

PROPRIETES DE TRANSPORT POUR L'ETUDE DE L'ARC ELECTRIQUE. EXEMPLE LE CUIVRE

P. André

LAEPT, UMR 6069 du CNRS, Université Blaise Pascal, 24 avenue des Landais 63177 Aubière Cedex

Depuis la création d'un arc électrique entre deux électrodes de graphite à S^t Petersburg par Petrov Vasili en 1803, la communauté scientifique n'a eu de cesse de modéliser, de mesurer toutes sortes de paramètres. Depuis le début du 20^{ème} siècle, de nombreux appareillages industriels normalisés et certifiés existent et sont utilisés pour leur fiabilité, par exemple pour notre protection (fusibles, disjoncteurs,...). Depuis ces 2 siècles d'étude, nous pourrions penser que l'arc électrique est scientifiquement décrit de façon précise et satisfaisante. Malheureusement il n'en est rien.

Les données de base de la description d'un arc électrique qui peuvent à la fois servir à l'interprétation des mesures, au dimensionnement de l'appareillage et à la modélisation sont les coefficients de transport : conductivité électrique, conductivité thermique et viscosité. Pour commenter l'évolution des connaissances dans ce domaine nous avons choisi le cuivre.

Dans un premier paragraphe, nous discuterons les potentiels d'interaction choisis par plusieurs auteurs, puis nous donnerons les résultats des coefficients calculés par ces auteurs.

I. Potentiels d'interaction

I.1 l'interaction Cu Cu

Plusieurs types de potentiels ont été utilisés (Morse, Hubert Hirschfelder, Lennard Jones (12,6)) pour décrire l'interaction entre atomes de cuivre. En 1984, Mostaghini et al [1] utilise un potentiel de type Morse modifié pour l'interaction totale :

$$V(r) = \varepsilon \left\{ \exp\left[-\frac{2C}{\sigma}(r - r_e)\right] - 2 \exp\left[-\frac{C}{\sigma}(r - r_e)\right] \right\} \quad (1)$$

avec $\frac{r_e}{\sigma} = 1 + \frac{\ln 2}{C}$, $\varepsilon = 2.54 \cdot 10^{-20}$ J, $\sigma = 3.20$ Å, $C=9.81$

En 1992, un potentiel de type Lennard-Jones (12,6) est utilisé par Krenek [2], puis en 1994 par Chervy et al [3] et par Cressault [4] :

$$V(r) = 4 \varepsilon \left(\left(\frac{\sigma}{r}\right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r}\right)^6 \right) \quad (2)$$

avec $\sigma=5.058$ Å et $\varepsilon = 4.1185 \cdot 10^{-20}$ J.

Les données de ce potentiel sont obtenues à partir de la température d'ébullition du cuivre par une technique décrite dans [5].

Dans les années 80, pour obtenir une meilleure description de l'interaction entre deux atomes électriquement neutres des chercheurs ont développé, avec l'avènement de la puissance de calcul informatique, des codes permettant de prendre plusieurs niveaux d'excitation en compte [6]. En 1996, pour l'interaction entre deux atomes de cuivre deux niveaux ont été pris en compte par S. Bouillon [7] : l'état attractif $^1\Sigma_g$ et l'état répulsif $^3\Sigma_u$. La description du niveau $^3\Sigma_u$ puisque son poids statistique est le plus important, 3 contre 1 pour le niveau $^1\Sigma_g$ doit être décrit avec soin. Bouillon S [7] utilise un potentiel de Morse modifié :

$$V(r) = \varepsilon \{ \exp[-2\beta(r - r_e)] - 2 \exp[-\beta(r - r_e)] \} \quad (3)$$

avec $\beta = 1.65 \text{ \AA}^{-1}$, $r_e = 2.61 \text{ \AA}$ et $\varepsilon = 2.72372 \cdot 10^{-20} \text{ J}$

En 2002, pour décrire cet état Aubreton A [8] utilise un potentiel de type Hubert Hirschfelder :

$$V_{HH}(r^*) = \varepsilon \left\{ e^{-2\alpha \left(\frac{r^*}{d} - 1\right)} - 2 e^{-\alpha \left(\frac{r^*}{d} - 1\right)} + \beta \left(\frac{r^*}{d} - 1\right)^3 \left(1 + \gamma \left(\frac{r^*}{d} - 1\right)\right) e^{-2\alpha \left(\frac{r^*}{d} - 1\right)} \right\} \quad (4)$$

avec $r^* = r/\sigma$, $\alpha = 4.907$, $\beta = -24.155$, $\gamma = -1.868$, $\varepsilon = 2.24306 \cdot 10^{-20} \text{ J}$, $\sigma = 2.53562 \text{ \AA}$ et $d = 1.14765$.

L'état $^1\Sigma_g$ est décrit par un potentiel de type Hubert_Hirschfelder avec les constantes suivantes : $\alpha = 3.1071$, $\beta = -1.7598$, $\gamma = -2.6165$, $\varepsilon = 3.31076 \cdot 10^{-19} \text{ J}$, $\sigma = 1.74362 \text{ \AA}$ et $d = 1.27304$ pour Bouillon S et $\alpha = 3.1213$, $\beta = -1.8034$, $\gamma = -2.6017$, $\varepsilon = 3.33255 \cdot 10^{-19} \text{ J}$, $\sigma = 1.74536 \text{ \AA}$ et $d = 1.27137$ pour Aubreton A.

Ces potentiels sont donnés sur la figure 1.

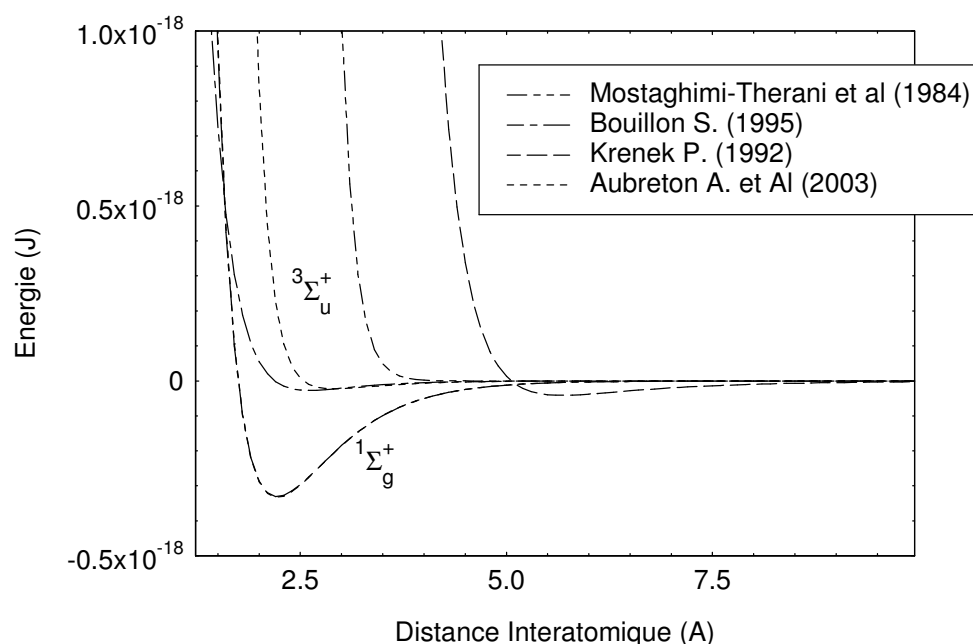


Fig 1 : Potentiels d'interaction utilisés par plusieurs auteurs pour décrire l'interaction entre deux atomes de cuivres.

Sur la figure 1, on note une grande disparité entre les potentiels. Seul le potentiel $^1\Sigma_g$ semble bien décrit. En effet il est directement calculé à partir des constantes spectroscopiques [7, 8].

1.2 Collision entre Cu et Cu⁺

Lors d'une collision entre un atome et son ion, il se produit un transfert de charge. Lorsque la section efficace de transfert n'a pas été mesurée, il faut pouvoir l'évaluer. Si les états associés : gerat et ungerat de l'état fondamental de l'ion sont disponibles, on peut évaluer le transfert de charge [8]. Pour les collisions Cu Cu⁺ seul l'état $^2\Sigma_g$ est disponible d'après [8]. Certains auteurs ont utilisé la polarisabilité de l'atome de cuivre pour évaluer la section efficace de collision.

Chervy et al [3] utilise la formulation de Dalgarno [9]:

$$\begin{aligned} \bar{Q}^{(l,s)} = & A^2 - ABx + \left(\frac{Bx}{2}\right)^2 + \frac{B\zeta}{2}(Bx - 2A) + \frac{B^2}{4}\left(\frac{\pi^2}{6} - \sum_{n=1}^{s+1} \frac{1}{n^2} + \zeta^2\right) \\ & + \frac{B}{2}[B(x + \zeta) - 2A]\ln\left(\frac{T}{M}\right) + \left(\frac{B}{2}\ln\left(\frac{T}{M}\right)\right)^2 \end{aligned} \quad (5)$$

avec M la masse d'une mole de cuivre (g/mol), R la constante des gaz parfaits (erg/mol/K), et $\zeta = 0.99784$ pour $s = 1$.

Ces auteurs ont choisi : $A=47.4 \text{ \AA}$ et $B=4.67 \text{ \AA}$; l'intégrale de collision augmente en fonction de la température. A. Aubreton évalue A à 24.5 \AA et B à 1.091 \AA . Nous avons représenté sur la figure 2 les intégrales de collision utilisées par plusieurs auteurs. N'ayant pas de donnée expérimentale, il est difficile de dire qu'elle est la meilleure approximation.

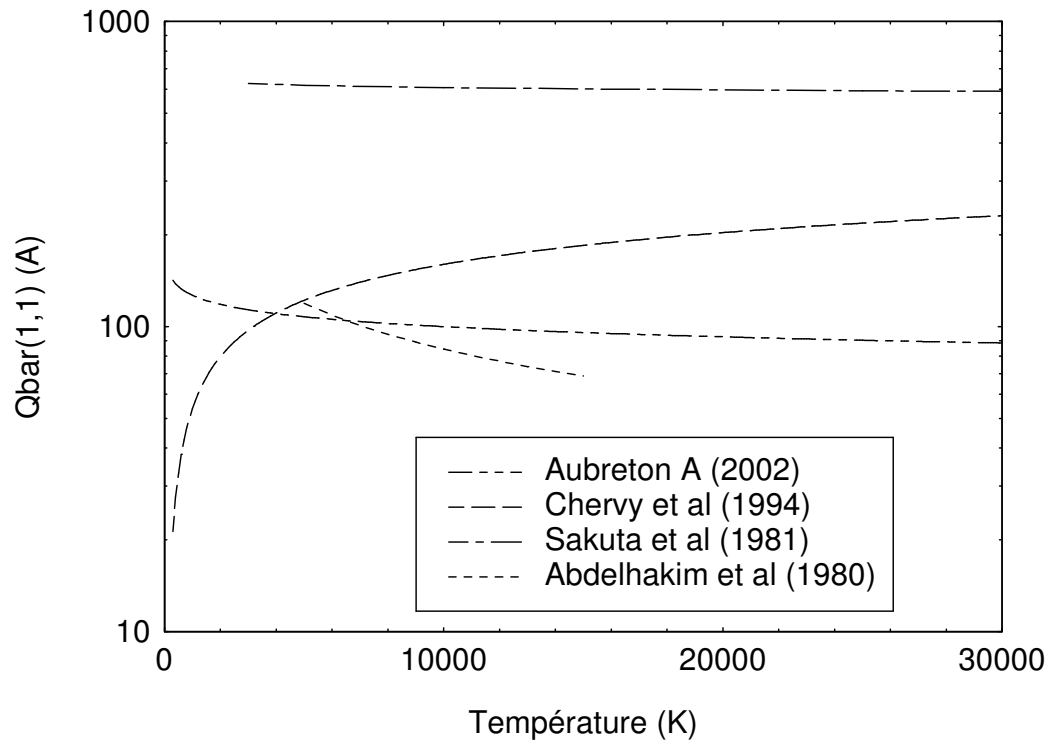


Fig 2. : Intégrales de collision $\bar{Q}^{(1,1)}$ en fonction de la température pour plusieurs auteurs.

I.3. Collision entre les électrons et les atomes neutres de cuivre

La figure 3 montre les sections efficaces de transfert de quantité de mouvement en fonction de l'énergie des électrons. Les résultats de Trajnar [10] sans traitement numérique sont représentés. Ceux-ci ont été normalisés puis utilisés par Krenek [2] pour obtenir un polynôme de lissage :

$$Q_{eCu} = 0.03286 \varepsilon^3 - 3.506 e^{-7} \varepsilon^7$$

avec ε en eV et Q_{eCu} en \AA^2

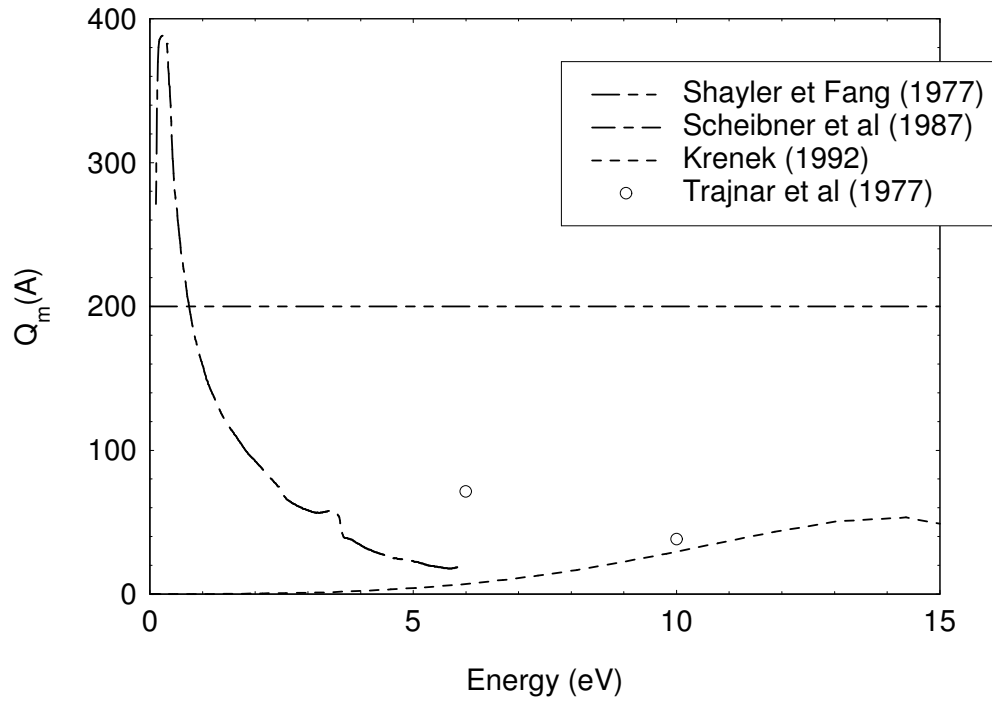


Fig. 3 : Section efficace de transfert de quantité de mouvement entre un électron et un atome de cuivre en fonction de l'énergie de l'électron.

Jusqu'en 1995 le travail de Scheibner et al [3, 11] n'était pas connu par les chercheurs calculant les coefficients de transport. Depuis cette date, les données de Scheibner et al ont été intégrées dans les calculs. Les résultats obtenus pour la conductivité électrique sont similaires à ceux obtenus par un modèle de sphère rigide : 200 Å avec une tolérance de +/- 100% [12].

I.4. Collision entre ions et électrons

Les auteurs d'articles sur les coefficients de transport utilisent habituellement un potentiel Coulombien écranté. Depuis l'article de Devoto [13] qui montre des résultats expérimentaux pour un arc formé dans l'argon, la longueur de Debye est calculée en supposant les ions et les espèces neutres immobiles (eq. 7).

La longueur de Debye complète :

$$l_d = \left(\frac{e^2}{\epsilon_0 kT} \sum_{j=1}^N \zeta_j^2 n_j \right)^{-1/2} \quad (6)$$

avec N est le nombre total d'espèces chimiques présentes dans le plasma, ζ_j le nombre de charge et n_j la densité de l'espèce j .

La longueur de Debye avec uniquement les électrons:

$$l_d = \left(\frac{n_e e^2}{\epsilon_0 kT} \right)^{-1/2} \quad (7)$$

n_e la densité électronique.

II. Résultats

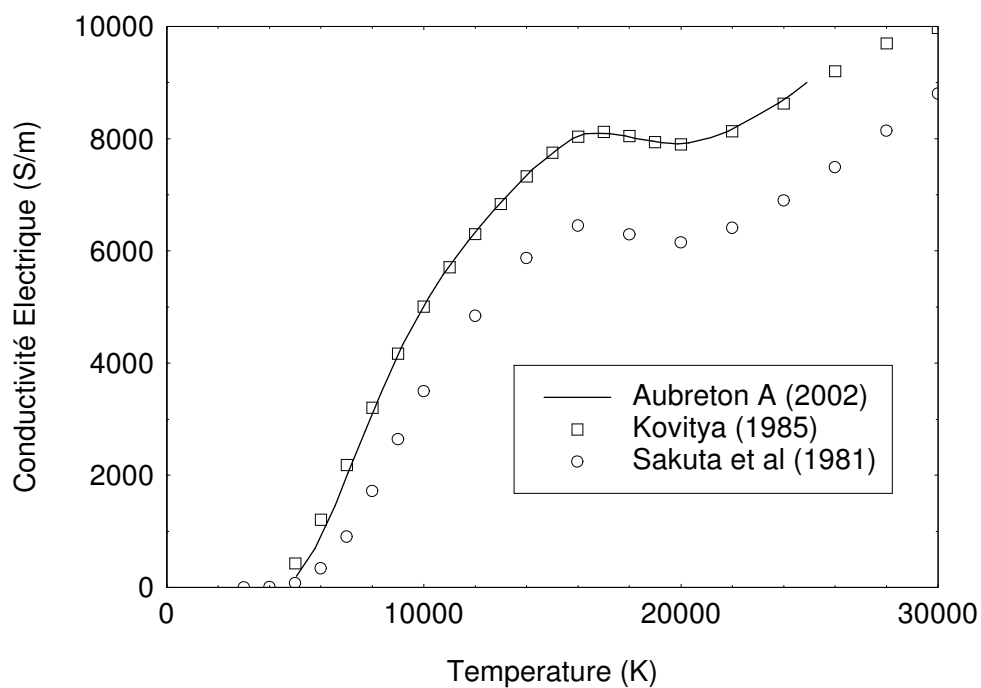


Fig. 4 : Conductivité électrique en fonction de la température à la pression atmosphérique.

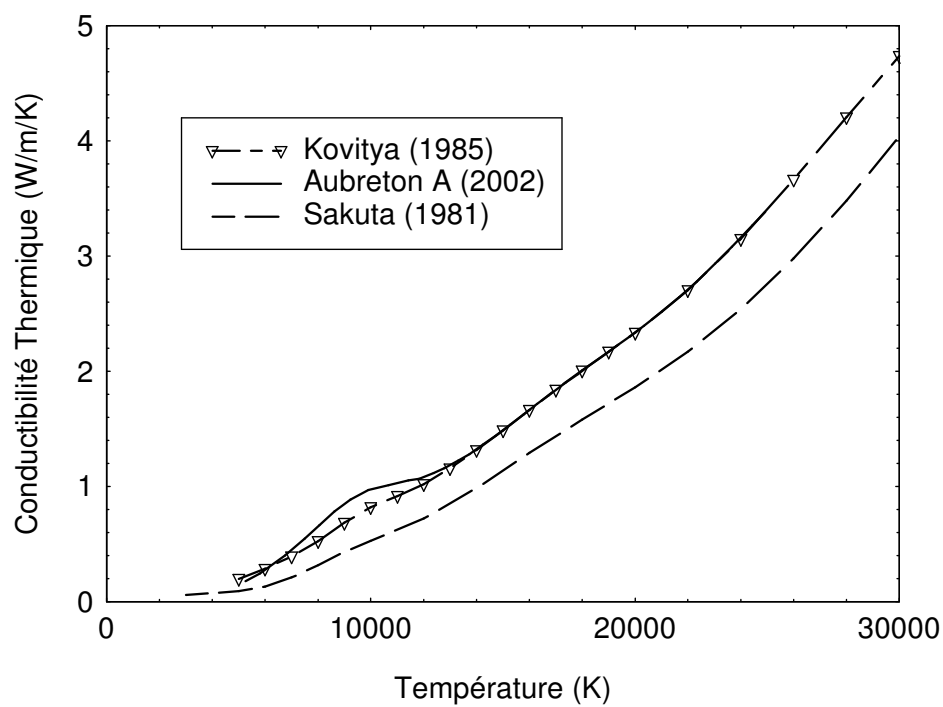


Fig 5 : Conductivité thermique en fonction de la température à la pression atmosphérique.

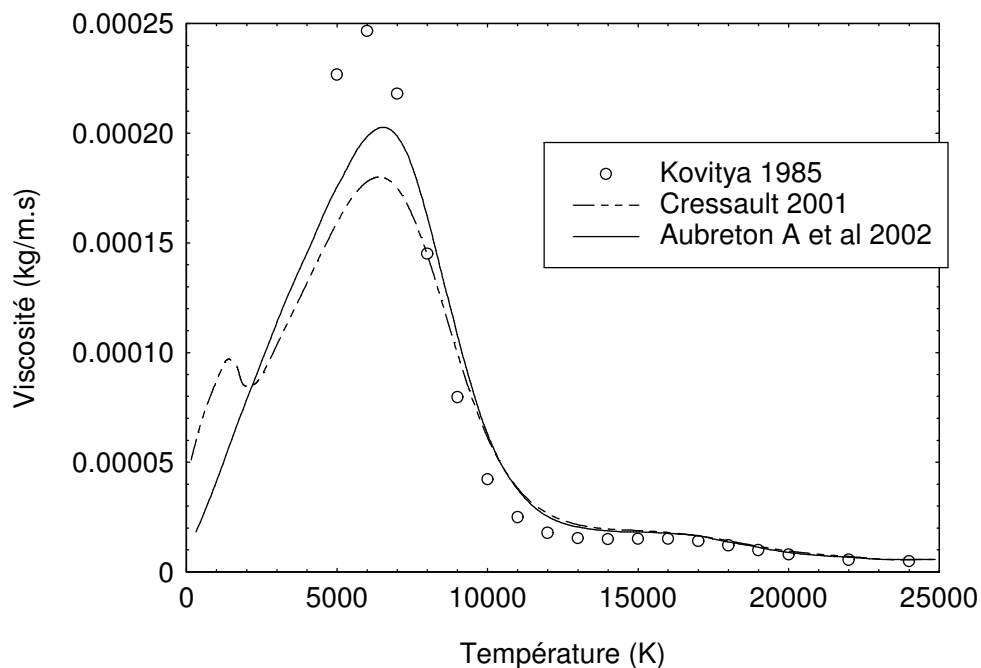


Fig. 6 : Viscosité en fonction de la température à la pression atmosphérique.

Comme le montre les résultats reproduits sur les figures 4, 5 et 6, on retrouve une grande disparité de résultats entre les différents auteurs, notamment avec ceux de Sakuta qui utilise un ordre insuffisamment dans l'approximation de Chapman Enskog.

Conclusion

Pour le calcul des potentiels, les auteurs tentent de décrire de plus en plus finement le potentiel d'interaction souvent à partir de recettes. Dans la méthode de Chapman_Enskog le champ électrique n'est pas pris en compte. Il faudrait pouvoir comparer cette méthode de calcul avec une autre méthode par exemple la dynamique moléculaire. Les coefficients de transport sont souvent utilisés dans des codes de calcul d'écoulement pour l'instant il n'y pas de « Feed Back » pour les améliorer. En ce qui concerne les mélanges de gaz avec le cuivre, la diffusion peut engendrer une concentration plus élevée de cuivre et donc des phénomènes de nucléation. Ainsi, l'utilisation des coefficients de transport doit être menée avec la plus grande précaution.

Références

- [1] Mostaghini-Tehrani J., Pfender E., PCPP, p 129, 1984
- [2] Krenek Petr, Acta Techn. CSAV, 37, p 399, 1992
- [3] Chervy B, Gleizes A, Razafinimanana M, J. Phys D: Appl Phys., 27, p 1193-1206, 1994.
- [4] Cressault Y, DU, Université de Toulouse, 2001.
- [5] Hirschfelder, JO, Curtiss CF, Bird RB, *Molecular theory of gases and liquids*, John Wiley, 1954.
- [6] Rainwater JC, Biolsi L, Biolsi J, Holland P, J Chem Phys, 79, 3, p 1462-1468, 1983.
- [7] Bouillon S, DU, Université de Limoges, 1995.
- [8] Aubreton A, DU, Université de Toulouse, 2002.
- [9] Dalgarno A., Phil Trans Roy Soc London Vol 250 A, 426-439, 1958
- [10] Trajnar S, Williams W, Srivasta SK, J Phys B: Atom. Molec. Phys., V10, N16, p 3323, 1977.
- [11] Scheibner KF, Hazi AU, Physical Review A, V 35, N11, p 4869, 1987.
- [12] Shayler PJ, Fang MTC, J Phys D: Appl Phys, V 10, p 1659, 1977.
- [13] Devoto RS, The Physics of Fluids, V 16, N 5, p 616, 1973.