 ($10^4 \text{cm} \cdot \text{s}^{-1}$) | D ($\text{cm}^2 \cdot \text{s}^{-1}$) | | η (10^{-8}Pas) | | κ ($10^{-7} \text{cal/cm} \cdot \text{s} \cdot ^\circ\text{C}$) | |
|----------------|-------|------------------------------|----------|----------------------------|-----------------------------------|--|--|--------|------------------------------------|--------|---|--------|
| | | | | | | | théorique | mesuré | théorique | mesuré | théorique | mesuré |
| He | 4.00 | 2.18 | 100 | 645 | 11.28 | 7.28 | 0.276 | 0.270 | 1123 | 951 | 2093 | 1744 |
| | | | 300 | 1936 | 6.51 | 12.60 | 1.437 | 1.669 | 1946 | 1981 | 3625 | 3583 |
| | | | 500 | 3226 | 5.04 | 16.27 | 3.091 | 3.890 | 2512 | 2790 | 4679 | 4844 |
| Ar | 39.90 | 3.64 | 100 | 231 | 9.95 | 2.30 | 0.031 | 0.023 | 1273 | 815 | 238 | 154 |
| | | | 300 | 694 | 5.75 | 3.99 | 0.163 | 0.186 | 2204 | 2271 | 412 | 422 |
| | | | 500 | 1157 | 4.45 | 5.15 | 0.351 | 0.456 | 2846 | 3351 | 531 | 631 |
| N ₂ | 28.02 | 3.75 | 100 | 218 | 12.61 | 2.75 | 0.035 | 0.027 | 1005 | 698 | 339 | 232 |
| | | | 300 | 654 | 7.28 | 4.76 | 0.183 | 0.205 | 1740 | 1663 | 587 | 602 |
| | | | 500 | 1090 | 5.64 | 6.15 | 0.395 | 0.495 | 2247 | 2657 | 766 | 876 |

¹Poids moléculaire. ²Vitesse moyenne ($\sqrt{\frac{8kT}{\pi m}}$).

I.3 Théorie cinétique des gaz

Le traitement de la théorie cinétique des gaz ou des plasmas sous un aspect plus approfondi est basé sur la connaissance de la fonction de distribution $f_i(\vec{r}, \vec{v}, t)$ relative à chaque variété (i) d'espèce présente dans le milieu étudié. Déterminer cette fonction n'est pas une tâche facile, dans un gaz non uniforme en composition, en vitesse, en énergie (température), ou dans un plasma fortement collisionnel, ou bien hors équilibre, cette fonction de distribution devient très compliquée à établir. L'évolution spatio-temporelle de la fonction de distribution $f_i(\vec{r}, \vec{v}, t)$ obéit à une équation type intégral-différentielle, dite "équation de Boltzmann".

Cette dernière décrit les variations de la fonction de distribution dans l'espace par rapport au temps d'un milieu gazeux de densité suffisamment faible pour négliger toute interaction à trois corps. Une solution exacte de l'équation de Boltzmann n'a toujours pas été trouvée, néanmoins plusieurs auteurs ont proposé des méthodes numériques ou des solutions approchées sous certaines restrictions. Enskog [19] fut le premier à donner une méthode numérique qui permettait de résoudre l'équation de Boltzmann en 1911, puis le mathématicien Hilbert avait démontré l'existence d'une solution [20] à condition que les molécules soient représentées par des sphères élastiques rigides. Lorentz avait traité le problème de la diffusion des électrons [21] en utilisant l'équation de Boltzmann, mais toute généralisation pour d'autres espèces avait été écartée à cause de la faible masse des électrons. Ce n'est qu'en 1917 que la théorie cinétique a connu une étape importante dans son développement grâce aux travaux de Chapman et Cooling [5], qui ont réussi à déterminer la fonction de distribution des vitesses par deux méthodes différentes. Ces travaux ont contribué à calculer les coefficients de transport d'une façon précise. Très récemment Cédric Villani [22, 23] a contribué aux avancées dans la compréhension mathématique entre l'équation cinétique de Boltzmann et les équations hydrodynamiques. Il a obtenu la médaille Fields en 2010.

I.3.1 Équation intégral-différentielle de Boltzmann

Dans cette section, l'équation de Boltzmann sera établie sous deux formes différentes, un cas où les collisions sont négligées, puis un autre cas où les collisions sont prises en compte.

I.3.1.1 Cas sans collision

Dans la section 1.2.3.2 le nombre de particules à l'intérieur d'un petit élément de volume $d^3r d^3v$ dans l'espace des phases à un instant t , noté $d^6N(\vec{r}, \vec{v}, t)$ est donné en fonction de la fonction de distribution comme suit :

$$d^6N(\vec{r}, \vec{v}, t) = f(\vec{r}, \vec{v}, t) d^3r d^3v \quad (\text{I.3.1})$$

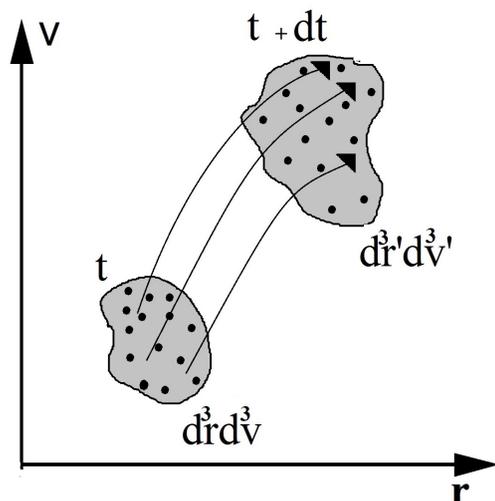


FIGURE I.6 – Représentation de l'espace des phases à l'instant t qui correspond au petit élément de volume d^3rd^3v et après un intervalle dt qui correspond au petit élément de volume $d^3r'd^3v'$.

On suppose que les particules n'interagissent pas entre elles, et que chaque particule est soumise à une force externe (accélération) qu'on note \vec{F} . A un instant t , la particule qui se trouve dans un élément de volume d^3rd^3v qui a pour coordonnées (\vec{r}, \vec{v}) dans l'espace des phases (voir figure I.6), sera déplacée, dans un intervalle de temps dt , vers un autre point qui aura pour coordonnées (\vec{r}', \vec{v}') qui se trouve dans un élément de volume $d^3r'd^3v'$ relatif au même espace des phases, de telle sorte que :

$$\begin{cases} \vec{r}'(t + dt) = \vec{r}(t) + \vec{v}dt \\ \vec{v}'(t + dt) = \vec{v}(t) + \vec{a}dt \end{cases} \quad (\text{I.3.2})$$

où $\vec{a} = \frac{\vec{F}}{m}$ représente l'accélération de la particule qui a pour masse m .

Si on considère que le nombre de particules est conservé durant l'intervalle dt , alors on peut écrire :

$$f(\vec{r}', \vec{v}', t + dt) d^3r' d^3v' = f(\vec{r}, \vec{v}, t) d^3r d^3v \quad (\text{I.3.3})$$

La forme du petit élément de volume d^3rd^3v pourrait être modifiée après l'intervalle dt pour qu'il prenne une autre forme suivant la formule suivante :

$$d^3r' d^3v' = |J| d^3r d^3v \quad (\text{I.3.4})$$

tel que $|J|$ désigne le Jacobien correspondant à la transformation de coordonnées initiales (\vec{r}, \vec{v}) vers les coordonnées finales (\vec{r}', \vec{v}') dans l'espace des phases [8]. Pour une transformation sans interaction et sans collision entre particules le Jacobien est égale à 1 ($|J| = 1$). Par conséquent l'équation (I.3.3) devient :

$$\left[f(\vec{r}', \vec{v}', t + dt) - f(\vec{r}, \vec{v}, t) \right] d^3r d^3v = 0 \quad (\text{I.3.5})$$

La fonction $f(\vec{r}', \vec{v}', t + dt)$ admet un développement en série de Taylor au premier ordre (le 2^{ème} ordre $(dt)^2$ est négligé) comme ceci :

$$\begin{aligned}
 f(\vec{r}', \vec{v}', t + dt) &= f(\vec{r} + \vec{v}dt, \vec{v} + \vec{a}dt, t + dt) \\
 &= f(\vec{r}, \vec{v}, t) + \left\{ \frac{\partial f(\vec{r}, \vec{v}, t)}{\partial t} + \vec{v} \frac{\partial f(\vec{r}, \vec{v}, t)}{\partial \vec{r}} + \vec{a} \frac{\partial f(\vec{r}, \vec{v}, t)}{\partial \vec{v}} \right\} dt \\
 &= f(\vec{r}, \vec{v}, t) + \left[\frac{\partial f(\vec{r}, \vec{v}, t)}{\partial t} + \vec{v} \cdot \nabla f(\vec{r}, \vec{v}, t) + \vec{a} \cdot \nabla_v f(\vec{r}, \vec{v}, t) \right] dt
 \end{aligned} \tag{I.3.6}$$

En remplaçant cette formule dans l'équation (I.3.5), on aboutit à l'équation de Boltzmann sans le terme de collision :

$$\frac{\partial f(\vec{r}, \vec{v}, t)}{\partial t} + \vec{v} \cdot \nabla f(\vec{r}, \vec{v}, t) + \vec{a} \cdot \nabla_v f(\vec{r}, \vec{v}, t) = 0 \tag{I.3.7}$$

Il faut noter que dans un milieu polyatomique qui possède plusieurs espèces de particules (plasmas partiellement ionisés), le nombre d'équations de type (I.3.7) correspond au nombre d'espèces présentes dans le gaz (ou dans le plasma). Les différentes solutions sont les différentes fonctions de distribution relatives à chaque espèce.

L'équation de Boltzmann sans le terme de collision est utilisée généralement dans des modèles très spécifiques, où beaucoup de restrictions sont à respecter, c'est le cas notamment des plasmas en équilibre qui possèdent des densités très faibles.

Dans un plasma très dilué soumis à un champ électromagnétique \vec{E} et \vec{B} , l'équation de Boltzmann (I.3.7) prend la forme suivante :

$$\frac{\partial f(\vec{r}, \vec{v}, t)}{\partial t} + \vec{v} \cdot \nabla f(\vec{r}, \vec{v}, t) + \frac{q}{m} (\vec{E} + \vec{v} \wedge \vec{B}) \cdot \nabla_v f(\vec{r}, \vec{v}, t) = 0 \tag{I.3.8}$$

Cette dernière équation est connue sous le nom d'équation de Vlasov élaborée pour les plasmas magnétisées avec de faibles densités.

En employant l'opérateur de dérivation totale, l'équation de Boltzmann (I.3.7) s'écrit comme suit :

$$\frac{df(\vec{r}, \vec{v}, t)}{dt} = 0 \tag{I.3.9}$$

cette opérateur est donné par :

$$\frac{d}{dt} = \frac{\partial}{\partial t} + \vec{v} \cdot \nabla + \vec{a} \cdot \nabla_v \tag{I.3.10}$$

L'équation (I.3.9) représente une équation de conservation (ou de continuité) de densité de points représentatifs des particules dans l'espace des phases. Ce résultat est connu aussi sous le nom de théorème de Liouville.

I.3.1.2 Cas avec collisions

Lorsque les interactions entre particules sont prises en compte, le Jacobien n'est plus égal à l'unité et l'équation (I.3.7) doit être modifiée. Durant un intervalle dt , les collisions entre particules vont faire en sorte que certaines particules qui se trouvent initialement dans le petit élément de volume d^3rd^3v vont en être retirées et que d'autres particules qui se trouvent initialement en dehors du petit élément de volume d^3rd^3v vont rentrer à l'intérieur de celui-ci voir figure I.7. Généralement le nombre de particules gagnées (entrées dans le petit élément de volume d^3rd^3v) est différent du nombre de particules perdues (retirées du petit élément de volume d^3rd^3v). Ce taux de gain ou de perte peut être formulé comme suit :

$$\tau_{coll} = \left[\frac{\delta f(\vec{r}, \vec{v}, t)}{\delta t} \right]_{coll} d^3rd^3v dt \quad (\text{I.3.11})$$

L'équation (I.3.5) devient :

$$\left[f(\vec{r}', \vec{v}', t + dt) - f(\vec{r}, \vec{v}, t) \right] d^3rd^3v = \left[\frac{\delta f(\vec{r}, \vec{v}, t)}{\delta t} \right]_{coll} d^3rd^3v dt \quad (\text{I.3.12})$$

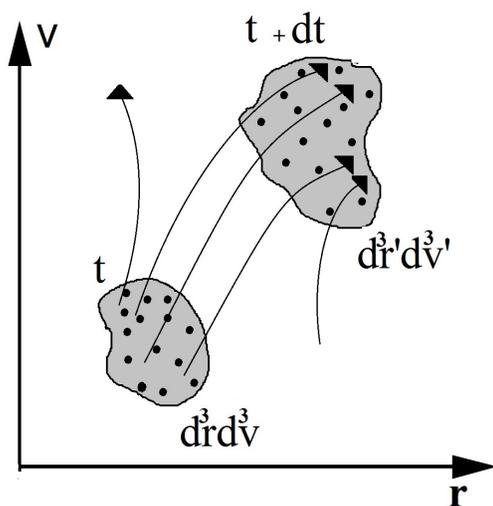


FIGURE I.7 – Représentation de l'espace des phases à l'instant t qui correspond au petit élément de volume d^3rd^3v et après un intervalle dt qui correspond au petit élément de volume $d^3r'd^3v'$ en tenant compte des collisions.

Enfin, en utilisant le même raisonnement que dans la section I.3.1.1, on aboutit à l'équation finale de Boltzmann avec un terme de collision :

$$\frac{\partial f(\vec{r}, \vec{v}, t)}{\partial t} + \vec{v} \cdot \nabla f(\vec{r}, \vec{v}, t) + \vec{a} \cdot \nabla_v f(\vec{r}, \vec{v}, t) = \left(\frac{\delta f(\vec{r}, \vec{v}, t)}{\delta t} \right)_{coll} \quad (\text{I.3.13})$$

I.3.1.3 Terme de collision

L'élaboration du terme de collision fait l'objet d'une étude à part, des expressions ont été proposées comme le modèle de relaxation proposé par Krook, l'intégrale de collision de Boltzmann et le terme de collision de Fokker-Planck.

I.3.1.3.i Modèle de relaxation de Krook

Le modèle de relaxation proposé par Krook est un modèle relativement simple basé sur l'idée d'un équilibre local. Toute perturbation d'un milieu qui se trouve initialement en équilibre, caractérisé par une fonction de distribution en équilibre $f_{eq}(\vec{r}, \vec{v})$, tend à retrouver son équilibre avec le temps, et ce grâce aux collisions entre particules qui vont faire en sorte que la perturbation soit transportée et propagée dans tout le milieu d'une façon homogène et isotrope. L'expression mathématique de ce modèle est donnée par :

$$\left(\frac{\delta f(\vec{r}, \vec{v}, t)}{\delta t} \right)_{coll} = - \frac{f(\vec{r}, \vec{v}, t) - f_{eq}(\vec{r}, \vec{v})}{\tau} \quad (\text{I.3.14})$$

Cette équation prend une forme différentielle comme suit :

$$\frac{\partial f(\vec{r}, \vec{v}, t)}{\partial t} + \frac{f(\vec{r}, \vec{v}, t) - f_{eq}(\vec{r}, \vec{v})}{\tau} = 0 \quad (\text{I.3.15})$$

la solution homogène de l'équation (I.3.15) est de forme exponentielle :

$$f(\vec{v}, t) = f_{eq}(\vec{v}) + [f(\vec{v}, 0) - f_{eq}(\vec{v})] \exp\left(\frac{-t}{\tau}\right) \quad (\text{I.3.16})$$

τ est un temps de relaxation qui est inversement proportionnel à la fréquence de collision donnée par les équations (I.2.12) et (I.2.13). La fonction d'équilibre $f_{eq}(\vec{v})$ correspond bien à la distribution de Maxwell-Boltzmann (voir section I.3.2.1).

I.3.1.3.ii Intégrale de collision de Boltzmann

Avant d'évaluer le terme de collision de Boltzmann, il faudrait au préalable satisfaire certaines hypothèses simplificatrices [16], quelques-unes ont déjà été évoquées dans la description d'un gaz parfait (voir section I.2.2).

- ⊗ Le gaz doit être suffisamment dilué pour ne prendre en compte que des collisions binaires ;
- ⊗ Les vitesses de collision sont supposées indépendantes statistiquement, et toute corrélation entre vitesse et position est négligée. Cette hypothèse est appelée approximation du chaos moléculaire ;
- ⊗ Les forces intermoléculaires sont supposées à symétrie sphérique. Ce qui simplifie considérablement la description dynamique d'une collision binaire et le calcul des angles de déflexion (voir section II.3.1) ;
- ⊗ Seules les lois de la mécanique classique sont prises en compte, la mécanique quantique ou la relativité sont ignorées ;
- ⊗ La longueur caractéristique sur laquelle évolue la fonction de distribution est beaucoup plus importante que la longueur de la portée de la force intermoléculaire ;

- ⊗ La fonction de distribution ne doit pas subir de changements brusques pendant un intervalle de temps durant lequel une collision binaire a eu lieu.

Déterminer le terme de collision de Boltzmann revient à calculer le taux d'échange du nombre de particules dans le petit élément de volume $d^3r d^3v$ dans l'espace des phases durant un temps compris entre t et $t + dt$ dû à une collision binaire. Le taux d'échange net (effectif) est le résultat de la compétition de deux processus. Le premier processus qui favorise la diminution du nombre de particules dans le petit élément de volume $d^3r d^3v$ dans l'espace des phases est dû à certaines particules qui se trouvent initialement dans $d^3r d^3v$ et qui vont être diffusées par collision en dehors de ce petit élément de volume qu'on va noter $(\delta f / \delta t)^{-}$. Le deuxième processus va contribuer à augmenter le nombre de particules dans le petit élément de volume $d^3r d^3v$, ce sont donc des particules qui ne se trouvent pas initialement dans $d^3r d^3v$ et qui finiront par y rentrer par collision et qu'on va noter $(\delta f / \delta t)^{+}$. Finalement le terme de collision peut être exprimé en fonction de la différence des deux termes cités ci-dessus :

$$\frac{\delta f}{\delta t} = \left(\frac{\delta f}{\delta t} \right)^+ - \left(\frac{\delta f}{\delta t} \right)^- \quad (\text{I.3.17})$$

Par raison de simplification de notation, on écrit f au lieu de $f(\vec{r}, \vec{v}, t)$.

Pour évaluer le terme $(\delta f / \delta t)^{-}$, considérant une particule de type α qui se localise dans le petit élément de volume d^3r à la position \vec{r} dont la vitesse se situe à l'intérieur du petit élément de volume de vitesse d^3v au voisinage de \vec{v} et qui sera diffusée en dehors de ce petit élément de vitesse d^3v par effet de collision binaire avec une autre particule type β , qui se localise dans le même petit élément de volume d^3r à la position \vec{r} et qui possède une vitesse qui se situe à l'intérieur du petit élément de volume de vitesse d^3v_1 au voisinage du \vec{v}_1 . Dans l'espace des phases la particule de type α se situe dans $d^3r d^3v$ et la particule de type β dans $d^3r d^3v_1$. Compte tenu des définitions faites dans la section [I.2.3.2](#), le produit $f_\beta(\vec{r}, \vec{v}_1, t) d^3v_1$ représente le nombre de particules de type β par unité de volume d^3r , par conséquent on peut écrire le flux du faisceau incident relatif aux particules de type β comme suit :

$$\begin{aligned} \Gamma_\beta &= f_\beta(\vec{r}, \vec{v}_1, t) d^3v_1 |\vec{v}_1 - \vec{v}| \\ &= f_\beta(\vec{r}, \vec{v}_1, t) d^3v_1 \cdot \vec{g} \end{aligned} \quad (\text{I.3.18})$$

On considère que la particule de type β approche avec un paramètre d'impact compris entre b et $b + db$ sur un plan de collision défini entre les angles ϵ et $\epsilon + d\epsilon$ (voir figure [I.8](#)). Si on multiplie le flux donné par l'équation [\(I.3.18\)](#) par le petit élément de surface $b \cdot db \cdot d\epsilon$ et par l'intervalle de temps dt , alors on obtient le nombre de particules qui traversent le petit élément de surface $b \cdot db \cdot d\epsilon$ durant un temps dt :

$$\Gamma_\beta \cdot b \cdot db \cdot d\epsilon dt = f_\beta(\vec{r}, \vec{v}_1, t) d^3v_1 \cdot \vec{g} \cdot b \cdot db \cdot d\epsilon dt \quad (\text{I.3.19})$$

tel que $\sigma(\Omega, \epsilon)$ est une section efficace différentielle définie dans la section II.2.1 :

$$\sigma(\Omega, \epsilon)d\Omega = b.db.d\epsilon \quad (\text{I.3.25})$$

L'équation de Boltzmann prend alors la forme finale suivante :

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \vec{v} \cdot \nabla f + \vec{a} \cdot \nabla_v f = \sum_{\beta} \int_{v'_1} \int_{\Omega} (f'_{\alpha} f'_{\beta} - f_{\alpha} f_{\beta}) d^3 v_1 g \sigma(\Omega, \epsilon) d\Omega \quad (\text{I.3.26})$$

L'équation de Boltzmann (I.3.26) s'appelle équation intégro-différentielle, parce qu'elle implique à la fois une intégrale et des dérivées de la fonction de distribution.

Si le nombre d'espèces présentes dans le milieu gazeux se limite à une seule espèce alors l'équation I.3.26 se simplifie et prend la forme ci-dessous :

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \vec{v} \cdot \nabla f + \vec{a} \cdot \nabla_v f = \int_{v'_1} \int_{\Omega} (f' f'_1 - f f_1) d^3 v_1 g \sigma(\Omega, \epsilon) d\Omega \quad (\text{I.3.27})$$

Pour discuter de la signification de chaque terme [10] présent dans l'équation ci-dessus (I.3.27), nous la réécrivons sous la forme suivante :

$$\frac{\partial f}{\partial t} = -\vec{v} \cdot \nabla f - \vec{a} \cdot \nabla_v f + C(f, f_1) \quad (\text{I.3.28})$$

Sous cette expression, l'équation (I.3.28) désigne d'une manière générale une variation dans le temps, de la fonction de distribution en un point donné dans le gaz qui est équivalente à la variation de la somme de trois termes.

Le premier terme qui est donné par $\vec{v} \cdot \nabla f$ traduit l'influence des phénomènes de diffusion exprimé en fonction de la vitesse des particules \vec{v} et le gradient ∇f associé à la fonction de distribution par rapport à la position (voir section I.2.5.1). Ce terme de diffusion disparaît si on considère un état d'équilibre dont le gradient dans l'espace des positions est nul ou si la vitesse \vec{v} est égale à zéro.

Le deuxième terme $\vec{a} \cdot \nabla_v f$ formule l'effet de la force extérieure \vec{F} appliquée au système, ce qui génère une accélération des particules \vec{a} . Dans un plasma constitué de particules chargées q de masse m , soumis à un champ électrique \vec{E} alors on a $\vec{a} = q\vec{E}/m$. Le gradient de la fonction de distribution dans l'espace des vitesses est donné par $\nabla_v f$ qui a tendance à créer des forces de frottement et qui contribue au transport de la quantité de mouvement sous forme de viscosité (voir section I.2.5.2).

Enfin, le troisième terme $C(f, f_1)$ discuté auparavant met en évidence de façon implicite l'influence des interactions entre particules. Si on suppose un état où les collisions entre particules sont extrêmement rares alors ce terme s'annule $C(f, f_1) \approx 0$.

I.3.1.3.iii Terme de collision de Fokker-Planck

Le terme de collision dans l'équation de Boltzmann est obtenu sous certaines restrictions. En général, l'équation de Boltzmann est appliquée à un gaz avec des densités relativement faibles ou à un plasma faiblement ionisé, pour lequel les interactions binaires

entre les particules (neutres-neutres ou neutres-chargées) sont considérées comme dominantes.

L'une des plus importantes caractéristiques d'un plasma sont les interactions coulombiennes entre particules chargées constituant le plasma. Ainsi, pour un plasma très ionisé, les interactions ne sont plus considérées comme binaires, ce sont plutôt les effets collectifs qui sont pris en compte dans la description de la cinétique des plasmas. Pour un tel système, le terme de collision de Boltzmann ne pourrait plus s'appliquer, par conséquent une autre approche doit être adaptée pour déterminer un terme de collision adéquat.

Le terme de collision de Fockker-Planck a été proposé pour décrire les interactions simultanées dues aux forces coulombiennes. Pour pouvoir dériver le terme de collision de Fockker-Planck à partir du terme de collision de Boltzmann, il faudrait faire l'hypothèse des petits angles de déflexion successifs, relatifs à une collision binaire.

On considère une quantité arbitraire $\chi(\vec{v})$ qui est fonction de la vitesse relative à une collision entre deux espèces α et β . En utilisant la relation (I.3.24), le taux d'échange par rapport au temps de cette quantité est donnée par :

$$\begin{aligned} \int_v \chi(\vec{v}) \left(\frac{\delta f_\alpha}{\delta t} \right)_{coll} d^3v &= \int_{v_1} \int_v \int_\Omega (f'_\alpha f'_\beta - f_\alpha f_\beta) \chi(\vec{v}) g \sigma(\Omega) d\Omega d^3v_1 d^3v \\ &= \int_{v_1} \int_v \int_\Omega f_\alpha f_\beta (\chi' - \chi) g \sigma(\Omega) d\Omega d^3v_1 d^3v \end{aligned} \quad (\text{I.3.29})$$

La quantité χ' désigne l'après collision relative à la vitesse \vec{v}' .

Pour les collisions associées à de faibles angles de déflexion, on peut écrire alors :

$$\begin{aligned} \vec{v}' &= \vec{v} + \Delta\vec{v} \\ \chi'(\vec{v}') &= \chi(\vec{v} + \Delta\vec{v}) \end{aligned} \quad (\text{I.3.30})$$

On peut appliquer un développement en série de Taylor au deuxième ordre comme ceci :

$$\chi(\vec{v} + \Delta\vec{v}) = \chi(\vec{v}) + \sum_i \frac{\partial \chi}{\partial v_i} \Delta v_i + \frac{1}{2} \sum_{ij} \frac{\partial^2 \chi}{\partial v_i \partial v_j} \Delta v_i \Delta v_j + \dots \quad (\text{I.3.31})$$

En remplaçant l'équation (I.3.31) dans (I.3.29), on obtient :

$$\begin{aligned} \int_v \chi(\vec{v}) \left(\frac{\delta f_\alpha}{\delta t} \right)_{coll} d^3v &= \int_{v_1} \int_v \int_\Omega f_\alpha f_\beta \left(\sum_i \frac{\partial \chi}{\partial v_i} \Delta v_i \right. \\ &\quad \left. + \frac{1}{2} \sum_{ij} \frac{\partial^2 \chi}{\partial v_i \partial v_j} \Delta v_i \Delta v_j \right) g \sigma(\Omega) d\Omega d^3v_1 d^3v \end{aligned} \quad (\text{I.3.32})$$

En utilisant l'intégration par partie [8], on aboutit à l'expression suivante :

$$\begin{aligned}
\int_v \chi(\vec{v}) \left(\frac{\delta f_\alpha}{\delta t} \right)_{coll} d^3v &= - \int_{v_1} \int_v \int_\Omega \chi \sum_i \frac{\partial \chi}{\partial v_i} [\Delta v_i f_\alpha g \sigma(\Omega) d\Omega] f_\beta d^3v_1 d^3v \\
&+ \int_{v_1} \int_v \int_\Omega \frac{1}{2} \chi \sum_{ij} \frac{\partial^2 \chi}{\partial v_i \partial v_j} [\Delta v_i \Delta v_j f_\alpha g \sigma(\Omega) d\Omega] f_\beta d^3v_1 d^3v \\
&= - \int_v \chi \left[\sum_i \frac{\partial \chi}{\partial v_i} \left(f_\alpha \int_{v_1} \int_\Omega \Delta v_i g \sigma(\Omega) d\Omega f_\beta d^3v_1 \right) \right] d^3v \\
&+ \int_v \chi \left[\frac{1}{2} \sum_{ij} \frac{\partial^2 \chi}{\partial v_i \partial v_j} \left(f_\alpha \int_{v_1} \int_\Omega \Delta v_i \Delta v_j g \sigma(\Omega) d\Omega f_\beta d^3v_1 \right) \right] d^3v
\end{aligned} \tag{I.3.33}$$

On définit ensuite les quantités moyennes suivantes :

$$\begin{aligned}
\langle \Delta v_i \rangle &= \int_{v_1} \int_\Omega \Delta v_i g \sigma(\Omega) d\Omega f_\beta d^3v_1 \\
\langle \Delta v_i \Delta v_j \rangle &= \int_{v_1} \int_\Omega \Delta v_i \Delta v_j g \sigma(\Omega) d\Omega f_\beta d^3v_1
\end{aligned} \tag{I.3.34}$$

En substituant ces quantités moyennes (I.3.34) dans l'équation (I.3.33), on trouve l'équation ci-dessous :

$$\begin{aligned}
\int_v \chi \left(\frac{\delta f_\alpha}{\delta t} \right)_{coll} d^3v &= - \int_v \chi \left[\sum_i \frac{\partial \chi}{\partial v_i} (f_\alpha \langle \Delta v_i \rangle) \right. \\
&\left. + \frac{1}{2} \sum_{ij} \frac{\partial^2 \chi}{\partial v_i \partial v_j} (f_\alpha \langle \Delta v_i \Delta v_j \rangle) \right] d^3v
\end{aligned} \tag{I.3.35}$$

Cette équation est valable pour n'importe quelle fonction arbitraire $\chi(\vec{v})$, donc pour $\chi = 1$ on obtient le terme de collision de Fockker-Planck qui est donné par :

$$\begin{aligned}
\left(\frac{\delta f_\alpha}{\delta t} \right)_{coll} &= - \sum_i \frac{\partial}{\partial v_i} (f_\alpha \langle \Delta v_i \rangle) \\
&+ \frac{1}{2} \sum_{ij} \frac{\partial^2}{\partial v_i \partial v_j} (f_\alpha \langle \Delta v_i \Delta v_j \rangle)
\end{aligned} \tag{I.3.36}$$

Si on substitue ce terme de collision (I.3.36) dans l'équation de Boltzmann (I.3.13), on obtient l'équation de Fockker-Planck appliquée généralement aux plasmas fortement ionisés. Il existe une équation de ce type pour chaque espèce de particules présentes dans le plasma.

Les quantités moyennes $\langle \Delta v_i \rangle$ et $\langle \Delta v_i \Delta v_j \rangle$ sont appelées coefficients de friction dynamique et de diffusion dans l'espace des vitesses [25], respectivement. Les collisions par effet de force coulombienne qui sont à grande portée, produisent un flux $\vec{J}_{\alpha\beta}$ de l'espèce α par rapport à l'espèce β , qu'on pourrait formuler comme ceci [10] :

$$\begin{aligned}
\vec{J}_{\alpha\beta} &= f_\alpha \frac{\langle \Delta \vec{v}_\alpha \rangle_\beta}{\Delta t} + \frac{\partial}{\partial \vec{v}_\alpha} \cdot f_\alpha \frac{\langle \Delta \vec{v}_\alpha \Delta \vec{v}_\alpha \rangle_\beta}{\Delta t} \\
&= -f_\alpha \frac{\vec{F}_{\alpha\beta}}{m_\alpha} + \frac{\partial}{\partial \vec{v}_\alpha} f_\alpha \overline{\overline{D}}.
\end{aligned}
\tag{I.3.37}$$

Le premier terme représente le phénomène de transport moyen des vitesses \vec{v}_α de l'espèce α par rapport à l'espèce β , soumises à la force $\vec{F}_{\alpha\beta}$. Le deuxième terme exprime un effet de diffusion ou dispersion moyenne des vitesses \vec{v}_α traduit par un coefficient tensoriel de diffusion $\overline{\overline{D}}$. A l'équilibre le phénomène de friction est contrebalancé par le phénomène de diffusion.

Sans rentrer dans les détails du calcul de ces coefficients $\langle \Delta v_i \rangle$ et $\langle \Delta v_i \Delta v_j \rangle$, disponible dans [8, 16], on donne directement les résultats. Sur la base d'un système de coordonnées cartésiennes, les expressions de ces coefficients prennent la forme suivante :

$$\begin{aligned}
\langle \Delta v_x \rangle &= \langle \Delta v_y \rangle = 0 \\
\langle \Delta v_z \rangle &= \frac{m_\beta}{m_\alpha + m_\beta} \int_{v_1} \frac{\Theta}{g^2} f_\beta d^3 v_1 \\
\langle \Delta v_i \Delta v_j \rangle &= 0 \quad i \neq j \\
\langle \Delta v_z^2 \rangle &= \frac{m_\beta^2}{(m_\alpha + m_\beta)^2} \int_{v_1} \frac{\Theta}{g \ln \Lambda} f_\beta d^3 v_1 \\
\langle \Delta v_x^2 \rangle &= \langle \Delta v_y^2 \rangle \\
&= \frac{m_\beta^2}{(m_\alpha + m_\beta)^2} \int_{v_1} \frac{\Theta}{g} f_\beta d^3 v_1
\end{aligned}
\tag{I.3.38}$$

tels que :

$$\Theta = \frac{Z^2 e^4 \ln \Lambda}{4\pi \epsilon_0^2 \mu^2}$$

$$\Lambda = \frac{\lambda_D}{b_0} \quad \text{Logarithme Coulombien}$$

$$b_0 = \frac{qq_1}{4\pi \epsilon_0^2 \mu g^2} \quad \text{Valeur de } b \text{ qui correspond à } \chi = \frac{\pi}{2}$$

$$\lambda_D = \sqrt{\frac{\epsilon_0 k T}{n e^2}} \quad \text{Longueur de Debye définie dans la section I.1.3}$$

$$\mu = \frac{m_\alpha m_\beta}{m_\alpha + m_\beta} \quad \text{Masse réduite}$$

$$\vec{g} = \vec{v}_1 - \vec{v} \quad \vec{g} \text{ est supposée parallèle à l'axe } z$$

Pour une collision entre un ion et un électron dont les ions sont considérés comme immobiles devant les électrons qui, à cause de leur faible masse devant les ions ($m_i \gg m_e$), ont une facilité à se déplacer dans l'espace contrairement aux ions. La fonction de distribution relative aux ions immobiles correspond à la fonction de Dirac qui a pour expression :

$$f_\beta = n_0 \delta(v_{1x}) \delta(v_{1y}) \delta(v_{1z}) \quad (\text{I.3.39})$$

Avec ces approximations on peut obtenir les coefficients de Fockker-Planck relatifs à une collision des électrons avec les ions comme ceci :

$$\begin{aligned} \langle \Delta v_z \rangle &= \frac{n_0 \Theta}{g^2} \\ \langle \Delta v_z^2 \rangle &= \frac{n_0 \Theta}{g \ln \Lambda} \\ \langle \Delta v_x^2 \rangle &= \langle \Delta v_y^2 \rangle \\ &= \frac{n_0 \Theta}{g} \end{aligned} \quad (\text{I.3.40})$$

Le terme de collision de Fockker-Planck est souvent utilisé pour déterminer la conductivité électrique d'un plasma complètement ionisé voir section I.3.3.7 dans l'approximation de faibles angles de déflexion pour des collisions successives qui produisent de faibles déviations relatives aux vitesses des particules.

I.3.2 Fonction de distribution des vitesses

I.3.2.1 Distribution de Maxwell-Boltzmann

La première fonction de distribution des vitesses a été proposée par James Clerk Maxwell [11] en 1859, développée dans le cadre d'un gaz en équilibre statistique. La fonction de distribution de Maxwell était la clé du développement de la théorie cinétique des gaz qui permettait de relier les mouvements microscopiques des molécules aux quantités macroscopiques mesurables à notre échelle via des outils statistiques.

L'expression de la distribution de Maxwell a été obtenue sous certaines hypothèses, qu'on peut citer ci-dessous :

- ⊗ La fonction de distribution est indépendante du temps, $\partial f / \partial t = 0$;
- ⊗ Le gaz est supposé constitué d'un nombre indénombrable de molécules, de forme sphérique assimilées à des boules de billard voir section I.2.2 ;
- ⊗ Les collisions entre particules sont parfaitement élastiques ;
- ⊗ Après une collision binaire, la direction des vitesses des particules est distribuée d'une manière isotrope, cela veut dire qu'après une collision la probabilité de trouver une particule diffusée avec un petit élément d'angle solide $d\Omega$ est égale $d\Omega/4\pi$;
- ⊗ L'hypothèse du chaos moléculaire citée dans la section I.3.1.3.ii ;
- ⊗ Aucune force extérieure n'est à prendre en compte ($\vec{F}_{ext} = 0$) ;

- ⊗ Les particules sont uniformément distribuées dans l'espace, par conséquent la fonction de distribution est indépendante de la position \vec{r} , et que $\nabla f = 0$;
- ⊗ Le terme de collision dans l'équation de Boltzmann (I.3.13) est égale à zéro $\left(\frac{\delta f}{\delta t}\right)_{coll} = 0$;
- ⊗ Au final la fonction de distribution $f(\vec{r}, \vec{v}, t) = f(v)$.

En mécanique classique, durant une collision binaire certaines quantités restent inchangées avant et après la collision, ce qu'on appelle les invariants du mouvement. Si on considère une collision entre la particule de masse m_1 et de vitesse \vec{v}_1 avant la collision et \vec{v}'_1 après la collision avec la particule de masse m_2 et de vitesse \vec{v}_2 avant la collision et \vec{v}'_2 après la collision, alors on pourrait écrire d'après les lois de conservation de masse, de quantité de mouvement et de l'énergie les équations suivantes :

$$\begin{cases} m_1 + m_2 = m_1 + m_2 \\ m_1 \vec{v}_1 + m_2 \vec{v}_2 = m_1 \vec{v}'_1 + m_2 \vec{v}'_2 \\ \frac{1}{2} m_1 v_1^2 + \frac{1}{2} m_2 v_2^2 = \frac{1}{2} m_1 v_1'^2 + \frac{1}{2} m_2 v_2'^2 \end{cases} \quad (\text{I.3.41})$$

A l'état d'équilibre, l'effet de chaque collision est compensé par l'effet d'une collision équivalente en sens inverse, et par raison de conservation des quantités (masse, vitesse et énergie) on pourrait écrire :

$$f_1(\vec{v}_1) f_2(\vec{v}_2) = f_1'(\vec{v}'_1) f_2'(\vec{v}'_2) \quad (\text{I.3.42})$$

En appliquant le logarithme sur les deux cotés de l'équation (I.3.42), on obtient :

$$\ln f_1(\vec{v}_1) + \ln f_2(\vec{v}_2) = \ln f_1'(\vec{v}'_1) + \ln f_2'(\vec{v}'_2) \quad (\text{I.3.43})$$

Par analogie avec les invariants de mouvement cités dans l'équation (I.3.41), on pourrait dire que $\ln f_1(v_1)$ est un invariant du processus de collision, et il pourrait être exprimé [6, 26] comme une combinaison linéaire des autres invariants (m_1 , $m_1 \vec{v}_1$ et $m_1 v_1^2/2$) :

$$\ln f_1(\vec{v}_1) = m_1 \left(a_0 + \vec{a}_1 \cdot \vec{v}_1 - \frac{1}{2} a_2 v_1^2 \right) \quad (\text{I.3.44})$$

avec a_0 , $\vec{a}_1 = a_{1x} \vec{x} + a_{1y} \vec{y} + a_{1z} \vec{z}$, et a_2 des constantes. Le signe (-) a été choisi par convenance avec l'équation qui suit :

$$\begin{aligned} \ln f_1(\vec{v}_1) &= m_1 \left[a_0 + (a_{1x}^2 + a_{1y}^2 + a_{1z}^2) / (2a_2) \right] \\ &- \frac{1}{2} m_1 a_2 \left[(v_x - a_{1x}/a_2)^2 + (v_y - a_{1y}/a_2)^2 + (v_z - a_{1z}/a_2)^2 \right] \\ &= m_1 \left[a_0 + a_1^2 / (2a_2) \right] - \frac{1}{2} m_1 a_2 (\vec{v}_1 - \vec{a}_1/a_2)^2 \end{aligned} \quad (\text{I.3.45})$$

Si on définit deux nouvelles constantes qu'on note C et \vec{v}_0 de telle sorte que :

$$\begin{aligned} \ln C &= m_1 \left[a_0 + a_1^2 / (2a_2) \right] \\ \vec{v}_0 &= \frac{\vec{a}_1}{a_2} \end{aligned} \quad (\text{I.3.46})$$

Si on remplace les deux constantes dans l'équation (I.3.45) on aboutit à l'expression de la distribution de Maxwell :

$$f(\vec{v}_1) = C \exp \left[-\frac{1}{2} m_1 a_2 (\vec{v}_1 - \vec{v}_0)^2 \right] \quad (\text{I.3.47})$$

Il reste maintenant à déterminer les constantes C , a_2 et \vec{v}_0 .

Nous avons vu dans la section I.2.3.2 que toutes les quantités macroscopiques (densité, vitesse moyenne, pression, température...etc) sont reliées à la fonction de distribution. Si on remplace l'expression de la fonction de distribution par celle trouvée ci-dessus (I.3.47), alors la densité n_1 devient :

$$n_1 = C \int_{v_1} \exp \left[-\frac{1}{2} m_1 a_2 (\vec{v}_1 - \vec{v}_0)^2 \right] d^3 v_1 \quad (\text{I.3.48})$$

Pour simplifier les notations, on utilise les constantes suivantes $A = m_1 a_2 / 2$ et $\xi_i = (v_i - v_{1i})$ avec $i = x, y, z$, l'équation (I.3.48) prend la forme suivante :

$$n_1 = C \int \int \int_{-\infty}^{+\infty} \exp \left[-A (\xi_x^2 + \xi_y^2 + \xi_z^2) \right] d\xi_x d\xi_y d\xi_z \quad (\text{I.3.49})$$

En intégrant cette équation par rapport à toutes valeurs possibles de ξ_x , ξ_y et ξ_z on obtient :

$$n_1 = C \left(\frac{\pi}{A} \right)^{3/2} = C \left(\frac{2\pi}{m_1 a_2} \right)^{3/2} \quad (\text{I.3.50})$$

A partir de la définition de la vitesse moyenne on peut écrire :

$$\vec{u} = \langle \vec{v} \rangle = \frac{1}{n} \int f \vec{v} d^3 v \quad (\text{I.3.51})$$

En remplaçant l'expression de Maxwell (I.3.47), l'équation (I.3.51) devient :

$$\vec{u} = \frac{C}{n_1} \int_{v_1} \vec{v}_1 \exp \left[-\frac{1}{2} m_1 a_2 (\vec{v}_1 - \vec{v}_0)^2 \right] d^3 v_1 \quad (\text{I.3.52})$$

Les mêmes notations utilisées ci-dessus seront employées ici :

$$\begin{aligned} \vec{u} &= \frac{C}{n_1} \int \int \int_{-\infty}^{+\infty} (\xi_x \vec{x} + \xi_y \vec{y} + \xi_z \vec{z}) \exp \left[-A (\xi_x^2 + \xi_y^2 + \xi_z^2) \right] d\xi_x d\xi_y d\xi_z \\ &+ \frac{C}{n_1} \vec{v}_0 \int \int \int_{-\infty}^{+\infty} \exp \left[-A (\xi_x^2 + \xi_y^2 + \xi_z^2) \right] d\xi_x d\xi_y d\xi_z \end{aligned} \quad (\text{I.3.53})$$

La première intégrale triple disparaît si l'intégrand est une fonction impaire en ξ_i . La deuxième intégrale triple, déjà calculée, est égale à n/C , ce qui donne :

$$\vec{u} = \vec{v}_0 \quad (\text{I.3.54})$$

La constante \vec{v}_0 représente la vitesse moyenne de l'écoulement de flux de particules. La vitesse de particules \vec{v} peut être exprimée en fonction de la vitesse moyenne \vec{u} et de la

vitesse particulière³ \vec{c} , comme suit :

$$\vec{v} = \vec{u} + \vec{c} \quad (\text{I.3.55})$$

Maintenant on donne l'expression de la température cinétique en fonction de la distribution de Maxwell :

$$\begin{aligned} \frac{3}{2}n_1kT &= \frac{1}{2}n_1m_1 \langle c^2 \rangle = \frac{1}{2}m_1 \int_{v_1} f c^2 d^3v_1 \\ &= \frac{1}{2}n_1C \int_c c^2 \exp(-Ac^2) d^3c \end{aligned} \quad (\text{I.3.56})$$

Après intégration on donne :

$$kT = \left(\frac{C}{n_1 a_2} \right) \left(\frac{2\pi}{m_1 a_2} \right)^{3/2} \quad (\text{I.3.57})$$

En combinant les deux équations (I.3.50) et (I.3.57) on obtient les deux constantes C et a_2 :

$$\begin{aligned} C &= n_1 \left(\frac{m_1}{2\pi kT} \right)^{3/2} \\ a_2 &= \frac{1}{kT} \end{aligned} \quad (\text{I.3.58})$$

Au final, en substituant toutes constantes trouvées dans l'équation (I.3.47), l'expression de la distribution Maxwellienne appelée aussi distribution de Maxwell-Boltzmann, pour un système à une seule espèce, prend la forme finale ci-dessous :

$$f(c) = n \left(\frac{m}{2\pi kT} \right)^{3/2} \exp \left(\frac{-mc^2}{2kT} \right) \quad (\text{I.3.59})$$

La fonction de distribution est isotrope ce qui entraîne que la distribution des composantes de la vitesse selon n'importe quel axe cartésien est le même. La répartition des vitesses en valeur absolue prend l'expression suivante :

$$f(v) = n \left(\frac{m}{2\pi kT} \right)^{3/2} 4\pi v^2 \exp \left(\frac{-mv^2}{2kT} \right) \quad (\text{I.3.60})$$

Il faut noter qu'il existe une autre approche purement statistique qui permet de retrouver la même distribution de Maxwell.

3. La vitesse particulière correspond à la vitesse réelle de la particule par rapport au mouvement d'ensemble du système, si une particule possède une vitesse \vec{v} qui va dans le même sens avec le même module que la vitesse moyenne \vec{u} , alors la vitesse particulière apparaît nulle ($\vec{c} = 0$), c'est la description eulérienne du mouvement.

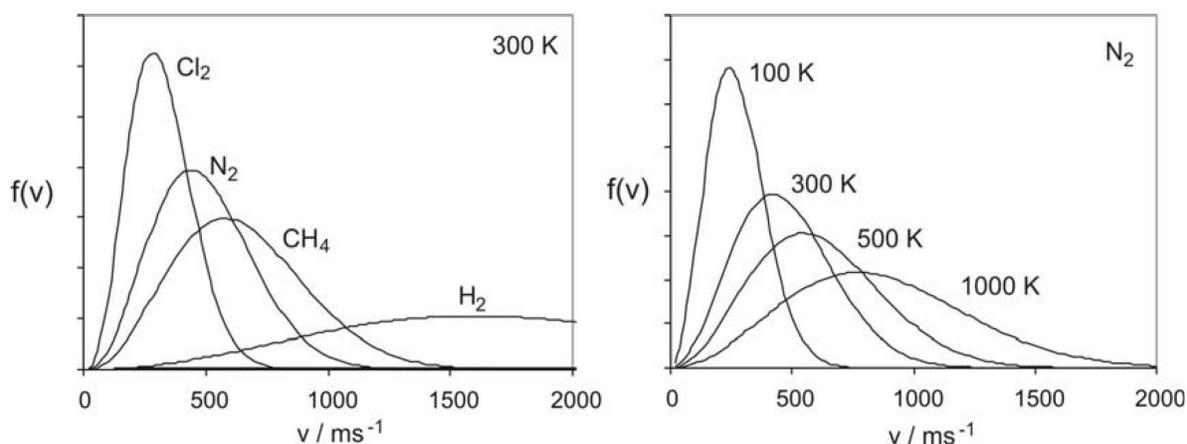


FIGURE I.9 – Illustration de la fonction de distribution de Maxwell-Boltzmann pour différents types de gaz en fonction de la vitesse [27].

Si le système ne présente pas de mouvement de translation dans son ensemble, alors la vitesse particulaire c est égale à la vitesse v . On peut voir sur la figure I.9 la distribution de Maxwell tracée pour certaines espèces gazeuse en fonction de la vitesse v pour quelques valeurs de température. Deux remarques essentielles peuvent être tirées de la figure I.9 :

Remarque (1) : Quand la température augmente la distribution de Maxwell s'élargit et son pic (maximum) se déplace vers des vitesses plus élevées, cela signifie qu'il y a de plus en plus de particules rapides avec une présence importante des particules lentes. Échauffer un gaz revient à augmenter les vitesses des molécules et l'énergie désordonnée, le refroidir veut dire diminuer les vitesses des molécules.

Remarque (2) : Quand la masse des particules diminue la distribution de Maxwell a le même effet que quand la température augmente, c'est-à-dire les particules lourdes sont plus lentes que les particules légères à température égale.

Si un gaz est maintenu isolé de toute force extérieure dans une enceinte fermée (sans interaction avec le milieu extérieur) à température constante, le système évolue vers une situation d'équilibre, et même si la fonction de distribution est initialement hors-équilibre, elle va tendre vers l'équilibre au bout d'un certain temps par effet de collision.

Pour un plasma en équilibre thermique, partiellement ionisé dans lequel les ions, les électrons et les neutres ont la même température alors la distribution des vitesses de chaque espèce de particule est décrite séparément par la fonction de Maxwell-Boltzmann (I.3.60) avec leur densité respective.

Il existe une autre écriture de la fonction de distribution de Maxwell-Boltzmann dite locale, qui décrit un système proche de l'équilibre. Si on considère au voisinage de chaque point dans le gaz une situation d'équilibre locale alors la distribution des vitesses sera décrite par les fonctions suivantes :

$$f(\vec{r}, \vec{c}, t) = n(\vec{r}, t) \left(\frac{m}{2\pi kT(\vec{r}, t)} \right)^{3/2} \exp \left(\frac{-m\vec{c}^2}{2kT(\vec{r}, t)} \right) \quad (\text{I.3.61})$$

$$f(\vec{r}, \vec{v}, t) = n(\vec{r}, t) \left(\frac{m}{2\pi kT(\vec{r}, t)} \right)^{3/2} \exp \left(\frac{-m [\vec{v} - \vec{u}(\vec{r}, t)]^2}{2kT(\vec{r}, t)} \right) \quad (\text{I.3.62})$$

I.3.2.2 Distribution de Maxwell-Boltzmann en présence d'un champ de force conservatif

Sous la condition d'équilibre, un système gazeux qui est soumis à un champ de force $\vec{F}(\vec{r})$ conservatif, est caractérisé par une distribution de vitesse maxwellienne multipliée par un facteur exponentiel appelé facteur de Boltzmann. L'expression de la nouvelle distribution est donnée par :

$$f(\vec{r}, v) = n_0 \left(\frac{m}{2\pi kT} \right)^{3/2} \exp \left(\frac{-mc^2}{2kT} \right) \exp \left(\frac{-U(\vec{r})}{kT} \right) \quad (\text{I.3.63})$$

avec $U(\vec{r})$ le potentiel correspondant à la force conservative $F(\vec{r})$, telle que :

$$\vec{F}(\vec{r}) = -\vec{\nabla}U(\vec{r}) \quad (\text{I.3.64})$$

Un plasma qui est soumis à un champ électrostatique \vec{E} dérive d'un potentiel scalaire électrostatique $\Phi(\vec{r})$:

$$\vec{E} = -\vec{\nabla}\Phi(\vec{r}) = -\vec{\nabla} \left\{ \frac{U(\vec{r})}{q} \right\} \quad (\text{I.3.65})$$

La répartition spatiale des particules qui composent le plasma cesse d'être homogène à cause du champ électrostatique \vec{E} qui lui est appliqué. A l'équilibre, la densité de particule $n(\vec{r})$ de charge q sera donnée par la formule suivante :

$$n(\vec{r}) = n_0 \exp \left[-\frac{q\Phi(\vec{r})}{kT} \right] \quad (\text{I.3.66})$$

I.3.2.3 Propriétés de la distribution de Maxwell-Boltzmann

On avait mentionné auparavant que la fonction de distribution est isotrope, ce qui entraîne que la distribution des composantes de la vitesse selon n'importe quel axe cartésien est la même. On note $g(v_x)$ la fonction de distribution correspondant à la composante v_x de la vitesse \vec{v} et on peut écrire :

$$g(v_x)dv_x = \int_{v_y} \int_{v_z} f(v)dv_x dv_y dv_z \quad (\text{I.3.67})$$

En remplaçant $f(v)$ par la distribution de Maxwell-Boltzmann, on obtient :

$$g(v_x)dv_x = n \left(\frac{m}{2\pi kT} \right)^{3/2} \exp \left(\frac{-mv_x^2}{2kT} \right) dv_x \quad (\text{I.3.68})$$

$$\int_{v_y} \exp \left(\frac{-mv_y^2}{2kT} \right) dv_y \int_{v_z} \exp \left(\frac{-mv_z^2}{2kT} \right) dv_z$$

Chaque intégrale dans l'équation (I.3.68) est égale à $(2\pi kT/m)$, donc :

$$g(v_x)dv_x = n \left(\frac{m}{2\pi kT} \right)^{1/2} \exp \left(\frac{-mv_x^2}{2kT} \right) dv_x \quad (\text{I.3.69})$$

Cette équation (I.3.69) est normalisable à n et est aussi applicable à n'importe quelle direction des composantes de la vitesse.

Par symétrie, la vitesse moyenne $\langle v_x \rangle$ devrait être égale à zéro :

$$\begin{aligned} \langle v_x \rangle &= \frac{1}{n} \int_{-\infty}^{+\infty} g(v_x) v_x dv_x \\ &= \left(\frac{m}{2\pi kT} \right)^{1/2} \int_{-\infty}^{+\infty} \exp \left(\frac{-mv_x^2}{2kT} \right) v_x dv_x \\ &= 0 \end{aligned} \quad (\text{I.3.70})$$

La variance $\langle v_x^2 \rangle$ est donnée par la moyenne de v_x^2 et correspond à la dispersion de la distribution autour de $\langle v_x \rangle$:

$$\begin{aligned} \langle v_x^2 \rangle &= \frac{1}{n} \int_{-\infty}^{+\infty} g(v_x) v_x^2 dv_x \\ &= \frac{kT}{m} \\ &= \langle v_y^2 \rangle \\ &= \langle v_z^2 \rangle \end{aligned} \quad (\text{I.3.71})$$

Ce qui donne l'énergie moyenne d'une particule :

$$\begin{aligned} \frac{1}{2}m \langle v^2 \rangle &= \frac{1}{2}m (\langle v_x^2 \rangle + \langle v_y^2 \rangle + \langle v_z^2 \rangle) \\ &= \frac{3}{2}kT \end{aligned} \quad (\text{I.3.72})$$

La fonction de distribution des vitesses (I.3.60) en valeur absolue passe par un maximum v_{max} qui correspond à la valeur la plus probable, qu'on peut évaluer comme suit :

$$\begin{aligned} \left. \frac{\partial f(v)}{\partial v} \right|_{v=v_{max}} &= 0 \\ v_{max} &= \sqrt{\frac{2kT}{m}} \end{aligned} \quad (\text{I.3.73})$$

La vitesse moyenne $\langle v \rangle$ se calcule de la même manière que $\langle v_x \rangle$ en remplaçant la fonction $g(v_x)$ par $f(v)$:

$$\begin{aligned}
\langle v \rangle &= \frac{1}{n} \int_0^{+\infty} f(v) v dv \\
&= 4\pi \left(\frac{m}{2\pi kT} \right)^{3/2} \int_0^{+\infty} \exp\left(\frac{-mv^2}{2kT}\right) v^3 dv \\
&= \sqrt{\frac{8kT}{\pi m}}
\end{aligned} \tag{I.3.74}$$

de même pour $\langle v^2 \rangle$

$$\begin{aligned}
\langle v^2 \rangle &= \frac{1}{n} \int_{-\infty}^{+\infty} f(v) v^2 dv \\
&= 4\pi \left(\frac{m}{2\pi kT} \right)^{3/2} \int_0^{+\infty} \exp\left(\frac{-mv^2}{2kT}\right) v^4 dv \\
&= \frac{3kT}{m}
\end{aligned} \tag{I.3.75}$$

$$\sqrt{\langle v^2 \rangle} = \sqrt{\frac{3kT}{m}}$$

Les trois quantités v_{max} , $\langle v \rangle$ et $\sqrt{\langle v^2 \rangle}$ peuvent être classées (voir la figure I.10) suivant l'inégalité suivante :

$$\sqrt{\langle v^2 \rangle} > (\langle v \rangle) > v_{max} \tag{I.3.76}$$

Il faut noter que la vitesse la plus probable est différente de la vitesse moyenne que peuvent avoir les molécules dans un gaz.

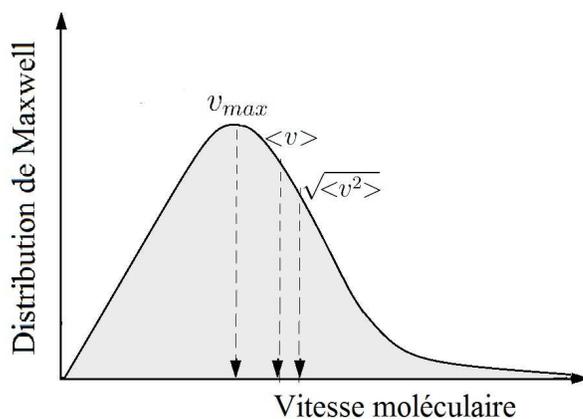


FIGURE I.10 – Illustration qualitative de la distribution de Maxwell en fonction de la vitesse à une température donnée.

Appliquons les formules précédentes à un gaz couramment utilisé : l'azote N_2 [17].

La masse d'une molécule N_2 est donnée par $m_{N_2} \approx 4.65 \cdot 10^{-26} \text{ kg}$, si le gaz se trouve à une température ambiante ($T = 300\text{K}$), alors le produit $kT \approx 4.141 \cdot 10^{-21} \text{ J}$, on en déduit les trois quantités suivantes :

$$\begin{aligned}
v_{max}(N_2) &= \sqrt{\frac{2kT}{m}} = 422 \text{ m s}^{-1} \\
\langle v \rangle (N_2) &= \sqrt{\frac{8kT}{\pi m}} = 476.7 \text{ m s}^{-1} \\
\sqrt{\langle v^2 \rangle}(N_2) &= \sqrt{\frac{3kT}{m}} = 516.8 \text{ m s}^{-1}
\end{aligned}$$

La vitesse du son qui se propage dans l'air par effet de transmission de mouvement des molécules de proche en proche est de l'ordre de 340 m s^{-1} à 15°C ce qui est relativement faible par rapport aux vitesses citées ci-dessus.

I.3.2.4 Le théorème H

L'obtention de la distribution de Maxwell (I.3.60) se fait sous condition d'équilibre statistique indépendamment de l'équation de Boltzmann. La question qu'on pourrait se poser, comment l'équation de Boltzmann aboutit à une fonction de distribution d'un système de particules qui ont une tendance à évoluer vers une fonction de distribution d'équilibre ?

Pour examiner les solutions à l'équilibre de l'équation de Boltzmann, considérant une fonction qu'on note $H(t)$ et qui a pour expression :

$$H(t) = \int_v f(\vec{v}, t) \ln [f(\vec{r}, \vec{v}, t)] d^3v \quad (\text{I.3.77})$$

avec $f(\vec{v}, t)$ une fonction de distribution indépendante de la position \vec{r} qui doit vérifier l'équation de Boltzmann (I.3.27).

La fonction $H(t)$ est proportionnelle à l'entropie S du système [6, 8, 26] suivant la relation ci-dessous :

$$\frac{S}{V} = -kH \quad (\text{I.3.78})$$

Où k et V sont définies comme étant la constante de Boltzmann et le volume du système, respectivement.

La dérivée de $H(t)$ par rapport au temps donne :

$$\frac{\partial H(t)}{\partial t} = \int_v (1 + \ln f(\vec{v}, t)) \frac{\partial f(\vec{v}, t)}{\partial t} d^3v \quad (\text{I.3.79})$$

En remplaçant l'équation de Boltzmann (I.3.27) dans cette équation (I.3.79) on obtient :

$$\frac{\partial H(t)}{\partial t} = \int_{\Omega} \int_v \int_{v_1} (1 + \ln f) (f' f'_1 - f f_1) g \sigma(\Omega) d\Omega d^3v_1 d^3v \quad (\text{I.3.80})$$

La fonction $H(t)$ est valable aussi pour la fonction $f_1 = f_1(\vec{v}_1, t)$, les variables \vec{v} et \vec{v}_1 sont interchangeables, donc l'équation (I.3.80) peut s'écrire aussi comme suit :

$$\frac{\partial H(t)}{\partial t} = \int_{\Omega} \int_{v_1} \int_v (1 + \ln f_1) (f'_1 f' - f_1 f) g \sigma(\Omega) d\Omega d^3v d^3v_1 \quad (\text{I.3.81})$$

En additionnant les deux équations (I.3.80) et (I.3.81), puis en divisant par 2, on obtient :

$$\frac{\partial H(t)}{\partial t} = \frac{1}{2} \int_{\Omega} \int_v \int_{v_1} (2 + \ln f f_1) (f'_1 f' - f_1 f) g \sigma(\Omega) d\Omega d^3 v_1 d^3 v \quad (\text{I.3.82})$$

On pourrait faire la même chose en remplaçant les vitesses avant la collision \vec{v} et \vec{v}_1 par les vitesses après la collision \vec{v}' et \vec{v}'_1 , et on écrit :

$$\frac{\partial H(t)}{\partial t} = \frac{1}{2} \int_{\Omega} \int_v \int_{v_1} (2 + \ln f' f'_1) (f_1 f - f'_1 f') g \sigma(\Omega) d\Omega d^3 v_1 d^3 v \quad (\text{I.3.83})$$

En combinant les deux équations (I.3.82) et (I.3.83), on aboutit à l'expression suivante :

$$\frac{\partial H(t)}{\partial t} = \frac{1}{4} \int_{\Omega} \int_v \int_{v_1} \left[\ln \left(\frac{f f_1}{f' f'_1} \right) \right] (f'_1 f' - f_1 f) g \sigma(\Omega) d\Omega d^3 v_1 d^3 v \quad (\text{I.3.84})$$

Dans cette expression on peut remarquer que si :

$f' f'_1 > f f_1$ alors $\ln(f f_1 / f' f'_1) < 0$ et par conséquent $(\partial H(t) / \partial t) < 0$ puisque tous les autres facteurs qui apparaissent dans l'équation sont positifs.

$f' f'_1 < f f_1$ alors $\ln(f f_1 / f' f'_1) > 0$ et par conséquent $(\partial H(t) / \partial t) < 0$.

$f' f'_1 = f f_1$ alors $(\partial H(t) / \partial t) = 0$ qui correspond à l'état d'équilibre.

En conclusion, quelle que soit la fonction f , pourvu qu'elle satisfasse l'équation de Boltzmann, la fonction $H(t)$ est toujours une fonction décroissante d'une manière monotone dans le temps jusqu'à ce qu'elle atteigne une valeur limite. C'est le célèbre théorème H de Boltzmann.

$$\frac{\partial H(t)}{\partial t} \leq 0 \quad (\text{I.3.85})$$

La valeur limite que peut atteindre la fonction $H(t)$ n'est définie que lorsque la condition suivante est réalisée :

$$f' f'_1 = f f_1 \quad (\text{I.3.86})$$

En appliquant le logarithme sur l'équation (I.3.86) on retrouve l'équation (I.3.43) utilisée dans la démonstration de la distribution de Maxwell :

$$\ln f + \ln f_1 = \ln f' + \ln f'_1 \quad (\text{I.3.87})$$

Ce résultat signifie que la quantité $\ln f$ est un invariant du processus de collision, et plus important encore, la seule fonction qui vérifie la valeur limite de la fonction $H(t)$ et qui vérifie l'équation (I.3.87) est celle de Maxwell-Boltzmann trouvée dans la section I.3.1.3.ii. Autrement dit, l'unique solution d'équilibre de l'équation de Boltzmann est celle où non seulement le terme de collision est nul mais aussi l'intégrand de chaque intégrale est égal à zéro par le fait de l'équilibre du terme collisionnel, c'est-à-dire le nombre de molécules créées dans un petit élément de volume des phases est équivalent (contrebalance) à celui perdu dans le même petit élément de volume.

Le théorème H de Boltzmann traduit aussi d'une autre manière, la croissance monotone de l'entropie du système jusqu'à atteindre une valeur maximale ($\partial S(t)/\partial t \leq 0$). Au moment où Boltzmann a proposé son théorème H , un paradoxe est apparu. En effet la croissance monotone de l'entropie au cours du temps traduit un comportement irréversible du système étudié; en revanche, les lois de la mécanique newtonienne sont parfaitement réversibles, c'est ce qu'on appelait le paradoxe de J. Loschmidt (1877); il imaginait que si la fonction $H(t)$ était en train de décroître et qu'à un instant donné on fait en sorte que toutes les vitesses des particules soient renversées, alors a priori la fonction $H(t)$ commence à croître. Le paradoxe a été levé par l'hypothèse du chaos moléculaire supposé avant la dérivation de terme de collision dans l'équation de Boltzmann (voir section I.3.1.3.ii), ce qui exclut toute corrélation entre les vitesses des particules. Aussi l'échelle du temps pendant laquelle évolue le système physique est beaucoup plus importante comparée au temps de collision, donc la fonction $H(t)$ ou $S(t)$ peut avoir un comportement monotone à grande échelle (voir figure I.11), tout en ayant des fluctuations (non monotone) à très petite échelle [28].

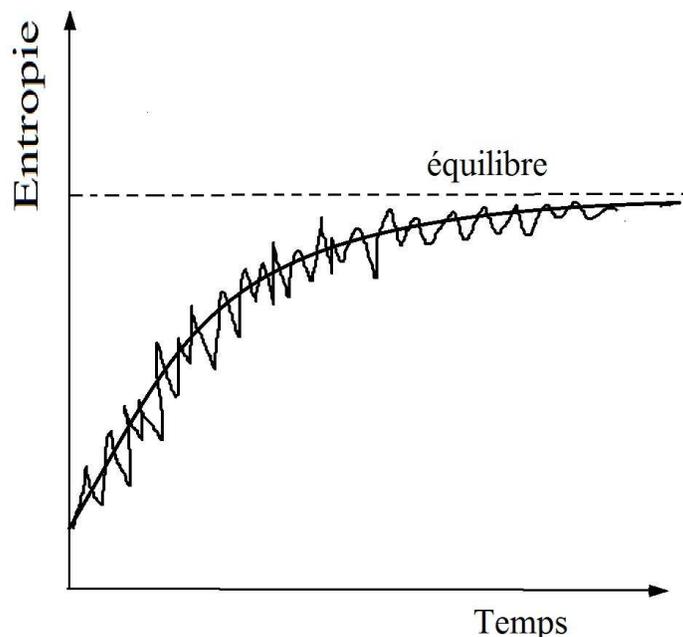


FIGURE I.11 – Illustration de la croissance de l'entropie à grande échelle et à petite échelle en fonction du temps.

Par ailleurs, si on tient compte des forces extérieures au système (plasma non uniforme) alors la dérivée de fonction $H(t)$ par rapport au temps s'écrit [26] :

$$\begin{aligned} \frac{\partial H(t)}{\partial t} = & \sum_i \int \int \left[(1 + \ln f_i) \left\{ \sum_j \int \int \int (f'_i f'_j - f_i f_j) g_{ij} \sigma(\Omega) d\Omega d\vec{v}_j \right. \right. \\ & \left. \left. - \left(\vec{v}_i \cdot \frac{\partial f_i}{\partial \vec{r}} \right) - \left(\vec{a}_i \cdot \frac{\partial f_i}{\partial \vec{v}_i} \right) \right\} \right] d^3 d\vec{v}_i d\vec{r} \end{aligned} \quad (\text{I.3.88})$$

L'équilibre n'est atteint que lorsque les fonctions de distribution deviennent indépendantes

du temps :

$$\frac{\partial f_i}{\partial t} = 0 \quad (\text{I.3.89})$$

En utilisant l'équation de Boltzmann (I.3.27), on en déduit :

$$\frac{\partial H(t)}{\partial t} = 0 \quad (\text{I.3.90})$$

On a vu que l'entropie S est proportionnelle à la fonction $H(t)$, par conséquent l'équation (I.3.88) peut s'écrire :

$$S = \sum_i (S_i^{int} + S_i^{ext}) \quad (\text{I.3.91})$$

S correspond à l'entropie totale du système, S_i^{int} traduit l'entropie relative aux fonctions de distribution et aux échanges d'énergie entre les différentes particules et S_i^{ext} désigne l'entropie due aux forces extérieures et aux gradients. On peut écrire alors :

$$\frac{\partial S}{\partial t} = 0 \quad (\text{I.3.92})$$

On retrouve la condition qu'un plasma soumis à des forces extérieures doit satisfaire pour être stable dans le temps [26].

I.3.3 Reformulation des coefficients de transport

Le traitement rigoureux de la théorie cinétique des gaz est basé sur la détermination de la fonction de distribution, solution de l'équation de Boltzmann (I.3.27). Le théorème H (voir section I.3.2.4) a démontré que la seule solution de l'équation de Boltzmann d'un état en équilibre est la fonction de Maxwell-Boltzmann (I.3.60). Pour un état qui se trouve hors équilibre la fonction de distribution solution de l'équation de Boltzmann ne prend plus une forme maxwellienne. La solution de l'équation de Boltzmann décrivant un système hors équilibre a été déterminée par Chapman-Enskog par la méthode de perturbation qui admet une expansion de la fonction de distribution autour de la distribution de Maxwell-Boltzmann.

On a vu dans la section I.2.5 que le retour à l'équilibre d'un système se trouvant initialement hors équilibre se traduit par un phénomène de transport d'une quantité conservative caractérisé par un coefficient de transport. Les coefficients de transport qui ont été établis sur la base du concept du libre parcours moyen doivent être reformulés rigoureusement en utilisant les fonctions de distribution proposées Chapman-Enskog.

I.3.3.1 Expansion de la fonction de distribution en polynômes de Sonine

Si on considère une fonction de distribution arbitraire $f(v)$ qui satisfait l'équation de Boltzmann, alors cette fonction peut être écrite sous forme de combinaison de polynômes de Sonine autour de la distribution de Maxwell-Boltzmann $f^{(0)}(v)$ (voir équation (I.3.59)) :

$$f(v) = f^{(0)}(v) \left\{ 1 + \sum_{p=1}^{\infty} a_p S_p(v^2) \right\} \quad (\text{I.3.93})$$

La série des fonctions orthogonales $S_p(x)$ qui représentent la déviation d'un état hors équilibre de celui représenté par la distribution de Maxwell-Boltzmann qui définit un état d'équilibre. Chapman et Enskog ont adopté une série des polynômes de Sonine qui est donnée par l'expression suivante :

$$S_m^n(x) = \sum_{p=0}^n \frac{(-1)^p (m+n)!}{(m+p)!(n-p)!p!} x^p \quad (\text{I.3.94})$$

Le polynôme de Sonine satisfait la condition d'orthogonalité suivante :

$$\begin{aligned} \int_0^\infty \exp(-x) x^m S_m^p(x) S_m^q(x) dx &= \left\{ \frac{\Gamma(m+p+1)}{p!} \right\} \delta_{p,q} \\ &= \frac{(m+p)!}{p!} \delta_{p,q} \end{aligned} \quad (\text{I.3.95})$$

avec $\delta_{p,q}$ et Γ représentent le symbole de Kronecker et la fonction gamma, respectivement.

Les premiers termes de la série des polynôme de Sonine sont donnés par :

$$\begin{aligned} S_m^0(x) &= 1 \\ S_m^1(x) &= m+1-x \\ S_m^2(x) &= m + \frac{x^2}{2} - \frac{5x}{2} + \frac{11}{8} \end{aligned}$$

I.3.3.2 Théorie de Chapman-Enskog

Chapman et Enskog ont développé séparément une approche rigoureuse qui a permis de résoudre l'équation de Boltzmann basée sur l'expansion de la fonction de distribution en polynômes de Sonine. Le calcul des coefficients de transport est basé sur la détermination de la fonction de distribution que Chapman-Enskog [29, 19] ont proposé.

Pour un gaz monoatomique, on suppose une fonction de distribution f , légèrement différente de celle qui décrit un équilibre $f^{(0)}$, qu'on peut mettre sous la forme suivante :

$$f = f^{(0)} + \epsilon f^{(1)} + \epsilon^2 f^{(2)} + \dots \quad (\text{I.3.96})$$

ϵ est un paramètre de perturbation et $f^{(0)}$ est la distribution de Maxwell-Boltzmann (I.3.59) qu'on peut écrire sous cette forme :

$$\begin{aligned} f^{(0)} &= n \left(\frac{m}{2\pi kT} \right) \exp(-\zeta^2) \\ \zeta &= \sqrt{\frac{mc^2}{2kT}} \end{aligned} \quad (\text{I.3.97})$$

avec c la vitesse particulaire qui est donnée par $c = v - c_0$, v et c_0 représentent la vitesse des particules et la vitesse moyenne, respectivement (voir section I.3.2.1).

Le terme de collision (voir équation (I.3.24)), discuté dans la section I.3.1.3.ii peut être reformulé comme suit :

$$I(f, f_1) = 2\pi \int \int (f' f'_1 - f f_1) g b db dv_1 \quad (\text{I.3.98})$$

L'équation de Boltzmann (I.3.26) relative à la fonction f peut être linéarisée suivant les fonctions $f^{(0)}$, $f^{(1)}$, et $f^{(2)}$, ...

$$0 = I(f^{(0)}, f_1^{(0)})$$

$$\frac{\partial f^{(0)}}{\partial t} + \vec{v} \cdot \nabla f^{(0)} + \vec{a} \cdot \nabla_v f^{(0)} = [I(f^{(0)}, f_1^{(1)}) + I(f^{(1)}, f_1^{(0)})] \quad (\text{I.3.99})$$

$$\frac{\partial f^{(1)}}{\partial t} + \vec{v} \cdot \nabla f^{(1)} + \vec{a} \cdot \nabla_v f^{(1)} = [I(f^{(0)}, f_1^{(2)}) + I(f^{(1)}, f_1^{(1)}) + I(f^{(2)}, f_1^{(0)})]$$

La fonction f peut être exprimée en fonction de $\Phi^{(1)}$ qui est une fonction de perturbation [6] :

$$f = f^{(0)} + f^{(0)} \Phi^{(1)} \quad (\text{I.3.100})$$

Par conséquent, en se limitant au premier ordre, la deuxième équation du système (I.3.99) peut s'écrire :

$$\begin{aligned} \frac{\partial f^{(0)}}{\partial t} + \vec{v} \cdot \nabla f^{(0)} + \vec{a} \cdot \nabla_v f^{(0)} &= 2\pi \int \int f^{(0)} f_1^{(0)} (\Phi' + \Phi'_1 - \Phi - \Phi_1) g b db dv_1 \\ &= I(\Phi) \end{aligned} \quad (\text{I.3.101})$$

$\Phi^{(1)}$ est donné par la formule suivante [30, 6] :

$$\Phi^{(1)} = -\frac{1}{n} \sqrt{\frac{2kT}{m}} \vec{A} \cdot \nabla \ln(T) - \frac{2}{n} \overline{\overline{B}} : \nabla c_0 \quad (\text{I.3.102})$$

tel que \vec{A} et $\overline{\overline{B}}$ sont le vecteur et le tenseur, respectivement, qui prennent la forme suivante :

$$\begin{aligned} \vec{A}(\vec{\zeta}) &= \vec{\zeta} A(\zeta) \\ \overline{\overline{B}}(\vec{\zeta}) &= \vec{\zeta} \wedge \vec{\zeta} B(\zeta) \end{aligned} \quad (\text{I.3.103})$$

En substituant l'équation (I.3.102) dans (I.3.100), on obtient :

$$f = f^{(0)} \left(1 - \frac{1}{n} \sqrt{\frac{2kT}{m}} \vec{A} \cdot \nabla \ln(T) - \frac{2}{n} \overline{\overline{B}} : \nabla c_0 \right) \quad (\text{I.3.104})$$

Les notations de Chapman relatives à la conductivité thermique et à la viscosité sont définies comme suit :

$$\begin{aligned} nI(\vec{A}) &= f^{(0)} \left(\zeta^2 - \frac{5}{2} \right) \vec{\zeta} \\ nI(\overline{\overline{B}}) &= f^{(0)} \vec{\zeta} \wedge \vec{\zeta} \end{aligned} \quad (\text{I.3.105})$$

En utilisant l'expression donnée dans l'équation (I.3.101), on peut alors écrire :

$$\begin{aligned} n^2 I(\Phi) &= n^2 \left(\frac{m}{2kT} \right) \sigma_0^2 \int \int \exp(-\zeta^2 - \zeta'^2) \\ &\times \left(\Phi(\vec{\zeta}') + \Phi(\vec{\zeta}'_1) - \Phi(\vec{\zeta}) - \Phi(\vec{\zeta}_1) \right) g b^* db^* d\vec{\zeta}'_1 \end{aligned} \quad (\text{I.3.106})$$

avec $b^* = b/\sigma_0$ et $(2\pi\sigma_0^2)$ représente la section efficace relative aux sphères rigides.

On définit le flux de chaleur \vec{q} et le tenseur de pression $\bar{\bar{p}}$ comme suit :

$$\vec{q} = \frac{1}{2} m \int f c^2 \vec{c} dv \quad (\text{I.3.107})$$

$$\bar{\bar{p}} = m \int f \vec{c} \wedge \vec{c} dv \quad (\text{I.3.108})$$

En utilisant l'expression de f (I.3.104) et la condition de normalisation suivante :

$$\int f^{(0)} A(\zeta) \zeta dv = 0 \quad (\text{I.3.109})$$

il s'ensuit :

$$\vec{q} = -\lambda \nabla T \quad (\text{I.3.110})$$

$$\bar{\bar{p}} = p \bar{\bar{U}} - 2\eta \bar{\bar{\nabla}} c_0 \quad (\text{I.3.111})$$

p et $\bar{\bar{U}}$ représentent la pression scalaire et le tenseur unité, respectivement. La conductivité thermique λ et la viscosité η sont données par les expressions suivantes [5, 6, 30] :

$$\begin{aligned} \lambda &= \frac{2k^2 T}{3mn} \int f^{(0)} \zeta^2 A(\zeta) \left(\zeta^2 - \frac{5}{2} \right) dv \\ &= -\frac{8k^2 T}{3m\sqrt{\pi}} \int_0^\infty \exp(-\zeta^2) \zeta^4 \left(\frac{5}{2} - \zeta^2 \right) A(\zeta) d\zeta \end{aligned} \quad (\text{I.3.112})$$

$$\begin{aligned} \eta &= \frac{2kT}{5n} \int f^{(0)} \vec{\zeta} \wedge \vec{\zeta}' : \vec{\zeta} \wedge \vec{\zeta}' B(\zeta) dv \\ &= \frac{16kT}{15\sqrt{\pi}} \int_0^\infty \exp(-\zeta^2) \zeta^6 B(\zeta) d\zeta \end{aligned}$$

Les fonctions $A(\zeta)$ et $B(\zeta)$ peuvent être exprimées en fonction des polynômes de Sonine (voir section I.3.3.1) comme suit :

$$A(\zeta) = \sum_{p=1}^N a_p S_{3/2}^{(p)}(\zeta^2) \quad (\text{I.3.113})$$

$$B(\zeta) = \sum_{p=1}^N b_p S_{5/2}^{(p-1)}(\zeta^2) \quad (\text{I.3.114})$$

Le système d'équations de Chapman-Enskog (I.3.105) peut aussi être exprimé en fonction des polynômes de Sonine :

$$\begin{aligned}
nI(\vec{\zeta}A(\zeta)) &= f^{(0)}S_{3/2}^{(1)}(\zeta^2)\vec{\zeta} \\
nI(\vec{\zeta}\wedge\vec{\zeta}B(\zeta)) &= f^{(0)}S_{5/2}^{(0)}(\zeta^2)\vec{\zeta}\wedge\vec{\zeta}
\end{aligned}
\tag{I.3.115}$$

En substituant les fonctions $A(\zeta)$ et $B(\zeta)$ multipliées par $S_{3/2}^{(q)}(\zeta^2)\vec{\zeta}$ et $S_{5/2}^{(q-1)}(\zeta^2)\vec{\zeta}\wedge\vec{\zeta}$, respectivement, on aboutit à un système d'équations linéaires avec les coefficients d'expansion a_p et b_p :

$$\begin{cases}
\sum_{p=1}^N a_{pq}a_p = \alpha_q & (q = 1, 2, 3, \dots, N) \\
\sum_{p=1}^N b_{pq}b_p = \beta_q & (q = 1, 2, 3, \dots, N)
\end{cases}
\tag{I.3.116}$$

Les coefficients a_{pq} , b_{pq} , α_q et β_q sont donnés par les équations suivantes, respectivement :

$$\begin{aligned}
a_{pq} &= \int I(\vec{\zeta}S_{3/2}^{(p)}(\zeta^2)) \cdot \vec{\zeta}S_{3/2}^{(q)}(\zeta^2) dv \\
b_{pq} &= \int I(\vec{\zeta}\wedge\vec{\zeta}S_{5/2}^{(p-1)}(\zeta^2)) : \vec{\zeta}\wedge\vec{\zeta}S_{5/2}^{(q-1)}(\zeta^2) dv \\
\alpha_q &= -n^{-1} \int f^{(0)}(\vec{\zeta}S_{3/2}^{(1)}(\zeta^2)) \cdot \vec{\zeta}S_{3/2}^{(q)}(\zeta^2) dv \\
&= -\frac{15}{4}\delta_{q,1} \\
\beta_q &= -n^{-1} \int f^{(0)}(\vec{\zeta}\wedge\vec{\zeta}S_{5/2}^{(0)}(\zeta^2)) : \vec{\zeta}\wedge\vec{\zeta}S_{5/2}^{(q-1)}(\zeta^2) dv \\
&= \frac{5}{2}\delta_{q,1}
\end{aligned}
\tag{I.3.117}$$

Finalement, la conductivité thermique λ et la viscosité η prennent les formes suivantes :

$$\begin{aligned}
\lambda &= -\frac{5k^2T}{2m}a_1 \\
\eta &= kTb_1
\end{aligned}
\tag{I.3.118}$$

Pour trouver les coefficients d'expansion a_q et b_q il faut résoudre le système d'équations (I.3.116) qui dépend principalement de l'ordre N du degré de précision souhaitée relatif aux polynômes de Sonine et qui permet d'évaluer au préalable les coefficients a_{pq} et b_{pq} , qu'on peut exprimer en fonction de ce qu'on appelle les intégrales oméga ou bien les intégrales de collision [6] qu'on note $\Omega^{(\ell,s)}$:

$$\begin{aligned}
a_{pq} &= \sum_{\ell,s} \hat{A}_{pq\ell s} \Omega^{(\ell,s)}(T) \\
b_{pq} &= \sum_{\ell,s} \hat{B}_{pq\ell s} \Omega^{(\ell,s)}(T)
\end{aligned}
\tag{I.3.119}$$

Les quantités $\hat{A}_{pq\ell s}$ et $\hat{B}_{pq\ell s}$ sont des nombres et les intégrales de collision $\Omega^{(\ell,s)}$ sont exprimées comme suit :

$$\Omega^{(\ell,s)}(T) = \sqrt{\frac{2\pi kT}{m}} \int_0^\infty \int_0^\infty \exp(-\gamma^2) \gamma^{2s+3} (1 - \cos^\ell \chi) b \, db d\gamma \tag{I.3.120}$$

avec $\gamma = \left(\frac{mg^2}{2kT}\right)$ et χ représente l'angle de déflexion (voir section II.3.2, équation (II.3.32)). Compte tenu de l'équation de l'angle de déflexion (II.3.32), les intégrales de collision (I.3.120) prennent une forme d'une triple intégrale qui représente certaines difficultés à résoudre, notamment les singularités que peuvent avoir les sections efficaces et l'angle de déflexion dans certains cas. Le choix du potentiel d'interaction qui apparaît dans l'intégrale de l'angle de déflexion entraîne parfois des anomalies qui rendent la résolution de ces triples intégrales ardue. On a consacré un chapitre dans ce travail pour traiter ces singularités et proposer des outils mathématiques et numériques pour surmonter ces difficultés et avoir une méthode qui permette d'évaluer ces intégrales de collision avec précision.

Il existe une relation qui relie l'intégrale de collision pour un ordre s avec celle d'ordre $s + 1$ qui peut être donnée ci-dessous :

$$\Omega^{(\ell,s+1)}(T) = \frac{\partial \Omega^{(\ell,s)}(T)}{\partial T} + \left(s + \frac{3}{2}\right) \Omega^{(\ell,s)}(T) \tag{I.3.121}$$

Chapman et Cowling [5] ont évalué les coefficients a_{pq} et b_{pq} pour un ordre $N = 3$, qu'on donne ici :

$$\begin{aligned}
a_{11} &= 4\Omega^{(2,2)} \\
a_{12} &= 7\Omega^{(2,2)} - 8\Omega^{(2,3)} \\
a_{22} &= \frac{77}{4}\Omega^{(2,2)} - 28\Omega^{(2,3)} + 20\Omega^{(2,4)} \\
a_{13} &= \frac{63}{8}\Omega^{(2,2)} - 18\Omega^{(2,3)} + 10\Omega^{(2,4)} \\
a_{23} &= \frac{945}{32}\Omega^{(2,2)} - \frac{261}{4}\Omega^{(2,3)} + \frac{125}{2}\Omega^{(2,4)} - 30\Omega^{(2,5)} \\
a_{33} &= \frac{14553}{256}\Omega^{(2,2)} - \frac{1215}{8}\Omega^{(2,3)} + \frac{1565}{8}\Omega^{(2,4)} - 135\Omega^{(2,5)} + \frac{105}{2}\Omega^{(2,6)} + 4\Omega^{(4,4)}
\end{aligned} \tag{I.3.122}$$

$$\begin{aligned}
b_{11} &= a_{11} \\
b_{12} &= a_{12} \\
b_{22} &= \frac{301}{12}\Omega^{(2,2)} - 28\Omega^{(2,3)} + 20\Omega^{(2,4)} \\
b_{13} &= a_{13} \\
b_{23} &= \frac{1365}{32}\Omega^{(2,2)} - \frac{321}{4}\Omega^{(2,3)} + \frac{125}{2}\Omega^{(2,4)} - 30\Omega^{(2,5)} \\
b_{33} &= \frac{25137}{256}\Omega^{(2,2)} - \frac{1215}{8}\Omega^{(2,3)} + \frac{1905}{8}\Omega^{(2,4)} - 135\Omega^{(2,5)} + \frac{105}{2}\Omega^{(2,6)} + 12\Omega^{(4,4)}
\end{aligned}$$

I.3.3.2.i Intégrale de collision sous forme réduite

Dans le calcul des coefficients de transport, on emploie généralement des quantités réduites (sans dimension). Les intégrales de collision sont normalisées aux intégrales de collision $[\Omega^{(\ell,s)}]_{\text{sphère-rigide}}$ relatives au potentiel de sphères rigides [6].

$$\begin{aligned}
[\Omega^{(\ell,s)}]_{\text{sphère-rigide}} &= \sqrt{\frac{kT}{2\pi\mu}} \frac{(s+1)!}{2} [Q^{(\ell)}]_{\text{sphère-rigide}} \\
[Q^{(\ell)}]_{\text{sphère-rigide}} &= \left[1 - \frac{1}{2} \frac{1 + (-1)^\ell}{1 + \ell} \right] \sigma
\end{aligned} \tag{I.3.123}$$

avec $\sigma = \pi d^2$ la section efficace discutée dans la section I.2.4. Pour $\ell = 1$ on trouve $Q^{(1)} = \sigma$ qui est indépendante de la vitesse g qu'on appelle parfois la section efficace de diffusion, et si $\ell = 2$ alors $Q^{(2)} = \frac{2}{3}\sigma$ on retrouve la section efficace dite de viscosité.

On définit aussi les paramètres sans dimension suivants :

$$\begin{aligned}
r^* &= \frac{r}{d} && \text{Distance intermoléculaire réduite} \\
b^* &= \frac{b}{d} && \text{Paramètre d'impact réduit} \\
V^*(r^*) &= \frac{V(r)}{\epsilon} && \text{Potentiel d'interaction réduit} \\
T^* &= \frac{kT}{\epsilon} && \text{Température réduite} \\
g^{*2} &= \frac{\frac{1}{2}\mu g^2}{\epsilon} && \text{Vitesse cinétique réduite}
\end{aligned}$$

ϵ correspond au puits de potentiel (énergie de la profondeur du puits).

Les trois intégrales incluses l'une dans l'autre, relatives à l'angle de déflexion réduit, la section efficace réduite et l'intégrale omega prennent les formes suivantes, respectivement :

$$\begin{aligned}
\chi(b^*, g^{*2}) &= \pi - 2b^* \int_{r_{min}^*}^{\infty} \frac{dr^*/r^{*2}}{\sqrt{1 - \frac{b^{*2}}{r^{*2}} - \frac{V^*(r^*)}{g^{*2}}}} \\
Q^{(\ell)*} &= \frac{Q^{(\ell)}}{[Q^{(\ell)}]_{\text{sphère-rigide}}} \\
&= 2 \left[1 - \frac{1}{2} \frac{1 + (-1)^\ell}{1 + \ell} \right]^{-1} \int_0^\infty (1 - \cos^\ell \chi) b^* db^* \tag{I.3.124} \\
\Omega^{(\ell,s)*}(T^*) &= \frac{\Omega^{(\ell,s)}}{[\Omega^{(\ell,s)}]_{\text{sphère-rigide}}} \\
&= \frac{2}{(s+1)! T^{*s}} \int_0^\infty \exp(-g^{*2}/T^*) g^{*(2s+3)} Q^{(\ell)*}(g^*) dg^*
\end{aligned}$$

avec r_{min} la distance minimale d'approche (voir section II.3.2).

I.3.3.3 Résolution analytique de quelques intégrales de collision

La détermination des intégrales de collision fait l'objet d'une étude à part dans le calcul des coefficients de transport, elle nécessite souvent le recours aux outils numériques selon le type de potentiel d'interaction entre particules qui est pris en compte. Néanmoins, il existe certains potentiels relativement simples pour lesquels un calcul analytique de l'intégrale triple (I.3.120) est possible.

Certaines interactions entre molécules sont représentées suivant un potentiel de la forme :

$$V(r) = \frac{d}{r^\delta} \quad (\text{I.3.125})$$

d est un nombre, s'il est positif alors le potentiel $V(r)$ est répulsif si non il est attractif, et δ est un entier positif.

Pour un potentiel de type (I.3.125), l'intégrale de collision (I.3.120) peut se résoudre analytiquement [31] et prend l'expression suivante :

$$\Omega^{(\ell,s)}(T) = \sqrt{\left(\frac{\pi kT}{2\mu}\right)} \left(\frac{\delta}{kT}\right)^{2/\delta} (d^2)^{1/\delta} \Gamma\left(s + 2 - \frac{2}{\delta}\right) A^{(\ell)}(\delta) \quad (\text{I.3.126})$$

Les valeurs $A^{(\ell)}(\delta)$ sont donnés dans le tableau I.2.

TABLE I.2 – Tableau de valeurs correspondant au $A^{(\ell)}(\delta)$

| $A^{(\ell)}(\delta)$ | d négatif | d positif |
|----------------------|-------------|-------------|
| $A^{(1)}(2)$ | 0.807 | 0.397 |
| $A^{(1)}(3)$ | 0.675 | 0.311 |
| $A^{(1)}(4)$ | 0.552 | |
| $A^{(1)}(6)$ | 0.434 | |
| $A^{(2)}(2)$ | 0.711 | 0.529 |
| $A^{(2)}(3)$ | 0.464 | 0.353 |
| $A^{(2)}(4)$ | 0.385 | |
| $A^{(2)}(6)$ | 0.328 | |
| $A^{(3)}(4)$ | 0.638 | |
| $A^{(3)}(6)$ | 0.502 | |
| $A^{(4)}(6)$ | 0.420 | |

Une interaction entre une particule neutre et une particule ionisée est représentée par un potentiel de polarisation inversement proportionnel à (r^4) et qui peut être approximé par le potentiel (I.3.125) avec un $\delta = 4$.

I.3.3.4 Coefficient de diffusion

Le traitement approfondi de la cinétique des gaz par la théorie de Chapman-Enskog nous permet de formuler, entre autre le coefficient de diffusion, pour un gaz mono-espèce, dans une première approximation en fonction des intégrales de collision réduites I.3.3.2.i comme suit [6] :

$$\begin{aligned}
D_1 &= \frac{3}{8} \left(\frac{\sqrt{\pi m k T}}{\sigma \Omega^{(1,1)*}} \right) \left(\frac{1}{\rho} \right) \\
&= \frac{3}{16} \left(\frac{\sqrt{2\pi k^3 T^3 / \mu}}{p \sigma \Omega^{(1,1)*}} \right) \left(\frac{1}{\rho} \right) \\
&= 2.628 \times 10^{-7} \sqrt{\frac{T^3}{M}} \frac{1}{p d^2 \Omega^{(1,1)*}} \quad [m^2 s^{-1}]
\end{aligned} \tag{I.3.127}$$

avec $d[\text{Å}]$, $m[\text{kg}]$, M , $T[\text{K}]$ et $p[\text{atm}]$ le diamètre des sphères rigides (parfois désigné par σ), la masse, le poids moléculaire, la température et la pression, respectivement.

Il faut noter que le coefficient de transport élaboré avec la théorie de Chapman-Enskog dans l'approximation des sphères rigides ($\Omega^{(1,1)*} \approx 1$), ne diffère que d'un coefficient ($\approx 1/2$) par rapport à celui trouvé avec le concept du libre parcours moyen (voir section I.2.5.1).

Pour un système à deux espèces gazeuses, on parle d'un coefficient de diffusion binaire donné, dans une première approximation, par l'expression suivante :

$$D_{12} = 2.628 \times 10^{-7} \sqrt{\frac{T^3 (M_1 + M_2)}{2M_1 M_2}} \frac{1}{p d_{12}^2 \Omega_{12}^{(1,1)*} (T_{12}^*)} \tag{I.3.128}$$

avec M_1 , M_2 , d_{12} et $T_{12}^* = kT/\epsilon_{12}$ les masses molaires des espèces 1 et 2, le diamètre des sphères rigides et le puits d'interaction relatif à l'interaction entre la particule 1 et 2, respectivement.

Enfin, pour un système caractérisé par plusieurs espèces moléculaires, le coefficient de diffusion multi-espèce correspondant est donné par la formule :

$$\bar{D}_{ij} = \frac{1}{M_j} \left(\sum_k x_k M_k \right) \frac{K^{ji} - K^{ii}}{|K|} \tag{I.3.129}$$

tel que x_k désigne la fraction molaire de l'espèce k qui est déterminée par le calcul de composition, traitée dans la section IV.2. Toutes les espèces sont prises en compte dans la somme ci-dessous :

$$K_{ij} = \frac{x_i}{D_{ij}} + \frac{M_j}{M_i} \sum_{k \neq i} \frac{x_k}{D_{ik}} \quad i \neq j \tag{I.3.130}$$

$K_{ii} = 0$, $|K|$ est le déterminant de la matrice K_{ij} et K^{ji} désigne les mineurs de la matrice

K_{ij} qui sont les déterminants de ses sous-matrices carrées :

$$K^{ji} = (-1)^{i+j} \begin{vmatrix} 0 & \cdots & K_{1,j-1} & K_{1,j+1} & \cdots & K_{1,\nu} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ K_{j-1,1} & \cdots & K_{j-1,i-1} & K_{j-1,i+1} & \cdots & K_{j-1,\nu} \\ K_{j+1,1} & \cdots & K_{j+1,i-1} & K_{j+1,i+1} & \cdots & K_{j+1,\nu} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ K_{\nu,1} & \cdots & K_{\nu,i-1} & K_{\nu,i+1} & \cdots & K_{\nu,\nu} \end{vmatrix} \quad (\text{I.3.131})$$

avec ν le nombre total des espèces présentes dans le gaz et/ou dans le plasma. Plus le nombre d'espèces devient important plus la résolution du système matriciel (I.3.131) et (I.3.129) devient long et coûteux en temps de calcul. Une reformulation alternative du coefficient de diffusion multi-espèce a été proposé [32] et on l'appelle le coefficient de diffusion effectif D_i^{eff} , pour une espèce donnée i :

$$D_i^{eff} = \frac{1 - x_i}{\sum_{j \neq i} \frac{x_j}{D_{ij}}} \quad (\text{I.3.132})$$

Souvent dans un plasma on considère que les électrons sont plus rapides que les ions, par conséquent les électrons diffusent plus rapidement que les ions ce qui crée une séparation de charge locale, et qui tend à faire apparaître un champ électrique local et des zones de charge d'espace. Ce champ électrique ainsi créé va freiner les électrons et accélérer les ions, pour que finalement les deux espèces électronique et ionique diffusent avec la même vitesse. On définit ainsi la diffusion ambipolaire comme suit :

$$D_\alpha = \frac{D_e \mu_i + D_i \mu_e}{\mu_i + \mu_e} \quad (\text{I.3.133})$$

avec μ_i , D_i , μ_e et D_e la mobilité et le coefficient de diffusion des ions et des électrons, respectivement. La mobilité est donnée par la relation d'Einstein suivante :

$$\mu_i = \frac{eD_i}{kT_i} \quad (\text{I.3.134})$$

$$\mu_e = \frac{eD_e}{kT_e}$$

I.3.3.5 Viscosité

La résolution du système d'équations (I.3.116) donnée dans la section I.3.3.2 nous permet d'aboutir à la formule de la viscosité (équation (I.3.118)) pour n'importe quel ordre d'approximation voulu pour un système mono-espèce (espèce pure). L'expression de la viscosité qui dérive de la théorie de Chapman-Enskog est donnée par [6, 5] :

$$\eta_1 = \frac{5}{16} \left(\frac{\sqrt{\pi m k T}}{\sigma \Omega^{(2,2)*}} \right) \quad (\text{I.3.135})$$

$$= 2.6693 \times 10^{-6} \frac{\sqrt{MT}}{d^2 \Omega^{(2,2)*}} \quad [kg \ m^{-1} s^{-1}]$$

Le coefficient de viscosité pour un mélange binaire est donné par l'expression suivante :

$$\begin{aligned} \eta_{12} &= \frac{5}{16} \left(\frac{\sqrt{\frac{2\pi m_1 m_2 kT}{m_1 + m_2}}}{\sigma_{12} \Omega_{12}^{(2,2)*}(T_{12}^*)} \right) \\ &= 2.6693 \times 10^{-6} \sqrt{\frac{2M_1 M_2 T}{M_1 + M_2}} \frac{1}{d_{12}^2 \Omega_{12}^{(2,2)*}(T_{12}^*)} \quad [kg \ m^{-1} s^{-1}] \end{aligned} \quad (I.3.136)$$

Pour un gaz à plusieurs espèces le coefficient de viscosité multi-espèces η_{mix} est donné par un rapport de deux déterminants de deux matrices [5, 6] :

$$\eta_{mix} = - \frac{\begin{vmatrix} H_{11} & H_{12} & H_{13} & \cdots & H_{1\nu} & x_1 \\ H_{21} & H_{22} & H_{23} & \cdots & H_{2\nu} & x_2 \\ H_{31} & H_{23} & H_{33} & \cdots & H_{3\nu} & x_3 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ H_{\nu 1} & H_{\nu 2} & H_{\nu 3} & \cdots & H_{\nu\nu} & x_\nu \\ x_1 & x_2 & x_3 & \cdots & x_\nu & 0 \end{vmatrix}}{\begin{vmatrix} H_{11} & H_{12} & H_{13} & \cdots & H_{1\nu} \\ H_{21} & H_{22} & H_{23} & \cdots & H_{2\nu} \\ H_{31} & H_{23} & H_{33} & \cdots & H_{3\nu} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ H_{\nu 1} & H_{\nu 2} & H_{\nu 3} & \cdots & H_{\nu\nu} \end{vmatrix}} \quad (I.3.137)$$

tel que les termes sur la diagonale sont donnés par :

$$H_{ii} = \frac{x_i^2}{\eta_i} + \sum_{\substack{k=1 \\ k \neq i}}^{\nu} \frac{2x_i x_k}{\eta_{ik}} \frac{M_i M_k}{(M_i + M_k)^2} \left(\frac{M_k}{M_i} + \frac{5}{3} \frac{\Omega_{ik}^{(1,1)*}}{\Omega_{ik}^{(2,2)*}} \right) \quad (I.3.138)$$

Pour les autres termes on a :

$$H_{ij} = - \frac{2x_i x_j}{\eta_{ij}} \frac{M_i M_j}{(M_i + M_j)^2} \left(\frac{5}{3} \frac{\Omega_{ik}^{(1,1)*}}{\Omega_{ik}^{(2,2)*}} - 1 \right) \quad i \neq j \quad (I.3.139)$$

Les équations (I.3.139) et (I.3.138) font intervenir la viscosité des gaz mono-espèce η_i et des mélanges binaires η_{ij} .

Quand le nombre d'espèces ν devient très élevé, le temps de calcul devient important, par conséquent il est utile d'employer dans les codes d'hydrodynamique une expression simplifiée du coefficient de viscosité donnée ci-dessous [33] :

$$\eta_{mix} \approx \sum_{i=1}^{\nu} \frac{n_i \eta_i}{\sum_{j=1}^{\nu} n_j \sqrt{\frac{2m_{ij}}{m_i} \frac{\Omega_{ij}^{(2,2)*}}{\Omega_{ii}^{(2,2)*}}}} \quad (I.3.140)$$

Dans le calcul de la viscosité relative aux plasmas thermiques, la contribution des électrons est souvent ignorée à cause de leur masse qui est très faible devant les autres espèces lourdes présentes dans le plasma.

I.3.3.6 Conductivité thermique

Comme le cas de la viscosité, la conductivité thermique (conductibilité) est obtenue par la résolution du système d'équations (I.3.116) donné dans la section I.3.3.2. Pour un système mono-espèce, l'expression de la conductivité thermique est donnée par :

$$\begin{aligned}
 \kappa_1 &= \frac{25}{32} \left(\frac{\sqrt{\pi m k T}}{\sigma \Omega^{(2,2)*}} \right) \left(\frac{c_v}{m} \right) \\
 &= 8.3227 \times 10^{-5} \frac{\sqrt{T/M}}{d^2 \Omega^{(2,2)*}} \quad [J \ K^{-1} m^{-1} s^{-1}] \quad (\text{I.3.141}) \\
 &= \frac{15}{4} \frac{R}{M} \eta_1
 \end{aligned}$$

Cette équation de la conductivité thermique est utilisée uniquement pour des particules qui ne possèdent pas de degrés de liberté, c'est-à-dire pour les quelles on néglige les énergies de rotation et de vibration. Pour un gaz polyatomique, on peut reformuler l'équation (I.3.141) en tenant compte de la correction de Eucken :

$$\kappa_{\text{Polyatomique}} = \frac{15}{4} \frac{R}{M} \eta_1 \left(\frac{4}{15} \frac{c_v}{R} + \frac{3}{5} \right) \quad (\text{I.3.142})$$

Pour un gaz diatomique, la capacité calorifique à volume constant $c_v = \frac{5}{2}R$ et la conductivité thermique devient :

$$\kappa_{\text{Diatomique}} = \frac{19}{4} \frac{R}{M} \eta_1 \quad (\text{I.3.143})$$

On définit la conductivité thermique pour un système à deux espèces comme suit :

$$\begin{aligned}
 \kappa_{12} &= \frac{25}{32} \left(\frac{\sqrt{\frac{\pi k T (m_1 + m_2)}{2 m_1 m_2}}}{\sigma_{12} \Omega_{12}^{(2,2)*}(T_{12}^*)} \right) \left(\frac{3}{2} k \right) \\
 &= 8.3227 \times 10^{-5} \sqrt{\frac{T(M_1 + M_2)}{2 M_1 M_2}} \frac{1}{d_{12}^2 \Omega_{12}^{(2,2)*}(T_{12}^*)} \quad [J \ K^{-1} m^{-1} s^{-1}] \quad (\text{I.3.144})
 \end{aligned}$$

Pour la première approximation de la méthode de Chapman-Enskog, le coefficient de conductivité thermique translationnel κ_{tr} relatif à un mélange de plusieurs espèces lourdes s'écrit [5, 6] :

$$\kappa_{tr} = 4 \begin{array}{c} \left| \begin{array}{cccccc} L_{11}^{00} & \cdots & L_{1\nu}^{00} & L_{11}^{01} & \cdots & L_{1\nu}^{01} & 0 \\ \vdots & & \vdots & \vdots & & \vdots & \vdots \\ L_{\nu 1}^{00} & \cdots & L_{\nu\nu}^{00} & L_{\nu 1}^{01} & \cdots & L_{\nu\nu}^{01} & 0 \\ L_{11}^{01} & \cdots & L_{1\nu}^{01} & L_{11}^{11} & \cdots & L_{1\nu}^{11} & x_1 \\ \vdots & & \vdots & \vdots & & \vdots & \vdots \\ L_{\nu 1}^{01} & \cdots & L_{\nu\nu}^{01} & L_{\nu 1}^{11} & \cdots & L_{\nu\nu}^{11} & x_\nu \\ 0 & \cdots & 0 & x_1 & \cdots & x_\nu & 0 \end{array} \right| \\ \left| \begin{array}{cccccc} L_{11}^{00} & \cdots & L_{1\nu}^{00} & L_{11}^{01} & \cdots & L_{1\nu}^{01} \\ \vdots & & \vdots & \vdots & & \vdots \\ L_{\nu 1}^{00} & \cdots & L_{\nu\nu}^{00} & L_{\nu 1}^{01} & \cdots & L_{\nu\nu}^{01} \\ L_{11}^{01} & \cdots & L_{1\nu}^{01} & L_{11}^{11} & \cdots & L_{1\nu}^{11} \\ \vdots & & \vdots & \vdots & & \vdots \\ L_{\nu 1}^{01} & \cdots & L_{\nu\nu}^{01} & L_{\nu 1}^{11} & \cdots & L_{\nu\nu}^{11} \end{array} \right| \end{array} \quad (\text{I.3.145})$$

Les coefficients des deux matrices sont donnés ci-dessous :

$$\begin{aligned} L_{ii}^{00} &= 0 \\ L_{ij}^{00} &= \frac{2x_i x_j}{A_{ij}^* \kappa_{ij}} + \sum_{k \neq i}^{\nu} \frac{2x_j x_k M_j}{M_i A_{ik}^* \kappa_{ik}} \quad i \neq j \\ L_{ii}^{01} &= 5 \sum_{k \neq i}^{\nu} \frac{x_i x_k M_k (-1 + 6C_{ik}^*/5)}{(M_i + M_k) A_{ik}^* \kappa_{ik}} \\ L_{ij}^{01} &= 5x_i x_j \frac{M_i (-1 + 6C_{ij}^*/5)}{(M_i + M_j) A_{ij}^* \kappa_{ij}} \quad i \neq j \\ L_{ij}^{10} &= \frac{M_j}{M_i} L_{ij}^{01} \\ L_{ii}^{11} &= \frac{4x_i^2}{\kappa_i} - \sum_{k \neq i}^{\nu} \frac{2x_i x_k \left[\frac{15}{2} M_i^2 + \frac{25}{4} M_k^2 - 3M_k^2 B_{ik}^* + 4M_i M_k A_{ik}^* \right]}{(M_i + M_k)^2 A_{ik}^* \kappa_{ik}} \\ L_{ij}^{11} &= \frac{2x_i x_j M_i M_j}{(M_i + M_j)^2 A_{ij}^* \kappa_{ij}} \left[\frac{55}{4} - 3B_{ij}^* - 4A_{ij}^* \right] \quad i \neq j \\ A_{ij}^* &= \frac{\Omega_{ij}^{(2,2)*}}{\Omega_{ij}^{(1,1)*}} \\ B_{ij}^* &= \frac{5\Omega_{ij}^{(1,2)*} - 4\Omega_{ij}^{(1,3)*}}{\Omega_{ij}^{(1,1)*}} \\ C_{ij}^* &= \frac{\Omega_{ij}^{(1,2)*}}{\Omega_{ij}^{(1,1)*}} \end{aligned}$$

L'équation de la conductivité thermique (I.3.145) relative à un mélange de plusieurs espèces fait intervenir la conductivité thermique des gaz mono-espèce κ_i et des mélanges binaires κ_{ij} .

Selon la méthode de Chapman-Enskog, une expression de la conductivité thermique des électrons peut s'écrire à la troisième approximation (l'approximation correspond au

degré des polynômes de Sonine employés dans la résolution de l'équation de Boltzmann par la méthode de Chapman-Enskog) comme suit [34] :

$$\kappa_e = \frac{75}{8} n_e^2 k \sqrt{\frac{2\pi k T_e}{m_e}} \frac{q^{22}}{\begin{vmatrix} q^{11} & q^{12} \\ q^{21} & q^{22} \end{vmatrix}} \quad (\text{I.3.146})$$

avec n_e , m_e et T_e la densité, la masse et la température des électrons.

Les coefficients q^{ij} s'expriment par les formules suivantes :

$$\begin{aligned} q^{11} &= 8\sqrt{2} n_e^2 \Omega_{ee}^{(2,2)*} + 8n_e \sum_{j \neq e}^{\nu} n_j \left[\frac{25}{4} \Omega_{je}^{(1,1)*} - 15 \Omega_{je}^{(1,2)*} + 12 \Omega_{je}^{(1,3)*} \right] \\ q^{12} &= q^{21} \\ &= 8\sqrt{2} n_e^2 \left(\frac{7}{4} \Omega_{ee}^{(2,2)*} - 2 \Omega_{ee}^{(2,3)*} \right) + 8n_e \sum_{j \neq e}^{\nu} n_j \left[\frac{175}{16} \Omega_{je}^{(1,1)*} - \frac{315}{8} \Omega_{je}^{(1,2)*} + 57 \Omega_{je}^{(1,3)*} - 30 \Omega_{je}^{(1,4)*} \right] \\ q^{22} &= 8\sqrt{2} n_e^2 \left(\frac{77}{16} \Omega_{ee}^{(2,2)*} - 7 \Omega_{ee}^{(2,3)*} + 5 \Omega_{ee}^{(2,4)*} \right) \\ &+ 8n_e \sum_{j \neq e}^{\nu} n_j \left[\frac{1225}{64} \Omega_{je}^{(1,1)*} - \frac{735}{8} \Omega_{je}^{(1,2)*} + \frac{399}{2} \Omega_{je}^{(1,3)*} - 210 \Omega_{je}^{(1,4)*} + 90 \Omega_{je}^{(1,5)*} \right] \end{aligned}$$

Brokaw [35] a proposé des formules simplifiées pour calculer la conductivité thermique et la viscosité.

La conductivité thermique relative à un système de plusieurs espèces polyatomiques constitue une contribution de trois termes :

$$\kappa_{mix} = \kappa_{tr} + \kappa_{int} + \kappa_r \quad (\text{I.3.147})$$

Le premier terme κ_{tr} correspond à la conductivité thermique translationnelle des particules lourdes discuté ci-dessus (voir équation (I.3.145)), le deuxième terme κ_{int} désigne la conductivité thermique interne parfois appelée conductivité thermique de Eucken, qui s'écrit :

$$\kappa_{int} = \frac{5\sqrt{kT}}{16\sqrt{\pi} N_A} \sum_i^{\nu} x_i \frac{(c_{pi} - 2.5R)}{\sum_j^{\nu} x_j \sqrt{\frac{d_{ij}^2}{\frac{M_i + M_j}{M_i M_j}}}} \quad (\text{I.3.148})$$

avec N_A et R le nombre d'Avogadro et la constante des gaz parfait, respectivement. Finalement, le troisième terme κ_r traduit la conductivité thermique de réaction relative aux réactions chimiques, qui est définie comme suit [36] :

$$\kappa_r = -\frac{1}{RT^2} \frac{\begin{vmatrix} A_{11} & \cdots & A_{1\nu} & \Delta H_1 \\ \vdots & & \vdots & \vdots \\ A_{1\nu} & \cdots & A_{\nu\nu} & \Delta H_\nu \\ \Delta H_1 & \cdots & \Delta H_\nu & 0 \end{vmatrix}}{\begin{vmatrix} A_{11} & \cdots & A_{1\nu} \\ \vdots & & \vdots \\ A_{1\nu} & \cdots & A_{\nu\nu} \end{vmatrix}} \quad (\text{I.3.149})$$

avec :

$$\begin{aligned} A_{ij} &= A_{ji} \\ &= \sum_{k=1}^{\nu-1} \sum_{\ell=k+1}^{\nu} \frac{RT}{D_{ij}p} x_k x_\ell \left(\frac{n_{ik}}{x_k} - \frac{n_{i\ell}}{x_\ell} \right) \left(\frac{n_{jk}}{x_k} - \frac{n_{j\ell}}{x_\ell} \right) \\ \Delta H_i &= \sum_{k=1}^{\nu} n_{ik} H_k \end{aligned}$$

ν représente le nombre de réactions chimique indépendantes, ΔH_i désigne la variation d'enthalpie due à la $i^{\text{ème}}$ réaction chimique qui est le résultat des processus d'ionisation et de dissociation et n_{jk} sont des coefficients stœchiométriques.

I.3.3.7 Conductivité électrique

D'une manière générale, pour un gaz ionisé soumis à un champ électromagnétique, son coefficient de conductivité électrique est donné en fonction de la direction du champ électrique et du champ magnétique. Si on considère un champ magnétique suivant la direction des z et que le gradient de pression et les courants ioniques sont négligeables alors la loi d'Ohm sera écrite sous forme matricielle :

$$\begin{bmatrix} j_{ex} \\ j_{ey} \\ j_{ez} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sigma_{\perp} & -\sigma_H & 0 \\ \sigma_H & -\sigma_{\perp} & 0 \\ 0 & 0 & \sigma_{\parallel} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} E_x \\ E_y \\ E_z \end{bmatrix} \quad (\text{I.3.150})$$

avec :

$$\sigma_{\parallel} = \frac{e^2 n_e}{m_e \sum_p \nu_{ep}}$$

$$\sigma_{\perp} = \frac{\sigma_{\parallel}}{1 + \beta^2}$$

$$\sigma_H = \frac{\beta \sigma_{\parallel}}{1 + \beta^2}$$

β est le paramètre de Hall, les signes \parallel et \perp désignent la conductivité donnée suivant la direction parallèle et perpendiculaire au champs magnétique. En l'absence de champ magnétique $\sigma_H = 0$ et $\sigma_{\perp} = \sigma_{\parallel}$, la loi d'Ohm se simplifie suivant la formule :

$$\vec{j} = \sigma \vec{E} \quad (\text{I.3.151})$$

La conductivité électrique σ relative à un gaz ionisé s'écrit de la manière suivante :

$$\sigma = \sigma_e + \sigma_i \quad (\text{I.3.152})$$

avec σ_e et σ_i la conductivité électrique due aux électrons et aux ions, respectivement. Les expressions de σ_e et σ_i sont données par :

$$\sigma_e = \frac{e^2 n_e}{m_e \sum_p \nu_{ep}} \quad (\text{I.3.153})$$

$$\sigma_i = \frac{e^2 n_e}{m_e \sum_p \nu_{ep}} \left[1 - \frac{\rho_n \nu_{en}}{\rho_i \nu_{in}} \right] \quad (\text{I.3.154})$$

avec ρ la densité massique, ν_{ep} la fréquence de collisions des électrons avec les autres espèces ioniques, ν_{en} la fréquence de collisions des électrons avec les neutres et ν_{in} la fréquence de collision des ions avec les neutres. L'hypothèse de quasi-neutralité ($n_e \approx n_i$) relative aux plasmas, et le fait que la masse des électrons est très faible devant celle des ions $\frac{m_e}{m_i} \ll 1$ impliquent que la conductivité électrique est due essentiellement aux électrons :

$$\begin{aligned} \sigma &\approx \sigma_e \\ &= \frac{e^2 n_e}{m_e \sum_p \nu_{ep}} \end{aligned} \quad (\text{I.3.155})$$

La particularité du coefficient de conductivité électrique par rapport aux autres coefficients, est qu'il existe plusieurs formules selon l'état d'ionisation du gaz. Dans la limite d'un plasma faiblement ionisé, la conductivité électrique est donnée par une Lorentzienne :

$$\sigma = \frac{4\pi e^2 n_e}{3 kT_e} \int_0^{\infty} \frac{v^4 f_e^M(v)}{\sum_n \nu_{en}} dv \quad (\text{I.3.156})$$

avec $f_e^M(v)$ la distribution de Maxwell (voir section I.3.2.1) relative aux électrons.

Spitzer et Härm ont développé une formule de la conductivité électrique sous l'hypothèse des plasmas complètement ionisés qui s'écrit :

$$\sigma = \frac{3\pi}{2} \frac{e^2 n_e}{m_e \nu_{ei}} \quad (\text{I.3.157})$$

La fréquence de collision des électrons avec les autres espèces peut être formulée comme

ceci :

$$\nu_{ei} = n_i \langle v \rangle Q_{ei}$$

$$\langle v \rangle = \sqrt{\frac{8kT}{\pi m_e}} \quad (\text{I.3.158})$$

$$Q_{ei} = 4\pi b_0^2 \ln \sqrt{1 + \left(\frac{\lambda_D}{b_0}\right)^2}$$

Les paramètres b_0 et λ_D ont été déjà définis dans la section I.3.1.3.iii. Pour un plasma d'hydrogène complètement ionisé soumis à un champ magnétique B , la résistivité (l'inverse de la conductivité) électrique du plasma d'hydrogène (η_{\parallel} est parallèle au champ B et η_{\perp} lui est perpendiculaire), appelée aussi résistivité de Spitzer [7] est donnée par les formules numériques suivantes :

$$\eta_{\parallel} = 5.2 \times 10^{-5} \frac{Z_{eff} \ln \Lambda}{T^{3/2} (eV)} \quad [ohm.m] \quad (\text{I.3.159})$$

$$\eta_{\perp} = 2.0 \eta_{\parallel}$$

avec $Z_{eff} = \sum_i Z^2 n_i / n_e$ la charge effective du plasma. Le facteur $\ln \Lambda = \ln(\lambda_D / b_0)$ est appelé logarithme coulombien.

Dans le cas des plasmas qui se trouvent entre les deux hypothèses précédentes, c'est-à-dire entre faiblement et complètement ionisés, la formule usuellement utilisée est celle proposée par Devoto [37, 34, 38] à l'approximation d'ordre 3 (l'ordre d'approximation est lié à la résolution de l'équation de Boltzmann par la méthode de Chapman-Enskog) :

$$\sigma = -\frac{3}{2} e^2 n_e^2 \sqrt{\frac{2\pi}{m_e kT}} \frac{\begin{vmatrix} q^{11} & q^{12} \\ q^{12} & q^{22} \end{vmatrix}}{\begin{vmatrix} q^{00} & q^{01} & q^{02} \\ q^{01} & q^{11} & q^{12} \\ q^{02} & q^{12} & q^{22} \end{vmatrix}} \quad (\text{I.3.160})$$

Les expressions des termes q^{00} , q^{01} et q^{02} sont données par :

$$q^{00} = 8n_e \sum_{j \neq e}^{\nu} n_j \Omega_{je}^{(1,1)*}$$

$$q^{01} = 8n_e \sum_{j \neq e}^{\nu} n_j \left[\frac{5}{2} \Omega_{je}^{(1,1)*} - 3 \Omega_{je}^{(1,2)*} \right]$$

$$q^{02} = 8n_e \sum_{j \neq e}^{\nu} n_j \left[\frac{35}{8} \Omega_{je}^{(1,1)*} - \frac{21}{2} \Omega_{je}^{(1,2)*} + 6 \Omega_{je}^{(1,3)*} \right]$$

Les autres termes q^{11} , q^{12} et q^{22} sont donnés dans l'équation de conductivité thermique des électrons (I.3.146).

I.3.3.8 Influence du choix de potentiel sur les coefficients de transport

Le seul paramètre d'entrée qui permet de calculer les intégrales de collisions est le potentiel d'interaction qui est propre à chaque espèce gazeuse. Il existe plusieurs formes de potentiels qui peuvent représenter une même interaction entre particules. L'étude de l'influence de ces différents potentiels sur les intégrales de collision (donc sur les coefficients de transport) est primordiale.

Dans cette section on propose de montrer l'influence du choix de potentiel sur les coefficients de transport de certains gaz (O_2 , Ar , He , Ne , Kr , Xe , N_2 , H_2 , CH_4 et CO). On considère deux potentiels, un potentiel de Lennard-Jones et un potentiel de Buckingham. Nous nous sommes limités à la comparaison de ces deux potentiels car ils sont usuellement utilisés dans la description des interactions moléculaires. D'autres formes de potentiels seront étudiés dans les chapitres III et IV, à savoir le potentiel de Hulburt-Hirschfelder, le potentiel de Morse...etc. Les différents paramètres de ces deux potentiels (Lennard-Jones et Buckingham) sont donnés dans la section II.1.2, (voir tableaux II.1 et II.2). Nous avons employé la même méthode numérique pour calculer les coefficients de transport, représentés dans les tableaux numérotés de I.3 à I.12. Le détail de la méthode numérique utilisée sera présenté dans le chapitre III.

Les coefficients de transport calculés à partir des deux potentiels (Lennard-Jones et Buckingham) sont la viscosité η [$\mu Pa.s$], la conductivité thermique λ [$10^{-3}W/m.K$] et le coefficient de diffusion D [$10^{-4}m^2/s$]. La comparaison entre les deux potentiels, qui donnent des coefficients de transport différents, se fait sur la base d'un écart relatif $\delta[\%]$ qui définit la différence entre un coefficient calculé à partir du potentiel de Lennard-Jones et le même coefficient calculé à partir du potentiel de Buckingham divisée par leur moyenne, c'est-à-dire :

$$\begin{aligned}\delta_\eta[\%] &= \frac{\eta_{LJ} - \eta_B}{\bar{\eta}} \times 100 \\ \delta_\lambda[\%] &= \frac{\lambda_{LJ} - \lambda_B}{\bar{\lambda}} \times 100 \\ \delta_D[\%] &= \frac{D_{LJ} - D_B}{\bar{D}} \times 100\end{aligned}\tag{I.3.161}$$

TABLE I.3 – Coefficients de transport de l'oxygène en fonction de la température, obtenus à partir du potentiel de Lennard-Jones et du potentiel de Buckingham.

| T(K) | Lennard-Jones | | | Buckingham | | | Écart relatif | | |
|-------|--------------------------|---------------------------------|---------------------------|--------------------------|---------------------------------|---------------------------|-------------------|----------------------|----------------|
| | η ($\mu Pa.s$) | λ ($10^{-3}W/m.K$) | D ($10^{-4}m^2/s$) | η ($\mu Pa.s$) | λ ($10^{-3}W/m.K$) | D ($10^{-4}m^2/s$) | $\delta_\eta(\%)$ | $\delta_\lambda(\%)$ | $\delta_D(\%)$ |
| 200 | 14.56 | 14.19 | 0.0975 | 13.96 | 13.60 | 0.0890 | 4.21 | 4.21 | 9.19 |
| 300 | 20.44 | 19.91 | 0.2060 | 20.36 | 19.84 | 0.2006 | 0.39 | 0.39 | 2.67 |
| 400 | 25.47 | 24.82 | 0.3433 | 25.86 | 25.20 | 0.3455 | 1.52 | 1.52 | 0.66 |
| 500 | 29.95 | 29.18 | 0.5058 | 30.72 | 29.94 | 0.5191 | 2.57 | 2.57 | 2.60 |
| 600 | 34.03 | 33.16 | 0.6913 | 35.15 | 34.25 | 0.7186 | 3.23 | 3.23 | 3.87 |
| 700 | 37.83 | 36.86 | 0.8983 | 39.26 | 38.25 | 0.9424 | 3.71 | 3.71 | 4.80 |
| 800 | 41.39 | 40.33 | 1.1256 | 43.13 | 42.02 | 1.1893 | 4.10 | 4.10 | 5.51 |
| 900 | 44.78 | 43.63 | 1.3721 | 46.81 | 45.61 | 1.4584 | 4.44 | 4.44 | 6.10 |
| 1000 | 48.01 | 46.78 | 1.6371 | 50.34 | 49.05 | 1.7489 | 4.74 | 4.74 | 6.60 |
| 5000 | 136.35 | 132.86 | 23.6490 | 152.62 | 148.71 | 27.5583 | 11.26 | 11.26 | 15.27 |
| 10000 | 214.00 | 208.52 | 74.5288 | 250.59 | 244.17 | 91.7684 | 15.75 | 15.75 | 20.73 |

TABLE I.4 – Coefficients de transport de l'argon en fonction de la température, obtenus à partir du potentiel de Lennard-Jones et du potentiel de Buckingham.

| T(K) | Lennard-Jones | | | Buckingham | | | Écart relatif | | |
|-------|--------------------------|---------------------------------|---------------------------|--------------------------|---------------------------------|---------------------------|-------------------|----------------------|----------------|
| | η ($\mu Pa.s$) | λ ($10^{-3}W/m.K$) | D ($10^{-4}m^2/s$) | η ($\mu Pa.s$) | λ ($10^{-3}W/m.K$) | D ($10^{-4}m^2/s$) | $\delta_\eta(\%)$ | $\delta_\lambda(\%)$ | $\delta_D(\%)$ |
| 200 | 15.77 | 12.31 | 0.0847 | 15.29 | 11.94 | 0.0772 | 3.10 | 3.10 | 9.26 |
| 300 | 22.52 | 17.58 | 0.1818 | 22.20 | 17.32 | 0.1736 | 1.45 | 1.45 | 4.61 |
| 400 | 28.37 | 22.14 | 0.3059 | 28.10 | 21.93 | 0.2983 | 0.96 | 0.96 | 2.50 |
| 500 | 33.59 | 26.21 | 0.4534 | 33.29 | 25.98 | 0.4471 | 0.88 | 0.88 | 1.40 |
| 600 | 38.33 | 29.92 | 0.6221 | 37.99 | 29.65 | 0.6175 | 0.89 | 0.89 | 0.74 |
| 700 | 42.73 | 33.35 | 0.8105 | 42.35 | 33.05 | 0.8082 | 0.90 | 0.90 | 0.29 |
| 800 | 46.85 | 36.56 | 1.0175 | 46.44 | 36.24 | 1.0181 | 0.88 | 0.88 | 0.06 |
| 900 | 50.75 | 39.61 | 1.2420 | 50.32 | 39.28 | 1.2463 | 0.84 | 0.84 | 0.35 |
| 1000 | 54.47 | 42.51 | 1.4834 | 54.04 | 42.18 | 1.4923 | 0.78 | 0.78 | 0.59 |
| 5000 | 155.13 | 121.08 | 21.5214 | 159.93 | 124.82 | 22.8707 | 3.05 | 3.05 | 6.08 |
| 10000 | 243.29 | 189.88 | 67.8034 | 258.87 | 202.05 | 74.9342 | 6.21 | 6.21 | 9.99 |

TABLE I.5 – Coefficients de transport de l'hélium en fonction de la température, obtenus à partir du potentiel de Lennard-Jones et du potentiel de Buckingham.

| T(K) | Lennard-Jones | | | Buckingham | | | Écart relatif | | |
|-------|--------------------------|---------------------------------|---------------------------|--------------------------|---------------------------------|---------------------------|-------------------|----------------------|----------------|
| | η ($\mu Pa.s$) | λ ($10^{-3}W/m.K$) | D ($10^{-4}m^2/s$) | η ($\mu Pa.s$) | λ ($10^{-3}W/m.K$) | D ($10^{-4}m^2/s$) | $\delta_\eta(\%)$ | $\delta_\lambda(\%)$ | $\delta_D(\%)$ |
| 200 | 15.26 | 118.86 | 0.8407 | 14.83 | 115.50 | 0.8516 | 2.86 | 2.86 | 1.29 |
| 300 | 19.83 | 154.47 | 1.6451 | 19.75 | 153.82 | 1.7171 | 0.42 | 0.42 | 4.28 |
| 400 | 23.89 | 186.08 | 2.6483 | 24.27 | 189.05 | 2.8322 | 1.59 | 1.59 | 6.71 |
| 500 | 27.61 | 215.05 | 3.8316 | 28.54 | 222.29 | 4.1837 | 3.31 | 3.31 | 8.78 |
| 600 | 31.08 | 242.09 | 5.1818 | 32.62 | 254.08 | 5.7624 | 4.83 | 4.83 | 10.61 |
| 700 | 34.36 | 267.63 | 6.6889 | 36.56 | 284.78 | 7.5620 | 6.21 | 6.21 | 12.25 |
| 800 | 37.48 | 291.95 | 8.3450 | 40.39 | 314.60 | 9.5774 | 7.47 | 7.47 | 13.75 |
| 900 | 40.47 | 315.26 | 10.1433 | 44.12 | 343.70 | 11.8046 | 8.63 | 8.63 | 15.14 |
| 1000 | 43.35 | 337.70 | 12.0785 | 47.78 | 372.21 | 14.2406 | 9.72 | 9.72 | 16.43 |
| 5000 | 124.71 | 971.49 | 174.7468 | 174.92 | 1362.56 | 276.6968 | 33.51 | 33.51 | 45.17 |
| 10000 | 196.56 | 1531.13 | 551.0478 | 367.53 | 2862.97 | 1213.1506 | 60.62 | 60.62 | 75.06 |

TABLE I.6 – Coefficients de transport du néon en fonction de la température, obtenus à partir du potentiel de Lennard-Jones et du potentiel de Buckingham.

| T(K) | Lennard-Jones | | | Buckingham | | | Écart relatif | | |
|-------|--------------------------|---------------------------------|---------------------------|--------------------------|---------------------------------|---------------------------|-------------------|----------------------|----------------|
| | η ($\mu Pa.s$) | λ ($10^{-3}W/m.K$) | D ($10^{-4}m^2/s$) | η ($\mu Pa.s$) | λ ($10^{-3}W/m.K$) | D ($10^{-4}m^2/s$) | $\delta_\eta(\%)$ | $\delta_\lambda(\%)$ | $\delta_D(\%)$ |
| 200 | 24.03 | 37.13 | 0.2583 | 23.66 | 36.56 | 0.2557 | 1.55 | 1.55 | 1.02 |
| 300 | 31.52 | 48.71 | 0.5114 | 31.17 | 48.16 | 0.5107 | 1.13 | 1.13 | 0.15 |
| 400 | 38.06 | 58.80 | 0.8265 | 37.77 | 58.36 | 0.8304 | 0.76 | 0.76 | 0.46 |
| 500 | 43.99 | 67.98 | 1.1976 | 43.81 | 67.69 | 1.2094 | 0.43 | 0.43 | 0.98 |
| 600 | 49.51 | 76.49 | 1.6206 | 49.45 | 76.40 | 1.6439 | 0.12 | 0.12 | 1.43 |
| 700 | 54.69 | 84.51 | 2.0922 | 54.79 | 84.65 | 2.1311 | 0.17 | 0.17 | 1.84 |
| 800 | 59.62 | 92.12 | 2.6101 | 59.88 | 92.53 | 2.6686 | 0.44 | 0.44 | 2.22 |
| 900 | 64.34 | 99.41 | 3.1720 | 64.79 | 100.10 | 3.2548 | 0.69 | 0.69 | 2.58 |
| 1000 | 68.87 | 106.42 | 3.7764 | 69.52 | 107.42 | 3.8879 | 0.94 | 0.94 | 2.91 |
| 5000 | 196.22 | 303.19 | 54.3000 | 210.08 | 324.60 | 60.3182 | 6.82 | 6.82 | 10.50 |
| 10000 | 309.30 | 477.91 | 171.5595 | 345.29 | 533.52 | 200.5847 | 11.00 | 11.00 | 15.60 |

TABLE I.7 – Coefficients de transport du krypton en fonction de la température, obtenus à partir du potentiel de Lennard-Jones et du potentiel de Buckingham.

| T(K) | Lennard-Jones | | | Buckingham | | | Écart relatif | | |
|-------|--------------------------|---------------------------------|---------------------------|--------------------------|---------------------------------|---------------------------|-------------------|----------------------|----------------|
| | η ($\mu Pa.s$) | λ ($10^{-3}W/m.K$) | D ($10^{-4}m^2/s$) | η ($\mu Pa.s$) | λ ($10^{-3}W/m.K$) | D ($10^{-4}m^2/s$) | $\delta_\eta(\%)$ | $\delta_\lambda(\%)$ | $\delta_D(\%)$ |
| 200 | 17.74 | 6.60 | 0.0460 | 19.17 | 7.13 | 0.0529 | 7.77 | 7.77 | 14.11 |
| 300 | 26.07 | 9.70 | 0.1006 | 27.77 | 10.33 | 0.1122 | 6.33 | 6.33 | 10.84 |
| 400 | 33.41 | 12.43 | 0.1716 | 35.45 | 13.19 | 0.1890 | 5.92 | 5.92 | 9.66 |
| 500 | 39.96 | 14.87 | 0.2566 | 42.42 | 15.78 | 0.2817 | 5.97 | 5.97 | 9.33 |
| 600 | 45.90 | 17.08 | 0.3542 | 48.84 | 18.17 | 0.3890 | 6.20 | 6.20 | 9.37 |
| 700 | 51.39 | 19.12 | 0.4634 | 54.84 | 20.41 | 0.5100 | 6.50 | 6.50 | 9.58 |
| 800 | 56.52 | 21.03 | 0.5834 | 60.51 | 22.52 | 0.6440 | 6.83 | 6.83 | 9.87 |
| 900 | 61.36 | 22.83 | 0.7138 | 65.91 | 24.52 | 0.7905 | 7.15 | 7.15 | 10.20 |
| 1000 | 65.97 | 24.55 | 0.8539 | 71.09 | 26.45 | 0.9490 | 7.47 | 7.47 | 10.54 |
| 5000 | 189.14 | 70.37 | 12.4858 | 220.12 | 81.90 | 15.2468 | 15.14 | 15.14 | 19.91 |
| 10000 | 296.38 | 110.28 | 39.3267 | 363.94 | 135.41 | 51.2361 | 20.46 | 20.46 | 26.30 |

TABLE I.8 – Coefficients de transport du xénon en fonction de la température, obtenus à partir du potentiel de Lennard-Jones et du potentiel de Buckingham.

| T(K) | Lennard-Jones | | | Buckingham | | | Écart relatif | | |
|-------|--------------------------|---------------------------------|---------------------------|--------------------------|---------------------------------|---------------------------|-------------------|----------------------|----------------|
| | η ($\mu Pa.s$) | λ ($10^{-3}W/m.K$) | D ($10^{-4}m^2/s$) | η ($\mu Pa.s$) | λ ($10^{-3}W/m.K$) | D ($10^{-4}m^2/s$) | $\delta_\eta(\%)$ | $\delta_\lambda(\%)$ | $\delta_D(\%)$ |
| 200 | 15.79 | 3.75 | 0.0262 | 16.92 | 4.02 | 0.0297 | 6.93 | 6.93 | 12.58 |
| 300 | 23.59 | 5.60 | 0.0583 | 25.58 | 6.07 | 0.0649 | 8.11 | 8.11 | 10.76 |
| 400 | 30.66 | 7.28 | 0.1006 | 33.29 | 7.91 | 0.1112 | 8.23 | 8.23 | 9.97 |
| 500 | 37.03 | 8.79 | 0.1517 | 40.16 | 9.54 | 0.1671 | 8.10 | 8.10 | 9.62 |
| 600 | 42.84 | 10.17 | 0.2107 | 46.39 | 11.02 | 0.2317 | 7.95 | 7.95 | 9.49 |
| 700 | 48.20 | 11.45 | 0.2769 | 52.14 | 12.38 | 0.3044 | 7.85 | 7.85 | 9.48 |
| 800 | 53.21 | 12.64 | 0.3497 | 57.52 | 13.66 | 0.3848 | 7.80 | 7.80 | 9.54 |
| 900 | 57.92 | 13.76 | 0.4289 | 62.62 | 14.87 | 0.4724 | 7.79 | 7.79 | 9.65 |
| 1000 | 62.40 | 14.82 | 0.5141 | 67.48 | 16.02 | 0.5670 | 7.82 | 7.82 | 9.78 |
| 5000 | 180.45 | 42.85 | 7.5898 | 203.90 | 48.42 | 8.8643 | 12.20 | 12.20 | 15.49 |
| 10000 | 282.61 | 67.11 | 23.9048 | 330.86 | 78.57 | 29.1652 | 15.73 | 15.73 | 19.82 |

TABLE I.9 – Coefficients de transport de l'azote en fonction de la température, obtenus à partir du potentiel de Lennard-Jones et du potentiel de Buckingham.

| T(K) | Lennard-Jones | | | Buckingham | | | Écart relatif | | |
|-------|--------------------------|---------------------------------|---------------------------|--------------------------|---------------------------------|---------------------------|-------------------|----------------------|----------------|
| | η ($\mu Pa.s$) | λ ($10^{-3}W/m.K$) | D ($10^{-4}m^2/s$) | η ($\mu Pa.s$) | λ ($10^{-3}W/m.K$) | D ($10^{-4}m^2/s$) | $\delta_\eta(\%)$ | $\delta_\lambda(\%)$ | $\delta_D(\%)$ |
| 200 | 12.93 | 14.39 | 0.0993 | 11.86 | 13.20 | 0.0939 | 8.60 | 8.60 | 5.67 |
| 300 | 17.78 | 19.79 | 0.2052 | 16.86 | 18.77 | 0.1961 | 5.33 | 5.33 | 4.55 |
| 400 | 21.91 | 24.39 | 0.3382 | 21.16 | 23.55 | 0.3261 | 3.49 | 3.49 | 3.63 |
| 500 | 25.58 | 28.47 | 0.4952 | 24.94 | 27.76 | 0.4805 | 2.52 | 2.52 | 3.01 |
| 600 | 28.95 | 32.22 | 0.6741 | 28.37 | 31.57 | 0.6568 | 2.02 | 2.02 | 2.60 |
| 700 | 32.08 | 35.71 | 0.8736 | 31.52 | 35.08 | 0.8537 | 1.75 | 1.75 | 2.31 |
| 800 | 35.04 | 39.00 | 1.0925 | 34.47 | 38.37 | 1.0697 | 1.62 | 1.62 | 2.11 |
| 900 | 37.85 | 42.13 | 1.3300 | 37.27 | 41.48 | 1.3042 | 1.56 | 1.56 | 1.96 |
| 1000 | 40.55 | 45.13 | 1.5853 | 39.93 | 44.44 | 1.5563 | 1.53 | 1.53 | 1.85 |
| 5000 | 114.99 | 127.99 | 22.8195 | 113.63 | 126.47 | 22.7535 | 1.20 | 1.20 | 0.29 |
| 10000 | 180.65 | 201.07 | 71.9505 | 180.00 | 200.35 | 72.7553 | 0.36 | 0.36 | 1.11 |

TABLE I.10 – Coefficients de transport du l'hydrogène en fonction de la température, obtenus à partir du potentiel de Lennard-Jones et du potentiel de Buckingham.

| T(K) | Lennard-Jones | | | Buckingham | | | Écart relatif | | |
|-------|--------------------------|---------------------------------|---------------------------|--------------------------|---------------------------------|---------------------------|-------------------|----------------------|----------------|
| | η ($\mu Pa.s$) | λ ($10^{-3}W/m.K$) | D ($10^{-4}m^2/s$) | η ($\mu Pa.s$) | λ ($10^{-3}W/m.K$) | D ($10^{-4}m^2/s$) | $\delta_\eta(\%)$ | $\delta_\lambda(\%)$ | $\delta_D(\%)$ |
| 200 | 6.79 | 105.02 | 0.7320 | 6.73 | 104.10 | 0.7332 | 0.88 | 0.88 | 0.17 |
| 300 | 8.89 | 137.57 | 1.4462 | 8.90 | 137.65 | 1.4658 | 0.06 | 0.06 | 1.35 |
| 400 | 10.73 | 166.01 | 2.3356 | 10.81 | 167.12 | 2.3874 | 0.66 | 0.66 | 2.19 |
| 500 | 12.41 | 191.87 | 3.3833 | 12.55 | 194.08 | 3.4821 | 1.14 | 1.14 | 2.88 |
| 600 | 13.96 | 215.89 | 4.5774 | 14.18 | 219.30 | 4.7391 | 1.57 | 1.57 | 3.47 |
| 700 | 15.42 | 238.50 | 5.9090 | 15.72 | 243.20 | 6.1505 | 1.95 | 1.95 | 4.00 |
| 800 | 16.81 | 260.00 | 7.3711 | 17.20 | 266.06 | 7.7097 | 2.31 | 2.31 | 4.49 |
| 900 | 18.14 | 280.56 | 8.9579 | 18.63 | 288.06 | 9.4116 | 2.64 | 2.64 | 4.94 |
| 1000 | 19.42 | 300.34 | 10.6644 | 20.00 | 309.34 | 11.2518 | 2.95 | 2.95 | 5.36 |
| 5000 | 55.36 | 856.21 | 153.3806 | 61.35 | 948.91 | 177.5069 | 10.27 | 10.27 | 14.58 |
| 10000 | 87.28 | 1349.93 | 484.6533 | 101.74 | 1573.56 | 596.1665 | 15.30 | 15.30 | 20.63 |

TABLE I.11 – Coefficients de transport du méthane (CH_4) en fonction de la température, obtenus à partir du potentiel de Lennard-Jones et du potentiel de Buckingham.

| T(K) | Lennard-Jones | | | Buckingham | | | Écart relatif | | |
|-------|---|--|---|---|--|---|-------------------|----------------------|----------------|
| | η ($\mu\text{Pa}\cdot\text{s}$) | λ ($10^{-3}\text{W}/\text{m}\cdot\text{K}$) | D ($10^{-4}\text{m}^2/\text{s}$) | η ($\mu\text{Pa}\cdot\text{s}$) | λ ($10^{-3}\text{W}/\text{m}\cdot\text{K}$) | D ($10^{-4}\text{m}^2/\text{s}$) | $\delta_\eta(\%)$ | $\delta_\lambda(\%)$ | $\delta_D(\%)$ |
| 200 | 7.54 | 14.66 | 0.1016 | 8.29 | 16.12 | 0.1178 | 9.51 | 9.51 | 14.81 |
| 300 | 10.78 | 20.95 | 0.2169 | 11.50 | 22.34 | 0.2409 | 6.43 | 6.43 | 10.47 |
| 400 | 13.56 | 26.36 | 0.3641 | 14.35 | 27.88 | 0.3977 | 5.62 | 5.62 | 8.84 |
| 500 | 16.03 | 31.15 | 0.5388 | 16.94 | 32.93 | 0.5850 | 5.57 | 5.57 | 8.22 |
| 600 | 18.27 | 35.50 | 0.7385 | 19.35 | 37.61 | 0.8004 | 5.77 | 5.77 | 8.05 |
| 700 | 20.34 | 39.53 | 0.9614 | 21.61 | 42.00 | 1.0423 | 6.05 | 6.05 | 8.07 |
| 800 | 22.29 | 43.31 | 1.2062 | 23.75 | 46.15 | 1.3092 | 6.35 | 6.35 | 8.18 |
| 900 | 24.13 | 46.89 | 1.4719 | 25.78 | 50.11 | 1.6000 | 6.63 | 6.63 | 8.35 |
| 1000 | 25.89 | 50.31 | 1.7574 | 27.73 | 53.90 | 1.9139 | 6.88 | 6.88 | 8.53 |
| 5000 | 73.69 | 143.21 | 25.4638 | 82.33 | 160.00 | 29.2007 | 11.08 | 11.08 | 13.67 |
| 10000 | 115.59 | 224.63 | 80.2285 | 132.73 | 257.94 | 95.3175 | 13.81 | 13.81 | 17.19 |

TABLE I.12 – Coefficients de transport du monoxyde de carbone (CO) en fonction de la température, obtenus à partir du potentiel de Lennard-Jones et du potentiel de Buckingham.

| T(K) | Lennard-Jones | | | Buckingham | | | Écart relatif | | |
|-------|---|--|---|---|--|---|-------------------|----------------------|----------------|
| | η ($\mu\text{Pa}\cdot\text{s}$) | λ ($10^{-3}\text{W}/\text{m}\cdot\text{K}$) | D ($10^{-4}\text{m}^2/\text{s}$) | η ($\mu\text{Pa}\cdot\text{s}$) | λ ($10^{-3}\text{W}/\text{m}\cdot\text{K}$) | D ($10^{-4}\text{m}^2/\text{s}$) | $\delta_\eta(\%)$ | $\delta_\lambda(\%)$ | $\delta_D(\%)$ |
| 200 | 12.74 | 14.18 | 0.0980 | 12.07 | 13.44 | 0.0865 | 5.35 | 5.35 | 12.47 |
| 300 | 17.81 | 19.83 | 0.2053 | 17.43 | 19.40 | 0.1921 | 2.17 | 2.17 | 6.66 |
| 400 | 22.13 | 24.63 | 0.3409 | 21.93 | 24.41 | 0.3272 | 0.89 | 0.89 | 4.09 |
| 500 | 25.96 | 28.89 | 0.5012 | 25.83 | 28.76 | 0.4871 | 0.48 | 0.48 | 2.85 |
| 600 | 29.45 | 32.78 | 0.6841 | 29.33 | 32.65 | 0.6691 | 0.41 | 0.41 | 2.22 |
| 700 | 32.70 | 36.40 | 0.8882 | 32.54 | 36.22 | 0.8716 | 0.48 | 0.48 | 1.88 |
| 800 | 35.75 | 39.80 | 1.1121 | 35.54 | 39.56 | 1.0934 | 0.60 | 0.60 | 1.69 |
| 900 | 38.66 | 43.03 | 1.3550 | 38.38 | 42.72 | 1.3336 | 0.72 | 0.72 | 1.59 |
| 1000 | 41.43 | 46.12 | 1.6161 | 41.09 | 45.74 | 1.5914 | 0.83 | 0.83 | 1.54 |
| 5000 | 117.61 | 130.92 | 23.3151 | 115.69 | 128.78 | 23.0158 | 1.65 | 1.65 | 1.29 |
| 10000 | 184.64 | 205.53 | 73.4861 | 181.96 | 202.55 | 73.0352 | 1.46 | 1.46 | 0.62 |

La première remarque qui peut être tirée des différents tableaux numérotés de I.3 à I.12 est que le choix du potentiel est très important dans le calcul des coefficients de transport, étant donné l'écart qui existe entre deux choix de potentiels différents. Le potentiel de Lennard -Jones est celui qui se rapproche le plus des résultats trouvés dans la littérature, ce qui est logique puisque la majorité des auteurs utilisent également le potentiel de Lennard-Jones.

Lorsque les intégrales de collision sont normalisées par rapport à σ (le diamètre des sphères rigides qui est défini dans le chapitre suivant, voir section II.1.1) ou r_e (la distance d'équilibre où le potentiel est à son minimum qui est également défini dans le chapitre suivant, voir section II.1.1), on obtient des intégrales qui ne dépendent que d'un seul paramètre qui est celui de puits D_e , ce qui veut dire que la seule différence entre les intégrales de collision de différentes espèces est le paramètre D_e . Par conséquent, les potentiels avec plusieurs paramètres semblent les plus adaptés pour différencier les interactions entre les différentes espèces chimiques.

L'écart relatif observé pour certains gaz (O_2 , Ar , He , Ne , Kr , Xe et H_2) est relativement proportionnel à la température pour tous les coefficients de transport, ce qui n'est pas le cas pour les autres gaz (CH_4 et CO) où l'écart relatif a une dépendance aléatoire avec la température, ou inversement proportionnel à la température pour le N_2 .

Plusieurs plages de températures sont nécessaires pour déterminer expérimentalement les paramètres du potentiel de Buckingham. Ainsi, un paramètre donné entre $T = 200K$ et $T = 300K$ n'est pas forcément celui donné entre $T = 900K$ et $T = 1000K$, ce qui explique la différence des coefficients de transport obtenus à haute température.

Les figures I.12, I.13 et I.14 montrent la dépendance des coefficients de diffusion, de viscosité et de conductivité thermique, respectivement, en fonction du produit $D_e \cdot \sigma$. Dans une première approximation on peut conclure que la viscosité est proportionnelle au produit $D_e \cdot \sigma$ et que les coefficients de diffusion et de conductivité thermique sont inversement proportionnels à ce produit. Bien que la masse de l'hydrogène soit la plus faible, le produit $D_e \cdot \sigma$ de l'hélium est le plus faible en raison de son potentiel d'interaction, ce qui expliquerait le fait que l'hélium est le gaz qui possède une conductivité thermique et un coefficient de diffusion les plus élevés comparés aux autres gaz, (figures I.12, I.13 et I.14).

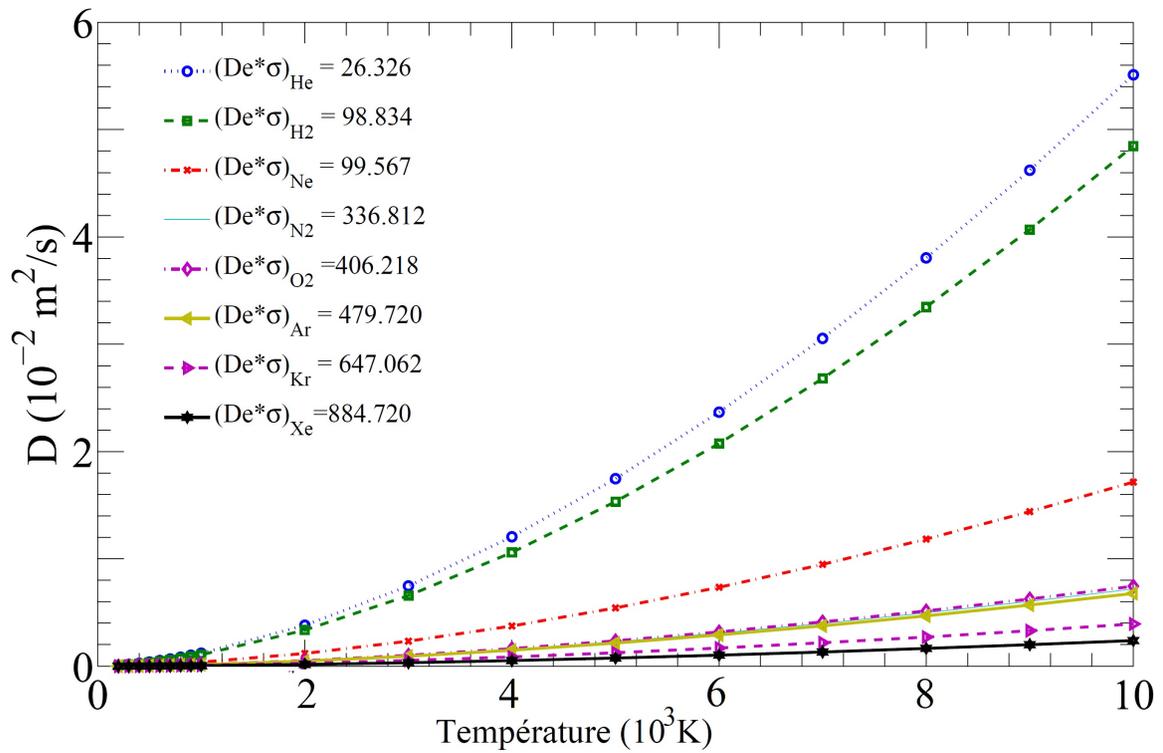


FIGURE I.12 – Influence du produit $D_e \cdot \sigma$ sur les coefficients de diffusion de quelques espèces gazeuses donnés en fonction de la température.

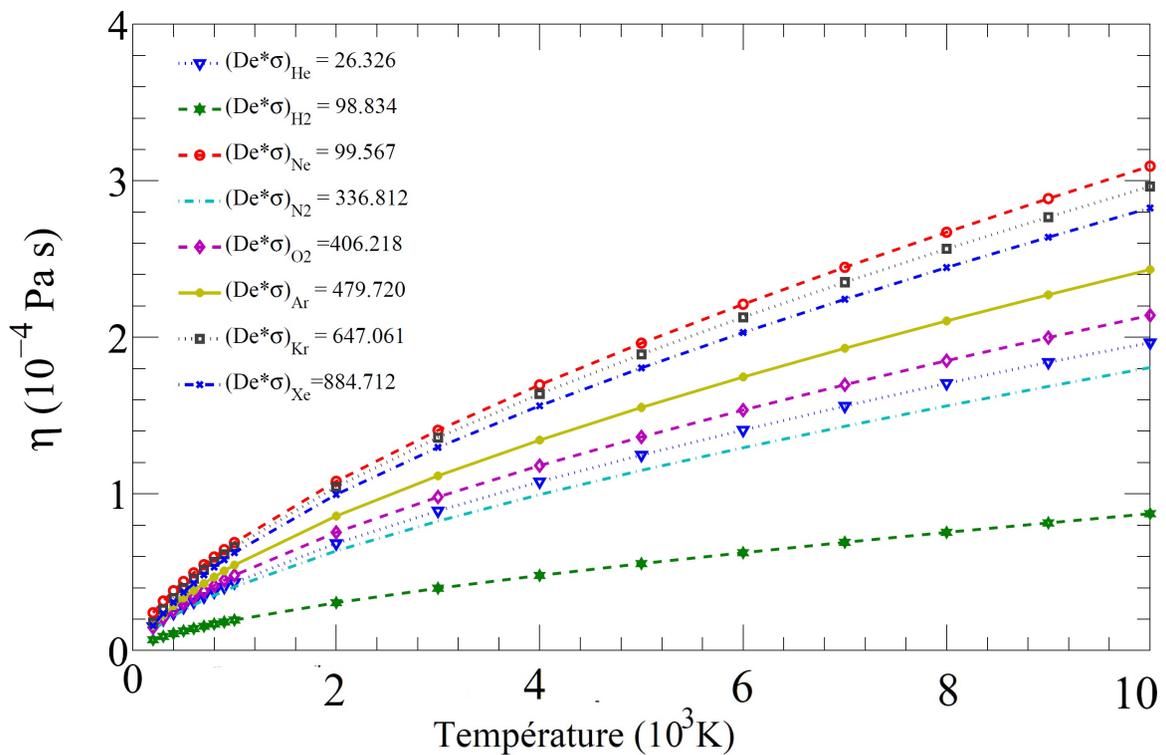


FIGURE I.13 – Influence du produit $D_e \cdot \sigma$ sur les coefficients de viscosité de quelques espèces gazeuses donnés en fonction de la température.

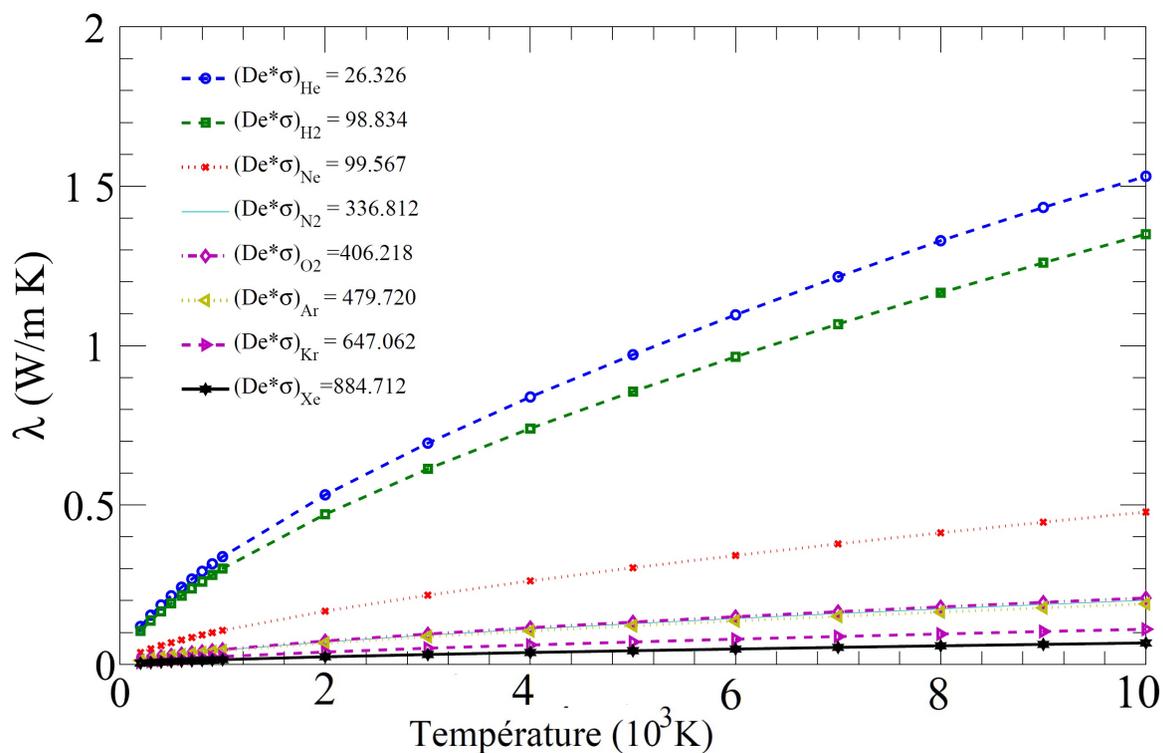


FIGURE I.14 – Influence du produit $D_e \cdot \sigma$ sur les coefficients de conductivité thermique de quelques espèces gazeuses donnés en fonction de la température.

I.3.4 Limite de validité des formules

Toutes les propriétés de transport obtenues par la méthode de Chapman-Enskog dérivent implicitement de l'équation de Boltzmann. Par conséquent, la validité des formules des coefficients de transport dépend essentiellement des hypothèses de validité de l'équation de Boltzmann, à savoir l'approximation faite sur les collisions entre particules, qui sont uniquement de nature binaire (pas de collision simultanée de trois particules ou plus). Toute interaction à longue distance est négligée, les particules sont dotées d'une liberté totale dans leur mouvement (excepté durant une collision). La durée d'une collision est très faible comparée au temps qui correspond au libre parcours moyen.

Ces hypothèses sont applicables généralement pour un gaz dilué avec une densité relativement faible. Naturellement si la densité devient très importante alors les interactions entre particules de nature ternaire (interaction à trois corps) prédominent. Les formules des coefficients de transport ne seront plus valides pour de telles densités.

Formuler mathématiquement la limite de densité pour laquelle les formules des coefficients de transport obtenues par la méthode Chapman-Enskog ne sont plus valides est une chose très compliquée, d'autant plus qu'elle doit être valable pour n'importe quel gaz.

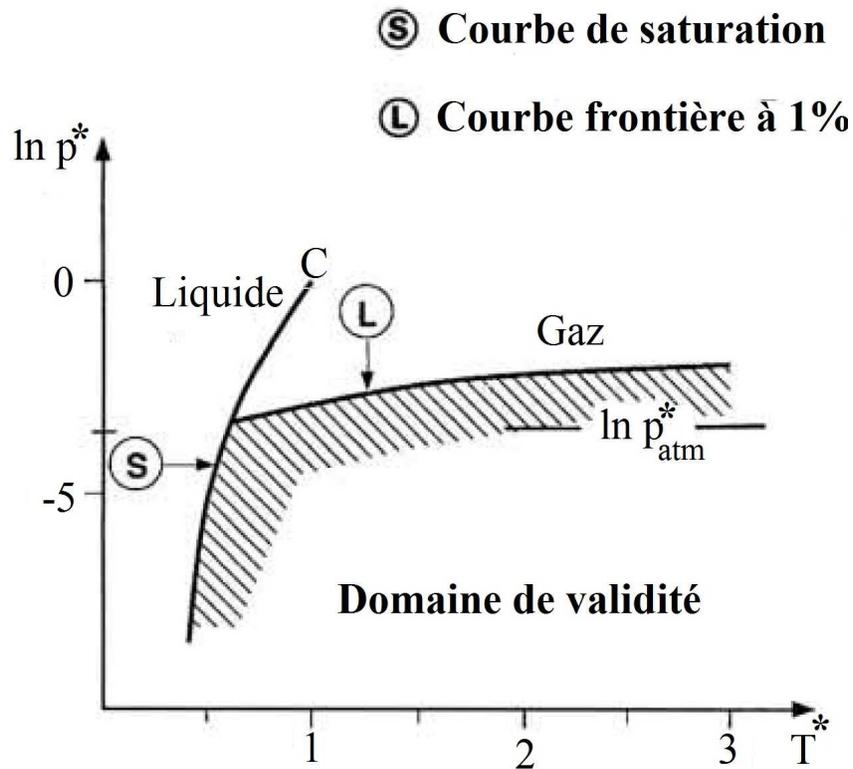


FIGURE I.15 – Domaine de validité des formules de la théorie cinétique des gaz [39].

Une étude a été menée dans ce contexte [40, 39] pour établir une limite de validité de la théorie cinétique des gaz, en établissant une condition sur le couple température-pression. Il a été établie :

$$p^* \leq 0.061T^* - 0.003$$

$$p^* = \frac{p}{p_c} \quad \text{Pression réduite} \quad (\text{I.3.162})$$

$$T^* = \frac{T}{T_c} \quad \text{Température réduite}$$

avec p_c et T_c pression et température absolue au point critique, respectivement. Cette limite n'est valable que pour une gamme de températures comprise entre $0.5 < T^* < 4.5$, ce qui veut dire que la limite dépend aussi de la température.

Un exemple est montré sur la figure I.15 : celui de l'azote. La température critique et la pression critique correspondant à l'azote sont : $p_c = 33.9 \text{ bar}$; $T_c = 126.2 \text{ K}$. Le domaine de validité est donné au dessous de la courbe L , pour une pression égale à la pression atmosphérique alors la courbe est délimitée par $\ln p_{atm}^*$. La condition de validité donnée ci-dessus (I.3.162) prend la forme suivante pour l'azote :

$$p \leq 0.061 \left(\frac{p_c}{T_c} \right) T - 0.003p_c \quad (\text{I.3.163})$$

$$p \leq 0.016 T - 0.1017$$

Pour une température ambiante $T \approx 300\text{K}$ la limite supérieure en pression est de l'ordre

de 4.7 bar. Certains auteurs continuent à employer les formules de la cinétique des gaz obtenues par Chapman-Enskog même pour des pressions très élevées alors que leur domaine de validité est limité. Une autre condition liée aux hypothèses relatives à la dérivation de l'équation de Boltzmann concerne la densité qui doit être suffisamment importante pour que les collisions puissent avoir lieu, et que le libre parcours moyen ℓ soit suffisamment faible devant les dimensions du système L étudié. Cette condition est formulée par le nombre de Knudsen :

$$K_n = \frac{\ell}{L} \quad (\text{I.3.164})$$

Le nombre de Knudsen K_n doit être inférieur à peu près à 0.01 [39].

En remplaçant la formule du libre parcours moyen (I.2.11) dans l'équation ci-dessus (I.3.164) on obtient :

$$K_n = \frac{1}{\sqrt{2}L} \frac{kT}{p\sigma}$$

$$p = \frac{1}{\sqrt{2}L} \frac{kT}{K_n\sigma} \quad (\text{I.3.165})$$

$$p \geq \frac{1}{\sqrt{2}L} \frac{kT}{0.01\sigma}$$

Le diamètre moléculaire de l'azote correspond à 3.75 Å, donc pour une température ambiante $T \approx 300K$ et une dimension $L \approx 1cm$ alors la valeur limite inférieure de la pression est environ de l'ordre de $6.5 \cdot 10^{-4} atm$.

Il faut noter que les deux limites en pression, supérieure et inférieure dépendant directement de la température.

Conclusion

Dans ce chapitre nous avons rappelé les définitions et le sens physique des coefficients de transport grâce à une approche simplifiée à l'aide du concept de libre parcours moyen. Leurs formulations ont été données sous un angle plus approfondi développé sur la base de la résolution de l'équation de Boltzmann avec la méthode de Chapman-Enskog. Nous avons constaté que le paramètre important qui permet l'évaluation des coefficients de transport est le potentiel d'interaction. Nous avons également montré l'importance du choix de la forme du potentiel d'interaction sur les résultats finaux relatifs aux coefficients de transport. Les formules obtenues par la méthode de Chapman-Enskog ne sont applicables que dans un certain domaine de validité en pression et en température.

Dans le chapitre suivant, un ensemble de différentes formes de potentiels d'interaction plus au moins connus, sera présenté. Une étude d'une collision binaire sera également décrite.

Chapitre II

Théorie des collisions et des interactions inter-particulaires

Sommaire

| | |
|---|-----------|
| II.1 Potentiels d'interaction interparticulaires | 80 |
| II.1.1 Nature des interactions | 80 |
| II.1.2 Différents types de potentiel | 81 |
| II.2 Section efficace de collision | 89 |
| II.2.1 Section efficace différentielle | 90 |
| II.2.2 Section efficace totale | 90 |
| II.2.3 Section efficace de transfert de quantité de mouvement | 91 |
| II.3 Collisions binaires | 91 |
| II.3.1 Description dynamique d'une collision binaire | 92 |
| II.3.2 Évaluation de l'angle de déflexion | 97 |
| II.3.3 Résolution analytique de l'angle de déflexion | 98 |
| II.3.4 Étude asymptotique d'une collision binaire | 103 |

Dans la continuité du premier chapitre, nous allons traiter dans ce chapitre les phénomènes de collision entre particules afin de mettre en évidence, sous certaines conditions, des singularités qui peuvent apparaître dans le calcul numérique des sections efficaces.

La première partie de ce chapitre est une présentation d'une liste, non exhaustive, des potentiels d'interactions usuellement utilisés dans le calcul des coefficients de transport.

Dans la deuxième partie, une brève présentation des sections efficaces de collision sera exposée ainsi qu'une démonstration des formules utilisées. Enfin, la troisième partie est consacrée à une étude théorique d'une collision binaire. Nous traiterons également dans la troisième partie les conditions d'apparition des anomalies citées ci-dessus ainsi que les formules mathématiques qui permettent d'éliminer ces singularités suivie d'un cas concret d'une expérience trouvée dans la littérature [41] qui met en avant ces anomalies en question.

II.1 Potentiels d'interaction interparticulaires

Plusieurs propriétés physiques (thermodynamiques ou mécaniques) ou chimiques de la matière sont souvent liées directement ou indirectement aux interactions (atomiques ou moléculaires) des particules qui constituent la matière. L'état de la matière, solide, liquide ou gaz est déterminé par la nature et la portée des interactions intermoléculaires à l'échelle microscopique.

L'étude des potentiels d'interaction est cruciale dans le calcul des coefficients de transport et des coefficients de viriel. L'une des plus importantes difficultés dans l'évaluation des coefficients de transport (encore mal maîtrisée) est le choix du potentiel dans la description d'une interaction donnée. Une liste non exhaustive des potentiels fréquemment utilisés dans la littérature sera présentée dans la section [II.1.2](#).

II.1.1 Nature des interactions

Il existe plusieurs critères qui permettent de classer les potentiels d'interaction. On peut parler des forces électromagnétique, gravitationnelle ou encore des forces nucléaires qui donnent naissance à des potentiels de forme et de nature différentes. Bien entendu, à l'échelle qui nous intéresse dans le cadre de la théorie cinétique des gaz, les forces gravitationnelles ou nucléaires ne présentent aucune influence. Par conséquent, seules les forces électromagnétiques sont considérées.

Les potentiels d'interaction correspondant aux forces électromagnétiques peuvent être distingués selon la portée de l'interaction en question, on parle alors des interactions longue portée et courte portée.

Les potentiels d'interaction longue portée sont généralement exprimés par trois termes [42, 43] :

$$V(r)_{\text{longue portée}} = V(\text{Polarisation}) + V(\text{Dispersion}) + V(\text{Électrostatique}) \quad (\text{II.1.1})$$

Le terme de polarisation appelé parfois terme d'induction relatif aux forces de Debye est une conséquence des effets d'attraction entre une charge ionique (moment multipolaire permanent) et un moment multipolaire induit d'une particule neutre.

Le terme de dispersion appelé force de London a une nature quantique. La nature de cette force est liée aux fluctuations instantanées des électrons en mouvement, elle se manifeste entre deux moments multipolaires induits.

Le terme électrostatique appelé force de Keesom est une conséquence des effets d'attraction ou de répulsion entre des moments multipolaires permanents liés à la distribution de charge statique.

L'ensemble des contributions de ces trois forces (Debye, London et Keesom) constitue les forces de Van der Waals.

Le potentiel d'interaction courte portée se manifeste sur des distances plus faibles que les rayons atomiques. Les effets de répulsion sont dominants et plus importants en intensité. Le terme exponentiel est souvent employé pour reproduire ce type de potentiel.

Malgré les efforts théoriques pour calculer ces potentiels, la justification physique de leur choix reste empirique.

II.1.2 Différents types de potentiel

Pour représenter une interaction entre deux particules, plusieurs formes de potentiel ont été proposées. Nous allons décrire quelques potentiels du plus simple au plus élaboré.

II.1.2.1 Potentiel des sphères rigides

Le potentiel le plus simple est celui des sphères rigides. Dans ce modèle on considère deux particules i et j assimilées à des boules rigides impénétrables de rayon r_i et r_j . Le potentiel résultant de l'interaction entre i et j est un potentiel purement répulsif qui peut être donné par :

$$V(r) = \begin{cases} \infty & r \leq \sigma \\ 0 & r > \sigma \end{cases} \quad (\text{II.1.2})$$

$\sigma = r_i + r_j$ correspond au diamètre des sphères rigides. Pour un tel potentiel, une collision binaire n'aurait lieu que si la distance qui sépare les deux particules est inférieure ou égale au diamètre σ . L'avantage de l'utilisation de ce potentiel réside dans la possibilité de calculer les coefficients de transport analytiquement [6], dans une première approximation très simpliste. En effet, les erreurs induites par l'utilisation de ce potentiel sur les valeurs des coefficients de transport sont assez importantes, de plus les coefficients du viriel seraient indépendants de la température.

II.1.2.2 Potentiel des centres ponctuels répulsif et attractif

Dans ce modèle, les particules sont considérées comme des points ponctuels qui peuvent se repousser comme s'attirer contrairement au modèle des sphères rigides. Les particules qui interagissent entre elles sont appelées particules maxwelliennes. La forme que prend ce potentiel est donnée par :

$$V(r) = \begin{cases} +\beta_n \left(\frac{1}{r}\right)^n & , \text{ potentiel répulsif} \\ -\beta_n \left(\frac{1}{r}\right)^n & , \text{ potentiel attractif} \end{cases} \quad (\text{II.1.3})$$

β_n est une caractéristique de l'interaction prise comme une constante positive, appelée parfois exposant de répulsion ou d'attraction. Dans la plupart des cas n est compris entre 9 et 15 pour un potentiel répulsif. Dans le cas où $n = 1$ on retrouve le potentiel coulombien, pour $n = 4$ on obtient le potentiel de polarisation de Maxwell qui décrit l'interaction entre une particule neutre et un ion suivant la formule :

$$V(r) = \frac{-Z_i e^2 \alpha}{2r^4} \quad (\text{II.1.4})$$

α et Z_i désignent la polarisabilité de la particule neutre et la charge de l'ion, respectivement.

II.1.2.3 Potentiel de Sutherland

L'expression de ce potentiel est donnée par :

$$V(r) = \begin{cases} \infty & \text{si } r < \sigma \\ -\epsilon \left(\frac{\sigma}{r}\right)^n & \text{si } r > \sigma \end{cases} \quad (\text{II.1.5})$$

n est l'indice d'attraction, ϵ correspond à l'énergie maximale de l'attraction. Le potentiel de Sutherland ressemble au potentiel des sphères rigides mais plus réaliste et il présente moins de difficultés à manipuler analytiquement. On retrouve les interactions de Van der Waals si $n = 6$.

II.1.2.4 Potentiel en puits carré

Ce potentiel est une amélioration du potentiel des sphères rigides, en tenant compte de la force attractive. La forme de ce potentiel peut être présentée comme suit :

$$V(r) = \begin{cases} \infty & \text{si } r \leq \sigma \\ -\epsilon & \text{si } \sigma < r < \lambda\sigma \\ 0 & \text{si } r > \lambda\sigma \end{cases} \quad (\text{II.1.6})$$

ϵ désigne la profondeur de la zone attractive qui s'étend de σ jusqu'à $\lambda\sigma$. λ est un paramètre, généralement plus grand que l'unité, typiquement compris entre 1.25 et 1.75 [44, 45].

II.1.2.5 Potentiel de Lennard-Jones

Le potentiel de Lennard-Jones est certainement le potentiel le plus connu et le plus couramment utilisé pour décrire les interactions entre espèces non polaires. L'expression

générale de ce potentiel prend la forme suivante :

$$V(r) = \epsilon \left[\left(\frac{m}{n-m} \right) \left(\frac{r_{min}}{r} \right)^n - \left(\frac{n}{n-m} \right) \left(\frac{r_{min}}{r} \right)^m \right] \quad (\text{II.1.7})$$

Les indices m et n représentent des indices d'attraction et de répulsion, respectivement, la distance r_{min} correspond à la distance où l'énergie potentielle est égale à ϵ . La relation qui lie r_{min} à σ est donnée par :

$$r_{min} = \sigma \left(\frac{n}{m} \right)^{\frac{1}{n-m}}$$

Le potentiel de Lennard-Jones est souvent connu avec un indice d'attraction $m = 6$ et un indice de répulsion¹ $n = 12$, ainsi on obtient le potentiel de Lennard-Jones 6 – 12.

$$\begin{aligned} V(r) &= 4\epsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r} \right)^6 \right] \\ &= \epsilon \left[\left(\frac{r_{min}}{r} \right)^6 - 2 \left(\frac{r_{min}}{r} \right)^{12} \right] \end{aligned} \quad (\text{II.1.8})$$

Il faut noter qu'avec le potentiel Lennard-Jones 6 – 12, le second coefficient de viriel peut être évalué analytiquement [6].

Dans le tableau II.1 on donne quelques exemples de paramètres du potentiel de Lennard-Jones 6 – 12 [46] utilisés pour calculer les coefficients de transport et les coefficients du viriel pour certaines substances.

TABLE II.1 – Exemple des paramètres du potentiel Lennard-Jones donnés pour quelques substances [46, 6].

| Espèce | Paramètres du potentiel Lennard-Jones | |
|-----------------|---------------------------------------|---------------------------|
| | $\sigma(\text{\AA})$ | $\frac{\epsilon}{k_B}(K)$ |
| He | 2.576 | 10.22 |
| Ne | 2.789 | 35.7 |
| Ar | 3.418 | 124.0 |
| Kr | 3.61 | 190.0 |
| Xe | 4.055 | 229.0 |
| N ₂ | 3.681 | 91.5 |
| O ₂ | 3.433 | 113.0 |
| CO | 3.590 | 110.0 |
| CH ₄ | 3.882 | 137.0 |

Afin de mieux représenter la partie répulsive du potentiel Lennard-jones, une troncature a été proposée à une distance $r = 2^{1/6}\sigma$. Le potentiel ainsi tronqué prend la forme :

$$V(r) = \begin{cases} 4\epsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r} \right)^6 \right] + \epsilon & \text{si } r \leq 2^{1/6}\sigma \\ 0 & \text{si } r > 2^{1/6}\sigma \end{cases} \quad (\text{II.1.9})$$

Ce type de potentiel est généralement utilisé dans les simulations de la dynamique moléculaire.

1. Le terme attractif représente les interactions longue portée type dipôle-induit dipôle-induit. Le terme répulsif représente les interactions courte portée.

II.1.2.6 Potentiel de Stockmayer

Le potentiel de Lennard-Jones ne s'applique qu'aux particules non polaires. Pour une interaction type dipôle-dipôle, une autre expression approchée de Lennard-Jones a été proposé [47, 48] qui a pour expression :

$$V(r) = 4\epsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r} \right)^6 \right] - \frac{4\epsilon\sigma^3}{r^3} \delta^* \quad (\text{II.1.10})$$

δ^* est un paramètre qui corrige le potentiel de Lennard-Jones afin de prendre en compte les particules non polaires.

II.1.2.7 Potentiel de Kihara

Le potentiel de Kihara [49, 50] est un ajustement du potentiel de Lennard-Jones pour tenir compte des molécules non sphériques, tout en gardant l'intégrabilité analytique du second coefficient de viriel. L'expression de ce potentiel est donnée par :

$$V(r) = \begin{cases} 4\epsilon \left[\left(\frac{\sigma-d}{r-d} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma-d}{r-d} \right)^6 \right] & \text{si } r > d \\ \infty & \text{si } r \leq d \end{cases} \quad (\text{II.1.11})$$

d est un paramètre de telle sorte que le point pour lequel le potentiel $V(r) = \infty$ sera translaté de $r = 0$ à $r = d$.

II.1.2.8 Potentiel de Buckingham

Le potentiel de Buckingham a l'avantage d'avoir un terme exponentiel qui paraît plus réaliste que les potentiels de Lennard-Jones et les autres cités auparavant, qui n'ont que des termes en puissance. L'expression de ce potentiel est donnée par :

$$V(r) = \epsilon \frac{(6 + 8\beta) \exp \left[\alpha \left(1 - \frac{r}{r_{min}} \right) \right] - (\alpha) \left[\left(\frac{r_{min}}{r} \right)^6 + \beta \left(\frac{r_{min}}{r} \right)^8 \right]}{\alpha - 6 + (\alpha - 8)\beta} \quad (\text{II.1.12})$$

α et β représentent la pente de l'exponentielle répulsive et de la partie attractive, respectivement. Les valeurs de ces constantes sont données et discutées dans [6]. Typiquement elles prennent les valeurs $9 < \alpha < 15$ et $0 < \beta < 0.25$. Le potentiel de Buckingham inclut les interactions type dipôle-induit dipôle-induit et dipôle-induit quadripôle-induit.

Malgré les avantages que présentent le potentiel de Buckingham par rapport aux autres potentiels, ce dernier manifeste un comportement non physique à très courte séparation inter-atomique voir figure II.1. En effet, la force attractive tend vers l'infinie à très courte distance.

Une modification du potentiel de Buckingham a été proposée [51, 52] afin de résoudre l'anomalie physique que présente ce potentiel. Le potentiel ainsi modifié appelé potentiel de Buckingham-Corner prend la forme suivante :

$$V(r) = \epsilon \frac{(6 + 8\beta) \exp \left[\alpha \left(1 - \frac{r}{r_{min}} \right) \right] - (\alpha) \left[\left(\frac{r_{min}}{r} \right)^6 + \beta \left(\frac{r_{min}}{r} \right)^8 \right] \delta}{\alpha - 6 + (\alpha - 8)\beta} \quad (\text{II.1.13})$$

où δ suit les conditions suivantes :

$$\delta = \begin{cases} \exp \left[4 \left(1 - \frac{r_{min}}{r} \right)^3 \right] & \text{si } r < r_{min} \\ 1 & \text{si } r \geq r_{min} \end{cases}$$

Avec les conditions faites sur δ , le potentiel de Buckingham n'est modifié que pour des courtes distances $r < r_{min}$, sinon le potentiel garde sa forme originelle. On peut voir sur la figure II.1 les modifications apportées par les nouveaux potentiels.

Un autre potentiel a aussi été proposé dans la même approche, à savoir corriger l'anomalie induite par le potentiel de Buckingham. C'est le potentiel de Rice-Buckingham, parfois appelé potentiel (6-exp) qui est donné par :

$$V(r) = \begin{cases} \frac{\epsilon}{1-\frac{6}{\alpha}} \left\{ \frac{6}{\alpha} \exp \left[\alpha \left(1 - \frac{r}{r_{min}} \right) \right] - \left(\frac{r}{r_{min}} \right)^6 \right\} & \text{si } r > \lambda r_{min} \\ \infty & \text{si } r < \lambda r_{min} \end{cases} \quad (\text{II.1.14})$$

λr_{min} correspond à la distance pour la quelle le potentiel $V(r)$ passe par un maximum. La valeur de λ peut être obtenue en résolvant l'équation suivante :

$$\lambda^7 \exp[\alpha(1-\lambda)] - 1 = 0 \quad (\text{II.1.15})$$

λ correspond à la plus petite racine de cette équation.

Dans le tableau II.2 on donne quelques exemples de paramètres du potentiel (6-exp) [46] utilisés pour calculer les coefficients de transport et les coefficients de viriel pour certaines substances.

TABLE II.2 – Exemples des paramètres du potentiel (6-exp) donnés pour quelques substances

| Espèce | Paramètres du potentiel (6-exp) | | |
|-----------------|---------------------------------|---------------------|---------------------------|
| | α | $r_{min}(\text{Å})$ | $\frac{\epsilon}{k_B}(K)$ |
| Ne | 14.5 | 3.147 | 38.0 |
| Ar | 14.0 | 3.866 | 123.2 |
| Kr | 12.3 | 4.056 | 158.3 |
| Xe | 13.0 | 4.450 | 231.2 |
| N ₂ | 16.2 | 4.040 | 113.5 |
| CO | 17.0 | 3.937 | 119.1 |
| CH ₄ | 14.0 | 4.206 | 152.8 |

II.1.2.9 Potentiels dépendant des constantes spectroscopiques

Il existe certains potentiels qui dépendent entièrement des constantes spectroscopiques. Les paramètres de ces potentiels peuvent être obtenus à l'aide de la spectroscopie moléculaire, contrairement aux autres potentiels pour lesquels les paramètres sont souvent mesurés expérimentalement² aux basses températures.

2. En mesurant la viscosité ou le second terme de viriel, on pourrait déterminer certains paramètres des potentiels d'interaction à savoir le σ ou ϵ .

Le potentiel de Morse est l'un des potentiels le plus connu qui est déterminé en fonction des constantes spectroscopiques :

$$V_M(r) = D_e \left[\left(1 - e^{-\sigma(r-r_e)} \right)^2 - 1 \right] \quad (\text{II.1.16})$$

r_e désigne la distance d'équilibre où le potentiel est à son minimum. σ est donné par :

$$\sigma = \frac{\omega_e}{2r_e\sqrt{\beta_e D_e}}$$

ω_e et β_e sont des constantes spectroscopiques de vibration et de rotation, respectivement.

Ce potentiel est largement utilisé pour évaluer avec précision les intégrales de collision (voir section III.4).

Un autre potentiel qui dépend entièrement des constantes spectroscopiques est celui de Hulburt-Hirschfelder [53, 54]. Les paramètres du potentiel de Hulburt-Hirschfelder sont au nombre de 5, ce qui rend ce potentiel plus maniable et plus facile à ajuster par rapport à des données expérimentales, mais il présente également un inconvénient quand ces paramètres sont calculés à partir des constantes spectroscopiques (si elles sont mal connues l'erreur commise sur le potentiel de Hulburt-Hirschfelder est d'autant plus importante que le nombre de ces paramètres est important). Le potentiel de Hulburt-Hirschfelder est une correction du potentiel de Morse :

$$V_{HH}(r) = V_M(r) + \Delta V(r) \quad (\text{II.1.17})$$

$\Delta V(r)$ est un terme correctif apporté au potentiel de Morse. L'expression la plus usuelle du potentiel de Hulburt-Hirschfelder est donnée sous la forme :

$$V_{HH}(r) = D_e \left[\left(1 - e^{-x} \right)^2 + cx^3(1 + bx)e^{-2x} - 1 \right] \quad (\text{II.1.18})$$

$$x = \frac{\omega_e}{2\sqrt{\beta_e D_e}} \left(\frac{r - r_e}{r_e} \right)$$

$$c = 1 + a_1 \sqrt{\frac{D_e}{a_0}}$$

$$b = 2 - \frac{\frac{7}{12} - D_e(a_2/a_0)}{c}$$

$$a_0 = \frac{\omega_e^2}{4\beta_e}$$

$$a_1 = -1 - \frac{\alpha_e \omega_e}{6\beta_e^2}$$

$$a_2 = \frac{5}{4}a_1^2 - \frac{2\omega_e x_e}{3\omega_e}$$

D_e correspond à la profondeur du puits de potentiel (énergie).

ω_e et $\omega_e x_e$ sont des constantes spectroscopiques de vibration, β_e est défini comme une

constante de rotation, enfin α_e est une constante de couplage de rotation-vibration. Une première approximation de D_e peut être donnée par :

$$D_e = \frac{4\beta_e^3}{\omega_e^2} \quad (\text{II.1.19})$$

On remarque que lorsque $c = 0$, on retrouve le potentiel de Morse.

Dans la section III.5.6 une comparaison entre des intégrales de collision évaluées en utilisant le potentiel de Morse avec celles obtenues à l'aide du potentiel de Hulbert-Hirschfelder sera présentée.

On pourrait trouver d'autres potentiels dépendant des constantes spectroscopiques comme celui de Varshni [55] :

$$V_V(r) = D_e \left[\left(1 - \frac{r_e}{r} e^{-\beta(r^2 - r_e^2)} \right)^2 - 1 \right] \quad (\text{II.1.20})$$

$$\beta = \frac{\sigma r_e^2 - 1}{2r_e^2}$$

II.1.2.10 Potentiels ionique et polaire

Les interactions longue portée sont généralement des interactions qui se font entre des charges électriques q , des moments dipolaires μ ou entre des moments quadripolaire Q . On donne un ensemble de potentiel de ce type d'interaction.

$$V(r)^{(q,q)} = \frac{q_a q_b}{r} \quad (\text{II.1.21})$$

$$V(r)^{(q,\mu)} = \frac{q_a \mu_b \cos \theta_b}{r^2} \quad (\text{II.1.22})$$

$$V(r)^{(q,Q)} = \frac{q_a Q_b (3 \cos^2 \theta_b - 1)}{4r^3} \quad (\text{II.1.23})$$

$$V(r)^{(\mu,\mu)} = \frac{\mu_a \mu_b (2 \cos \theta_a \cos \theta_b - \sin_a \sin_b \cos(\phi_a - \phi_b))}{r^3} \quad (\text{II.1.24})$$

$$V(r)^{(\mu,Q)} = \frac{3\mu_a Q_b}{4r^4} \left[\cos \theta_a (3 \cos^2 \theta_b - 1) - 2 \sin_a \sin_b \cos \theta_b \cos(\phi_a - \phi_b) \right] \quad (\text{II.1.25})$$

$$V(r)^{(Q,Q)} = \frac{3Q_a Q_b}{16r^5} \left[1 - 5 \cos^2 \theta_a - 5 \cos^2 \theta_b - 15 \cos^2 \theta_a \cos^2 \theta_b + 2 (\sin_a \sin_b \cos \theta_b \cos(\phi_a - \phi_b) - 4 \cos \theta_a \cos^2 \theta_b)^2 \right] \quad (\text{II.1.26})$$

où $\theta_a, \theta_b, \phi_a$ et ϕ_b définissent les différentes orientations entre molécules.

Pour résumer cette partie qui concerne les potentiels, on a porté sur la figure II.1 un ensemble de potentiels habituellement cités ou étudiés qui sont présentés dans les sections précédentes. Les rayons sont normalisés soit par rapport à σ , soit par rapport à r_{min} . L'énergie potentielle est normalisée par rapport à ϵ .

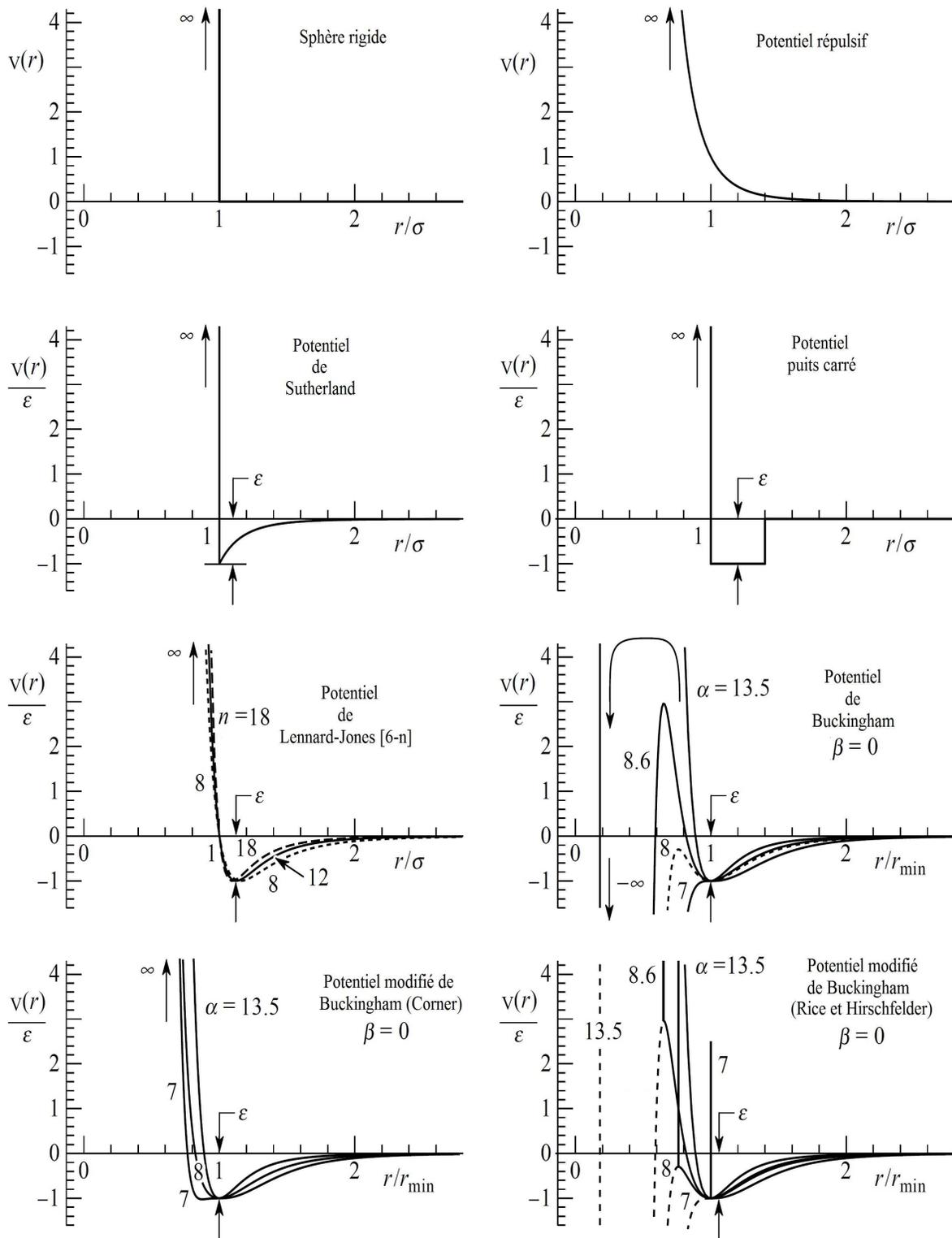


FIGURE II.1 – Représentation des différentes formes des potentiels d'interaction [45].

II.2 Section efficace de collision

Les sections efficaces sont généralement définies en terme de faisceau de particules identiques qui arrivent sur une cible à symétrie sphérique. Le potentiel d'interaction est le même pour toutes les particules du faisceau.

Les particules incidentes avec un paramètre d'impact b seront déviées avec un angle χ , et on peut considérer que les particules incidentes avec un paramètre d'impact $b+db$ seront déviées avec un angle $\chi + d\chi$ comme illustré sur la figure II.2. Le nombre de particules déviées par seconde dans un angle compris entre χ et $\chi + d\chi$ dépendra du flux Γ (densité de courant) de particules incidentes. Le flux de particules Γ est donné par le nombre de particules incidentes par unité de surface perpendiculaire au faisceau et par unité de temps.

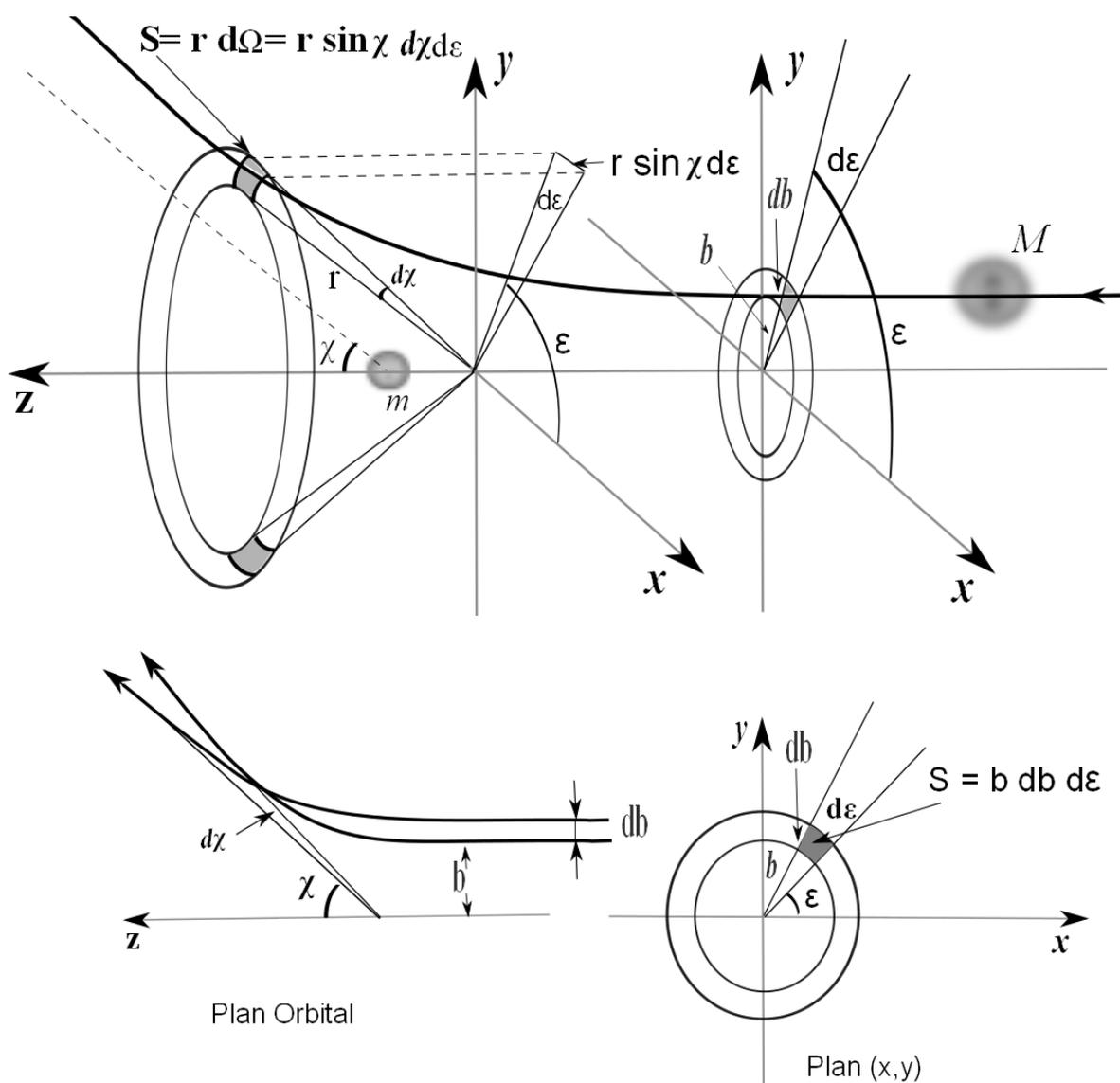


FIGURE II.2 – Illustration conceptuelle d'une section efficace pour une collision binaire dans un champ de force centrale [8].

II.2.1 Section efficace différentielle

La section efficace différentielle $\sigma(\chi, \epsilon)$ appelée parfois fonction de distribution angulaire est définie comme le nombre de particules déviées par unité de temps, par unité de flux incident Γ et par unité d'angle solide Ω faisant un angle χ avec l'axe des z . La formule mathématique dégagée de cette définition est donnée par :

$$\frac{dN}{dt} = \sigma(\chi, \epsilon) \Gamma d\Omega \quad (\text{II.2.1})$$

Le nombre de particules incidentes par unité de temps avec un paramètre d'impact compris entre b et $b+db$ dans un plan orbital orienté entre ϵ et $\epsilon+d\epsilon$ est donné par $\Gamma \cdot b \cdot db \cdot d\epsilon$. Le même nombre de particules déviées par unité de temps entre élément différentiel d'angle solide $d\Omega$ contenu entre les angles χ et $\chi + d\chi$ et entre ϵ et $\epsilon + d\epsilon$, permet d'écrire l'égalité suivante :

$$\frac{dN}{dt} = \Gamma \cdot b \cdot db \cdot d\epsilon \quad (\text{II.2.2})$$

Combinant les deux équations (II.2.1) et (II.2.2) on obtient :

$$\sigma(\chi, \epsilon) d\Omega = b \cdot db \cdot d\epsilon \quad (\text{II.2.3})$$

Puisque $d\Omega = \sin\chi d\chi d\epsilon$ alors l'équation (II.2.3) devient :

$$\sigma(\chi, \epsilon) = \frac{b}{\sin\chi} \left| \frac{db}{d\chi} \right| \quad (\text{II.2.4})$$

La dimension de la section efficace différentielle est la dimension d'une surface. La forme de $\sigma(\chi, \epsilon)$ dépend directement du potentiel d'interaction des particules.

II.2.2 Section efficace totale

La section efficace totale est définie comme le nombre de particules déviées par unité de temps et par unité de flux de particules incidentes dans toutes les directions ou orientations par rapport au centre diffuseur (cible). En intégrant la section efficace différentielle sur tout l'angle solide on obtient la formule relative à la section efficace totale :

$$\begin{aligned} \sigma_t &= \int_{\Omega} \sigma(\chi, \epsilon) d\Omega \\ &= \int_0^{2\pi} d\epsilon \int_0^{\pi} \sigma(\chi, \epsilon) \sin\chi d\chi \end{aligned} \quad (\text{II.2.5})$$

Dans le cas où le potentiel d'interaction est isotrope³, la section efficace différentielle est indépendante de la variable ϵ . L'équation (II.2.5) prend alors la forme simple suivante :

$$\sigma_t = 2\pi \int_0^{\pi} \sigma(\chi) \sin\chi d\chi \quad (\text{II.2.6})$$

3. Des interactions à symétrie sphérique et non polaire

II.2.3 Section efficace de transfert de quantité de mouvement

Dans le cas d'un transfert de quantité de mouvement lors d'une collision binaire il est commode de définir une section efficace de transfert de quantité de mouvement. On note μg la quantité de mouvement relative aux particules incidentes, avec μ la masse réduite et g la vitesse relative initiale. Le flux de moment incident est donné par : $\Gamma \mu g$. La quantité de mouvement totale transférée au centre diffuseur en unité de temps, par toutes les particules diffusées dans tout l'espace est donnée par l'expression suivante :

$$\Gamma \mu g \int_{\Omega} (1 - \cos \chi) \sigma(\chi, \epsilon) d\Omega \quad (\text{II.2.7})$$

A partir de cette expression, on donne la formule de la section efficace de transfert de quantité de mouvement comme ceci :

$$\sigma_{QM} = \int_{\Omega} (1 - \cos \chi) \sigma(\chi, \epsilon) d\Omega \quad (\text{II.2.8})$$

Dans le cas d'une interaction isotrope (potentiel à symétrie sphérique), l'équation (II.2.8) peut s'écrire [8] :

$$\sigma_{QM} = 2\pi \int_0^{\pi} (1 - \cos \chi) \sigma(\chi) \sin \chi d\chi \quad (\text{II.2.9})$$

Il faut noter que cette formule est la même qui apparaît dans le calcul des intégrales de collision relatives aux coefficients de transport. La méthode numérique qui permet l'évaluation de cette intégrale ainsi que les singularités qui lui sont associées seront présentées dans le troisième chapitre.

II.3 Collisions binaires

Pour mieux comprendre les phénomènes de transport dans les gaz, particulièrement dans les plasmas, on fait appel à l'étude des collisions inter-particulaires. À l'échelle macroscopique les caractéristiques physiques d'un plasma ou d'un gaz d'une façon générale, dépendent fortement des interactions entre particules et des forces qui les régissent à l'échelle microscopique.

En terme macroscopique, la notion de collision est définie comme un contact physique entre deux corps. A l'échelle atomique ou moléculaire les collisions sont vues comme des interactions entre des forces associées à chaque particule [8]. Les forces qui gouvernent ces interactions peuvent être distinguées par leur portée : on parle alors, soit d'interaction à longue portée soit d'interaction à courte portée [6].

Les collisions binaires sont classées en deux catégories différentes, les collisions élastiques et les collisions inélastiques. Dans le cas des collisions élastiques, la quantité de mouvement, la masse et l'énergie sont conservées avant et après la collision, c-à-d qu'il n'y a ni création ni annihilation de particules et l'état interne des particules reste le même. Pour les collisions inélastiques, l'état interne de certaines ou toutes les particules peut être changé et il peut y avoir de nouvelles particules (création) ou disparition (annihilation). Par exemple, une particule chargée peut être combinée avec une autre pour constituer

une particule neutre, ou bien dans le cas contraire, une particule neutre peut se détacher d'un électron pour former un ion (ionisation).

II.3.1 Description dynamique d'une collision binaire

Dans cette partie, on ne s'intéressera qu'à l'étude des collisions élastiques sous une approche classique. Dans le cas quantique, les corrections qui sont apportées aux calculs des sections efficaces (voir section II.2) obtenues classiquement sont souvent négligeables [56, 57].

Nous allons traiter dans ce qui va suivre les équations de mouvement de deux particules en interaction mutuelle dans un champ de potentiel (voir section II.1) associé à ces deux particules [58].

Considérant deux particules qui ont pour masse m et M , elles interagissent l'une avec l'autre via un potentiel d'interaction $V(r)$, qui dépend uniquement de la distance r qui sépare les deux particules. Les vecteurs \vec{R}_m et \vec{R}_M correspondent aux positions de chacune des deux particules m et M , respectivement. En appliquant le principe fondamental de la dynamique (lois de Newton) sur chaque particule, on obtient :

$$\vec{F}_m = m \frac{d^2 \vec{R}_m}{dt^2} = m \vec{\ddot{R}}_m \quad (\text{II.3.1})$$

$$\vec{F}_M = M \frac{d^2 \vec{R}_M}{dt^2} = M \vec{\ddot{R}}_M = -\vec{F}_m \quad (\text{II.3.2})$$

\vec{F}_m et \vec{F}_M sont les forces agissant, respectivement, sur m et M , et qui dérivent du potentiel $V(r)$. L'égalité entre les deux forces $F_m = -F_M$ signifie que la seule force s'exerçant sur la particule m est due à la présence de la particule M et vice versa.

Afin de simplifier le traitement du mouvement, nous introduisons la position du centre de masse \vec{R} qui est défini par :

$$\vec{R} = \frac{m\vec{R}_m + M\vec{R}_M}{m + M} \quad (\text{II.3.3})$$

Si on dérive l'équation (II.3.3) deux fois par rapport au temps, on obtient :

$$\vec{\ddot{R}} = \frac{m\vec{\ddot{R}}_m + M\vec{\ddot{R}}_M}{m + M} \quad (\text{II.3.4})$$

On remarque bien que si $\vec{\ddot{R}} = 0$, cela veut dire que le mouvement du centre de masse relatif aux deux particules est **uniforme** (sans accélération).

Maintenant, nous allons combiner l'équation (II.3.1) avec (II.3.2), pour obtenir une équation sous la forme suivante :

$$\vec{F}_m = \mu \frac{d^2}{dt^2} (\vec{R}_m - \vec{R}_M) \quad (\text{II.3.5})$$

μ représente la masse réduite des deux particules m et M , et qui est donnée par :

$$\mu = \frac{mM}{m + M} \quad (\text{II.3.6})$$

On rappelle que \vec{r} est le vecteur formé par \vec{R}_m et \vec{R}_M , tel que $\vec{r} = \vec{R}_m - \vec{R}_M$. La direction de la force \vec{F}_m est donnée par le vecteur \vec{r} , par conséquent le mouvement relatif (particule réduite) a la même forme que pour chacune des deux particules de masses respectives m et M (voir équations (II.3.1) et (II.3.2)).

II.3.1.1 La trajectoire des deux particules à deux dimensions

Pour trouver la trajectoire des deux particules m et M dans le système du laboratoire, on résoudra l'équation (II.3.5) comme suit :

d'abord on multiplie (II.3.5) par le vecteur \vec{r} , ensuite on remplace $\vec{R}_m - \vec{R}_M$ par \vec{r} :

$$\vec{r} \wedge \vec{F}_m = \vec{r} \wedge \mu \frac{d^2 \vec{r}}{dt^2} \quad (\text{II.3.7})$$

Nous avons vu précédemment que \vec{F}_m est dans la même direction que le vecteur \vec{r} , par conséquent :

$$\vec{r} \wedge \vec{F}_m = \vec{0} \quad (\text{II.3.8})$$

On note que la formule (II.3.8) n'est vraie que dans l'hypothèse où la force intermoléculaire (inter-particulaire) est une force centrale dérivant d'un potentiel à symétrie sphérique. De plus, la force en question dépend uniquement de la distance séparant les particules. Pour les molécules dipolaires qui se trouvent dans des états excités, cette hypothèse n'est plus valable, par conséquent tout ce qui va suivre dans les calculs, notamment le calcul de l'angle de déflexion χ qui est primordial pour la détermination des intégrales de collision, n'est valable que si cette hypothèse est justifiée [6].

On peut écrire alors :

$$\vec{r} \wedge \mu \frac{d^2 \vec{r}}{dt^2} = \vec{0} \quad (\text{II.3.9})$$

Cette équation peut être écrite sous la forme :

$$\frac{d}{dt} \left[\vec{r} \wedge \frac{d\vec{r}}{dt} \right] - \left[\frac{d\vec{r}}{dt} \wedge \frac{d\vec{r}}{dt} \right] = \vec{0} \quad (\text{II.3.10})$$

Le second terme est nul puisque $d\vec{r}/dt$ est colinéaire à lui-même. On intègre le premier terme par rapport au temps, et on obtient :

$$\int \left\{ \frac{d}{dt} \left[\vec{r} \wedge \frac{d\vec{r}}{dt} \right] \right\} dt = \vec{r} \wedge \frac{d\vec{r}}{dt} = \vec{k} \quad (\text{II.3.11})$$

Ce qui fait :

$$\vec{r} \wedge \vec{v} = \vec{k} \quad (\text{constante}) \quad (\text{II.3.12})$$

avec \vec{v} une vitesse relative des deux particules qu'on peut écrire comme suit :

$$\vec{v} = \frac{d\vec{r}}{dt} = \frac{d(\vec{R}_m - \vec{R}_M)}{dt} = \frac{d\vec{R}_m}{dt} - \frac{d\vec{R}_M}{dt} = \vec{V}_m - \vec{V}_M \quad (\text{II.3.13})$$

\vec{k} est un vecteur constant indépendant du temps, perpendiculaire au plan formé par \vec{r} et \vec{v} .

D'après l'équation (II.3.12), \vec{k} peut prendre la dimension d'un moment cinétique divisé par une masse, cela peut se traduire par le fait que la collision des deux particules m et M ne se passe que dans un plan perpendiculaire au moment cinétique créé par la vitesse relative \vec{v} de m et M ainsi que par leur position relative. Ainsi, le problème a été réduit à deux dimensions.

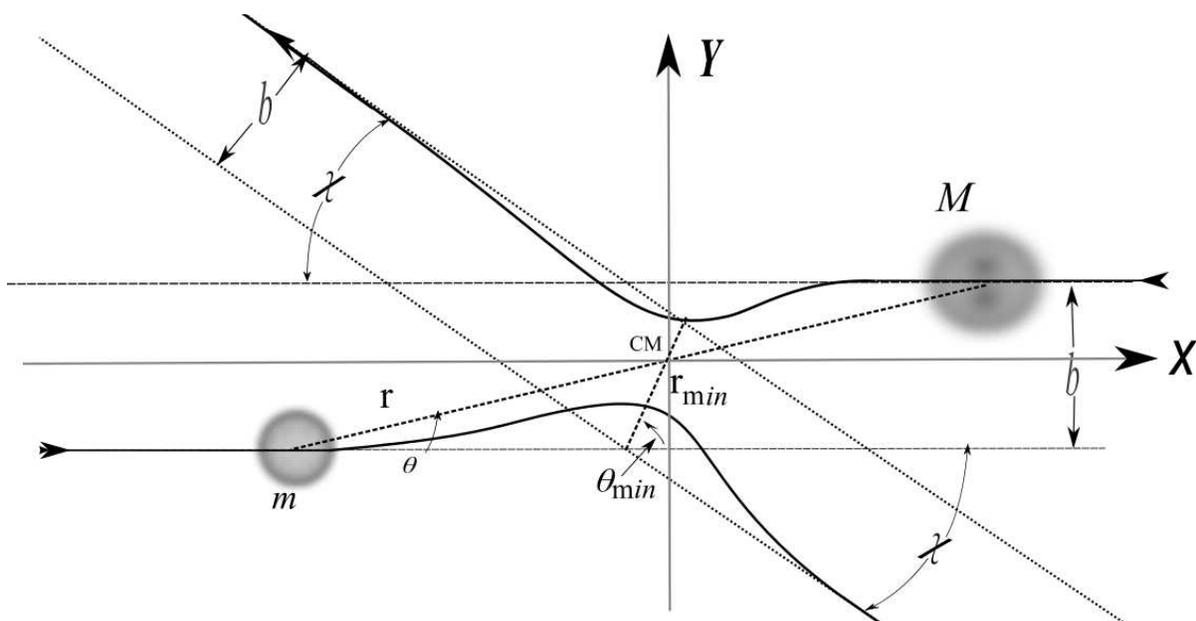


FIGURE II.3 – Représentation typique d'une collision élastique entre deux particules m et M . Le potentiel d'interaction mis en jeu est composé d'une partie attractive et d'une autre répulsive.

La figure II.3 montre une collision entre deux particules m et M qui se fait dans un plan XY perpendiculaire au vecteur \vec{k} . b est le paramètre d'impact, θ est l'angle qui détermine l'orientation instantanée du vecteur \vec{r} qui correspond à la distance séparant les deux particules. La valeur de l'angle θ_{min} correspond à la distance minimale d'approche r_{min} . On définit χ comme étant l'angle de déflexion ou l'angle de diffusion, qui est la seule caractéristique de la collision qui nous intéressera par la suite pour calculer les coefficients de transport (voir les sections I et II.3.2).

On peut distinguer sur la figure II.3 deux régions différentes, une zone où l'influence du potentiel répulsif domine sur une portée de l'ordre de r_{min} vers le centre de masse CM , et une seconde zone qui manifeste l'existence d'un champ de potentiel attractif à longue portée. Physiquement, c'est la contribution des deux potentiels attractif et répulsif qui contrôle l'allure de la trajectoire des particules dans une collision élastique.

II.3.1.2 Réduction du problème à un seul corps

Dans une collision élastique, les lois de conservation de la quantité de mouvement et de l'énergie avant et après la collision sont données comme suit :

$$\begin{cases} m\vec{V}_m + M\vec{V}_M = m\vec{V}'_m + M\vec{V}'_M \\ \frac{1}{2}mV_m^2 + \frac{1}{2}MV_M^2 = \frac{1}{2}mV_m'^2 + \frac{1}{2}MV_M'^2 \end{cases} \quad (\text{II.3.14})$$

Sur le plan XY , l'énergie cinétique T_{CM} des particules dans le système du centre de masse, peut s'écrire en coordonnées cartésiennes de la façon suivante :

$$T_{CM} = \frac{1}{2}m(\dot{x}_m^2 + \dot{y}_m^2) + \frac{1}{2}M(\dot{x}_M^2 + \dot{y}_M^2) \quad (\text{II.3.15})$$

Pour simplifier le problème, on procède au changement de coordonnées, et on passe aux coordonnées polaires. L'expression de T_{CM} sera écrite en fonction de deux variables r et θ , tel que θ peut varier de 0 à 2π et r dans un premier temps, varie de 0 à ∞ .

Les deux systèmes de coordonnées sont reliés par les équations suivantes :

$$\begin{cases} x_m = -\frac{M}{m+M}r \cos \theta \\ y_m = -\frac{M}{m+M}r \sin \theta \end{cases} \quad (\text{II.3.16})$$

$$\begin{cases} x_M = \frac{m}{m+M}r \cos \theta \\ y_M = \frac{m}{m+M}r \sin \theta \end{cases} \quad (\text{II.3.17})$$

$$\begin{cases} x_m = -\frac{M}{m+M}r \cos \theta \\ y_m = -\frac{M}{m+M}r \sin \theta \end{cases} \quad (\text{II.3.18})$$

$$\begin{cases} x_M = \frac{m}{m+M}r \cos \theta \\ y_M = \frac{m}{m+M}r \sin \theta \end{cases} \quad (\text{II.3.19})$$

En combinant ces quatre équations avec l'équation (II.3.15), l'expression de T_{CM} est donnée en fonction de r et θ comme suit :

$$T_{CM} = \frac{1}{2}\mu(\dot{r}^2 + r^2\dot{\theta}^2) \quad (\text{II.3.20})$$

De la même façon on cherche à simplifier l'expression du moment angulaire J_{CM} relatif aux deux particules.

$$\vec{J}_{CM} = (\vec{r}_m \wedge m\vec{V}_m) + (\vec{r}_M \wedge M\vec{V}_M) \quad (\text{II.3.21})$$

après projection

$$J_{CM} = (r_m m r_m \dot{\theta}) + (r_M M r_M \dot{\theta}) = \mu r^2 \dot{\theta} \quad (\text{II.3.22})$$

r_m et r_M correspondent aux distances séparant m et M du centre de masse CM , respectivement.

En vertu des lois de conservation de la dynamique, la quantité J_{CM} est conservée lors d'une collision. Pour pouvoir étudier le problème de collision dans ce cas-là, il suffit d'ajouter l'expression de l'énergie potentielle $V(r)$ du système de particules à l'énergie cinétique T_{CM} , ce qui simplifie le problème de deux corps à un seul corps.

La figure II.4 décrit le problème à une seule particule (fictive), qui est équivalent dynamiquement à un problème à deux particules [59]. La particule de masse μ est diffusée par un centre diffuseur qui a pour potentiel $V(r)$. Les quantités r , r_{min} , θ , θ_{min} , b et χ ont la même signification que celles représentées sur la figure II.3. Une certaine symétrie apparaît sur la figure II.4. En effet, on constate que l'allure de la trajectoire de μ avant la collision est symétrique à celle après par rapport à la ligne de la distance minimale d'approche ($\chi = \pi - 2\varphi$). Cette régularité est l'une des conséquences de la symétrie sphérique du potentiel d'interaction.

On définit v_0 comme étant la vitesse initiale de la particule fictive μ , c'est à dire, lorsque $r \rightarrow \infty$, l'influence de $V(r)$ sera alors négligeable. Si on applique les lois de conservation de l'énergie totale et du moment angulaire sur le système en question (entre $r \rightarrow \infty$ et juste après la collision), on aboutit au système d'équations suivant :

$$\begin{cases} \mu b v_0 = \mu r^2 \dot{\theta} \\ \frac{1}{2} \mu v_0^2 = \frac{1}{2} \mu (\dot{r}^2 + r^2 \dot{\theta}^2) + V(r) \end{cases} \quad (\text{II.3.23})$$

Avec ces deux équations, on a une description complète du mouvement en terme de potentiel d'interaction, d'énergie cinétique initiale (vitesse initiale) ainsi que du paramètre d'impact.

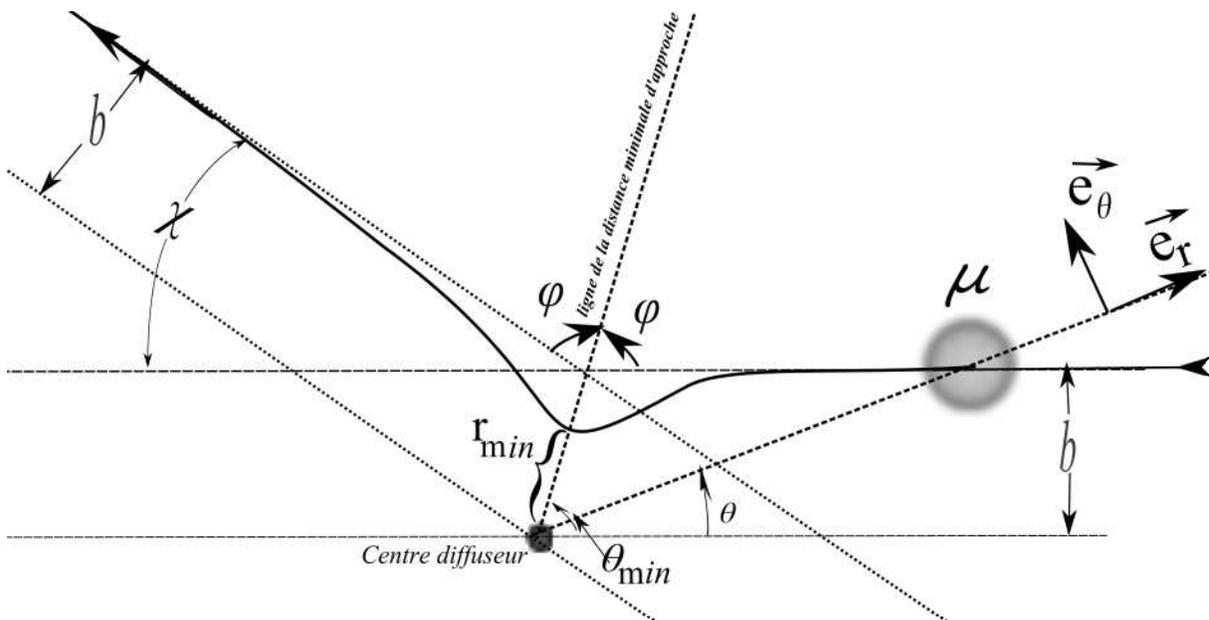


FIGURE II.4 – Représentation typique de la déviation de la particule fictive μ (problème à un seul corps) par un centre diffuseur, dans la base du système de coordonnées polaires. Le potentiel d'interaction auquel est soumise la particule μ , est à symétrie sphérique.

On peut encore simplifier le problème de deux dimensions à une seule dimension en introduisant le potentiel effectif V_{eff} de façon à éliminer la variable θ dans les équations précédentes. L'équation (II.3.23) devient alors :

$$\frac{1}{2} \mu v_0^2 = \frac{1}{2} \mu \dot{r}^2 + \left(V(r) + \frac{\mu v_0^2 b^2}{2r^2} \right) \quad (\text{II.3.24})$$

telle que :

$$V_{eff} = V(r) + \frac{\mu v_0^2 b^2}{2r^2} \quad (\text{II.3.25})$$

L'équation (II.3.24) décrit le mouvement de la particule μ à un seul degré de liberté (suivant l'axe des r) avec une énergie totale $\frac{1}{2}\mu v_0^2$ et elle est soumise à un champ de potentiel effectif V_{eff} . Le second terme de l'équation (II.3.25) ($\frac{\mu v_0^2 b^2}{2r^2}$) représente l'énergie cinétique rotationnelle du système, on note que c'est une fonction monotone inversement proportionnelle à r et qui est toujours positive. Ce dernier peut être considéré comme une source fictive d'une force centrifuge. Ceci nous permet, entre autres, de faire une étude qualitative des mouvements possibles de la particule μ et de mettre en évidence certaines singularités (voir section II.3.4).

II.3.2 Évaluation de l'angle de déflexion

Comme mentionné dans la section précédente, l'angle de déflexion χ est la plus importante caractéristique de l'étude des collisions élastiques dans le calcul des coefficients de transport. Il est défini comme l'angle entre les vecteurs vitesse relatifs aux deux particules avant et après la collision (voir la figure II.3). L'angle χ pourrait être relié à θ_{min} via la relation [6, 59] :

$$\chi = \pi - 2\theta_{min} \quad (\text{II.3.26})$$

θ_{min} correspond à la valeur de la variable θ pour la quelle la distance interparticulaire r est à son minimum. Pour trouver θ_{min} et r_{min} on résout $(dr/d\theta)$ comme suit :

L'expression de dr est donnée à partir de l'équation (II.3.24) et celle de $d\theta$ est donnée à partir de (II.3.23), en combinant les deux on obtient :

$$\frac{dr}{d\theta} = \frac{dr/dt}{d\theta/dt} = \pm \left(\frac{r^2}{b} \right) \left[1 - \frac{V(r)}{\mu v_0^2/2} - \frac{b^2}{r^2} \right]^{1/2} \quad (\text{II.3.27})$$

Par raison de symétrie, les signes \pm correspondent, respectivement, à la branche sortante et entrante de la trajectoire. A la distance minimale d'approche on a $dr/d\theta = 0$, ce qui veut dire :

$$1 - \frac{V(r)}{\mu v_0^2/2} - \frac{b^2}{r^2} = 0 \quad (\text{II.3.28})$$

\implies

$$r^2 \left(1 - \frac{V(r)}{\mu v_0^2/2} \right) - b^2 = 0 \quad (\text{II.3.29})$$

Autrement dit, la distance minimale d'approche r_{min} , vérifie l'égalité entre le potentiel d'interaction et l'énergie cinétique du système :

$$V(r_{min}) = \frac{\mu v_0^2}{2} \left(1 - \frac{b^2}{r_{min}^2} \right) \quad (\text{II.3.30})$$

A priori, l'équation (II.3.29) admet deux racines, dont la plus grande (positive) correspond à r_{min} . On calculera, par la suite, numériquement les valeurs de r_{min} pour différentes énergies $E = \mu v_0^2/2$ et différents paramètres d'impact b .

Pour chercher la valeur de θ_{min} on intègre l'équation (II.3.27) (lorsque $\theta \rightarrow 0 \implies r \rightarrow \infty$ et lorsque $\theta \rightarrow \theta_{min} \implies r \rightarrow r_{min}$).

$$\theta_{min} = \int_0^{\theta_{min}} d\theta = - \int_{\infty}^{r_{min}} \frac{\frac{b}{r^2} dr}{\left[1 - \frac{V(r)}{E} - \frac{b^2}{r^2}\right]^{1/2}} \quad (\text{II.3.31})$$

On remplace cette relation dans l'équation (II.3.26), on obtient ainsi la formule finale de l'angle de déflexion :

$$\chi(b, E) = \pi - 2b \int_{r_{min}}^{\infty} \frac{\frac{dr}{r^2}}{\left[1 - \frac{V(r)}{E} - \frac{b^2}{r^2}\right]^{1/2}} \quad (\text{II.3.32})$$

Dans la plupart des cas, la résolution de cette équation se fait numériquement, néanmoins, il existe des solutions analytiques pour certains choix du potentiel $V(r)$, notamment les exemples qui sont traités dans la section suivante II.3.3.

II.3.3 Résolution analytique de l'angle de déflexion

Nous allons traiter dans cette section des exemples de choix de potentiels qui nous permettront d'évaluer, analytiquement, l'angle de déflexion en fonction du paramètre d'impact b et de l'énergie E .

Il existe des potentiels d'interaction purement attractifs de la forme :

$$V(r) = -\frac{k}{r^n} \quad (\text{II.3.33})$$

Et purement répulsifs de la forme :

$$V(r) = \frac{k'}{r^n} \quad (\text{II.3.34})$$

k et k' sont des constantes positives liées à la nature de l'interaction en question ; n est un entier naturel ($n \geq 1$).

Le tableau II.3 montre quelques types d'interaction selon le nombre n .

TABLE II.3 – Différents types d'interaction particulière correspondant aux différents nombre n [50].

| n | Type d'interaction |
|-----|---|
| 1 | ion-ion |
| 2 | ion-dipôle |
| 3 | dipôle-dipôle |
| 4 | ion-dipôle induit |
| 5 | dipôle-dipôle induit |
| 6 | dipôle induit-dipôle induit (aussi connue comme Van der Waals, London, ou dispersion moléculaire) |

La figure II.5 montre des trajectoires typiques pour deux potentiels d'interaction différents : un potentiel purement attractif (figure II.5a) et un autre purement répulsif (figure II.5b). On a tracé plusieurs trajectoires hyperboliques pour différents paramètres d'impacts b pour les deux cas. L'interaction dans le cas d'un potentiel répulsif est similaire à la diffusion Rutherford.

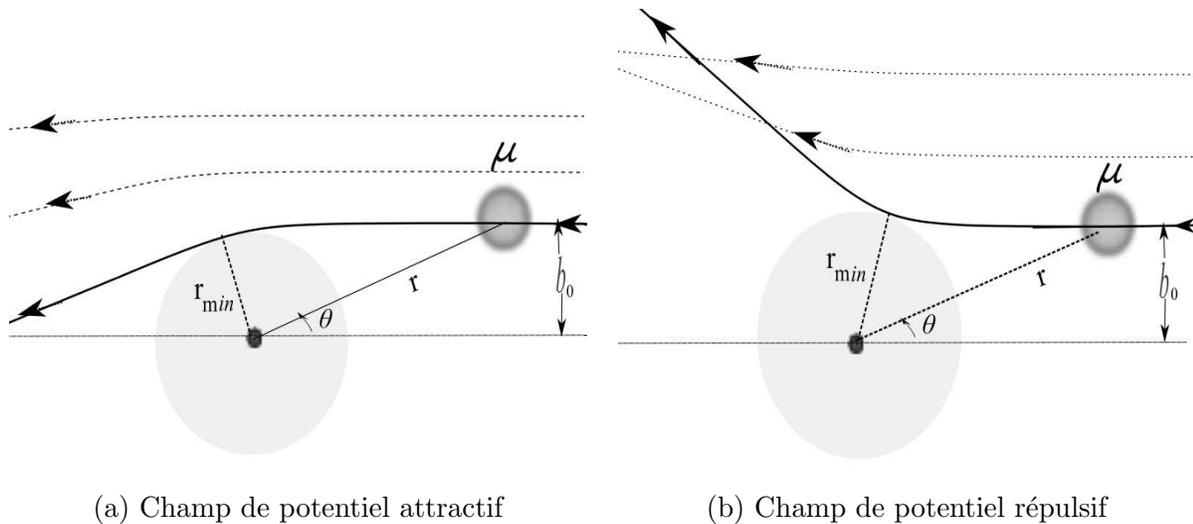


FIGURE II.5 – Représentation des trajectoires typiques correspondant à des potentiels attractif II.5a et répulsif II.5b en fonction de l'énergie relative E et de différents paramètres d'impact b . La distance inter-particule décroît jusqu'à une distance minimale d'approche r_{min} pour les trajectoires qui ont un paramètre d'impact b_0 .

L'angle de déflexion peut être évalué en terme de fonctions trigonométriques quand $n = 1$ ou 2 , et en terme d'intégrales elliptiques pour $n = \pm 6, \pm 4, \pm 3$ voir [60].

Dans le cas où $n = 1$, $V(r)$ correspond à un potentiel répulsif par exemple un potentiel type coulombien pour deux charges de même signe et il correspond aussi, à un potentiel attractif, exemple d'un potentiel gravitationnel ou coulombien pour deux charges de signe opposé. Pour le potentiel attractif, l'équation (II.3.32) devient :

$$\chi(b, E) = \pi - 2b \int_{r_{min}}^{\infty} \frac{\frac{dr}{r^2}}{\left[1 + \frac{k}{E} \frac{1}{r} - \frac{b^2}{r^2}\right]^{1/2}} \quad (\text{II.3.35})$$

Et l'équation (II.3.29) pour r_{min} sera écrite de la façon suivante :

$$r_{min}^2 + r_{min} \frac{k}{E} - b^2 = 0 \quad (\text{II.3.36})$$

C'est une équation du second degré qui admet deux racines, dont la plus grande (positive) a une signification physique et correspond à r_{min} .

$$r_{min} = -\frac{k}{2E} + \frac{1}{2} \sqrt{\left(\frac{k}{E}\right)^2 + 4b^2} \quad (\text{II.3.37})$$

On effectue un changement de variables dans l'équation (II.3.35), en introduisant la variable x telle que : $x = r_{min}/r$, on obtient alors :

$$\chi(b, E) = \pi - 2 \int_0^1 \frac{dx}{\left[\left(\frac{r_{min}}{b} \right)^2 - x^2 + x \left(\frac{k r_{min}}{Eb^2} \right) \right]^{1/2}} \quad (\text{II.3.38})$$

On substitue l'expression de k/E obtenue à partir de l'équation (II.3.36), tel que :

$$\frac{k}{E} = \frac{b^2 - r_{min}^2}{r_{min}} \quad (\text{II.3.39})$$

Ce qui donne :

$$\chi(b, r_{min}) = \pi - 2 \int_0^1 \frac{dx}{\left[\left(\frac{r_{min}}{b} \right)^2 - x^2 + x \left(1 - \frac{r_{min}^2}{b^2} \right) \right]^{1/2}} \quad (\text{II.3.40})$$

La solution de cette équation (II.3.40) est de la forme suivante :

$$\int \frac{1}{\sqrt{\alpha + \beta x + \gamma x^2}} dx = \frac{1}{\sqrt{-\gamma}} \arcsin \left(\frac{\beta + 2\gamma x}{\sqrt{\beta^2 - 4\alpha\gamma}} \right) \quad (\text{II.3.41})$$

En appliquant ce résultat sur (II.3.40), on aboutit à :

$$\chi = \pi - 2 \left[-\arcsin \left(\frac{1 - \left(\frac{r_{min}}{b} \right)^2 - 2x}{1 + \left(\frac{r_{min}}{b} \right)^2} \right) \right]_0^1 = -2 \arcsin \left(\frac{b^2 - r_{min}^2}{b^2 + r_{min}^2} \right) \quad (\text{II.3.42})$$

\implies

$$\sin \left(-\frac{1}{2}\chi \right) = \left(\frac{b^2 - r_{min}^2}{b^2 + r_{min}^2} \right) \quad (\text{II.3.43})$$

En utilisant les relations trigonométriques, on obtient l'égalité suivante :

$$b^2 + r_{min}^2 = 2br_{min} \quad (\text{II.3.44})$$

Maintenant, nous allons combiner les équations (II.3.39), (II.3.42) et (II.3.44), pour aboutir à la formule finale de l'angle de déflexion χ correspondant à un potentiel attractif inversement proportionnel à r :

$$\chi(b, E) = -2 \arctan \left(\frac{k}{2bE} \right) \quad (\text{II.3.45})$$

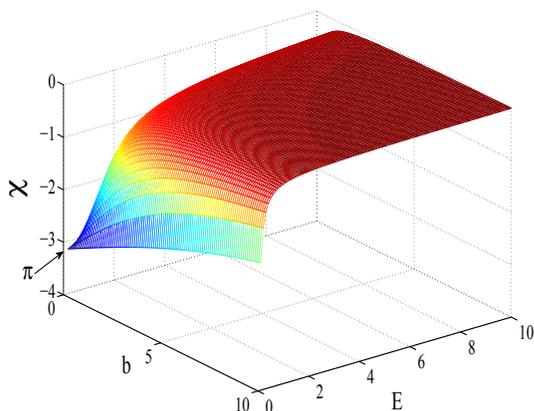
De la même manière, on évalue l'angle de déflexion dans le cas d'un potentiel répulsif, $V(r) = k'/r$, l'exemple d'un potentiel coulombien pour deux charges qui ont un signe opposé. Pour un tel potentiel, la distance minimale d'approche est donnée par :

$$r'_{min} = \frac{k'}{2E} + \frac{1}{2} \sqrt{\left(\frac{k'}{E} \right)^2 + 4b^2} \quad (\text{II.3.46})$$

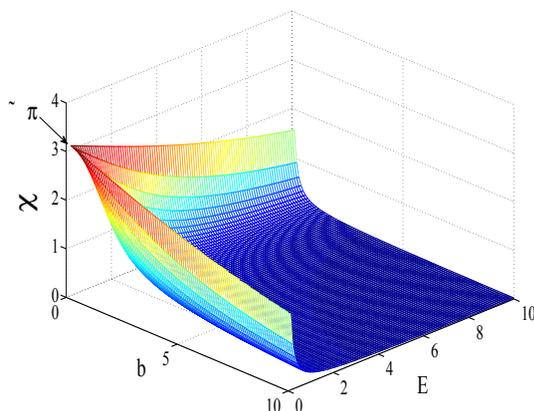
Et l'équation (II.3.45) devient :

$$\chi'(b', E) = 2 \arctan \left(\frac{k'}{2b'E} \right) \quad (\text{II.3.47})$$

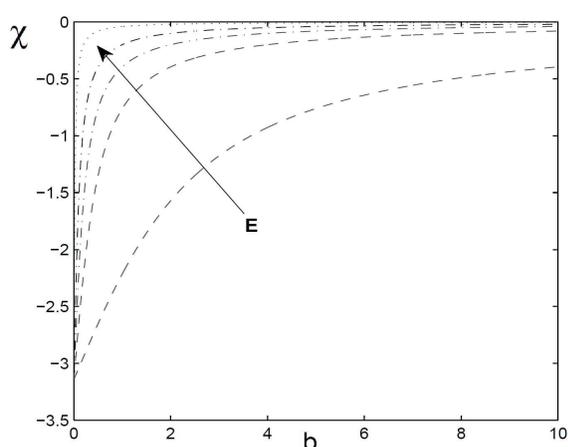
Pour plus de détails voir le livre de *Goldstein* [58].



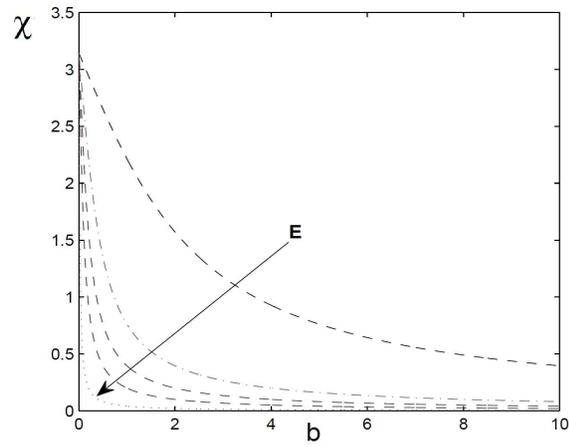
(a) Une vue 3D de l'angle de déflexion correspondant à un champ de potentiel attractif



(b) Une vue 3D de l'angle de déflexion correspondant à un champ de potentiel répulsif



(c) Une vue 2D de l'angle de déflexion correspondant à un champ de potentiel attractif



(d) Une vue 2D de l'angle de déflexion correspondant à un champ de potentiel répulsif

FIGURE II.6 – Une représentation 3D et 2D de l'angle de déflexion correspondant à un potentiel purement attractif et à un potentiel purement répulsif en fonction du paramètre d'impact b et de l'énergie E .

Dans la figure II.6, on a tracé l'angle de déflexion χ en 3D (figures II.6a et II.6b) et sa projection en 2D (figures II.6c et II.6d), dans les cas d'un potentiel attractif et répulsif, en fonction du paramètre d'impact b pour différentes énergies E . Les fonctions tracées sont des fonctions monotones, croissantes pour le cas attractif, et décroissantes pour le cas répulsif.

On observe sur la figure II.6 qu'à partir d'une certaine valeur du paramètre b , l'angle de déflexion devient très faible et tend vers zéro très lentement, ce qui signifie que les deux particules ne se voient plus au delà d'une certaine valeur limite du paramètre b .

On peut avoir une relation entre l'angle de déflexion correspondant à un potentiel attractif et celui d'un potentiel répulsif comme suit :

$$\chi'(b') = 2\pi - \chi(b) \quad (\text{II.3.48})$$

Nous considérons maintenant le cas où $n = 2$, l'équation (II.3.32) devient :

$$\chi(b, E) = \pi - 2b \int_{r_{min}}^{\infty} \frac{\frac{dr}{r^2}}{\left[1 + \frac{k}{E} \frac{1}{r^2} - \frac{b^2}{r^2}\right]^{1/2}} \quad (\text{II.3.49})$$

La distance minimale d'approche correspondante est déterminée à partir de :

$$b^2 = r_{min}^2 \left(1 + \frac{k}{E} \frac{1}{r_{min}^2}\right) \quad (\text{II.3.50})$$

ou

$$r_{min} = \sqrt{b^2 - \frac{k}{E}} \quad (\text{II.3.51})$$

A partir de la relation (II.3.51), on constate que r_{min} n'existe que si la condition $b^2 > k/E$ est satisfaite. On note que cette restriction n'est utilisée que pour un potentiel attractif ou un potentiel possédant une composante attractive (Lennard-Jones, Morse,..etc), pour un potentiel purement répulsif (coulombien) r_{min} existe toujours. On remarque que pour des énergies E très élevées $r_{min} \approx b$.

On pose $x = r_{min}/r$, ce qui rend l'équation (II.3.49) plus facile à résoudre, ce qui donne ainsi :

$$\chi(b, E) = \pi - 2b \int_{r_{min}}^{\infty} \frac{\frac{dx}{r_{min}}}{\left[1 - \left(\frac{b^2}{r_{min}^2} - \frac{k}{Er_{min}^2}\right) x^2\right]^{1/2}} \quad (\text{II.3.52})$$

En combinant les deux équations (II.3.50) et (II.3.52), on aboutit à :

$$\chi(b, r_{min}) = \pi - 2b \int_{r_{min}}^{\infty} \frac{\frac{dx}{r_{min}}}{\sqrt{1 - x^2}} \quad (\text{II.3.53})$$

Cette intégrale est écrite sous une forme dont on connaît la primitive, qui est fonction de $\arcsin(x)$. On peut donc écrire le résultat soit en fonction de b et de r_{min} :

$$\chi(b, r_{min}) = \pi - \left[\frac{2b}{r_{min}} \arcsin(x)\right]_0^1 = \pi \left(1 - \frac{b}{r_{min}}\right) \quad (\text{II.3.54})$$

soit en fonction de b et de E :

$$\chi(b, E) = \pi \left(1 - \frac{b}{\sqrt{b^2 - \frac{k}{E}}}\right) \quad (\text{II.3.55})$$

II.3.4 Étude asymptotique d'une collision binaire

Lors d'une collision binaire, différents phénomènes peuvent avoir lieu, ils sont fortement liés à la nature du potentiel d'interaction mis en jeu. Un potentiel purement répulsif ne peut diffuser une particule que d'un angle χ compris entre 0 et π . On verra par la suite que pour certains choix de potentiels attractifs ou de potentiels possédant une composante attractive (Lennard-Jones, Morse,...etc), l'angle de déflexion χ peut être supérieur à 2π ou même dans certains cas, il tend vers $-\infty$ pour un paramètre d'impact donné. Ces phénomènes se manifestent par la présence de plusieurs trajectoires (ou plusieurs paramètres d'impact) qui conduisent à un **même** angle de déflexion. Leur traitement est crucial, notamment pour une meilleure évaluation des sections efficaces. Ces types d'anomalies seront traités comme des singularités qui présentent des divergences ou des oscillations au niveau des sections efficaces.

On distingue trois sortes de singularités, souvent appelées dans la littérature anglo-saxonne : *Orbiting* ou *Spiraling*, *Rainbow* et *Glory scattering*.

II.3.4.1 Rainbow Scattering (diffusion arc en ciel)

Ce type de singularité se produit lorsque la dérivée de l'angle de déflexion par rapport au paramètre d'impact ($b = b_R$) est nulle, et le potentiel d'interaction possède un minimum.

$$\left[\frac{d\chi}{db} \right]_{b=b_R} = 0 \quad (\text{II.3.56})$$

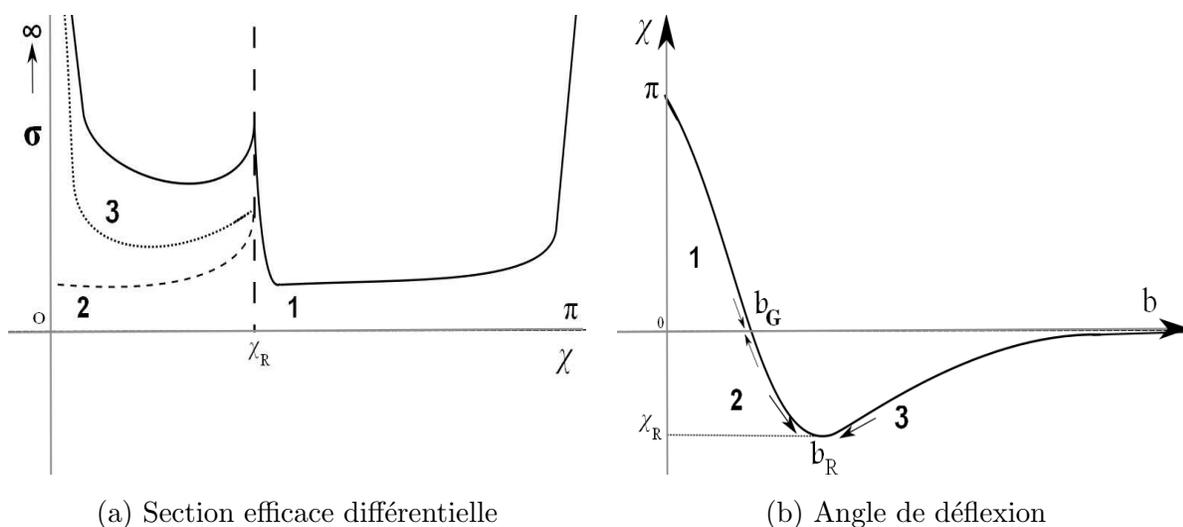


FIGURE II.7 – Représentation typique de l'angle de déflexion χ en fonction du paramètre d'impact b et la contribution du "Rainbow" dans la section efficace différentielle pour une énergie donnée dans le cas d'un potentiel type Lennard-Jones.

L'angle de déviation correspondant χ_R est appelé angle de "Rainbow" par analogie aux phénomènes optiques de diffusion de la lumière sur les fines gouttelettes de pluie donnant naissance à l'arc en ciel.

On donne la formule de la section efficace différentielle en fonction de l'angle de déflexion ainsi que du paramètre d'impact :

$$\sigma(\chi, b) = \left| \frac{b}{\sin \chi} \frac{db}{d\chi} \right|_{b=b_R} \quad (\text{II.3.57})$$

La disparition du terme $(d\chi/db)$ conduira à deux importantes conséquences, à savoir :

- (i) La stationnarité de l'angle χ avec b implique que pour certaines particules qui ont des paramètres d'impact légèrement différents les uns les autres seront diffusées avec un **même** angle de déflexion. La section efficace σ devient alors très grande pour de tels paramètres, en effet à $\chi = \chi_R$ l'équation (II.3.57) tend vers l'infini c.-à-d $\left(\frac{d\chi}{db}\right)^{-1} \rightarrow \infty$.
- (ii) Au voisinage de χ_R , les angles de diffusion qui sont possibles, seront limités au dessous de χ_R , c'est pourquoi on parle du côté clair ("bright side") de "Rainbow" pour $\chi < \chi_R$, et du côté sombre ("dark side") de "Rainbow" pour $\chi > \chi_R$.

Afin de pouvoir déterminer la section efficace au voisinage de χ_R , on voit bien qu'il faut d'abord résoudre le problème de singularité qui se pose. Pour cela on peut faire un développement limité de χ autour de l'angle de "Rainbow" :

$$\chi = \chi_R + \epsilon (b - b_R)^2 \quad (\text{II.3.58})$$

Avec :

$$\epsilon = \frac{1}{2} \left(\frac{d^2\chi}{db^2} \right)_{b=b_R} \quad (\text{II.3.59})$$

Maintenant on peut dériver facilement l'équation (II.3.58) par rapport à b , ce qui donne :

$$\frac{d\chi}{db} = 2\epsilon (b - b_R) \quad (\text{II.3.60})$$

L'image à droite de la figure II.7 nous montre l'allure de l'angle de déflexion χ en fonction du paramètre d'impact b pour une interaction de deux particules soumises à un potentiel type Lennard-Jones. On voit que pour des paramètres d'impact légèrement inférieurs (branche **2**) ou légèrement supérieurs (branche **3**) à b_R , ils conduisent au même angle de déflexion, par conséquent la section efficace classique est donnée par la sommation de différentes contributions. Dans notre cas on a une même contribution des deux branches (**2** et **3**).

En combinant les équations (II.3.57), (II.3.58) et (II.3.60) on trouve que la section efficace peut être constituée par les deux branches ($b < b_R$ ou $b > b_R$) :

$$\sigma(\chi, b_R) = \frac{b_R}{\sin \chi} \left(\frac{1}{\sqrt{|\epsilon(\chi - \chi_R)|}} \right) \quad (\text{II.3.61})$$

Il existe une troisième branche qui a la même contribution en valeur absolue, cela veut dire que l'on peut trouver un paramètre d'impact dans la branche **1** (voir la figure II.7) qui conduit au même angle de déflexion en valeur absolue, ce qui contribue dans le calcul de la section efficace totale.

Sur la figure II.7 (à gauche) on a tracé les trois branches (en pointillé) qui contribuent à la section efficace totale (en trait continu) en fonction de différents angles de déflexion pour une énergie donnée.

II.3.4.2 Glory Scattering

Dans certains cas, l'angle de déflexion peut avoir des valeurs de multiple de π pour un paramètre d'impact non nul ($\chi = -n\pi$, n est entier et $b_n \neq 0$). Compte tenu de l'équation (II.3.57), la section efficace devient infinie lorsque $\chi = \chi_G = -n\pi$ car $(\sin(-n\pi))^{-1} \rightarrow \infty$. Ce type de singularité est appelé "backward glory" pour $n = 1, 3, 5\dots$ et "forward glory" pour $n = 0, 2, 4\dots$. χ_G correspond à l'angle de "Glory". On rencontre souvent le cas où $n = 0$, c'est à dire l'angle de déflexion est nul, ce phénomène correspond à une zone d'interaction où la partie attractive compense la partie répulsive du potentiel intermoléculaire (voir la figure II.8, la trajectoire correspondant à $\chi = 0$).

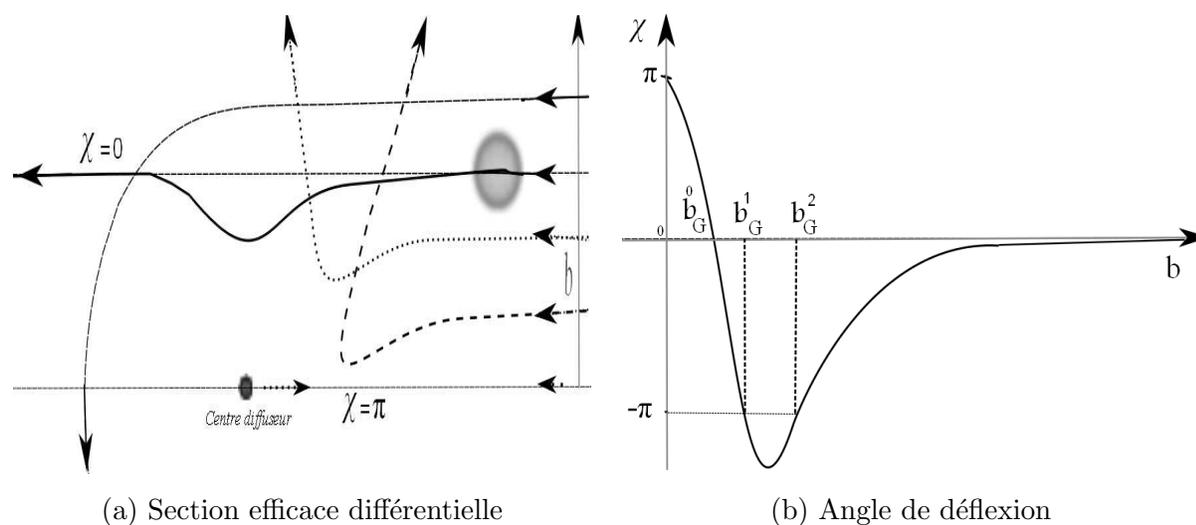


FIGURE II.8 – Représentation typique de l'angle de déflexion χ en fonction du paramètre d'impact b (à droite) et une représentation d'une trajectoire correspondant au phénomène de "Glory" d'une particule fictive soumise à un potentiel type Lennard-Jones (à gauche).

Pour résoudre ce problème de singularité, on effectue une approximation linéaire de la fonction de l'angle de déflexion (χ) au voisinage de l'angle de "Glory" (χ_G) :

$$\chi = \chi_G + \xi (b - b_G) \quad (\text{II.3.62})$$

Avec :

$$\xi = \left(\frac{d\chi}{db} \right)_{b=b_G}$$

Par conséquent, la section efficace différentielle autour de χ_G est la somme de deux contributions identiques des régions avec $\chi > \chi_G$ et $\chi < \chi_G$. La section efficace (II.3.57) prend alors la forme suivante :

$$\sigma(\chi, b_G) = \frac{2b_G}{|\xi|} \left(\frac{1}{|\sin(\chi - \chi_G)|} \right) \quad (\text{II.3.63})$$

Compte tenu de l'approximation $\sin(\theta \approx 0) = \theta$, l'équation précédente (II.3.63) devient :

$$\sigma(\chi, b_G) = \frac{2b_G}{|\xi|} \left(\frac{1}{|\chi - \chi_G|} \right) \quad (\text{II.3.64})$$

Sur la figure II.8 (à gauche), nous avons tracé plusieurs trajectoires correspondantes aux différents paramètres d'impact, et nous avons mis en évidence le phénomène de "Glory" dans le cas où l'angle de "Glory" est nul ($\chi_G = 0$), qui représente d'ailleurs la situation la plus fréquente par rapport aux autres ($\chi_G = -\pi, -2\pi, \dots$). On note que le cas où $\chi = \pi$ ne manifeste pas une singularité dans le calcul de la section efficace, puisqu'il n'est envisageable que pour un paramètre d'impact nul ($\chi = \pi \Rightarrow b = 0$). Néanmoins on rencontre parfois des situations où $\chi_G = -\pi$, (voir la figure II.8, à droite), qui sont engendrées par la nature du potentiel d'interaction ainsi que par l'énergie mise en jeu.

II.3.4.3 Orbiting Collision (spiral scattering)

Le phénomène d' "Orbiting" ou "Spiraling" est celui le plus traité parmi les singularités présentes dans l'étude d'une collision élastique. Physiquement, ce type de phénomène se manifeste aussi bien à l'échelle astronomique (satellisation des planètes, mise en orbite d'un satellite artificiel...etc) qu'à l'échelle atomique (capture électronique, interaction nucléaire...etc.). Les deux particules m et M rentrant en collision, peuvent constituer un système où, soit une particule tourne autour de l'autre ($m \ll M$), soit les deux particules tournent l'une autour de l'autre mutuellement ($m \cong M$) (voir la figure II.9).

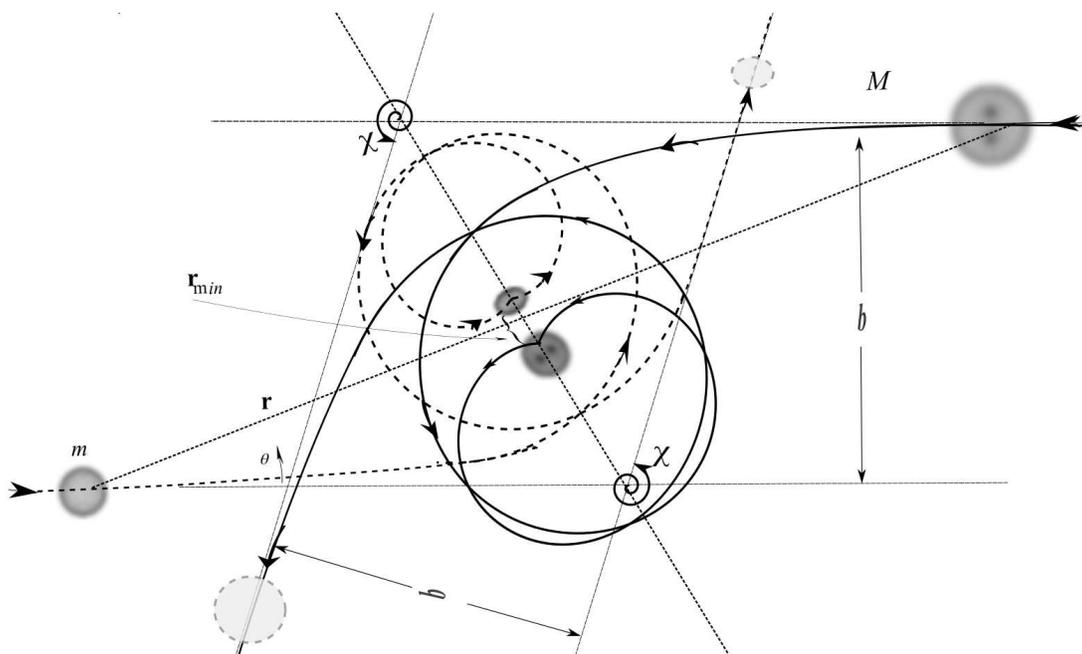


FIGURE II.9 – Représentation de la trajectoire des deux particules m et M qui tournent l'une autour de l'autre en forme spirale. L'angle de déflexion χ est supérieur à 2π (Orbiting).

Nous avons vu précédemment dans la section II.3.1.2 que pour réduire le problème de diffusion (collision binaire) à une dimension r , nous devrions ajouter au potentiel d'interaction $V(r)$, un potentiel centrifuge $V_c(r)$ qui forme une barrière centrifuge. Le potentiel

résultant constitue ainsi un potentiel effectif qui contribue réellement au mouvement de la particule fictive.

$$V_{eff}(r) = V_c(r) + V(r) \quad (\text{II.3.65})$$

Le potentiel $V_c(r)$ peut s'écrire en fonction du moment angulaire, $L = \mu v_0 b$, du système :

$$V_c(r) = \frac{L^2}{2\mu r^2} \quad (\text{II.3.66})$$

La particule fictive μ se rapproche du centre diffuseur avec une énergie initiale E , cette quantité est conservée tout au long de la trajectoire, elle est donnée par la somme du potentiel effectif et de l'énergie cinétique radiale :

$$E = \frac{1}{2}\mu\dot{r}^2 + V_{eff}(r) \quad (\text{II.3.67})$$

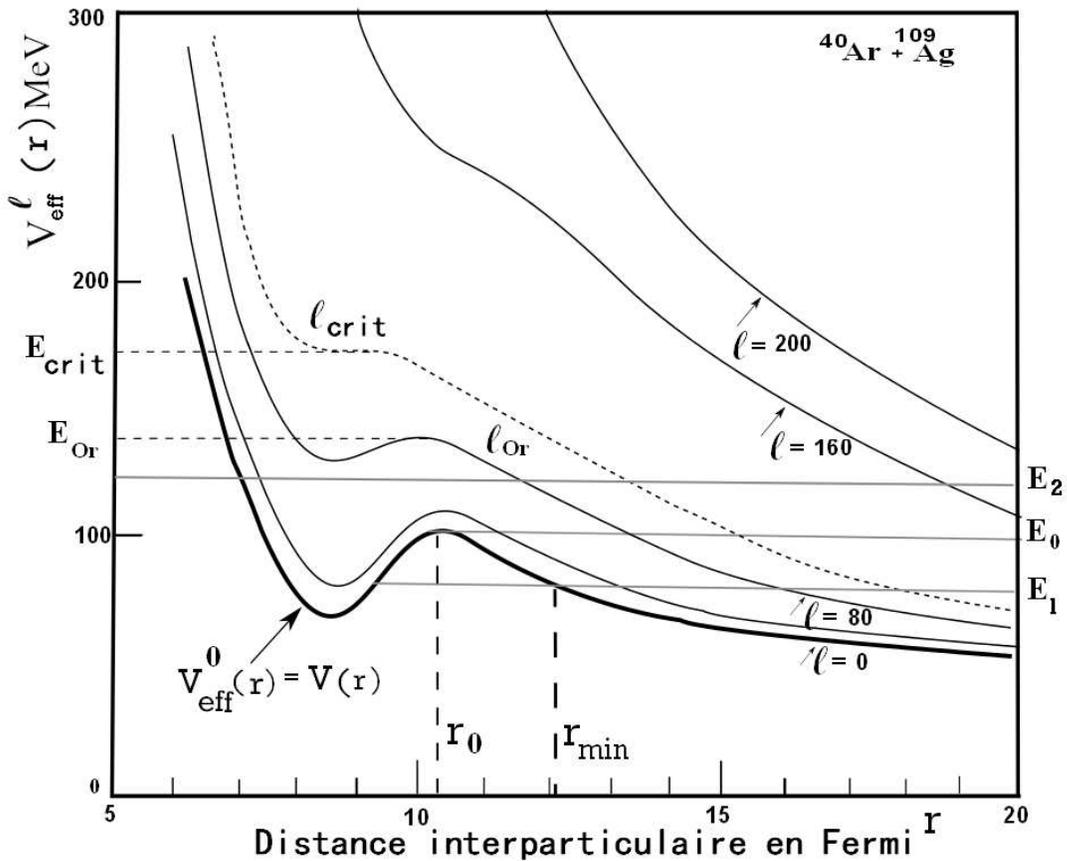


FIGURE II.10 – Représentation du potentiel effectif V_{eff}^l de l'interaction $^{40}\text{Ar} + ^{109}\text{Ag}$ en fonction de la distance inter-particulaire r pour différents paramètres d'impact b (ou pour différents moments angulaires $\ell = \mu v_0 b$) [61, 62].

Lorsque la forme du potentiel effectif V_{eff} présente un maximum $V_{max} = E_0$ coïncidant avec une distance r_0 (voir la figure II.10) alors toutes les particules incidentes avec une énergie inférieure à ce max, ($E_1 < E_0$), seront reflétées par la barrière centrifuge à partir de la distance minimale d'approche r_{min} qui correspond au cas $E_1 = V_{eff}$. En revanche,

pour les particules incidentes avec une énergie bien supérieure à V_{max} , $E_2 > E_0$, elles pourront passer la barrière sans être déviées. Pour le cas limite $E = V_{eff}(r_0) = E_0$, on peut écrire :

$$\frac{1}{2}\mu\dot{r}^2 = E - V_{eff}(r) \Rightarrow E_0 - V_{eff}(r_0) = 0 \quad (\text{II.3.68})$$

Pour une telle énergie initiale ($E = E_0$), on voit bien que la vitesse radiale (\dot{r}^2) est nulle au voisinage du maximum ($V_{eff}(r_0) = V_{max}$), et en particulier, on a :

$$\left(\frac{dV_{eff}}{dr}\right)_{r=r_0} = 0 \quad (\text{II.3.69})$$

En combinant les équations (II.3.65), (II.3.68) et (II.3.69), on aboutit à :

$$V_{eff}(r_0) = V(r_0) + \frac{1}{2}r_0 \left(\frac{dV}{dr}\right)_{r_0} \quad (\text{II.3.70})$$

Par conséquent, la particule fictive μ se met à tourner autour du centre diffuseur (problème à un seul corps) avec un moment angulaire $L_0 = \mu v_0 b_{Or}$, voir la figure II.11, ou dans le cas réel, les deux particules qui rentrent en collision se mettent à tourner l'une autour de l'autre avec une période plus au moins stable. Dans une telle situation, l'angle de déflexion χ correspondant au paramètre d'impact d' "Orbiting" b_{Or} est bien supérieur à 2π (en valeur absolue). On peut envisager d'autres cas où le paramètre d'impact b est légèrement inférieur ou légèrement supérieur à b_{Or} , ou en d'autres termes, si l'énergie initiale $E \approx E_0 \approx V_{max}$ alors les deux particules se mettent à spiraler l'une autour de l'autre pendant un moment avant de rebondir en chemin inverse (voir la figure II.9).

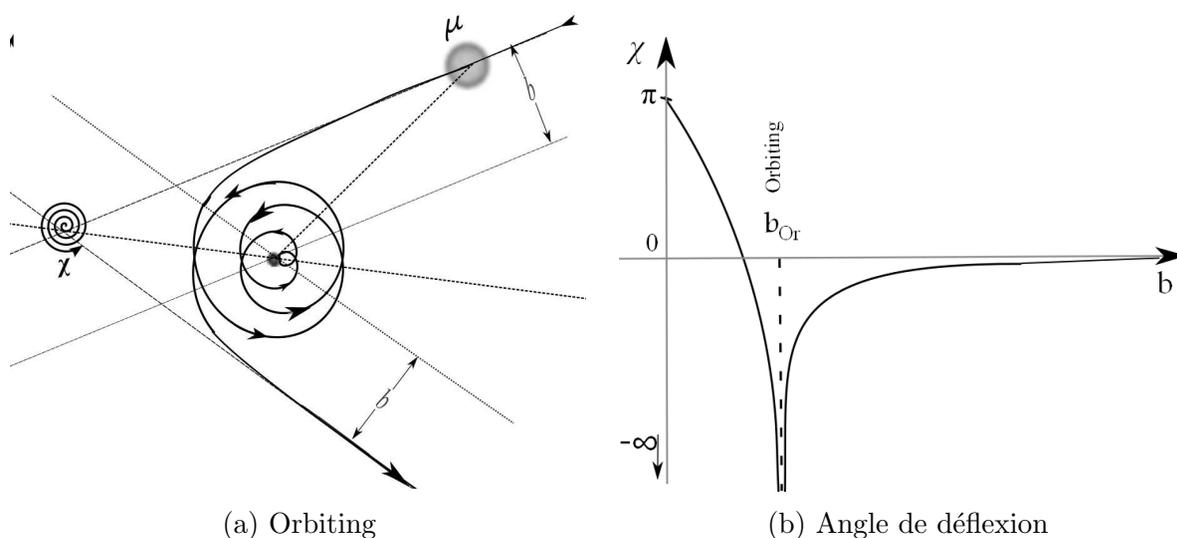


FIGURE II.11 – Une trajectoire d'une particule fictive μ (problème à un seul corps) qui tourne autour du centre diffuseur en forme spirale (à gauche), dans un champ de potentiel attractif. L'angle de déflexion (montré à droite) χ est inférieur à -2π (Orbiting ou Spiraling) pour un paramètre d'impact b_{Or} .

Il convient de dire, pour que le phénomène d' "Orbiting" existe, qu'il faut satisfaire à priori deux conditions qui sont le résultat d'une combinaison entre l'énergie E et le paramètre d'impact b , à savoir : (i) le potentiel effectif $V_{eff}(r)$ doit présenter un maximum

(V_{max}) à une distance inter-particulaire donnée (r_0), (ii) l'énergie initiale E correspondante au système de particules doit également au maximum (V_{max}) c'est-à-dire ($E = E_0$). Il faut noter que pour des énergies très élevées ou très faibles, la condition n'est pas satisfaite et l'Orbiting n'existerait pas.

La figure II.10 montre un exemple de potentiel effectif $V_{eff}^l(r)$ d'une interaction $^{40}\text{Ar} + ^{109}\text{Ag}$ [61, 62]. Plusieurs potentiels effectifs ont été tracés en fonction de la distance inter-particulaire correspondante à différents moments angulaires (paramètres d'impact). On voit qu'à partir d'une certaine valeur (critique) du moment angulaire L_{crit} (b_{crit}), la forme du potentiel effectif ne possède plus un maximum pour satisfaire la condition qui permet d'avoir le phénomène d' "Orbiting", donc on peut délimiter la gamme d'énergie pour laquelle l' "Orbiting" est possible, soit :

$$E_0 \leq E \leq E_{crit} \quad (\text{II.3.71})$$

Sachant que :

$$\begin{cases} E_0 = V_{max}^{L=0} \\ E_{crit} = V_{max}^{L=crit} \end{cases} \quad (\text{II.3.72})$$

Pour une énergie $E > E_{crit}$, il est possible de retrouver une singularité de type "Rainbow", comme montré dans la section précédente II.3.4.1.

Afin d'évaluer la singularité qui correspond à l' "Orbiting", on effectuera une approximation de l'angle de déflexion χ au voisinage du paramètre d' "Orbiting" (b_{or}) à l'aide d'une fonction logarithmique [63] :

$$\chi(b, E) \cong \chi_{out} + \eta \ln \left[\frac{(b - b_{or})}{b_{or}} \right], \quad \text{pour } b > b_{or} \quad (\text{II.3.73})$$

$$\chi(b, E) \cong \chi_{in} + 2\eta \ln \left[\frac{(b_{or} - b)}{b_{or}} \right], \quad \text{pour } b < b_{or} \quad (\text{II.3.74})$$

tel que :

$$\eta = \left(\frac{-2E}{[V_{eff}'']_{r_{or}}} \right)^{\frac{1}{2}} \left(\frac{b_{or}}{r_{or}^2} \right)$$

χ_{in} et χ_{out} sont deux fonctions qui ne présentent pas une singularité. Au voisinage de b_{or} , elles sont prises comme des constantes par rapport à E et b , de plus, la fonction logarithmique devient prédominante dès qu'on se rapproche de la zone d' "Orbiting" ($b \rightarrow b_{or}$). Néanmoins, χ_{in} et χ_{out} dépendent de la forme de potentiel loin du maximum de la barrière. Sur la figure II.11b, un cas typique de l'angle de déflexion $\chi(b)$ est représenté qui prend une allure d'une fonction logarithmique au voisinage du paramètre d'impact d' "Orbiting" b_{or} .

Le facteur 2 qui apparaît dans le cas $b < b_{or}$, équation (II.3.74) est dû à la prise en compte, dans l'intégration, des deux cotés du maximum de la barrière du potentiel. Maintenant, on peut déterminer la pente de l'angle de déflexion χ aux alentours de b_{or} pour évaluer la section efficace :

$$\left| \frac{d\chi}{db} \right| \cong \frac{\eta}{b - b_{Or}} = \left(\frac{\eta}{b_{Or}} \right) \exp \left[-\frac{(\chi - \chi_{out})}{\eta} \right], \quad \text{pour } b > b_{Or} \quad (\text{II.3.75})$$

$$\left| \frac{d\chi}{db} \right| \cong \frac{2\eta}{b_{Or} - b} = \left(\frac{2\eta}{b_{Or}} \right) \exp \left[-\frac{(\chi - \chi_{in})}{2\eta} \right], \quad \text{pour } b < b_{Or} \quad (\text{II.3.76})$$

Pour un angle θ , la section efficace $\sigma(\theta, b_{Or})$ va recevoir une progression infinie des contributions de chaque cycle balayé par l'angle de déflexion, soit :

$$-\chi = \theta, \theta + \pi, \theta + 2\pi, \theta + 3\pi, \dots$$

Cela est vrai puisque :

$$|\sin(\theta + n\pi)| = |\sin(\theta)|$$

II.3.4.4 Application à une collision des ions lourds

Nous allons montrer dans ce paragraphe un cas concret d'une collision entre ions lourds traité par Broglia et al [41]. Ils ont mis en évidence les singularités traités précédemment, notamment, le "Rainbow" et l' "Orbiting". Les auteurs ont étudié une interaction $^{16}\text{O} + ^{58}\text{Ni}$ avec une énergie $E_{Lab} = 60\text{MeV}$.

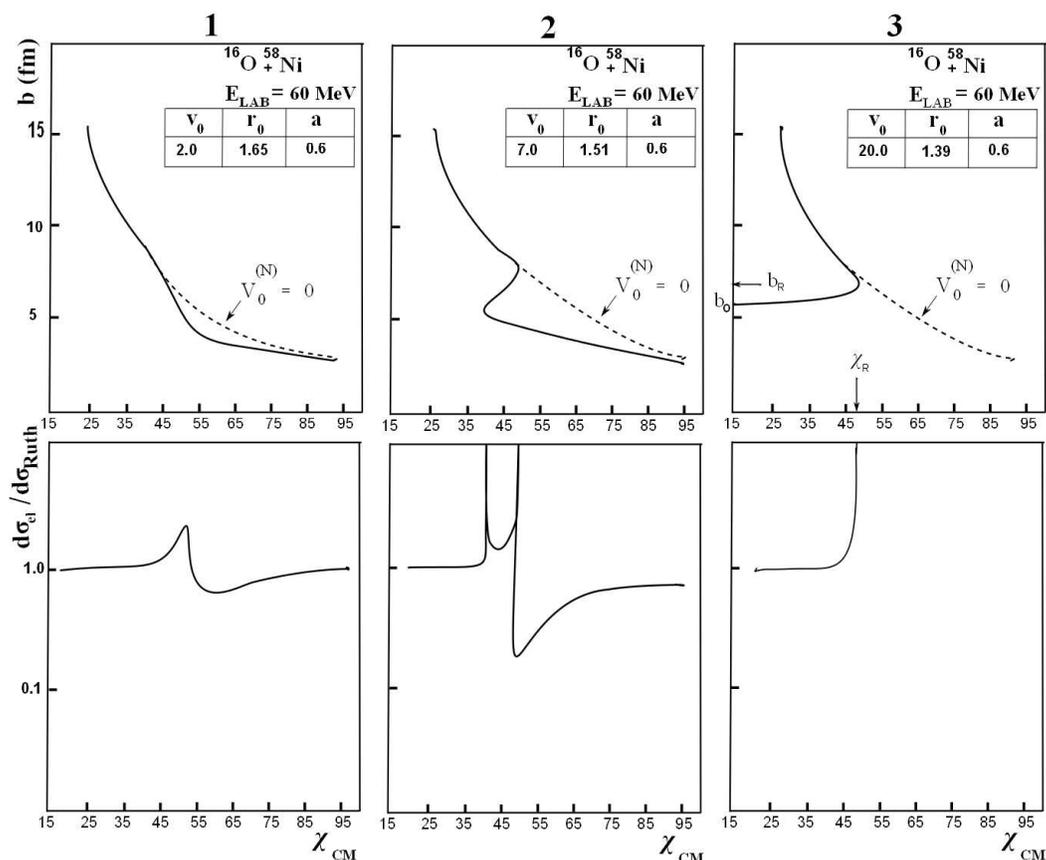


FIGURE II.12 – Illustration, en haut, de l'angle de déflexion en fonction du paramètre d'impact, et en bas, de la section efficace réduite en fonction de l'angle pour différents paramètres du potentiel de *Wood-Saxon* d'une interaction $^{16}\text{O} + ^{58}\text{Ni}$ [41].

Le potentiel choisi est celui de *Wood-Saxon* additionné à un potentiel de *Coulomb* :

$$\begin{aligned} V(r) &= V_{Coulomb} + V_{Wood-Saxon} \\ &= \left(\frac{Z_O Z_{Ni} e^2}{r} \right) + \left(\frac{-V_0}{1 + \exp\left(\frac{r-R}{a}\right)} \right) \end{aligned} \quad (\text{II.3.77})$$

Avec : V_0 , R et a des paramètres ajustables pour le potentiel de *Wood-Saxon*.

Sur la figure II.12, trois types de potentiel correspondant à différentes valeurs des paramètres du *Wood-Saxon* sont présentés :

1. $V_0 = 2.0$ Mev, $a = 0.6$ fm, $r_0 = 1.65$ fm ;
2. $V_0 = 7.0$ Mev, $a = 0.6$ fm, $r_0 = 1.51$ fm ;
3. $V_0 = 20.0$ Mev, $a = 0.6$ fm, $r_0 = 1.39$ fm.

Les trois types de potentiel ont le même comportement asymptotique pour les grandes distances r séparant les particules. Par conséquent, l'angle de déflexion ainsi que la section efficace réduite (par rapport à la section efficace de *Rutherford*) présentés sur la figure II.12 ont également le même comportement asymptotique pour des paramètres d'impact élevés.

Le premier type de potentiel (avec les paramètres cités dans 1.) correspond à une faible attraction nucléaire exercée par le potentiel *Wood-Saxon*, c'est pourquoi la trajectoire est légèrement modifiée par rapport à celle de *Coulomb*. Le deuxième type de potentiel (avec les paramètres cités dans 2.) donne naissance à une double singularité de type *Rainbow*, le potentiel attractif (*Wood-Saxon*) dans ce cas, est d'une intensité intermédiaire. Le dernier type de potentiel (avec les paramètres cités dans 3.) met en évidence, simultanément, deux singularités, à savoir l'*Orbiting* et le *Rainbow*. En raison de la forte attraction nucléaire du potentiel en question, la zone où $b < b_{or}$ n'est pas très bien connue, ainsi, l'*Orbiting* dans cette zone n'est pas tracé.

Nous avons présenté les phénomènes d'*Orbiting*, de *Rainbow* et de *Glory* d'un point de vue mathématique. Dans la chapitre suivant, nous allons décrire une méthode numérique qui permet d'évaluer l'angle de déflexion, la section efficace et de l'intégrale de collision en tenant compte des singularités traités ci-dessus.

Chapitre III

Approche numérique du processus de collision

Sommaire

| | | |
|--------------|--|------------|
| III.1 | Quadrature de Clenshaw-Curtis | 114 |
| III.2 | Évaluation numérique de l'angle de déflexion | 116 |
| III.3 | Calcul numérique de la section efficace | 117 |
| III.3.1 | Première zone d'intégration (Orbiting) | 117 |
| III.3.2 | Deuxième zone d'intégration (Rainbow) | 118 |
| III.3.3 | Troisième zone d'intégration | 119 |
| III.4 | Calcul de l'intégrale de collision | 119 |
| III.5 | Résultats et discussion | 120 |
| III.5.1 | Angle de déflexion | 123 |
| III.5.2 | Section efficace | 124 |
| III.5.3 | Intégrales de collision de l'interaction $O(^3P) - O(^3P)$ | 125 |
| III.5.4 | Potentiel équivalent | 127 |
| III.5.5 | Influence des paramètres du potentiel H-H sur les intégrales de collision | 129 |
| III.5.6 | Comparaison entre un potentiel de Morse avec celui de Hulbert-Hirschfelder | 133 |

Ce chapitre porte sur le développement de la méthode numérique qui permet l'obtention des intégrales de collision nécessaires aux calculs des coefficients de transport.

Dans la théorie de Chapman-Enskog [5] concernant les gaz dilués, traitée dans le premier chapitre (voir section I.3.3.2), les propriétés de transport peuvent être exprimées en fonction d'intégrales de collision $\Omega^{\ell,s}(T)$ [64, 16, 6], qui dépendent de la température T et du potentiel d'interaction $V(r)$.

$$\Omega^{\ell,s}(T) = \frac{F(\ell, s)}{2(kT)^{s+2}} \int_0^\infty e^{-x} x^{s+1} \sigma_\ell(kTx) dx \quad (\text{III.0.1})$$

Où : k est la constante de Boltzmann, ℓ et s sont des entiers, $x = E/kT$ et le facteur $F(\ell, s)$ est donné par :

$$F(\ell, s) = \frac{4(\ell + 1)}{\pi(s + 1)! (2\ell + 1 - (-1)^\ell)} \quad (\text{III.0.2})$$

La section efficace de collision $\sigma_\ell(E)$ dépend de l'énergie initiale E et elle est donnée par :

$$\sigma_\ell(\chi) = 2\pi \int_0^\infty b (1 - \cos^\ell(\chi)) db \quad (\text{III.0.3})$$

Où b est le paramètre d'impact, χ est l'angle de déflexion, (voir équation (II.3.32) dans la section II.3.2) :

$$\chi(b, E) = \pi - 2b \int_{r_{min}}^\infty \frac{\frac{dr}{r^2}}{\sqrt{F(r, b, E)}} \quad (\text{III.0.4})$$

Quelques programmes numériques ont été développés [65, 66, 67, 68, 57] pour calculer ces triples intégrales. Nous allons décrire dans la suite de ce chapitre la méthode que nous avons adoptée pour calculer l'angle de déflexion et la section efficace associés aux coefficients de transport.

III.1 Quadrature de Clenshaw-Curtis

La quadrature de Clenshaw-Curtis [69, 70] est une méthode numérique d'intégration peu utilisée malgré les atouts qu'elle présente par rapport aux autres quadratures (Gauss-Legendre, trapèze, Simpson,...etc), notamment sa maîtrise de la précision des calculs.

Le principe de la méthode consiste à décomposer une fonction complexe $f(x)$ en somme de polynômes de Chebyshev (ou en développement en série de Fourier), par conséquent on peut approximer facilement l'intégrale $\int_a^b f(x) dx$.

Avec un changement de variable adapté, les bornes de n'importe quelle intégrale peuvent être ramenées à la forme suivante :

$$I = \int_{-1}^{+1} F(t) dt \quad (\text{III.1.1})$$

L'intégrand $F(t)$ peut être approximé en une série finie des polynômes de Chebyshev :

$$F(t) = \sum_{r=0}^N a_r T_r(t) \quad (\text{III.1.2})$$

tel que :

$$T_r(t) = \cos(r \arccos(t)) \quad (\text{III.1.3})$$

$$t = \frac{2x - (b+a)}{b-a}$$

Les coefficients a_r sont définis par :

$$a_r = \frac{2}{N} \sum_{s=0}^N \cos\left(\frac{r\pi s}{N}\right) F\left(\cos\frac{\pi s}{N}\right) \quad (\text{III.1.4})$$

La série est intégrée terme par terme, le résultat de la quadrature devient :

$$I_N = \sum_{s=0}^N \omega_s^N F(x_s) \quad (\text{III.1.5})$$

ω_s^N et x_s sont appelés, respectivement, poids et nœuds de quadrature, tels que :

$$x_s = \cos\left(\frac{\pi s}{N}\right) \quad (\text{III.1.6})$$

$$\omega_s^N = (-1)^s \frac{2}{N^2 - 1} + \frac{4}{N} \sin\left(\frac{\pi s}{N}\right) \sum_{i=1}^{N/2} \frac{\sin[(2i-1)/N]}{2i-1} \quad (\text{III.1.7})$$

$$s=1,2,\dots,N-1$$

avec :

$$\omega_0^N = \omega_N^N = \frac{1}{N^2 - 1} \quad (\text{III.1.8})$$

Cette méthode présente beaucoup d'avantages [66, 71], notamment (1) les nœuds x_s qui sont de simples fonctions trigonométriques (voir équation (III.1.6)), sont faciles à calculer comparée, par exemple, aux nœuds de la quadrature de Gauss-Legendre qui nécessite la détermination des racines des polynômes de Legendre, (2) une meilleure précision qui est due à la rapidité de la convergence des séries de Chebyshev, (3) si on prend par exemple 9 points de quadrature ($N = 8$) l'évaluation des fonctions sont les mêmes pour 17 points de quadrature ($N = 16$), donc on peut doubler le nombre de points sans perdre l'évaluation des fonctions, (4) le plus grand avantage est la possibilité de déterminer une estimation de l'erreur E_N .

$$E_N = \frac{16N}{(N^2 - 1)(N^2 - 9)} \max\left\{|a_N|, \frac{1}{2}|a_{N-2}|, \frac{1}{8}|a_{N-4}|\right\} \quad (\text{III.1.9})$$

avec :

$$a_{N-2r} = \frac{2}{N} \sum_{s=0}^N (-1)^s \cos\left(\frac{2r\pi s}{N}\right) F\left(\cos\frac{\pi s}{N}\right) \quad (\text{III.1.10})$$

Pour que E_N soit fiable, il a été démontré [71] il faut satisfaire la condition :

$$|a_N| < \frac{1}{2} |a_{N-2}| < \frac{1}{8} |a_{N-4}| \quad (\text{III.1.11})$$

Si cette condition n'est pas satisfaite, il faut continuer le calcul jusqu'à avoir $E_N < \epsilon/10$ (ϵ est la précision voulue).

| Nombre de noeuds | Erreur commise sur l'angle χ | Erreur commise sur la section efficace σ |
|------------------|-----------------------------------|---|
| N | En (χ) | En (σ) |
| 4 | 0.154037 | 1.210182 |
| 8 | 0.004617 | 0.032750 |
| 16 | 0.000254 | 0.001788 |
| 32 | 0.000015 | 0.000108 |
| 64 | 0.000000 | 0.000007 |

TABLE III.1 – Estimation de l'erreur commise sur χ et sur σ pour O_2

III.2 Évaluation numérique de l'angle de déflexion

Pour calculer l'angle de déflexion χ numériquement, on élimine, dans un premier temps, la première singularité qui se présente au niveau du pôle r_{min} du dénominateur de l'équation (III.0.3), par un changement de variable adéquat.

$$\cos \left[\frac{1}{4} \pi (x + 1) \right] = \frac{r_{min}}{r} \quad (\text{III.2.1})$$

l'équation (III.0.3) devient :

$$\chi(b, E) = \pi \left[1 - \frac{b}{2r_{min}} \int_{-1}^{+1} \frac{\sin \frac{1}{4} \pi (x + 1)}{\sqrt{F(r_{min}/\cos \frac{1}{4} \pi (x + 1), b, E)}} \right] \quad (\text{III.2.2})$$

La forme de cette équation permet d'utiliser la quadrature de *Clenshaw-Curtis*, néanmoins il faudrait, au préalable, distinguer trois différentes régions d'énergies pour lesquelles, les singularités traitées dans la section II.3.4 ("Orbiting" et "Rainbow") se manifestent.

On a montré dans la section II.3.4.3 que, pour tenir compte de la singularité d' "Orbiting", il faut satisfaire une condition sur l'énergie, à savoir :

$$E_0 < E < E_{crit} \quad (\text{III.2.3})$$

Dans cette gamme d'énergie, non seulement l'angle de déflexion diverge ($\chi \rightarrow -\infty$) mais aussi la section efficace a une infinité d'oscillations pour un paramètre d'impact d'Orbiting b_{Or} correspondant à une distance inter-particulaire $r = r_{Or}(x = x_{Or})$. C'est pourquoi il est nécessaire de diviser l'intégrale (III.2.2) en deux parties ($\int_{-1}^{x_{Or}} + \int_{x_{Or}}^{+1}$).

Un autre changement de variable est impératif pour concentrer les points au voisinage du x_{Or} , donc on pose :

$$(x + 1) = (x_{Or} + 1) \cos \theta \quad (\text{III.2.4})$$

Au final, pour pouvoir utiliser la quadrature de *Clenshaw-Curtis*, on effectue un dernier changement de variable comme suit :

$$\begin{cases} \int_{-1}^{x_{Or}} & \rightarrow \theta = -\frac{\pi}{4}y + \frac{\pi}{4} \\ \int_{x_{Or}}^{+1} & \rightarrow \theta = \frac{\pi}{4}y + \frac{\pi}{4} \end{cases} \quad (\text{III.2.5})$$

Pour des paramètres b supérieurs à b_{Or} ou des énergies E supérieures à E_{crit} , on applique directement la quadrature *Clenshaw-Curtis* sur l'équation (III.2.2).

III.3 Calcul numérique de la section efficace

Il est impératif de distinguer les zones d'intégration avant d'appliquer la quadrature *Clenshaw-Curtis* sur l'intégrale de la section efficace afin d'éviter les oscillations qui apparaissent à cause des singularités liées au Rainbow et à l'Orbiting.

III.3.1 Première zone d'intégration (Orbiting)

De la même manière que dans la section III.2, on divise l'intégrale de l'équation (III.0.3) en deux parties, afin de tenir compte de la région d'Orbiting correspondant à b_{Or} ,

$$\sigma_\ell(E) = 2\pi \left[\int_0^{b_{Or}} b (1 - \cos^\ell(\chi)) db + \int_{b_{Or}}^\infty b (1 - \cos^\ell(\chi)) db \right] \quad (\text{III.3.1})$$

Pour une meilleure évaluation de la section efficace, il est utile de remplacer la valeur de l'angle de déflexion au voisinage de b_{Or} par une formule logarithmique (les équations (II.3.73) et (II.3.74)), mentionnée dans la partie II.3.4.3. Pour faire apparaître la zone d'Orbiting, on développe les bornes d'intégration :

$$\int_0^{b_{Or}} = \int_0^{b_{Or}-\delta b} + \int_{b_{Or}-\delta b}^{b_{Or}} \quad (\text{III.3.2})$$

$$\int_{b_{Or}}^\infty = \int_{b_{Or}}^{b_{Or}+\delta b} + \int_{b_{Or}+\delta b}^\infty \quad (\text{III.3.3})$$

En remplaçant la formule logarithmique de χ dans le deuxième terme de l'équation (III.3.1) et dans le premier terme de l'équation (III.3.3), on trouve :

$$\int_0^{b_{Or}} = \int_0^{b_{Or}-\delta b} + \int_{b_{Or}-\delta b}^{b_{Or}} b \left\{ 1 - \cos^\ell \left(2\eta \ln \left[\frac{(b_{Or} - b)}{b_{Or}} \right] \right) \right\} db \quad (\text{III.3.4})$$

$$\int_{b_{Or}}^\infty = \int_{b_{Or}}^{b_{Or}+\delta b} b \left\{ 1 - \cos^\ell \left(\eta \ln \left[\frac{(b - b_{Or})}{b_{Or}} \right] \right) \right\} db + \int_{b_{Or}+\delta b}^\infty \quad (\text{III.3.5})$$

Ensuite, on effectue un changement de variable propre à chaque terme pour ramener les bornes d'intégration à la forme \int_{-1}^{+1} :

$$\left\{ \begin{array}{l} \int_0^{b_{Or} - \delta b} \rightarrow b = (b_{Or} - \delta b) \cos \left[\frac{1}{4}\pi(x+1) \right] \\ \int_{b_{Or} + \delta b}^{\infty} \rightarrow b = \frac{(b_{Or} + \delta b)}{\sin \left[\frac{1}{4}\pi(x+1) \right]} \end{array} \right. \quad (\text{III.3.6})$$

III.3.2 Deuxième zone d'intégration (Rainbow)

Pour des énergies E supérieures à E_{crit} , l'angle χ peut avoir un minimum ou un maximum, ce qui donne naissance à une singularité type "Rainbow" pour un paramètre d'impact b_R .

$$\sigma_{\ell}(E) = 2\pi \left[\int_0^{b_R} b (1 - \cos^{\ell}(\chi)) db + \int_{b_R}^{\infty} b (1 - \cos^{\ell}(\chi)) db \right] \quad (\text{III.3.7})$$

Dans ce type de singularité, il est avantageux de remplacer la variable b par r_{min} .

$$b = r_{min} \sqrt{1 - \frac{V(r_{min})}{E}} \quad (\text{III.3.8})$$

\Rightarrow

$$b.db = r_{min} \left(1 - \frac{V(r_{min})}{E} - r_{min} \frac{V'(r_{min})}{2E} \right) dr_{min} \quad (\text{III.3.9})$$

Nous allons maintenant remplacer $b.db$ dans le deuxième terme de l'équation (III.3.7), on aboutit à :

$$\int_{b_R}^{\infty} = 2\pi \int_{R_1}^{\infty} r_{min} \left(1 - \frac{V(r_{min})}{E} - r_{min} \frac{V'(r_{min})}{2E} \right) (1 - \cos^{\ell}(\chi)) dr_{min} \quad (\text{III.3.10})$$

avec R_1 la distance minimale d'approche correspondante au paramètre d'impact de Rainbow b_R . Pour pouvoir utiliser la quadrature de *Clenshaw-Curtis*, on a choisi le changement de variable suivant :

$$r_{min} = \frac{R_1}{\sin \left(\frac{1}{2}\pi x \right)} \quad (\text{III.3.11})$$

l'équation (III.3.10) devient :

$$\int_{b_R}^{\infty} = \frac{1}{2}\pi \int_0^1 r_{min} \left(1 - \frac{V(r_{min})}{E} - r_{min} \frac{V'(r_{min})}{2E} \right) \left(\frac{1 - \cos^{\ell}(\chi)}{\sin^2 \frac{1}{2}\pi x} \right) \cos \frac{1}{2}\pi x dx \quad (\text{III.3.12})$$

Pour ce terme, les nœuds positifs de la quadrature de *Clenshaw-Curtis* sont appliqués.

De la même manière, le premier terme de l'équation (III.3.7) devient :

$$\int_0^{b_R} = 2\pi \int_{R_0}^{R_1} r_{min} \left(1 - \frac{V(r_{min})}{E} - r_{min} \frac{V'(r_{min})}{2E} \right) (1 - \cos^{\ell}(\chi)) dr_{min} \quad (\text{III.3.13})$$

Avec un simple changement de variable, on peut mettre l'intégrale (III.3.13) sous la forme de \int_{-1}^{+1} :

$$r_{min} = \frac{R_1 - R_0}{2}x + \frac{R_1 + R_0}{2} \quad (\text{III.3.14})$$

R_0 est la distance minimale d'approche correspondant au paramètre d'impact nul $b = 0$.

Maintenant, il reste à appliquer la quadrature de *Clenshaw-Curtis* sur la somme des deux termes.

III.3.3 Troisième zone d'intégration

Pour des énergies très élevées, la contribution du phénomène de "Rainbow" est très faible, voir nulle, par conséquent les intégrales de collision sont plus faciles à calculer. Il faut juste distinguer la zone où $\chi \approx \pi/2$ pour un paramètre d'impact b_x , où l'intégrand de la section efficace atteint son minimum, tout comme le cas des potentiels purement répulsifs.

$$\sigma_\ell(E) = 2\pi \left[\int_0^{b_x} b (1 - \cos^\ell(\chi)) db + \int_{b_x}^\infty b (1 - \cos^\ell(\chi)) db \right] \quad (\text{III.3.15})$$

De la même façon que précédemment, il suffit de ramener les bornes d'intégration sous la forme \int_{-1}^{+1} pour pouvoir ensuite utiliser la quadrature de *Clenshaw-Curtis*.

III.4 Calcul de l'intégrale de collision

L'évaluation numérique de l'intégrale (III.0.1), appelée intégrale de collision, ne présente pas beaucoup de difficultés. La forme de l'intégrand de cette équation (III.0.1) est dominée pas le terme exponentiel ($e^{-x}x^{s+1}$) qui présente un pic à $s + 1$, car $\sigma_\ell(E)$ varie faiblement avec l'énergie E , c'est pourquoi il est avantageux de diviser l'intégrale en deux parties au niveau du pic ($s + 1$), tout en introduisant un changement de variable comme suit :

$$y = \frac{(s+1)}{x} \quad (\text{III.4.1})$$

L'intégrale (III.0.1) devient alors :

$$\Omega^{\ell,s}(T) = \int_0^{s+1} e^{-x}x^{s+1}\sigma_\ell(kTx)dx + (s+1) \int_0^1 \frac{e^{-x}x^{s+1}\sigma_\ell(kTx)dx}{y^2} dy \quad (\text{III.4.2})$$

Avec un changement de variable adéquat, on peut écrire le premier terme sous la forme \int_{-1}^{+1} , en posant :

$$z = \frac{2x}{s+1} - 1 \quad (\text{III.4.3})$$

donc le terme de gauche de l'équation (III.4.2) devient :

$$\int_0^{s+1} = \int_{+1}^{-1} e^{-\frac{s+1}{2}(z+1)} \left(\frac{s+1}{2}(z+1) \right)^{s+1} \sigma_\ell \left(kT \frac{s+1}{2}(z+1) \right) dz \quad (\text{III.4.4})$$

III.5 Résultats et discussion

Nous présenterons dans cette section les résultats que nous avons pu obtenir en utilisant les méthodes d'intégration que nous avons proposées dans la section précédente. Plusieurs molécules diatomiques ont été testées pour valider la méthode numérique, qui ne sont pas toutes présentées ici. Les sections efficaces et les intégrales de collision liées aux interactions entre atomes d'oxygène ont été calculées et leurs valeurs ont été comparées avec celles de la littérature (qui utilisent d'autres méthodes numériques).

Le potentiel de Hulburt-Hirschfelder (voir la section II.1), a été choisi pour représenter les potentiels attractifs correspondant aux interactions entre atomes d'oxygène $O(^3P) - O(^3P)$.

Afin de pouvoir travailler avec des variables sans dimension (*), on a employé le potentiel réduit [67] de Hulburt-Hirschfelder qui est donné par :

$$V_{HH}^*(r^*) = e^{-2a(r^*/d-1)} - 2e^{-a(r^*/d-1)} + \beta(r^*/d-1)^3 [1 + \gamma(r^*/d-1)] e^{-2a(r^*/d-1)} \quad (\text{III.5.1})$$

avec :

$$V_{HH}^* = \frac{V_{HH}}{D_e}$$

$$r^* = \frac{r}{\sigma}$$

$$\alpha = \frac{\omega_e}{2\sqrt{\beta_e D_e}}$$

$$d = \frac{r_e}{\sigma}$$

$$\beta = c\alpha^3$$

$$\gamma = b\alpha$$

tel que σ est défini comme le diamètre effectif des sphères rigides de telle sorte que $V(\sigma) = 0$. Tous les autres coefficients ont déjà été définis dans la section II.1.

Ci-dessous le tableau des constantes spectroscopiques de la molécule O_2 pour différents niveaux d'excitation [72, 73].

TABLE III.2 – Constantes spectroscopiques de la molécule O_2 [72, 73].

| | $X^3 \Sigma_g^-$ | $a^1 \Delta_g$ | $b^1 \Sigma_g^+$ | $c^1 \Sigma_g^-$ | $C^3 \Delta_u$ | $A^3 \Sigma_g^+$ |
|-------------------------|------------------|----------------|------------------|------------------|----------------|------------------|
| $D_e(eV)$ | 5.213 | 4.225 | 3.568 | 1.066 | 0.867 | 0.824 |
| $\omega_e(cm^{-1})$ | 1580.2 | 1483.5 | 1432.8 | 794.2 | 850 | 799.07 |
| $\omega_e x_e(cm^{-1})$ | 11.98 | 12.0 | 14.00 | 12.73 | 20 | 12.16 |
| $\beta_e(cm^{-1})$ | 1.4456 | 1.4264 | 1.4004 | 0.915 | 0.960 | 0.9106 |
| $\alpha_e(cm^{-1})$ | 0.0159 | 0.0171 | 0.0182 | 0.0139 | 0.026 | 0.0141 |
| $r_e(\text{\AA})$ | 1.207 | 1.215 | 1.226 | 1.517 | 1.480 | 1.521 |

TABLE III.3 – Paramètres des potentiels répulsifs liés à l'interaction $O(^3P) - O(^3P)$ [74].

| | $1^1 \Pi_g$ | $1^1 \Pi_u$ | $1^3 \Pi_g$ | $1^3 \Pi_u$ | $1^5 \Sigma_g^+$ | $2^1 \Sigma_g^+$ |
|---------------------------|------------------|------------------|--------------|-------------|------------------|------------------|
| $A(eV)$ | 234.626 | 703.855 | 1005.876 | 1354.729 | 607.635 | 120.280 |
| $\alpha(\text{\AA}^{-1})$ | 3.054 | 3.766 | 4.594 | 4.539 | 3.0207 | 1.9697 |
| | $2^3 \Sigma_u^+$ | $2^5 \Sigma_g^+$ | $5 \Delta_g$ | $5 \Pi_g$ | $5 \Pi_u$ | $5 \Sigma_u^-$ |
| $A(eV)$ | 210.424 | 391.738 | 342.104 | 1531.468 | 310.021 | 921.738 |
| $\alpha(\text{\AA}^{-1})$ | 2.3326 | 2.4469 | 2.6308 | 4.2405 | 2.5987 | 3.7102 |

L'ensemble des potentiels attractifs et répulsifs liés aux constantes spectroscopiques du tableau III.2 et aux paramètres donnés dans tableau III.3 sont représentés sur la figure III.1. Ces données suffisent à elles seules pour déterminer, avec précision, les intégrales de collision liées à l'interaction $O(^3P) - O(^3P)$.

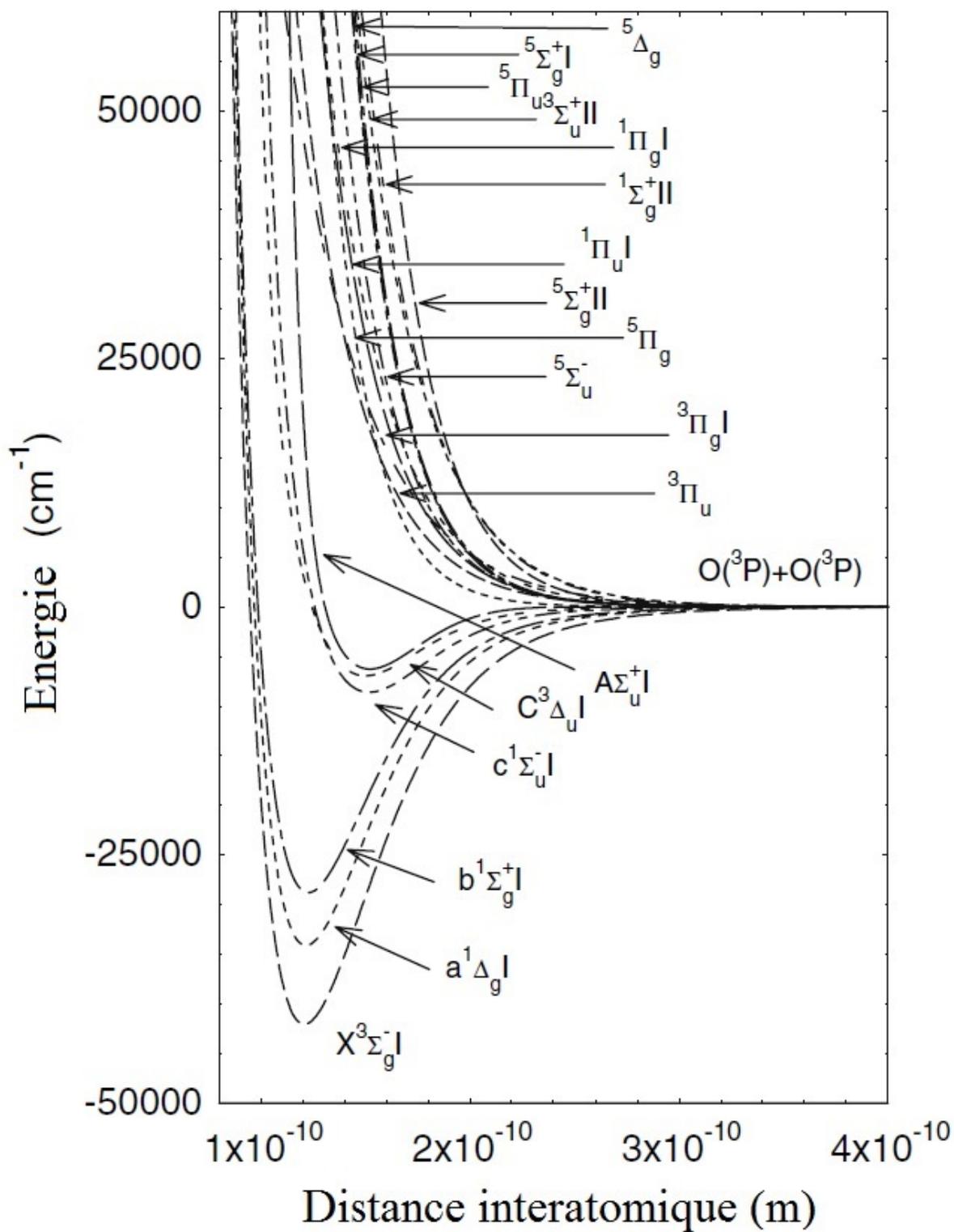
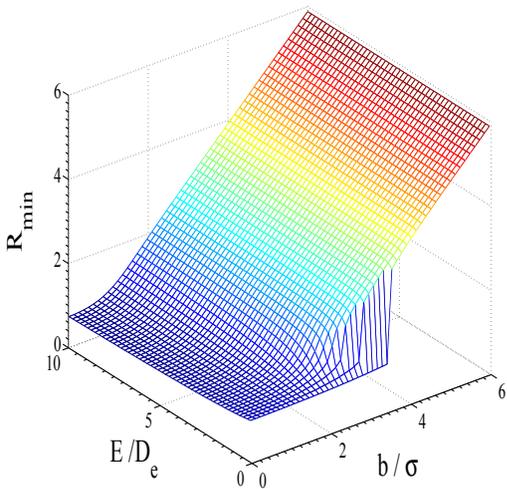
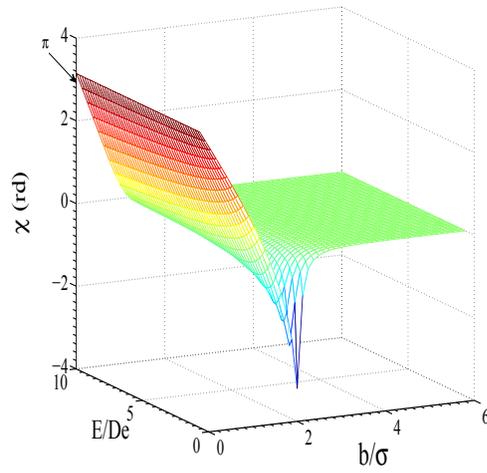


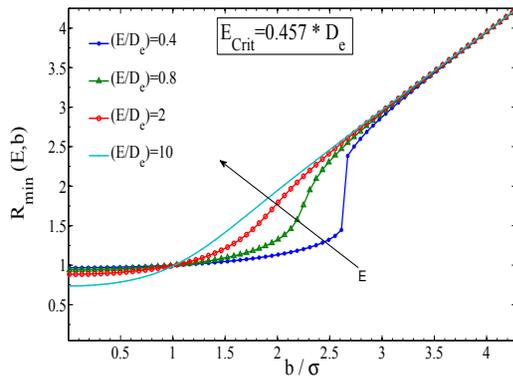
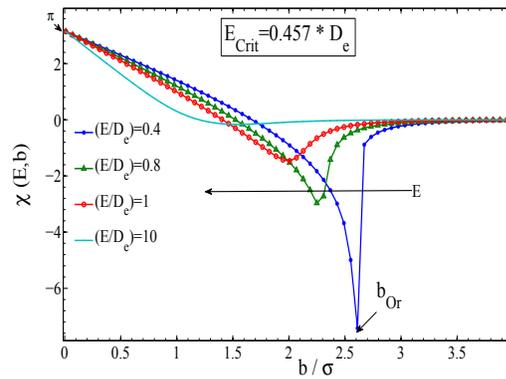
FIGURE III.1 – Représentation de différents potentiels d'interaction correspondant à l'interaction $\text{O}(^3\text{P}) - \text{O}(^3\text{P})$ [75]

III.5.1 Angle de déflexion

Les résultats de l'évaluation numérique de la première intégrale, relative à l'angle de déflexion sont montrés sur la figure III.2 pour une interaction $O(^3P) - O(^3P)$ correspondante à l'état $X^3 \Sigma_g^-$. Les figures III.2b et III.2a montrent, respectivement, une vue tridimensionnelle de l'angle de déflexion χ et de la distance minimale d'approche R_{min} en fonction de l'énergie réduite E/D_e et du paramètre d'impact réduit b/σ . Pour des énergies ($E/D_e = 0.4, 0.8, 1.0$ et 10), nous avons tracé, sur les figures III.2d et III.2c, les variations du χ et de R_{min} en fonction du paramètre d'impact réduit b/σ , respectivement. Nous pouvons constater que l'Orbiting est présent pour un paramètre d'impact réduit $b/\sigma \approx 2.6$ et pour une énergie réduite $E/D_e = 0.4$.


 (a) Une vue 3d de r_{min} .


(b) Une vue 3d de l'angle de déflexion.

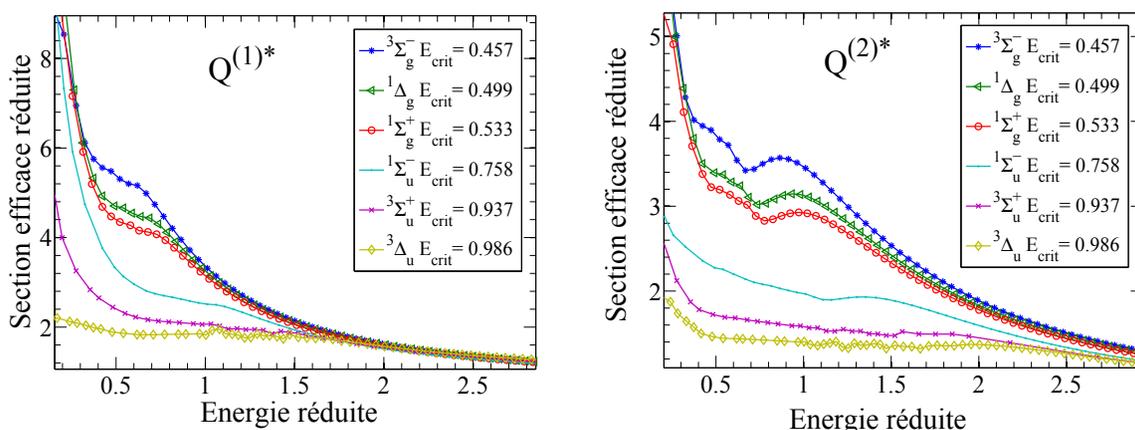

 (c) Une vue 2d de r_{min} .


(d) Une vue 2d de l'angle de déflexion.

FIGURE III.2 – Représentation de l'angle de déflexion et de la distance minimale d'approche en fonction du paramètre d'impact b et de l'énergie E pour une interaction $O(^3P) - O(^3P)$ correspondante à l'état $X^3 \Sigma_g^-$.

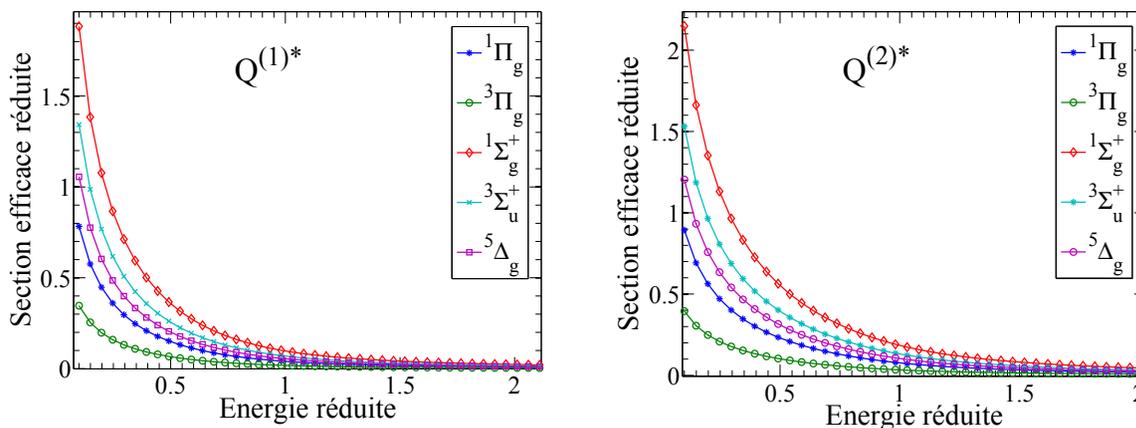
III.5.2 Section efficace

Les figures III.3a et III.3b représentent les variations de la section efficace réduite en fonction de l'énergie réduite dans le cas ($\ell = 1$) et dans le cas ($\ell = 2$), respectivement, pour différents niveaux d'excitation des potentiels type attractifs. Dans le cas des potentiels répulsifs, les variations de la section efficace réduite sont montrées sur les figures III.4a et III.4b pour ($\ell = 1$) et ($\ell = 2$), respectivement.



(a) Section efficace de type diffusion ($\ell = 1$) (b) Section efficace de type viscosité ($\ell = 2$)

FIGURE III.3 – Représentation des sections efficaces réduites de collision en fonction de l'énergie E des différents niveaux d'excitation des potentiels attractifs correspondants à l'interaction $O(^3P) - O(^3P)$.



(a) Section efficace de type diffusion ($\ell = 1$) (b) Section efficace de type viscosité ($\ell = 2$)

FIGURE III.4 – Représentation des sections efficaces réduites de collision en fonction de l'énergie E des différents niveaux d'excitation des potentiels répulsifs correspondants à l'interaction $O(^3P) - O(^3P)$.

III.5.3 Intégrales de collision de l'interaction $O(^3P) - O(^3P)$

Pour tenir compte de toutes les intégrales de collision correspondantes à chaque potentiel d'interaction lié aux différents états (répulsif et attractif) de la molécule d'oxygène (voir figure. III.1), on utilise une moyenne de toutes les contributions en appliquant la formule introduite par Mason [76] :

$$\Omega_{moy}^{(\ell,s)} = \frac{\sum_n w_n \Omega_n^{(\ell,s)}}{\sum_n w_n} \quad (\text{III.5.2})$$

w_n est appelé facteur de poids statistique, n désigne l'état en question. Cette formule qui est largement utilisée par la communauté scientifique, ne tient pas compte du peuplement des niveaux quantiques. Certains états ne sont pas peuplés aux basses températures mais le sont aux hautes températures. On peut modifier alors la relation précédente en prenant en compte le facteur de Boltzmann. On obtient alors la formule suivante :

$$\Omega_{moy}^{(\ell,s)} = \frac{\sum_n w_n \exp\left(\frac{-E_n}{kT}\right) \Omega_n^{(\ell,s)}}{\sum_n w_n \exp\left(\frac{-E_n}{kT}\right)} \quad (\text{III.5.3})$$

E_n désigne l'énergie de chaque état n .

Dans la gamme de température considérée, le facteur de Boltzmann peut être considéré proche de l'unité on retrouve alors la formule (III.5.2).

L'ensemble des combinaisons des intégrales de collision nécessaires aux calculs des coefficients de transport avec des approximations plus élevées est donné dans le tableau III.4. Les facteurs de correction de Kihara (qui interviennent dans le calcul des intégrales de collision) sont donnés par [77] :

$$f_\eta^2 = 1 + \frac{3}{49} \left[\frac{4\Omega^{(2,3)}}{\Omega^{(2,2)}} - \frac{7}{2} \right]^2 \quad (\text{III.5.4})$$

$$f_\lambda^2 = 1 + \frac{2}{21} \left[\frac{4\Omega^{(2,3)}}{\Omega^{(2,2)}} - \frac{7}{2} \right]^2 \quad (\text{III.5.5})$$

$$f_D^2 = 1 + \frac{1}{10 + 2\Omega^{(2,2)}/\Omega^{(1,1)}} \left[\frac{\Omega^{(1,2)}}{\Omega^{(1,1)}} - \frac{5}{2} \right]^2 \quad (\text{III.5.6})$$

TABLE III.4 – Différentes intégrales de collision (Å^2) correspondantes à l'interaction $O(^3P) - O(^3P)$

| T(K) | $\Omega^{(1,1)}$ | $\Omega^{(1,2)}$ | $\Omega^{(1,3)}$ | $\Omega^{(1,4)}$ | $\Omega^{(1,5)}$ | $\Omega^{(2,2)}$ | $\Omega^{(2,3)}$ | $\Omega^{(2,4)}$ | $\Omega^{(2,5)}$ | $\Omega^{(3,3)}$ |
|-------|------------------|------------------|------------------|------------------|------------------|------------------|------------------|------------------|------------------|------------------|
| 250 | 10.350 | 12.224 | 11.812 | 12.656 | 12.544 | 11.388 | 11.097 | 12.127 | 11.836 | 10.705 |
| 500 | 8.351 | 10.055 | 9.560 | 10.451 | 10.244 | 9.131 | 8.622 | 9.623 | 9.279 | 7.946 |
| 750 | 7.479 | 9.129 | 8.632 | 9.515 | 9.292 | 8.355 | 7.886 | 8.868 | 8.521 | 7.397 |
| 1000 | 6.923 | 8.514 | 8.033 | 8.889 | 8.670 | 7.810 | 7.365 | 8.309 | 7.975 | 6.929 |
| 2000 | 5.765 | 7.192 | 6.761 | 7.542 | 7.338 | 6.599 | 6.201 | 7.052 | 6.746 | 5.796 |
| 3000 | 5.161 | 6.510 | 6.094 | 6.842 | 6.636 | 5.955 | 5.560 | 6.383 | 6.075 | 5.167 |
| 4000 | 4.741 | 6.048 | 5.637 | 6.370 | 6.158 | 5.511 | 5.113 | 5.922 | 5.612 | 4.730 |
| 5000 | 4.420 | 5.698 | 5.291 | 6.013 | 5.797 | 5.171 | 4.775 | 5.571 | 5.261 | 4.402 |
| 6000 | 4.162 | 5.417 | 5.012 | 5.726 | 5.508 | 4.899 | 4.506 | 5.289 | 4.982 | 4.143 |
| 7000 | 3.948 | 5.182 | 4.782 | 5.488 | 5.268 | 4.673 | 4.285 | 5.055 | 4.751 | 3.930 |
| 8000 | 3.766 | 4.982 | 4.585 | 5.284 | 5.063 | 4.481 | 4.097 | 4.856 | 4.554 | 3.750 |
| 9000 | 3.610 | 4.808 | 4.415 | 5.106 | 4.885 | 4.314 | 3.935 | 4.682 | 4.384 | 3.596 |
| 10000 | 3.473 | 4.654 | 4.265 | 4.949 | 4.728 | 4.168 | 3.793 | 4.530 | 4.235 | 3.460 |
| 11000 | 3.352 | 4.517 | 4.132 | 4.809 | 4.588 | 4.038 | 3.667 | 4.394 | 4.101 | 3.340 |
| 12000 | 3.243 | 4.394 | 4.012 | 4.683 | 4.462 | 3.921 | 3.554 | 4.271 | 3.982 | 3.233 |
| 13000 | 3.145 | 4.282 | 3.903 | 4.568 | 4.348 | 3.814 | 3.452 | 4.159 | 3.873 | 3.136 |
| 14000 | 3.055 | 4.179 | 3.804 | 4.462 | 4.243 | 3.717 | 3.359 | 4.057 | 3.774 | 3.047 |
| 15000 | 2.973 | 4.084 | 3.712 | 4.365 | 4.147 | 3.627 | 3.274 | 3.963 | 3.683 | 2.967 |
| 16000 | 2.898 | 3.997 | 3.628 | 4.275 | 4.058 | 3.544 | 3.195 | 3.875 | 3.599 | 2.892 |
| 17000 | 2.828 | 3.915 | 3.550 | 4.190 | 3.975 | 3.466 | 3.122 | 3.794 | 3.521 | 2.824 |
| 18000 | 2.763 | 3.839 | 3.477 | 4.112 | 3.897 | 3.394 | 3.054 | 3.718 | 3.449 | 2.760 |
| 19000 | 2.703 | 3.767 | 3.409 | 4.038 | 3.825 | 3.326 | 2.991 | 3.647 | 3.381 | 2.700 |
| 20000 | 2.647 | 3.700 | 3.345 | 3.969 | 3.757 | 3.262 | 2.932 | 3.580 | 3.317 | 2.645 |
| 21000 | 2.594 | 3.636 | 3.285 | 3.903 | 3.693 | 3.202 | 2.876 | 3.517 | 3.257 | 2.592 |
| 22000 | 2.544 | 3.576 | 3.228 | 3.841 | 3.633 | 3.145 | 2.824 | 3.457 | 3.201 | 2.543 |
| 23000 | 2.497 | 3.519 | 3.174 | 3.782 | 3.575 | 3.092 | 2.774 | 3.401 | 3.147 | 2.497 |
| 24000 | 2.452 | 3.465 | 3.124 | 3.726 | 3.521 | 3.041 | 2.727 | 3.347 | 3.097 | 2.453 |
| 25000 | 2.410 | 3.413 | 3.075 | 3.673 | 3.469 | 2.992 | 2.683 | 3.296 | 3.049 | 2.411 |
| 30000 | 2.228 | 3.187 | 2.865 | 3.439 | 3.244 | 2.781 | 2.490 | 3.073 | 2.839 | 2.232 |

TABLE III.5 – Facteurs de correction de Kihara donnés au 2^{eme} ordre

| T(K) | f_η^2 | f_λ^2 | f_D^2 |
|-------|------------|---------------|---------|
| 250 | 1.00969 | 1.00036 | 1.03622 |
| 500 | 1.00470 | 1.00017 | 1.03868 |
| 1000 | 1.00454 | 1.00017 | 1.04098 |
| 2000 | 1.00410 | 1.00015 | 1.04263 |
| 3000 | 1.00336 | 1.00012 | 1.04393 |
| 4000 | 1.00274 | 1.00010 | 1.04529 |
| 5000 | 1.00229 | 1.00008 | 1.04659 |
| 10000 | 1.00121 | 1.00004 | 1.05136 |
| 15000 | 1.00075 | 1.00003 | 1.05447 |
| 20000 | 1.00055 | 1.00002 | 1.05672 |
| 25000 | 1.00046 | 1.00002 | 1.05842 |
| 30000 | 1.00040 | 1.00001 | 1.05974 |

TABLE III.6 – Comparaison des intégrales de collision (\AA^2) type diffusion avec d'autres auteurs (qui utilisent des méthodes numériques différentes) pour une interaction $O(^3P) - O(^3P)$

| T(K) | $\Omega^{(1,1)}^1$ | $\Omega^{(1,1)[74]}$ | $\Omega^{(1,1)[78]}$ | $\Omega^{(1,1)[79]}$ | $\Omega^{(2,2)[72]}$ | $\Omega^{(1,1)[80]}$ |
|-------|--------------------|----------------------|----------------------|----------------------|----------------------|----------------------|
| 2000 | 5.764 | 6.014 | 4.689 | 4.837 | 4.976 | 5.271 |
| 4000 | 4.741 | 4.880 | 3.977 | 4.003 | 4.092 | 4.386 |
| 6000 | 4.161 | 4.257 | 3.576 | 3.567 | 3.623 | 3.905 |
| 8000 | 3.766 | 3.837 | 3.300 | 3.270 | 3.310 | 3.575 |
| 10000 | 3.473 | 3.525 | 3.093 | 3.046 | 3.078 | 3.335 |
| 12000 | 3.242 | 3.280 | 2.928 | 2.866 | 2.895 | 3.148 |
| 14000 | 3.055 | 3.080 | 2.791 | 2.717 | 2.745 | 2.996 |
| 16000 | 2.897 | 2.913 | 2.676 | 2.591 | 2.620 | |
| 18000 | 2.763 | 2.770 | 2.579 | 2.481 | 2.512 | |
| 20000 | 2.646 | 2.645 | 2.494 | 2.385 | 2.418 | |

TABLE III.7 – Comparaison des intégrales de collision (\AA^2) type viscosité avec d'autres auteurs (qui utilisent des méthodes numériques différentes) pour une interaction $O(^3P) - O(^3P)$

| T(K) | $\Omega^{(2,2)}^1$ | $\Omega^{(2,2)[74]}$ | $\Omega^{(2,2)[78]}$ | $\Omega^{(2,2)[79]}$ | $\Omega^{(2,2)[72]}$ |
|-------|--------------------|----------------------|----------------------|----------------------|----------------------|
| 2000 | 6.598 | 6.967 | 5.455 | 5.584 | 5.688 |
| 4000 | 5.511 | 5.742 | 4.657 | 4.669 | 4.725 |
| 6000 | 4.898 | 5.059 | 4.210 | 4.198 | 4.223 |
| 8000 | 4.480 | 4.592 | 3.904 | 3.877 | 3.890 |
| 10000 | 4.168 | 4.243 | 3.674 | 3.635 | 3.643 |
| 12000 | 3.921 | 3.966 | 3.490 | 3.441 | 3.447 |
| 14000 | 3.716 | 3.740 | 3.337 | 3.279 | 3.285 |
| 16000 | 3.543 | 3.549 | 3.208 | 3.140 | 3.148 |
| 18000 | 3.393 | 3.385 | 3.099 | 3.019 | 3.028 |
| 20000 | 3.262 | 3.243 | 3.001 | 2.912 | 2.923 |

¹Mes résultats.

Nous obtenons des résultats très proches de ceux de Laricchiuta [74], qui est dû probablement au fait que nous utilisons les mêmes potentiels attractifs.

III.5.4 Potentiel équivalent

Afin de simplifier le calcul des intégrales de collision, surtout quand il s'agit de tenir compte de plusieurs potentiels d'interaction comme c'est le cas de l'interaction $O(^3P) - O(^3P)$, nous proposons un potentiel de type Morse équivalent permettant de simplifier considérablement les calculs. L'idée consiste à remplacer l'ensemble des potentiels attractifs, qui sont au nombre de 6, par un seul potentiel (attractif), et remplacer l'ensemble des potentiels répulsifs, qui sont au nombre de 12, par un seul potentiel (répulsif). Les paramètres des deux potentiels sont calculés à partir des potentiels attractifs et répulsifs, en faisant la moyenne sur tous les paramètres des potentiels concernés. Le potentiel attractif équivalent est donné alors par :

$$V_{Atr_{eq}}(r) = De_{eq} \left\{ (1 - \exp(-a_{eq}x))^2 - 1 \right\} \quad (\text{III.5.7})$$

tel que $x = \frac{r - r_{eq}}{r_{eq}}$. Les paramètres du potentiel $V_{a_{eq}}(r)$ sont donnés par :

$$De_{eq} = \frac{\sum_i De_i}{\sum_i i} = 21144.60 \text{ cm}^{-1}$$

$$r_{eq} = \frac{\sum_i r e_i}{\sum_i i} = 1.3614 \text{ \AA}$$

$$a_{eq} = \frac{\sum_i a_i}{\sum_i i} = 4.174 \text{ \AA}^{-1}$$

a est défini comme suit :

$$a = \frac{\omega_e}{\sqrt{\beta_e D_e}}$$

Le potentiel répulsif équivalent est donné par :

$$V_{Rep_{eq}}(r) = A_{eq} \exp(-\alpha_{eq} r) \quad (\text{III.5.8})$$

Les paramètres de ce potentiel sont donnés par :

$$A_{eq} = \frac{\sum_i A_i}{\sum_i i} = 5.199 \cdot 10^6 \text{ cm}^{-1}$$

$$\alpha_{eq} = \frac{\sum_i \alpha_i}{\sum_i i} = 3.242 \text{ \AA}^{-1}$$

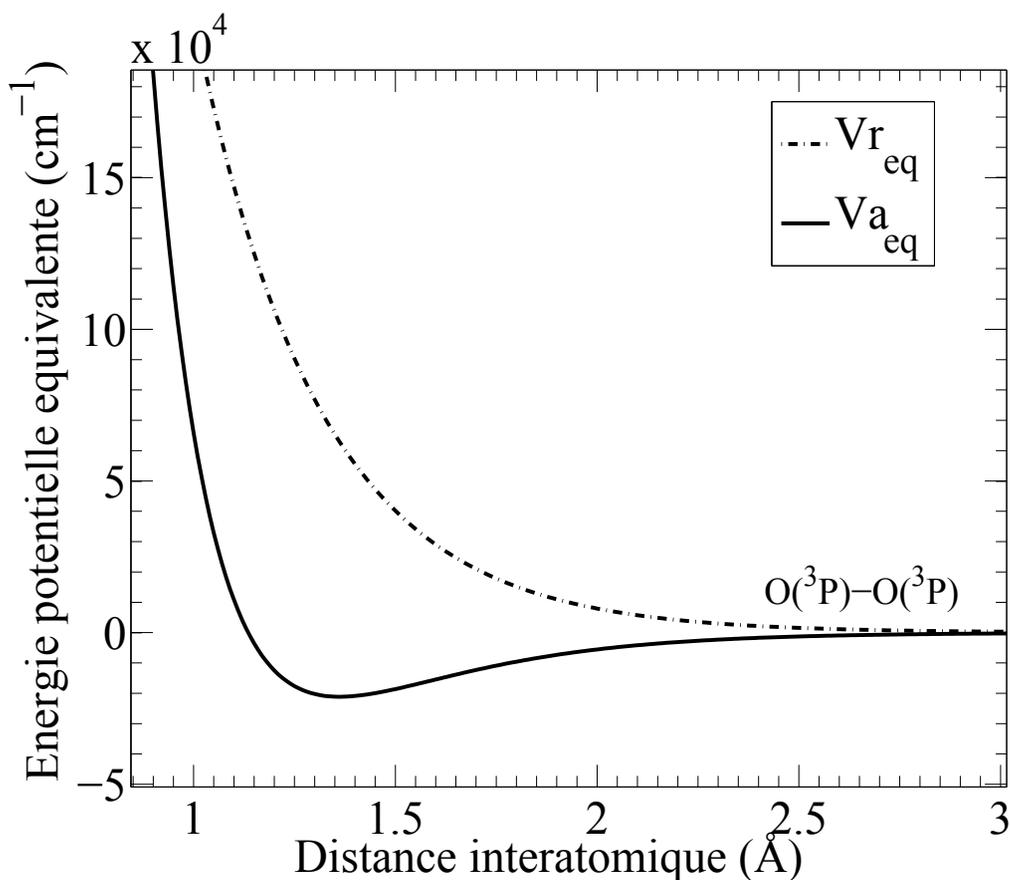
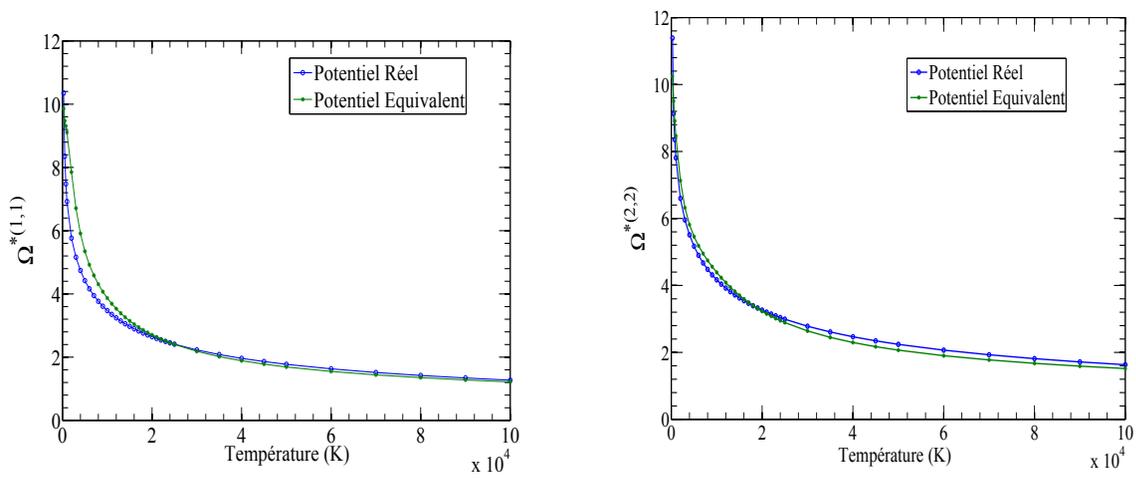
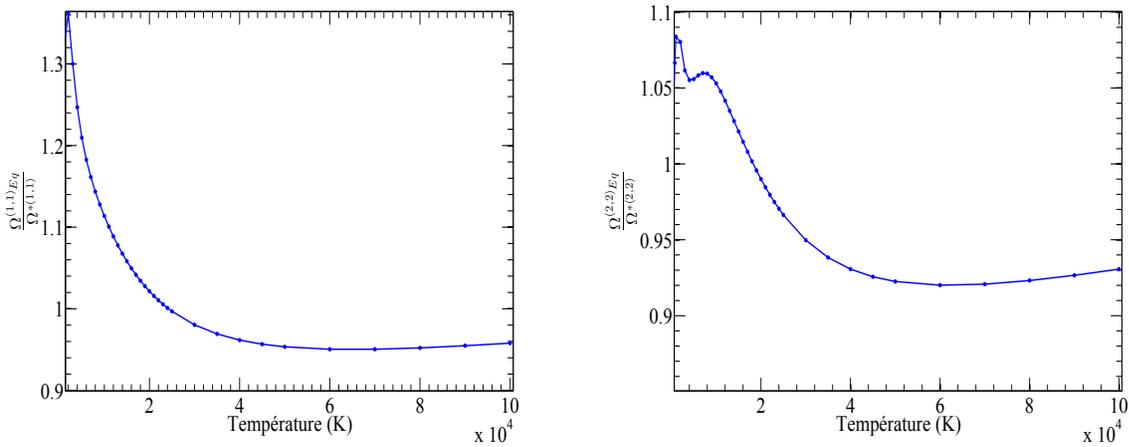


FIGURE III.5 – Représentation du potentiel d'interaction équivalent, répulsif et attractif.



(a) Comparaison des intégrales de collision type diffusion.

(b) Comparaison des intégrales de collision type viscosité.



(c) Rapport des intégrales de collision type diffusion.

(d) Rapport des intégrales de collision type viscosité.

FIGURE III.6 – Comparaison des intégrales de collision obtenues à partir du potentiel équivalent (imaginaire) avec ceux obtenues à partir du potentiel réel.

Les résultats obtenus en utilisant le potentiel équivalent sont remarquablement intéressants, notamment à haute température où la différence avec les potentiels réels devient très faible.

III.5.5 Influence des paramètres du potentiel H-H sur les intégrales de collision

Il est intéressant d'étudier la sensibilité des intégrales de collision vis-à-vis des paramètres du potentiel de Hulburd-Hirschfelder qui sont donnés avec des erreurs relatives ou absolues. La question qui pourrait se poser est de savoir si l'imprécision liée à la détermination des constantes spectroscopiques influencerait les résultats finaux concernant les intégrales de collision et si oui avec quel degré.

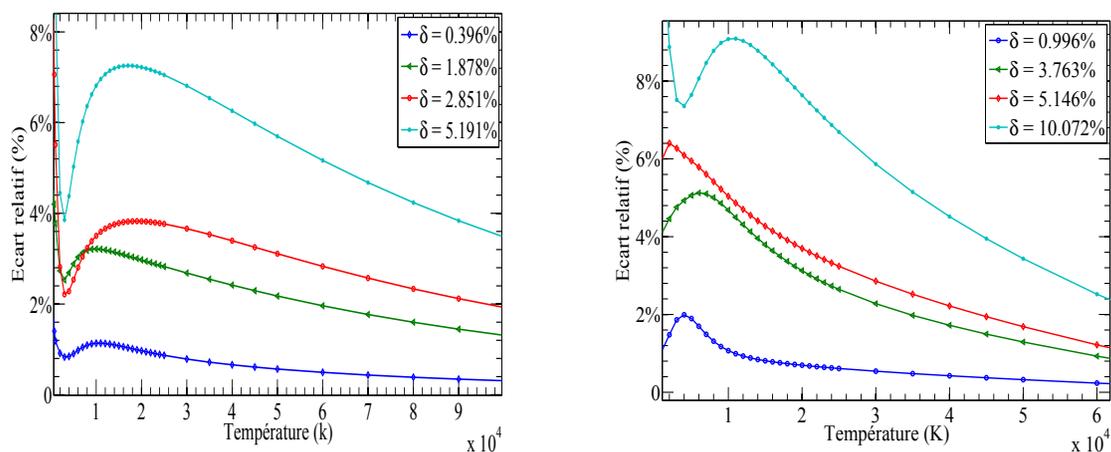
Dans la littérature on trouve plusieurs valeurs des paramètres D_e , ω_e , β_e , α_e et x_e relatives à la même interaction et l'écart relatif entre ces valeurs atteint parfois les 10%.

Le choix de ces paramètres reste encore difficile. C'est pourquoi on se propose d'étudier l'influence que peuvent avoir ces écart relatifs sur le résultat final.

L'idée est de prendre une valeur référence, qu'on note P_R , des paramètres (D_e , ω_e , β_e , α_e et x_e) cités dans le tableau III.2 et de calculer ensuite les écarts relatifs des différentes valeurs qu'on pourrait trouver dans la littérature, qu'on note P , par rapport à la valeur de référence P_R comme ceci :

$$\text{Écart relatif}(P_R) [\%] = \frac{\Omega_P^{(\ell,s)} - \Omega_{P_R}^{(\ell,s)}}{\Omega_{P_R}^{(\ell,s)}} \times 100 \quad (\text{III.5.9})$$

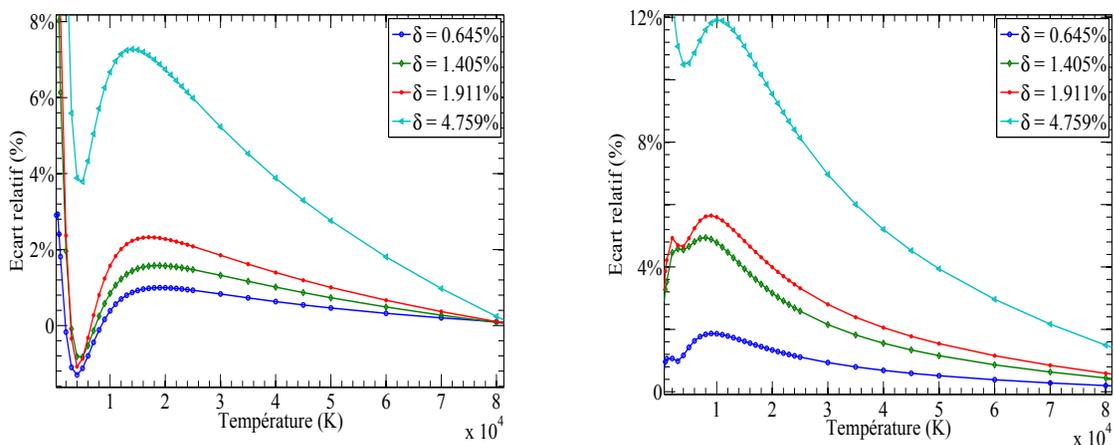
Les figures qui montrent les variations, en fonction de la température, des écarts relatifs des paramètres D_e , ω_e , β_e , α_e et x_e sont, respectivement, III.7, III.8, III.9, III.10 et III.11. Nous pouvons constater que tout les paramètres ont une influence relativement importante à basse température ($T < 20000K$). Pour des température $T > 20000K$ l'écart relatif devient plus faible. Il semble que les paramètres D_e , ω_e et β_e ont une influence plus importante que les autres paramètres.



(a) Écart relatif des intégrales de collision type diffusion ($\ell = 1, s = 1$).

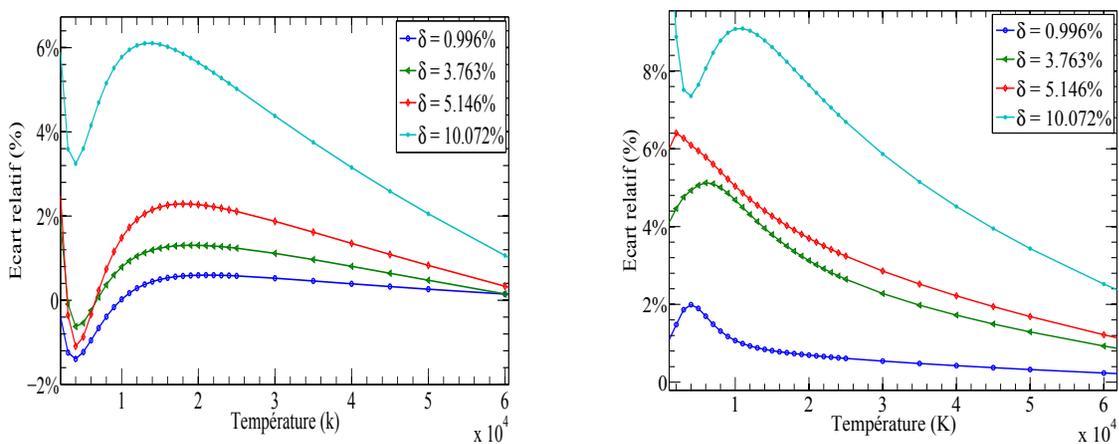
(b) Écart relatif des intégrales de collision type viscosité ($\ell = 2, s = 2$).

FIGURE III.7 – Représentation de l'influence du paramètre D_e sur le calcul des intégrales de collision.



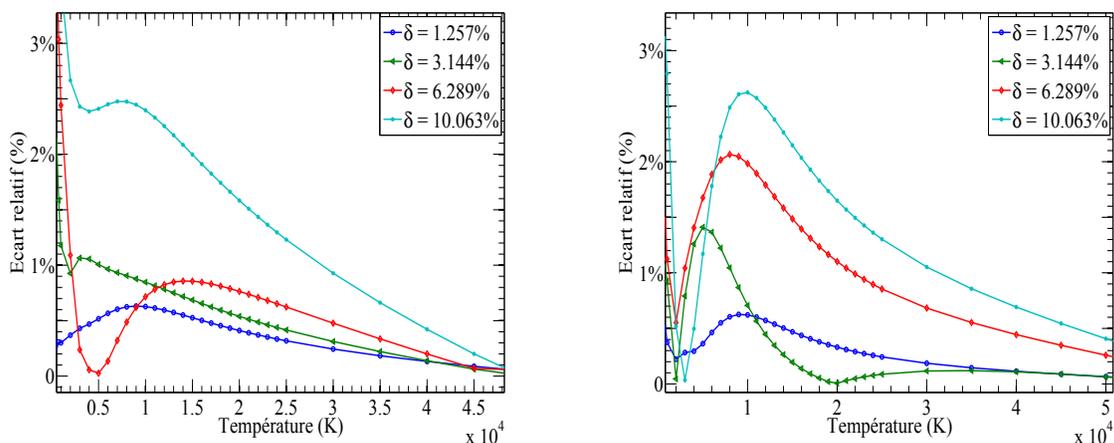
(a) Écart relatif des intégrales de collision type diffusion ($\ell = 1, s = 1$). (b) Écart relatif des intégrales de collision type viscosité ($\ell = 2, s = 2$).

FIGURE III.8 – Représentation de l'influence du paramètres ω_e sur le calcul des intégrales de collision.



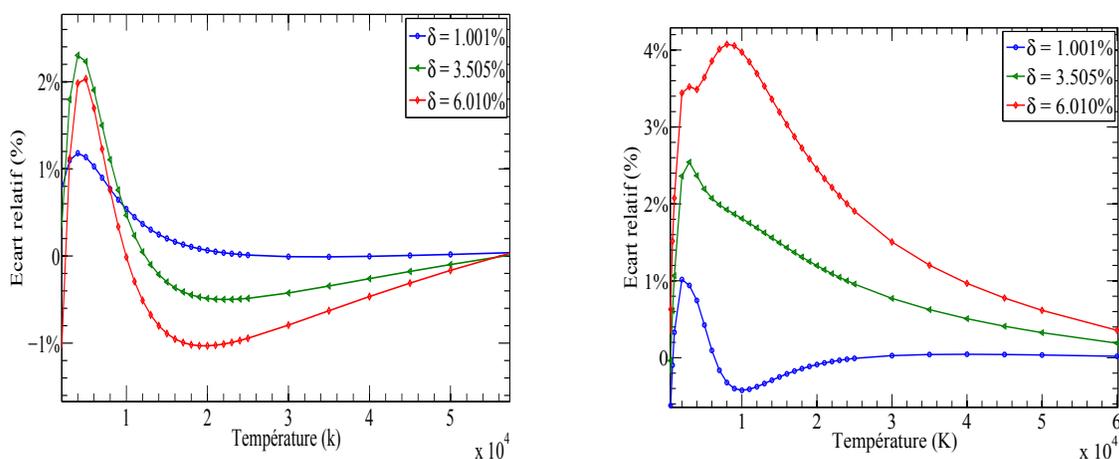
(a) Écart relatif des intégrales de collision type diffusion ($\ell = 1, s = 1$). (b) Écart relatif des intégrales de collision type viscosité ($\ell = 2, s = 2$).

FIGURE III.9 – Représentation de l'influence du paramètre β_e sur le calcul des intégrales de collision.



(a) Écart relatif des intégrales de collision type diffusion ($\ell = 1, s = 1$). (b) Écart relatif des intégrales de collision type viscosité ($\ell = 2, s = 2$).

FIGURE III.10 – Représentation de l'influence du paramètre α_e sur le calcul des intégrales de collision.



(a) Écart relatif des intégrales de collision type diffusion ($\ell = 1, s = 1$). (b) Écart relatif des intégrales de collision type viscosité ($\ell = 2, s = 2$).

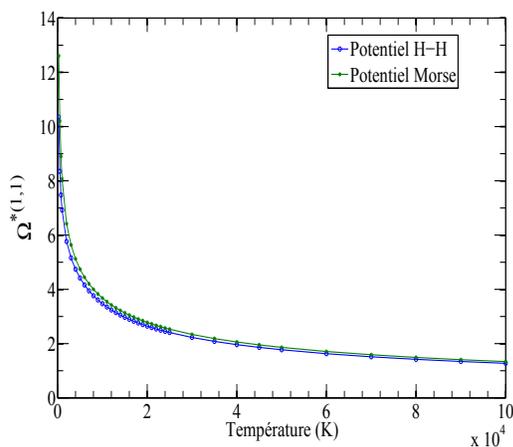
FIGURE III.11 – Représentation de l'influence du paramètre χ_e sur le calcul des intégrales de collision.

L'ensemble des résultats montrent qu'un choix judicieux des paramètres du potentiel Hulburt-Hirschfelder est primordial dans le calcul des intégrales de collision étant donné que leur influence sur les résultats numériques est relativement importante.

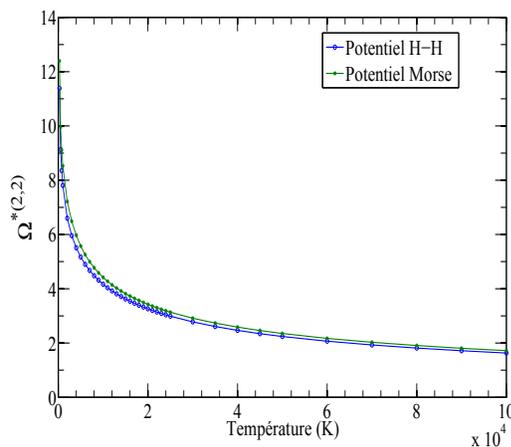
III.5.6 Comparaison entre un potentiel de Morse avec celui de Hulburt-Hirschfelder

Dans ce paragraphe nous proposons de faire une comparaison entre le potentiel de Hulburt-Hirschfelder et celui de Morse. Il faut noter que le potentiel de Hulburt-Hirschfelder (voir équation (II.1.18)) est une correction du potentiel de Morse (voir équation (II.1.16)).

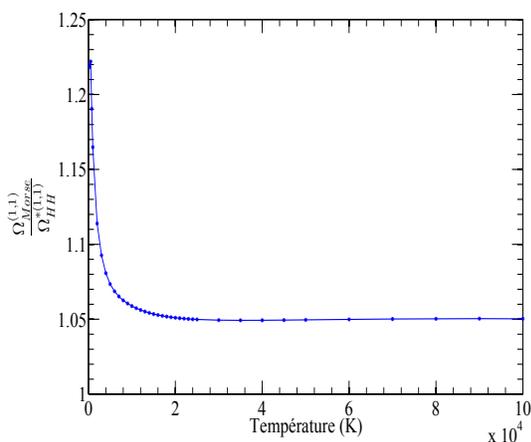
Les paramètres des deux potentiels utilisés sont obtenus à partir des constantes spectroscopiques citées dans le tableau III.2 pour l'état $X^3\Sigma_g^-$.



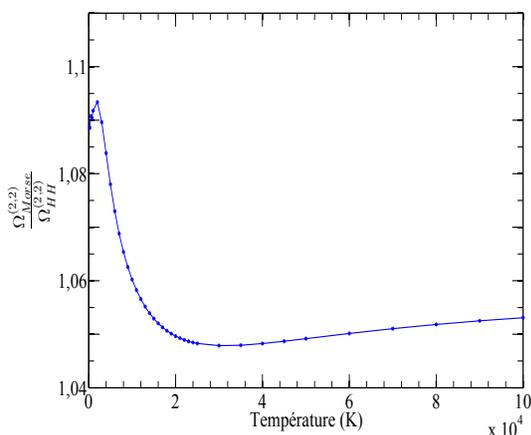
(a) Comparaison des intégrales de collision type diffusion.



(b) Comparaison des intégrales de collision type viscosité.



(c) Rapport des intégrales de collision type diffusion.



(d) Rapport des intégrales de collision type viscosité.

FIGURE III.12 – Comparaison des intégrales de collision obtenues à partir du potentiel de Morse avec celles obtenues à partir du potentiel de Hulburt-Hirschfelder.

Les résultats obtenus avec les deux potentiels sont très similaires pour les hautes températures ($T > 20000K$) mais il existe des différences allant jusqu'à 25% pour des températures inférieures. Dans le cas des plasmas thermiques un choix judicieux est nécessaire.

Chapitre IV

Propriétés thermodynamiques et de transport du plasma d'hélium

Sommaire

| | |
|--|------------|
| IV.1 Équilibre thermodynamique d'un plasma | 136 |
| IV.1.1 Équilibre thermodynamique complet | 137 |
| IV.1.2 Équilibre thermodynamique local | 138 |
| IV.2 Calcul de composition d'un plasma d'hélium | 140 |
| IV.2.1 Méthodes de calcul de composition | 140 |
| IV.2.2 Résultats et discussion | 143 |
| IV.3 Fonctions thermodynamiques | 146 |
| IV.4 Coefficients de transport | 149 |
| IV.4.1 Potentiels d'interaction | 149 |
| IV.4.2 Résultats de calcul | 154 |

L'hélium possède des propriétés physiques assez spécifiques dans ses différents états : solide, liquide, gaz mais aussi à l'état plasma. Les interactions inter-particulaires relatives à l'hélium gazeux sont particulièrement faibles, par conséquent toutes les hypothèses de la théorie de Chapman-Enskog, traitées dans le premier chapitre, qui permettent l'obtention des coefficients de transport, restent valables pour un gaz d'hélium.

L'énergie contenue dans un plasma thermique d'hélium, sous forme d'enthalpie, ainsi que sa capacité à la transférer, sous forme de conductivité thermique sont relativement importantes [81]. Ce qui fait par ailleurs, l'importance de l'utilisation de l'hélium sous forme gazeuse ou plasma dans des applications industrielles [82]. Dans certaines applications (processus de pulvérisation, fusion thermonucléaire) le gaz d'hélium est couplé avec un autre gaz rare comme l'argon ou l'hydrogène. Les propriétés thermodynamiques ainsi que les coefficients de transport du plasma d'hélium sont des données importantes également pour les projets d'exploration de la planète Jupiter [83]. En effet, l'atmosphère de la planète Jupiter étant constituée essentiellement d'hydrogène et de l'hélium, la connaissance de leurs compositions et de leurs propriétés thermodynamiques à haute température est nécessaire pour appréhender les couches limites autour des boucliers thermiques lors des rentrées atmosphériques (terrestre ou exploration).

Dans ce chapitre, les coefficients de transport et les fonctions thermodynamiques ont été évalués pour un plasma d'hélium. Le cas d'un plasma en équilibre thermique ainsi que celui d'un plasma à deux températures (température des électrons est différente de celle des espèces lourdes) ont été considérés. Les différentes approches de calcul de composition relatives aux deux cas : équilibre et hors équilibre thermique seront présentées et comparées.

Les formules employées dans ce chapitre pour évaluer les coefficients de transport du plasma d'hélium ont été exposées dans le premier chapitre et la méthode numérique adaptée est celle traitée dans le troisième chapitre. Nous n'utilisons pas les formulations développées par les laboratoires LAEPT et SPCTS [84] dans le cas d'un plasma à deux températures car nous souhaitons montrer la sensibilité des coefficients de transport par rapport aux potentiels d'interaction et aux méthodes de calcul de la composition chimique.

IV.1 Équilibre thermodynamique d'un plasma

Tout système isolé de toute force extérieure, va évoluer vers l'équilibre. Au cours de son évolution, la fonction H ou l'entropie du système (voir premier chapitre section I.3.2.4) va diminuer ou augmenter. Lorsque l'équilibre est atteint, la fonction H va tendre vers une limite minimale et l'entropie vers une limite maximale.

Un système est dit en équilibre thermodynamique quand les propriétés macroscopiques qui le caractérisent restent inchangées dans l'espace et dans le temps. Un équilibre thermodynamique doit satisfaire trois conditions : la première est relative à l'équilibre thermique qui est réalisée quand la température du système est homogène partout ; la deuxième condition est obtenue quand la pression du système est identique partout ce qui définit un équilibre mécanique ; la troisième condition traduit l'équilibre chimique qui suppose que le potentiel chimique est également identique.

La notion d'équilibre est très importante dans le calcul des propriétés des plasmas ou des gaz d'une manière plus générale. Souvent les calculs ou les modélisations des plasmas sont faits sur la base de deux hypothèses relatives à l'équilibre thermodynamique. Un équilibre global qui est valable dans tout le système, un autre équilibre dit local.

La notion d'équilibre thermodynamique complet ainsi que celle d'un équilibre local seront présentées dans les sections suivantes.

IV.1.1 Équilibre thermodynamique complet

Un équilibre thermodynamique complet (ETC) est difficilement réalisable sous les conditions du laboratoire. Cet équilibre s'établit lorsque tout les processus collisionnels et radiatifs sont en équilibre, caractérisé par l'uniformité de tous les paramètres macroscopiques. Ce qui signifie que tous les phénomènes de transport (la masse, la quantité de mouvement et la chaleur) sont supposés inexistant et la pression, la température et la masse volumique sont considérées constantes en tout point. Le principe de micro-réversibilité que l'ETC doit satisfaire, stipule que chaque processus d'interaction est contrebalancé par son processus inverse, si par exemple il y a émission d'un photon alors le processus de l'émission doit être contrebalancé par le processus d'absorption.

Plus en détail, un ETC doit satisfaire les conditions suivantes [2] :

- ⊗ Toutes les vitesses des différentes espèces constituant le plasma suivent la distribution de Maxwell-Boltzmann, traitée dans le premier chapitre section 1.3.2.1. La température caractéristique de l'énergie de translation qui apparaît dans la distribution de Maxwell-Boltzmann (voir équation (1.3.59)) est notée T_M ;
- ⊗ La densité de population, relative aux différents niveaux d'énergie d'excitation que pourrait avoir chaque espèce de particule présente dans le plasma, suit la distribution de Boltzmann qui s'écrit [85] :

$$\frac{n_{s,j}}{n_s} = \frac{g_{s,j}}{Q_s} \exp\left(\frac{-E_{s,j}}{kT_B}\right) \quad (\text{IV.1.1})$$

avec n_s la densité de particules de l'espèce s , $E_{s,j}$ l'énergie relative du niveau d'excitation j de l'espèce s , $g_{s,j}$ le poids statistique du niveau j et Q_s la fonction de partition de l'espèce s donnée ci-dessous :

$$Q_s = \sum_j g_{s,j} \exp\left(\frac{-E_{s,j}}{kT_B}\right) \quad (\text{IV.1.2})$$

La statistique de Boltzmann est applicable sous l'hypothèse qu'elle ne tient compte ni de l'indiscernabilité des molécules ni de la dégénérescence des niveaux d'énergies $E_{s,j}$;

- ⊗ Le degré d'ionisation ou de recombinaison, liant les espèces chargées aux espèces neutres, est déterminable par l'équation de Saha qui s'exprime comme ceci :

$$\frac{n_{Z+1}n_e}{n_Z} = \frac{2Q_{Z+1}}{Q_Z} \left(\frac{2\pi m_e kT_S}{h^2}\right)^{\frac{3}{2}} \exp\left(-\frac{E_{Z+1}}{kT_S}\right) \quad (\text{IV.1.3})$$

avec E_{Z+1} est l'énergie nécessaire pour produire un état ionisé $Z + 1$ à partir de l'état Z . Si le processus de recombinaison n'équilibre pas le processus d'ionisation,

le plasma est hors équilibre. A l'équilibre la température T_S d'ionisation est la même partout dans le plasma ;

- ⊛ Un plasma en équilibre thermodynamique complet doit être considéré comme un corps noir dont le facteur d'absorption est égale à l'unité pour toutes les radiations électromagnétiques qu'il reçoit. La luminance énergétique spectrale du rayonnement thermique que reçoit le plasma suit la loi de Planck qui s'écrit :

$$L(\nu, T_P) = \frac{2h\nu^3}{c^2} \frac{1}{\exp\left(\frac{h\nu}{kT_P}\right) - 1} \quad (\text{IV.1.4})$$

avec h la constante de Planck, ν la fréquence du rayonnement et c la célérité de la lumière.

Finalement, le respect simultané de toutes les conditions citées ci-dessus définit l'équilibre thermodynamique complet et on peut écrire :

$$T_{\text{plasma}} \approx T_M \approx T_B \approx T_S \approx T_P \quad (\text{IV.1.5})$$

avec T_{plasma} la température macroscopique du système plasma, T_M la température qui apparaît dans la distribution des vitesses de Maxwell-Boltzmann, T_B la température qui apparaît dans la distribution de Boltzmann, T_S la température qui apparaît dans la loi de Saha-Eggert (et Guldberg-Waage) et T_p la température qui apparaît dans la loi de Planck.

IV.1.2 Équilibre thermodynamique local

Les pertes d'énergie par conduction, par convection, par diffusion et particulièrement par radiation aux parois d'un plasma rendent les conditions d'équilibre thermodynamique complet impossible à réaliser techniquement. C'est pourquoi les plasmas de laboratoire ou les plasmas naturels sont difficilement en équilibre thermodynamique complet.

Pour contourner le problème de la non justification de l'équilibre thermodynamique complet dans la majorité des situations, un autre équilibre, dit équilibre thermodynamique local (ETL), a été proposé et obéit à certains critères.

En réalité, un plasma ne peut être considéré comme un corps noir, les photons émis par un plasma ne sont pas totalement réabsorbés, donc l'énergie perdue par rayonnement ne sera pas contrebalancée par les processus inverses, ce qui veut dire que : $T_{\text{plasma}} \neq T_P$. Par conséquent, les plasmas sont supposés optiquement minces¹ et l'équation de Planck (IV.1.4) n'est plus justifiée. Un équilibre thermodynamique local suppose que les processus collisionnels entre particules sont responsables des phénomènes de transition et de réaction au sein du plasma et non pas les processus radiatifs [85, 86].

La densité électronique élevée favorise les processus collisionnels entre les électrons et les autres espèces lourdes présentes dans le plasma, mais aussi le transfert d'énergie par collision. Donc dire que le processus radiatif est négligeable devant les processus collisionnels c'est dire que la densité électronique doit être relativement importante. Les

1. Un plasma est dit optiquement mince si les photons qui sont émis à une fréquence ν donnée sont très peu réabsorbés. Dans le cas contraire, si l'absorption est très importante, le plasma est dit optiquement épais.

phénomènes de diffusion de particules au sein d'un plasma qui créent des gradients de densité impliquent une distribution non uniforme de la densité des électrons dans l'espace. C'est pourquoi on parle d'un équilibre thermodynamique local, qui est valable dans certaines zones du plasma et pas dans d'autres. Généralement la densité électronique au cœur d'un plasma est relativement élevée comparée à celle à son bord et à ses frontières avec le milieu extérieur. Par exemple, dans un plasma d'arc électrique, près des électrodes, certains phénomènes physiques singuliers apparaissent (notamment la chute de la densité d'électrons et la non vérification du principe de quasi-neutralité) qui impliquent systématiquement la non-validité de l'ETL [33, 85].

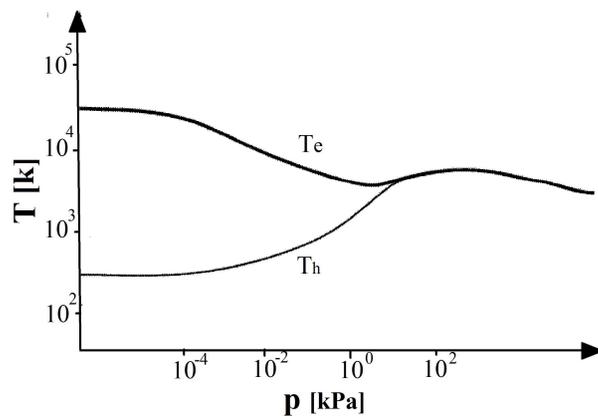


FIGURE IV.1 – Variations des températures des électrons T_e et des espèces lourdes T_h en fonction de la pression p dans un plasma d'arc [85]. Deux principales régions peuvent être distinguées, une zone hors équilibre $T_e \neq T_h$ qui se situe à basse pression et une autre zone qui est en équilibre thermique $T_e \approx T_h$ qui se situe relativement à moyenne et haute pression.

Au niveau local, si le principe de micro-réversibilité est respecté alors le transfert d'énergie entre les électrons et les particules lourdes entraînent une harmonisation des températures des électrons avec celles des lourdes ($T_e \approx T_h \approx T_{plasma}$). Une condition qui est valable pour des densités électroniques et des pressions limites qui doivent être relativement importantes. A basse pression ($\approx 1 - 50 \text{ kPa}$) les collisions deviennent de plus en plus rares et le maintien de l'équilibre (essentiellement thermique) devient tellement faible que l'écart de température occasionnée entre celle des électrons et celle des lourds devient plus important ($T_e \neq T_h$) (voir figure IV.1), par conséquent l'ETL n'existe plus sous de telles conditions et les deux fonctions de distribution de Maxwell-Boltzmann relatives à T_e et T_h doivent être considérées séparément. Il a été établi [87] que la densité électronique limite de validité de l'ETL est de l'ordre de 10^{22} à 10^{23} électrons par m^3 .

En établissant un bilan énergétique à partir des collisions élastiques, on peut écrire [85] :

$$\frac{3}{2}k(T_e - T_h) \frac{2m_e}{m_h} = eE v_d^e \tau_e \quad (\text{IV.1.6})$$

Le terme de gauche désigne l'énergie transmise d'un électron de masse m_e à une particule de masse m_h lors d'une collision. Le membre de droite traduit l'énergie gagnée par les électrons entre deux collisions. Avec v_d^e et E la vitesse de dérive des électrons et le champ électrique, tel que $v_d^e = \mu_e E$. Le taux de collision τ_e s'exprime en fonction du libre parcours

moyen ℓ_e et la vitesse thermique v_{th}^e ($\tau_e = \frac{\ell_e}{v_{th}^e}$) (voir section I.2.4).

En substituant les valeurs de v_d^e et de τ_e dans l'équation (IV.1.6), on aboutit à l'expression suivante :

$$\frac{T_e - T_h}{T_e} = \frac{\pi m_h (\ell_e e E)^2}{24 m_e (k T_e)^2} \quad (\text{IV.1.7})$$

Le libre parcours moyen est inversement proportionnel à la pression $\ell_e \propto 1/p$, une notion traitée dans le premier chapitre (voir section I.2.4), donc pour des pressions très faibles l'écart ($T_e - T_h$) devient plus important (voir figure IV.1). Ainsi, le déséquilibre thermique provoqué par l'écart entre T_e et T_h est généralement caractérisé par le rapport $T_e/T_h = \theta$. Si $\theta \approx 1$ on parle d'un équilibre thermique, si non si $\theta > 1$ le plasma est hors équilibre thermique ($T_e > T_h$).

En conclusion, l'équilibre thermodynamique local obéit (au niveau local) pratiquement aux mêmes lois que celle d'un équilibre thermodynamique complet à savoir, la distribution de Maxwell, la loi de Saha et la loi de Boltzmann à l'exception de la loi des corps noirs : la loi de Planck. Dans la suite de ce chapitre, le calcul de composition et la détermination des coefficients de transport seront établis, à la fois, en équilibre et hors équilibre thermique.

IV.2 Calcul de composition d'un plasma d'hélium

Il est nécessaire de connaître les proportions de chaque espèce présente dans le plasma. Toutes les propriétés thermodynamiques ainsi que les coefficients de transport qui caractérisent le plasma dépendent directement ou indirectement de sa composition.

Dans le paragraphe suivant, les différentes méthodes de calcul de composition seront présentées et comparées dans le cas d'équilibre et dans le cas hors équilibre thermique. Les méthodes sont appliquées pour un plasma d'hélium.

IV.2.1 Méthodes de calcul de composition

Le calcul de densité relative à chaque espèce constituant le plasma se fait généralement en équilibre mais aussi hors équilibre dans certain cas. Il existe essentiellement deux approches différentes qui proposent d'évaluer numériquement les densités de particules qui forment le plasma, ainsi que leur évolution en fonction de la température pour des pressions données. La première méthode est basée sur le principe de minimisation de l'enthalpie libre de Gibbs à l'aide des multiplicateurs de Lagrange [1, 88, 89]. L'autre méthode est basée sur la loi d'action de masse [1, 2].

En principe, chaque système physique est décrit par un système d'équations donné. Les variables qui le caractérisent sont obtenues par la résolution de ce système d'équations, et ce à condition que le nombre d'équations soit égal au nombre de variables recherchées. Dans un plasma thermique, le degré d'ionisation est donné par la loi de Saha (équation (IV.1.3)), les équilibres de dissociation-recombinaison suivent la loi de Gulberg-Waage. Si on considère, en plus des deux lois citées ci-dessus, la loi des gaz parfaits et la loi

de quasi-neutralité où interviennent les variables densités, alors cet ensemble d'équations constitue un système d'équations complet qui permet l'évaluation numérique des densités de chaque espèce.

En équilibre thermodynamique, les deux méthodes ne présentent aucune difficulté à résoudre, par contre hors équilibre thermique, différentes approches ont été proposées pour tenir compte de l'écart qui existe entre la température des électrons et celle des espèces lourdes. Le choix entre les nouvelles méthodes fait toujours débat [90, 91, 92]. Une généralisation de loi de Saha au cas d'un plasma à deux températures a été proposée par Potapov [93, 90]. Une loi qui a été dérivée à partir de l'énergie libre de Helmholtz sous certaines hypothèses qui sont critiquables selon certains auteurs [90, 92]. La nouvelle forme de la loi de Saha à deux températures selon Potapov s'écrit :

$$n_e \left(\frac{n_{Z+1}}{n_Z} \right)^{\frac{1}{\theta}} = 2 \frac{Q_{Z+1}(T_e)}{Q_Z(T_e)} \left(\frac{2\pi m_e k T_e}{h^2} \right)^{\frac{3}{2}} \exp \left(-\frac{E_{Z+1}}{k T_e} \right) \quad (\text{IV.2.1})$$

avec T_h la température des espèces lourdes, T_e la température des électrons et $\theta = \frac{T_e}{T_h}$ le déséquilibre thermique.

Une autre expression de la loi de Saha a été proposée par Van de Sanden [94] qui diffère de celle de Potapov qu'au niveau de l'exposant qui apparaît dans le terme de gauche de l'équation (IV.2.1). La nouvelle expression de la loi de Saha selon Van de Sanden est donnée par :

$$\frac{n_{Z+1} n_e}{n_Z} = 2 \frac{Q_{Z+1}(T_e)}{Q_Z(T_e)} \left(\frac{2\pi m_e k T_e}{h^2} \right)^{\frac{3}{2}} \exp \left(-\frac{E_{Z+1}}{k T_e} \right) \quad (\text{IV.2.2})$$

A l'équilibre thermique $T_e \approx T_h$ les deux expressions retrouvent leurs formes originales, à savoir la loi de Saha (IV.1.3).

L'autre loi d'action de masse, de Gulberg-Waage relative à une réaction de dissociation-recombinaison type ($C \leftrightarrow A + B$), prend la forme suivante :

$$\frac{n_A n_B}{n_C} = \frac{Q_A^* Q_B^*}{Q_C^*} \left(\frac{2\pi k T_h}{h^2} \right)^{\frac{3}{2}} \left(\frac{m_A m_B}{m_C} \right)^{\frac{3}{2}} \exp \left(-\frac{E_D}{k T_h} \right) \quad (\text{IV.2.3})$$

avec Q_i^* et E_D la fonction de partition interne de l'espèce i et l'énergie de dissociation de la molécule C , respectivement. Pour une espèce monoatomique, la fonction de partition Q_i^* s'écrit :

$$Q_i^* = [Q_i^e(T_e)]^\theta \quad (\text{IV.2.4})$$

avec Q_i^e la fonction de partition électronique relative à l'espèce i . Dans le cas d'une espèce diatomique ou polyatomique, on écrit de façon simplifiée :

$$Q_i^* = [Q_i^e(T_e)]^\theta Q_i^v(T_h) Q_i^r(T_h) \quad (\text{IV.2.5})$$

Q_i^v et Q_i^r représentent respectivement, la fonction de partition de vibration et de rotation.

La méthode de minimisation de l'enthalpie libre de Gibbs a été généralisée par André [95, 96] pour un plasma hors-équilibre thermique à deux températures ($T_e \neq T_h$). Il faut noter qu'en équilibre thermique les différentes méthodes sont équivalentes physiquement, d'autant plus que la méthode de la loi d'action de masse peut être dérivée à partir de l'énergie libre de Gibbs [1, 85].

Dans le cas d'un plasma d'hélium constitué de quatre espèces (He , He^+ , He^{++} et e^-), le système d'équations considéré (selon le formalisme de Van de Sanden) est le suivant :

$$\left\{ \begin{array}{l} n_e = n_{He^+} + 2n_{He^{++}} \\ P + \Delta P = n_e k T_e + (n_{He} + n_{He^+} + n_{He^{++}}) k T_h \\ \frac{n_{n_{He^+}} n_e}{n_{He}} = 2 \frac{Q_{He^+}(T_e)}{Q_{He}(T_e)} \left(\frac{2\pi m_e k T_e}{h^2} \right)^{\frac{3}{2}} \exp \left(-\frac{E_{i,He} - \delta E_{i,He}}{k T_e} \right) \\ \frac{n_{n_{He^{++}}} n_e}{n_{He^+}} = 2 \frac{Q_{He^{++}}(T_e)}{Q_{He^+}(T_e)} \left(\frac{2\pi m_e k T_e}{h^2} \right)^{\frac{3}{2}} \exp \left(-\frac{E_{i,He^+} - \delta E_{i,He^+}}{k T_e} \right) \end{array} \right. \quad (IV.2.6)$$

avec $E_{i,He} = 24.59 \text{ eV}$ et $E_{i,He^+} = 54.42 \text{ eV}$ les énergies d'ionisation de l' He et de l' He^+ , respectivement. Le terme $\delta E_{i,He}$ désigne l'abaissement de l'énergie d'ionisation due aux interactions entre particules chargées qui s'exprime :

$$\delta E_i = \frac{(Z_i + 1) e^2}{4\pi\epsilon_0\lambda_D^h} \quad (IV.2.7)$$

ΔP est le terme d'abaissement de la pression dû également aux interactions entre particules chargées donné par l'expression suivante [97] :

$$\Delta P = \frac{1}{24\pi\epsilon_0\lambda_D^h} \sum_{i=1}^{\nu} Z_i^2 n_i \quad (IV.2.8)$$

telle que λ_D^h est la longueur de Debye introduite dans le premier chapitre, section I.1.3.1, mais son expression est différente de celle qui est définie dans l'équation (I.1.10). La nouvelle forme de la longueur de Debye λ_D^h est donnée par :

$$\lambda_D^h = \left(\frac{e^2}{\epsilon_0 k} \left[\frac{n_e}{T_e} + \sum_{i=1, i \neq e^-}^{\nu} \frac{Z_i^2 n_i}{T_h} \right] \right)^{-\frac{1}{2}} \quad (IV.2.9)$$

Cette nouvelle expression de la longueur de Debye tient compte du fait que la température des électrons est différente de celle des ions. On verra par la suite que le choix de la formule de la longueur de Debye influence sur les résultats de calcul des coefficients de transport notamment sur la conductivité électrique (voir figures IV.21 et IV.22).

IV.2.2 Résultats et discussion

Les résultats du calcul de la composition relatifs au plasma d'hélium sont présentés dans cette partie pour les pressions suivantes : 0.5 atm , 1 atm , 2 atm et 10 atm . La création des espèces ioniques en fonction de la température est inversement proportionnelle à la pression. Une comparaison entre les différentes méthodes de calcul est montrée dans le cas en équilibre et hors équilibre. Dans le cas hors équilibre les résultats sont obtenus à la pression atmosphérique (1 atm) et les différentes valeurs choisies pour le θ sont : $\theta = 1$, $\theta = 1.5$, $\theta = 2$ et $\theta = 3$.

En équilibre thermique, les deux méthodes de calcul de composition citées ci-dessus aboutissent aux mêmes résultats numériques (voir figure IV.2, IV.3 et IV.4). Ce résultat traduit le fait que les deux méthodes sont physiquement équivalentes, et leur comparaison se fait plutôt au niveau de leur simplicité à programmer numériquement.

Lorsque la température des électrons est plus importante que celles des espèces lourdes, alors le choix de la méthode à adopter pour le calcul de composition devient compliqué, d'autant plus que les coefficients de transport dépendent fortement de la composition du plasma. Les résultats de calcul relatifs aux différentes méthodes dans le cas hors équilibre sont montrés sur les figures IV.5 et IV.6. Pour des températures électroniques comprises entre $T_e = 3.10^4 K$ et $T_e = 4.10^4 K$, les deux méthodes, Potapov et Van de Sanden, sont équivalentes. Pour les autres températures $T_e < 3.10^4 K$ et $T_e > 4.10^4 K$, la méthode de Potapov (voir figure IV.6) présente des écarts entre les différents θ qui sont plus importants que la méthode de Van de Sanden (voir figure IV.5).

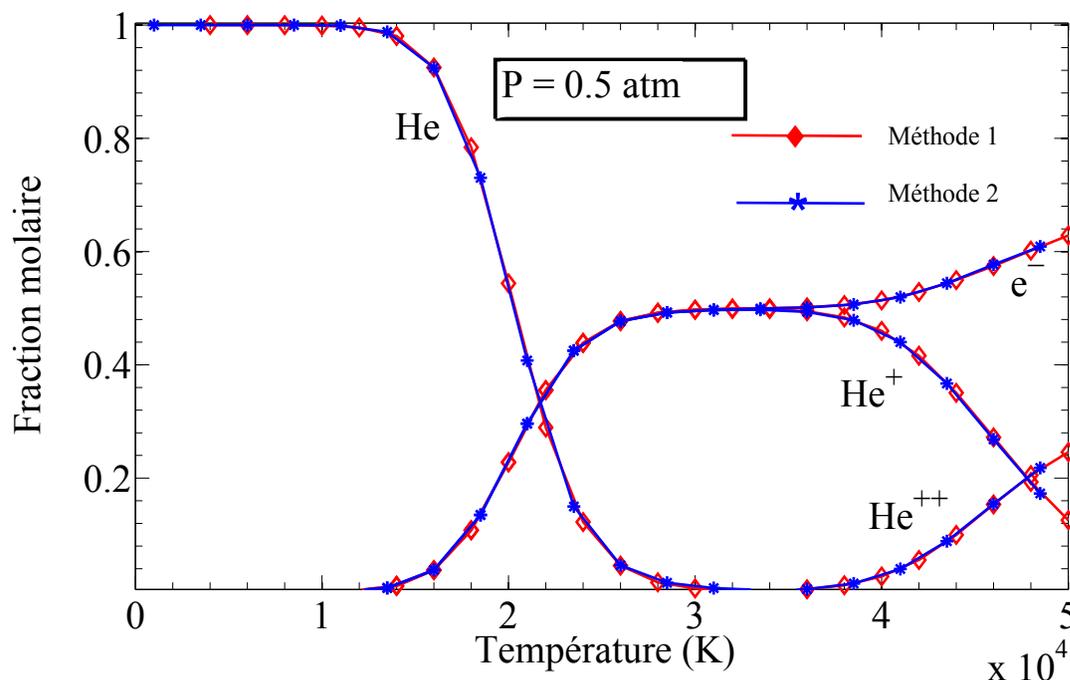


FIGURE IV.2 – Variation des fractions molaires des différentes espèces présentes dans le plasma d'hélium en fonction de la température à l'ETL. Une comparaison entre les deux méthodes (celle de minimisation de l'enthalpie libre, noté méthode 1 et l'autre méthode, loi d'action de masse notée méthode 2) est montrée à une pression égale à 0.5 atm .

Dans la section consacrée au calcul des coefficients de transport IV.4, les écarts, cités ci-dessus, vont induire des différences relativement importantes dans la détermination de coefficients de transport selon la méthode de calcul de composition choisie.

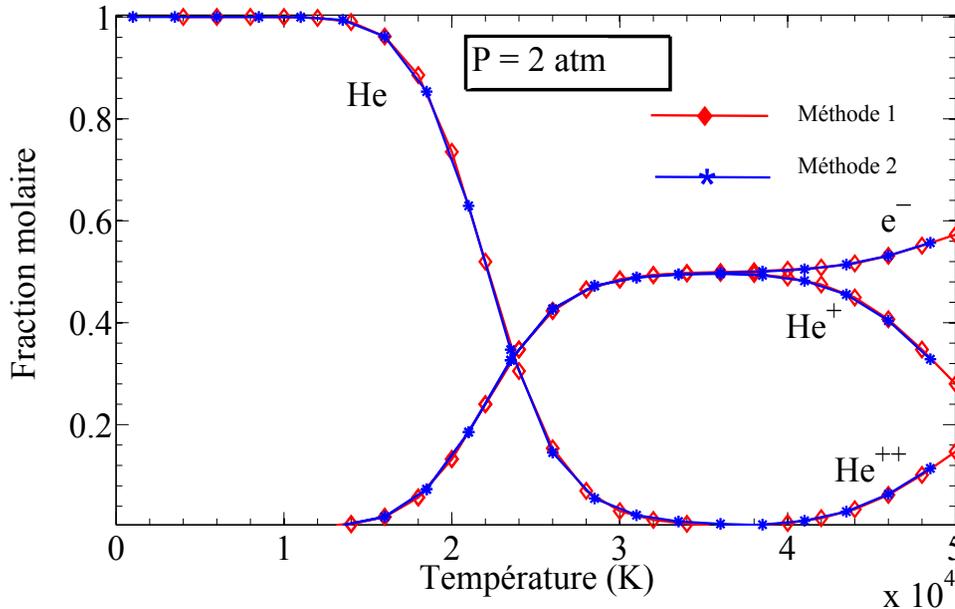


FIGURE IV.3 – Variation des fractions molaires des différentes espèces présentes dans le plasma d'hélium en fonction de la température à l'ETL. Une comparaison entre les deux méthodes (celle de minimisation de l'enthalpie libre, noté méthode 1 et l'autre méthode, loi d'action de masse notée méthode 2) est montrée à une pression égale à 2 atm.

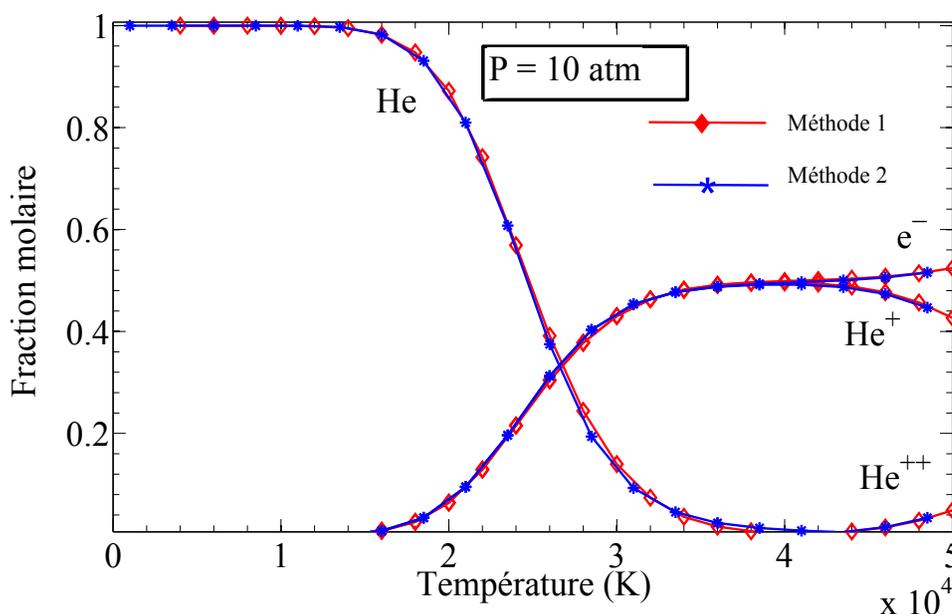


FIGURE IV.4 – Variation des fractions molaires des différentes espèces présentes dans le plasma d'hélium en fonction de la température à l'ETL. Une comparaison entre les deux méthodes (celle de minimisation de l'enthalpie libre, noté méthode 1 et l'autre méthode, loi d'action de masse notée méthode 2) est montrée à une pression égale à 10 atm.

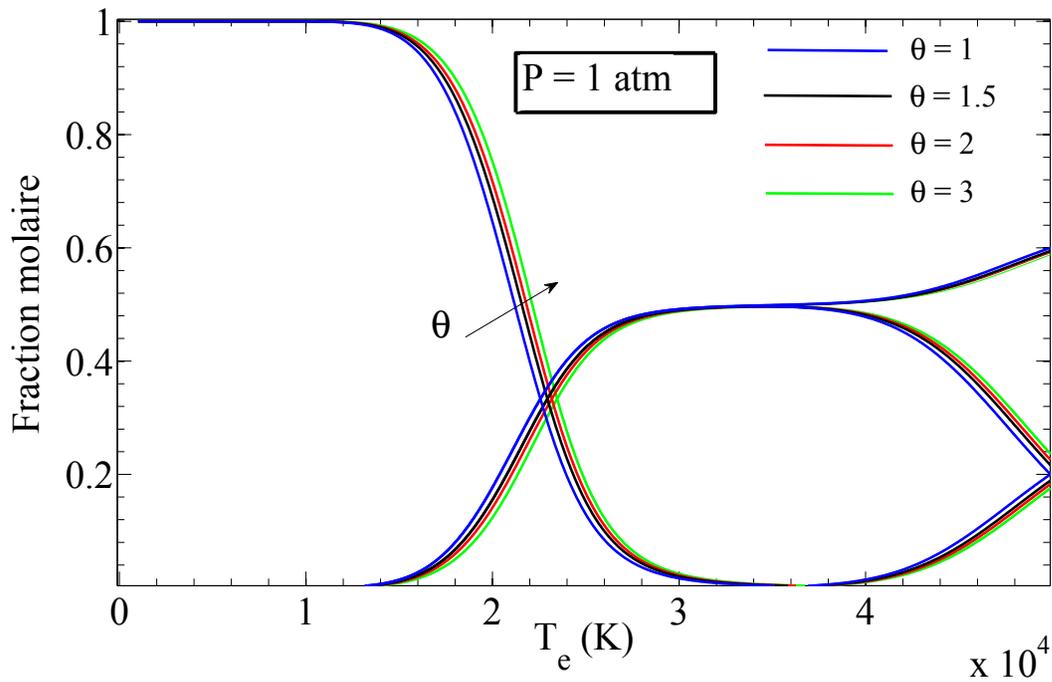


FIGURE IV.5 – Variation des fractions molaires hors équilibre des différentes espèces présentes dans le plasma d'hélium en fonction de la température pour différents θ . La méthode employée est celle de Van de Sanden.

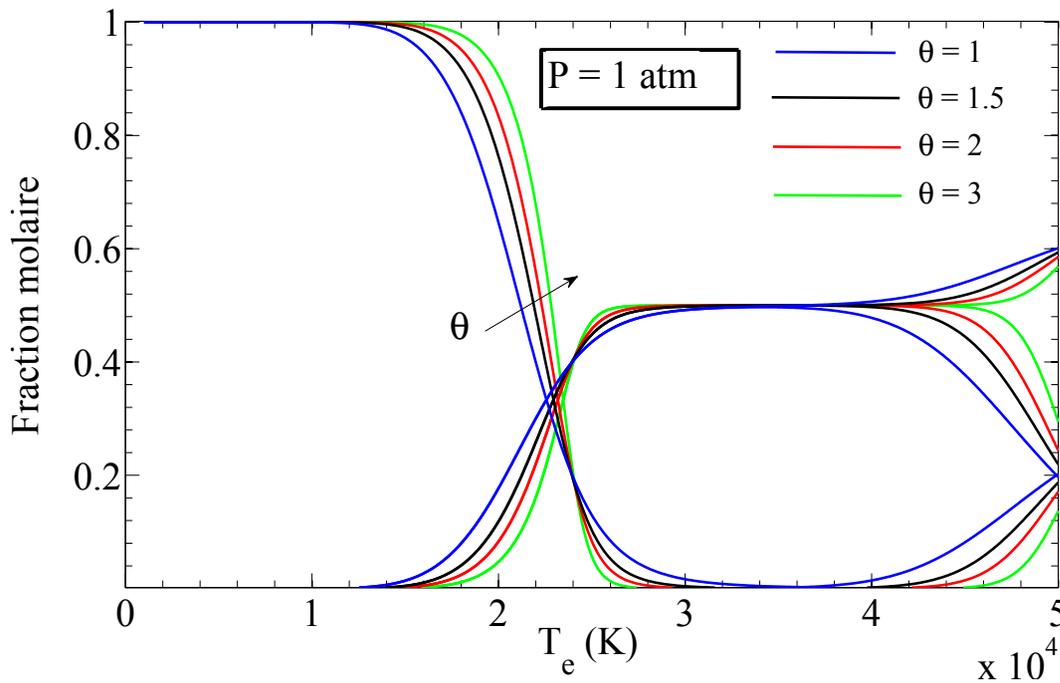


FIGURE IV.6 – Variation des fractions molaires hors équilibre des différentes espèces présentes dans le plasma d'hélium en fonction de la température pour différents θ . La méthode employée est celle de Potapov.

IV.3 Fonctions thermodynamiques

En connaissant les fonctions de partition et les densités relatives à l'ensemble des particules formant le plasma, les propriétés thermodynamiques peuvent être obtenues relativement sans difficultés. Pour déterminer la conductivité thermique de réaction il faut évaluer au préalable l'enthalpie massique relative au plasma. De plus toutes les modélisations des plasmas thermiques nécessitent la connaissance des propriétés thermodynamiques en plus des coefficients de transport.

Pour un système thermodynamique à plusieurs températures, l'enthalpie massique h s'écrit :

$$h = \frac{5k}{2\rho} \sum_i n_i T_i + \frac{1}{\rho} \sum_i n_i E_i + \frac{k}{\rho} \sum_i n_i T_i^2 \frac{\partial \ln Q_i^{int}}{\partial T_i} \quad (\text{IV.3.1})$$

avec E_i l'énergie de formation de l'espèce de particule i . La densité massique ρ est donnée par :

$$\rho = \sum_i m_i n_i \quad (\text{IV.3.2})$$

L'énergie interne e a pour expression :

$$e = \frac{3k}{2\rho} \sum_i n_i T_i + \frac{1}{\rho} \sum_i n_i E_i + \frac{k}{\rho} \sum_i n_i T_i^2 \frac{\partial \ln Q_i^{int}}{\partial T_i} \quad (\text{IV.3.3})$$

La chaleur spécifique à pression constante C_p se déduit de l'enthalpie massique comme ceci :

$$C_p = \left(\frac{\partial h}{\partial T_e} \right)_p \quad (\text{IV.3.4})$$

L'énergie libre de Gibbs G et l'entropie S prennent, respectivement, les formes suivantes [1] :

$$G = \sum_i n_i \left(\mu_i^0 + RT \ln \left(\frac{n_i RT}{P^0} \right) \right) - \frac{VkT}{8\pi\lambda_D^3} \quad (\text{IV.3.5})$$

$$S = \sum_i n_i \left(s_i^0 + R \ln \left(\frac{n_i RT}{P^0} \right) \right) - \frac{Vk}{8\pi\lambda_D^3} \quad (\text{IV.3.6})$$

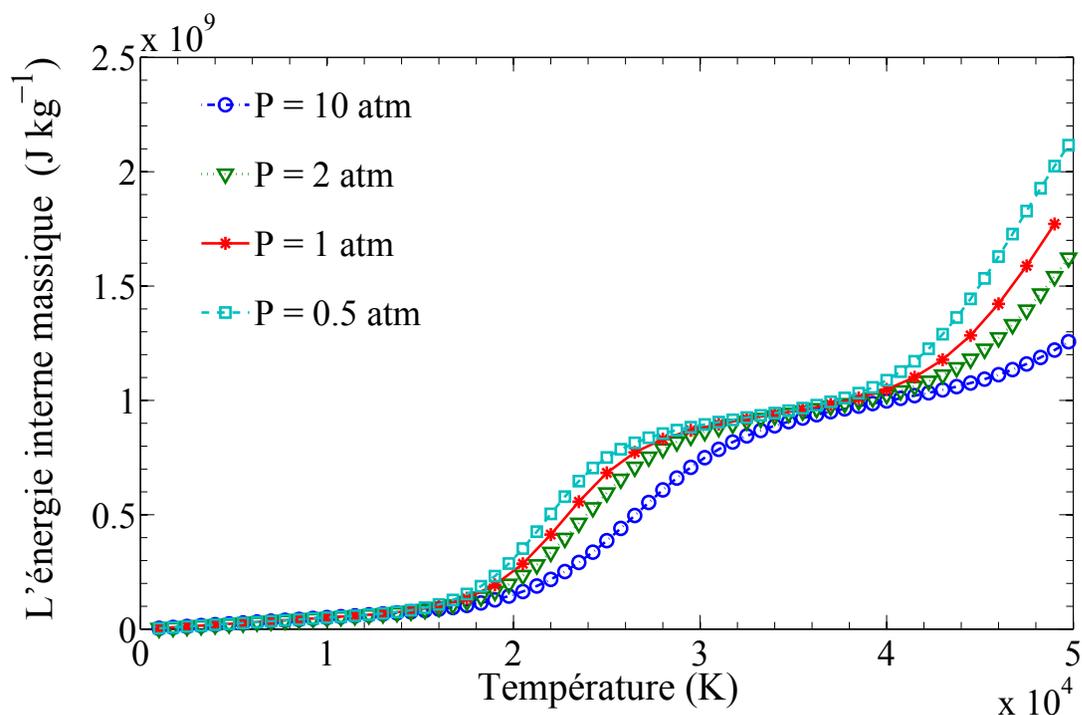


FIGURE IV.7 – Évolution de l'enthalpie massique du plasma d'hélium en fonction de la température pour quelques pressions à l'ETL.

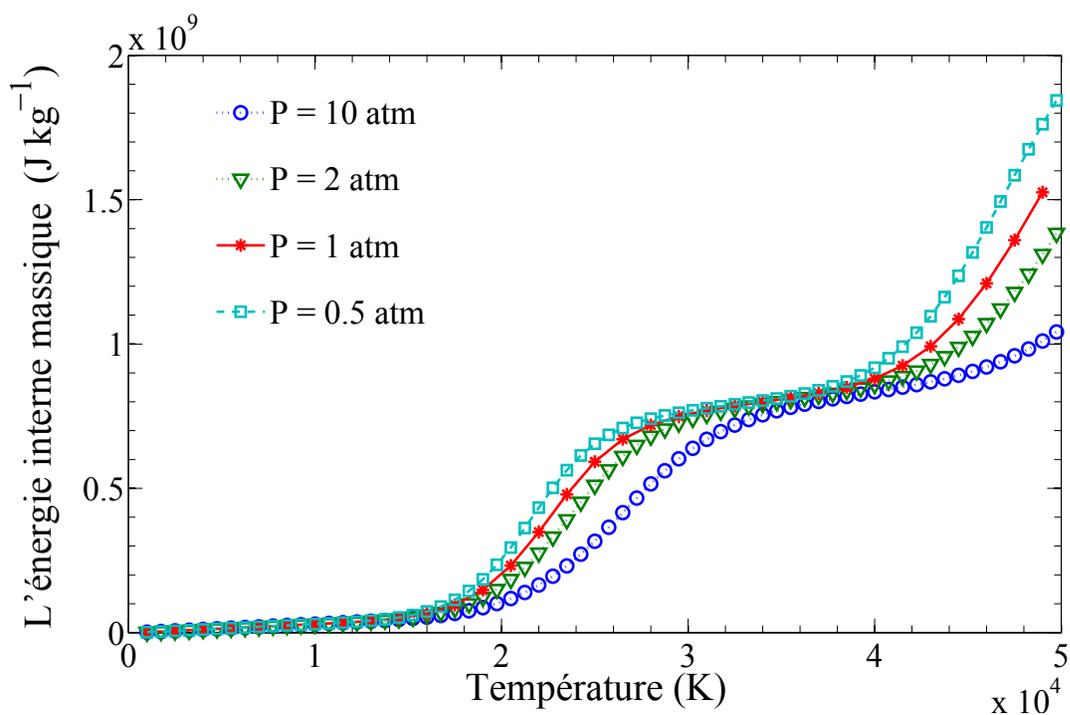


FIGURE IV.8 – Évolution de l'énergie interne du plasma d'hélium en fonction de la température pour quelques pressions à l'ETL.

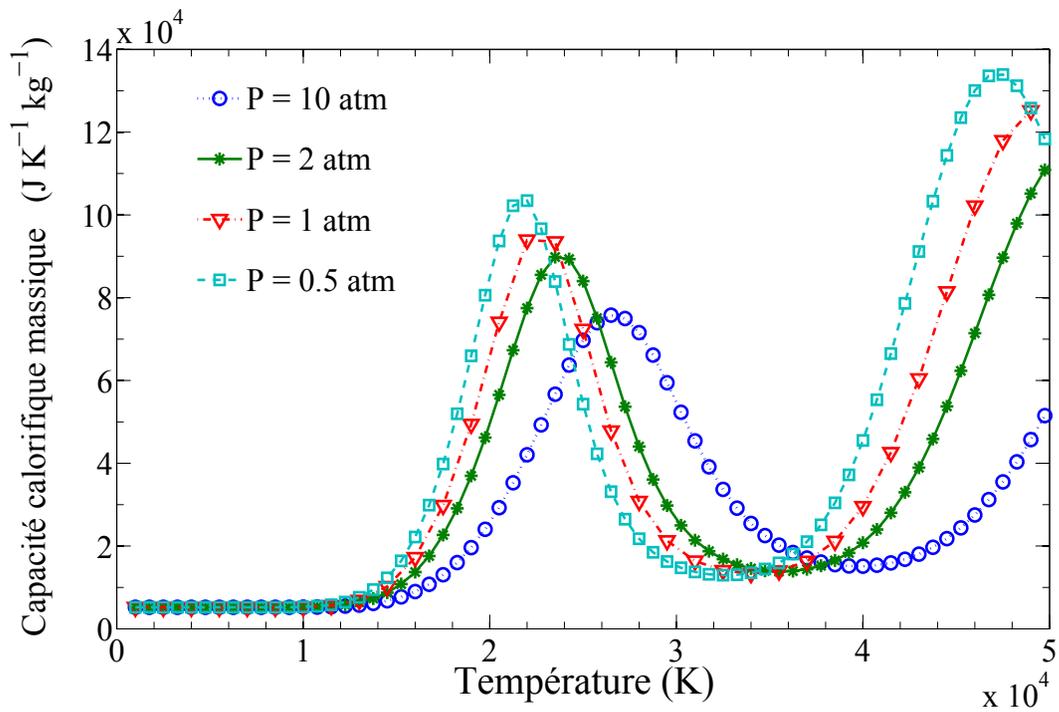


FIGURE IV.9 – Évolution de la capacité calorifique massique du plasma d'hélium en fonction de la température pour quelques pressions à l'ETL.

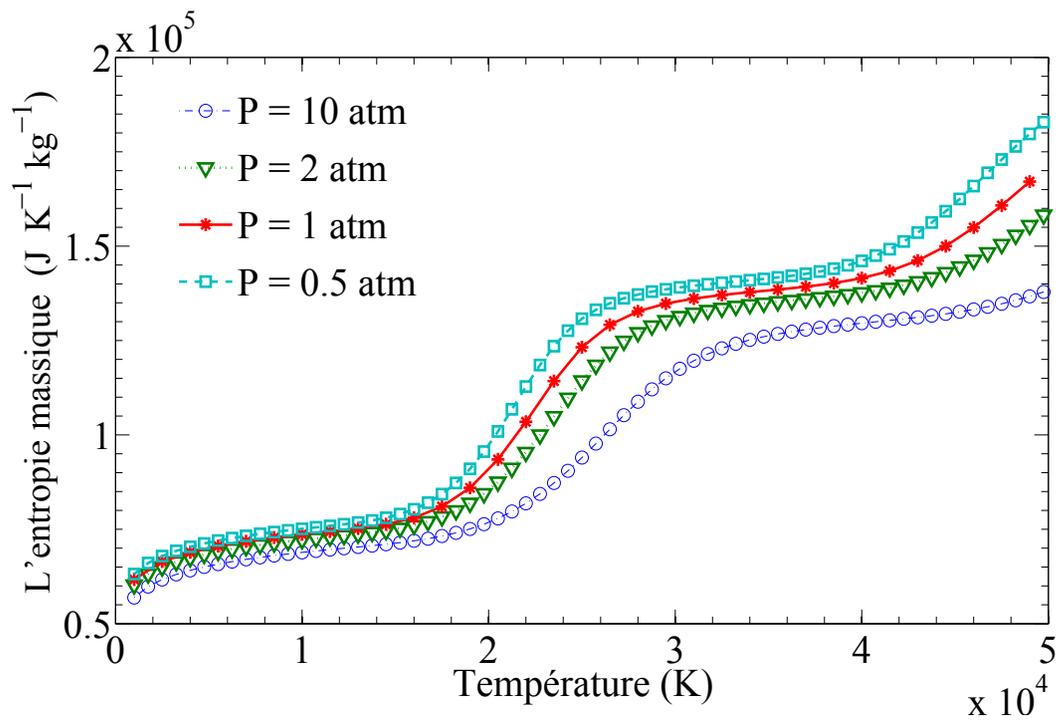


FIGURE IV.10 – Évolution de l'entropie massique du plasma d'hélium en fonction de la température pour quelques pressions à l'ETL.

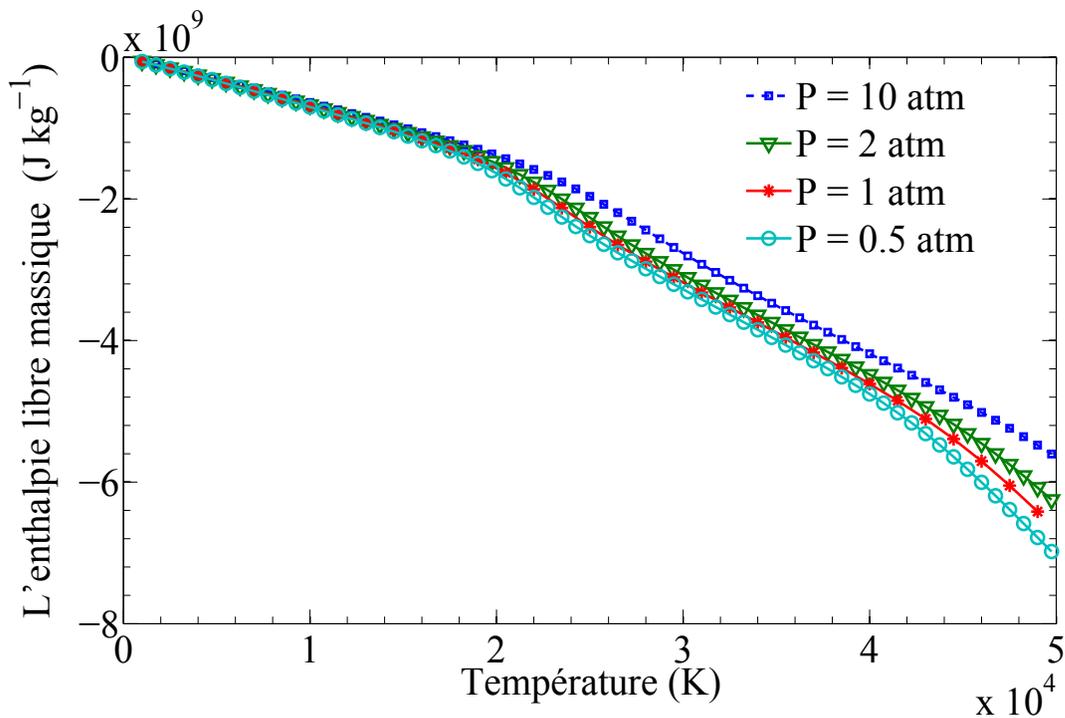


FIGURE IV.11 – Évolution de l'enthalpie libre de Gibbs du plasma d'hélium en fonction de la température pour quelques pressions à l'ETL.

IV.4 Coefficients de transport

Sous l'hypothèse de l'équilibre thermique $T_e \approx T_h \approx T$ les formules employées pour calculer les coefficients de transport restent les mêmes que celles présentées dans le premier chapitre (voir section I.3.3). Pour un plasma d'hélium à deux températures $T_e \neq T_h$, les électrons ayant une masse très faible devant les autres espèces lourdes, leur contribution dans le calcul de la viscosité est négligeable, par conséquent la formule de la viscosité (I.3.137) doit être généralisée au cas d'un plasma hors équilibre en remplaçant la température T par la température des lourds T_h , de même pour la conductivité thermique relative aux espèces lourdes (voir équation (I.3.145)). La température T qui apparaît dans la conductivité thermique relative aux électrons (voir équation (I.3.146)) doit être remplacée par celle des électrons T_e . Le courant électrique dans le plasma est dû essentiellement aux électrons, ce qui fait que la conductivité électrique (voir équation (I.3.160)) dépend exclusivement de la température des électrons T_e dans le cas d'un plasma hors équilibre.

La méthode numérique utilisée dans le calcul des intégrales de collision relatives aux coefficients de transport du plasma d'hélium est celle exposée dans la chapitre III en tenant compte des singularités qui apparaissent dans le calcul des sections efficaces, traitées dans le deuxième chapitre, section II.3.4.

IV.4.1 Potentiels d'interaction

Le potentiel d'interaction est le paramètre d'entrée le plus important dans le calcul des intégrales de collisions qui permettent une évaluation des coefficients de transport. Le choix de la forme du potentiel influence significativement les résultats des coefficients de

transport, ce qui a été montré dans le premier chapitre (voir section I.3.3.8) et ce qui va être confirmé dans la suite de ce paragraphe.

En général, dans un plasma faiblement ionisé, il existe quatre types d'interactions qui peuvent avoir lieu, à savoir une interaction neutre-neutre ; chargée-neutre ; électron-neutre et chargée-chargée. A chaque type d'interaction on associe un potentiel d'interaction bien spécifique. Dans notre cas d'étude, on a pris en considération toutes les interactions possibles au sein d'un plasma d'hélium faiblement ionisé.

IV.4.1.1 Interaction $He-He$

C'est une interaction type neutre-neutre, pour la décrire, plusieurs formes de potentiels ont été proposés à basses températures, le potentiel d'Aziz [98] reproduit à partir de données expérimentales, semble le plus approprié puisque il donne le meilleur accord entre les coefficients de transport calculés et ceux mesurés expérimentalement. A haute température, les paramètres du potentiel de Hulbert-Hirschfelder [54, 53] (voir équation (III.5.1)) ont été ajustés à partir des valeurs données par le potentiel d'Aziz [98]. Les paramètres utilisés sont : $D_e = 10.948 K$, $r_e = 2.963 \text{ \AA}$, $\alpha_{HH} = 6.375$, $\beta_{HH} = -0.207$, $\gamma_{HH} = 3.726$.

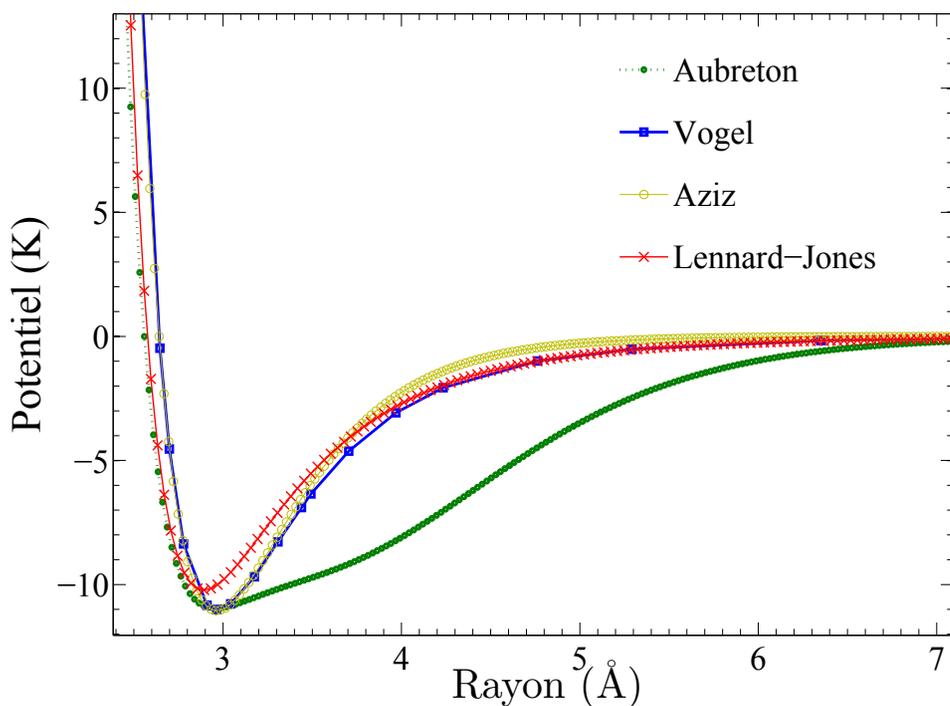


FIGURE IV.12 – Potentiel d'interaction entre deux atomes neutres d'hélium donné par différents auteurs.

La figure IV.12 montre une comparaison de différents potentiels d'interaction relatifs à l'interaction $He - He$ donnés par différents auteurs : Aubreton [81], Vogel [99], Aziz [98], Song [100] et Lennard-Jones (voir deuxième chapitre, section II.1.2.5). Ces différents potentiels ont une influence plus au moins importante sur les coefficients de transport. L'écart relatif de chaque coefficient calculé à partir d'un potentiel cité ci-dessus est pré-

senté sur la figure IV.13 pour la viscosité, et sur la figure IV.14 pour le coefficient de diffusion.

Sur l'axe des ordonnées, figure IV.12, on a tracé les écarts relatifs de chaque coefficient de viscosité η_p calculé à partir des différents potentiels d'interaction montrés sur la figure IV.13 par rapport au coefficient de viscosité de référence, calculé à partir du potentiel de Hulburt-Hirshfelder η_{HH} (cité au début de ce paragraphe). Le même raisonnement peut être fait pour le coefficient de diffusion, figure IV.14, qu'on peut formuler comme ceci :

$$\delta_\eta[\%] = \frac{\eta_p - \eta_{HH}}{\bar{\eta}} \times 100 \quad (\text{IV.4.1})$$

$$\delta_D[\%] = \frac{D_p - D_{HH}}{\bar{D}} \times 100$$

avec $\bar{\eta}$ la moyenne prise par rapport à tous les coefficient de viscosité relatifs à chaque potentiel montré sur la figure IV.12, et \bar{D} la moyenne prise par rapport à tous les coefficients de diffusion relatifs à chaque potentiel de la figure IV.12. Dans le cas de viscosité, les résultats ont été comparés aux valeurs expérimentales [101]. A basse température ($T < 1000$ K), l'écart relatif est assez faible entre les différents potentiels, qui est de l'ordre de 1 %. A plus haute température l'écart augmente légèrement, à l'exception de Lennard-Jones qui présente une divergence beaucoup plus importante comparée aux autres. Cet écart peut s'expliquer par le fait que le potentiel de Lennard-Jones possède une zone répulsive très élevée (pour de faibles distances inter-particulaires) par rapport aux autres potentiels qui présentent des différences essentiellement dans les zones attractives.

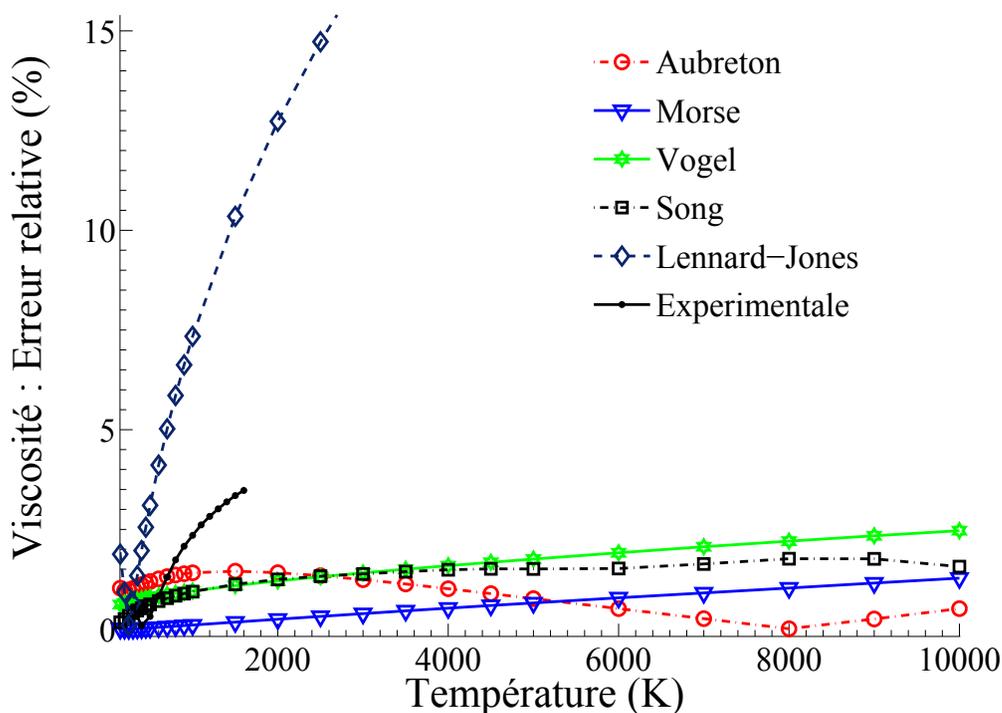


FIGURE IV.13 – Comparaison de la viscosité relative aux différents potentiels d'interaction de l'atome neutre de l'hélium.

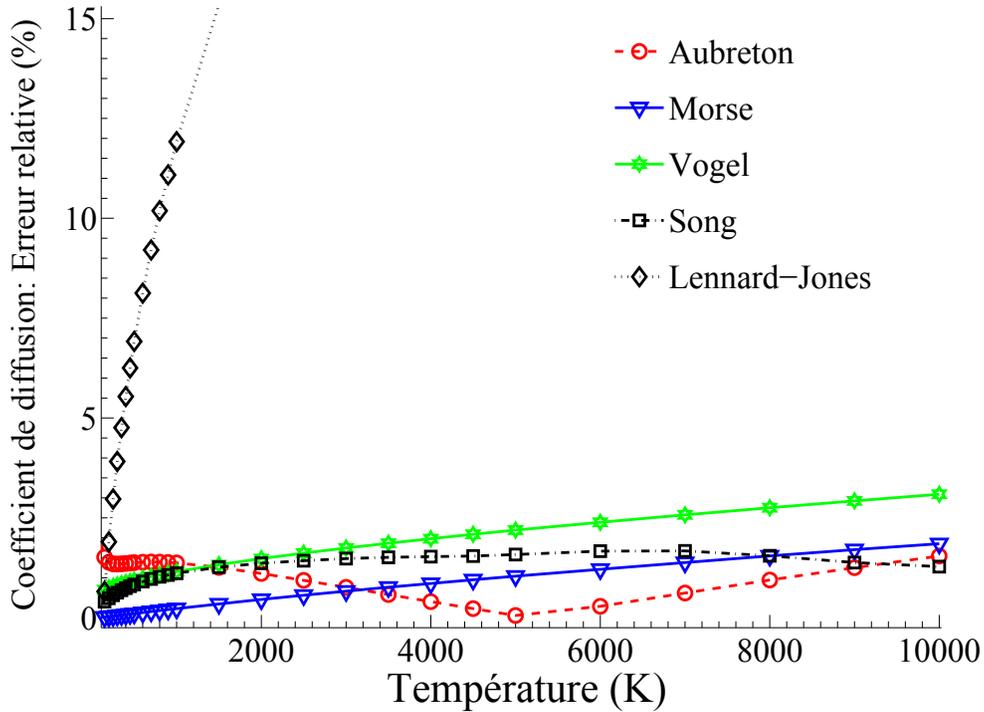


FIGURE IV.14 – Comparaison du coefficient de diffusion relatif aux différents potentiels d'interaction de l'atome neutre de l'hélium.

IV.4.1.2 Interaction $He-He^+$

Deux états d'excitation ont été pris en compte pour cette interaction de type neutre-chargée, un état $^1\Sigma_g$ et un état $^3\Sigma_u$. Le même potentiel de Hulber-Hirschfelder a été adopté pour décrire ces deux interactions avec des paramètres ajustés à partir des données proposées dans [102].

$$- \ ^1\Sigma_g : D_e = 0.00215 \text{ eV}, r_e = 4.619 \text{ \AA}, \alpha_{HH} = 4.650, \beta_{HH} = -0.0049, \gamma_{HH} = -2528.0.$$

$$- \ ^3\Sigma_u : D_e = 2.448 \text{ eV}, r_e = 1.085 \text{ \AA}, \alpha_{HH} = 2.235, \beta_{HH} = 0.0086, \gamma_{HH} = 0.8524.$$

Un transfert de charge peut avoir lieu entre une particule neutre et une chargée ($P_1 + P_2^+ \rightarrow P_1^+ + P_2$), qui correspond à une collision inélastique, et la section efficace de transfert de charge [81] s'écrit comme ceci :

$$Q_{ex} = \frac{1}{2} (A - B \ln g)^2 \quad (\text{IV.4.2})$$

g est la vitesse relative, A et B sont des constantes données par Aubreton [81] : $A = 1.842 \text{ nm}$ et $B = 0.08214 \text{ nm}$.

La contribution des intégrales de collision $\Omega_{ex}^{\ell,s}$ relatives aux sections efficaces de transfert de charge Q_{ex} par rapport aux intégrales de collision totales $\Omega_{tot}^{\ell,s}$ est donnée par la relation suivante :

$$\Omega_{tot}^{(\ell,s)*} = \sqrt{(\Omega_{el}^{(\ell,s)*})^2 + (\Omega_{ex}^{(\ell,s)*})^2} \quad (\text{IV.4.3})$$

avec $\Omega_{el}^{\ell,s}$ l'intégrale de collision élastique. L'expression de $\Omega_{ex}^{\ell,s}$ est donnée par Devoto [34, 38] :

$$\begin{aligned} \pi\Omega_{ex}^{\ell,s*} &= A^2 - ABX - \left(\frac{BX}{2}\right)^2 + \frac{B\zeta}{2}(BX - 2A) + \frac{B^2}{4}\left(\frac{\pi^2}{6} - \sum_{n=1}^{s+1}\frac{1}{n^2} + \zeta^2\right) \\ &+ \frac{B}{2}(B(X + \zeta) - 2A)\ln\left(\frac{M}{T}\right) + \left(\frac{B}{2}\ln\left(\frac{T}{M}\right)\right)^2 \end{aligned} \quad (\text{IV.4.4})$$

tel que $X = \ln(4R)$ et $\zeta = \sum_{n=1}^{s+1} -\gamma$, avec R la constante des gaz parfaits et γ la constante d'Euler qui vaut 0.5772.

IV.4.1.3 Interaction $He-He^{++}$

Une étude théorique a été faite dans [103] pour retrouver les différents potentiels correspondant aux différents niveaux d'excitation de cette interaction. On ne tient compte, dans nos calculs, que des deux premiers niveaux d'excitation $^1\Sigma_g$ et un état $^3\Sigma_u$.

IV.4.1.4 Interaction $He-e^-$

Des sections efficaces ont été déjà évaluées par Capitelli et al [83] pour une interaction entre un électron et une particule d'hélium neutre.

IV.4.1.5 Interaction chargée-chargée

Une interaction chargée-chargée concerne toutes les combinaisons possibles entre particules chargées positivement ou négativement (He^+ , He^{++} , e^-). Des sections efficaces pour ce type d'interaction ont été calculées analytiquement par Devoto [34] à partir du potentiel de Coulomb écranté à la longueur de Debye :

$$Q^{(1,s)} = \frac{4\pi}{s(s+1)}b_0^2 \left[\ln\left(\frac{2\lambda_D}{b_0} - \frac{1}{2} - 2\gamma + \Psi(s)\right) \right] \quad (\text{IV.4.5})$$

$$Q^{(2,s)} = \frac{12\pi}{s(s+1)}b_0^2 \left[\ln\left(\frac{2\lambda_D}{b_0} - \frac{1}{2} - 2\gamma + \Psi(s)\right) \right]$$

où $\Psi(s) = \sum_{n=1}^{s+1} \left(\frac{1}{n}\right)$, $\Psi(1) = 0$ et b_0 est défini déjà dans la section I.3.1.3.iii.

Le calcul final qui nous permet l'évaluation des coefficients de transport du plasma d'hélium fait intervenir toutes les combinaisons possibles d'interaction entre les particules. Avec les différentes interactions citées ci-dessus, il sont désormais possible de calculer les coefficients de transport du plasma d'hélium. Les résultats seront présentés dans le paragraphe suivant.

IV.4.2 Résultats de calcul

Dans cette partie nous présentons les différents résultats de calcul qui sont obtenus dans le cas d'équilibre et dans le cas hors équilibre thermique. L'évolution des coefficients de transport du plasma d'hélium en fonction de la température pour quelques valeurs de pressions est présentée sur les figures numérotées de IV.15 à IV.20 dans le cas d'un plasma à une seule température. La comparaison entre les deux formules de la longueur de Debye relatif à un plasma d'hélium à l'ETL est présentée sur la figure IV.21 et l'influence du choix de la longueur de Debye sur l'évolution de la conductivité électrique du plasma d'hélium en fonction de la température est montrée sur la figure IV.22. Dans le cas d'un plasma à deux températures, nous avons calculé les coefficients de transport du plasma d'hélium en utilisant trois méthodes différentes relatives au calcul de composition, voir figures numérotées de IV.23 à IV.28. Les méthodes 1, 2 et 3 désignent, respectivement, la méthode de Potapov [90, 92], la méthode de Van de Sanden [94] et la méthode d'André [95, 96] adoptées dans le calcul de composition. Les valeurs choisies pour le paramètre de déséquilibre thermique θ sont : $\theta = 3$, $\theta = 2$, $\theta = 1.5$ et $\theta = 1$.

IV.4.2.1 Le cas à l'équilibre thermique

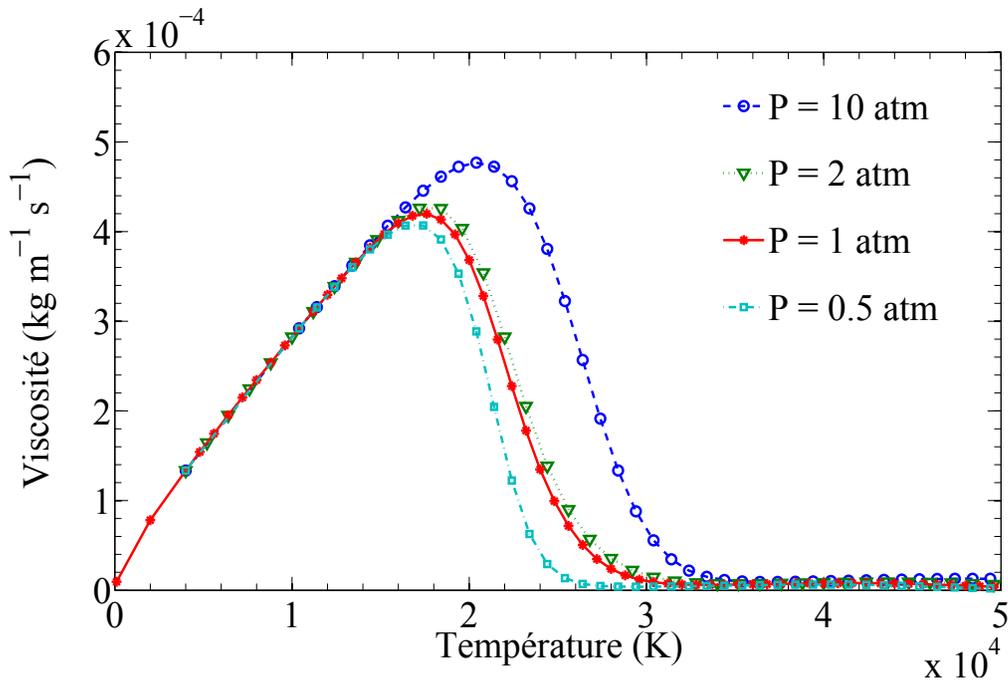


FIGURE IV.15 – Évolution de la viscosité du plasma d'hélium en fonction de la température pour quelques pressions à l'ETL.

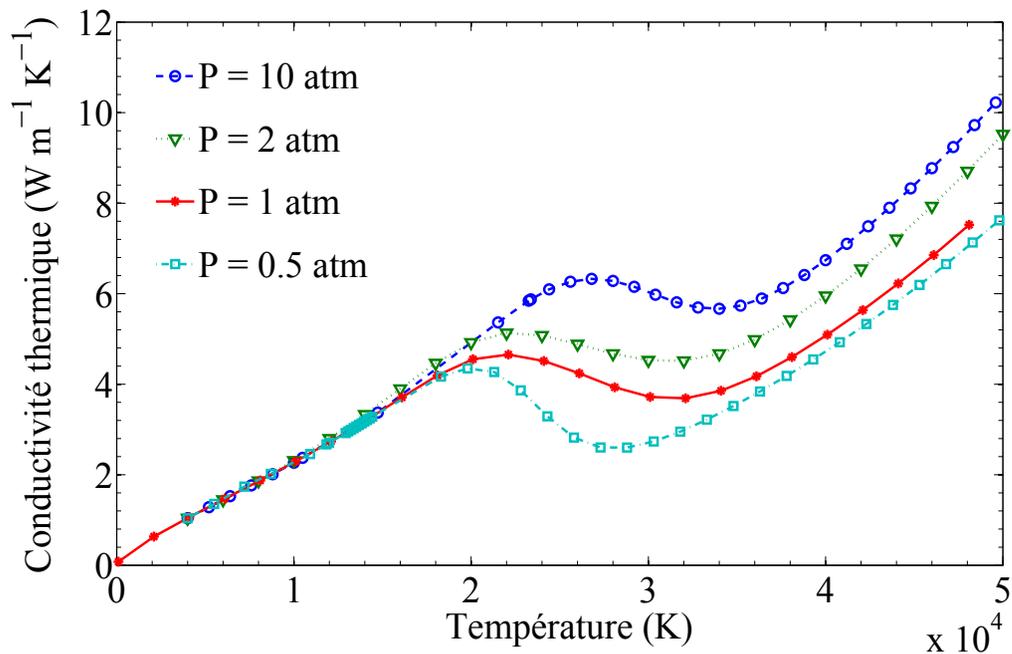


FIGURE IV.16 – Évolution de la conductivité thermique translationnelle relative au espèces lourdes du plasma d'hélium en fonction de la température pour quelques pressions à l'ETL.

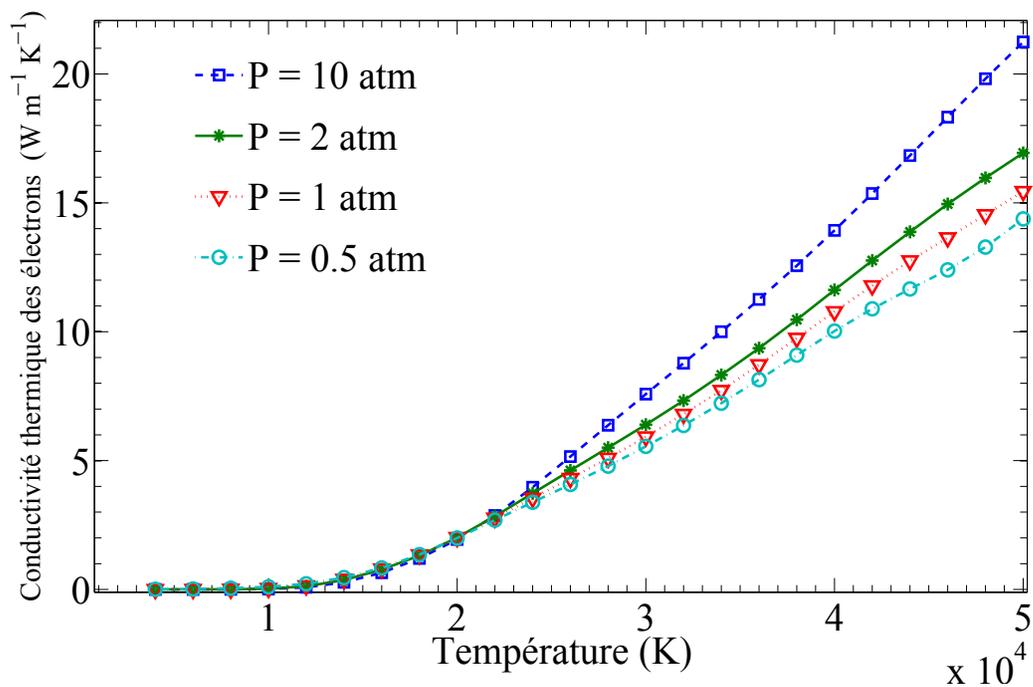


FIGURE IV.17 – Évolution de la conductivité thermique des électrons d'un plasma d'hélium en fonction de la température pour quelques pressions à l'ETL.

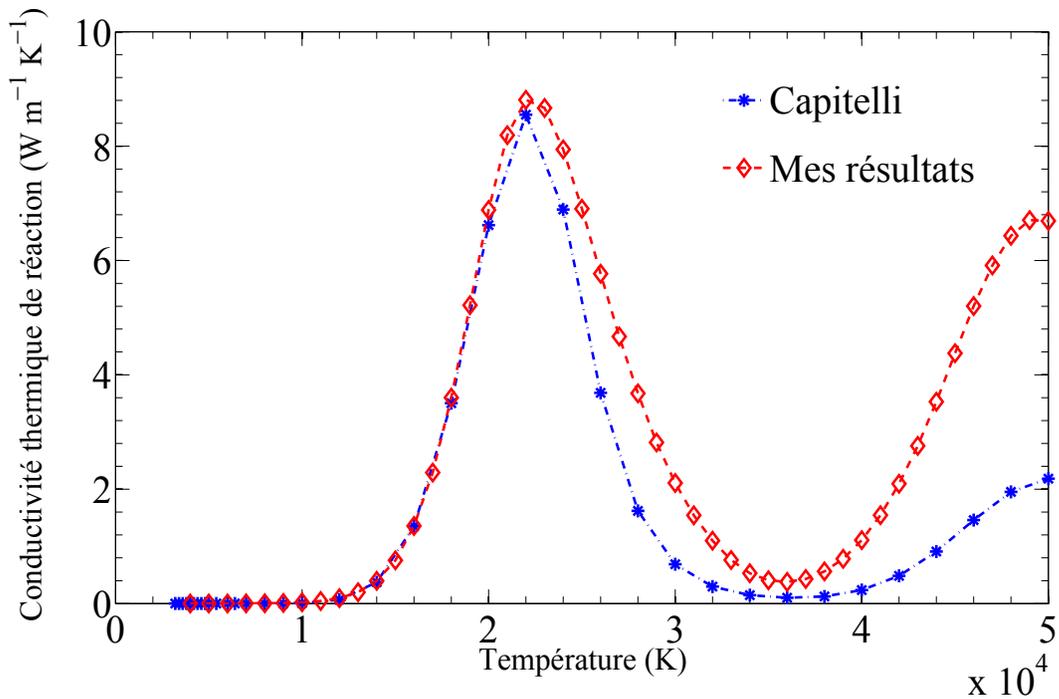


FIGURE IV.18 – Évolution de la conductivité thermique de réaction d'un plasma d'hélium en fonction de la température à l'ETL. Les résultats ont été comparés avec ceux de Capitelli [83].

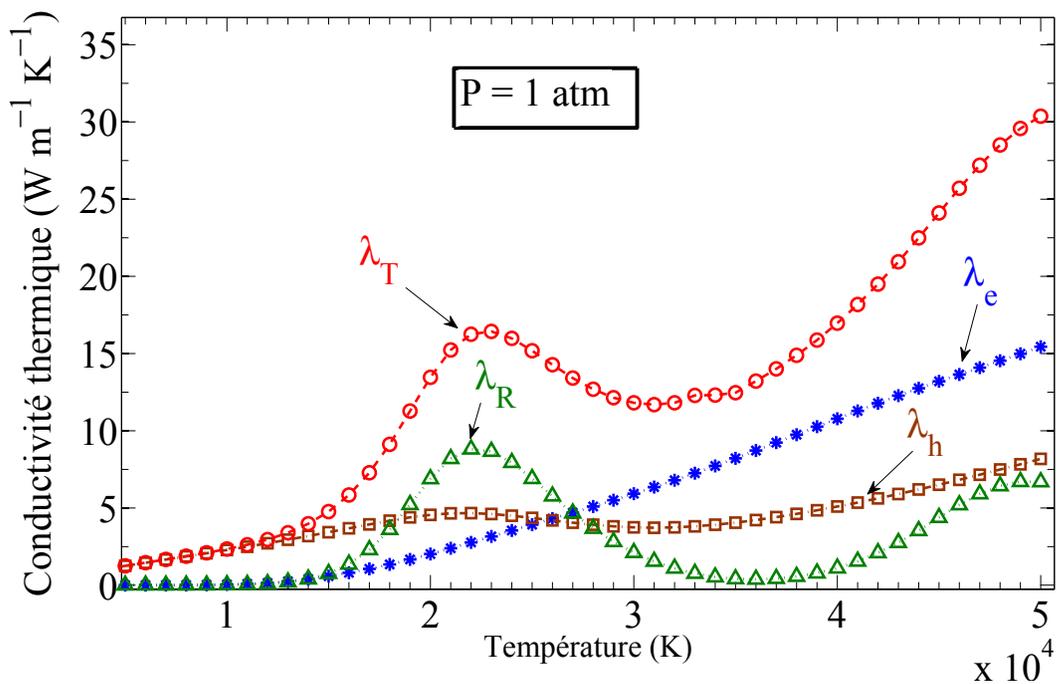


FIGURE IV.19 – Évolution de la conductivité thermique totale λ_T d'un plasma d'hélium en fonction de la température à l'ETL.

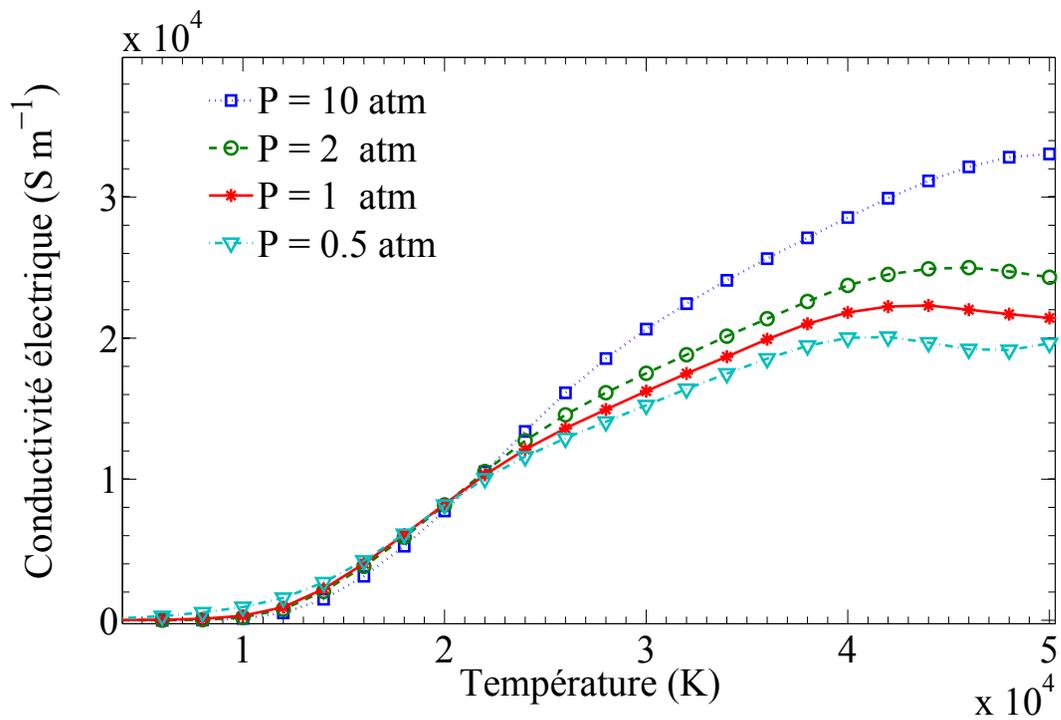


FIGURE IV.20 – Évolution de la conductivité électrique du plasma d'hélium en fonction de la température pour quelques pressions à l'ETL.

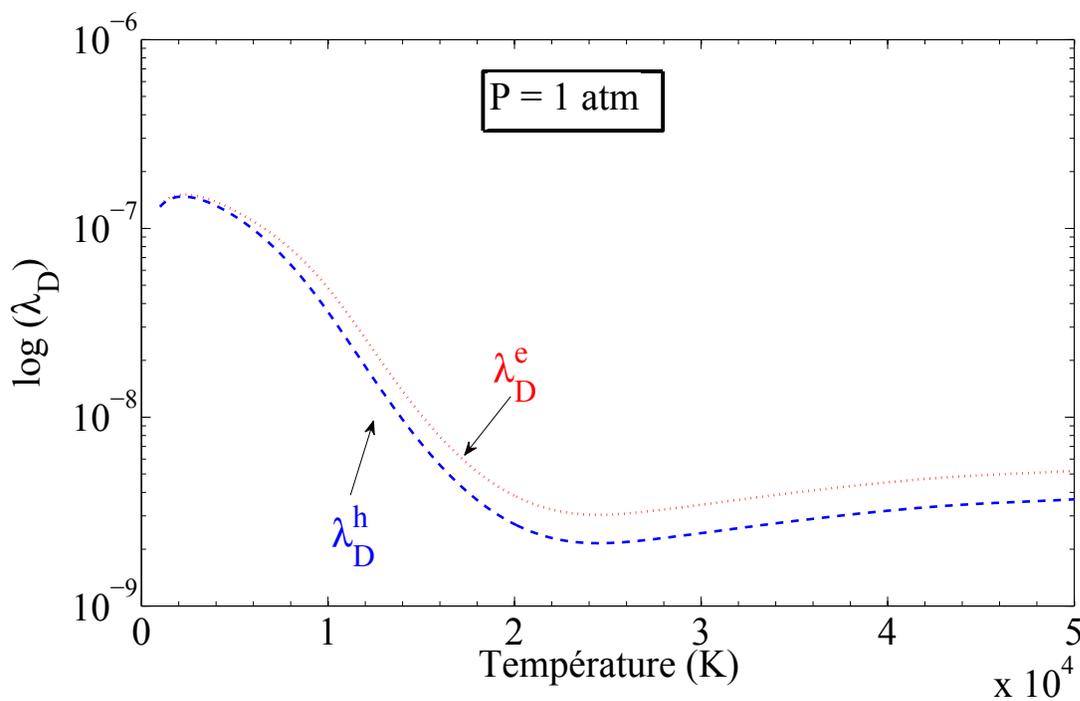


FIGURE IV.21 – Comparaison entre les deux formules de la longueur de Debye relatif à un plasma d'hélium à l'ETL.

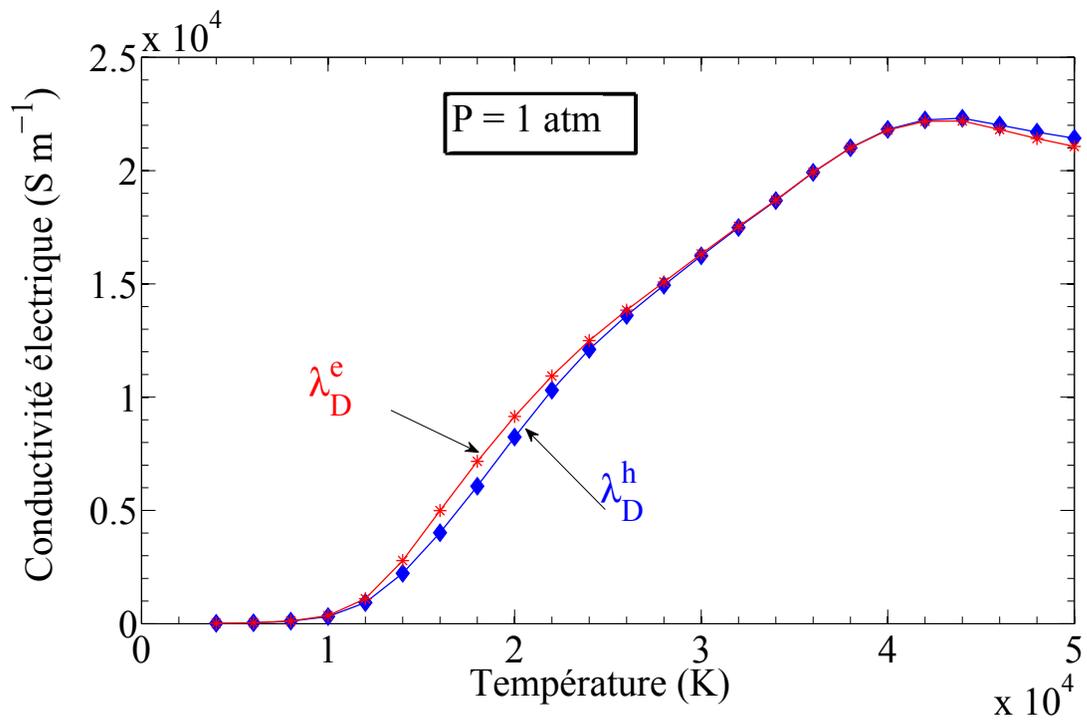


FIGURE IV.22 – Influence du choix de la longueur de Debye sur l'évolution de la conductivité électrique du plasma d'hélium en fonction de la température à l'ETL.

IV.4.2.2 Le cas hors équilibre thermique

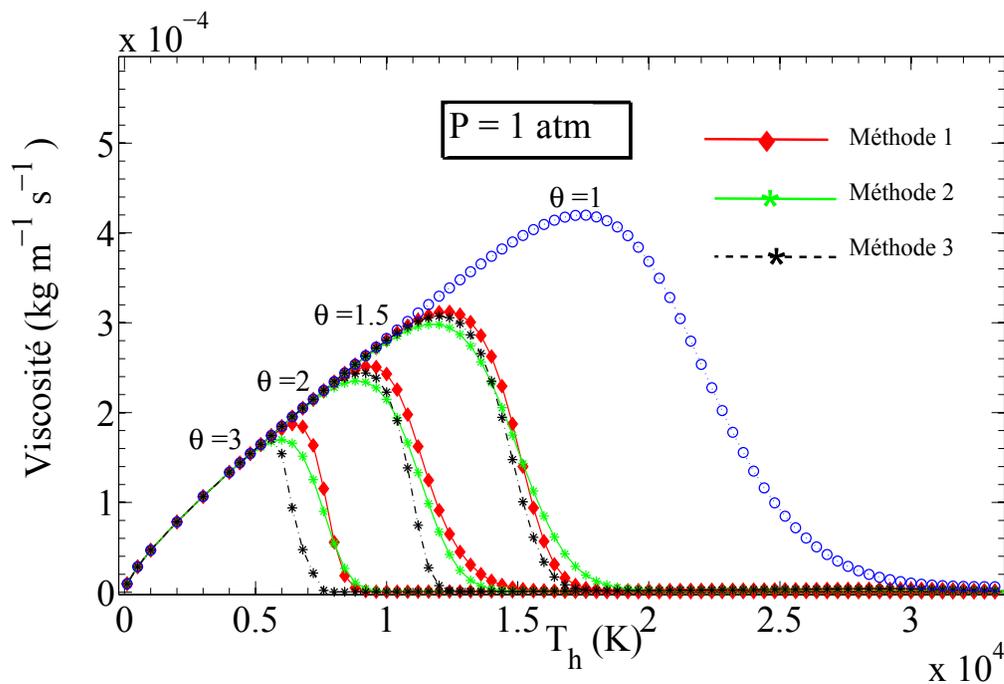


FIGURE IV.23 – Évolution de la viscosité en fonction de la température T_h du plasma d'hélium hors équilibre à 1 atm. Les méthodes 1, 2 et 3 désignent, respectivement, la méthode de Potapov [90, 92], la méthode de Van de Sanden [94] et la méthode d'André [95, 96] adoptées dans le calcul de composition.

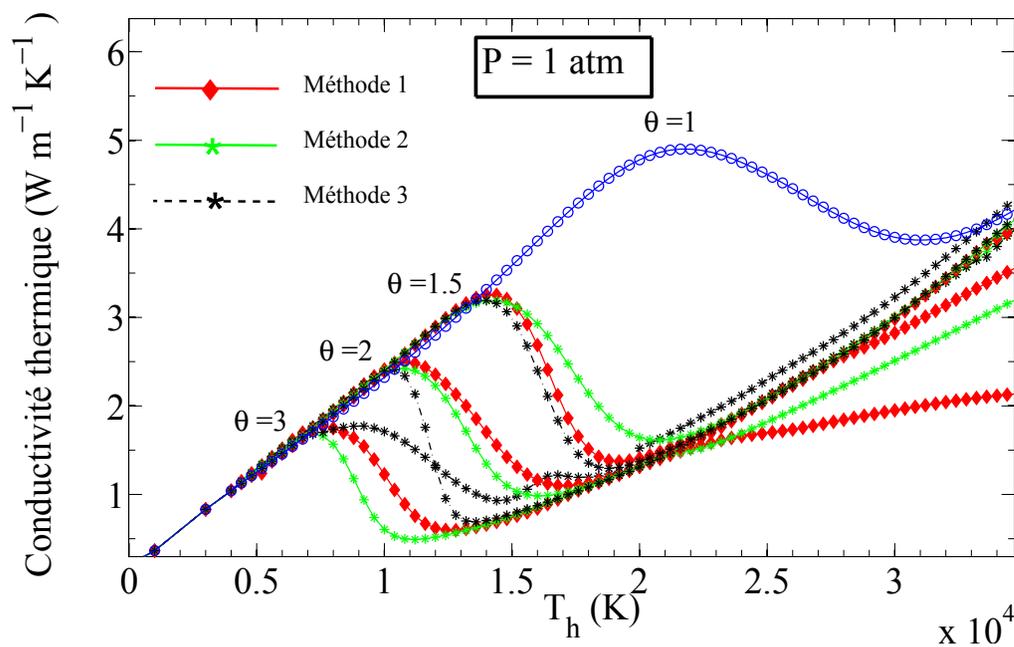


FIGURE IV.24 – Évolution de la conductivité thermique translationnelle relative au espèces lourdes en fonction de la température T_h du plasma d'hélium hors équilibre à 1 atm. Les méthodes 1, 2 et 3 désignent, respectivement, la méthode de Potapov [90, 92], la méthode de Van de Sanden [94] et la méthode d'André [95, 96] adoptées dans le calcul de composition.

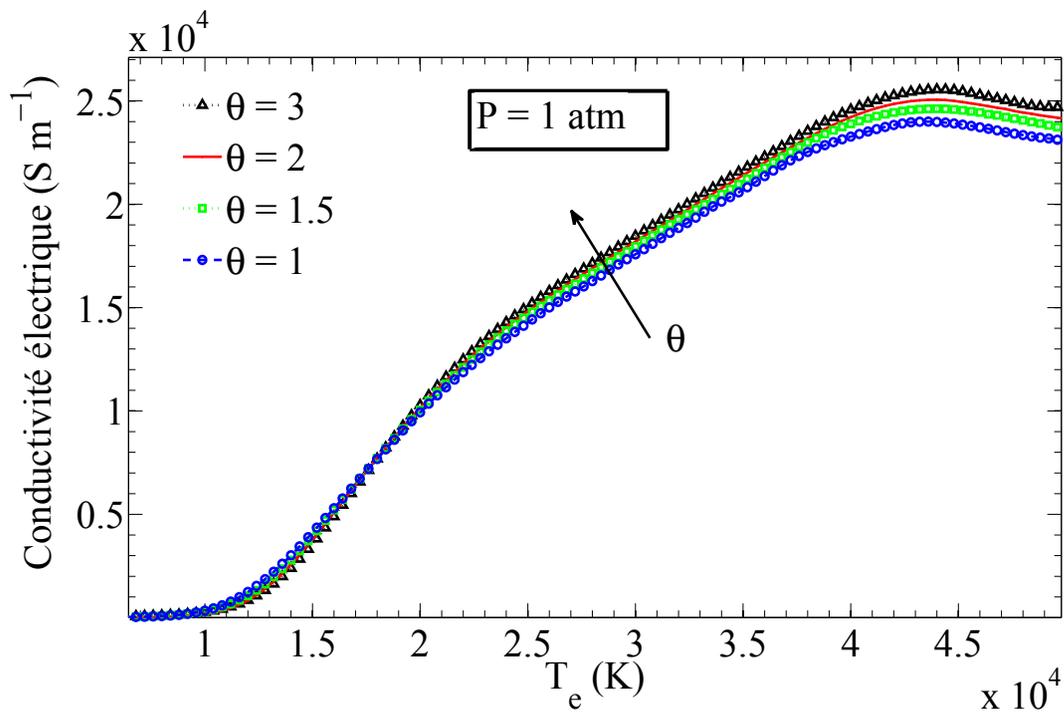


FIGURE IV.25 – Évolution de la conductivité électrique en fonction de la température T_e du plasma d'hélium hors équilibre à 1 atm. La méthode adoptée dans le calcul de composition est celle de Van de Sanden.

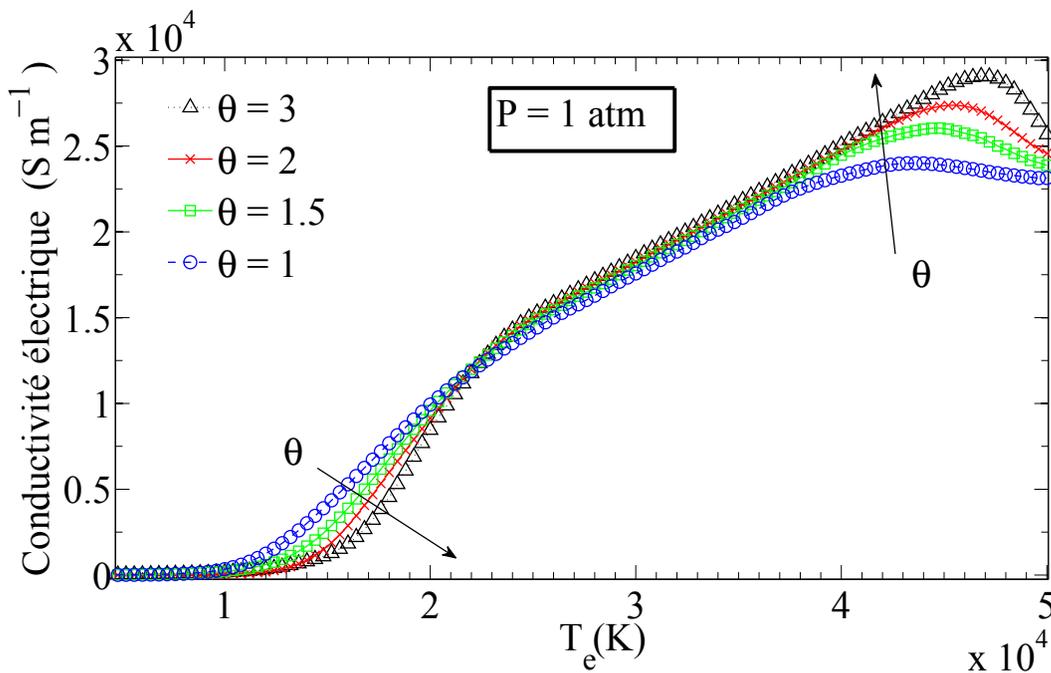


FIGURE IV.26 – Évolution de la conductivité électrique en fonction de la température T_e du plasma d'hélium hors équilibre à 1 atm. La méthode adoptée dans le calcul de composition est celle de Potapov.

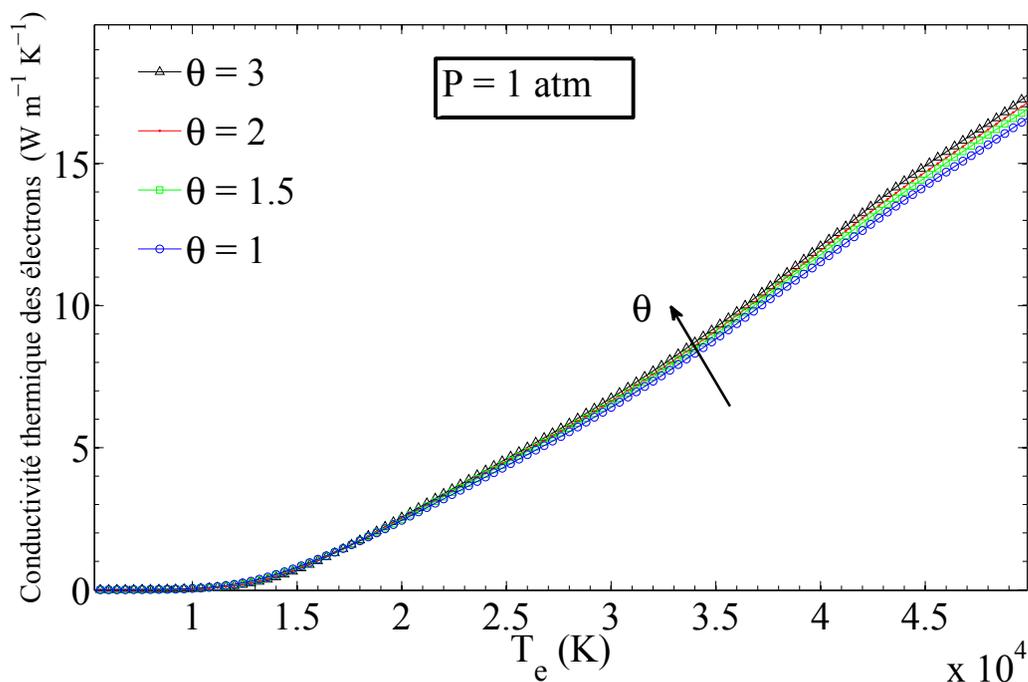


FIGURE IV.27 – Évolution de la conductivité thermique de translation des électrons en fonction de la température T_e du plasma d'hélium hors équilibre à 1 atm. La méthode adoptée dans le calcul de composition est celle de Van de Sanden.

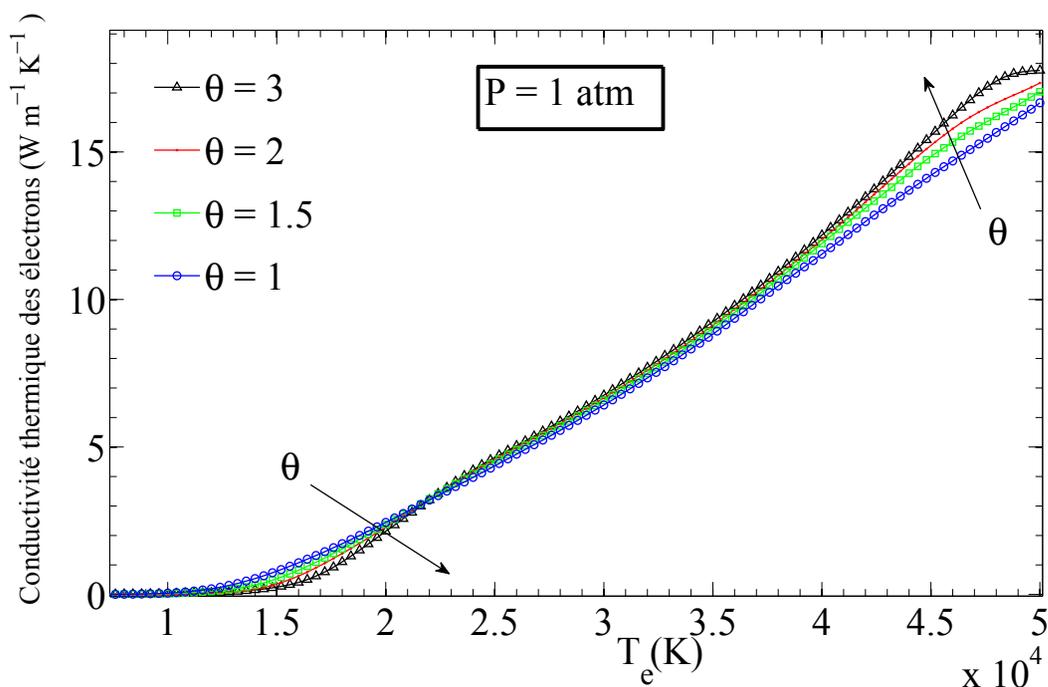


FIGURE IV.28 – Évolution de la conductivité thermique de translation des électrons en fonction de la température T_e du plasma d'hélium hors équilibre à 1 atm. La méthode adoptée dans le calcul de composition est celle de Potapov.

Les propriétés thermodynamiques ainsi que les coefficients de transport du plasma d'hélium ont été calculés en fonction de la température à l'équilibre et hors-équilibre pour

plusieurs paramètres de déséquilibre thermique θ à la pression atmosphérique. Dans le cas hors équilibre, les trois méthodes de calcul de composition citées ci-dessus donnent des résultats similaires pour les températures $T < 6000K$, contrairement aux hautes températures ($T > 6000K$) où des différences, sur les coefficients de transport, deviennent plus importantes. Les résultats numériques obtenus ne présentent pas la meilleure méthode mais plutôt la mise en évidence de l'influence du choix de la méthode de calcul de composition sur les coefficients de transport. Un choix judicieux de la méthode de composition à adopter dans le calcul des coefficients de transport est donc nécessaire.

Chapitre V

Interaction onde plasma : Application au plasma d'hélium

Sommaire

| | |
|---|------------|
| V.1 Le modèle théorique | 164 |
| V.1.1 Les équations de base | 164 |
| V.1.2 Adimensionnement des équations | 167 |
| V.2 Le modèle numérique | 168 |
| V.2.1 Le cas d'un matériau conducteur | 168 |
| V.2.2 Le cas d'un plasma d'hélium | 171 |
| V.3 Résultats de la simulation | 171 |
| V.3.1 Le cas d'un matériau conducteur | 171 |
| V.3.2 Le cas d'un plasma d'hélium | 173 |

Ce chapitre, qui est une application directe des coefficients de transport, porte sur une étude d'un modèle simple d'un transfert de chaleur d'une onde électromagnétique vers un plasma d'hélium. Le même concept est utilisé dans des applications industrielles, à savoir dans le chauffage par micro-onde.

Dans la première partie de ce chapitre nous présentons le modèle théorique et les équations utilisées qui font intervenir les coefficients de transport (la conductivité thermique et la conductivité électrique).

La deuxième partie porte sur le modèle numérique utilisé dans deux cas, à savoir le cas d'un plasma d'hélium et le cas d'un matériaux conducteur qui sert notamment de modèle test pour valider la méthode numérique.

Enfin, la troisième partie présente les résultats de la simulation dans les deux cas cités ci-dessus.

V.1 Le modèle théorique

Un nombre important de technologies modernes comme les radars, les télécommunications, l'imagerie médicale, les micro-ondes...etc sont une manifestation des phénomènes électromagnétiques.

V.1.1 Les équations de base

Une onde électromagnétique est une combinaison de champ électrique et de champ magnétique qui se propagent dans le vide à la vitesse de la lumière. La particularité de l'utilisation des ondes électromagnétiques réside dans leur capacité à transporter de l'information, de l'énergie mais aussi de sonder la matière dans ses différentes échelles.

Les phénomènes électromagnétiques sont gouvernés par des équations connues sous le nom d'équations de Maxwell. Dans un milieu continu, les équations de Maxwell s'écrivent comme ceci :

$$\vec{\nabla} \wedge \vec{H} = \vec{J} + \frac{\partial \vec{D}}{\partial t} \quad (\text{V.1.1})$$

$$\vec{\nabla} \wedge \vec{E} = -\frac{\partial \vec{B}}{\partial t} \quad (\text{V.1.2})$$

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{B} = 0 \quad (\text{V.1.3})$$

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{D} = \rho_q \quad (\text{V.1.4})$$

avec \vec{H} le champ magnétique ($A.m^{-1}$), \vec{B} l'induction magnétique (*Tesla*), \vec{E} le champs électrique ($V.m^{-1}$), \vec{D} le déplacement électrique ($C.m^{-2}$), \vec{J} la densité de courant électrique ($A.m^{-2}$) et ρ_q la densité volumique des charges électriques ($C.m^{-3}$), respectivement.

Les deux premières équations (V.1.1) et (V.1.2) sont des équations d'évolutions qui traduisent le lien qui existe entre le champ magnétique et le champ électrique, et le fait qu'une variation spatiale du champ électrique crée une variation temporelle du champ magnétique, et vice-versa. A une différence près, le champ électrique peut être obtenu avec un dipôle électrique créé par des particules chargées (qui peuvent être statiques), contrairement au champ magnétique qui nécessite une variation spatiale du champ électrique pour exister.

Le déplacement électrique \vec{D} et la densité de courant électrique \vec{J} sont reliés au champs électrique \vec{E} par les relations suivantes :

$$\vec{D} = \epsilon \vec{E} \quad (\text{V.1.5})$$

$$\vec{J} = \sigma \vec{E} \quad (\text{V.1.6})$$

de la même façon, le champ magnétique \vec{H} est relié à l'induction magnétique \vec{B} via la formule ci-dessous :

$$\vec{B} = \mu \vec{H} \quad (\text{V.1.7})$$

avec ϵ , μ et σ ($S.m^{-1}$) la permittivité diélectrique, la perméabilité magnétique et la conductivité électrique, respectivement, relatives au milieu où se propage l'onde électromagnétique. Dans le vide on a : $\epsilon_0 = 8.8542 \cdot 10^{-12} F.m^{-1}$, $\mu_0 = 4\pi \cdot 10^{-7} H.m^{-1}$ et $\sigma = 0$ ($J = 0$).

Dans le cas général, la permittivité diélectrique ϵ et la perméabilité magnétique μ du milieu où se propage l'onde électromagnétique, peuvent être exprimées en fonction de l'indice de réfraction n du milieu ainsi que des constantes ϵ_0 et μ_0 , sous les formes suivantes :

$$\epsilon = \epsilon_0 n^2 \quad (\text{V.1.8})$$

$$\mu = \mu_0 n^2 \quad (\text{V.1.9})$$

On pourrait définir ainsi la permittivité diélectrique relative¹ ϵ_r et la perméabilité magnétique relative μ_r comme ceci :

$$\epsilon_r = \frac{\epsilon}{\epsilon_0} = n^2 \quad (\text{V.1.10})$$

$$\mu_r = \frac{\mu}{\mu_0} \quad (\text{V.1.11})$$

Dans de nombreux milieux (les gaz, le cuivre, l'aluminium,..etc) la perméabilité magnétique relative μ_r est prise égale approximativement à 1. La figure V.1 montre un modèle simple d'une interaction entre un milieu plasma et une onde électromagnétique.

1. La relation V.1.10 n'est vraie que dans le cas d'un milieu non magnétique ($\mu_r = 1$).

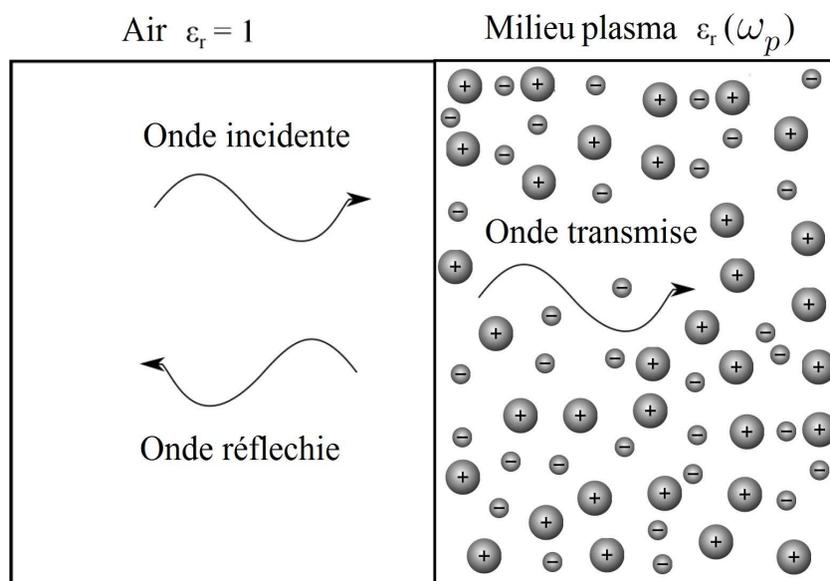


FIGURE V.1 – Illustration d'un modèle simple d'une interaction entre un milieu plasma et une onde électromagnétique.

La vitesse de propagation de l'onde électromagnétique dans le vide est égale à la vitesse de la lumière $c = 1/\sqrt{\epsilon_0\mu_0} \approx 2.99 \cdot 10^8 m.s^{-1}$ et le module du champ électrique $\|\vec{E}\|$ est relié au module du champ magnétique $\|\vec{B}\|$ par la constante c : $\|\vec{E}\| = c\|\vec{B}\|$. La vitesse de l'onde électromagnétique dans un milieu de permittivité diélectrique ϵ et de perméabilité magnétique μ est égale à $v = 1/\sqrt{\epsilon\mu}$.

Pour un plasma homogène, l'indice de réfraction n s'exprime de la façon suivante [10] :

$$n = \sqrt{1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2}} \quad (\text{V.1.12})$$

avec $\omega_p = 2\pi f_p$ la pulsation (f_p la fréquence) plasma (voir section I.1.3.2) et ω la fréquence de l'onde électromagnétique. Il faut noter que l'onde électromagnétique peut se propager dans le plasma uniquement si $\omega > \omega_p$, sinon on aura une réflexion totale pour des fréquences électromagnétiques inférieures à la fréquence plasma. Si on prend l'exemple d'un plasma ionosphérique, qui a pour densité électronique $n_e \approx 10^{11} m^{-3}$ alors la fréquence plasma $f_p \approx 8.98\sqrt{n_e} \approx 3 MHz$, par conséquent les seules ondes électromagnétiques qui sont susceptibles de se propager dans l'ionosphère sont celles qui ont des fréquences supérieures à 3 MHz. C'est pourquoi les communications par satellite se font avec des fréquences bien spécifiques.

Un champ électromagnétique transporte une énergie sous forme de flux qui peut être représenté par le vecteur de Poynting qui s'exprime en watt par mètre carré et s'écrit :

$$\vec{P} = \vec{E} \wedge \vec{H} \quad (\text{V.1.13})$$

On note W la densité d'énergie électromagnétique totale ($J.m^{-3}$) et qui peut être donnée par la formule ci-dessous :

$$W = \frac{1}{2} (\vec{E} \cdot \vec{D} + \vec{B} \cdot \vec{H}) \quad (\text{V.1.14})$$

L'équation de conservation de l'énergie relative au vide, appelée aussi théorème de Poynting est donnée par [104] :

$$\frac{\partial W}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot \vec{P} = -\vec{J} \cdot \vec{E} \quad (\text{V.1.15})$$

Afin de pouvoir étudier la transmission de l'énergie sous forme thermique de l'onde au milieu où elle se propage, il faut coupler les équations de Maxwell avec l'équation de Fourier qui s'écrit :

$$\rho C_p \frac{\partial T}{\partial t} + u \nabla T = \kappa \nabla^2 T + Q \quad (\text{V.1.16})$$

avec T la température (K), u la vitesse ($m.s^{-1}$), ρ la densité volumique ($kg.m^{-3}$), C_p la capacité calorifique ($J.kg^{-1}K^{-1}$), κ la conductivité thermique ($W.m^{-1}K^{-1}$) et Q le terme de source de chaleur ($W.m^{-3}$).

Le premier terme $\rho C_p \frac{\partial T}{\partial t}$ de l'équation (V.1.16) représente le taux d'échange d'énergie thermique, le terme $u \nabla T$ désigne le transfert d'énergie par convection, le terme $\kappa \nabla^2 T$ traduit la diffusion de l'énergie thermique par conduction et le dernier terme Q représente la chaleur générée par l'onde électromagnétique, qui peut être donnée par la relation ci-dessous :

$$Q = \vec{J} \cdot \vec{E} \quad (\text{V.1.17})$$

En combinant les équations (V.1.1) et (V.1.2), le terme Q s'exprime comme ceci :

$$Q = \frac{1}{\sigma} |\vec{\nabla} \wedge \vec{H}|^2 \quad (\text{V.1.18})$$

Dans notre cas d'étude, le plasma étant considéré comme un fluide fixe, la vitesse u est nulle et l'équation (V.1.16) prend la forme suivante :

$$\rho C_p \frac{\partial T}{\partial t} - \kappa \nabla^2 T = \frac{1}{\sigma} |\vec{\nabla} \wedge \vec{H}|^2 \quad (\text{V.1.19})$$

V.1.2 Adimensionnement des équations

L'adimensionnement des équations est une étape nécessaire avant de les mettre sous forme numérique. Pour normaliser les équations (V.1.1), (V.1.2) et (V.1.19), on définit les paramètres sans dimension suivants :

$$T^* = \frac{\rho C_p}{H_0^2} T \quad (\text{V.1.20})$$

$$H^* = \frac{H}{H_0} \quad (\text{V.1.21})$$

$$E^* = H_0^{-1} \sqrt{\frac{\epsilon_0}{\mu_0}} E \quad (\text{V.1.22})$$

$$x^* = \frac{x}{L} \quad (\text{V.1.23})$$

$$t^* = \frac{1}{L\sqrt{\epsilon_0\mu_0}}t \quad (\text{V.1.24})$$

$$\kappa^*(T^*) = \frac{\sqrt{\epsilon_0\mu_0}}{\rho C_p L} \kappa(T) \quad (\text{V.1.25})$$

$$\sigma^*(T^*) = L\sqrt{\frac{\mu_0}{\epsilon_0}} \sigma(T) \quad (\text{V.1.26})$$

avec L et H_0 la dimension du système étudié et l'amplitude maximale du champ électrique délivré, respectivement. On suppose que le produit ρC_p varie très peu en fonction de la température. Dans le cas d'un système uni-dimensionnel $T \rightarrow T(x, t)$ et $H \rightarrow H(x, t)$, l'équation (V.1.19) devient :

$$\frac{\partial T^*}{\partial t^*} - \frac{\partial}{\partial x^*} \left(\kappa^* \frac{\partial T^*}{\partial x^*} \right) = \frac{1}{\sigma^*} \left| \frac{\partial H^*}{\partial x^*} \right|^2 \quad (\text{V.1.27})$$

Et les équations de Maxwell (V.1.1) et (V.1.2) prennent les formes adimensionnées suivantes :

$$\frac{\partial H^*}{\partial x^*} = \sigma^* E^* + \epsilon_r \frac{\partial E^*}{\partial t^*} \quad (\text{V.1.28})$$

$$\frac{\partial E^*}{\partial x^*} = -\mu_r \frac{\partial H^*}{\partial t^*} \quad (\text{V.1.29})$$

On considère que μ_r est égale à l'unité.

V.2 Le modèle numérique

Les trois équations (V.1.27), (V.1.28) et (V.1.29) constituent un système complet qui permet de trouver les variations du champ électrique et du champ magnétique ainsi que l'énergie transférée au milieu considéré sous forme thermique.

Cette partie présente les calculs numériques utilisés dans deux cas :

1. Matériau conducteur ;
2. Plasma d'Hélium.

V.2.1 Le cas d'un matériau conducteur

Dans le cas d'un matériau conducteur, on suppose le terme κ^* est égal à l'unité. Le courant (dû au terme σE) est beaucoup plus important que celui qui est causé par le déplacement électrique traduit par le terme $\vec{D} = \epsilon \vec{E}$, l'équation (V.1.28) se simplifie comme ceci :

$$E^* = \frac{1}{\sigma^*} \frac{\partial H^*}{\partial x^*}$$

$$\Rightarrow \tag{V.2.1}$$

$$\frac{\partial E^*}{\partial x^*} = \frac{\partial}{\partial x^*} \left(\frac{1}{\sigma^*} \frac{\partial H^*}{\partial x^*} \right)$$

En substituant la deuxième formule de l'équation (V.2.1) dans l'équation (V.1.29), on aboutit à une expression qui est fonction d'une seule variable H^* :

$$\frac{\partial H^*}{\partial t^*} = - \frac{\partial}{\partial x^*} \left(\frac{1}{\sigma^*} \frac{\partial H^*}{\partial x^*} \right) \tag{V.2.2}$$

Finalement, le système d'équations qui permet de modéliser le transfert d'énergie d'une onde électromagnétique vers un matériau conducteur est un couple de deux équations données ci-dessous :

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial H^*}{\partial t^*} + \frac{\partial}{\partial x^*} \left(\frac{1}{\sigma^*} \frac{\partial H^*}{\partial x^*} \right) = 0 \\ \frac{\partial T^*}{\partial t^*} - \frac{\partial^2 T^*}{\partial x^{*2}} - \frac{1}{\sigma^*} \left| \frac{\partial H^*}{\partial x^*} \right|^2 = 0 \end{array} \right. \tag{V.2.3}$$

Les conditions aux limites et les conditions initiales relatives au champ H^* et à la température T^* ont été choisies tel que [105] :

$$\left\{ \begin{array}{l} H^*(0, t^*) = \sin(t^*) \quad \rightarrow x = 0 \\ H^*(1, t^*) = 0 \quad \rightarrow x = L \\ H^*(x^*, 0) = 0 \quad \rightarrow t = 0 \end{array} \right. \tag{V.2.4}$$

$$\left\{ \begin{array}{l} T^*(0, t^*) = 0 \quad \rightarrow x = 0 \\ T^*(1, t^*) = 0 \quad \rightarrow x = L \\ T^*(x^*, 0) = 2x^*(1 - x^*) \quad \rightarrow t = 0 \end{array} \right. \tag{V.2.5}$$

Le choix des conditions aux limites, dans ce cas, est conditionné par la volonté de valider le modèle numérique en comparant les résultats à ceux de la littérature [105].

Pour discrétiser le système d'équations (V.2.3), nous avons opté pour la méthode des différences finies avec un schéma implicite. Sur le domaine d'étude Ω_t , les intervalles de temps et de l'espace sont subdivisés en sous-intervalles. On discrétise l'intervalle de temps, $[0, t_{max}]$, en $N + 1$, $t_n^* = n\Delta t^*$ pour $n = 0, 1, 2, \dots, N$, et l'intervalle des x^* , $[0, 1]$, en $J + 1$, $x_j^* = j\Delta x^*$ pour $j = 0, 1, 2, \dots, J$.

Par la suite, pour simplifier les notations on désigne les variables sans dimension en omettant le caractère *. Le système d'équations (V.2.3) est discrétisé de la manière suivante :

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{H_j^{n+1} - H_j^n}{\Delta t} + \left(\frac{1}{\sigma_{j+1/2}^n} \frac{H_{j+1}^{n+1} - H_j^{n+1}}{\Delta x^2} - \frac{1}{\sigma_{j-1/2}^n} \frac{H_j^{n+1} - H_{j-1}^{n+1}}{\Delta x^2} \right) = 0 \\ \frac{T_j^{n+1} - T_j^n}{\Delta t} - \frac{T_j^{n+1} - 2T_{j-1}^{n+1} + T_{j-1}^{n+1}}{\Delta x^2} - \frac{1}{\sigma_j^n} \left(\frac{H_{j+1}^n - H_{j-1}^n}{\Delta x^2} \right)^2 = 0 \end{array} \right. \quad (\text{V.2.6})$$

L'avantage de l'utilisation d'un schéma implicite c'est qu'il est inconditionnellement stable, et la démonstration de la consistance de ce schéma numérique peut être trouvée dans [105].

On pose $r = \frac{\Delta t}{\Delta x^2}$, le système (V.2.6) peut être exprimé sous la forme suivante :

$$\left\{ \begin{array}{l} \left(1 + \frac{1}{\sigma_{j+1/2}^n} r + \frac{1}{\sigma_{j-1/2}^n} r \right) H_j^{n+1} - \frac{1}{\sigma_{j+1/2}^n} r H_{j+1}^{n+1} - \frac{1}{\sigma_{j-1/2}^n} r H_{j-1}^{n+1} = H_j^n \\ (1 + 2r) T_j^{n+1} - r T_{j+1}^{n+1} - r T_{j-1}^{n+1} - \frac{1}{\sigma_j^n} r \left(\frac{H_{j+1}^n - H_{j-1}^n}{2} \right)^2 = T_j^n \end{array} \right. \quad (\text{V.2.7})$$

Sous forme matricielle, le système V.2.7 s'écrit :

$$A \widehat{H}^{n+1} = \widehat{H}^n \quad (\text{V.2.8})$$

$$B \widehat{T}^{n+1} = \widehat{T}^n \quad (\text{V.2.9})$$

avec,

$$A = \begin{vmatrix} \alpha & \beta & 0 & \dots & 0 \\ \beta & \alpha & \beta & 0 & \dots & \vdots \\ 0 & & . & . & . & \\ \vdots & & & & & \beta \\ 0 & \dots & & \beta & \alpha & \end{vmatrix}$$

$$B = \begin{vmatrix} 1 + 2r & -2r & 0 & \dots & 0 \\ -r & 1 + 2r & -r & 0 & \dots & \vdots \\ 0 & & . & . & . & \\ \vdots & & & & & -r \\ 0 & & \dots & -2r & 1 + 2r & \end{vmatrix}$$

tel que :

$$\alpha = \left(1 + (\sigma_{3/2}^n)^{-1} r + (\sigma_{1/2}^n)^{-1} r \right)$$

$$\beta = -(\sigma_{3/2}^n)^{-1} r$$

On appelle cette méthode implicite parce qu'elle conduit à chaque itération à la résolution du système d'équations défini par les systèmes matriciels (V.2.8) et (V.2.9).

V.2.2 Le cas d'un plasma d'hélium

Dans le cas de la pénétration d'une onde électromagnétique dans un plasma d'hélium, on prend en compte le fait que la conductivité thermique varie en fonction de la température ainsi que la permittivité diélectrique relative ϵ_r qui varie en fonction de la fréquence f de l'onde électromagnétique ($\omega = 2\pi f$) qui interagit avec le plasma. L'expression de la permittivité diélectrique relative ϵ_r est donnée par :

$$\begin{aligned}\epsilon_r &= 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2} \\ &= n^2\end{aligned}\tag{V.2.10}$$

Les équations (V.1.28) et (V.1.29) peuvent être combinées en appliquant le rotationnel sur l'équation (V.1.29) pour aboutir à une seule équation relative à une seule variable E^* :

$$\frac{\partial^2 E^*}{\partial t^{*2}} + \frac{\sigma^*}{\epsilon_r} \frac{\partial E^*}{\partial t^*} - \frac{1}{\epsilon_r} \frac{\partial^2 E^*}{\partial x^{*2}} = 0\tag{V.2.11}$$

Cette équation est couplée à l'équation de conservation de l'énergie thermique (V.1.27) qui constitue un système complet pour évaluer le champ E^* et la température T^* :

$$\begin{cases} \frac{\partial T^*}{\partial t^*} - \frac{\partial}{\partial x^*} \left(\kappa^* \frac{\partial T^*}{\partial x^*} \right) - \frac{1}{\sigma^*} \left| \frac{\partial H^*}{\partial x^*} \right|^2 = 0 \\ \frac{\partial^2 E^*}{\partial t^{*2}} + \frac{\sigma^*}{\epsilon_r} \frac{\partial E^*}{\partial t^*} - \frac{1}{\epsilon_r} \frac{\partial^2 E^*}{\partial x^{*2}} = 0 \end{cases}\tag{V.2.12}$$

Le même schéma numérique que celui employé dans la section précédente V.2.1 est appliqué à ce système d'équations.

Les conditions aux limites et initiales relatives au champ E^* ont été choisies comme celles relatives au champ H^* prises dans le cas d'un matériau conducteur, voir équation (V.2.4). Pour la température T^* , nous avons supposé qu'aux bords du milieu plasma la température est égale à la température ambiante, et qu'à l'instant initial ($t = 0$) la température suit un profil gaussien.

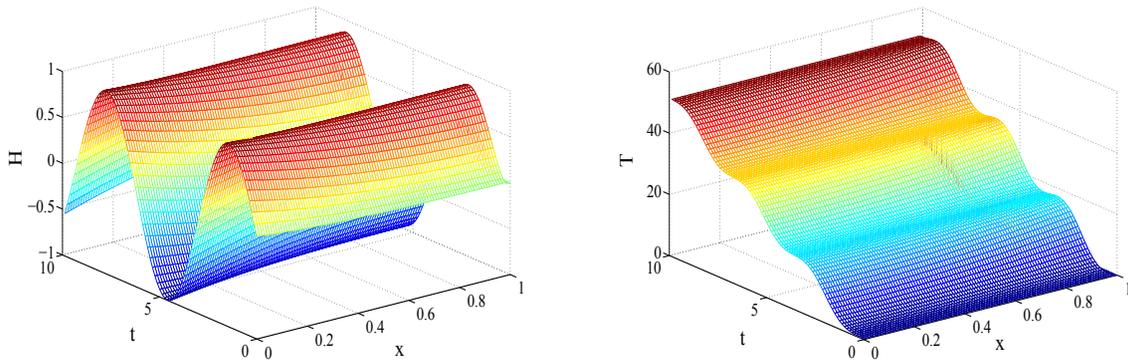
Dans la section suivante, nous présenterons les résultats de calcul dans le cas d'un matériaux conducteur puis dans le cas d'un plasma d'hélium.

V.3 Résultats de la simulation

V.3.1 Le cas d'un matériau conducteur

On considère deux situations pour la conductivité électrique [105], une situation où elle ne varie pas en fonction de la température et une autre où elle dépend de la température comme ceci : $\sigma = (1 + T)^{-2}$. Les figures V.2 et V.3 montrent les variations du champ sans dimension H ainsi que de la température adimensionné en fonction du temps t et

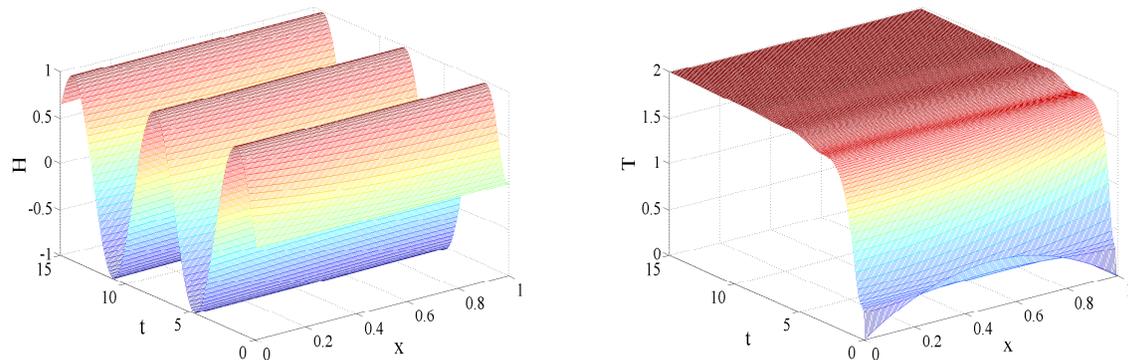
de la distance x , dans le cas d'une conductivité électrique constante et dans le cas d'une conductivité électrique qui varie en fonction de la température, respectivement.



(a) Évolution du champ électrique en fonction de la distance pour des temps différents.

(b) Variation de la température en fonction de la distance pour des temps différents.

FIGURE V.2 – Représentation tridimensionnelle de la pénétration du champ magnétique à l'intérieur d'un matériau conducteur et de l'évolution de la température en fonction du temps et de la distance en considérant la conductivité électrique constante.



(a) Évolution du champ électrique en fonction de la distance pour des temps différents.

(b) Variation de la température en fonction de la distance pour des temps différents.

FIGURE V.3 – Représentation tridimensionnelle de la pénétration du champ magnétique à l'intérieur d'un matériau conducteur et de l'évolution de la température en fonction du temps et de la distance en considérant la conductivité électrique fonction de la température.

V.3.2 Le cas d'un plasma d'hélium

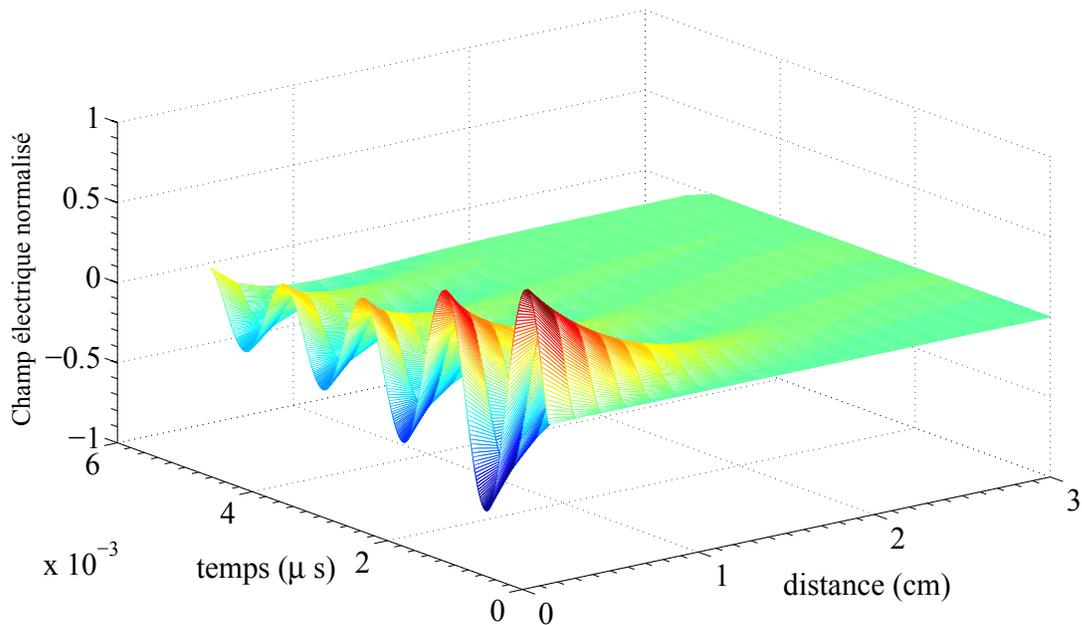
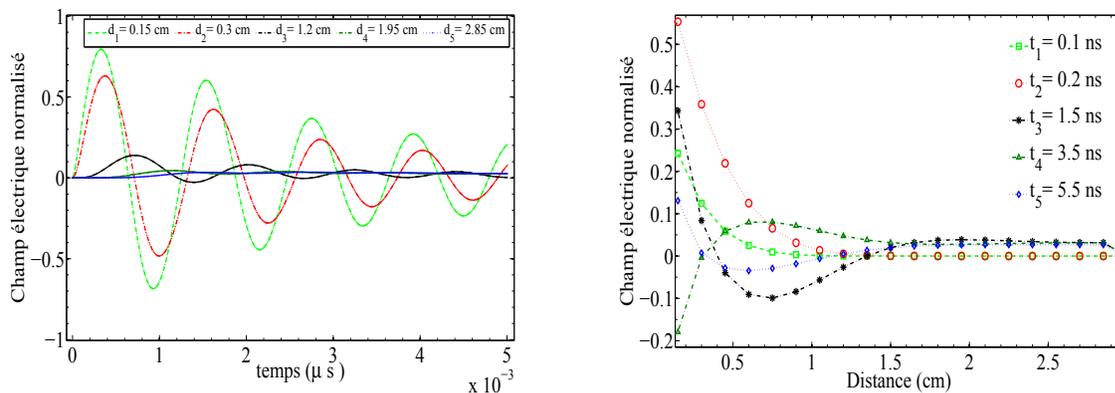


FIGURE V.4 – Représentation tridimensionnelle de la pénétration du champ électrique à l'intérieur du plasma d'hélium en fonction du temps et de la distance. La fréquence de l'onde $f = 5.5GHz$.



(a) Variation du champ électrique en fonction du temps pour des distances différentes.

(b) Variation du champ électrique en fonction de la distance pour des temps différents.

FIGURE V.5 – Représentation bidimensionnelle de la variation du champ électrique à l'intérieur du plasma d'hélium. La fréquence de l'onde $f = 5.5GHz$.

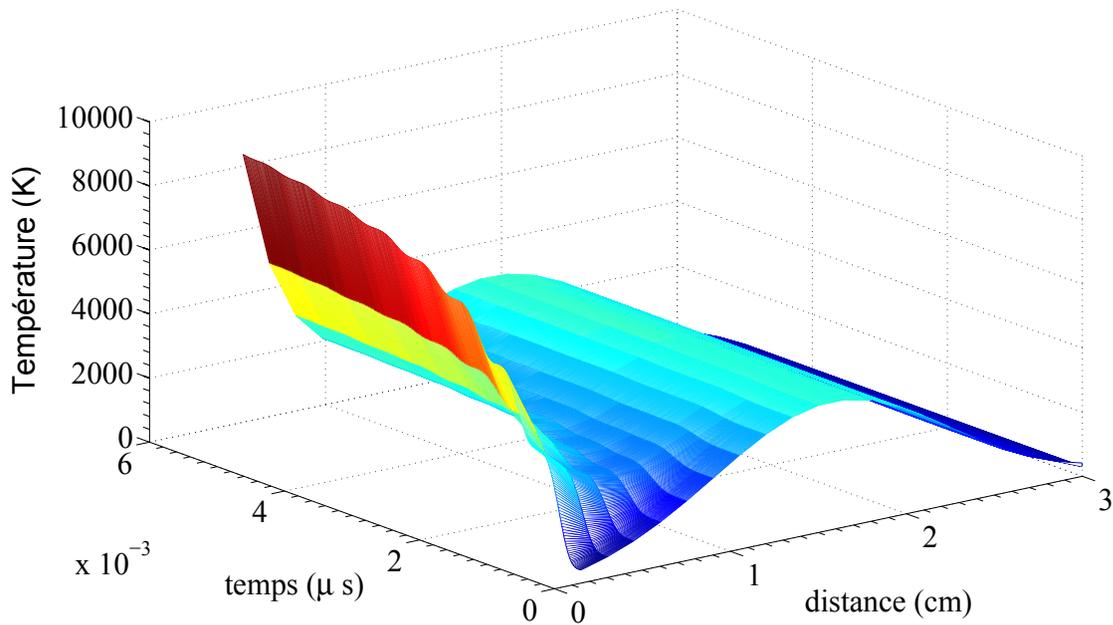
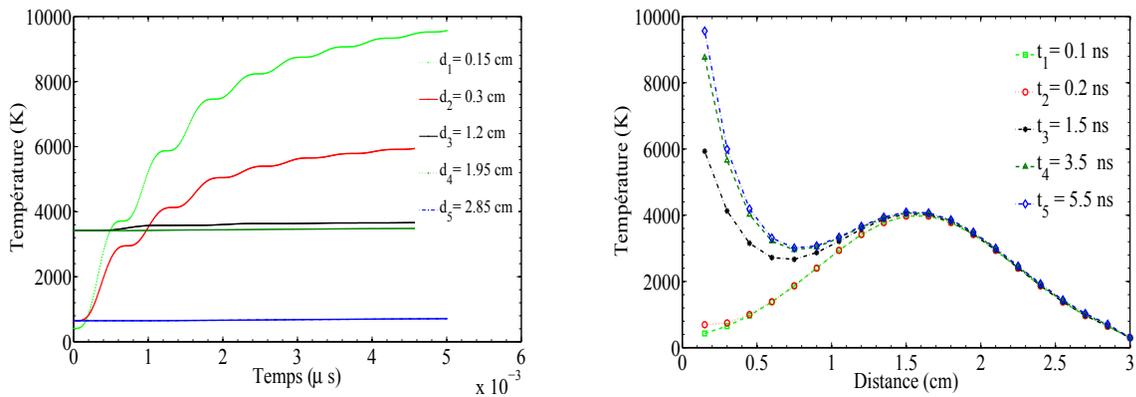


FIGURE V.6 – Représentation tridimensionnelle de l'évolution de la température du plasma d'hélium, soumis à un champ électromagnétique, en fonction du temps et de la distance. La fréquence de l'onde $f = 5.5GHz$.



(a) Variation de la température en fonction du temps pour des distances différentes.

(b) Variation de la température en fonction de la distance pour des temps différents.

FIGURE V.7 – Représentation bidimensionnelle de la variation de la température du plasma d'hélium.

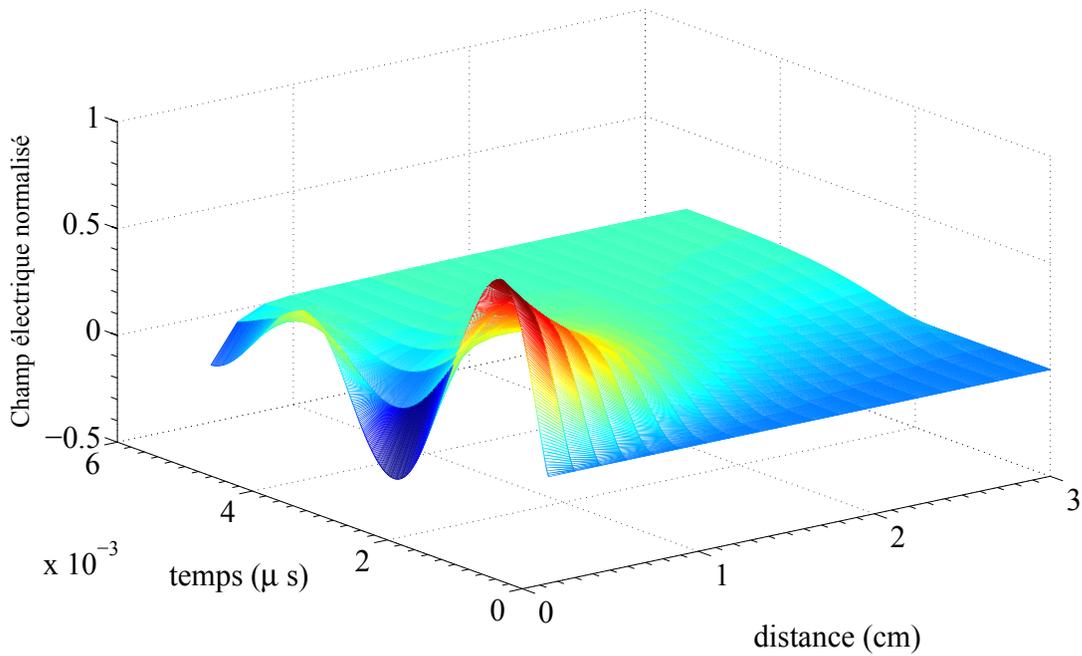
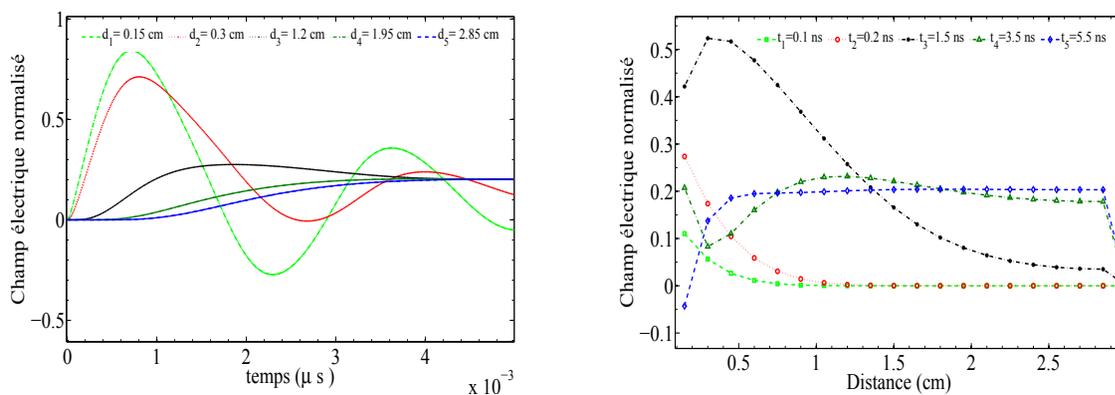


FIGURE V.8 – Représentation tridimensionnelle de la pénétration du champ électrique à l’intérieur du plasma d’hélium en fonction du temps et de la distance. La fréquence de l’onde $f = 2.45GHz$.



(a) Variation du champ électrique en fonction du temps pour des distances différentes.

(b) Variation du champ électrique en fonction de la distance pour des temps différents.

FIGURE V.9 – Représentation bidimensionnelle de la variation du champ électrique à l’intérieur du plasma d’hélium. La fréquence de l’onde $f = 2.45GHz$.

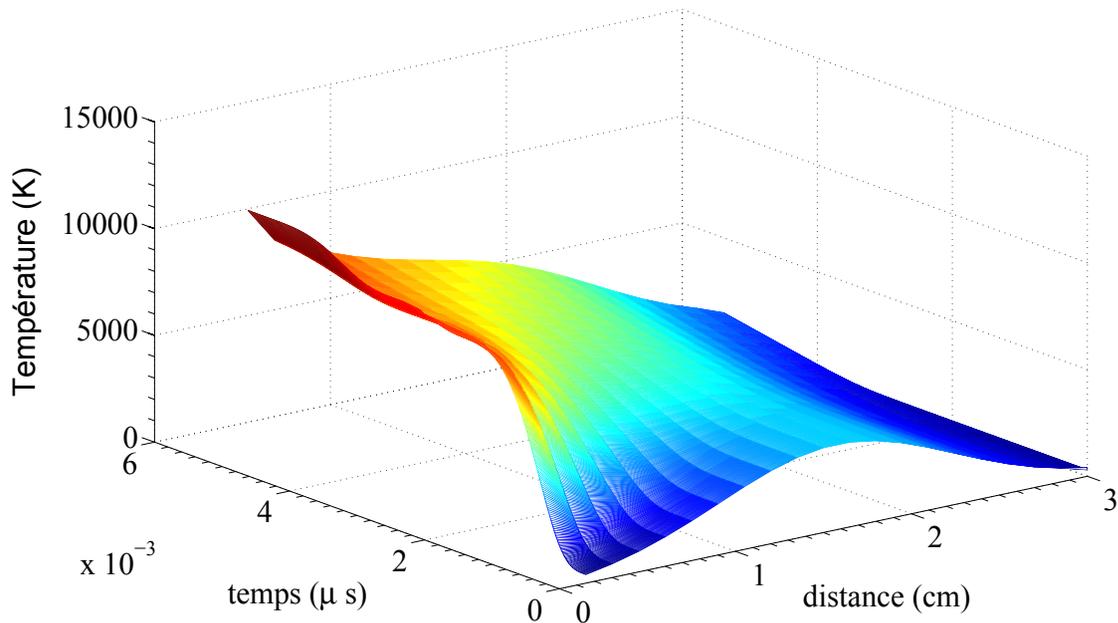
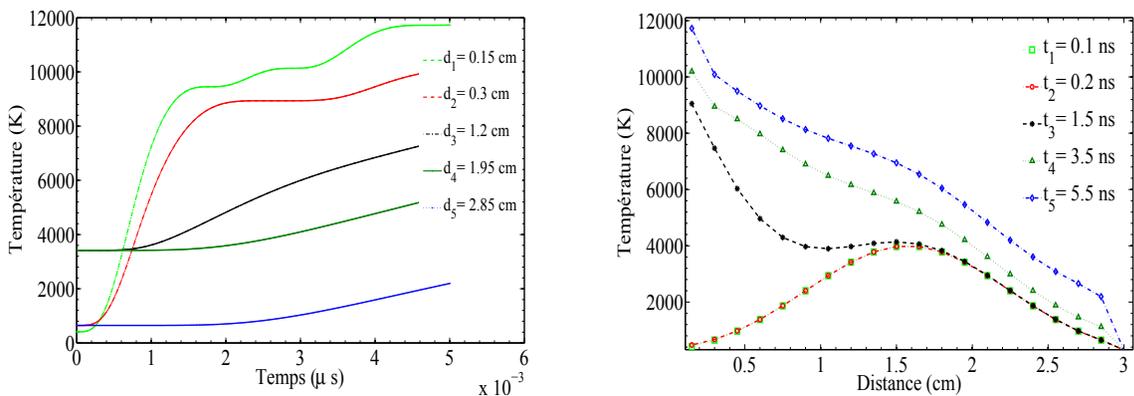


FIGURE V.10 – Représentation tridimensionnelle de l'évolution de la température du plasma d'hélium, soumis à un champ électromagnétique, en fonction du temps et de la distance. La fréquence de l'onde $f = 2.45GHz$.



(a) Variation de la température en fonction du temps pour des distances différentes.

(b) Variation de la température en fonction de la distance pour des temps différents.

FIGURE V.11 – Représentation bidimensionnelle de la variation de la température du plasma d'hélium. La fréquence de l'onde $f = 2.45GHz$.

Conclusion

Le modèle simplifié développé dans cette étude, nous a permis d'appréhender la transmission d'une onde électromagnétique dans un plasma. Nous avons appliqué ce modèle au cas de l'hélium et étudié la transmission de l'énergie de l'onde au plasma sous forme de chaleur. L'atténuation de l'onde électromagnétique à l'intérieur du plasma reste à vérifier par des modèles plus élaborés. En effet, la constante de permittivité électrique utilisée

dans notre modèle ne tiens pas compte des collisions entre les électrons et les neutres. L'utilisation d'un modèle tri-dimensionnel est souhaitable afin de faire une étude qui se rapproche plus de la réalité.

Conclusion

Dans le premier chapitre de notre étude, nous avons traité la théorie cinétique des gaz et les phénomènes de transport avec deux approches différentes. La première approche consistait à faire une description physique des coefficients de transport en donnant des formules relativement simples dans le cadre de la théorie du libre parcours moyen. La deuxième approche avait pour objectif de présenter les coefficients de transport avec la méthode de Chapman-Enskog qui fait apparaître les intégrales de collision. Nous avons constaté que le paramètre d'entrée important pour l'obtention de ces intégrales de collision est le potentiel d'interaction. L'influence du choix du potentiel d'interaction sur le calcul des coefficients de transport a été montré. Nous avons clôturé ce chapitre avec l'étude du domaine de validité des formules utilisées dans le cadre de la théorie cinétique des gaz.

Dans le deuxième chapitre, un ensemble de potentiels d'interaction usuellement utilisés dans le calcul des coefficients de transport a été présenté, suivi de l'étude des phénomènes de collision. Les conditions d'apparition des singularités (Orbiting, Rainbow et Glory) dans le calcul des sections efficaces ont été traitées et des formules mathématiques qui permettent d'éliminer ces singularités ont été proposées.

La méthode numérique employée qui permet l'obtention des intégrales de collision a été présentée dans le troisième chapitre. Le code numérique ainsi développé a été testé pour une interaction entre les atomes d'oxygène et les résultats numériques sont en bon accord avec ceux de la littérature. L'influence des paramètres du potentiel de Hulburt-Hirschfelder, choisi pour décrire l'interaction entre les atomes d'oxygène, sur les coefficients de transport relatifs à l'interaction en question a été traitée.

Les propriétés thermodynamiques et les coefficients de transport du plasma d'hélium ont été calculés dans le quatrième chapitre. Nous avons montré les différentes méthodes de calcul de composition et l'influence que peuvent avoir ces différentes méthodes sur le calcul des coefficients de transport. Le code numérique relatif au calcul de composition a été développé pour un plasma d'hélium à une seule température mais aussi à deux températures pour plusieurs valeurs du paramètre de déséquilibre thermique $\theta = \frac{T_e}{T_h}$.

Le dernier chapitre nous a permis de développer un modèle simplifié du transfert de chaleur d'une onde électromagnétique vers un plasma d'hélium. Ceci constitue une des applications des coefficients de transport indispensables à l'étude des plasmas.

Bibliographie

- [1] Pascal André. *Etude de la composition et des propriétés thermodynamiques des plasmas thermiques à l'équilibre et hors d'équilibre thermodynamique*. PhD thesis, Université de Clermont Ferrand, 1995. [1](#), [140](#), [142](#), [146](#)
- [2] Zacharie Koalaga. *Contribution à l'étude expérimentale et théorique des plasmas d'arcs électriques laminés*. PhD thesis, Université Blaise Pascal, Clermont-Ferrand, 1991. Thèse de doctorat dirigée par CHEMINAT, Sciences appliquées Clermont Ferrand 2 1991. [1](#), [137](#), [140](#)
- [3] Alain Coulbois. *Etude de la transition préarc-arc dans les éléments fusibles*. PhD thesis, Université Blaise Pascal, Clermont-Ferrand, 2015. [1](#)
- [4] Amaury Augeard. *Etude des risques d'arc électrique dans les batteries lithium-ion*. PhD thesis, Université Blaise Pascal, Clermont-Ferrand, 2015. [1](#)
- [5] S. Chapman and T.G. Cowling. *The Mathematical Theory of Non-uniform Gases : An Account of the Kinetic Theory of Viscosity, Thermal Conduction and Diffusion in Gases*. Cambridge Mathematical Library. Cambridge University Press, 1970. [1](#), [27](#), [52](#), [54](#), [59](#), [60](#), [61](#), [114](#)
- [6] J.O. Hirschfelder, C.F. Curtiss, R.B. Bird, and University of Wisconsin Theoretical Chemistry Laboratory. *Molecular theory of gases and liquids*. Structure of matter series. Wiley, 1954. [1](#), [25](#), [26](#), [39](#), [46](#), [51](#), [52](#), [53](#), [55](#), [57](#), [59](#), [60](#), [61](#), [81](#), [83](#), [84](#), [91](#), [93](#), [97](#), [114](#)
- [7] F.F. Chen. *Introduction to Plasma Physics and Controlled Fusion*. Number vol. 1 in Introduction to Plasma Physics and Controlled Fusion. Springer, 2006. [6](#), [8](#), [66](#)
- [8] J.A. Bittencourt. *Fundamentals of Plasma Physics*. Springer, 2004. [8](#), [13](#), [28](#), [35](#), [37](#), [46](#), [89](#), [91](#)
- [9] J.M. Rax. *Physique des plasmas - Cours et applications : Cours et applications*. Physique. Dunod, 2005. [9](#), [16](#)
- [10] J.L. Delcroix. *Physique des plasmas*. Number vol. 2 in Monographies Dunod. Dunod, 1966. [9](#), [34](#), [36](#), [166](#)
- [11] J. Clerk Maxwell. On the dynamical theory of gases. *Philosophical Transactions of the Royal Society of London*, 157 :49–88, 1867. [10](#), [11](#), [38](#)
- [12] J.H. Jeans. *The Dynamical Theory of Gases*. Landmarks of science. University Press, 1904. [10](#), [11](#)
- [13] J.H. Jeans and A. Clerc. *Théorie dynamique des gaz, traduit sur la troisième édition anglaise, par A. Clerc, ingénieur diplômé de l'École supérieure d'électricité de Paris et de l'École polytechnique de Zurich*. Collection de monographies scientifiques étrangères / publiée sous la direction de M. G. Juvet, professeur à l'Université de Neuchâtel. impr. Durand, 1925. [10](#), [11](#), [12](#)

- [14] E. Bloch. *Théorie cinétique des gaz*. Armand Colin. Section de Physique. A. Colin, 1921. [10](#), [16](#), [21](#), [23](#), [25](#)
- [15] Y. Rocard. *L'hydrodynamique et la théorie cinétique des gaz*. Gauthier-Villars et Cie., 1932. [11](#)
- [16] T.I. Gombosi. *Gaskinetic Theory*. Cambridge Atmospheric and Space Science Series. Cambridge University Press, 1994. [11](#), [17](#), [19](#), [31](#), [37](#), [114](#)
- [17] C. Ngô and H. Ngô. *Physique statistique. Introduction, cours et exercices corrigés, 2ème édition*. Sciences sup. Dunod, 2001. [16](#), [45](#)
- [18] G. Meurant. *Fundamentals of Maxwell's kinetic theory of a simple monatomic gas : Treated as a branch of rational mechanics*. Pure and Applied Mathematics. Elsevier Science, 1980. [23](#)
- [19] D.Enskog. About a generalization of the second maxwell's theory of gases and comments on a fundamental equation in the kinetic theory of gases. *Phys*, 12 :58, 1911. [27](#), [50](#)
- [20] D.Hilbert. Justification for the kinetic theory of gases. *Mathematische Annalen*, 72 :562–577, 1916. [27](#)
- [21] H.A. Lorentz. *The Theory of Electrons and Its Applications to the Phenomena of Light and Radiant Heat*. Dover books on physics. Dover Publications, 2003. [27](#)
- [22] Cédric Villani. A review of mathematical topics in collisional kinetic theory. In *Handbook of mathematical fluid dynamics, Vol. I*, pages 71–305. North-Holland, Amsterdam, 2002. [27](#)
- [23] Cédric Villani. Limites hydrodynamiques de l'équation de boltzmann. *Séminaire Bourbaki*, 43 :365–405, 2000-2001. [27](#)
- [24] Saitoh Kuniyasu. *Kinetic Theory of Granular Gases*. Faculty of Engineering Technology, University of Twente, 2015. [33](#)
- [25] S. Chandrasekhar. Dynamical Friction. I. General Considerations : the Coefficient of Dynamical Friction. *apj*, 97 :255, March 1943. [36](#)
- [26] Pascal. André, Jacques. Aubreton, Marie-Françoise. Elchinger, Pierre. Fauchais, A. Lefort, and A.B. Murphy. A statistical mechanical view of the determination of the composition of multitemperature plasmas. *Plasma Chemistry and Plasma Processing*, 24(3) :435–446, 2004. [39](#), [46](#), [48](#), [49](#)
- [27] Vallance. Claire. *Properties of Gases*. <http://vallance.chem.ox.ac.uk/CVteaching.html>, Inconnue. [42](#)
- [28] R. Hakim. *Introduction à la mécanique statistique : avec exercices*. Amphi Sciences. Masson, 1996. [48](#)
- [29] S. Chapman. On the kinetic theory of a gas. part ii : A composite monatomic gas : Diffusion, viscosity, and thermal conduction. *Philosophical Transactions of the Royal Society of London A : Mathematical, Physical and Engineering Sciences*, 217(549-560) :115–197, 1918. [50](#)
- [30] S. K. Loyalka, E. L. Tipton, and R. V. Tompson. Chapman-enskog solutions to arbitrary order in sonine polynomials i : Simple, rigid-sphere gas. *Physica A : Statistical Mechanics and its Applications*, 379(2) :417–435, June 2007. [51](#), [52](#)
- [31] M. A. Eliason, D. E. Stogryn, and J. O. Hirschfelder. Some Molecular Collision Integrals for Point Attraction and Repulsion Potentials. *Proceedings of the National Academy of Science*, 42 :546–559, August 1956. [57](#)

- [32] H. Krier, R. L. Burton, T. W. Megli, S. A. Bufton, and N. T. Tiliakos. ARCJET plasma modeling with experimental validation. Technical report, Department of Mechanical and Industrial Engineering, September 1994. [59](#)
- [33] M. Mitchner and C. H. Kruger. *Partially Ionized Gases*. Wiley series in plasma physics. Wiley, 1973. [60](#), [139](#)
- [34] R. S. Devoto. Transport coefficients of partially ionized argon. *Physics of Fluids*, 10(2) :354–364, 1967. [63](#), [66](#), [153](#)
- [35] R.S. Brokaw and Lewis Research Center. *Approximate formulas for viscosity and thermal conductivity of gas mixtures*. NASA technical note. National Aeronautics and Space Administration, 1964. [63](#)
- [36] Richard S. Brokaw. Thermal conductivity of gas mixtures in chemical equilibrium. ii. *The Journal of Chemical Physics*, 32(4) :1005–1006, 1960. [63](#)
- [37] R. S. Devoto. Transport properties of ionized monatomic gases. *Physics of Fluids*, 9(6) :1230–1240, 1966. [66](#)
- [38] R. S. Devoto. Transport coefficients of ionized argon. *Physics of Fluids*, 16(5) :616–623, 1973. [66](#), [153](#)
- [39] Jean GOSSE. Propriétés de transport des gaz à pression modérée. *Techniques de l'ingénieur Équations d'états et constantes thermiques*, base documentaire : TIB340DUO.(ref. article : k425), 1991. fre. [76](#), [77](#)
- [40] G. E. Childs and H. J. M. Hanley. Applicability of dilute gas transport property tables to real gases. *Cryogenics*, 8 :94–97, 1968. [76](#)
- [41] R.A. Broglia, S. Landowne, and A. Winther. Semi-classical description of elastic and inelastic heavy-ion scattering above the coulomb barrier. *Physics Letters B*, 40(3) :293 – 299, 1972. [80](#), [110](#)
- [42] J.O. Hirschfelder. *Intermolecular forces*. Advances in chemical physics. Interscience Publishers, 1967. [80](#)
- [43] A.J. Stone. *The Theory of Intermolecular Forces*. International Series of Monographs on Chemistry. Clarendon Press, 1997. [80](#)
- [44] McFall Jennifer Howard and Scott Wilson David. Accurate correlation of the second virial coefficients of some 40 chemicals based on an anisotropic square-well potential. *Industrial and Engineering Chemistry Research*, 41(5) :1107–1112, 2002. [82](#)
- [45] Maciej K. Hryniewicki. Accurate and Efficient Evaluation of the Second Virial Coefficient Using Practical Intermolecular Potentials for Gases. Master's thesis, University of Toronto, 2011. [82](#), [88](#)
- [46] Edward A. Mason and William E. Rice. The Intermolecular Potentials for Some Simple Nonpolar Molecules. *The Journal of Chemical Physics*, 22(5) :843–851, May 1954. [83](#), [85](#)
- [47] F.J. Krieger. *The Viscosity of Polar Gases*. Memorandum (Rand Corporation). Rand Corporation, 1951. [84](#)
- [48] L. Monchick and E. A. Mason. Transport Properties of Polar Gases. *The Journal of Chemical Physics*, 35(5) :1676–1697, November 1961. [84](#)
- [49] Kihara Taro. The second virial coefficient of non-spherical molecules. *Journal of the Physical Society of Japan*, 6(5) :289–296, 1951. [84](#)
- [50] GC Maitland, M Rigby, EB Smith, and WA Wakeham. *Intermolecular Forces - their origin and determination*. Oxford University Press, 1981. [84](#), [98](#)

- [51] William E. Rice and Joseph O. Hirschfelder. Second Virial Coefficients of Gases Obeying a Modified Buckingham (Exp—Six) Potential. *The Journal of Chemical Physics*, 22(2) :187–192, February 1954. [84](#)
- [52] R. A. Buckingham and J. Corner. Tables of second virial and low-pressure joule-thomson coefficients for intermolecular potentials with exponential repulsion. *Proceedings of the Royal Society of London. Series A, Mathematical and Physical Sciences*, 189(1016) :pp. 118–129, 1947. [84](#)
- [53] Hugh M. Hulburt and Joseph O. Hirschfelder. Erratum : Potential energy functions for diatomic molecules. *The Journal of Chemical Physics*, 35(5) :1901–1901, 1961. [86](#), [150](#)
- [54] Hugh M. Hulburt and Joseph O. Hirschfelder. Potential energy functions for diatomic molecules. *The Journal of Chemical Physics*, 9(1) :61–69, 1941. [86](#), [150](#)
- [55] Yatendra Pal Varshni. Comparative study of potential energy functions for diatomic molecules. *Rev. Mod. Phys.*, 29 :664–682, Oct 1957. [87](#)
- [56] Francis J. Smith and R. J. Munn. Automatic Calculation of the Transport Collision Integrals with Tables for the Morse Potential. *The Journal of Chemical Physics*, 41(11) :3560–3568, December 1964. [92](#)
- [57] Sun Ung Kim and Charles W. Monroe. High-accuracy calculations of sixteen collision integrals for Lennard-Jones (12–6) gases and their interpolation to parameterize neon, argon, and krypton. *Journal of Computational Physics*, 273 :358–373, September 2014. [92](#), [114](#)
- [58] Herbert Goldstein. *Classical mechanics*. World student series. Addison-Wesley, Reading (Mass.), Menlo Park (Calif.), Amsterdam, 1980. [92](#), [101](#)
- [59] W. McDaniel, J.B.A. Mitchell, and E. Rudd. *Atomic Collisions*. Atomic collisions / Earl W. McDaniel. Wiley, 1993. [96](#), [97](#)
- [60] W. McDaniel. *Collision Phenomena in Ionized Gases*. Wiley (New York,), 1964. [99](#)
- [61] R.A. Broglia and A. Winther. *Heavy Ion Reactions : Elastic and inelastic reactions*. Frontiers in Physics. Benjamin/Cummings Publishing Company, Advanced Book Program, 1981. [107](#), [109](#)
- [62] P. Bonche, R. Schaeffer, B. Grammaticos, G. Vichniac, and H. Orland. Développements récents en physique des ions lourds. Cours universitaire, 1978. [107](#), [109](#)
- [63] R. M. Eisberg and C. E. Porter. Scattering of alpha particles. *Reviews of modern physics*, 33(2) :190, 1961. [109](#)
- [64] Harold Grad. On the kinetic theory of rarefied gases. *Communications on Pure and Applied Mathematics*, 2(4) :331–407, 1949. [114](#)
- [65] H. O’Hara and F. J. Smith. Transport collision integrals for a dilute gas. *Computer Physics Communications*, 2(1) :47–54, 1971. [114](#)
- [66] H O’Hara and Francis J Smith. The efficient calculation of the transport properties of a dilute gas to a prescribed accuracy. *Journal of Computational Physics*, 5(2) :328–344, April 1970. [114](#), [115](#)
- [67] James C. Rainwater, Paul M. Holland, and Louis Biolsi. Binary collision dynamics and numerical evaluation of dilute gas transport properties for potentials with multiple extrema. *The Journal of Chemical Physics*, 77(1) :434–447, 1982. [114](#), [120](#)
- [68] G. Colonna and A. Laricchiuta. General numerical algorithm for classical collision integral calculation. *Computer Physics Communications*, 178(11) :809–816, June 2008. [114](#)

- [69] Charles W. Clenshaw and Alan R. Curtis. A method for numerical integration on an automatic computer. *Numerische Mathematik*, 2(1) :197–205, 1960. [114](#)
- [70] J.P. Imhof. On the method for numerical integration of clenshaw and curtis. *Numerische Mathematik*, 5(1) :138–141, 1963. [114](#)
- [71] H. O’hara and Francis J. Smith. Error estimation in the Clenshaw–Curtis quadrature formula. *The Computer Journal*, 11(2) :213–219, 1968. [115](#), [116](#)
- [72] Paul M. Holland and Louis Biolsi. Transport properties of ground state oxygen atoms. *The Journal of chemical physics*, 89(5) :3203–3210, 1988. [120](#), [121](#), [127](#)
- [73] Paul H. Krupenie. The spectrum of molecular oxygen. *Journal of Physical and Chemical Reference Data*, 1(2) :423–534, 1972. [120](#), [121](#)
- [74] A. Laricchiuta, D. Bruno, M. Capitelli, R. Celiberto, C. Gorse, and G. Pintus. Collision integrals of oxygen atoms and ions in electronically excited states. *Chemical Physics*, 344(1-2) :13–20, February 2008. [121](#), [127](#)
- [75] Pascal André, William Bussière, and David Rochette. Transport Coefficients of Ag–SiO₂ Plasmas. *Plasma Chemistry and Plasma Processing*, 27(4) :381–403, August 2007. [122](#)
- [76] Edward A. Mason, Joseph T. Vanderslice, and Jerrold M. Yos. Transport properties of high temperature multicomponent gas mixtures. *Physics of Fluids*, 2(6) :688–694, 1959. [125](#)
- [77] Taro Kihara. The chapman-enskog and kihara approximations for isotopic thermal diffusion in gases. *Journal of Statistical Physics*, 13(2) :137–143, 1975. [125](#)
- [78] M. Capitelli and V. Ficocelli. Collision integrals of oxygen atoms in different electronic states. *Journal of Physics B : Atomic and Molecular Physics*, 5(11) :2066, 1972. [127](#)
- [79] E. Levin, H. Partridge, and J. R. Stallcop. Collision integrals and high temperature transport properties for N-N, O-O, and N-O. *Journal of Thermophysics and Heat Transfer*, 4(4) :469–477, 1990. [127](#)
- [80] K. S. Yun and E. A. Mason. Collision integrals for the transport properties of dissociating air at high temperatures. *Physics of Fluids*, 5(4) :380–386, 1962. [127](#)
- [81] J Aubreton, M F Elchinger, V Rat, and P Fauchais. Two-temperature transport coefficients in argon–helium thermal plasmas. *Journal of Physics D : Applied Physics*, 37(1) :34, 2004. [136](#), [150](#), [152](#)
- [82] Z. Duan, J. Heberlein, L. Beall, J. Schein, and M. Stachowicz. Diagnostics and modeling of an argon/helium plasma spray process. *Journal of Thermal Spray Technology*, 9(2) :225–234, 2000-2006. [136](#)
- [83] D. Bruno, C. Catalfamo, M. Capitelli, G. Colonna, O. De Pascale, P. Diomede, C. Gorse, A. Laricchiuta, S. Longo, D. Giordano, and F. Pirani. Transport properties of high-temperature jupiter atmosphere components. *Physics of Plasmas*, 17(11), 2010. [136](#), [153](#), [156](#)
- [84] V. Rat, P. André, J. Aubreton, M. F. Elchinger, P. Fauchais, and A. Lefort. Transport properties in a two-temperature plasma : Theory and application. *Phys. Rev. E*, 64 :026409, Jul 2001. [136](#)
- [85] M.I. Boulos, P. Fauchais, and E. Pfender. *Thermal Plasmas : Fundamentals and Applications*. Thermal Plasmas : Fundamentals and Applications. Springer US, 2013. [137](#), [138](#), [139](#), [142](#)

- [86] Pierre FAUCHAIS. Plasmas thermiques : aspects fondamentaux. *Techniques de l'ingénieur Matériaux conducteurs et plasmas*, base documentaire : TIB251DUO.(ref. article : d2810), 2005. fr. [138](#)
- [87] Hans R. Griem. *Principles of Plasma Spectroscopy*. Cambridge University Press, 1997. Cambridge Books Online. [139](#)
- [88] W. B. White, S. M. Johnson, and G. B. Dantzig. Chemical equilibrium in complex mixtures. *Journal of Chemical Physics*, 28 :751–755, May 1958. [140](#)
- [89] Fatna Bendjebbar, Pascal André, Mhammed Benbakkar, Samir Flazi, David Rochette, and Damien Vacher. Plasma Formed in Argon, Acid Nitric and Water Used in Industrial ICP Torches. *Plasma Science and Technology*, 14(8) :683, August 2012. [140](#)
- [90] Vincent Rat, A.B. Murphy, Jacques Aubreton, Marie-Françoise Elchinger, and Pierre Fauchais. Treatment of non-equilibrium phenomena in thermal plasma flow. *Journal of Physics D : Applied Physics*, 41 :183001–1–183001–28, 2008. [141](#), [154](#), [159](#)
- [91] D. Giordano and M. Capitelli. Two-temperature Saha equation - A misunderstood problem. *Journal of Thermophysics and Heat Transfer*, 9(4) :803–804, October 1995. [141](#)
- [92] Xi Chen and Peng Han. On the thermodynamic derivation of the saha equation modified to a two-temperature plasma. *Journal of Physics D : Applied Physics*, 32(14) :1711, 1999. [141](#), [154](#), [159](#)
- [93] A.V Potapov. Chemical equilibrium of multitemperature systems. *High Temp*, 4 :48–51, 1966. [141](#)
- [94] M. C. M. van de Sanden, P. P. J. M. Schram, A. G. Peeters, J. A. M. van der Mullen, and G. M. W. Kroesen. Thermodynamic generalization of the saha equation for a two-temperature plasma. *Phys. Rev. A*, 40 :5273–5276, Nov 1989. [141](#), [154](#), [159](#)
- [95] P. André. Partition functions and concentrations in plasmas out of thermal equilibrium. *IEEE Transactions on Plasma Science*, 23(3) :453–458, Jun 1995. [142](#), [154](#), [159](#)
- [96] P. André, M. Abbaoui, A. Lefort, and M. J. Parizet. Numerical method and composition in multi-temperature plasmas : Application to an ar-h2 mixture. *Plasma Chemistry and Plasma Processing*, 16(3) :379–398, 1995. [142](#), [154](#), [159](#)
- [97] A Gleizes, B Chervy, and J J Gonzalez. Calculation of a two-temperature plasma composition : bases and application to sf 6. *Journal of Physics D : Applied Physics*, 32(16) :2060, 1999. [142](#)
- [98] M. J. Slaman and R. A. Aziz. Accurate transport properties and second virial coefficients for helium based on a state-of-the art interatomic potential. *International Journal of Thermophysics*, 12(5) :837–854, September 1991. [150](#)
- [99] Eckard Bich, Robert Hellmann, and Eckhard Vogel. Ab initio potential energy curve for the helium atom pair and thermophysical properties of the dilute helium gas. ii. thermophysical standard values for low-density helium. *Molecular Physics*, 105(23-24) :3035–3049, 2007. [150](#)
- [100] Bo Song, Xiaopo Wang, Kai Kang, and Zhigang Liu. Highly accurate transport properties of helium-4, helium-3, and their binary mixtures by ab initio potential. *Cryogenics*, 61 :1 – 7, 2014. [150](#)

- [101] R. A. Dawe and E. B. Smith. Viscosities of the inert gases at high temperatures. *The Journal of Chemical Physics*, 52(2) :693–703, 1970. 151
- [102] J.A.S. Barata and C.A.N. Conde. Elastic he+ on he collision cross-sections and monte carlo calculation of the transport coefficients of he+ ions in gaseous helium. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A : Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment*, 619(1–3) :21 – 23, 2010. Frontiers in radiation physics and applications :Proceedings of the 11th International Symposium on Radiation Physics. 152
- [103] ZHANG Yun-Guang, ZHA Xin-Wei, V Rat, and GAO Tao. Theoretical study on the low-lying electronic states of he2, he+ 2 , and he++. *Theor. Phys.*, 57 :1084–1052, 2012. 153
- [104] Erell Jamelot. *Continuous Galerkin methods for solving Maxwell equations*. Theses, Ecole Polytechnique X, November 2005. Thèse déposée le 8 Septembre 2005. 167
- [105] Dong Sun, V. S. Manoranjan, and Hong-Ming Yin. Numerical solutions for a coupled parabolic equations arising induction heating processes. *DCDS Supplements*, 2007(Special) :956–964, 2007. 169, 170, 171
- [106] P. André, J. Aubreton, S. Clain, M. Dudeck, E. Duffour, M. F. Elchinger, B. Izrar, D. Rochette, R. Touzani, and D. Vacher. Transport coefficients in thermal plasma. Applications to Mars and Titan atmospheres. *The European Physical Journal D*, 57(2) :227–234, April 2010.
- [107] L.D. Higgins and Francis J. Smith. Collision integrals for high temperature gases. *Molecular Physics*, 14(4) :399–400, 1968.
- [108] D. Batic, N. G. Kelkar, and M. Nowakowski. Orbiting phenomena in black hole scattering. *Physical Review D*, 86(10) :104060, 2012.
- [109] D. Allan Bromley, editor. *Treatise on Heavy-Ion Science*. Springer US, Boston, MA, 1985.
- [110] P. Anninos, C. DeWitt-Morette, R. A. Matzner, P. Yioutas, and T. R. Zhang. Orbiting cross sections : Application to black hole scattering. *Physical Review D*, 46(10) :4477, 1992.
- [111] V. Colombo and E. Ghedini. Two-temperature thermodynamic and transport properties of carbon–oxygen plasmas. *Plasma Sources Science and Technology*, 20(3) :035003, jun 2011.
- [112] M. Tabor. Fast oscillations in the semiclassical limit of the total cross section. *Journal of Physics B : Atomic and Molecular Physics*, 10(13) :2649, 1977.
- [113] V. J. Berry and R. C. Koeller. Diffusion in compressed binary gaseous systems. *AIChE Journal*, 6(2) :274–280, 1960.
- [114] E. A. Mason and E. W. McDaniel. Transport properties of ions in gases. *NASA STI/Recon Technical Report A*, 89 :15174, 1988.
- [115] John A. Adam. The mathematical physics of rainbows and glories. *Physics Reports*, 356(4–5) :229 – 365, 2002.
- [116] Roger G Newton. *Scattering theory of waves and particles ; 2nd ed*. Springer, Berlin, 1982. Also a reprint ed. : Mineola, NY, Dover, 2002.
- [117] Amlan Ray. Nuclear orbiting at low energy nuclear collisions. *Nuclear Physics A*, 787(1–4) :499 – 506, 2007. Proceedings of the Ninth International Conference on Nucleus-Nucleus Collisions(NN2006).

-
- [118] S.H. Kahana and M.E. Sainio. Are orbiting resonances still possible in antiproton-nucleus scattering? *Physics Letters B*, 139(4) :231 – 234, 1984.
- [119] C. S. Shastry and I. Parija. Orbiting phenomenon in ^{16}O - ^{28}Si scattering. *Phys. Rev. C*, 27 :2042–2057, May 1983.
- [120] D. Batic, N. G. Kelkar, and M. Nowakowski. Orbiting phenomena in black hole scattering. *Phys. Rev. D*, 86 :104060, Nov 2012.
- [121] P. Anninos, C. DeWitt-Morette, R. A. Matzner, P. Yioutas, and T. R. Zhang. Orbiting cross sections : Application to black hole scattering. *Phys. Rev. D*, 46 :4477–4494, Nov 1992.
- [122] Larry A Viehland and Yongbin Chang. Calculation to a prescribed accuracy of the transport cross sections for collisions between structureless particles. *Journal of Physics : Conference Series*, 204 :012007, January 2010.
- [123] Wolfgang. Norenberg and Hans A. Weidenmuller. *Introduction to the theory of heavy-ion collisions*. Springer-Verlag Berlin ; New York, 2d enl. ed. edition, 1980.

Calcul des coefficients de transport dans des plasmas hors de l'équilibre

Résumé

Les propriétés de transport à haute température dans les gaz et/ou dans les plasmas ont une importance capitale dans différents domaines, à savoir dans le domaine de technologie de coupure à arc, plasmas de coupure, de soudure ou de gravure. La connaissance des coefficients de transport est nécessaire pour toute modélisation faisant intervenir les équations hydrodynamiques.

Dans le cadre de la théorie cinétique des gaz dilués, une solution approchée de l'équation intégral-différentielle de Boltzmann régissant les fonctions de distribution a été proposée par Chapman-Enskog. Les coefficients de transport sont calculés classiquement par la méthode de Chapman-Enskog via les intégrales de collision. Dans le cadre de notre étude nous avons développé, dans un premier temps, un code numérique permettant l'obtention de ces intégrales de collision en tenant compte des singularités qui peuvent apparaître dans le calcul des sections efficaces relatives aux interactions entre les particules constituant les gaz et/ou les plasmas. Dans un second temps nous avons étudié l'influence du choix des paramètres des potentiels d'interaction sur les coefficients de transport. Par la suite, nous avons utilisé le code numérique ainsi développé pour évaluer les coefficients de transport du plasma d'hélium en étudiant l'influence du choix de la méthode de calcul de composition chimique sur ces coefficients. Enfin, un modèle simplifié d'une interaction entre une onde électromagnétique et un plasma d'hélium a été proposé comme une application directe des coefficients de transport.

Mots-clés : Cinétique des gaz, équation de Boltzmann, coefficients de transport, intégrales de collision, section efficace, potentiels d'interaction, singularité d'orbiting, quadrature de Clenshaw-Curtis, fonctions thermodynamiques, calcul de composition, plasma d'hélium, transfert d'énergie, onde électromagnétique.

Calculation of transport coefficients in plasmas out of equilibrium

Abstract

Transport properties at high temperature in gases and/or in plasmas are of very importance in various fields, namely in the field of breaking technology in arc, cutting plasma, welding or burning. Knowledge of transport coefficients is necessary for any modeling involving hydrodynamic equations.

As part of the kinetic theory of diluted gas, an approximate solution of the integro-differential Boltzmann equation governing distribution functions was proposed by Chapman-Enskog. Transport coefficients are classically computed using the method of Chapman-Enskog through the collision integrals. In our study we have developed, initially, a numerical code to obtain these collision integral taking into account the singularities that may occur in the calculation of the cross sections relating to interactions between particles forming the gas and/or plasmas. Secondly, we have studied the influence of the choice of parameters of interaction potentials on transport coefficients. Subsequently, we have used the numerical code developed for evaluating and helium plasma transport coefficients by studying the influence of the choice of method for calculating chemical composition on these coefficients. Finally, a simplified model of an interaction between an electromagnetic wave and a helium plasma has been proposed as a direct application of the transport coefficients.

Keywords: Kinetic theory of gases,, Boltzmann equation, transport coefficients, collision integrals, cross section, interaction potentials, singularity of orbiting, Clenshaw-Curtis quadrature, thermodynamic functions, composition, helium plasma, transfer of energy, electromagnetic wave.

