



HAL
open science

Développement d'un instrument de mesure basée sur la FFE (Fluorescence par Faisceau d'Electrons) pour la caractérisation d'écoulements hypersoniques de basses densités en aérodynamique de rentrée

Babacar Diop

► **To cite this version:**

Babacar Diop. Développement d'un instrument de mesure basée sur la FFE (Fluorescence par Faisceau d'Electrons) pour la caractérisation d'écoulements hypersoniques de basses densités en aérodynamique de rentrée. Physique Générale [physics.gen-ph]. Ecole Polytechnique X, 2011. Français. NNT: . tel-00678444v1

HAL Id: tel-00678444

<https://theses.hal.science/tel-00678444v1>

Submitted on 12 Mar 2012 (v1), last revised 13 Apr 2012 (v2)

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.



ÉCOLE POLYTECHNIQUE



THESE

Pour obtenir

Le GRADE de DOCTEUR en PHYSIQUE

de l'école Polytechnique

Présentée par

Babacar DIOP

**Développement d'un instrument de mesure basée sur la
FFE (Fluorescence par Faisceau d'Electrons) pour la
caractérisation d'écoulements hypersoniques de basses
densités en aérodynamique de rentrée**

Soutenue le 14 décembre 2011

Devant le jury composé de:

Président du jury : **Jean-Marcel RAX**, Professeur Ecole Polytechnique

Directeur de thèse : **Brigitte ATTAL-TRETOUT**, Directrice de recherche ONERA

Rapporteur : **Bruno CHANETZ**, Professeur Université Paris Ouest Nanterre La Défense

Rapporteur : **Michel DUDECK**, Professeur Université Paris 6 Marie-Curie

Examineur : **Ajmal-Khan MOHAMED**, Ingénieur de Recherche et encadrant ONERA

Examineur : **Pierre VERVISCH**, Directeur de Recherche Univ. de Rouen

Examineur : **Viviana LAGO**, Ingénieur de Recherche ICARE-CNRS-Orléans

Avant-propos

Ce mémoire synthétise trois années de recherches effectuées au département de mesures physiques (*DMPH*) de l'Office National d'Etudes et de Recherches Aérospatiales (*ONERA*) à Palaiseau. Ces travaux sont le résultat d'efforts conduits avec l'équipe de recherche de l'unité Sources Laser et Métrologie (*SLM*) sous cofinancement de l'*ONERA* et du Centre National d'Etudes Spatiales (*CNES*) d'Evry, division Systèmes Spatiaux.

Cette section s'adresse aux personnes ayant contribué au bon déroulement des travaux réalisés dans le cadre de la thèse d'un point de vue technique, mais également d'un point de vue personnel et social.

Mes remerciements vont tout d'abord à l'endroit de Mme **Brigitte Attal-Tretout**, Directrice de Recherches à l'*ONERA*, qui a bien voulu diriger cette thèse. Je la remercie pour ces conseils et orientations de ces travaux mais également de m'avoir aidé à persévérer dans les mises au point et corrections du mémoire.

Mes remerciements vont ensuite à **Michel Lefebvre**, qui a accepté de m'accueillir dans son unité de recherches, le *SLM*.

Mes remerciements vont également à l'endroit d'**Ajmal-khan Mohamed**, qui m'a encadré tout au long de cette thèse. J'exprime ma reconnaissance pour sa sollicitude et sa disponibilité qui ont été d'un grand apport pour l'avancement de ces travaux et surtout d'avoir su me remonter le moral lorsque, comme tout thésard périodiquement, j'ai traversé des moments difficiles. Avec toute sa modestie, je le considère comme l'un des plus grands spécialistes en spectroscopie moléculaire à l'heure actuelle.

Mes remerciements concernent ensuite plus particulièrement les personnes ayant accepté de faire partie du jury. J'aimerais donc adresser mes sincères remerciements à mes deux rapporteurs : le Professeur **Bruno Chanetz** de l'Université Paris 10 et le Professeur **Michel Dudeck** de l'Université Paris 6 - Marie-Curie mais aussi à mes examinateurs : Le Professeur **Jean-Marcel Rax** de l'Ecole Polytechnique, Mr **Pierre Vervisch**, directeur de Recherche à l'université de Rouen et enfin Mme **Viviana Lago**, ingénieur de Recherche au laboratoire *ICARE-CNRS* d'Orléans.

Je remercie également le personnel du *DMPH* de l'*ONERA* et des laboratoires extérieurs qui m'ont apporté beaucoup en soutien technique :

- Une mention spéciale à **Jean Bonnet** du *DMPH* sans qui toutes ces campagnes de tests à Toulouse et Orléans n'auraient pas été possibles. Il a toujours su me donner une explication simple et concise aux phénomènes parfois très complexes de la physique des plasmas. J'ai été très touché de le revoir à ma soutenance malgré sa retraite prise depuis maintenant un an.
- **Jean-Pierre Faleni**, technicien du *DMPH* pour la simplicité et sa disponibilité lors des déplacements délicats du canon à électrons Paris-Orléans, Paris-Toulouse et nos longues journées de manip.
- **Thomas Schmid**, technicien du *DMPH* pour son support technique et nos discussions riches en pause café
- L'équipe de Mme **Viviana Lago** de la soufflerie *MARHy ICARE* à Orléans
- L'équipe de Mr **Jacques Soutade** de la soufflerie *F4* de l'*ONERA* à Toulouse

Mes collègues de l'équipe *SLM* : **Jean-Baptiste Dherbecourt, Fabien Boitier, Bertrand Hardy, Jérémie Courtois, Sara Abbate, Florence Baumgartner, Antoine Godard, Myriam Raybaut, Nassim ZAHZAM, Alexandre Bresson, Yannick Bidel, Nelly Dorval** et toute l'équipe du *DMPH* avec qui j'ai beaucoup appris et partagé.

J'exprime ma reconnaissance envers mes amis **Seynabou Bane** et **Frédéric Peschaud** d'avoir accepté de relire mon mémoire en faisant des critiques pour son amélioration mais aussi à mes amis de tous les jours **Amadou Diallo, Gondia Seck, Joseph Abissi, Issa Ngom, Marième Diallo, Dame Seck, Benjamin Njoko, Jean Jacques Dioh, Chris Emyglin** et enfin toutes les personnes qui, de près ou de loin, m'ont apporté leur soutien durant ces trois années.

Pour terminer, j'exprime ma profonde gratitude envers ma famille, notamment mes parents, qui m'ont poussé tout au long de mes études et de cette thèse en particulier, afin que je suive jusqu'au bout mes ambitions scientifiques. Je leur serais toujours reconnaissant pour leur soutien moral, affectif et pour leur fidélité dans leur engagement à mes cotés.

Résumé

Résumé :

Ces travaux de recherche ont consisté à mettre au point un nouveau prototype compact et miniaturisé d'instrument de mesure basée sur la technique de Fluorescence par Faisceau d'Electrons (*FFE*). Cet instrument est un canon à électrons destiné à la caractérisation d'écoulements hypersoniques à basses densités en vol à bord de démonstrateurs de rentrée atmosphérique. Les paramètres à mesurer sont les températures de rotation (T_R), de vibration (T_V) et les densités d'espèces telles que N_2 et NO pour une rentrée atmosphérique terrestre et N_2 , CO , CO_2 pour une rentrée atmosphérique martienne. La première partie de cette étude a été consacrée à la conception du prototype de canon à électrons destiné à des mesures embarquées. Nous avons ainsi choisi les différents composants avec des spécifications techniques compatibles avec un cahier des charges typique d'un instrument spatial. Les tests de qualification et de stabilité du faisceau d'électrons ont été réalisés en caisson à vide dans un gaz statique, ce qui a permis une première validation du fonctionnement du canon à électrons de 20 keV avec un courant de faisceau de 1 mA se propageant sur une distance de 30 cm avec peu de dispersion pour des pressions inférieures au millibar. Le prototype a été testé sur différents gaz et mélanges afin de mettre au point un modèle de dispersion.

Deux campagnes de mesures en soufflerie aérodynamique (*CNRS MARHy* et *ONERA F4*) ont permis de valider le bon fonctionnement du prototype sous vide et/ ou en conditions d'écoulement libre et en présence d'une onde de choc.

Une analyse spectroscopique a permis de valider les codes de simulation et d'inversion de spectres et d'identifier la majeure partie des systèmes vibrationnels et rotationnels issus des transitions électroniques, vibrationnelles et rotationnelles de N_2 , CO et CO_2 et des espèces ionisées associées.

Abstract :

The objective of this research was to develop a new prototype compact and miniaturized measuring instrument based on the technique of Electron Beam Fluorescence (*EBF*) This instrument is an electron gun for the characterization of low density hypersonic flows in flight in atmospheric reentry demonstrator. The parameters to be measured are the rotational temperature (T_R), vibrational temperature (T_V) and densities of species such as N_2 and NO for earth atmosphere re-entry and N_2 , CO , CO_2 for *Mars* atmosphere entry. The first part of this study was devoted to the design of a prototype instrument for an onboard experience. We have chosen the components with technical specifications consistent with the specifications of a typical space instrument. Qualification tests and stability of the electron beam have been achieved in a vacuum chamber with a static gas. This has allowed validating the operation of an electron gun of the order of 20 keV with a beam current of 1 mA propagating over a distance of 30 cm with low dispersion for pressures lower than mbar. The prototype was tested with different gases and mixtures to define and validate a dispersion model.

Two series of measurements in wind tunnel (*CNRS- MARHy* and *ONERA -F4* facilities) were used to validate the proper functioning of the prototype vacuum and / or flow conditions. Spectroscopic analysis was used to validate the simulation codes and inversion of spectra which can be traced back to the densities and temperatures of vibration and rotation in a free-flowing and in the presence of a shock wave.

A spectroscopic analysis has validated the simulation and spectra inversion codes by the identification of most of the vibrational and rotational systems coming from electronic transitions, vibrational and rotational of different gases and associated species.

It allows tracing back the densities and temperatures of vibration and rotation in a free-stream and behind a shock wave.

*Table des
matières*

Table des matières :

Introduction	16
Notations et abréviations	21
1. Chapitre 1 : Caractérisation des écoulements hypersoniques par la technique de FFE (Fluorescence par Faisceau d'Electrons)	23
1.1 La caractérisation des écoulements hypersoniques	23
1.1.1 La rentrée atmosphérique terrestre et la rentrée martienne	23
1.1.2 L'étude en soufflerie	25
1.2 La FFE (fluorescence par faisceau d'électrons) : Etat de l'art.....	26
1.3 La FFE : Introduction de la technique	29
1.3.1 La fluorescence	31
1.3.2 La mesure de la densité de gaz.....	34
1.3.3 Les gaz sondés grâce à la technique de FFE.....	35
1.3.4 La résolution spatiale	35
1.3.5 La mesure des températures de vibration et de rotation.....	35
1.4 Comparaison de la FFE à d'autres techniques de mesures en hypersonique : Avantages – Limites.....	37
1.5 Bibliographie - Chapitre 1.....	39
2. Chapitre 2 : Le canon à électrons : Design et assemblage	44
2.1 Le fonctionnement du canon à électrons à émission secondaire.....	46
2.2 Le courant d'ions et le courant d'électrons : plage de pression de fonctionnement	47

Table des matières

2.3	Le faisceau d'électrons : Dispersion, atténuation et création d'électrons secondaires	48
2.4	L'assemblage du prototype de canon à électrons.....	51
2.4.1	Le prototype <i>EGUN</i> v.1 d'instrument <i>FFE compact</i>	53
2.4.2	Le pilotage à distance du nouveau prototype <i>EGUN</i> v.2.....	57
2.5	Bibliographie - Chapitre 2.....	60
3.	Chapitre 3 : Etude de la dispersion du faisceau d'électrons	62
3.1	Théorie des collisions : Sections efficaces de collisions.....	62
3.1.1	Les collisions élastiques et inélastiques.....	64
3.1.1.1	Les collisions élastiques.....	64
3.1.1.2	Les collisions inélastiques.....	65
3.1.2	Les sections efficaces différentielles élastiques et inélastiques.....	65
3.1.2.1	La section efficace de Rutherford.....	66
3.1.2.2	La section efficace différentielle totale.....	67
3.1.2.3	Modélisation de la section efficace différentielle : Exemple d'un écoulement N_2	68
3.1.3	La section efficace totale de collision.....	72
3.1.4	Le nombre de collisions.....	75
3.2	Modélisation de la dispersion du faisceau d'électrons.....	76
3.2.1	Résultats expérimentaux.....	76
3.2.2	Modélisation de la dispersion du faisceau d'électrons.....	80

Table des matières

3.3	Détermination du profil point-à-point de la densité à partir de la dispersion du faisceau d'électrons	83
3.4	Modélisation de l'intensité du courant d'électrons primaires	89
3.5	Bibliographie - Chapitre 3.....	90
4.	Chapitre 4 : Spectroscopie vibrationnelle et rotationnelle : Développement des codes de simulation et d'inversion de spectres de fluorescence	93
4.1	Modélisation des spectres <i>FFE</i>	95
4.1.1	L'énergie d'un état moléculaire	95
4.1.2	Les transitions entre états moléculaires.....	98
4.1.2.1	Règles de sélection.....	98
4.1.2.2	Longueur d'onde et nombre d'onde d'une transition radiative.....	99
4.1.3	L'intensité de fluorescence.....	101
4.1.3.1	L'intensité d'une raie	101
4.1.3.2	L'élargissement de raie	103
4.1.3.3	La fonction d'appareil et la réponse spectrale	105
4.1.4	La distribution Boltzmannienne de population :	106
4.1.5	La probabilité d'excitation	107
4.1.6	Les facteurs Franck-Condon	107
4.1.7	Le moment de transition électronique	108
4.1.8	La durée de vie radiative	110
4.1.9	Les probabilités de transitions vibrationnelles	110
4.1.10	Les facteurs de branchement entre états rotationnels.....	111

Table des matières

4.1.11	Les programmes de simulation <i>SPECVIB</i> et <i>SPECROT</i>	113
4.2	Validation expérimentale dans une enceinte en statique.....	115
4.3	Résultats	118
4.3.1	Le diazote (N_2)	118
4.3.2	Le monoxyde de carbone (CO).....	122
4.3.2.1	Réseau de 300 traits :	128
4.3.2.2	Réseau de 2400 traits :	131
4.3.3	Le dioxyde de carbone (CO_2).....	142
4.3.4	Mélanges de gaz	151
4.4	Inversion des spectres.....	167
4.5	Bibliographie - Chapitre 4.....	169
5.	Chapitre 5 : Etude d'un mélange $N_2/CO_2/CO$ dans la soufflerie <i>MARHy</i>.....	175
5.1	Objectifs de la campagne de tests	175
5.2	Description de la soufflerie <i>MARHy</i>	175
5.3	Adaptation du canon à électrons dans la soufflerie <i>MARHy</i>	178
5.4	Les conditions expérimentales des mesures.....	180
5.5	Gaz et mélanges étudiés	184
5.6	Conditions générales dans l'écoulement.....	185
5.7	Résultats et discussions	186
5.7.1	Tenue sous vide des différents composants	186
5.7.2	Visualisation d'écoulement devant un obstacle	187

Table des matières

5.7.3	Analyse spectroscopique	191
5.7.3.1	Spectroscopie de l'air sec.....	191
5.7.3.1.1	Statique et en écoulement libre Mach 2.....	191
5.7.3.1.2	Ecoulement devant un obstacle	198
5.7.3.2	Spectroscopie du mélange CRYSTAL	202
5.7.3.3	Etude des bandes de CO	205
5.7.4	La dispersion du faisceau dans l'écoulement libre.....	207
5.7.5	Détermination du profil de densité par la technique de FFE	209
5.8	Bibliographie - Chapitre 5.....	215
6.	Chapitre 6 : Conclusions générales	217
7.	Chapitre 7 : Annexes.....	220
7.1	<i>Annexes A/ Assemblage du canon à électrons</i>	220
7.2	<i>Annexes B/ Procédure d'allumage du canon à électrons</i>	224
7.2.1	<i>Annexes B1/ Installation et procédure d'allumage canon à électrons dans le caisson à vide</i>	224
7.2.2	<i>Annexes B2/ Installation et procédure d'allumage canon à électrons dans MARHy 225</i>	
7.2.3	<i>Annexes B3/ Installation et procédure d'allumage canon à électrons dans F4 227</i>	
7.3	<i>Annexes C/ Dispersion du faisceau d'électrons</i>	231
7.4	<i>Annexes D/ Configuration électronique des atomes et molécules</i>	233
7.4.1	<i>Eléments de symétrie moléculaire : théorie des groupes</i>	233

Table des matières

7.4.2	Configuration électronique des molécules diatomiques : exemple de N_2	234
7.5	<i>Annexes E / Constantes Moléculaires</i>	237
7.5.1	N_2	237
7.5.2	NO	239
7.5.3	CO	240
7.5.4	CN	246
7.5.5	CO_2	247
7.6	<i>Annexes F/ Courbe de transmission de quelques matériaux</i>	248
7.7	<i>Annexes G/ Publications scientifiques et communications</i>	249
	Publications scientifiques à des revues avec comité de lecture	249
	Communications orales à des congrès nationaux et internationaux.....	249

Introduction

Introduction

Les écoulements hypersoniques à haute enthalpie et à basse densité rencontrés lors d'une rentrée atmosphérique (terrestre ou martienne) présentent des phénomènes thermo-chimiques et radiatifs très complexes. Suite aux excitations et échanges d'énergies entre les niveaux internes des espèces chimiques présentes, on observe des phénomènes d'ionisations, de dissociations, de recombinaisons moléculaires, de transferts radiatifs, etc. Une bonne compréhension de ces phénomènes permettrait de mieux maîtriser l'interaction d'un véhicule spatial avec son environnement. Les moyens clés pour arriver à cette compréhension sont la simulation et la caractérisation expérimentale de ces écoulements en soufflerie et en vol.

Pour la caractérisation, divers moyens de mesure sont utilisés, le but final est de construire une base de données des phénomènes mis en jeu. Souvent pour ces écoulements, les moyens de mesures classiques (sondes Pitots, thermocouples, balances d'efforts) ne suffisent pas à donner toutes les informations requises, en particulier dans le gaz loin de la surface du véhicule, on a donc cherché des méthodes nouvelles. Le caractère non-intrusif des méthodes optiques a été déterminant dans l'orientation de notre choix de technique de caractérisation.

Parmi ces méthodes de diagnostic, la Fluorescence par Faisceau d'Electrons (*FFE*) nous a semblé particulièrement bien adaptée à l'étude des écoulements gazeux à basses densités représentatifs de la haute atmosphère. Cette technique utilise un faisceau d'électrons hautement énergétique pour exciter les molécules du gaz et l'étude de la fluorescence induite permet d'accéder aux propriétés physico-chimiques du gaz. Ce moyen de diagnostic optique fournit une mesure locale simultanée de plusieurs paramètres tels que: densités, températures, concentrations d'espèces et vitesses d'écoulement.

L'histoire de la *FFE* commence avec Muntz [0.1] à [0.4] qui, dans les années 1950, y a consacré une grande partie de ses recherches en aérodynamique. Celles-ci, ont abouti à la publication d'un ouvrage faisant aujourd'hui référence en aérodynamique des milieux raréfiés [0.1]. Dans les années 1970, divers travaux, notamment ceux de Lengrand [0.5] dans des souffleries du *CNRS* à Meudon, ont permis d'améliorer cette technique sur des écoulements d'air et d'azote. Mohamed [0.6] et [0.7] a également utilisé dans ses travaux de thèse publiés en 1991, un prototype de canon à électrons pour sonder des rafales dans la soufflerie basse

Introduction

enthalpie *R5ch* à l'*ONERA*-Meudon et à haute enthalpie dans les souffleries *F4* de l'*ONERA* et (*LBK*) du *DLR* [0.8] avec des gaz et mélanges à base de N_2 et *NO*. Au milieu des années 90, Farley et Cattolica [0.9] ont initié l'étude de la fluorescence de dioxyde de carbone (CO_2) excité par impact d'électrons dans le cas d'une étude de composition de l'atmosphère de la planète *Mars*.

Notre étude s'inscrit dans le cadre du projet *EXPERT-ESA* ([0.10], [0.11]), qui a pour but d'étudier la rentrée atmosphérique d'un véhicule balistique de longueur avoisinant un mètre et de diamètre d'environ 0.4 m afin d'améliorer la connaissance de phénomènes hypersoniques tels que : interactions choc-couche limite, transition d'un écoulement laminaire ou turbulent, maîtrise de trajectoire, interactions gaz-surface sur différents matériaux pour une meilleure adaptation aux hauts flux thermiques. Un instrument basé sur la *FFE* a été proposé pour ce projet afin d'effectuer des mesures à des altitudes comprises entre 70 et 50 km lorsque les pressions (entre 10^{-3} mbar et 1 mbar) sont compatibles avec la technique. En particulier, nous avons développé un prototype d'instrument de mesure (faisceau d'électrons et son système de détection) miniature, compact et embarquable afin d'effectuer des mesures spectroscopiques de températures de rotation (T_R), de vibration (T_V) et des densités de N_2 et *NO*. L'étude a été étendue à la caractérisation d'espèces telles que *CO* et CO_2 , importantes lors d'une rentrée sur la planète *Mars*.

La mesure de densité permet de remonter à la composition des écoulements ainsi qu'à la géométrie de l'onde de choc créée par la rentrée de l'engin dans l'atmosphère. La mesure de la température de rotation ou de translation est importante comme donnée d'entrée des codes de calcul aérodynamique simulant l'écoulement autour d'un véhicule. La mesure de la température de vibration permet, quant à elle, de comprendre les «effets des gaz réels» mais aussi d'étudier les phénomènes hors équilibre dans un écoulement à haute enthalpie. La mesure de ces températures est utile notamment pour le choix des matériaux constituant la couche protectrice de ces véhicules (Thermal Protection System ou *TPS*).

La démarche s'est organisée autour de trois grands axes :

- Le développement de l'instrument lui-même (de sa conception aux différentes phases de test et de validation des différents prototypes en caisson à vide) conformément au cahier des charges

Introduction

- La mise au point des codes de calculs, de simulations et d'inversion de spectres ainsi que de traitement d'images
- La validation des codes de calculs par l'étude expérimentale de gaz et mélanges de gaz atmosphériques en souffleries aérodynamiques (*MARHy* et *F4*)

Ce manuscrit de thèse est constitué de cinq chapitres :

Le Chapitre 1 retrace l'histoire et l'état de l'art de la *FFE* et aborde les avantages et inconvénients de cette technique quant à la caractérisation des écoulements hypersoniques.

Le principe de fonctionnement du canon à électrons et l'assemblage de l'instrument *FFE* autour de ce canon à électrons seront détaillés au Chapitre 2. Les résultats des tests de qualification des différents prototypes de canon à électrons en caisson à vide et en conditions réelles dans une soufflerie à rafales *F4-ONERA-Toulouse* sont ainsi présentés.

Dans le Chapitre 3, on étudie la dispersion du faisceau d'électrons causée par des collisions entre les électrons et les molécules de gaz (ou espèce chimique). On propose un modèle de dispersion à partir des sections efficaces de collision et une nouvelle méthode de détermination de profil point-à-point de la densité de gaz dans l'écoulement à partir de l'évolution de la largeur à mi-hauteur du faisceau d'électrons.

Le Chapitre 4 présente l'analyse spectroscopique et les développements des codes de calculs (avec les programmes *SPECVIB*, *SPECROT* et *INVF_LMS*) pour les différents gaz (N_2 , NO , CO , CO_2) et la validation grâce aux mesures expérimentales en caisson à vide (mesures en statiques).

Enfin, une campagne de mesures dans la soufflerie continue *MARHy* au laboratoire *ICARE* du *CNRS* à Orléans a permis d'étudier la fluorescence d'un écoulement Mach 2 d'air sec et d'un mélange $N_2/CO_2/CO$. Les résultats de ces mesures sont présentés dans le Chapitre 5.

Bibliographie de l'introduction

- [0.1] Muntz, E.P. and Marsden, D.J., "Electron Excitation Applied to the Experimental Investigation of rarefied Gas Flow", *Rarefied Gas Dynamics, Vol.II pp.495-526 (Ed.J.A. Laurmann), 1963*
- [0.2] Muntz, E.P., Abel, S.J., Maguire, B.L., "The Electron Beam Fluorescence Probe in Experimental Gas Dynamics", *Vol.3, Issue.2, pp 210-222, 1965*
- [0.3] Muntz, E.P., "The Electron Beam Fluorescence Probe", Presented at the VKI, Jan 1967
- [0.4] Muntz E.P., "The Electron Beam Fluorescence Technique", *AGARDograph 132, 1968*
- [0.5] Lengrand, J.C., Cloupeau, M., "Application of Smith's model to Rotational temperature Measurements in Nitrogen", *AIAAJ. 12, 6 p.812, 1974*
- [0.6] Mohamed A.K., "EBF in blow-down hypersonic wind tunnels", *Thèse de Doctorat de l'université Paris Sud, Orsay, 1991*
- [0.7] Mohamed, A.K., Pot, T., Chanetz, B., "Diagnostics by Electron Beam Fluorescence in Hypersonic flows", ICIASF'95 Record 95-CH3482-7,14.1, *International Congress on Instrumentation in Aerospace Simulation Facilities, Wright-Patterson AFB, Ohio, USA, July 1995*
- [0.8] Mohamed, A.K., Bonnet, J., Koch, U., Esser, B., Guelhan, A., " Electron Beam Fluorescence (EBF) experiments in the LBK wind tunnel", *2nd European Conference for Aerospace Sciences (EUCASS), Brussels, Belgium, July 1-6, 2007*
- [0.9] Farley, D., "Electron Beam Fluorescence of Carbon Dioxide with Application to the Atmosphere of Mars", *PhD Dissertation, University of California at San Diego, 1996*
- [0.10] Ottens, H., Walpot, L., Muylaert, J.M., " *EXPERT* : European Experimental Reentry Testbed : The ESA in flight Research Program", *Aerodynamics and thermo-chemistry of high speed flows Congress, pp 25-27, Marseille 16-19 September, 2002*
- [0.11] Projet ESA : http://www.esa.int/esaMI/EXPERT/SEMDHS9J33G_0.html
http://www.esa.int/esaMI/EXPERT/SEMYRKQORVF_0.html

*Notations
et
abréviations*

Notations et abréviations

CCD- Charged Couple Device – Capteur photographique à base de pixels
CNES- Centre National d'Etudes Spatiales
CNRS- Centre National de la Recherche Scientifique
DLA- Diode Laser Absorption
DLR- Deutsches Zentrum für Luft und Raumfahrt – Centre Allemand pour l'aéronautique et l'aérospatiale
EBF- Electron Beam Fluorescence
EGUN- Electron Gun
ESA- European Space Agency- Agence Spatiale Européenne
EXPERT- European Experimental Re-entry Testbed
FFE- Fluorescence par Faisceau d'Electrons
HT- Haute Tension
ICARE- Institut de Combustion Aérothermique Réactivité et Environnement- CNRS Orléans
INVF_LMS- Programme d'inversion par la méthode des moindres carrés (Least Mean Square Method)
IR- Infrarouge
L.p.m- libre parcours moyen
LDV-Laser Doppler Velocimetry
LIF- Laser Induced Fluorescence- Fluorescence induite par Laser
MARHy- Mach Adaptable for Rarefied Hypersonic Wind-tunnel
NI- National Instrument
NIST- National Institute of Standards and Technologies
ONERA- Office National d'Etudes et de Recherches Aérospatiales
PIV- Particle Image Velocimetry
PSP- Pressure Sensitive Paint
SPECROT- Programme de simulation du spectre de rotation
SPECVIB- Programme de simulation du spectre de vibration
TPS- Thermal Protection System
U.V- Ultra-Violet

Chapitre I

1. Chapitre 1 : Caractérisation des écoulements hypersoniques par la technique de FFE (Fluorescence par Faisceau d'Electrons)

Ce chapitre est consacré à l'état de l'art de la technique de FFE (fluorescence par faisceau d'électrons). Il s'agit de présenter le choix de cette technique pour la caractérisation des écoulements de basses densités de rentrée atmosphérique.

1.1 La caractérisation des écoulements hypersoniques

Le développement d'un véhicule de transport aérospatial nécessite une recherche couvrant toutes les phases de la mission spatiale : de la conception du véhicule et des instruments de mesures embarqués, à leur développement en laboratoire, à leur test de qualification en soufflerie ainsi qu'à l'analyse et l'interprétation des données des expériences en vol.

La caractérisation des écoulements hypersoniques consiste à étudier la composition chimique des gaz ainsi que les phénomènes physico-chimiques du milieu en réaction. Les paramètres à mesurer sont les densités (pression ou concentration d'espèces), les températures et les vitesses d'écoulement ou les paramètres composés comme le nombre de Mach, les flux thermiques, les efforts aérodynamiques, etc.

1.1.1 La rentrée atmosphérique terrestre et la rentrée martienne

L'étude des écoulements gazeux a débuté au début du XX^{ème} siècle avec les débuts de l'aviation puis s'est étendue aux vols dans les couches plus lointaines de l'atmosphère terrestre et d'autres planètes du système solaire.

La caractérisation en rentrée atmosphérique à des vitesses très élevées est plus récente; elle visait l'étude des interactions entre le véhicule et les milieux traversés.

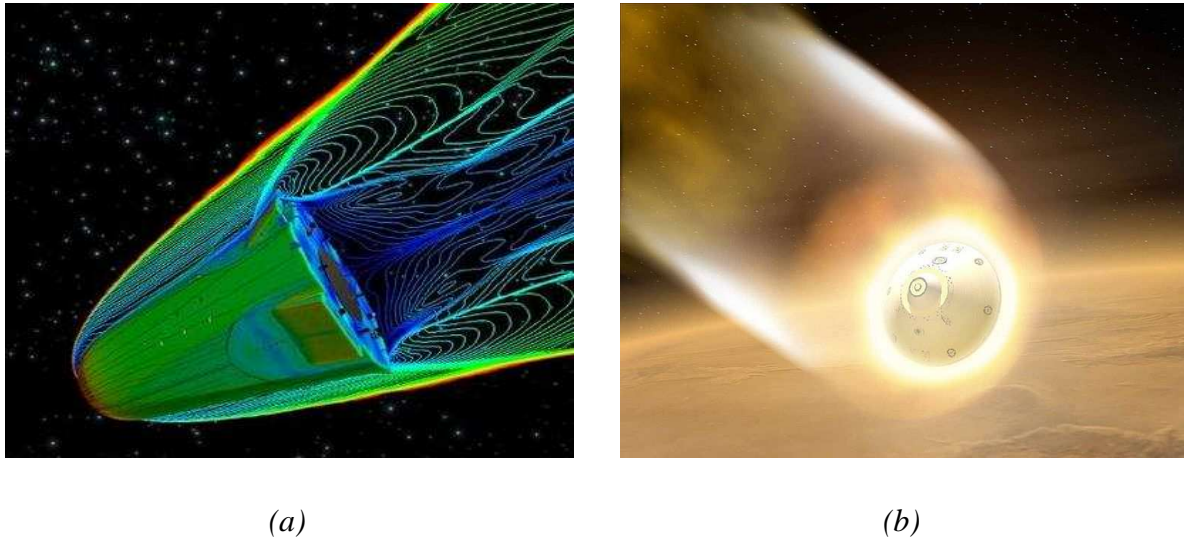


Figure 1.1

Simulations de rentrées atmosphériques : (a) véhicule EXPERT-ESA en rentrée atmosphérique terrestre et (b) vue d'artiste de la rentrée atmosphérique du Mars Exploration Rover sur la planète Mars

Lors d'une rentrée atmosphérique à grande vitesse (jusqu'à *Mach* 20), le freinage dans les couches denses de l'atmosphère s'accompagne d'un échauffement important de l'air autour du véhicule. C'est l'un des moments critiques de la mission car une mauvaise trajectoire ou une mauvaise protection thermique seraient rédhibitoires. Si l'angle de pénétration est trop important, le bouclier thermique, qui peut résister à une température de 3000°C avec la technologie actuelle, subira un échauffement important. La protection du module de rentrée atmosphérique (*Terre* Figure 1.1 (a) ou *Mars* Figure 1.1 (b)) passe ainsi par une recherche aussi bien sur les matériaux de protection thermiques que sur les conditions de rentrée atmosphérique, à savoir les densités, concentrations d'espèces et les températures. La caractérisation des écoulements hypersoniques, des échanges d'énergie et autres phénomènes physiques permet de mieux prévoir les différentes phases de cette rentrée.

Dans une onde de choc, à haute enthalpie, les gaz ne suivent plus la loi des gaz parfaits : ce phénomène est connu sous le nom d'«effets des gaz réels». L'énergie du gaz n'est plus seulement l'énergie cinétique (de translation) des molécules mais elle inclut aussi les énergies internes de vibration et de rotation des molécules. Les échanges entre ces modes sont

complexes. Une mesure des températures de vibration de ces molécules nous informe sur l'importance de ces «effets des gaz réels».

L'étude des molécules telles que N_2 ou O_2 sera complétée par celle de CO et CO_2 (rentrée martienne). Nous avons étudié le CO_2 dans le cadre d'études consacrées à la planète *Mars*. En effet, depuis les années 1970, malgré des explorations jugées coûteuses et difficiles, des missions comme *Mars Climate Orbiter* [1.1], 2001 *Mars Odissey* [1.2], *Mars Exploration Rover* [1.3] ou plus récemment les missions *Phoenix* [1.4], ont pu recueillir des informations sur la «Planète rouge». Les missions d'analyse in-situ de la surface ou de retour d'échantillons sont indissociables d'études sur la phase de rentrée dans l'atmosphère de cette planète.

1.1.2 L'étude en soufflerie

Il existe principalement deux types de souffleries : les souffleries à rafales et les souffleries continues. Les souffleries continues simplifient les tests mais ne sont généralement utiles que pour les écoulements à basse enthalpie. Elles sont généralement subsoniques ou transsoniques. Pour les applications relatives à l'étude de la dynamique des écoulements haute enthalpie de rentrée atmosphérique on utilise plutôt des souffleries à rafales qui permettent de maintenir des vitesses d'écoulement allant de Mach 1 à Mach 20.

Ces installations, à l'image de la soufflerie *F4* de l'*ONERA* (Figure 1.2 (a)), permettent de simuler les conditions de rentrée atmosphérique pour des enthalpies variant entre 2,5 et 17 MJ/kg et des nombres de Mach entre 6 et 20. Son fonctionnement consiste à chauffer un gaz, dans une chambre, par arc électrique. L'ouverture subite d'un col de tuyère placé en aval permet d'établir un écoulement hypersonique pendant 100 millisecondes (schéma du circuit aérodynamique de la soufflerie *F4* sur la Figure 1.2 (b)).

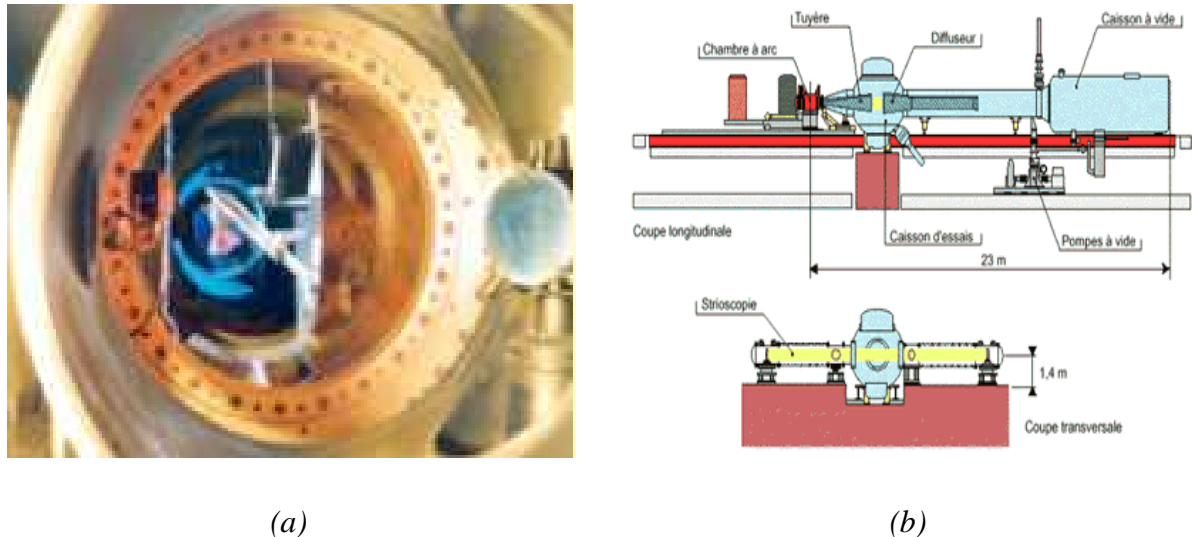


Figure 1.2

Soufflerie aérodynamique F4 de l'ONERA à Toulouse : (a) vue de la chambre de test et (b) vue d'ensemble du circuit aérodynamique

1.2 La *FFE* (fluorescence par faisceau d'électrons) : Etat de l'art

Au cours du processus de *FFE*, des collisions se produisent entre des électrons et les molécules du gaz. L'étude de la physique de ces collisions n'est pas nouvelle. En effet, dès le début des années 1930, des auteurs comme Thomsen (1933) [1.5], Mott&Massey (1952) [1.6] et Massey&Burhop (1952) [1.7], se sont intéressés aux collisions dans des gaz statiques. L'étude des caractéristiques de la luminescence issue de l'excitation de gaz atmosphériques de hautes altitudes par des particules énergétiques tels que les électrons a suscité de nombreuses recherches. Les premières expériences débutent dans les années 1950 avec Grun [1.8] et Schumacher (1952) [1.9] qui affirment que l'étude de la nature de l'émission issue de cette excitation peut donner des informations sur la densité locale. Schumacher appuie cette affirmation en se basant sur une relation de proportionnalité entre l'intensité de la lumière émise et la densité de gaz. Ainsi, dans une publication qui date de 1958 [1.10], Schumacher et Gadamer présentent leurs résultats sur la faisabilité de mesures locales de densité de gaz par l'utilisation d'un faisceau d'électrons dans des écoulements de basses densités de gaz tels que l'air. Tout en soulignant à cette époque encore quelques problèmes techniques relatifs à la

maîtrise du faisceau d'électrons, ils établissent, à partir d'expériences sur l'air à température ambiante, une courbe d'évolution de l'intensité de fluorescence en fonction de la densité de gaz. De cette courbe, ils proposent une formulation de cette relation par l'expression donnant l'intensité émise I :

$$I = \frac{K \cdot n}{1 + \frac{2n\sigma^2(4\pi RT)^{1/2}}{A_{nm}}} \quad \text{Eq. 1-1}$$

où K est une constante, n la densité de gaz et le terme $\frac{2n\sigma^2(4\pi RT)^{1/2}}{A_{nm}}$ représentant un coefficient de «quenching» ou de neutralisation de fluorescence induite par le faisceau d'électrons. Ce coefficient de quenching est directement lié à la section efficace des collisions σ entre les électrons et les atomes ou molécules du gaz, à la température T et inversement proportionnel aux probabilités de transition A_{nm} entre l'état n et l'état m . R est la constante des gaz parfaits.

La linéarité entre l'intensité émise et la densité de gaz n'est plus valable en raison de l'augmentation de la densité et du grand nombre de collisions. Schumacher [1.9] et Gadamer [1.10] montrent ainsi des écarts à la linéarité pour des densités de gaz supérieures à 5 mm d'Hg (6,67 mbar). Plus tard, des auteurs comme Muntz [1.11], Smith [1.20] et Lengrand [1.21] s'intéresseront à l'étude de la zone de non linéarité qui commence à des densités plus basses; autour du mbar pour l'azote moléculaire et encore plus bas en présence de O_2 .

Muntz [1.11], [1.12] et [1.13] publie plusieurs articles qui font aujourd'hui référence dans l'historique du développement d'un canon à électrons pour sonder des écoulements. Il s'est également intéressé à la possibilité de mesurer des paramètres aérodynamiques tels que les températures de rotation et de vibration d'espèces.

Il oriente ses recherches sur le diazote, et plus particulièrement sur le premier système négatif N_2^+IN de N_2 qui présente la bande d'émission la plus importante quand on excite ce gaz avec un faisceau de quelques kilos-électronvolts (keV). Il en déduit ainsi que la distribution spectrale de l'intensité de la fluorescence résulte des températures de rotation et de vibration de l'état fondamental du gaz. Il mesure ainsi, à partir de ces distributions, des températures en

parfait accord avec la température donnée par une sonde classique (thermocouple par exemple).

Par la suite Grun (1954) remarque une nette dépendance de la structure rotationnelle avec la température lors de l'étude du monoxyde de carbone (CO) et, peu de temps après (1961), Muntz finalise ses travaux sur les écoulements d'air et de diazote (N_2) et sur l'Hélium (He), (1964) en soulignant quelques difficultés rencontrés par la technique dans d'autres gaz (1963) [0.4].

De Leeuw [1.14], dans une publication datant de 1972, développe les méthodes expérimentales de mesure des densités de gaz par la fluorescence par faisceau d'électrons. Oneil [1.15] en 1974, Roben et Talbot (1965) [1.16] et Mori [1.17] proposent d'autres améliorations sur la mesure des températures de vibration et de rotation.

En ce qui concerne les mesures de vitesses, Muntz propose, dès 1964, une technique de mesure directe des vitesses absolues sur l'hélium à partir du décalage Doppler obtenu pour un angle incliné par rapport à l'axe d'écoulement tandis que Rothe [1.18] et Hickmann [1.19] proposent un moyen de visualisation de ces écoulements.

Les années 1970 ont été consacrées à l'amélioration des codes de simulation spectroscopique des différents gaz. En particulier, Smith [1.20] et Lengrand [1.21], qui ont proposé de nouveaux modèles du premier système négatif de N_2 . L'étude du diazote est le point central d'étude des écoulements d'air autour des nouvelles navettes spatiales américaines à cette époque. La fin des années 1980 a été marquée par un regain d'intérêt pour l'étude des écoulements hypersoniques [1.22] motivé surtout par la volonté en Europe de construire une navette spatiale et aux Etats-Unis, par l'exploration planétaire. Pour la réalisation de ces projets, l'accent est porté particulièrement sur l'amélioration de la simulation des conditions de rentrée des engins spatiaux ([1.23] et [1.24]) et les recherches s'orientent vers le développement d'outils de mesure embarqués au sein des démonstrateurs spatiaux.

Au début des années 1990, plusieurs publications ([0.5] et [1.25]) montrent les avancées tant dans les méthodes expérimentales d'étude que dans les techniques de mesure des paramètres aérodynamiques.

Au milieu des années 1990, l'un des tous premiers prototypes de canon à électrons de l'ONERA, été réalisé à Meudon [1.26].

L'application de la technique à des molécules telles que le dioxyde de carbone (CO_2) a débuté avec Beylich [1.27] (1971), Price (1984) [1.28] et plus récemment Cattolica et Farley ([1.29] à [1.33]). Farley [1.34] (1996-1999) a également étudié la dispersion du faisceau d'électrons dans des écoulements de densités proches du millibar et a étudié la fluorescence du CO_2 dans la zone entre 250 nm et 800 nm.

Les motivations des futurs travaux sont maintenant de concentrer les efforts sur l'instrument de mesure associé à son système de détection ainsi que sur l'analyse spectroscopique dans la zone u.v < 220 nm, peu connue. Cette dernière pourrait présenter de meilleures perspectives d'exploitation de la fluorescence car elle est loin de la zone spectrale d'émission propre à une couche de choc. L'étude dans cette zone est facilitée par l'apparition de nouveaux types de détecteurs u.v très sensibles (*ICCD*).

1.3 La FFE : Introduction de la technique

L'impact d'un faisceau d'électrons hautement énergétique (1 keV- 50 keV) de diamètre d'environ 1 mm (Figure 1.3) sur un atome ou une molécule a pour effet d'induire des transitions entre les différents niveaux d'énergies. Ces transitions résultent des collisions entre les électrons du faisceau et les atomes ou molécules du gaz. L'émission induite couvre un domaine allant des *rayons X* à l'*infrarouge (IR)*.

La figure 1.3 présente une géométrie typique de la technique FFE (Fluorescence par Faisceau d'Electrons) ou *EBF* (Electron Beam Fluorescence) dans un écoulement hypersonique basse densité à Mach 10. On y voit le faisceau fluorescent en amont d'une maquette de type «Blunt body» conique ainsi que l'onde de choc autour de cette maquette. La visualisation de cette onde de choc résulte du phénomène de post-luminescence induite par le faisceau d'électrons.

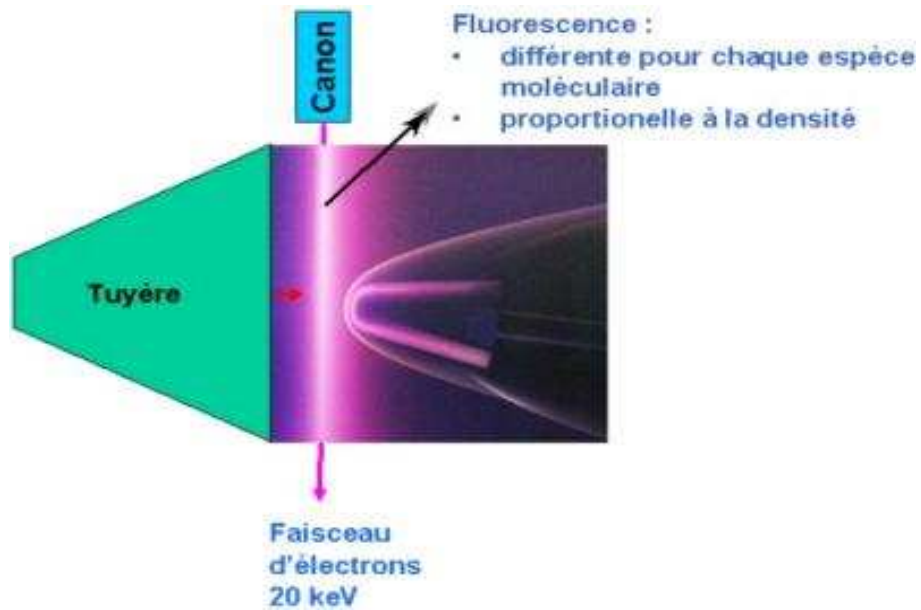


Figure 1.3

Utilisation d'un faisceau d'électrons de 20 keV utilisé pour le sondage d'un écoulement Mach 10 en soufflerie aérodynamique et devant une onde de choc : post-luminescence

Le fonctionnement du canon à électrons sera présenté, en détails, dans le Chapitre 2 et les méthodes de mesures de densités et de températures dans le Chapitre 4.

1.3.1 La fluorescence

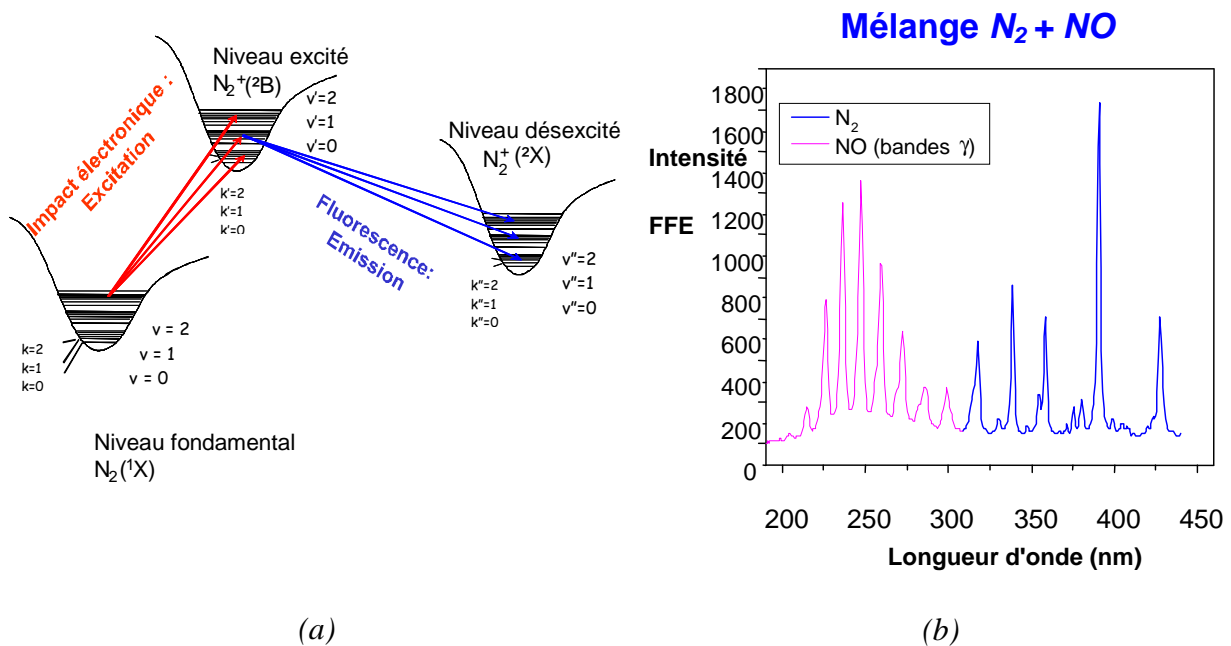


Figure 1.4

Principe de la fluorescence par faisceau d'électrons : (a) phénomène d'excitation-désexcitation et (b) bandes vibrationnelles dans un mélange N₂/NO ([1.26])

Le faisceau d'électrons fait passer la molécule d'un "état fondamental" à un "état excité" (Figure 1.4 (a)), le retour à "l'état stable" se faisant par émission spontanée de lumière allant de la zone u.v au visible (Figure 1.4 (b)) appelée *FLUORESCENCE*. Sur cette figure on observe les bandes de vibration du premier système négatif N₂⁺, *IN* entre 300 nm et 450 nm et les bandes gammas de *NO* entre 200 nm et 300 nm.

Dans le cas de la molécule de diazote N₂, les différentes étapes d'excitation sont :

La collision entre les électrons primaires du faisceau et des molécules d'azote

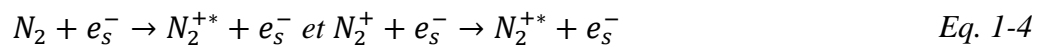


où e_p^- représente les électrons primaires du faisceau d'électrons. La formation d'ions N₂⁺* s'accompagne d'émission d'électrons secondaires e_s^- dont l'énergie peut atteindre

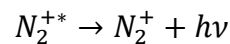
plusieurs électrons-volts. L'ion N_2^{+*} , excité dans les niveaux vibrationnels supérieurs est dénoté par le symbole «*». Il perd ensuite spontanément une partie de son énergie en émettant un photon d'énergie $h\nu$:



Les électrons secondaires créés peuvent également subir des collisions avec les molécules neutres N_2 mais aussi avec les ions N_2^+ . Une suite d'excitation suivie de désexcitation (cascade radiative) comme dans le cas des électrons primaires :



puis



qui produisent de la fluorescence supplémentaire.

Le phénomène de Quenching correspond à la désexcitation non radiative qui résulte des collisions entre les molécules. Le Quenching atténue ainsi la fluorescence. Il peut être exprimé selon l'équation :



Les phénomènes de création d'électrons secondaires et de quenching seront présentés dans les chapitres suivants.

Les nombres quantiques (Λ, v, k) sont associés respectivement aux niveaux électroniques, vibrationnels et rotationnels. Le niveau fondamental est associé à l'état électronique (Λ, v, k) , les niveaux excités (Λ', v', k') et les niveaux désexcités (Λ'', v'', k'') .

L'intensité de fluorescence entre ces niveaux excités est donnée par l'expression suivante [1.20] :

$$I_{\Lambda'v'k'}^{\Lambda v k}(\lambda) = I_1 \cdot \frac{q_{v'v''} P_{kk'} R_{\Lambda\Lambda'}}{2K' + 1} \cdot \sum_{vk} n_{\Lambda vk} q_{vv'} P_{kk'} \quad \text{Eq. 1-6}$$

Dans cette expression on retrouve l'intensité initiale du faisceau d'électrons I_1 , les constantes moléculaires et coefficients de transitions ($q_{v'v''}$, $P_{kk'}$, $R_{\Lambda\Lambda'}$, $q_{vv'}$, $P_{k'k''}$) détaillés dans le Chapitre 4. Le paramètre $n_{\Lambda vk}$ représente la population sur le niveau (Λ, v, k) . Il s'exprime suivant l'approximation de Born-Oppenheimer pour une distribution de Boltzmann (équilibre thermodynamique), par :

$$n_{\Lambda vk} = n_g \cdot \frac{e^{-\frac{E_\Lambda}{k_B T_\Lambda}}}{Q_{elec}} \cdot \frac{e^{-\frac{E_v}{k_B T_v}}}{Q_{vib}} \cdot \frac{e^{-\frac{E_k}{k_B T_R}}}{Q_{rot}} \quad \text{Eq. 1-7}$$

où n_g est la densité totale de gaz. E_Λ, E_v, E_k , les niveaux d'énergie des états fondamentaux électroniques Λ , vibrationnels v et rotationnels k et T_Λ, T_v et T_R , k_B la constante de Boltzmann, les températures électroniques, de vibration et de rotation et Q_i les facteurs tels que $Q_i = \sum e^{-\frac{E_i}{k_B T_i}}$ avec i désignant l'état électronique, vibrationnel ou rotationnel.

L'étude de la structure vibrationnelle ou rotationnelle (par exemple sur la bande principale à 391.14 nm de la fluorescence du premier système négatif de N_2^+ (Figure 1.4 (b)), donne distribution de population à l'état fondamental et donc les températures de vibration T_v et de rotation T_R . La résolution spatiale est liée au diamètre du faisceau. Pour les gaz à faibles densités (inférieures à 10^{16} molécules.cm⁻³) avec un faisceau d'électrons de l'ordre de 20 keV et de diamètre de 1 mm, la résolution spatiale est de l'ordre du millimètre avec un détecteur visualisant 1 mm de longueur du faisceau.

1.3.2 La mesure de la densité de gaz

A partir l'équation Eq. 1-7 et Eq. 1-6, on peut exprimer l'intensité de fluorescence pour tous les états électroniques et vibrationnels, et, à basse densité et lorsque $R_{\Lambda\Lambda}$ est indépendant de n_g , il y a proportionnalité avec n_g :

$$I_{\Lambda'\Lambda''} \propto n_g \quad \text{Eq. 1-8}$$

On comprend qu'il soit possible de déterminer avec une très bonne approximation la densité «locale» du milieu gazeux. On peut également déterminer le profil de densité de l'écoulement à partir d'une mesure de l'intensité de fluorescence le long du faisceau en prenant bien sûr en compte l'atténuation et la dispersion de celle-ci. En effet la relation de proportionnalité n'est valable que pour les faibles densités de gaz (10^{16} molécules.cm⁻³ ou 1 mbar à 300 K). A des densités supérieures à 10^{16} molécules.cm⁻³, le quenching, la dispersion et la participation plus importante des électrons secondaires à la fluorescence rendent cette relation de proportionnalité invalide.

L'utilisation d'un faisceau très énergétique permet de relever le seuil de non-linéarité. En effet, à plus grande énergie, la section efficace diminue avec moins de collisions et moins de dispersion, d'où une meilleure propagation à travers le gaz.

La *FFE* n'est donc utilisable que pour des densités inférieures à 10^{16} molécules.cm⁻³. En dessous de 10^{13} molécules.cm⁻³, une autre limitation est imposée par la limite de détectivité de notre système de détection.

Pour résumer, la mesure de densité est possible pour la plupart des gaz atmosphériques à condition que l'on ait :

- Un faisceau d'électrons très énergétique (1 keV à 30 keV selon les applications)
- Des densités d'écoulements comprises entre 10^{13} et 10^{16} molécules.cm⁻³

1.3.3 Les gaz sondés grâce à la technique de FFE

L'émission produite par des ions ou des molécules neutres tels que le diazote, le monoxyde d'azote (NO), le dioxygène (O_2), le monoxyde de carbone (CO), ou encore le dioxyde de carbone (CO_2) a été observée.

1.3.4 La résolution spatiale

La résolution spatiale est de l'ordre du diamètre du faisceau. Cependant l'atténuation et la dispersion du faisceau d'électrons, quand celui-ci se propage à travers le gaz, affectent la résolution spatiale. Les mesures doivent ainsi être faites dans le volume du faisceau défini par son diamètre de sortie et la distance de propagation. Au-delà, il faudrait une correction de la dispersion et de l'atténuation. Avec le faisceau de diamètre 1 mm, on a une résolution spatiale de l'ordre de 1 mm² au moins jusqu'à une trentaine de centimètres de propagation.

1.3.5 La mesure des températures de vibration et de rotation

Dans un écoulement gazeux, on distingue les paramètres externes et les paramètres internes. Les paramètres externes caractérisent le mouvement des molécules au sein de l'écoulement. La température de translation est la température qui caractérise le mouvement d'agitation. Dans un écoulement, un gradient de température s'installe entre la température dite génératrice T_g , à la sortie du col de la tuyère, et la température d'arrêt T_a que l'on obtient très loin en aval de la sortie de la tuyère.

A côté de ces paramètres externes, la distribution des populations sur les niveaux vibrationnels et rotationnels représente l'énergie interne des molécules. Les paramètres internes associés sont la température électronique T_Λ , la température de vibration T_V et la température de rotation T_R . Dans un gaz à l'équilibre, ces températures sont égales mais dans un écoulement à haute enthalpie, elles sont différentes. La température de vibration peut ainsi atteindre quelques milliers de Kelvins (entre 3000 et 5000 K), contre quelques centaines de Kelvins pour la température de rotation.

La température de rotation est voisine en général de la température de translation. La température de vibration donne accès à l'énergie interne de l'écoulement et donc aux «effets des gaz réels», considérés comme l'écart à l'équilibre de Boltzmann (Figure 1.5). Dans l'écoulement libre, il n'y a pas d'écart entre les températures T_V et T_R (couleur bleu foncé sur la figure) mais des écarts importants jusqu'à 1500 K sont présents dans la couche de choc.

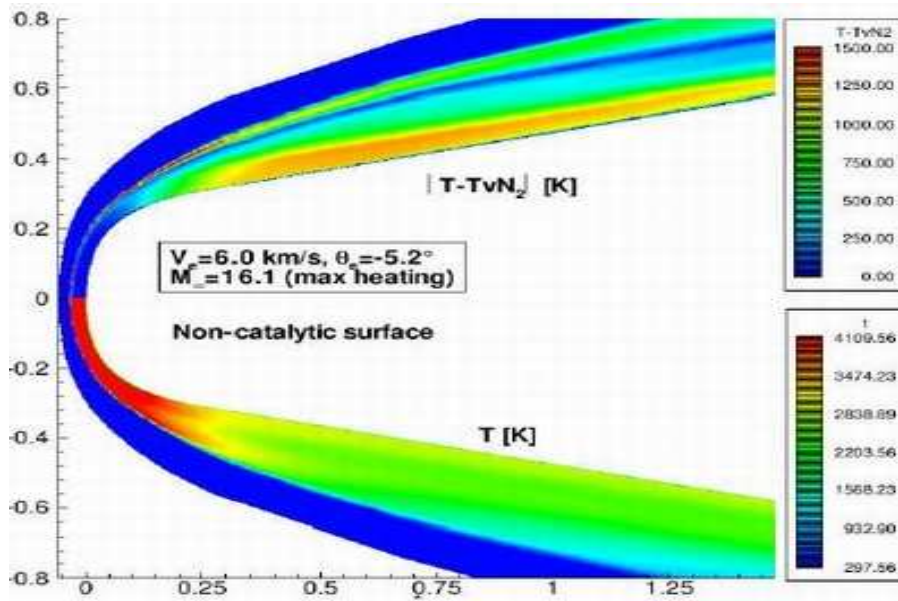


Figure 1.5

Simulation des écarts de températures $|T - T_v(N_2)|$ à la surface du véhicule EXPERT3 à 6 km/s et Mach 16,1 ([0.10])

La moitié basse de la Figure 1.5 montre que la température de rotation T_V peut être très élevée à la surface (près du nez).

1.4 Comparaison de la FFE à d'autres techniques de mesures en hypersonique : Avantages – Limites

Différentes méthodes expérimentales sont aujourd'hui utilisées pour caractériser les écoulements. Ces méthodes peuvent parfois être couplées. Elles permettent, soit la visualisation directe (analyse bidimensionnelle ou tridimensionnelle de la zone étudiée), soit une analyse indirecte par dépouillement de spectres d'absorption ou d'émission.

Parmi ces techniques [1.35] il y a l'interférométrie, le «shadowgraphy» pour les écoulements compressibles, ou encore la FFE pour les écoulements basses densités et la PIV (Particle Image Velocimetry).

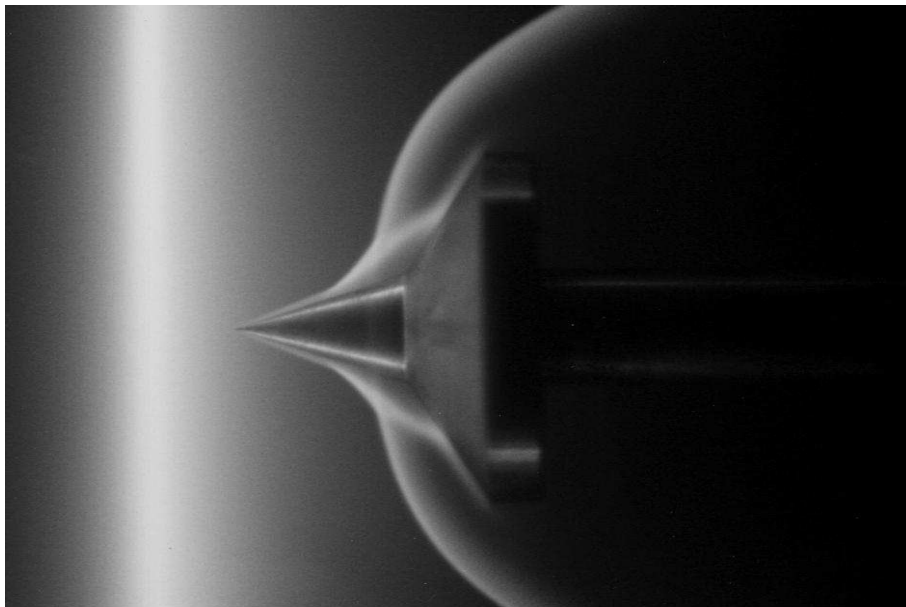


Figure 1.6

Visualisation de l'onde de choc créée par écoulement Mach 10 devant un double cône par la technique de FFE ([1.22])

A partir de ces images, on peut obtenir des informations telles que la distribution de pression. La méthode *PSP* (*Pressure Sensitive Paint*) donne la distribution de pression à la surface d'une maquette à partir de la fluorescence activée sur une peinture réactive à la présence

d'oxygène. La précision de cette méthode dépend de la quantité d'oxygène qu'il y a dans le milieu.

La fluorescence donne accès à des paramètres comme la vitesse d'écoulement, les températures ou encore les densités. La modulation de la fréquence d'émission ou d'absorption d'une source laser permet de mesurer la vitesse instantanée d'un écoulement; c'est le cas en *LDV* (Laser Doppler Velocimetry). D'autres méthodes comme la *LIF* (Laser Induced Fluorescence), la technique d'absorption diode laser *DLA* (Diode Laser Absorption) la technique de diffusion Raman ou Rayleigh permettent aussi de mesurer les vitesses instantanées et les températures et densités de gaz. L'utilisation d'un faisceau d'électrons à la place des lasers permet d'avoir un signal plus intense à basse densité car un électron a une section efficace d'excitation plus grande qu'un photon. On a aussi une plus large gamme d'excitation (de la zone u.v à l'Infrarouge) ce qui permet d'étudier un plus grand nombre de raies ou de système moléculaire. La *PIV* et la *FFE* permettent de faire une cartographie en temps réel de la distribution de densité. La fluorescence est directement induite sur des molécules dans leur état fondamental.

Methods for flow diagnostics

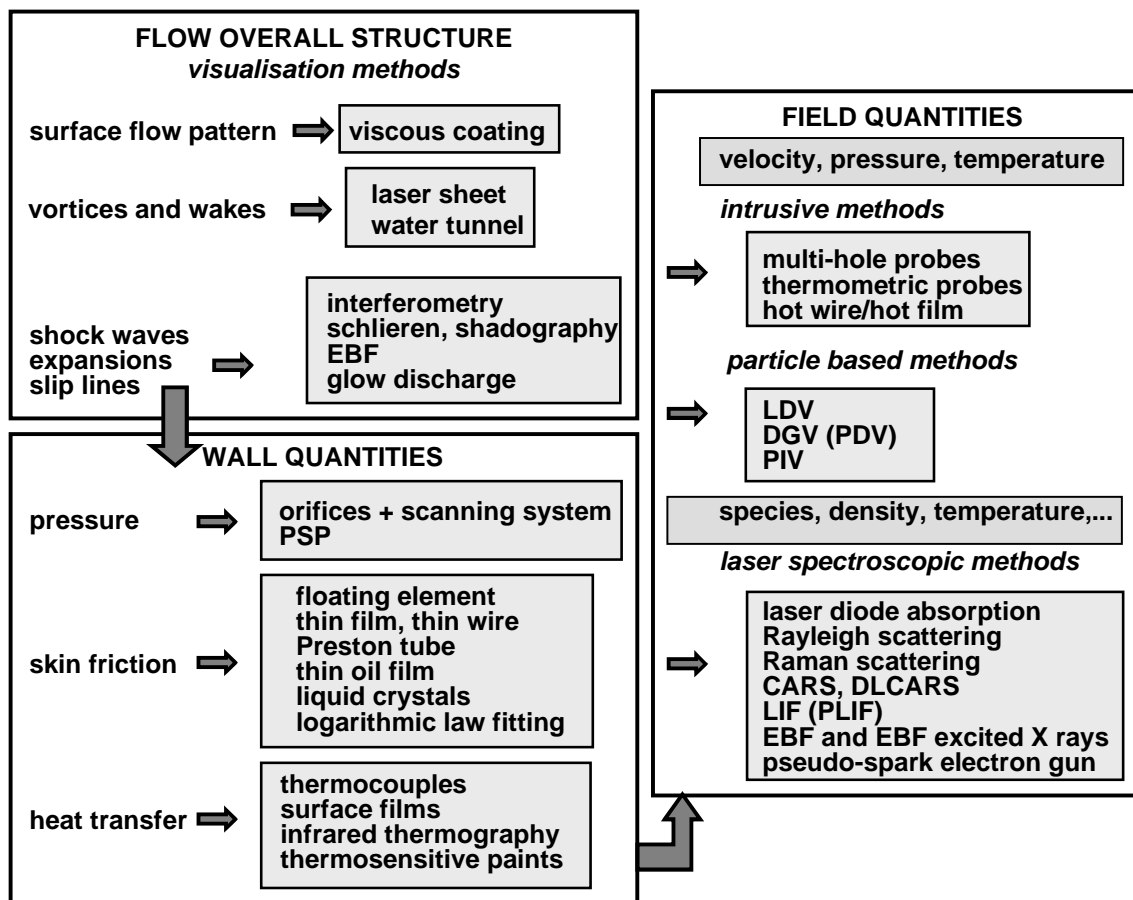


Figure 1.7

Différentes techniques de sondages utilisés pour la caractérisation d'écoulement ([1.35]).

1.5 Bibliographie - Chapitre 1

- [1.1] Site consacré à la mission *Mars* Climate Orbiter: <http://mars.jpl.nasa.gov/msp98/orbiter/>
- [1.2] Site consacré à la mission *Mars* Odissey: <http://mars.jpl.nasa.gov/odyssey/index.cfm>
- [1.3] Mar Rover : <http://marsrover.nasa.gov/home/>
- [1.4] Mars Phoenix : <http://www.jpl.nasa.gov/news/phoenix/main.php>

- [1.5] Thomsen, Sir J.J., "Conduction of Electricity Through Gases", Vol.II, *Cambridge University Press, London & New York, 1933*
- [1.6] Mott, N.F. and Massey, H.S.W., "The Theory of Atomic Collisions", *Oxford University Press (Clarendon), London & New York, 1952*
- [1.7] Massey, H.S.W. and Burhop, E.H., "Electronic and Ionic Impact Phenomena", *Oxford University press, Clarendon, London & New York, 1952*
- [1.8] Grun, A.E., Shopper, E., Schumacher, B., "Electron Shadowgraph and Afterglow Pictures of Gas Jets at Low Densities", *J. Appl. Phys., 24, p1527, 1953*
- [1.9] Schumacher, B.W., "Dynamic Pressure Stage Elements for the Projection of Intense Monokinetic Corpuscular Beams into Gases at High Pressure", *Optik 10, 1-3, 116, 1953*
- [1.10] Schumacher, B.W. and Gadamer, E.O., "Electron Beam Fluorescence Probe for Measuring the Local Gas Density in a Wide Field of Observation", *Can.J.Phys.Vol.36, 1958*
- [1.11] Muntz, E.P. and Marsden, D.J., "Electron Excitation Applied to the Experimental Investigation of rarefied Gas Flow", *Rarefied Gas Dynamics, Vol.II pp.495-526 (Ed.J.A. Laurmann), 1963*
- [1.12] Muntz, E.P., "The Electron Beam Fluorescence Probe", *Presented at the VKI, Jan 1967*
- [1.13] Muntz, E.P., "The Electron Beam Fluorescence Technique", *AGARDograph 132, 1968*
- [1.14] De Leeuw, J.H., Davies, W.E.R., "Measurement of temperature and density in the upper atmosphere using an electron beam", *Can. j. Phys, 50(10), 1044, 1972*
- [1.15] O'Neil, R.R., Pendelton, W.R., Hart, A.M., Stair, A.T., "Vibrational temperature and molecular density of nitrogen measured by rocket-borne electron beam induced luminescence", *J. Geophys. Res., 79(13), 1942, 1974*

- [1.16] Robben, F. and Talbot, L., “Measurement of Rotational Temperature in a Low Density Wind Tunnel”, *Physics of Fluids*, Vol.9, p.644, 1966
- [1.17] Mori, H., Tomohide, N., Isao, A., and Takumi, T., “Experimental detection of rotational non-Boltzmann distribution in supersonic free molecular nitrogen flows” *PHYSICS OF FLUIDS* 17, 117103, 2005
- [1.18] Rothe, D., *Physics of Fluids*, Vol.9, 164 3, 1966
- [1.19] Hickmann, R.S., “Electron Beam Flow Field Visualization”, *presented at APS Fluid Dyn.Div., Cleveland, Nov.1965*
- [1.20] Smith, R.B., “N₂ First Negative band Broadening due to Electron Beam Excitation”, *Rarefied gas Dynamics, 6th Symposium, Vol.2, p.174 Acad.Press, N.Y., 1969*
- [1.21] Lengrand, J.C., Cloupeau, M., “Application of Smith’s model to Rotational temperature Measurements in Nitrogen”, *AIAAJ. 12, 6 p.812, 1974*
- [1.22] Mohamed, A.K., Pot, T., Chanetz B., “Diagnostics by Electron Beam Fluorescence in Hypersonic flows”, ICIASF’95 Record 95-CH3482-7,14.1, *International Congress on Instrumentation in Aerospace Simulation Facilities, Wright-Patterson AFB, Ohio, USA, July 1995*
- [1.23] Gochberg, L.A., “Electron Beam Fluorescence Methods in Hypersonic Aerothermodynamics”, *Prog. Aerospace Sci., Vol. 33, pp. 431-480, 1997*
- [1.24] Larigaldie, S., Bize, D., Mohamed, A.K., Ory, M., Soutadé, J., and Taran, J.P., “Velocity Measurement in High Enthalpy, Hypersonic Flows Using an Electron-Beam-Assisted Glow Discharge”, *AIAA Journal, Vol. 36, No 6, 1998*
- [1.25] Kawashima, T., Oyama, K. and Suzuki, K., “A Measurement of Vibrational-Rotational Temperature and Density of Molecular Nitrogen in the Upper Atmosphere by Rocket-Borne Electron Beam Induced Luminescence”, *The Institute of Space and Astronautical Science(Japan), report n° 672, 1999*
- [1.26] Mohamed., A.K., “Sondage par faisceau d’électrons des écoulements hypersoniques en rafales brèves”, *Thèse de Doctorat de l’université Paris Sud, Orsay, 1991*

- [1.27] Beylich, A.E., *Physics of Fluids* 14, p. 898, 1971
- [1.28] Price, L.L., Williams, W.D., Stepanek, S.A., “Application of electron beam fluorescence for characterization of hypersonic facility flows”, *AIAA, Aerospace Ground Testing Conference, 17th, Nashville, TN, 17 p., July 6-8, 1992*
- [1.29] Cattolica, R.J., Schmitt, R.J., Palmer, R.E., “Feasibility of non-intrusive optical diagnostic measurements in hypersonic boundary layers for flight experiments”, *AIAA paper 90-0627, 1990*
- [1.30] Farley, D.R., Cattolica, R.J., “Electron-beam fluorescence from the $A^2\Pi-X^2\Pi$ and the $B^2\Sigma-X^2\Pi$ transitions of CO_2^+ ”. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer* 56-1, 83-9696., 1996
- [1.31] Farley, D.R. & Cattolica, R.J., “Multipole line strengths for linear Hund's case (a) molecules”, *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer* 56-5, 753-760, 1996
- [1.32] Farley, D.R., Cattolica, R.J., “Collisional quenching and excitation cross-sections of the CO_2^+ , $A^2\Pi(1\rightarrow 3,0,0)$ and $B^2\Sigma+(0,0,0)$ excited states from electron-impact ionization”, *Chemical Physics Letters, Volume 274, Issue 6, Pages 445-450, 1997*
- [1.33] Farley, D.R. & Cattolica, R.J., “Spectroscopic modelling of the $CO_2^+ A^2\Pi - X^2\Pi$ (110-010) Renner-Teller bands in the electron beam fluorescence of carbon dioxide”, *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer, Vol. 59. No. 1/2, pp. 25-31, 1998*
- [1.34] Farley, D.R. & Cattolica, R.J., Clapp, L.H., “Propagation of medium energy electrons (10–20 keV) in carbon dioxide”, *Phys. Fluids* 11, 226, 1999
- [1.35] Gilliot, A., Delery, J., Kompenhans, J., Schwamborn, D., “Experimental requirements in flow visualization” ONERA, DLR Technical Report, 2004

Chapitre II

2. Chapitre 2 : Le canon à électrons : Design et assemblage

Ce chapitre est consacré à l'instrument de mesure (canon à électrons) utilisant la technique de FFE. Il s'agit de voir en détail le principe de fonctionnement du canon à électrons. On présente ainsi les différents prototypes de canon à électrons utilisés pour des mesures par FFE.

La figure 2.1 présente les trois types de canon à électrons existants selon la technique utilisée :

- a) Le filament chauffé : La création de faisceau d'électrons résulte de l'échauffement d'un filament de tungstène, baryum ou autre type de cathode métallique à fort travail de sortie. Ceci permet de délivrer des courants allant jusqu'à 50 mA. Cependant, ce type d'extraction a des limitations lorsqu'on envisage une expérience embarquée :
 - La nécessité d'un vide secondaire rend son emploi difficile pour une expérience embarquée. En effet, ce type de dispositif ne fonctionne qu'à très basse pression (inférieure à 10^{-3} Pa);
 - Le volume et le poids sont importants pour des équipements de ce type;
 - La consommation en énergie est importante. En guise d'exemple, pour produire un faisceau de 1 mA à 20 keV, il faut une puissance de 20 W;
 - Le système est très sensible aux vibrations mécaniques : les diaphragmes et autres systèmes optiques nécessitent des réglages fins pour obtenir un faisceau de bonne qualité.
- b) Pseudospark : Dans le cas du pseudospark, les électrons du plasma sont accélérés par les mêmes électrodes ayant servi à la création du plasma afin de produire un faisceau mince et très intense mais de durée très brève d'environ 60 ns.
- c) Canon à émission secondaire : Dans le cas du canon à émission secondaire, les ions créés par décharge plasma sont accélérés vers la cathode et les impacts produisent d'autres

électrons qui seront accélérés dans le sens inverse pour former un mince faisceau d'électrons (Figure 2.1).

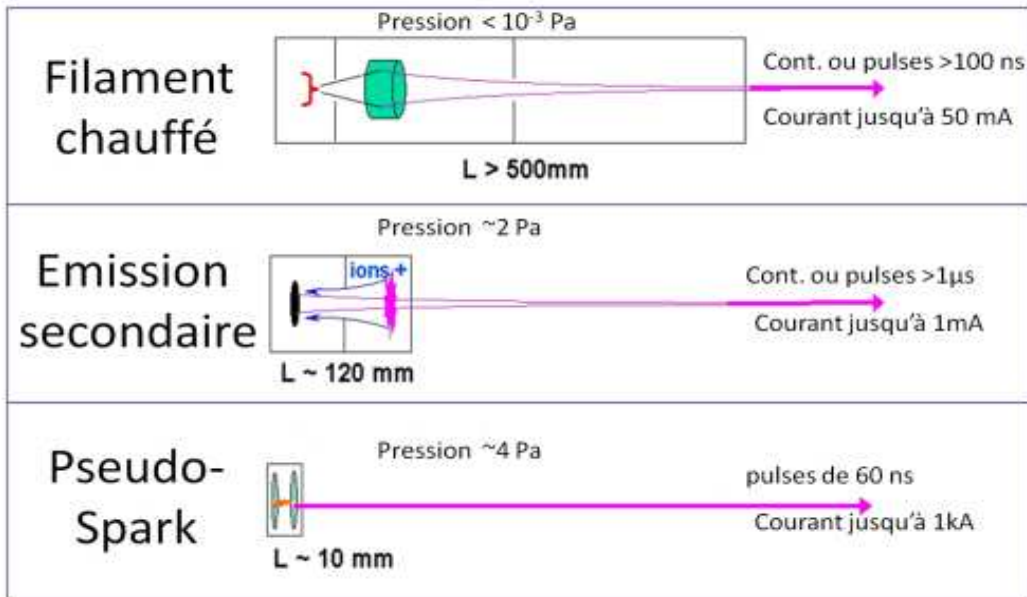


Figure 2.1

Principales méthodes de production de faisceau d'électrons : Filament chauffé, Emission secondaire et Pseudospark ([2.1])

L'émission secondaire offre les meilleures performances pour une adaptation à une expérience embarquée et nous avons choisi de développer cette technique dans les travaux de la présente thèse. Le pseudospark offre aussi des perspectives de faibles dimensions et satisfait aux besoins en vide secondaire. Cependant, il est très difficile de maîtriser la stabilité de la décharge car la faible distance entre les électrodes est plus favorable à des claquages de Paschen intempestifs. L'inconvénient majeur est que le rendement global en terme quantité d'électrons est insuffisant pour un signal exploitable par les détecteurs usuels à employer pour une expérience embarquée. Nous allons maintenant décrire plus en détail ce canon à émission secondaire ainsi que son intégration dans un instrument de mesure par *FFE*.

2.1 Le fonctionnement du canon à électrons à émission secondaire

La Figure 2.2 présente un schéma détaillé du canon à électrons à émission secondaire.

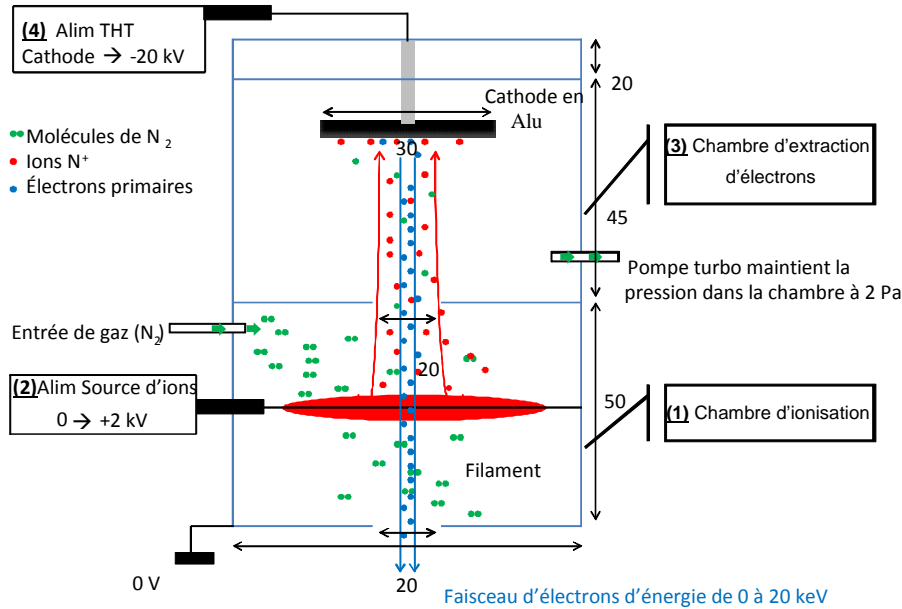


Figure 2.2

Canon à électrons : Principe de fonctionnement- Chambre d'ionisation et chambre d'extraction

Les ions sont produits dans le compartiment appelé chambre d'ionisation **(1)** du canon (Figure 2.2) maintenu à une pression entre 2 Pa et 8 Pa. Pour obtenir et maintenir un plasma à ces pressions, nous utilisons un filament porté à une tension entre 200V et 800V **(2)** par rapport à la paroi de la chambre d'ionisation (considérée comme cathode pour le plasma). Cette configuration produit un confinement électrostatique des ions du plasma. Le libre parcours moyen de ces derniers est plus grand que les dimensions de la chambre et par conséquent, une durée de vie plus importante. On maintient ainsi le plasma dans la chambre [2.2].

Les ions de ce plasma sont ensuite attirés vers la chambre d'extraction **(3)** où est installée la cathode du canon qui est portée à une tension de l'ordre de -20 kV **(4)**. Ces deux chambres sont séparées par un diaphragme de 8 mm de diamètre qui laisse passer les ions en un faisceau

peu dispersé qui bombarde la cathode et produit des électrons. Parmi les différents matériaux testés, l'aluminium a donné le meilleur rendement. Les électrons sont extraits d'une petite surface de la cathode, de 300 μm de diamètre, considérée comme le point source du faisceau d'électrons. Cette faible surface d'émission alliée à la géométrie du champ électrique entre la cathode et la sortie du canon produit un faisceau de faible divergence et de 3 mm de diamètre en sortie du canon. Dans certains cas, un système de focalisation magnétique (aimant) peut être utilisé pour améliorer la collimation du faisceau. Un aimant dit de «découpage» permet de dévier ou de balayer le faisceau d'électrons. C'est le cas du fonctionnement en régime «pulsé» dont les fréquences peuvent aller jusqu'au kilohertz.

Le courant d'électrons est contrôlé par le courant d'ions dans la chambre d'ionisation. Si on maîtrise bien la pression dans cette chambre, on obtient un courant très stable sur des heures de fonctionnement.

Le faisceau d'électrons produit est essentiellement mono-énergétique à la valeur imposée par la tension de la cathode. Les électrons de plus basse énergie sont filtrés par dispersion à l'intérieur du canon ou par blocage à travers les diaphragmes séparant les compartiments et à la sortie du canon.

2.2 Le courant d'ions et le courant d'électrons : plage de pression de fonctionnement

Le courant de faisceau dépend fortement du courant d'ions et du rendement d'extraction des électrons à la surface de la cathode.

Ce courant d'ions est lui-même fortement dépendant de la densité de gaz présent dans la chambre d'ionisation mais aussi de la tension «source» appliquée :

- Si la densité de gaz dans la chambre est faible, le courant d'ions le sera aussi et le courant de faisceau sera faible.
- Si la densité de gaz dans la chambre d'ionisation est trop importante, on a un claquage du courant «source». On met en général une résistance «ballast» pour évacuer le surplus de courant. Mais lorsque celui-ci est très important, on provoque une chute de

la haute tension *HT* car les électrons préféreront se déplacer entre la cathode et la référence tension source (moins importante).

En résumé, il existe une plage de pression de fonctionnement du canon à électrons qui est déterminée par la pression dans la chambre d'ionisation. Cette pression dépend du taux de pompage et du niveau de pression du milieu dans lequel va se propager le faisceau d'électrons. La pompe est connectée, dans notre cas, à la chambre *HT* et le pompage de la chambre d'ionisation s'effectue à travers le diaphragme séparant ces deux chambres (Figure 2.2). Dans certain cas, lorsque la pression extérieure est trop élevée, un pompage supplémentaire est nécessaire. La plage de fonctionnement de cette chambre varie entre 2 Pa et 8 Pa.

2.3 Le faisceau d'électrons : Dispersion, atténuation et création d'électrons secondaires

La dispersion, l'atténuation ou encore la création d'électrons secondaires sont des phénomènes qui jouent un rôle important :

a) Sous l'effet des collisions avec les molécules du gaz, les électrons du faisceau sont déviés. Il s'en suit une modification de la distribution spatiale des électrons du faisceau : c'est la dispersion. La dispersion du faisceau d'électrons est caractérisée par la largeur à mi-hauteur du profil de distribution axiale du faisceau. L'instrument sera plus performant si on parvient à limiter cette dispersion.

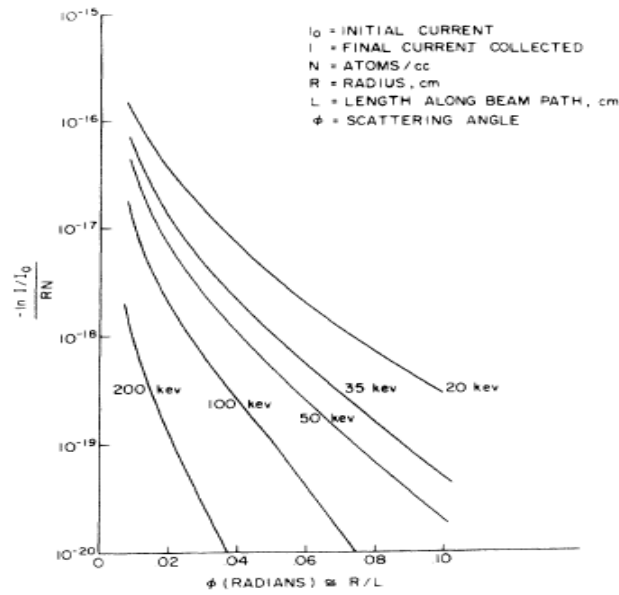


Figure 2.3

Dispersion du faisceau d'électrons en fonction du rapport rayon/longueur de propagation à différentes énergies de faisceau d'électrons (Muntz [1.12])

La Figure 2.3 présente la dispersion angulaire par une fonction représentative de l'intensité du courant I en fonction de l'angle de collection. Muntz [0.2] utilise le paramètre R/L , où R est le rayon de sortie du faisceau d'électrons et L la distance entre la sortie du faisceau d'électrons et le détecteur. Pour un même diamètre de sortie $2R$ et une même distance entre la sortie de faisceau et le détecteur, un faisceau d'énergie 50 keV est plus avantageux qu'un faisceau de 20 keV. La dispersion angulaire pour un faisceau d'énergie 20 keV reste raisonnable sur une distance de propagation entre 10 cm et 30 cm pour des densités inférieures à 10^{16} molécules.cm⁻³. Pour un instrument de laboratoire, un faisceau peu énergétique est préférable en raison de normes de sécurité imposées par la production de rayonnement X.

b) L'atténuation du faisceau d'électrons le long de sa propagation est une conséquence des collisions. Les collisions très déviantes font sortir certains électrons très loin du centre du faisceau si bien qu'on ne peut plus les comptabiliser comme appartenant au faisceau. D'autres vont perdre petit à petit leur énergie jusqu'à la capture par un ion. La Figure 2.4 donne la

pression mesurée en fonction de l'intensité du faisceau pour différentes énergies de faisceau d'électrons. La dispersion fait qu'on ne mesure qu'une partie du faisceau.

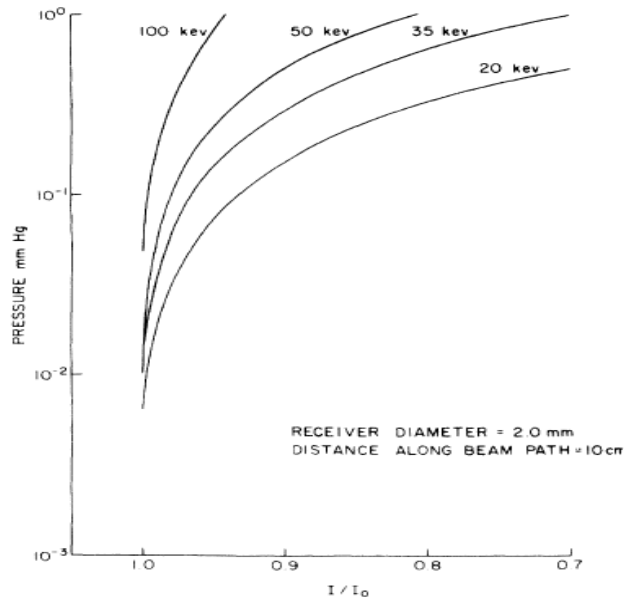


Figure 2.4

Mesure du rapport I/I_0 en fonction de la pression de gaz (en mm d'Hg) pour différentes énergies de faisceau d'électrons et avec un détecteur de 2mm (Muntz [1.12])

c) La distribution spatiale des électrons secondaires dépend fortement de celle des électrons primaires qui leur ont donné naissance mais aussi de la densité de gaz et des forces électriques de rappel dues aux ions (Eq. 2-1 à Eq. 2-3). Harbour [2.5] donne une expression de cette densité à l'intérieur du faisceau :

$$r < r_f; n_s \left(\frac{r}{r_f} \right) = const; r_f = \frac{\phi}{2} \quad \text{Eq. 2-1}$$

et en dehors du faisceau :

$$r > r_f; n_s \left(\frac{r}{r_f} \right) = n_s \left(\frac{r}{r_f} = 1 \right) \cdot \frac{e^{-\beta \cdot \frac{r}{r_f}}}{e^{-\beta}} \quad \text{Eq. 2-2}$$

où r_f est le rayon de sortie du faisceau, et $\beta = 0,15$.

A. K. Mohamed [0.6] donne une expression de la densité des électrons secondaires à l'extérieur du faisceau en fonction de celle des électrons primaires pour le cas de l'azote (N_2) :

$$n_g < n_{g0}; n_s = n_p \cdot 4,84 \cdot A_{1P} \cdot \frac{n_g \cdot r_f}{\sqrt{\varepsilon_0}} \quad \text{Eq. 2-3}$$

$$n_g > n_{g0}; n_s = n_p \cdot 4,64 \cdot 10^{-14} \cdot A_{1P} \cdot \frac{n_g^2 \cdot r_f^2}{\sqrt{\varepsilon_0}} \cdot \sqrt{T_i}$$

où $\varepsilon_0 \approx 2 \text{ eV}$ est l'énergie moyenne des électrons secondaires, T_i la température des ions que l'on suppose égale à la température du gaz.

Le coefficient A_{1P} est proportionnel à la section efficace d'excitation des bandes IN de N_2 et à la section efficace d'ionisation avec $n_{g0} = 2,6 \cdot 10^{14} \text{ molécules} \cdot \text{cm}^{-3}$.

2.4 L'assemblage du prototype de canon à électrons

Le canon à électrons développé à l'ONERA a beaucoup évolué depuis les premiers essais dans la soufflerie *R5ch* à Meudon [0.6].

Ce nouveau développement de prototype fait suite à différents tests menés dans la soufflerie *F4* de l'ONERA [2.4], [2.6]) puis en collaboration avec le *DLR* dans soufflerie *LBK* à Cologne.

En effet, depuis 2007, dans le cadre du projet *EXPERT* de l'ESA, un cahier des charges a été défini autour du développement d'un nouveau prototype de canon à électrons embarquable à bord d'un démonstrateur de rentrée atmosphérique tel que le véhicule *EXPERT* de l'ESA

(Figure 2.5). Le rôle de l'instrument est d'étudier les phénomènes aérodynamiques, en particulier les effets des gaz réels par la détermination des densités et des températures de vibration et de rotation.

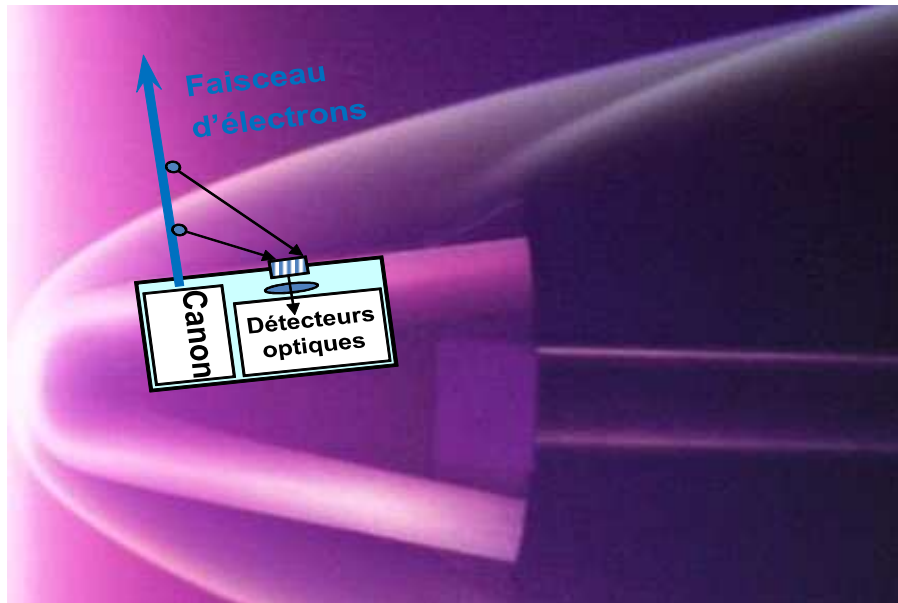


Figure 2.5

Maquette de véhicule EXPERT-ESA et canon à électrons embarqué pour une mesure avant et après l'onde de choc créée par le véhicule

Le système optique (spectromètre et caméra) permet d'effectuer des mesures sur le faisceau en amont et en aval de l'onde de choc.

Le canon à électrons a été modifié pour une adaptation en soufflerie et une meilleure compatibilité électromagnétique (perturbation par les conditions d'établissement d'une rafale par exemple ou les vibrations).

La première configuration de l'instrument *FFE* adoptée pour le véhicule *EXPERT*, identifiée comme la payload (charge) 09 (PL09), parmi 16 payloads à bord du véhicule, est présentée dans la Figure 2.6 (a). Les composants au nombre de onze (Figure 2.6 (b)), sont dispersés dans un segment du véhicule ce qui rend l'intégration et le pilotage assez difficile à gérer.

Cette configuration a été abandonnée au profit d'un instrument plus compact (prototype EGUN v.1) présenté sur la Figure 2.7

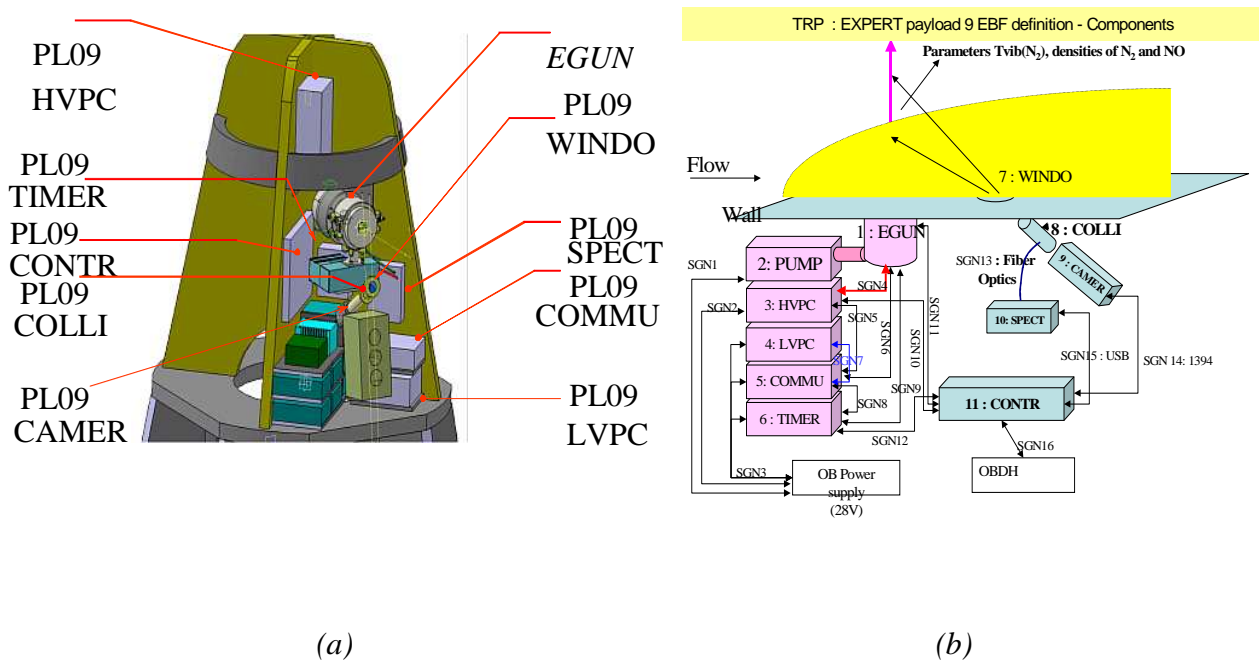


Figure 2.6

Modèle de véhicule EXPERT3 et du canon à électrons embarqué : (a) Instrument de mesure et ses différents composants et (b) interfaçage électrique des différents composants

2.4.1 Le prototype EGUN v.1 d'instrument FFE compact

Le nouveau prototype d'instrument FFE (EGUN v.1) est basé sur un corps de canon d'extérieur rectangulaire pour un couplage mécanique plus aisé avec une géométrie cylindrique intérieure présentée sur les Figure 2.7 et Figure 2.8.

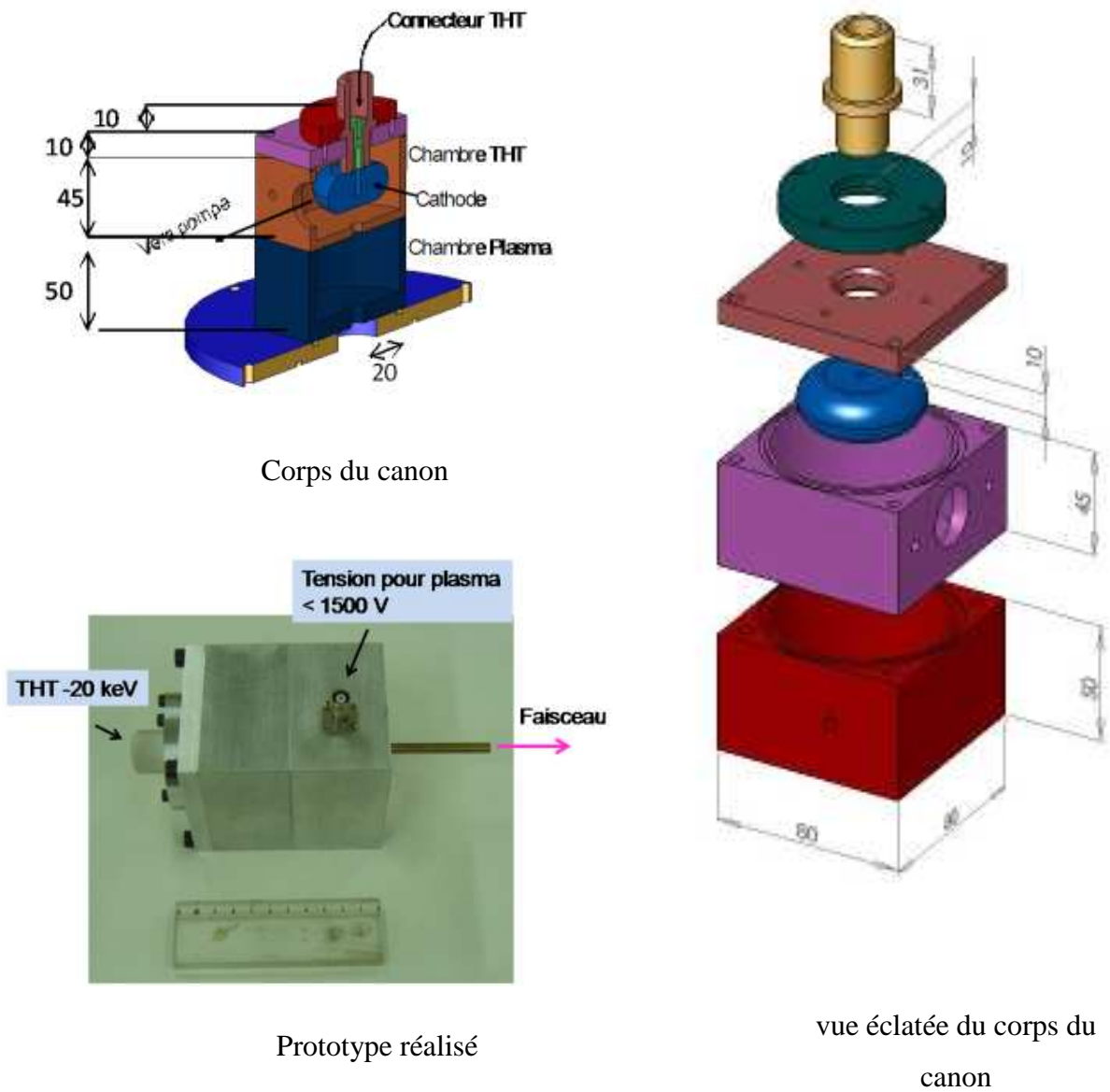


Figure 2.7

Nouveau prototype EGUN v.1 du canon à électrons

On ajoute autour de ce canon :

- Des alimentations hautes tensions délivrant jusqu'à 2 kV pour la chambre d'ionisation et jusqu'à 25 kV pour la cathode. Il s'agit de convertisseur courant continu Ultravolt® haute-tension délivrant des tensions entre 0 et -25 kV pour une tension d'entrée de 24 V

- Une alimentation basse tension (24 V) pour les différents composants
- Un spectromètre miniature HR4000 d’Ocean Optics et son système optique pour l’analyse spectroscopique
- Une caméra Basler Scout pour la visualisation de la fluorescence émise et de l’onde de choc créée
- Une plaque de protection (TPS) pour protéger l’ensemble des composants des radiations et de l’échauffement

Les Figure 2.8 (a) et (b) présentent le système dans son ensemble.

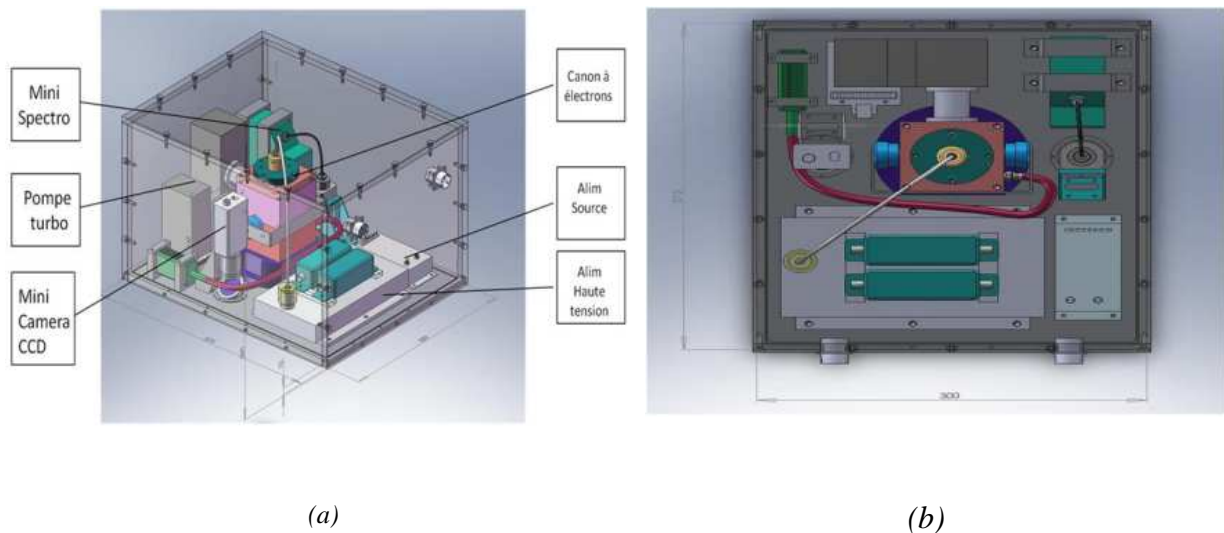


Figure 2.8

Assemblage du prototype EGUN v.1 du canon à électrons (a) vue de profil des différents composants et (b) vue de dessus

Les dimensions (375 mm X 300 mm X 250 mm) de ce prototype et son poids (10,5 kg) ont été sensiblement réduits. Sur les figures de Figure 7.1 à Figure 7.4 en Annexes A/ Assemblage du canon à électrons, on représente les coupes et vue en détails des différents composants réalisés sous Solidworks®.

Le fonctionnement de ce prototype a été testé sous vide. La Figure 2.9 montre l'ensemble du montage dans une chambre à vide compatible avec les mesures v.u.v (hublot et lentilles u.v) (Figure 2.9 (a)) et le montage avec une enceinte à vide pour les tests de stabilité du faisceau d'électrons et l'étude de la dispersion de celui-ci (Figure 2.9 (b)).



(a)



(b)

Figure 2.9

Prototype EGUN v.1 testé: (a) avec une enceinte à vide compatible u.v et (b) avec une enceinte à vide transparente pour les tests de stabilité et mesure de dispersion

Lors des tests en statique, le canon et ses différents composants ne sont pas placés sous vide. Il s'agit dans un premier temps de vérifier uniquement l'émission et la stabilité du faisceau d'électrons. La stabilité du faisceau est peu perturbée par les variations de pression dans l'enceinte car le pompage différentiel assure une pression autour de la plage de fonctionnement.

Pour valider ensuite ce prototype de canon à électrons et des différents composants nous avons effectué des tests en soufflerie continue (Figure 2.10) (MARHy- Orléans, Février 2010) où cette fois-ci l'instrument lui-même est placé sous vide. Il subit alors les perturbations du milieu. Avec un système de pompage et une installation de fuite réglable on arrive à stabiliser le faisceau d'électrons. Les résultats de ces tests sont présentés dans le Chapitre 5 et la

procédure de mesures en *Annexes B2/ Installation et procédure d'allumage canon à électrons dans MARHy* (Figure 7.5).

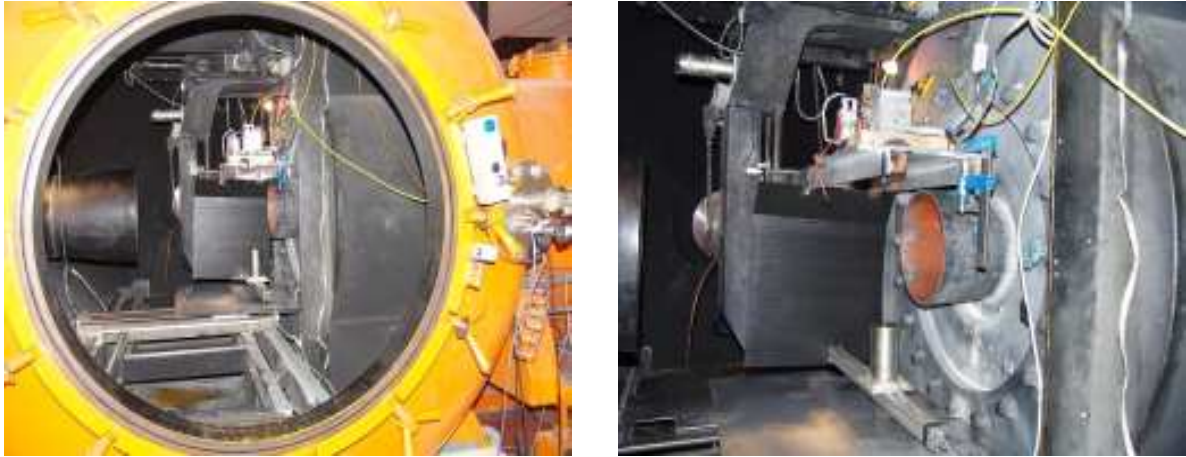


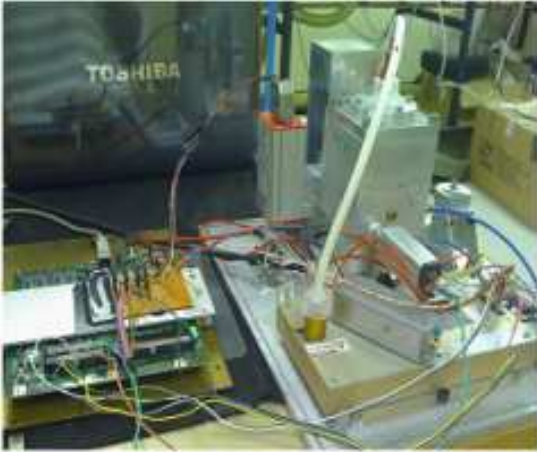
Figure 2.10

Installation et fixation du canon à électrons dans la soufflerie MARHy

2.4.2 Le pilotage à distance du nouveau prototype *EGUN v.2*

A la suite des tests dans *MARHy*, nous avons procédé à l'automatisation du prototype. L'automatisation de l'ensemble du système a l'avantage de permettre de contrôler à distance le fonctionnement du faisceau et de l'adapter aux variations des paramètres physiques de l'expérience. Une procédure automatique de commande/contrôle/acquisition permet ainsi d'effectuer un dépouillement en temps réel de spectres. Une carte d'acquisition/pilotage de National Instruments® a été utilisée pour effectuer la procédure de mise en route et d'acquisition de données (entrées / sorties) via un bus USB. Le diagramme représentant les différentes connexions et procédures de traitement de données est donné en annexes (Figure 7.7 et Figure 7.8).

Le pilotage automatique est nécessaire dans une soufflerie à rafales où la durée de mesure est de quelques centaines de millisecondes. Ce prototype a ainsi été testé dans la soufflerie *F4*.



(a)



(b)

Figure 2.11

Prototype du canon à électrons automatisé dans la soufflerie F4 : (a) connexion de la carte d'acquisition NI avec l'instrument et (b) installation du nouveau prototype dans la chambre de test de la soufflerie F4

Le fonctionnement de la carte d'acquisition (Figure 2.11 (a)) a été testé pour des durées de fonctionnement allant jusqu'à 45 minutes sans grande hausse de température (Figure 2.12). Un système d'évacuation de la chaleur permet de maintenir la carte à des températures autour de 31 °C.

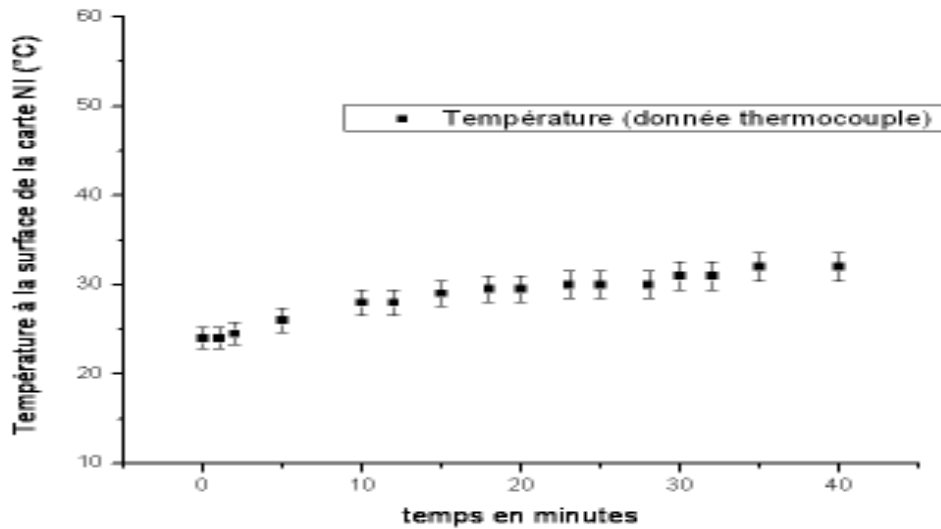


Figure 2.12

Evolution de la température de la surface de la carte électronique au cours des mesures (données thermocouple) -/+5 %

Conclusions :

Le fonctionnement du prototype a été validé en enceinte à vide pour l'étude de la stabilité du faisceau d'électrons et en soufflerie continue pour le fonctionnement des différents composants sous vide. Il permet de délivrer un faisceau d'électrons entre 1 keV et 30 keV pour des courants entre 1 et 2 mA. Le pompage secondaire et l'installation d'une fuite réglable permettent de stabiliser le faisceau d'électrons dans des gaz de pressions entre 10^{-3} et 1 mbar.

Il ressort également des tests effectués à la soufflerie F4 que l'ensemble des composants (carte électronique, transmission des données USB) fonctionnent sous vide.

Cependant, une meilleure isolation des différents composants permet de limiter les arcs électriques. En effet l'augmentation de la valeur de la résistance «ballast» permet une meilleure stabilisation du courant d'ions.

La carte électronique fonctionne sous vide avec une hausse de température de moins de 10 degrés pour un fonctionnement jusqu'à 40 minutes (Figure 2.12).

Le temps de réponse de la pompe turbo persiste; il faudrait utiliser une fuite mécanique, tout proche de la chambre d'ionisation, permettant d'introduire une petite quantité de gaz dans cette chambre d'ionisation afin de maintenir sa pression dans la plage de fonctionnement (entre 2 Pa et 8 Pa). Ce dispositif mécanique peut être contrôlé via un asservissement du système de commande automatisé.

2.5 Bibliographie - Chapitre 2

- [2.1] Yin, H.A.W., Cross, W.H , Ronald, K and Phelps, A.D.R. , “Investigation on pseudospark-based Electron and Ion Beam Generation and Applications”, *33rd EPS Conference on Plasma Phys. Rome, 19 - 23 June 2006 ECA Vol.30I, P-4.008, 2006*
- [2.2] Gueroult, R., Elias. P.Q., Bonnet, J., Rax, J.M., “Particle in cell modelling of the observed modes of a dc wire discharge”, *J. Phys. D : Appl. Phys. 2010, 43*
- [2.3] Larigaldie, S., Bize, D., Mohamed, A.K., Ory, M., Soutade, J., Taran, J.P., “Velocity measurement in hypersonic flows using electron beam-assisted glow discharge”, *AIAA J., 36, pp1061-1064, 1998.*
- [2.4] Sagnier, P., Devezeaux, D., Vérant, J.L., Masson, A., Mohamed, A.K., “Mesure de flux de chaleur dans la soufflerie à haute enthalpie F4 de L'ONERA”, *SFT 97, Congrès Français de Thermique, Toulouse, 20, 21 et 22 mai 1997*
- [2.5] Harbour & al, *J. Nucl. Mater. 176 & 177 (1990)*
- [2.6] Bonnet J., Pot, T. , “A new electron gun for hypersonic flow”, *3rd International symposium on atmospheric reentry vehicles and systems, Arcachon (France), March 24-27, 2003*

Chapitre III

3. Chapitre 3 : Etude de la dispersion du faisceau d'électrons

Ce chapitre est consacré à l'étude de la dispersion du faisceau d'électrons. Nous présentons notre nouveau modèle de dispersion prenant en compte les collisions élastiques et inélastique ainsi qu'une nouvelle méthode de détermination de profil point-a-point de densité le long du faisceau d'électrons.

3.1 Théorie des collisions : Sections efficaces de collisions

Pendant la collision entre deux particules, il peut y avoir transformation (ou création) d'espèces, changement d'état interne, modification de vitesse. La collision est inélastique s'il y a une modification d'état interne et de vitesse, et élastique s'il y a uniquement changement des vitesses des particules.

Dans notre cas, on distingue le groupe des atomes, molécules et ions du milieu gazeux et le groupe des particules (électrons). Nous nous intéresserons ici uniquement aux collisions entre des électrons et les autres particules (atomes, molécules, ions) pour étudier la dispersion du faisceau. On suppose qu'il y a peu d'interactions entre les électrons primaires du faisceau. La fréquence des collisions entre les électrons et les molécules dépend de la densité et de la température du gaz. Les collisions entre les espèces du milieu influencent l'intensité de la fluorescence (phénomènes de quenching, chimiluminescence etc.).

La détermination de la densité globale ou locale du milieu gazeux traversé par le faisceau d'électrons est basée sur la mesure de l'intensité de fluorescence induite par ce faisceau. A basse densité, cette intensité est directement proportionnelle à la densité partielle des espèces du milieu gazeux. Cependant, la mesure de cette intensité peut être perturbée par la dispersion du faisceau le long de sa propagation. Cette perturbation affecte la validité des mesures lors de la détermination du profil point-à-point de densité sur l'axe de propagation du faisceau. Cette dispersion peut également affecter la résolution spatiale de la mesure. Ainsi, l'une des étapes les plus importantes de la mesure par *FFE* consiste à modéliser la dispersion du faisceau d'électrons.

On s'appuiera sur des modèles empiriques pour décrire les phénomènes de collisions entre les électrons du faisceau et les molécules du gaz traversé.

Nous utilisons une description statistique pour modéliser les collisions et dégager les lois sur l'atténuation et la dispersion. A toute collision, on affecte une probabilité P . Cette probabilité varie avec la température. Dans le cas des collisions élastiques, P est proche de l'unité à faible température (de l'ordre de 300 K) et croît avec la température. Pour simplifier cette modélisation, nous parlerons du cas de la collision entre un électron (particule élémentaire) et une molécule (dipolaire). On suppose également que le gaz est homogène. La collision entre cet électron du faisceau et une molécule du gaz est représentée sur la Figure 3.1 :

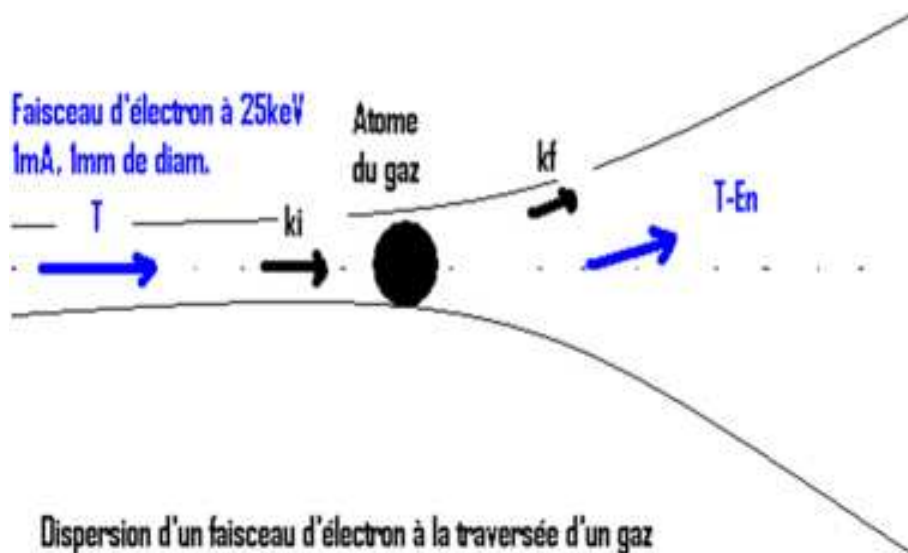


Figure 3.1

Dispersion du faisceau à la traversée d'un gaz

Ici la molécule est considérée comme une seule particule pour simplifier l'étude. Pour un électron ayant une énergie cinétique $T = \frac{mv^2}{2}$ où m est la masse de l'électron et v sa vitesse (Figure 3.1), qui entre en collision avec une particule du gaz, il lui transfère une énergie ΔE :

$$\Delta E = \frac{1}{2} m_e \cdot \vec{v}_i^2 - \frac{1}{2} m_e \cdot \vec{v}_f^2 = \frac{h^2}{2m_e} \cdot (2k_i \cdot K - K^2) \quad \text{Eq. 3-1}$$

où $K = k_i - k_f$, \vec{v}_i , \vec{v}_f , hk_i et hk_f sont respectivement les vitesses et quantités de mouvement de la particule avant et après collision avec l'électron, h , la constante de Planck.

Nous allons maintenant décrire les différents types de collisions.

3.1.1 Les collisions élastiques et inélastiques

3.1.1.1 Les collisions élastiques

Considérons le système isolé constitué d'un électron «e» et d'une molécule «a», les lois de conservation de masse, de quantité de mouvement et d'énergie donnent :

$$m_e + m_a = m'_e + m'_a \quad \text{Eq. 3-2}$$

$$m_e v_e + m_a v_a = m_e v'_e + m_a v'_a \quad \text{Eq. 3-3}$$

$$\text{et} \quad \frac{1}{2} m_e v_e^2 + \frac{1}{2} m_a v_a^2 = \frac{1}{2} m_e v_e'^2 + \frac{1}{2} m_a v_a'^2 \quad \text{Eq. 3-4}$$

On peut noter que $G = \frac{m_e v_e + m_a v_a}{m_e + m_a}$ représente la vitesse du centre de masse des deux particules; il est invariant suivant l'Eq. 3-4. On peut ainsi obtenir une description complète de la collision et des trajectoires des particules après la collision.

3.1.1.2 Les collisions inélastiques

Dans ce type de collision, les échanges entre particules concernent non seulement de l'énergie de translation mais également de l'énergie interne (rotationnelle, vibrationnelle, électronique et ionisation).

L'équation de conservation d'énergie Eq. 3-4 devient alors :

$$\frac{1}{2}m_e v_e^2 + \epsilon_{ie} + \frac{1}{2}m_a v_a^2 + \epsilon_{ja} = \frac{1}{2}m_e v_e'^2 + \epsilon_{ke} + \frac{1}{2}m_a v_a'^2 + \epsilon_{la} \quad \text{Eq. 3-5}$$

Pour l'atome, le changement de vitesse dv est de $v_a \rightarrow v_a'$ et le changement d'énergie interne est égal à $\epsilon_{la} - \epsilon_{ja}$, j ou l représentent l'ensemble des nombres quantiques (Λ, v, k) correspondant aux états électroniques, de vibration et de rotation d'une molécule.

Il n'y pas de structure à énergie interne pour l'électron et donc pas de notion de transition ($i \rightarrow k$); par conséquent, ϵ_{ie} et ϵ_{ke} sont nuls. Pour l'électron, il y a uniquement modification de l'énergie de translation, c'est-à-dire une variation de la vitesse. L'Eq. 3-5 devient alors :

$$\frac{1}{2}m_e v_e^2 + \frac{1}{2}m_a v_a^2 + \epsilon_{ja} = \frac{1}{2}m_e v_e'^2 + \frac{1}{2}m_a v_a'^2 + \epsilon_{la} \quad \text{Eq. 3-6}$$

3.1.2 Les sections efficaces différentielles élastiques et inélastiques

La section efficace différentielle, souvent notée $\frac{d\sigma}{d\Omega}$ représente la probabilité qu'un électron réagisse avec une molécule dans une surface $d\sigma$ (surface effective d'interaction) et soit envoyé dans l'angle solide Ω (vers une direction donnée) à $d\Omega$ près, avec $d\Omega = \sin(\theta) \cdot d\theta \cdot d\alpha$. Elle dépend du type d'interaction. La dispersion du faisceau d'électron est le résultat de l'ensemble des collisions entre électrons du faisceau et les molécules du gaz. On distingue deux types de sections efficaces : la section efficace élastique et la section efficace inélastique conformément aux types de collisions non-réactives possibles.

3.1.2.1 La section efficace de Rutherford

La distribution angulaire des particules diffusées peut apporter des informations sur l'interaction qui a eu lieu entre le faisceau et la molécule cible (par exemple la forme du potentiel d'interaction).

Dans une collision, deux paramètres définissent les directions des vitesses après collision : l'angle de déviation (θ) et l'angle azimutal (α).

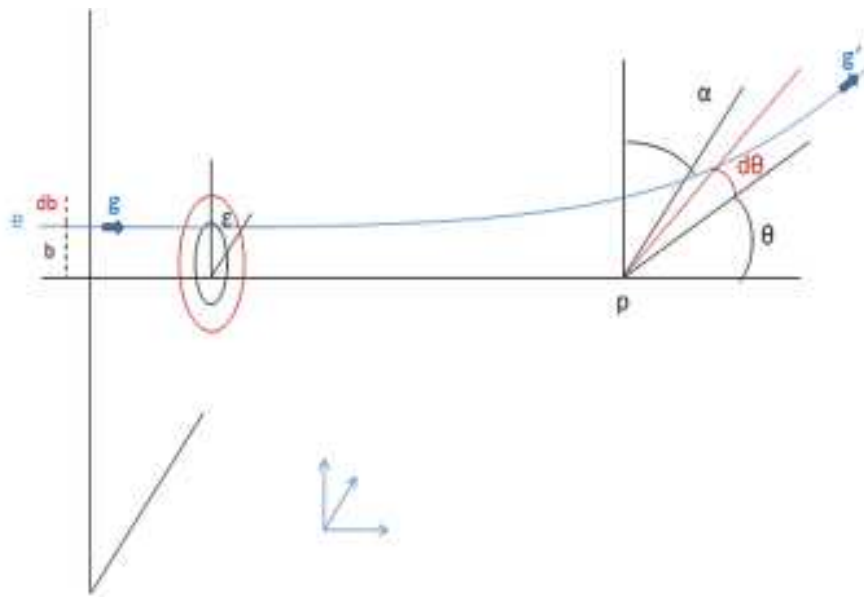


Figure 3.2

Section efficace de Rutherford

Le flux de particule traversant l'aire élémentaire $bdbdb\epsilon$, de rayon $d\epsilon$, se retrouve dans l'angle solide élémentaire $d\Omega$.

Sans interaction (ou à grande distance avant la cible), la distance b (Figure 3.2) est le paramètre d'impact du projectile. Du fait de la symétrie cylindrique, toutes les particules qui ont des paramètres d'impact compris entre b et $b+db$ seront diffusées entre θ et $\theta+d\theta$. Elles sont de ce fait associées à une surface $2\pi b db$ perpendiculaire au faisceau.

La section efficace différentielle de collision entre un électron d'énergie cinétique E_C et d'un atome de numéro atomique Z , est donnée par l'expression classique de Rutherford [3.1], avec la dépendance en $\sin^{-4}\left(\frac{\theta}{2}\right)$:

$$\frac{d\sigma^{Ruth}}{d\Omega}(\theta) = \frac{Z^2.e^4}{4.E_C.\sin^4\left(\frac{\theta}{2}\right)} \quad Eq. 3-7$$

On retrouve cette section efficace de Rutherford dans l'expression des sections efficaces de collisions aussi bien élastiques qu'inélastiques.

3.1.2.2 La section efficace différentielle totale

Différents auteurs comme Mott et Massey [3.1] et Ce&Ma. [3.2] proposent une expression de la section efficace différentielle totale de collision. Cette expression est la somme des contributions élastiques donnée par Liu [3.3] et inélastiques donnée par Inokuti [3.4] :

$$\frac{d\sigma^{tot}}{d\Omega}(\theta) = \frac{d\sigma^{el}}{d\Omega}(\theta) + \frac{d\sigma^{inel}}{d\Omega}(\theta) \quad Eq. 3-8$$

Liu [3.5], Bonham [3.7] et Center [3.8] utilisent une expression valable pour des faisceaux d'électrons non-relativistes d'énergies comprises entre 20 keV et 100 keV et pour des gaz tels que le diazote (N_2) ou l'argon (Ar) :

$$\frac{d\sigma^{tot}}{d\Omega}(\theta) = \frac{d\sigma^{Ruth}}{d\Omega}(\theta) \cdot \left\{ [1 - F(\theta)]^2 + \frac{G(\theta)}{Z} \right\} \quad Eq. 3-9$$

où $\sigma^{Ruth}(\theta)$ est la section efficace de Rutherford, $F(\theta)$ représente le facteur de forme atomique avec $[1 - F(\theta)]^2$ correspondant à la contribution élastique et $\frac{G(\theta)}{Z}$ la contribution inélastique. Les contributions élastiques et inélastiques sont :

avec

$$1 - F(\theta) = \left(\frac{2\lambda_0}{\lambda} \cdot \sum_{i=1}^3 \frac{a_i}{\Lambda_i^2 + \left[\left(\frac{2\lambda_0}{\lambda} \right) \cdot \sin\left(\frac{\theta}{2}\right) \right]^2} \right) \quad \text{Eq. 3-10}$$

avec $\lambda_0 = \frac{h}{m \cdot c}$ la longueur de Compton, $\lambda = \frac{h}{p}$ la longueur d'onde.

h , m et c et p , représentent respectivement la constante de Planck, la masse de l'électron, la vitesse de la lumière dans le vide et la quantité de mouvement.

On a aussi $\Lambda_i = \frac{z^{1/3}}{121} \cdot b_i$, où les constantes a_i et b_i et a_s sont données par Farley [3.13] :

$$G(\theta) = 1 - \left[1 + \left(\frac{2\pi\theta}{\lambda} \right)^2 a_s^2 \right]^{-2} \quad \text{Eq. 3-11}$$

3.1.2.3 Modélisation de la section efficace différentielle : Exemple d'un écoulement N_2

Les Eq. 3-10 et Eq. 3-11, donnent la variation des sections efficaces de collision élastique et inélastique, dans une collision entre un électron du faisceau et une molécule de diazote (N_2). Généralement, le phénomène des collisions est beaucoup plus complexe, car il met en jeu un faisceau constitué de plusieurs électrons et d'un gaz de plusieurs molécules. Ainsi, aux différentes collisions s'ajoutent des termes de couplage ou de collision en cascade. Mais nous avons choisi de simplifier le système à une collision entre un électron et une molécule neutre, du fait des densités faibles de particules dans le faisceau et le gaz.

Dans les figures suivantes, on représente les variations de ces sections efficaces différentielles de collision en fonction de l'angle de dispersion θ . Il s'agit d'une modélisation pour un faisceau d'électrons d'énergie 20 keV

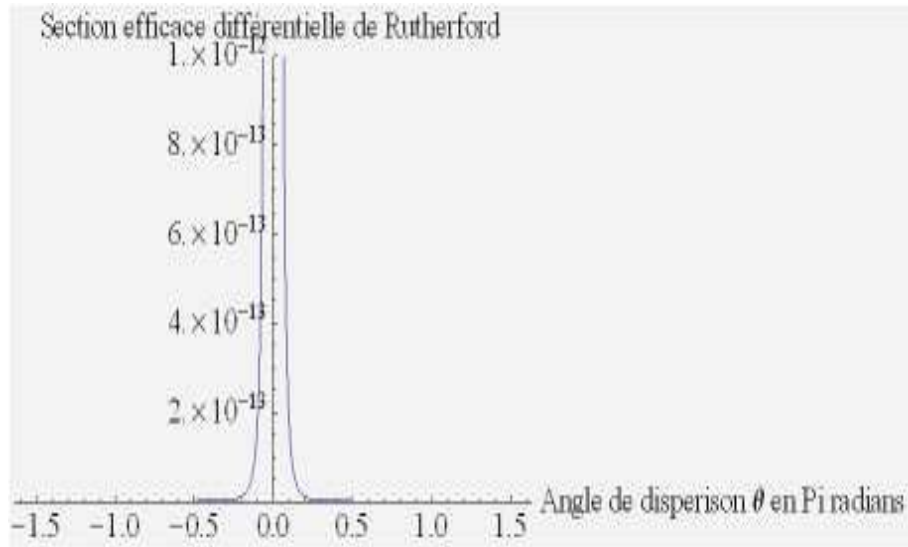


Figure 3.3

Section efficace différentielle de Rutherford en fonction de l'angle de dispersion

La section efficace de Rutherford représentée ici varie inversement par rapport au terme $4.E_C.\sin^4(\frac{\theta}{2})$. Cette section efficace est symétrique par rapport à l'angle de dispersion nul. Elle est maximale aux angles de dispersion minimaux $\pm\theta$ qui correspondent aux angles minima fixés par le paramètre d'écran.

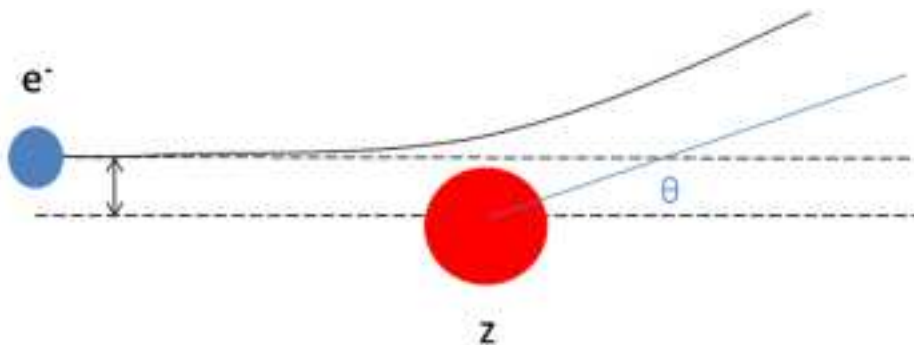


Figure 3.4

Collision entre un électron et un atome : angle de dispersion

On définit la dispersion au-delà du diamètre de la cible (considérée comme sphérique ici) (Figure 3.4) avec l'angle minimum de dispersion de Clapp [3.12] :

$$\theta_{min} = 2\pi \text{Arcsin} \left[\sqrt{\frac{b^2}{b^2 + \lambda_D^2}} \right] \quad \text{Eq. 3-12}$$

où b est le paramètre d'impact donné par :

$$b = \frac{Z \cdot e^2}{(p \cdot v)^2} \quad \text{Eq. 3-13}$$

λ_D , la longueur de Debye donnée par :

$$\lambda_D = 0,1 \cdot \sqrt{\frac{\epsilon_0 \cdot k \cdot T_e}{n_e \cdot e}} \quad \text{Eq. 3-14}$$

Z le numéro atomique de l'atome, e , n_e , T_e , p , v respectivement la charge élémentaire d'un électron, la densité électronique, la température des électrons, quantité de mouvement et la vitesse des électrons.

La Figure 3.5 représente la contribution élastique de la section efficace différentielle de collision, la contribution inélastique ainsi que la section efficace totale différentielle de collision en fonction de l'angle de dispersion θ sur une échelle logarithmique.

On remarque que la section efficace différentielle totale est essentiellement élastique pour les grands angles de dispersion, c'est-à-dire au-delà de 0,1 radians. Cette section efficace vaut 10^{17} cm^2 à 0,1 radians avant de chuter rapidement.

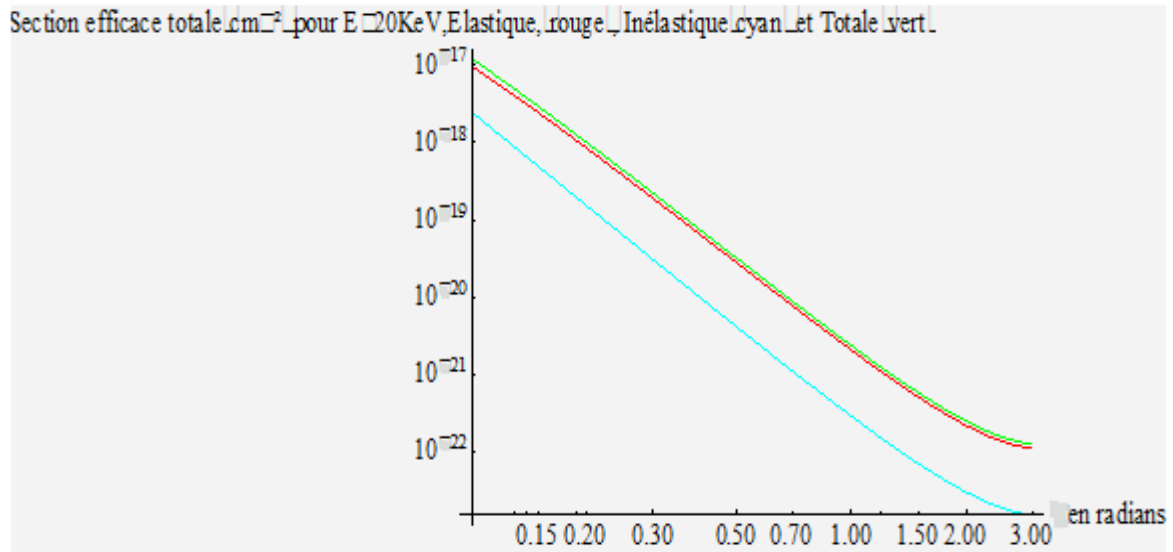


Figure 3.5

Sections efficaces de collisions avec N_2 : contributions élastiques (en rouge), inélastiques (en cyan) et totale (en vert)

Pour les faibles angles de dispersion, la section efficace différentielle totale est essentiellement inélastique. La Figure 3.6 montre que la section efficace totale est égale à 10^{12} cm^2 à 0,001 radians, de même que la section efficace inélastique, alors que la section efficace différentielle élastique est de l'ordre de 10^{-15} cm^2 . La zone de transition se trouve 0,03 radians. Nommons cet angle θ_{TR}

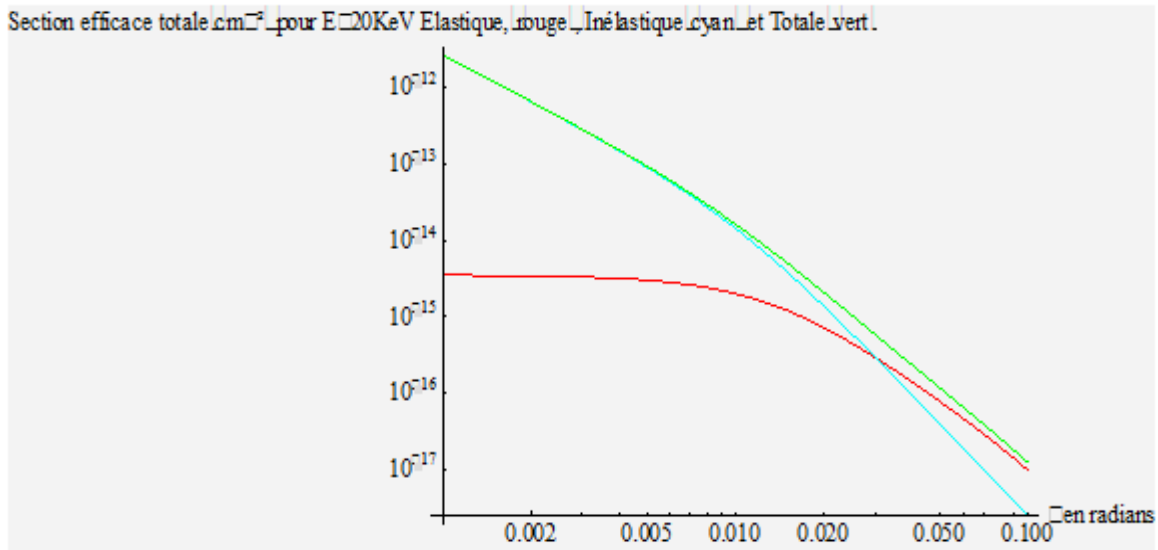


Figure 3.6

Sections efficace de collisions avec N_2 : Zoom sur la zone [0-0,1 radians] : contributions élastiques (en rouge), inélastiques (en cyan) et totale (en vert)

Au-delà de 0,03 radians, les influences des contributions élastiques et inélastiques s'inversent.

Un calcul correct de la section efficace totale de collision devra donc prendre en compte les deux contributions (élastique et inélastique).

3.1.3 La section efficace totale de collision

La section efficace totale de collision, notée σ^{tot} , s'obtient par une intégration sur l'ensemble des angles de dispersion. Elle s'écrit :

$$\sigma^{tot} = \int_{\theta_{min}}^{2\pi} 4\pi \cdot \sin(\theta) \cdot \frac{d\sigma}{d\theta}(\theta) d\theta \quad \text{Eq. 3-15}$$

où θ_{min} est l'angle minimum de dispersion donné par l'équation Eq. 3-12 qui dépend du paramètre d'impact, donc de la nature de l'atome, mais aussi de l'énergie du faisceau

d'électrons et de la longueur de Debye. Cette expression peut être généralisée dans le cas de molécule en prenant en compte Z comme le numéro atomique total (somme des numéros atomiques des différents atomes) de la molécule. Le Tableau 3-1 donne les valeurs des sections efficaces totales de collision pour différentes valeurs d'énergies de faisceau d'électrons et pour une molécule de diazote (N_2) :

<i>Energie du faisceau d'électrons en keV</i>	<i>Vitesse des électrons en m/s avant collision</i>	<i>Angle minimum de dispersion (radians)</i>	<i>Section efficace totale de collision avec N_2 en cm^2</i>	<i>Libre parcours moyen à 10 cm de propagation</i>
1	$1,88 \times 10^7$	1,62	$4,77 \times 10^{-16}$	0,21
5	$4,19 \times 10^7$	0,065	$3,26 \times 10^{-16}$	0,031
6	4,59	0,045	2,67	0,038
8	$5,30 \times 10^7$	0,025	$1,90 \times 10^{-16}$	0,052
10	$5,93 \times 10^7$	0,016	$1,43 \times 10^{-16}$	0,07
15	$7,26 \times 10^7$	0,0069	$7,69 \times 10^{-17}$	0,13
20	$8,39 \times 10^7$	0,0038	$4,49 \times 10^{-17}$	0,22
25	$9,38 \times 10^7$	0,0024	$2,81 \times 10^{-17}$	0,36
30	$1,02 \times 10^8$	0,0016	$1,85 \times 10^{-17}$	0,54

Tableau 3-1

Sections efficaces totales de collision calculées avec notre modèle (Eq.3.17) pour différentes valeurs d'énergies de faisceau d'électrons en collision avec un atome d'azote (N_2)

Entre 1 keV et 30 keV, la section efficace totale de collision est de l'ordre de $10^{-17} cm^2$. Cette section efficace de collision est proche des sections efficaces de collision mesurées expérimentalement par Ittikawa [3.10] dans la zone 200 nm et 700 nm pour les ions N_2^+ de N_2 .

On remarque que l'angle de dispersion minimum dépend du paramètre d'impact et de la longueur de Debye (Eq. 3-14). A titre d'exemple, dans le cas du diazote (N_2), cet angle

minimum de dispersion devient inférieur à $\theta_{TR} = 0,03$ radians pour des énergies d'électrons supérieures à 7 keV (Figure 3.7).

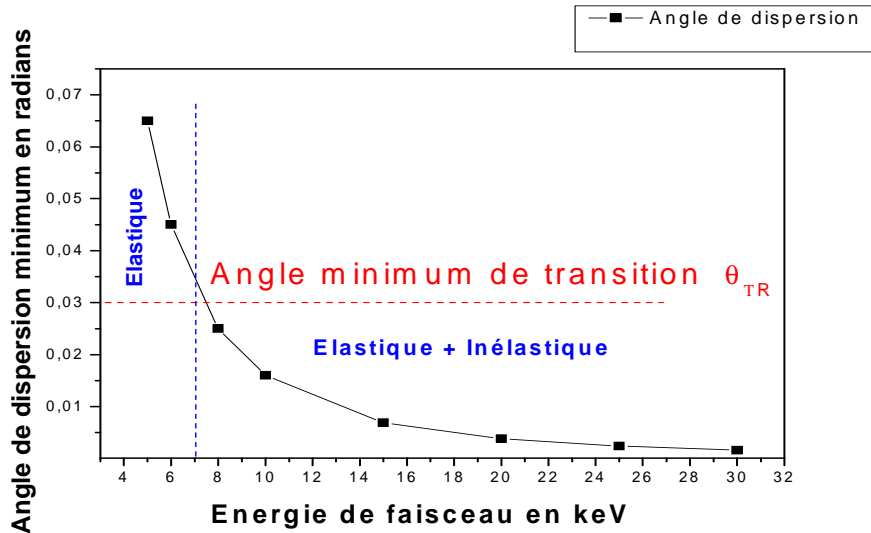


Figure 3.7

Angle de dispersion minimum θ_{min} en fonction de l'énergie du faisceau d'électrons et angle de transition $\theta_{TR} = 0,03$ Zones de prédominance des collisions élastiques et inélastiques dans le cas du diazote (N_2)

Les domaines de prédominance des contributions élastiques et inélastiques permettent de définir l'angle de transition θ_{TR} introduit sur la Figure 3.5. Cette transition se trouve à 7 keV (Figure 3.7).

Dans le cas de N_2 , pour des énergies de faisceau supérieures à 7 keV, il est important de prendre en compte les sections efficaces différentielles élastiques et inélastiques.

Les prototypes dont nous disposons à l'ONERA ont été conçu pour fonctionner à haute énergie (15 keV à 25 keV) pour minimiser la dispersion; ce qui a justifié le calcul présenté dans cette section.

3.1.4 Le nombre de collisions

Le nombre de collisions S , pour un électron, est :

$$S = n_g \cdot \sigma^{tot} \cdot z \quad \text{Eq. 3-16}$$

où n_g est la densité de gaz en molécules.cm⁻³, σ^{tot} la section efficace totale de collision en cm² donnée par l'équation Eq. 3-15 et z la distance de propagation du faisceau d'électrons.

Le Tableau 3-2 donne le nombre de collisions pour différentes valeurs d'énergie de faisceau, de densité de gaz sur 10 cm de propagation. La section efficace de collision est calculée pour le diazote (N₂).

Energie en keV	15	20	25	27	
Section efficace	1,2.10 ⁻¹⁶	6,13.10 ⁻¹⁷	3,63.10 ⁻¹⁷	3,02.10 ⁻¹⁷	
densité n_g en cm ⁻³					2,40.10 ⁺¹⁶ =1 mbar
Prop. sur 10 cm	27,60	14,71	8,71	7,25	
Prop. sur 20 cm	55,20	29,42	17,42	14,50	
Prop. sur 30 cm	82,80	44,14	26,14	21,74	
densité n_g en cm ⁻³					2,40.10 ⁺¹⁵ =0,1 mbar
Prop. sur 10 cm	2,76	1,47	0,87	0,72	
Prop. sur 20 cm	5,52	2,94	1,74	1,45	
Prop. sur 30 cm	8,28	4,41	2,61	2,17	
densité n_g en cm ⁻³					2,40.10 ⁺¹⁴ =0,01 mbar
Prop. sur 10 cm	0,28	0,15	0,09	0,07	
Prop. sur 20 cm	0,55	0,29	0,17	0,14	
Prop. sur 30 cm	0,83	0,44	0,26	0,22	
densité n_g en cm ⁻³					2,40.10 ⁺¹³ =0,001
Prop. sur 10 cm	0,03	0,01	0,01	0,01	10

Prop. sur 20 cm	0,06	0,03	0,02	0,01	20
Prop. sur 30 cm	0,08	0,04	0,03	0,02	30

Tableau 3-2

Nombre de collisions en fonction de l'énergie du faisceau d'électron (15, 20, 25 et 27 keV), de la densité de gaz (10^{-3} mbar, 10^{-2} mbar, 10^{-1} mbar et 1 mbar) et de la distance de propagation (10, 20 et 30 cm)

Dans ce tableau, la ligne surlignée en jaune, il y a 4,4 collisions à 20 keV sur 30 cm à une pression de 0,1 mbar. Si à chaque collision il y a 30 eV de perte, on ne perd que $4,4 \times 30 \text{ eV} = 132 \text{ eV}$, ce qui est négligeable pour l'électron qui conserve donc tout son pouvoir d'excitation.

Dans le cas d'un faisceau d'électrons de 15 keV, se propageant dans un gaz de pression 1 mbar, il ya 82 collisions sur 30 cm (le faisceau est très dispersé) les électrons ne perdent que 2,4 keV sur 15 keV, donc restent énergétiques. L'atténuation de l'énergie des électrons n'affecte donc pas la mesure.

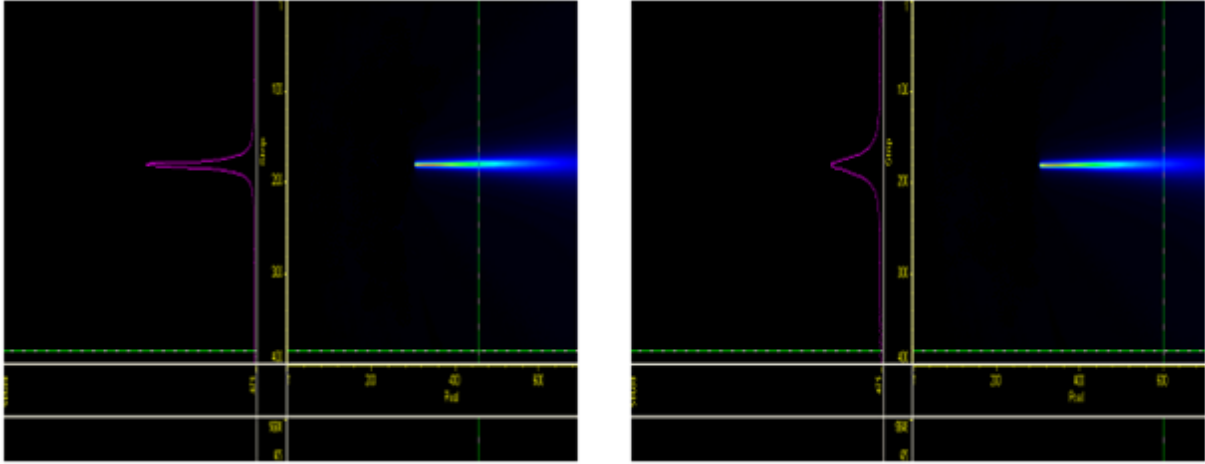
3.2 Modélisation de la dispersion du faisceau d'électrons

3.2.1 Résultats expérimentaux

Le diazote (N_2) a été utilisé lors de ces mesures. Le caisson à vide permet de maintenir une pression statique pouvant aller de 10^{-3} à 1 mbar. L'uniformité du gaz à l'intérieur du caisson est assurée par un pompage et une circulation continue. L'acquisition d'images du faisceau d'électrons se fait grâce à une camera CCD de 1340 X 400 pixels (correspondant à une image de 50 cm X 15 cm) équipée d'un filtre passe bande centré à 391,4 nm et de 10 nm de largeur de bande.

Toutes les mesures présentées dans cette section ont été faites à l'aide du prototype de canon à électrons décrit au chapitre 2 avec une tension variant de 15 kV à 27 kV. Nous rappelons aussi qu'on mesure la fluorescence que donne un pinceau assimilé à celui des électrons primaires du faisceau suivant l'équation 1.8 du chapitre 1. Cette approximation n'est valable

qu'à basse densité avec peu d'électrons secondaires. Sur les images de la Figure 3.8, on présente une image de ce faisceau d'électrons se propageant à travers 0,8 mbar de N_2 . On détermine la distribution des électrons à différentes positions sur l'axe de propagation :



(a)

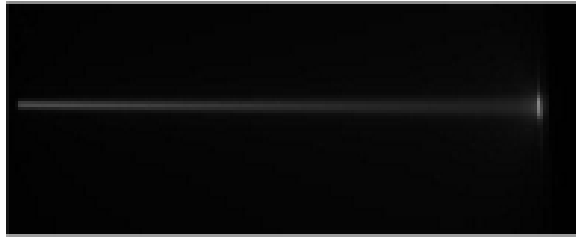
(b)

Figure 3.8

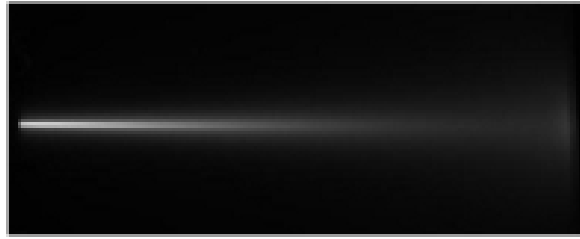
Dispersion d'un faisceau de 24 keV dans N_2 à 0,8 mbar. Image caméra CCD : distribution selon l'axe transversal : (a) à 4,2 cm de la sortie du faisceau et (b) à 6 cm de la sortie du faisceau

Le faisceau se disperse selon l'axe de propagation, comme on peut le voir sur la distribution axiale des électrons qui est beaucoup plus étalée de 4,2 cm à 6 cm de la sortie.

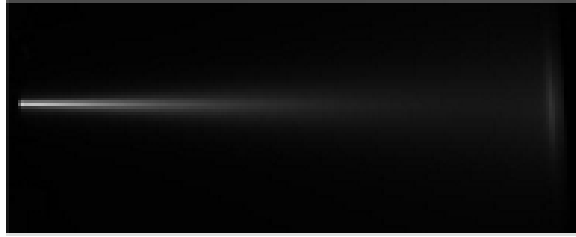
On a ensuite enregistré les images du faisceau 15 keV, à différentes pressions (allant de 10^{-2} mbar à 1 mbar) sur la Figure 3.9 :



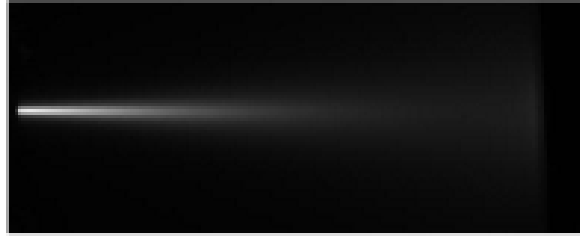
a) Image CCD 15 kV, 0.03 mbar



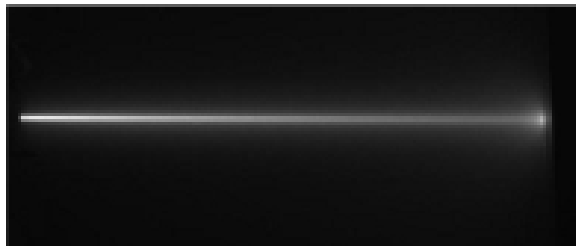
b) Image CCD 15 kV, 0.4 mbar



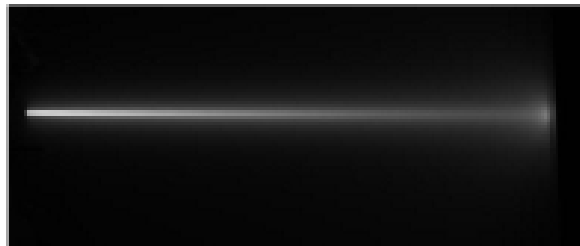
c) Image CCD 15 kV, 0.6 mbar



d) Image CCD 15 kV, 0.75 mbar



e) Image CCD 20 kV, 0.4 mbar



f) Image CCD 20 kV, 0.8 mbar

Figure 3.9

Images CCD du pinceau de fluorescence enregistrée dans différentes pressions de N_2 par des électrons à différentes énergies en fonction de la distance de propagation z . On utilise la caméra CCD Basler compatible u.v, d'autres images du faisceau à différentes pression de gaz sont disponibles en Annexes C/ Dispersion du faisceau d'électrons

L'intensité de fluorescence augmente aussi bien avec densité de gaz qu'avec la dispersion aussi (Figure 3.9 (a) à (d)).

Pour limiter la dispersion et maintenir un bon rapport signal sur bruit, il faudra utiliser un faisceau beaucoup plus énergétique (Figure 3.9 (e) et (f)). Les images sont traitées pour tracer le profil radial du faisceau. Un programme sous Labview[®] permet de mesurer la largeur à mi-hauteur suivant l'axe de propagation du faisceau.

Nous avons effectué des acquisitions pour des pressions allant de 10^{-2} mbar à 0,7 mbar mais, face à une difficulté d'extraction des profils pour des pressions inférieures à 0,1 mbar, due à un mauvaise stabilisation du faisceau, seuls des profils de 0,1 mbar à 0,7 mbar sont représentés ici. Sur la Figure 3.10, on a représenté l'évolution de la largeur à mi-hauteur en fonction de la densité de gaz pour différentes énergies du faisceau d'électrons :

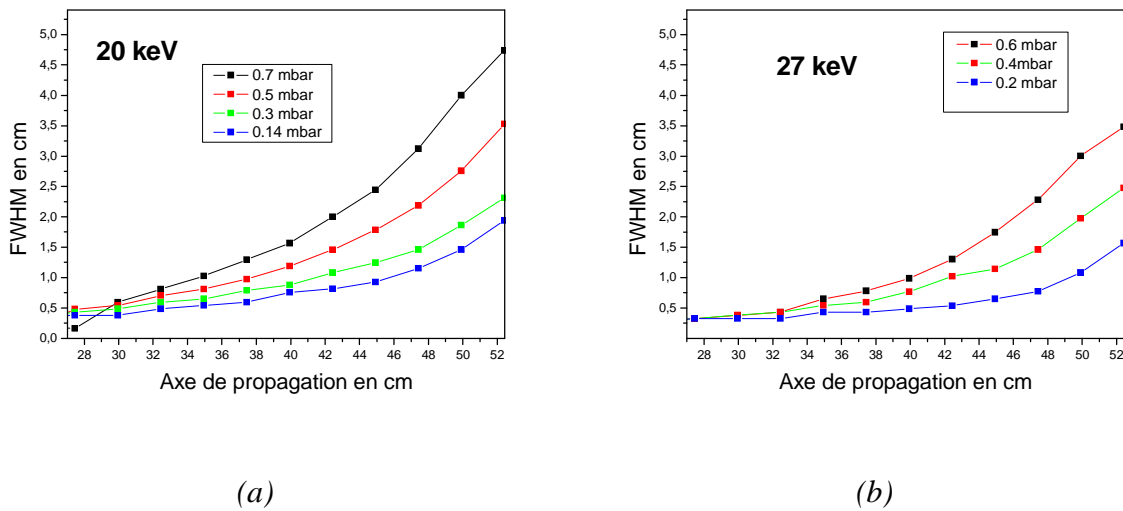


Figure 3.10

Mesures expérimentales de la largeur à mi-hauteur (FWHM) en fonction de la distance de propagation à différentes énergies d'électrons et différentes pressions de gaz :

(a) à 20 keV et (b) à 27 keV

Plus le gaz est dense (de 0,14 mbar à 0,7 mbar) plus le faisceau est dispersé. Le rayon de fluorescence, qui est équivalent au rayon du faisceau d'électrons, est à 20 keV (Figure 3.10 (a)), à 30 cm de propagation. Il passe à 1,5 cm pour une pression de 0,14 mbar et à 2,2 cm pour 0,3 mbar, à 3,5 cm pour 0,5 mbar et à 4,5 cm pour 0,7 mbar.

Avec un faisceau beaucoup plus énergétique (27 keV) (Figure 3.10 (b)), la dispersion est moins importante. A 0,6 mbar, la largeur à mi-hauteur, à 30 cm de propagation, est égale à 4,1 cm avec un faisceau de 20 keV et à 3,5 cm avec un faisceau de 27 keV.

3.2.2 Modélisation de la dispersion du faisceau d'électrons

Chaque collision électron-atome (ou électron- molécule) dévie légèrement l'électron incident d'un angle dont la valeur dépend de l'énergie de l'électron, par l'intermédiaire de la section efficace différentielle de collision et d'autres paramètres de la cible. La modélisation de la dispersion du faisceau d'électrons permet de prévoir la déviation du faisceau selon la densité de gaz, de l'énergie des électrons et de la distance de propagation. Un des objectifs de cette modélisation est d'estimer les limites de tolérance de dispersion acceptables pour les mesures du courant d'électrons ainsi que les corrections à apporter à la détermination de la densité à partir des mesures de la fluorescence. En soufflerie, on essaye d'obtenir un faisceau le moins dispersé possible sur une longueur égale au diamètre utile de l'écoulement. Le modèle qu'on utilise, se base sur les lois de collisions, vues au paragraphe §3.1.2.

Les paramètres de fonctionnement du prototype de canon à électrons utilisé à l'*ONERA* sont les suivants :

- Faisceau d'électrons d'énergie entre 1 keV et 30 keV
- Etude de la fluorescence sur une distance inférieure à 30 cm
- Densités de gaz entre 10^{13} et 10^{16} molécules.cm⁻³ (entre 10^{-3} et 1 mbar à 300 K)
- Les différents gaz étudiés sont N_2 , NO , CO , CO_2 et leurs mélanges.

Clapp [3.15] définit le rayon du faisceau d'électrons ¹ comme une fonction de la distance axiale z ayant pour origine la sortie du canon :

$$R_{rms} = \left[\frac{\int_0^\infty n_e(r, z) r^2 dr}{\int_0^\infty n_e(r, z) dr} \right]^2 \quad \text{Eq. 3-17}$$

où r est la distance radiale, $n_e(r, z)$ la densité électronique au point de coordonnées (r, z) .

Il s'agit d'une expression modifiée de la formule donnée par Lee et Cooper [3.14]. Elle est valable pour des collisions singulières ou multiples et se base sur la loi des forces de Lorentz et de la diffusion. Une autre modification, proposée par Clapp [3.15], néglige les effets relativistes et ne considère que de faibles angles de dispersion. Elle conduit à l'expression suivante :

$$R_{rms}(S) = R_{rms}(S = 0) \cdot \sqrt{1 + \frac{2}{S_R} \left(1 - S + \frac{1}{2}S + \frac{1}{24}S^4 - e^{-S}\right) \cdot \langle \theta_s^2 \rangle} \quad \text{Eq. 3-18}$$

où $S = n_g \cdot \sigma^{tot} \cdot z$ est le nombre de collisions, défini l' Eq. 3-16, $S_R = n_g \cdot \sigma^{tot} \cdot R_{rms}(S = 0)$; $R_{rms}(S = 0)$ est le rayon de sortie du faisceau d'électrons (à $z=0$).

$$\text{On considère que : } \langle \theta_s^2 \rangle = \frac{\int \theta^2 \cdot \frac{d\sigma}{d\Omega} d\Omega}{\int \frac{d\sigma}{d\Omega} d\Omega} \quad \text{Eq. 3-19}$$

¹ $R_{rms}(S)$ est la largeur à mi-hauteur (FHWM) du faisceau d'électrons.

Dans le calcul de la section efficace totale des collisions, la prise en compte des collisions aussi bien élastiques qu'inélastiques permet de déterminer une largeur à mi-hauteur $R_{rms}(z)$ beaucoup plus réaliste.

Le calcul de la largeur à mi-hauteur (*FHWM*) R_{rms}^2 du faisceau d'électrons a été effectué à partir des équations Eq. 3-15 et Eq. 3-18 . Nous avons ensuite appliqué le code de calcul pour déterminer le rayon du faisceau pour différentes énergies de faisceau (20 et 27 keV) et différentes pressions de gaz en fonction de la distance de propagation. Dans la Figure 3.11, ces variations de largeur à mi-hauteur sont comparées aux mesures expérimentales effectuées dans les mêmes conditions.

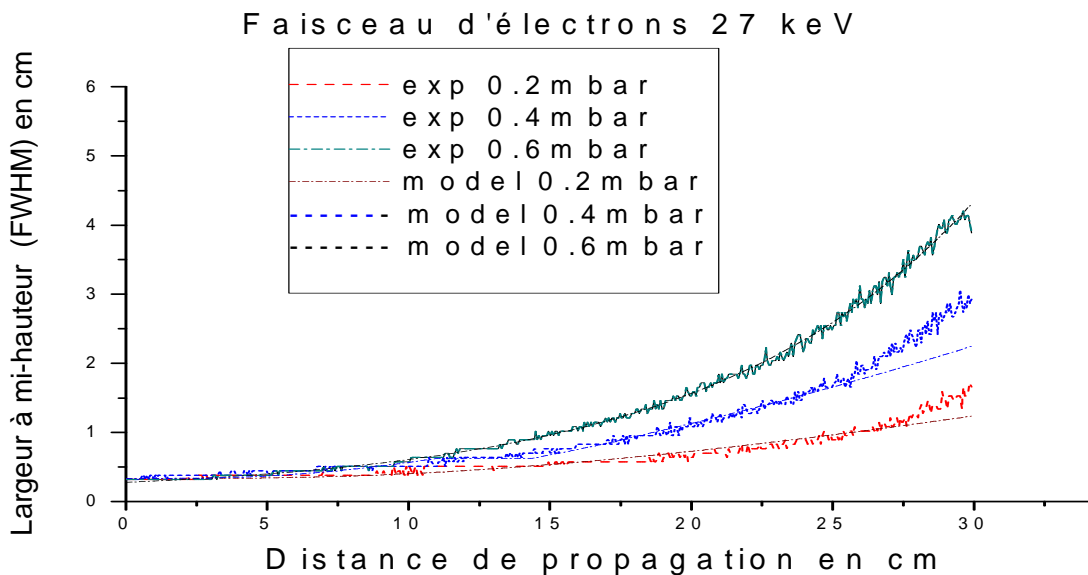


Figure 3.11

Comparaison entre modèle et mesure expérimentale de la largeur à mi-hauteur d'un faisceau d'électrons de 27 keV à différentes pressions de gaz (0,2, 0,4 et 0,6 mbar)

² Le diamètre de sortie du faisceau $R_{rms}(s=0)$ est de 0.3 centimètre (prototype EGUN v.1).

Les valeurs calculées par ce modèle suivent les valeurs expérimentales trouvées pour le faisceau de fluorescence aux différentes énergies et différentes pressions de gaz essayées. On note cependant des écarts à partir de 25 cm de propagation. Ces derniers peuvent être dus à la fluorescence supplémentaire induite par les électrons secondaires, dont la densité dépend essentiellement de celle du gaz et pas de la distance du canon. Un électron secondaire est créé avec une énergie de quelque eV et reste donc tout près de l'endroit de sa création.

Pour avoir des modèles plus réalistes, il faudrait donc tenir compte de deux phénomènes : la création d'électrons secondaires et le quenching.

Pour des pressions proches de 1 mbar, le modèle de dispersion utilisé jusqu'ici n'est plus valable. Il faudra dans ce cas, utiliser d'autres modèles tels que le "multiple scattering model" ou "envelop model" proposés par Clapp ainsi que Berkes et Demeter [3.16] et [3.17].

3.3 Détermination du profil point-à-point de la densité à partir de la dispersion du faisceau d'électrons

Dans l'équation donnant l'évolution de la largeur à mi-hauteur en fonction de la distance de propagation Eq. 3-18, le paramètre S est proportionnel à la densité de gaz n_g , or les écoulements traversés ne sont pas à densité uniforme, car la gaine d'écoulement présente un profil particulier de densité $n_g(z)$. On peut donc modéliser la largeur à mi-hauteur en fonction d'un profil particulier de densité et voir son influence sur la dispersion du faisceau d'électrons. La Figure 3.12 présente un exemple de profil de fluorescence obtenu dans l'écoulement libre de la soufflerie *DLR-LBK*.

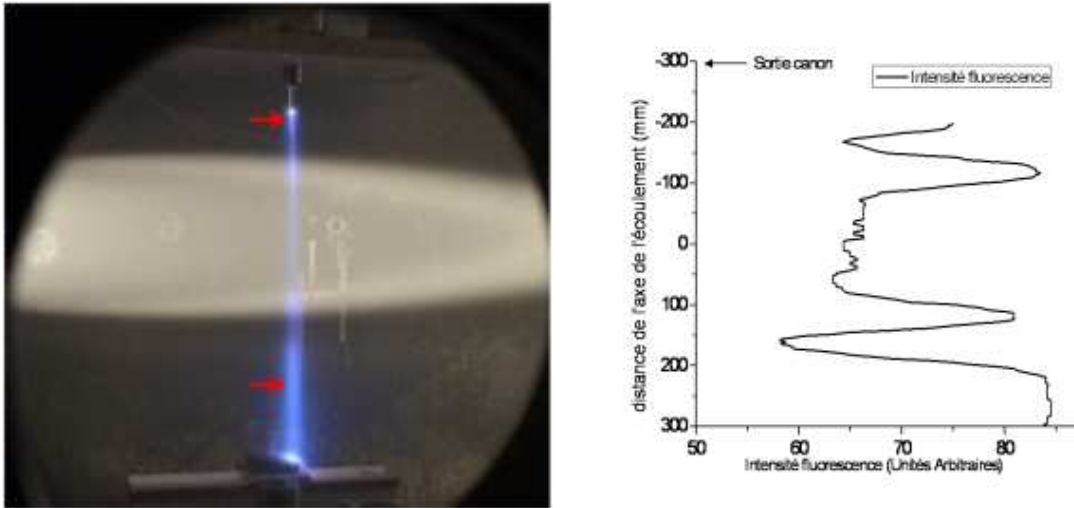


Figure 3.12

Vue de l'écoulement dans la soufflerie LBK (Mohamed & al.[0.8])

L'expression de la largeur à mi-hauteur, donnée par Clapp, n'est valable que pour une distribution uniforme de densité selon l'axe de propagation. Pour simuler l'évolution de cette largeur à mi-hauteur dans un écoulement (profil non uniforme de densité), il faut modifier l'équation Eq. 3-18 en faisant varier $n_g(z)$ en fonction de la distance de propagation z . La largeur à mi-hauteur, à la position z , dépend de la densité de gaz à cette distance mais également du passé du faisceau (c'est-à-dire de sa dispersion avant z). Pour étudier l'influence du profil de densité sur la largeur à mi-hauteur, nous avons défini une expression de cette densité avec des paramètres de forme de profil :

$$n_g(z) = n_{g0} \cdot \left(o - p \cdot \sin\left(\frac{z}{q}\right) \right) \quad \text{Eq. 3-20}$$

où $n_{g0} = 10^{16}$ molécules.cm⁻³, o , p et q sont les paramètres qui définissent la forme du profil.

On discrétise l'axe de propagation en dz en supposant que la pression reste constante sur une petite portion dz . Ainsi, pour trouver la dispersion à l'axe $z' = z+dz$, il faut connaître la dispersion à l'axe z et la densité $n_g(z)$. De proche en proche, on arrive à la dispersion à l'axe en z_0 où la largeur à mi-hauteur est R_0 .

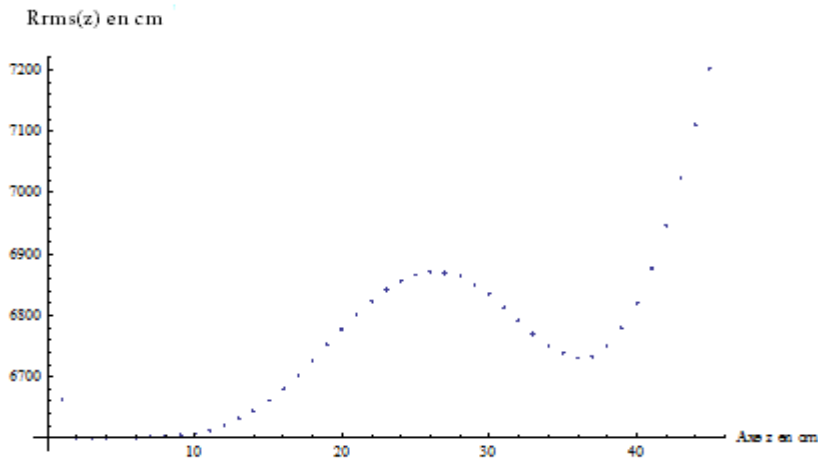
On prend un pas de 1 cm, si on fait l'hypothèse que sur 1 cm de propagation, la pression n'a pas trop varié (à 25 keV, Il y a au maximum une seule collision, $n_g \sigma z = 2,4 \cdot 10^{16} \cdot 3,63 \cdot 10^{-17} \cdot 1 = 0,87$). Ainsi, l'expression donnant la largeur à mi-hauteur du faisceau à une distance z devient :

$$R_{rms}(0) = R_0 = 0,3 \text{ cm} \tag{Eq. 3-21}$$

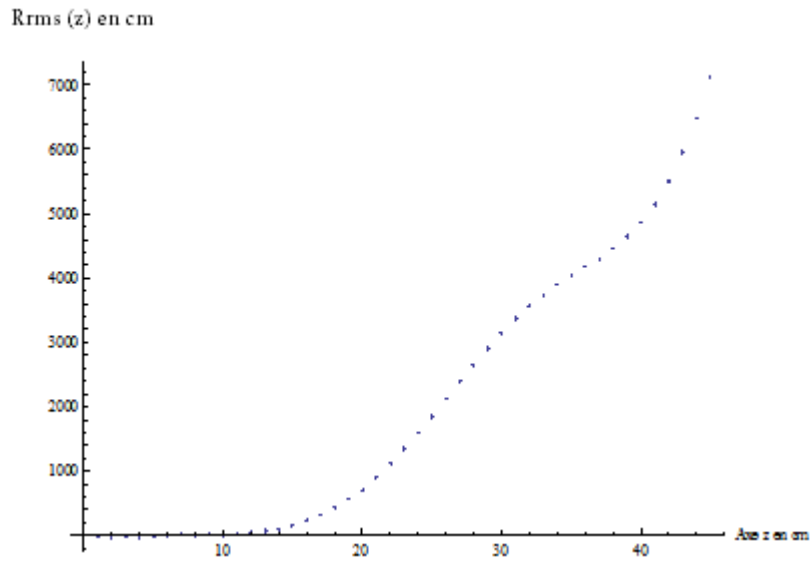
et pour $1 < z < 30$ cm (propagation sur 30 centimètres),

$$R_{rms}(z) =$$

$$R_{rms}(z) = \sqrt{1 + \frac{2}{n_g(z) \cdot \sigma \cdot R_{rms}(z-1)} \cdot (1 - (n_g(z) \cdot \sigma \cdot z) + \frac{1}{2} \cdot (n_g(z) \cdot \sigma \cdot z)^2 + \frac{1}{24} \cdot (n_g(z) \cdot \sigma \cdot z)^4 - e^{-(n_g(z) \cdot \sigma \cdot z)}) \cdot \langle \theta_S^2 \rangle}$$



a) Simulation de la largeur à mi-hauteur avec le modèle de Clapp



b) Simulation de la largeur à mi-hauteur avec le modèle de Clapp modifié

Figure 3.13

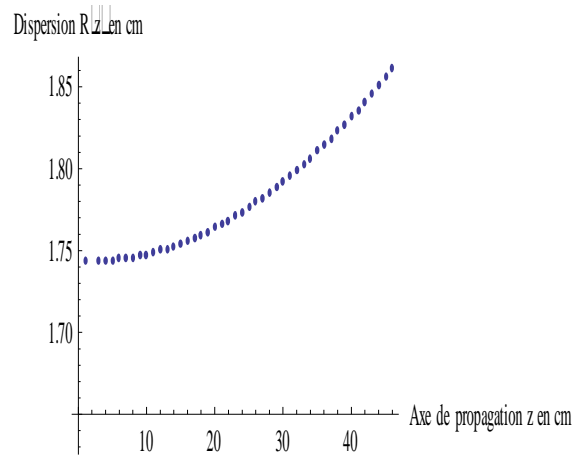
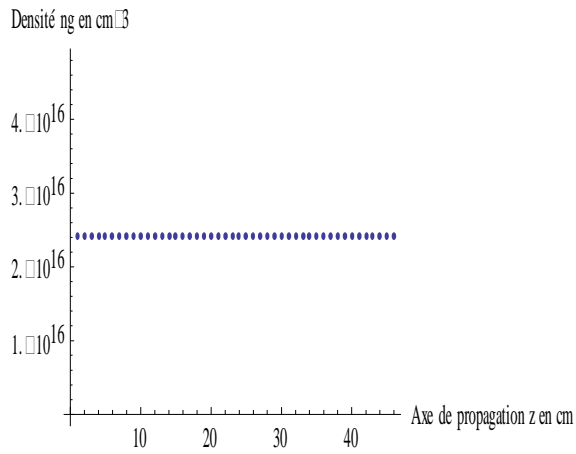
Evolution de la largeur à mi-hauteur en fonction de l'axe de propagation :

Modèle de Clapp (a) et notre modèle et (b) Profil $n_g(z)=2,4 \cdot 10^{16} \cdot (0,616-0,31 \cdot \sin(z/4,7))$

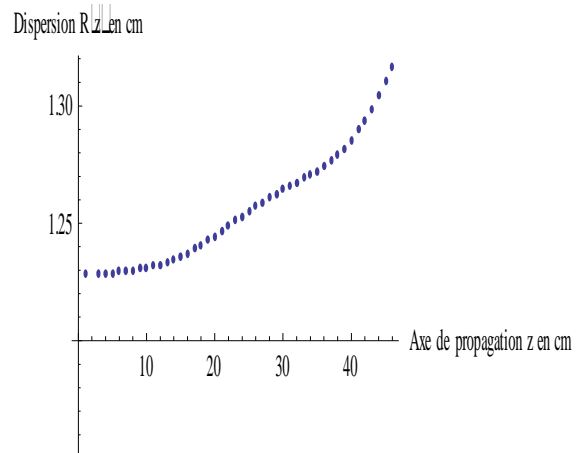
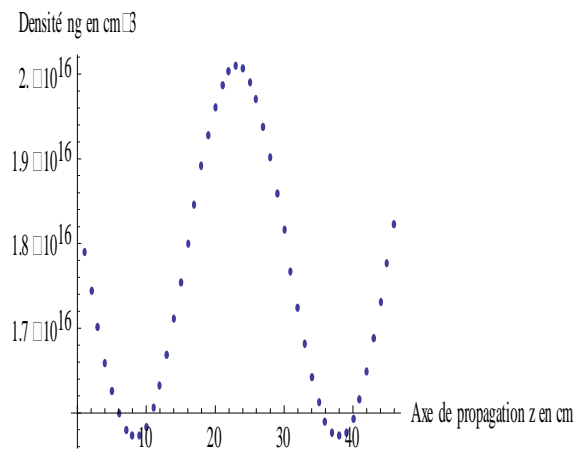
L'expérience montre que la largeur à mi-hauteur augmente quelque soit le profil de densité. Or, la simulation avec le modèle de Clapp montre un minimum sur cette largeur à mi-hauteur (Figure 3.13 (a)). L'expression modifiée de l'Eq. 3-21 tient compte du passé du faisceau (de sa dispersion à l'axe $[z-1]$: $R_{rms}[z-1]$).

En faisant varier ensuite o , p et q , on peut ajouter différents profils de densité. Ci-dessous, on représente des exemples de profils de dispersion obtenus avec le nouveau modèle :

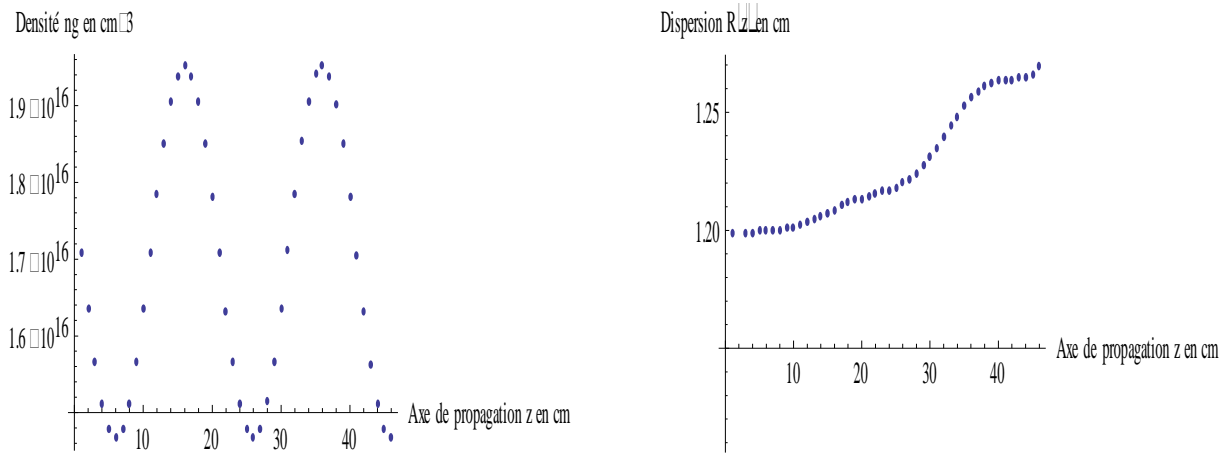
Chapitre III: Etude de la dispersion du faisceau d'électrons



(a) $n_{g0}=2,4 \cdot 10^{16}$; $\omega=1$; $p=0$; $q=4,7$



(b) $n_{g0}=2,24 \cdot 10^{16}$; $\omega=0,746$; $p=0,091$; $q=4,7$;



(c) $n_{g0}=2,24.10^{16}$; $o=0,712$; $p=0,101$; $q=3,18$;

Figure 3.14

Capture d'écran du programme d'ajout d'un profil de densité : Modélisation de la dispersion du faisceau d'électrons (images de droite) traversant un gaz avec différents profils de densité (images de gauche)

Le modèle de dispersion est un moyen de prévoir le comportement du faisceau d'électrons lors de sa propagation. Dans les expériences du projet *EXPERT*, le profil de densité est inconnu. Il s'agit de le mesurer.

Nous avons cherché à inverser numériquement l'équation Eq. 3-21 pour déterminer le profil point-à-point de la densité à partir de la variation de la largeur à mi-hauteur du faisceau d'électrons. Ce programme d'inversion n'est pas encore opérationnel.

3.4 Modélisation de l'intensité du courant d'électrons primaires

Le courant d'électrons sur l'axe du faisceau d'électrons $I_e(y)$ peut être modélisé par l'expression donnée par Ce & Ma [3.2].

$$\ln(I/I_0) = -\rho\sigma L + 2\pi \int_0^L dz \int_0^K d\theta \sin(\theta) \frac{d\sigma}{d\theta}(\theta) \quad \text{Eq. 3-22}$$

Cette expression étant liée à la position L du détecteur, on doit apporter une modification de sorte à avoir une expression indépendante du détecteur :

$$I_e(y) = I_0 \cdot \exp \left(2\pi \int_0^y dy \int_0^{\theta_m} \sin(\theta) \frac{d\sigma^{tot}}{d\theta}(\theta) \right) \quad \text{Eq. 3-23}$$

On remarque dans cette expression que, l'intensité du courant d'électrons le long de l'axe de propagation du faisceau d'électrons est une fonction de sections efficaces différentielles de collision aux différents angles de dispersion.

Conclusions :

Notre nouveau modèle de dispersion, qui tient compte des collisions, aussi bien élastiques qu'inélastiques, semble être beaucoup plus réaliste pour des faisceaux d'électron d'énergies supérieures à 7 keV et qui ont des angles de dispersion inférieurs à 0,03 radians. Ce modèle de dispersion est validé grâce aux mesures expérimentales de la largeur à mi-hauteur du faisceau en fonction de l'axe de propagation du faisceau d'électrons. Il reste cependant à compléter ce modèle par une correction des phénomènes de quenching et de création d'électrons secondaires, surtout pour des pressions de gaz proches du millibar. En perspective, nous établissons également une méthode de détermination de profil point-à-point de la densité le long du faisceau par inversion de la largeur à mi-hauteur

3.5 Bibliographie - Chapitre 3

- [3.1] Mott, N.F. and Massey, H.S.W., "The Theory of Atomic Collisions", *Oxford University Press (Clarendon), London & New York, 1952*
- [3.2] Ce, M. & al., "A new method for measuring absolute total electron-impact cross sections with forward scattering corrections", *Rev. Sci. Instrum.*, 60(12), Dec., 1989
- [3.3] Liu, J.W., "Elastic scattering of fast electrons by $H_2(1\Sigma_g^+)$ and $N_2(X1\Sigma_g^+)$ ", *Phys.Rev. A*, 32, 1384, 1985
- [3.4] Inokuti, M., "Inelastic collisions of fast charged particles with atoms and molecules- The Bethe theory revisited", *Rev. Mod. Phys.*, 43, 297, 1971
- [3.5] Liu, J.W., "Total cross-section for high energy electron scattering by $H_2(1\Sigma_g^+)$, $N_2(1\Sigma_g^+)$, and $O_2(3\Sigma_g^-)$ " *Physical Review A*, Vol.35,No.2, January 15, 1987
- [3.6] Mohamed A.K. "EBF in blow-down hypersonic wind tunnels", *Thèse de Doctorat de l'université Paris Sud, Orsay, 1991*
- [3.7] Bonham, H. & al., "A review of electron scattering cross section measurements by use of pulsed electron beam time of flight techniques" *Journal of Electron Spectroscopy and Related Phenomena vol.155, pp. 1-6, (2007)*
- [3.8] Center & al. "Ionization Cross Sections of N_2 and Cl_2 by Electron Impact" *J. Chem. Phys.* 57, 4104, (1972)
- [3.9] Van Wagelaar, B.,
- [3.10] Ittikawa, Y., Hayashi, M., Ichimura, A., Onda, K., Sakimoto, K., Takayanagi, K., "Cross section for Collision of Electrons and Photons with nitrogen" *J.Phys.Chem.Ref.Data*, Vol.15, No.3, 1986
- [3.11] Tabata, T., Shirai, T., Sataka, Hiroataka K., "Analytic cross sections for electron impact collisions with nitrogen molecules" *Atomic Data and Nuclear Data Tables*, Volume 92, Issue 3, Pages 375-406, May 2006

- [3.12] Clapp, L.H., Twiss, R.G. and Cattolica, R. J. "Electron Beam Dispersion in Nitrogen using Two-Dimensional Imaging of N_2^+ Fluorescence", *Rarefied Gas Dynamics : Proceedings of the 17th International Symposium*, , p. 1498, edited by A. E. Beylich (VCH, New York), 1990
- [3.13] Farley, D.R., Cattolica, R.J. ,Clapp, L.H., "Propagation of medium energy electrons (10 keV–20 keV) in carbon dioxide", *Phys. Fluids 11*, 226, 1999
- [3.14] Lee et Cooper & al.
- [3.15] Clapp, L.H., Twiss, R.G., Cattolica, R.J.; "Characterization of electron beam propagation for hypersonic flight research applications" *AIAA, International Aerospace Planes Conference, 4th, Orlando, FL, Dec. 1-4, 12 p.* , 1992
- [3.16] Berkes, I. and Demeter, I., "Small angle scattering of electrons", *Nucl. Phys. 15*, 421 , 1960
- [3.17] Lord, R.G., "Measurements of very small angle scattering of medium energy electrons in gases", *J. Phys. D : Appl. Phys. 3* 1480-1485, 1970

Chapitre IV

4. Chapitre 4 : Spectroscopie vibrationnelle et rotationnelle : Développement des codes de simulation et d'inversion de spectres de fluorescence

Dans ce chapitre nous décrivons les modèles spectroscopiques utilisés pour simuler des spectres de fluorescence qui sont comparés aux spectres expérimentaux afin d'extraire les paramètres de températures et de concentrations des espèces chimiques.

La spectroscopie vibrationnelle et rotationnelle permet d'étudier les transitions radiatives entre des états moléculaires. Ces états sont associés aux mouvements internes des électrons et atomes constituant la molécule. La théorie des orbitales atomiques et moléculaires, associé à d'autres théories comme la théorie des groupes permet de caractériser et classifier les géométries et les mouvements [4.1] à [4.7]. L'analyse du spectre moléculaire permet d'extraire des propriétés comme les températures ou la concentration d'une espèce chimique dans un milieu gazeux. On pourra trouver en *Annexes D/ Configuration électronique des atomes et molécules* un rappel sur ces mouvements internes décrits par la théorie des orbitales atomiques et moléculaires qui donne les structures rotationnelles et vibrationnelles des spectres.

Pour illustrer les différentes parties du programme de simulation et d'inversion des spectres *FFE*, nous reprenons les notions de la Figure 1.4 du chapitre 1. Ainsi dans la Figure 4.1, on présente, pour le cas N_2 , le processus d'excitation à partir de l'état électronique fondamental de N_2, X^1 vers un état électronique excité de l'ion N_2^+, B^2 qui se désexcite ensuite par fluorescence, vers l'état fondamental de l'ion N_2^+, X^2 qui survit assez longtemps pour ne plus être considéré dans le processus de fluorescence. Le spectre expérimental de la transition N_2^+, B^2 excité vers N_2^+, X^2 fondamental est présenté dans la Figure 4.1 avec, en haut, une résolution spectrale qui montre les bandes de vibrations et en bas, avec une résolution spectrale plus grande permettant d'observer la structure rotationnelle de la bande vibrationnel la plus intense.

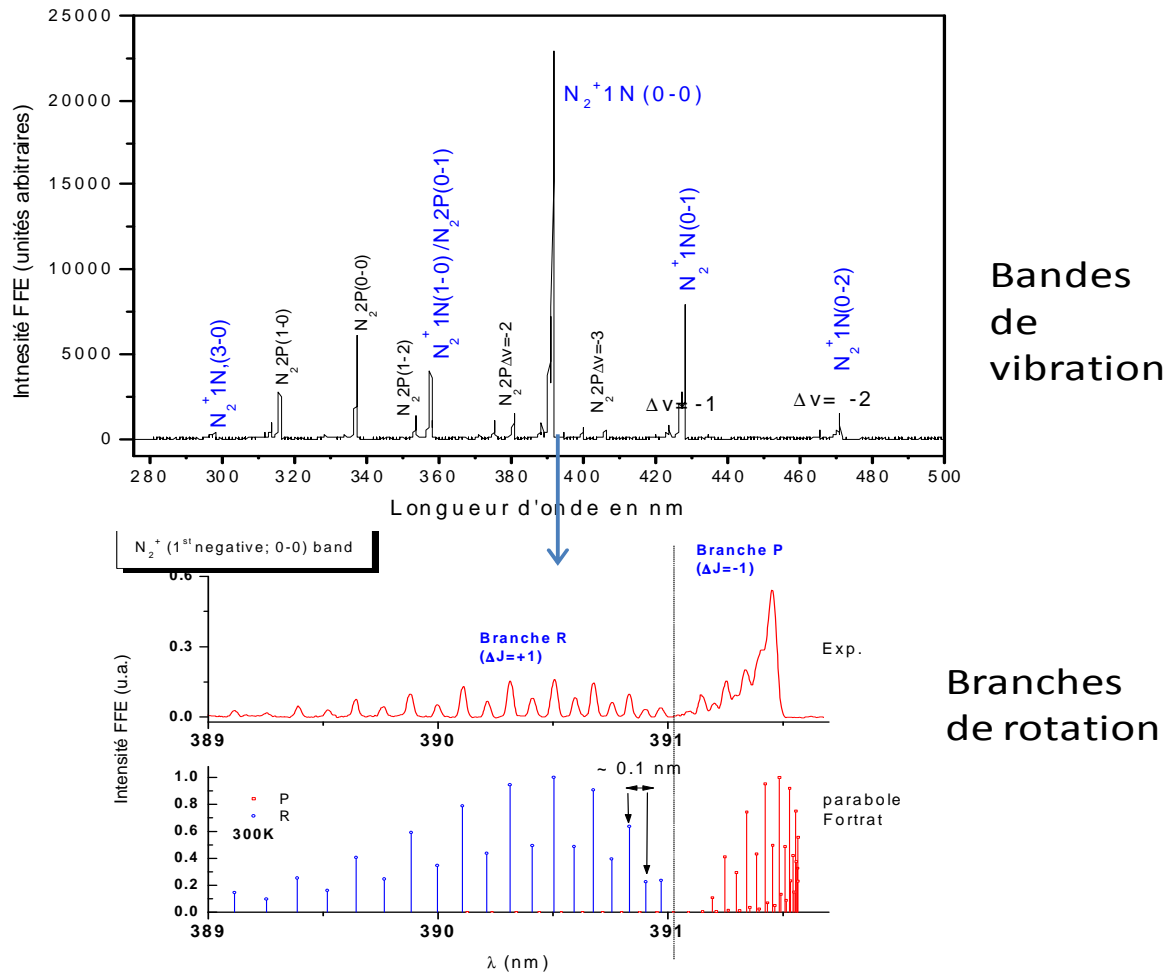


Figure 4.1

Niveaux des transitions et spectre de fluorescence de N_2^+ (1er négatif) avec en haut les bandes de vibration et en bas les branches de rotation de la bande de vibration (0,0)

Le programme de simulation et inversion des spectres FFE permet, en tout premier lieu, de calculer les positions des longueurs d'ondes de transitions (raies de rotations et bandes de vibration) puis les intensités. Ensuite, la procédure d'inversion consiste à utiliser ces intensités afin de remonter aux densités partielles, aux températures de rotation et de vibration. Le calcul des positions spectrales et des températures fait intervenir les états des molécules et plus particulièrement leurs niveaux d'énergie. La première partie de ce chapitre sera consacrée à un rappel sur les calculs des niveaux d'énergie moléculaires.

4.1 Modélisation des spectres FFE

4.1.1 L'énergie d'un état moléculaire

Un état moléculaire à un instant donné est caractérisé par la combinaison des mouvements électroniques, de vibration, de rotation et de spin nucléaire. Ces mouvements sont couplés mais il est possible de représenter les énergies individuelles en utilisant l'approximation de Born-Oppenheimer [4.10]. Cette approximation est basée sur le fait que le mouvement de vibration des noyaux est lent par rapport au déplacement des électrons et que le mouvement de rotation fait appel à une énergie plus basse que celle associée à la vibration. Dans cette approximation, on peut écrire que l'énergie d'un état est la somme des énergies individuelles :

$$E_{tot} = E_{elec} + E_{vib} + E_{rot} \quad Eq. 4-1$$

Avec $E_{rot} < E_{vib} \ll E_{elec}$. E_{elec} , E_{vib} , E_{rot} , respectivement les énergies des états électroniques, vibrationnels et rotationnels.

La Figure 4.2 donne l'échelle des énergies relatives d'excitation des différents niveaux :

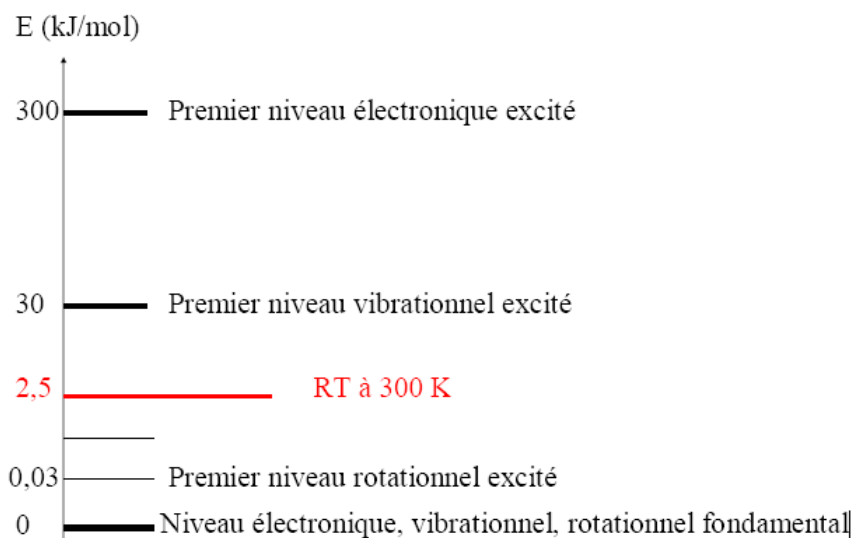


Figure 4.2

Energie relative d'excitation de différents niveaux d'orbitales moléculaires (Ogier [4.7])

Chapitre IV: Spectroscopie vibrationnelle et rotationnelle

Le spin étant couplé avec le moment cinétique des électrons, sa contribution énergétique est incluse dans l'expression de E_{elec} .

E_{elec} est souvent noté $T(\Lambda)$ dans notre programme de simulation.

E_{vib} est noté $G(\Lambda, v)$ en conservant toujours l'indice électronique Λ pour noter que cette énergie de vibration est spécifique à ce niveau Λ .

En supposant que le mouvement de vibration est représenté par un oscillateur anharmonique, on obtient l'expression suivante pour l'énergie de vibration :

$$G(\Lambda, v) = w_e \cdot \left(v + \frac{1}{2}\right) - w_e \cdot x_e \cdot \left(v + \frac{1}{2}\right)^2 + w_e \cdot y_e \cdot \left(v + \frac{1}{2}\right)^3 + \dots \quad \text{Eq. 4-2}$$

$w_e, w_e x_e, w_e y_e$ sont des constantes moléculaires. (*Annexes E / Constantes Moléculaires*).

Pour le cas de la rotation, le modèle communément adopté est celui du rotateur rigide où l'énergie de rotation F est inversement proportionnelle au moment d'inertie I_m . L'expression est la suivante :

$$F(\Lambda, v, k) = B_e \cdot k \cdot (k + 1) \quad \text{Eq. 4-3}$$

avec $B_e = \frac{h^2}{8\pi^2 \cdot c \cdot I_m}$ et k le niveau rotationnel

Un modèle de rotateur non-rigide consiste à introduire un coefficient de correction pour la distorsion centrifuge dans la formule de F :

$$F(\Lambda, v, k) = B_e \cdot k \cdot (k + 1) - D_e \cdot (k \cdot (k + 1))^2 + \dots \quad \text{Eq. 4-4}$$

avec $D_e = \frac{4 \cdot B_e^2}{w_e^2}$

La rotation est couplée avec la vibration et d'autres corrections (anharmonicité de l'énergie potentielle pour les états vibrationnels, etc.) doivent être apportées aux coefficients B et D qu'on renomme B_v et D_v . On obtient ainsi :

$$F(\Lambda, v, k) = B_v \cdot k \cdot (k + 1) - D_v \cdot k^2 \cdot (k + 1)^2 + H_v \cdot k^3 \cdot (k + 1)^3 + \dots \quad \text{Eq. 4-5}$$

avec :

$$B_v = B_e - \alpha_e \cdot \left(v + \frac{1}{2}\right) + \gamma_e \cdot \left(v + \frac{1}{2}\right)^2 + \dots$$

$$D_v = D_e - \beta_e \cdot \left(v + \frac{1}{2}\right) + \dots$$

$$H_v = H_e + \dots$$

$w_e, w_e x_e, w_e y_e, \alpha_e, \beta_e, \gamma_e$ sont des constantes moléculaires tabulées. (*Annexes E / Constantes Moléculaires*).

Le couplage entre la rotation et la vibration est représenté par les coefficients $\alpha_e, \beta_e, \gamma_e$ et l'équation Eq. 4-2 devient :

$$\begin{aligned} G(\Lambda, v, k) + F(\Lambda, v, k) &= w_e \cdot \left(v + \frac{1}{2}\right) - w_e x_e \cdot \left(v + \frac{1}{2}\right)^2 + w_e y_e \cdot \left(v + \frac{1}{2}\right)^3 \quad \text{Eq. 4-6} \\ &+ \left[B_e - \alpha_e \cdot \left(v + \frac{1}{2}\right)\right] \cdot k \cdot (k + 1) - \left[D_e - \beta_e \cdot \left(v + \frac{1}{2}\right)\right] \cdot (k \cdot (k + 1))^2 + \dots \end{aligned}$$

On peut regrouper les termes en $(v+1/2)^l$ et $(k(k+1))^m$, en utilisant le développement de Dunham [4.12] :

$$G(\Lambda, v) + F(\Lambda, v) = \sum_{l,m} Y_{l,m} \left[v + \frac{1}{2} \right]^l [k(k+1)]^m \quad \text{Eq. 4-7}$$

Les coefficients Y_{lm} se déduisent des formules précédentes :

$$Y_{10} = w_e \quad Y_{01} = B_e$$

$$Y_{20} = w_e x_e \quad Y_{02} = D_e$$

$$Y_{30} = w_e y_e \quad Y_{11} = \alpha_e$$

$$Y_{00} = B_e/4 + \frac{\alpha_e}{12B_e} + \frac{\alpha_e w_e^2}{144B_e^3} - w_e x_e/4$$

4.1.2 Les transitions entre états moléculaires

Les transitions entre états moléculaires sont induites en *FFE* par l'impact d'électrons suivi de désexcitations radiatives. Des désexcitations non radiatives (quenching) peuvent aussi avoir lieu mais celles-ci ne contribuent pas à la fluorescence.

4.1.2.1 Règles de sélection

Nous rappelons ici quelques règles de sélection utiles, les calculs sont détaillés dans la référence de Herzberg [4.17].

Le tableau suivant présente le cas des molécules diatomiques et des transitions optiques dipolaires.

Transitions permises	Exemples	Transition électronique	Transitions permises	Nom
$\Delta\Lambda=0, \pm 1$	$\Sigma \leftrightarrow \Sigma, \Pi \leftrightarrow \Pi, \Sigma \leftrightarrow \Pi, \Delta \leftrightarrow \Pi$	$\Sigma \leftrightarrow \Sigma$	$\Delta k=-1$	branche P
$\Delta S=0$	$^1\Sigma \leftrightarrow ^1\Sigma, ^3\Pi \leftrightarrow ^3\Pi, ^1\Sigma \leftrightarrow ^1\Pi, ^3\Sigma \leftrightarrow ^3\Pi$		$\Delta k=1$	branche R
$+\leftrightarrow +$	$\Sigma^+ \leftrightarrow \Sigma^+$	Autres $\Lambda - \Lambda$	$\Delta k=-1$	branche P
$-\leftrightarrow -$	$\Sigma^- \leftrightarrow \Sigma^-$		$\Delta k=1$	branche R
$g \leftrightarrow u$	$\Sigma_g^+ \leftrightarrow \Sigma_u^+, \Sigma_g \leftrightarrow \Pi_u,$		$\Delta k=0$	branche Q
a) Règles de sélection pour les propriétés électroniques			b) Règles de sélection pour la rotation	

Tableau 4.1

Règles de sélection (dipolaire) des molécules diatomiques

Les transitions induites par excitations avec des électrons très rapides (ou primaires dans notre cas) suivent les mêmes règles de sélection que celles des transitions optiques dipolaires. Les électrons à plus basses énergie (inférieure à la centaine d'eV) peuvent par contre induire des excitations quadripolaires avec des règles de sélection moins contraignantes que nous n'avons pas pris en compte.

4.1.2.2 Longueur d'onde et nombre d'onde d'une transition radiative

Les états excités sont désignés par l'exposant <'>, les états désexcités par l'exposant <">. L'écart d'énergie pour une transition radiative permise (Λ', v', k') vers (Λ'', v'', k'') est donné par :

$$\Delta E = E_{(\Lambda', \nu', k')} - E_{(\Lambda'', \nu'', k'')} = h \frac{\Lambda', \nu', k'}{\Lambda'', \nu'', k''} \nu = hc \frac{\Lambda', \nu', k'}{\Lambda'', \nu'', k''} \lambda$$

où ν et λ sont respectivement la fréquence (ou nombre d'onde) et la longueur d'onde de cette transition.

Le nombre d'onde peut se développer à partir de l'Eq. 4-6 comme suit :

$$\frac{\Lambda', \nu', k'}{\Lambda'', \nu'', k''} \nu = [T(\Lambda') - T(\Lambda'') + (G(\Lambda', \nu') - G'(\Lambda'', \nu'')) + (F(\Lambda', \nu', k') - F'(\Lambda'', \nu'', k''))] \quad \text{Eq. 4-8}$$

$$= \left[\begin{array}{c} T(\Lambda') - T(\Lambda'') \\ + \\ (w_e \cdot ((\nu' - \nu'') - x_e \cdot ((\nu' + 1/2)^2 - (\nu'' + 1/2)^2)) \\ + y_e \cdot ((\nu' + 1/2)^3 - (\nu'' + 1/2)^3) \\ + \\ (B_{\nu'} \cdot k' \cdot (k' + 1) - B_{\nu''} \cdot k'' \cdot (k'' + 1)) \\ - \\ (D_{\nu'} \cdot k'^2 \cdot (k' + 1)^2 - D_{\nu''} \cdot k''^2 \cdot (k'' + 1)^2) \\ + \\ (H_{\nu'} \cdot k'^3 \cdot (k' + 1)^3 - H_{\nu''} \cdot k''^3 \cdot (k'' + 1)^3) \\ + \\ \dots \end{array} \right]$$

Prenons l'exemple de la transition $N_2^+ B^2\Sigma_u^+ \rightarrow N_2^+ X^2\Sigma_g^+ (0 \rightarrow 0)$, appelée premier système négatif et notée $N_2^+ 1N(0 \rightarrow 0)$. Elle relie les deux états électroniques $B^2\Sigma_u^+ \rightarrow X^2\Sigma_g^+$ et les deux états vibrationnels ($\nu' = 0 \rightarrow \nu'' = 0$). La transition électronique $\Sigma_u^+ \rightarrow \Sigma_g^+$ est permise puisque $\Delta S = 0$ et $\Delta \Lambda' = 0$ et $u \rightarrow g$ et $+\rightarrow +$. Le Tableau 4-3 donne les valeurs des constantes moléculaires de ces deux états électroniques d'après Herzberg [4.17] et NIST [4.18] :

Molécule	N2	Molécule	N2
Etat électronique	$B^2\Sigma_u^+$	Etat électronique	$X^2\Sigma_g^+$
Constantes	Unité cm^{-1}	Constantes	Unité cm^{-1}
T_e	2.55E+04	T_e	0.00E+00
W_e	2.42E+03	W_e	2.21E+03
$W_e X_e$	2.41E+01	$W_e X_e$	1.62E+01
$W_e Y_e$	-3.00E-01	$W_e Y_e$	4.00E-03
B_e	2.09E+00	B_e	1.93E+00
D_e	-8.80E-05	D_e	5.92E-06
H_e	-7.05E-12	H_e	0.00E+00
α_e	2.12E-02	α_e	-1.88E-02
β_e	6.27E-06	β_e	-3.90E-08
γ_e	-5.00E-04	γ_e	-6.77E-05

Tableau 4.2

Constantes moléculaire des états électroniques $N_2^+ B^2\Sigma_u^+$ et $N_2^+ X^2\Sigma_g^+$, tirées des tables de Herzberg et NIST [4.17], [4.18]

Ces constantes moléculaires ont été soit déduites de spectres expérimentaux soit calculées à partir des valeurs des masses atomiques, rayons internucléaires et autres paramètres qui sont eux-mêmes connues avec des incertitudes. Il en résulte que les valeurs de ces constantes sont tabulées avec leurs incertitudes et il est très fréquent de trouver des valeurs différentes selon les auteurs. Dans le cas de notre simulation, nous avons utilisé les constantes tirées de publications récentes, qui en général, recalculent ces constantes avec de meilleures précisions. Dans certains cas, on fera une comparaison entre spectres simulés avec différentes constantes moléculaires et le choix se fait en fonction de l'écart aux spectres expérimentaux.

4.1.3 L'intensité de fluorescence

4.1.3.1 L'intensité d'une raie

L'intensité d'une raie résultant d'une transition $(\Lambda', v', k') \rightarrow (\Lambda'', v'', k'')$ est donnée par [4.42]

:

$$I_{\Lambda'v'k'}^{\Lambda v k} = I_0 \cdot n_g \cdot \left[\frac{q_{v'v''} P_{k'k''}}{2k' + 1} \cdot \sum_{\Lambda v k}^{max} n_{\Lambda v k}(\Lambda, v, k) \cdot q_{vv'} \cdot P_{kk'} \cdot R_{\Lambda\Lambda'} \right] \quad Eq. 4-9$$

Cette transition inclut les parties électroniques, vibrationnels et rotationnels. Les expressions des différents paramètres $q_{v'v''}$, $q_{vv'}$, $P_{k'k''}$, $P_{kk'}$, $n_{\Lambda v k}(\Lambda, v, k)$ et $R_{\Lambda\Lambda'}$ seront détaillées dans la suite de ce chapitre. Leurs expressions sont données dans les équations Eq. 4-15 à Eq. 4-31. Il s'agit respectivement des facteurs Franck-Condon, des facteurs de branchement rotationnels (ou force de raies), de la population du niveau (Λ, v, k) et de la probabilité d'excitation entre les états électroniques Λ et Λ' .

I_0 est le courant de sortie des électrons. Le terme $(1 + \frac{n_q}{n_g})$ représente l'influence du quenching; avec n_g et n_q , les densités de gaz et de quenching.

$$\text{Si } n_g \gg n_q \text{ alors } (1 + \frac{n_q}{n_g}) \text{ tend vers } 1 \text{ et } I \propto n_g \quad Eq. 4-10$$

$$\text{Sinon } I \propto n_g \cdot \left(\frac{1}{1 + \frac{n_q}{n_g}} \right)$$

On verra plus loin que l'intensité I est également proportionnelle au terme $n_s \cdot \Lambda' K_S$ représentant la contribution des électrons secondaires de la probabilité d'excitation électronique $R_{\Lambda\Lambda'}$ (Eq. 4-18).

Nous allons simuler l'intensité d'une raie d'émission à la longueur d'onde $\lambda_{\Lambda',v',k'}^{\Lambda,v,k}$

Si on se limite aux transitions vibrationnelles (c'est le cas lorsque l'on ne veut déterminer que la température de vibration), on va sommer tous les facteurs de branchement et l'expression de l'intensité des raies de vibration devient alors :

$$I_{\nu'} = I_0 \cdot n_g \cdot \left[\frac{q_{\nu'} \cdot \sum_{k=0}^{\max} n_{\nu'k} \cdot q_{\nu'k} \cdot R_{\nu'k}}{1 + \frac{n_g}{n_q}} \right] \quad \text{Eq. 4-11}$$

L'intensité de la raie de fluorescence donnée ci-dessus est mono-fréquence. On doit ensuite tenir compte du profil d'intensité répartie sur des fréquences autour la fréquence centrale. Ce profil résulte des divers phénomènes d'élargissement que nous allons maintenant détailler.

Nous développerons Eq. 4-11 et tous les paramètres impliqués dans le reste du chapitre avant de présenter le code de calcul de l'intensité de fluorescence dans le paragraphe 4.1.11.

4.1.3.2 L'élargissement de raie

Une raie est caractérisée par son maximum d'intensité $I_{\nu'}^{\text{MAX}}$ et par sa largeur à mi-hauteur $\Delta\nu$ représentés sur la Figure 4.3 :

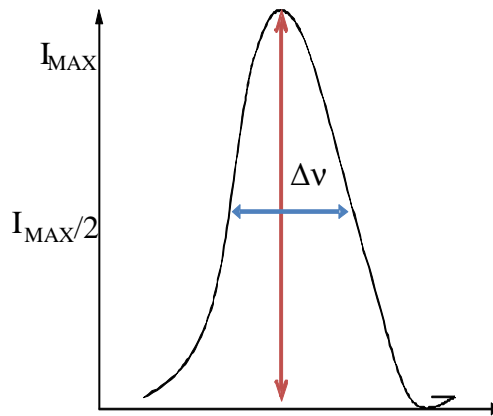


Figure 4.3

Elargissement d'une raie de fluorescence $\Delta\nu$ représente la largeur à mi-hauteur à une fréquence centrale ν_0 .

Il existe différents facteurs d'élargissement [4.7] :

- **L'élargissement naturel** On peut aisément comprendre que la longueur d'onde associée à une transition ne sera pas unique mais donnée par un profil faisant intervenir les incertitudes dans les énergies des niveaux en jeu. Dans nos conditions expérimentales, cet élargissement est négligeable devant les autres (environ 10 MHz pour les fréquences optiques).
- **L'élargissement par collisions (élargissement Lorentzien)** La collision entre particules (atomes ou molécules) modifie légèrement leurs niveaux énergétiques, d'où un élargissement du profil d'une raie. Cet effet est proportionnel à la pression du gaz au premier ordre et dépend aussi dans une moindre mesure de l'inverse de la température. Cet élargissement est représenté par f_L dans l'équation Eq. 4-12.
- **L'élargissement Doppler** L'effet Doppler provoque un décalage vers le rouge ou vers le bleu du rayonnement selon que la source s'éloigne ou se rapproche de l'observateur. Dans un gaz, toutes les particules sont en mouvement, ce qui provoque un élargissement des raies spectrales. Cet élargissement est gaussien car la distribution des vitesses est Maxwellienne de constante proportionnelle à T. Plus la température du gaz est élevée, plus les différences de vitesse sont grandes, et plus les raies sont larges. Cet effet est typiquement 100 fois plus intense que l'élargissement naturel (environ 1 GHz à 300 K). Cet élargissement est représenté par f_D dans l'Eq. 4-12.
- **L'élargissement de Voigt** prend en compte à la fois des effets de collisions et de vitesses, et la fonction de Voigt associée est une convolution des fonctions Doppler et Lorentz donnée par :

$$f_{voigt}(\sigma, P, T) = f_D(\sigma) \otimes f_L(\sigma) \quad \text{Eq. 4-12}$$

avec $f_D(\sigma, T) = \frac{1}{\alpha_D \sqrt{\pi}} \cdot e^{-\frac{(\sigma - \sigma_0)^2}{\alpha_D^2}}$, $f_L(\sigma, P, T) = \frac{1}{\pi} \cdot \frac{\alpha_D}{(\sigma - \sigma_0)^2 + \alpha_L}$ et où σ est le nombre d'onde en cm^{-1} , $\alpha_D = \frac{\sigma_0}{c} \cdot \sqrt{\frac{2 \cdot K \cdot T}{m}}$ et $\alpha_L = \sum_i \alpha_L^{i0} \cdot \frac{P_i}{P_0} \cdot \left(\frac{T_0}{T}\right)^{y_i}$, $y_i=0,5$, α_L^i , P_i et sont des paramètres de

l'espèce i , T la température de translation ou cinétique. Hui [4.15] donne une expression simplifiée :

$$f_{\text{voigt-hui}}(\sigma, P, T) = \frac{1}{\alpha_D \pi} \cdot \text{Re}(W(z)) \quad \text{avec } W(z) = \frac{i}{\pi} \cdot \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{e^{-t^2}}{z-t} dt \quad \text{Eq. 4-13}$$

$$\text{où } t = \frac{\sigma - \sigma_0}{\alpha_D} \text{ et } z = \frac{\sigma - \sigma_0}{\alpha_D} + i \frac{\alpha_L}{\alpha_D}$$

4.1.3.3 La fonction d'appareil et la réponse spectrale

La fonction d'appareil est la fonction de transfert du spectromètre, notée f_{app} . Elle est mesurée en traçant la courbe de transmission obtenue en balayant le spectre sur la fente de sortie, la fente d'entrée étant éclairée par une radiation monochromatique (convolution avec f_{app}). La largeur et la forme de la fonction d'appareil dépendent principalement des largeurs des fentes. C'est la largeur de la fonction d'appareil qui définit le pouvoir de résolution du spectromètre.

La réponse spectrale f_s , ou transmission spectrale, d'un spectromètre quantifie l'efficacité à mesurer une intensité lumineuse à chaque longueur d'onde (sur une largeur spectrale définie par la fonction d'appareil). Cette efficacité dépend de la réponse spectrale du photo-détecteur et de la transmission spectrale des optiques du spectromètre. Cette correction de réponse spectrale doit être prise en compte dans le spectre pour pouvoir restituer correctement les intensités relatives des raies ou bandes de fluorescence qui conditionnent les mesures de densité et de température de vibration. L'impact est moindre pour la température de rotation car souvent cette réponse spectrale est pratiquement constante sur la plage spectrale restreinte contenant la structure rotationnelle à exploiter. La correction consiste à diviser scalairement le spectre acquis par cette réponse spectrale f_s à chaque longueur d'onde.

L'expression de l'intensité de fluorescence de l'Eq. 4-11 devient ainsi :

$$I_{\Lambda''\nu''}^{\Lambda'\nu'} = I_0 \cdot n_g \cdot \left[\frac{q_{\nu'\nu''} \cdot \sum_{\Lambda\nu k}^{max} n_{\Lambda\nu k} \cdot q_{\nu\nu'} \cdot R_{\Lambda\Lambda'}}{1 + \frac{n_q}{n_g}} \right] \cdot f_{voigt-hui}(\sigma, P, T) \otimes f_{app} \cdot f_s \quad Eq. 4-14$$

4.1.4 La distribution Boltzmannienne de population :

A l'équilibre thermodynamique, la répartition des populations sur les niveaux de la molécule suit une distribution de Boltzmann. Dans ce cas, si on a un ensemble de molécules de population totale N , l'expression de la population N_i sur un niveau i , d'énergie E_i , est donnée par :

$$N_i = \frac{N}{Q} \cdot e^{\left(-\frac{E_i}{k_B T}\right)} \quad Eq. 4-15$$

où, T , est la température de Boltzmann définie intrinsèquement par cette relation, k_B est la constante de Boltzmann et $Q = \sum_i e^{\left(-\frac{E_i}{k_B T}\right)}$ est le facteur de normalisation appelé fonction de partition.

L'approximation de Born-Oppenheimer ([4.9] et [4.10]) permet de développer cette distribution à l'aide des distributions partielles sur les niveaux électroniques, vibrationnels et rotationnels. On obtient :

$$n_{\Lambda\nu k} \approx n(\Lambda) \cdot n(\Lambda\nu) \cdot n(\Lambda\nu k) \quad Eq. 4-16$$

$$n(\Lambda) = \frac{e^{\left(-\frac{E(\Lambda)}{k_B T}\right)}}{Q_\Lambda} \quad n(\Lambda\nu) = \frac{g_\nu \cdot e^{\left(-\frac{E(\Lambda,\nu)}{k_B T_\nu}\right)}}{Q_{\Lambda\nu}} \quad n(\Lambda\nu k) = \frac{g_k \cdot e^{\left(-\frac{E(\Lambda,\nu,k)}{k_B T_R}\right)}}{Q_{\Lambda\nu k}} \quad Eq. 4-17$$

$g_v = 1$ et $g_k = 2k + 1$ sont les facteurs de dégénérescence de la vibration et de la rotation respectivement. $Q_{\Lambda v} = \sum_v g_v \cdot \exp(-\beta_v \cdot E(\Lambda, v))$ et $Q_{\Lambda v k} = \sum_k g_k \cdot \exp(-\beta_k \cdot E(\Lambda, v, k))$ sont les fonctions de partition avec : $\beta_v = \frac{1}{k_B T_v}$ et $\beta_k = \frac{1}{k_B T_R}$.

4.1.5 La probabilité d'excitation

L'excitation à partir du niveau fondamental par un faisceau d'électrons se traduit par des transitions vers les niveaux excités. La probabilité de ces transitions est donnée par :

$$R_{\Lambda\Lambda'} = n_p \cdot v_p \cdot \sigma_{\Lambda\Lambda'}(E_p) + n_s \cdot \Lambda' K_S \quad \text{Eq. 4-18}$$

où n_p, v_p, E_p sont respectivement la densité, la vitesse et l'énergie des électrons primaires, $\sigma_{\Lambda\Lambda'}(E_p)$ la section efficace d'excitation, n_s et $\Lambda' K_S$ la densité des électrons secondaires et les coefficients de transitions de ces derniers.

4.1.6 Les facteurs Franck-Condon

Les facteurs Franck-Condon (FC) sont des facteurs de branchements entre populations vibrationnelles d'un même état électronique. Pour les molécules, ces coefficients ont pour expression le carré du module de l'intégrale dite de recouvrement entre les deux états vibrationnels [4.11] :

$$q_{vv'} = \left| \int_0^\infty \psi_v \psi_{v'} dr \right|^2 \quad \text{Eq. 4-19}$$

ψ_v et $\psi_{v'}$ sont des fonctions d'onde vibrationnelles correspondant respectivement aux niveaux vibrationnelles v et v' des niveaux électroniques fondamentaux et excités.

Les fonctions d'ondes ψ_v et $\psi_{v'}$ de ces deux niveaux sont les solutions de l'équation de Schrödinger. Des méthodes numériques de calcul de ces fonctions d'onde ont été proposées par Cooley et Numerov [4.20]. Les coefficients sont tels que :

$$\sum_{v=0}^{v_{max}} q_{vv'} = \sum_{v'=0}^{v'_{max}} q_{vv'} = 1 \quad \text{Eq. 4-20}$$

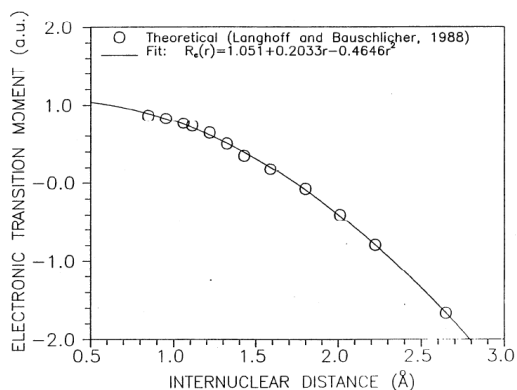
Ils sont donnés par Herzberg [4.17], NIST [4.18] et Gilmore [4.19]. Nous utiliserons des valeurs tabulées pour les gaz étudiés dans la suite.

4.1.7 Le moment de transition électronique

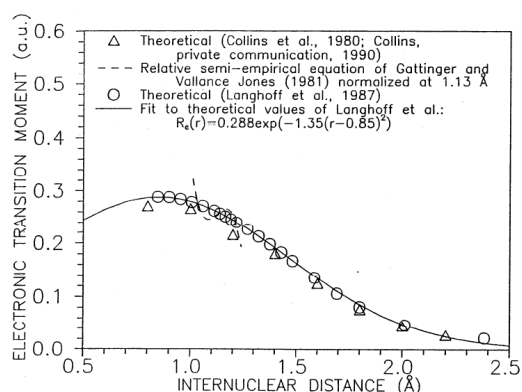
Considérons une molécule diatomique. Le moment dipolaire de transition électronique s'écrit :

$$R_e(r) = C \cdot \exp(a; (r - b)^2) \text{ ou } R_e(r) = C \cdot (a + b \cdot r + c \cdot r^2) \quad \text{Eq. 4-21}$$

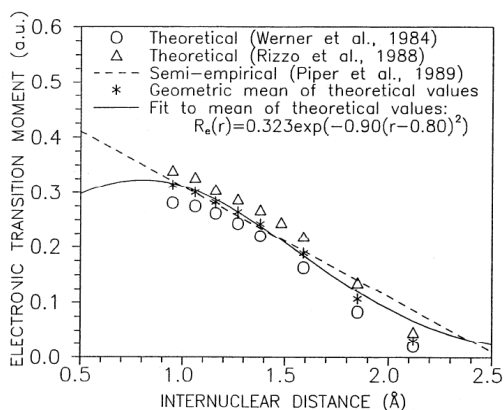
où r est le rayon internucléaire, a , b , c et C des constantes propres aux transitions. Les figures ci-dessous représentent la variation du moment de transition électronique en fonction du rayon internucléaire :



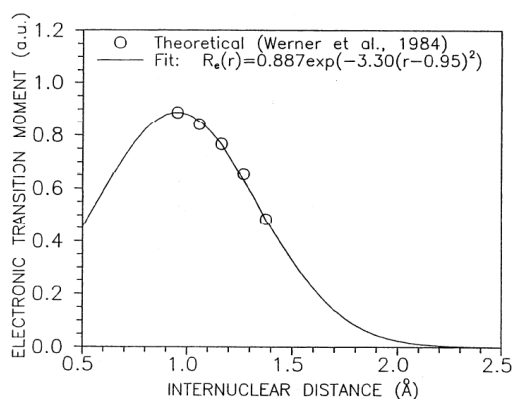
(a) Transition électronique : $N_2^+-B^2-X^2$



(b) Transition électronique : $N_2^+-A^2-X^2$



(c) Transition électronique : $N_2-B^3-A^3$



(d) Transition électronique : $N_2-C^3-B^3$

Figure 4.4

Moment dipolaire de quelques transitions électroniques de N_2 ((a) et (b)) et N_2^+ (c) et (d)) en fonction de la distance internucléaire. Comparaison entre différents auteurs et détermination de la valeur théorique en fonction de la distance internucléaire [4.23]

Lorsqu'on étudie les transitions vibrationnelles, on s'intéresse aux mouvements internes de la molécule car le rayon internucléaire subit des modifications. On note ainsi $r_{v',v''}$ le rayon internucléaire de la transition vibrationnelle $v' \rightarrow v''$, $r_{v',v''}$ est également désigné sous le nom de *r-centroid*.

$r_{v'v''}$, le rayon internucléaire de la transition vibrationnelle $v' \rightarrow v''$, s'écrit :

$$r_{v'v''} = \frac{\int_0^\infty \psi_{v'} r \psi_{v''} dr}{\int_0^\infty \psi_{v'} \psi_{v''} dr} \quad \text{Eq. 4-22}$$

4.1.8 La durée de vie radiative

La durée de vie radiative correspondant à la durée de vie d'une molécule dans le niveau v' excité, s'exprime par :

$$\frac{1}{\tau_{v'}} = C \cdot \sum_{v''} q_{v'v''} \cdot \lambda_{v'v''}^{-3} \cdot R_e(r_{v'v''}) = \sum_{v''=0}^{v''_{\max}} A_{v'v''} = A_{v'} \quad \text{Eq. 4-23}$$

où $A_{v'}$ représente la probabilité de transition vibrationnelle du niveau v' et où $A_{v'v''}$ représente la probabilité de transition vibrationnelle entre les deux niveaux v' et v''

4.1.9 Les probabilités de transitions vibrationnelles

Le changement de population entre les niveaux excités v' et désexcités v'' s'exprime par :

$$\frac{dn_{v'v''}}{dt} = n_{v'} \cdot A_{v'v''} \quad \text{Eq. 4-24}$$

avec

$$A_{v'v''} = \frac{64\pi^4 \cdot C^3}{3h \cdot \lambda_{v'v''}^3} \cdot \frac{1}{d.u} \cdot (\langle \psi_{v'} | R_e(r) | \psi_{v''} \rangle^2) \quad \text{Eq. 4-25}$$

On a également en première approximation :

$$\sum_{v''=0} A_{v'v''} \cong q_{v'v''} \cdot \lambda_{v'v''}^3 \quad \text{Eq. 4-26}$$

ou encore :

$$R_e(r_{v'v''}) = \left[\frac{\text{const.} \cdot A_{v'v''}}{v_{v'v''}^3 \cdot q_{v'v''}} \right]^2 \quad \text{Eq. 4-27}$$

4.1.10 Les facteurs de branchement entre états rotationnels

Il y a deux types de facteurs de branchement : $P_{kk'}$ pour l'excitation et $P_{k'k}$ pour la désexcitation. Les équations suivantes donnent les expressions de ces facteurs [3.6] dans le cas de N_2 par exemple (modèles de Smith [1.20] et Lengrand [1.21]) :

$$P_{kk'} = Y_{kk'} \cdot \frac{L \cdot C_{\Delta k} + \delta}{L + 1} \quad \text{Eq. 4-28}$$

avec

$$\delta = \begin{cases} 1 & \text{si } \Delta k = 1 \\ 0 & \text{si } \Delta k \neq 1 \end{cases} \quad L = \left(\frac{n_i}{n_1} \right)^{1/2} \cdot \left(\frac{T_1}{T_t} \right)^{7/5} \quad \text{Eq. 4-29}$$

Et 0 si $\Delta k \neq 1$

$$Et Y_{kk'} = \frac{\langle k|X^{\Delta k}|k'\rangle}{\langle k|X^{\Delta k}|k+\Delta k\rangle + \langle k|X^{\Delta k}|k-\Delta k\rangle} \text{ si } \Delta k \text{ est impair}$$

$$0 \text{ si } \Delta k \text{ est pair}$$
Eq. 4-30

$$\text{et } \langle k|X^{\Delta k}|k+\Delta k\rangle \prod_{i=0}^{\Delta k-1} \frac{k+i+1}{2(k+i)+1}$$

$$\langle k|X^{\Delta k}|k-\Delta k\rangle \prod_{i=0}^{\Delta k-1} \frac{k-i}{2(k-i)+1}$$

où $\Delta k = k' - k$, $n_1 = 10^{16}$, $T_1 = 300K$, $T_t = T$ et n_i , la densité partielle de gaz.

$$P_{k'k''} =$$
Eq. 4-31

$$\frac{k'+1}{2k'+1} \text{ si } \Delta k = 1$$

$$\frac{k'}{2k'+1} \text{ si } \Delta k = -1$$

$$\frac{k'+1}{2k'+1} \text{ si } \Delta k = 1$$

0 sinon

Et avec

$$\sum_{k'} P_{k'k''} = 2k'' + 1 \text{ et } \sum_{k''} P_{k''} = 2k' + 1$$

4.1.11 Les programmes de simulation *SPECVIB* et *SPECROT*

Les programmes *SPECVIB* et *SPECROT* ont été mis au point pour simuler les bandes vibrationnelles et rotationnelles des différents gaz étudiés. Le code *SPECVIB* permet de simuler le spectre de vibration des molécules à partir de l'équation Eq. 4-11 sans la structure rotationnelle.

Le code *SPECROT* est une extension de *SPECVIB* qui permet de simuler la structure rotationnelle. Il prend en compte les facteurs de branchement entre les différents niveaux de rotation et des règles de sélection rotationnelles (section §4.1.10). On étudie en général la structure rotationnelle des bandes de vibration les plus intenses car leurs constantes sont mieux connues dans la littérature et plus facile à vérifier expérimentalement du fait de leur bon rapport signal sur bruit.

Les paramètres d'entrée de ces programmes sont les constantes moléculaires mais aussi les conditions expérimentales de mesure telles que la pression et la température. Les constantes rotationnelles et probabilités de transitions sont aussi extraites des tables de Herzberg et NIST (*Annexes E / Constantes Moléculaires*).^{2,3}

On distingue deux types de paramètres d'entrées pour ces programmes :

- les paramètres propres à la ou les molécules (constantes moléculaires) qui permettent de calculer les longueurs d'onde des transitions et les intensités
- les paramètres de l'expérience tels que l'énergie des électrons du faisceau, le temps d'acquisition ou encore de la densité de gaz ou la température.

Nous avons aussi étudié l'influence de la variation d'une ou de plusieurs constantes sur l'ensemble des constantes à l'intérieur d'un même système de bandes vibrationnelles ou rotationnelles. La validation de ces codes de simulation se fait comparaison avec des spectres expérimentaux acquis, soit en caisson à vide en statique, soit en soufflerie aérodynamique.

Les tables de Herzberg [4.17], NIST [4.18] ou Gilmore [4.19] fournissent les constantes et paramètres pour nombre de transitions vibrationnelles et rotationnelles de nombre de molécules. Pour rappel ces paramètres sont :

Chapitre IV: Spectroscopie vibrationnelle et rotationnelle

- Le coefficient FC
- Le moment de transition électronique
- Le coefficient d'Einstein ou probabilité de transition
- Le rayon internucléaire de transition vibrationnelle.

A partir de ces constantes on calcule :

- La longueur d'onde centrale d'une transition ou le nombre d'onde de transition
- L'intensité de fluorescence

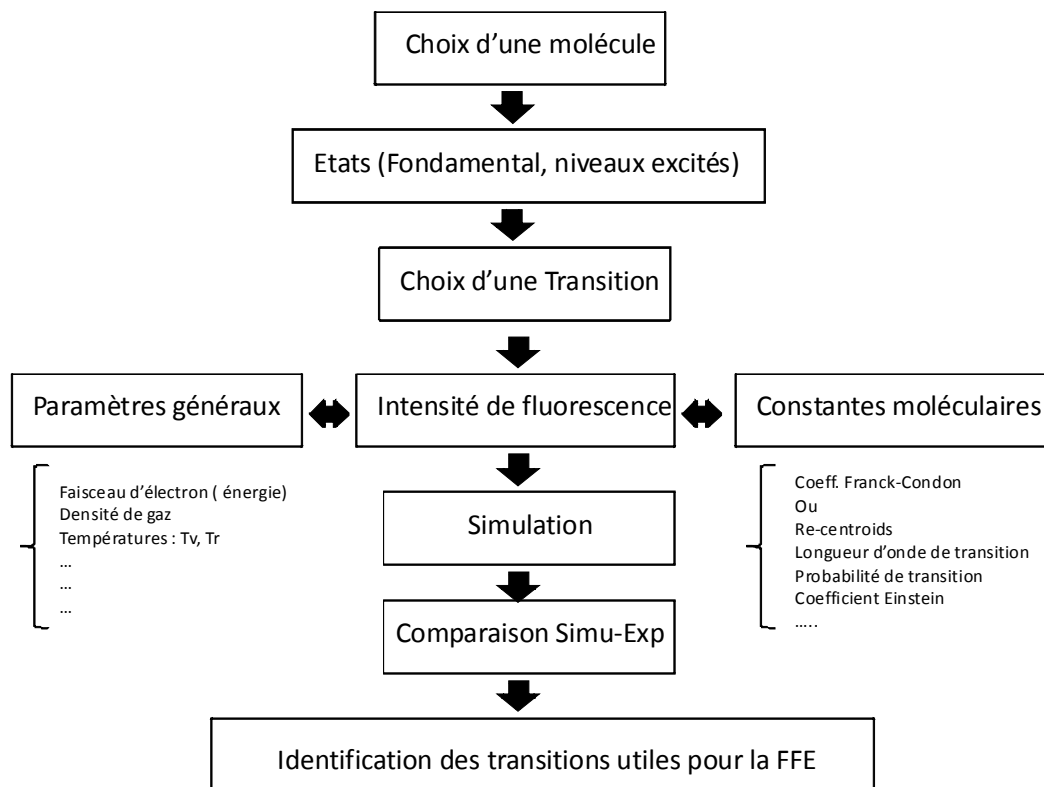


Figure 4.5

Diagramme de procédure de simulation

4.2 Validation expérimentale dans une enceinte en statique

La validation des codes de simulation *SPECVIB* et *SPECROT* s'est faite par comparaison avec des spectres expérimentaux de fluorescence obtenus pour différents gaz purs et mélanges de gaz. Le choix des gaz étudiés, N_2 , NO , CO et CO_2 , est fait par rapport à leur intérêt dans l'étude de la rentrée atmosphérique terrestre ou martienne. Cette comparaison permet aussi de valider les paramètres d'entrée (constantes moléculaires) qui donnent le meilleur fit.

Conditions expérimentales

Le prototype *EGUN* v.1 a été utilisé pour des tests en caisson à vide sur des gaz purs et mélanges en chambre à vide (Figure 4.6). Le but de ces tests est d'une part, de valider le fonctionnement de ce prototype sous vide et, d'autre part, de valider les codes de simulation des spectres de fluorescence des différents gaz étudiés.

Les gaz sont introduits directement dans le caisson et des débitmètres massiques sont utilisés pour ajuster la pression de chaque gaz, lorsque des mélanges de gaz sont utilisés. Des pompes primaires permettent d'évacuer le gaz et de faire un vide initial au remplissage dans la chambre d'ionisation. L'ensemble est maintenu à température ambiante (293 K). La pression est contrôlée tout au long des mesures à des valeurs situées entre 10^{-3} et 1 mbar; ce qui correspond à des pressions caractéristiques d'altitudes comprises entre 70 et 50 km.

Le prototype *EGUN* v.1 est utilisé avec les conditions suivantes :

- La tension du faisceau d'électrons est fixée à 14 kV \pm 0.2 kV avec un temps de stabilisation de l'ordre de la minute.
- Le courant de faisceau mesuré est de l'ordre du milli ampère (1 mA). Une cage de Faraday placée à l'intérieur du caisson, permet de mesurer le courant du faisceau après la traversée d'environ 30 cm de gaz.
- Pour analyser la fluorescence, nous avons utilisé un spectromètre Princeton avec des réseaux à 300, 1200 et 2400 traits, de transmission maximale à 500 nm, 300 nm et 240 nm respectivement et deux spectromètres HR4000 d'Ocean Optics® et Bwtec® moins

résolvants. Des détails techniques sur les différents composants utilisés peuvent être trouvés dans *Annexes F/ Courbe de transmission de quelques matériaux*.

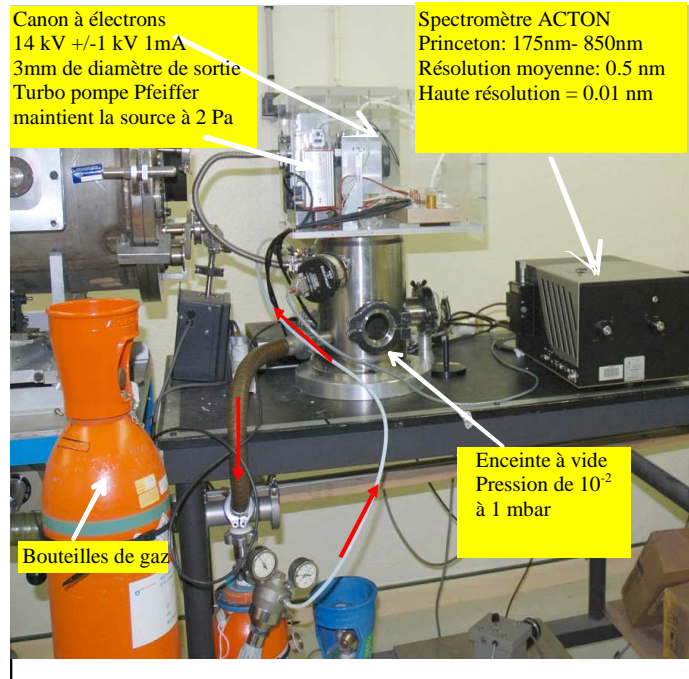


Figure 4.6

Mini-chambre à vide utilisée pour l'analyse spectroscopique de divers mélanges gazeux

- Les spectromètres ont été calibrés en longueur d'onde grâce à une lampe à mercure et en intensité avec une lampe Deutérium-Halogène. La Figure 4.7 donne la réponse spectrale du réseau de 2400 traits. L'intensité est maximale à 525 nm mais peut diminuer jusqu'à - 70 % en dessous de 200 nm d'où l'importance de corriger le spectre de fluorescence de CO car sa bande principale se trouve précisément dans cette zone u.v.
- Avant toute comparaison avec les simulations, les spectres bruts sont traités avec les trois procédés suivants :
 - ✓ soustraction du bruit de fond à l'aide de spectres enregistrés (faisceau éteint)
 - ✓ étalonnage en longueur d'onde avec le peigne des raies de la lampe au mercure

- ✓ étalonnage en intensité en utilisant la lampe Deutérium-Halogène.
- Une correction en réponse est ainsi réalisée pour chaque spectre acquis. La courbe de correction pour le réseau de 2400 traits est donnée en Figure 4.7
- Cette courbe de réponse est réalisée par jonction de deux portions correspondant à la réponse déterminée grâce à une lampe au Deutérium (gamme spectrale entre 150 et 400 nm) et de la réponse déterminée grâce à une lampe halogène (gamme spectrale entre 400 et 800 nm). L'ensemble des courbes de réponse est normalisé.

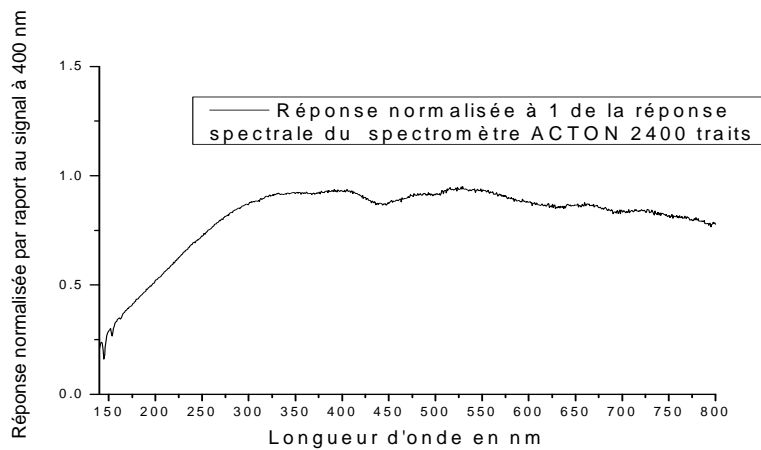


Figure 4.7

Réponse spectrale du réseau de 2400 traits du spectromètre ACTON normalisée à la longueur d'onde 500 nm

4.3 Résultats

On a étudié la fluorescence de différents gaz et mélanges avec le dispositif expérimental de la Figure 4.6. Cette partie est consacrée uniquement à l'étude et à l'identification des différentes transitions vibrationnelles et rotationnelles enregistrées en statique dans le caisson d'essais.

4.3.1 Le diazote (N_2)

Le diazote (N_2) est un composant récurrent des gaz de rentrée atmosphérique puisqu'il se trouve à 78 % sur la *Terre*, à 3 % dans l'atmosphère de *Mars* et à 4 % sur l'atmosphère de *Venus*. La molécule de N_2 a une structure de type C_∞ (*Annexes D/ Configuration électronique des atomes et molécules*). L'excitation par un faisceau d'électrons produit une fluorescence des transitions vibrationnelles de N_2 et de celles de l'ion N_2^+ qui couvrent la zone u.v-visible.

Il s'agit de systèmes vibrationnels assez connus (Figure 4.8 : transitions en bleu) et déjà étudiés par des auteurs comme Muntz, Lengrand, Mohamed [0.1] à [0.7]. L'excitation de ce gaz par la technique de *FFE* produit essentiellement les transitions correspondant au :

- premier système négatif : $N_2^+, B^2\Sigma_u^+ \rightarrow N_2^+, X^2\Sigma_g^+$, noté N_2^+IN qui est la bande principale centrée à 391,14 nm et dont la séquence vibrationnelle s'étend entre 350 nm et 450 nm
- premier système positif : $N_2, B^3\Pi_g \rightarrow N_2, A^3\Sigma_u^+$, noté N_2IP centré à 1046,39 nm qui n'est pas dans notre gamme d'étude.
- second système positif : $N_2, C^3\Pi_g \rightarrow N_2, B^3\Pi_g$ noté N_22P centré à 337 nm

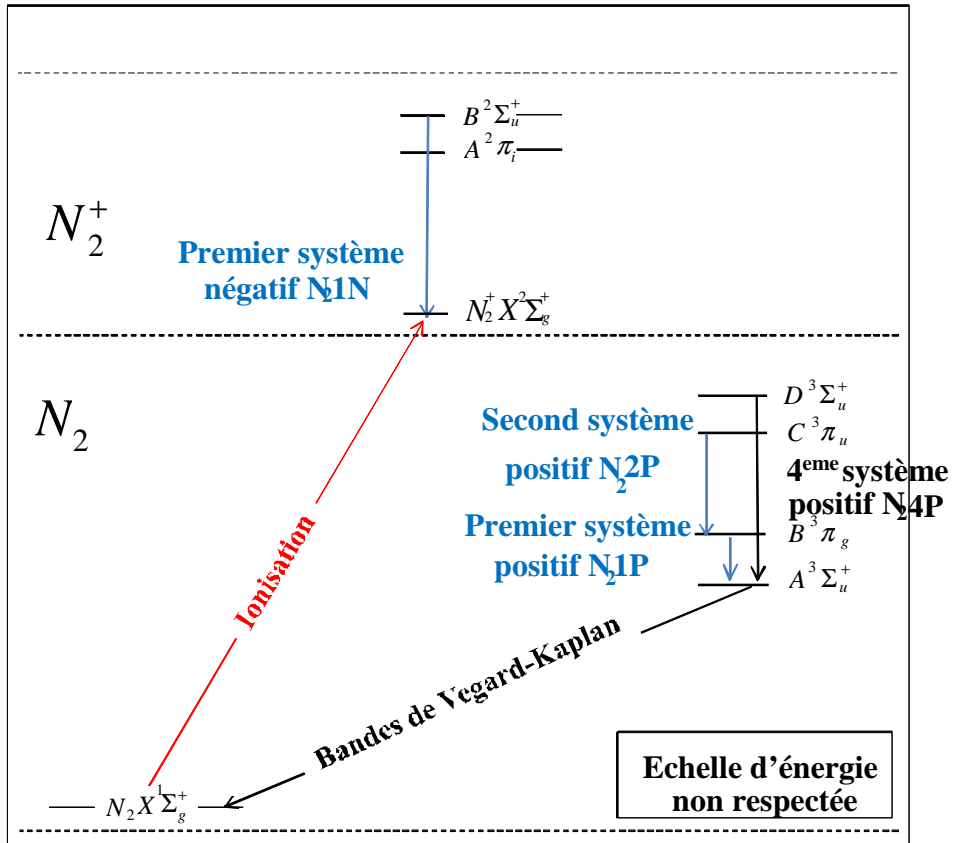


Figure 4.8

Diagramme des niveaux d'énergies des transitions électroniques de N_2 et N_2^+

Sur la Figure 4.9, les séquences vibrationnelles enregistrées dans N_2 pur à 0,012 mbar, sont comparées à une simulation des bandes de vibration du premier système négatif (N_2^+IN) et du deuxième système positif (N_2^2P) dans les mêmes conditions expérimentales. Le faisceau d'électrons est de l'ordre de 14 keV et le temps d'acquisition de 1 seconde.

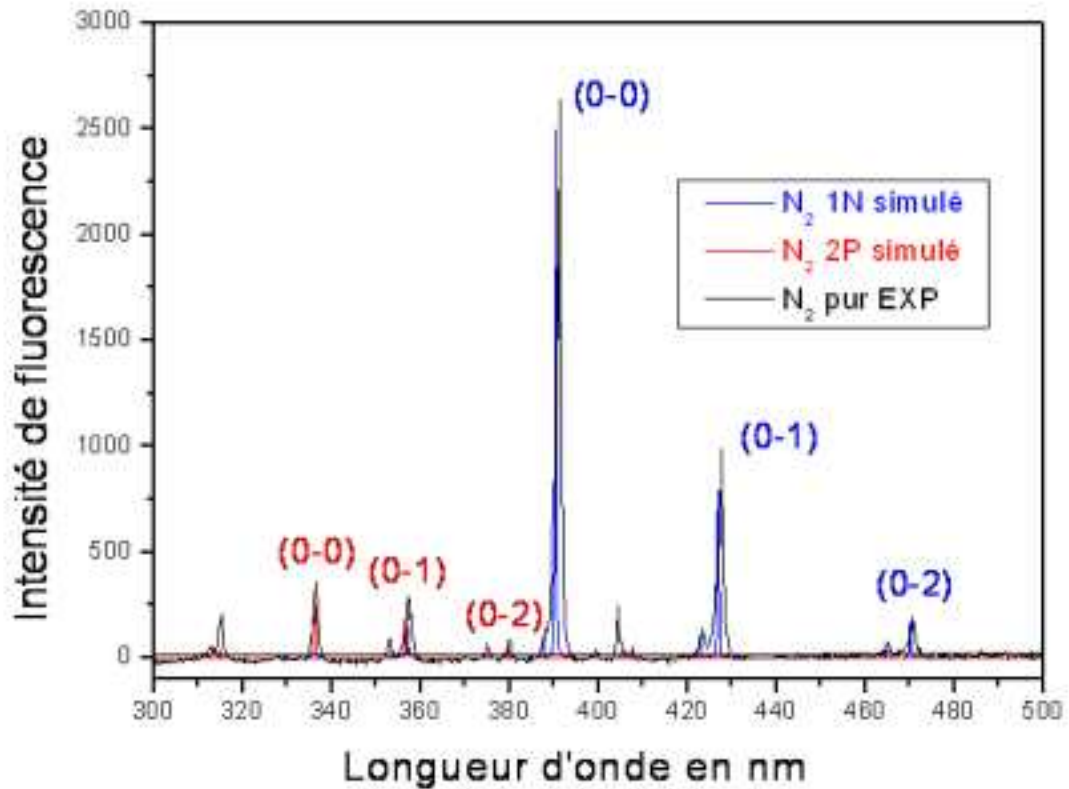


Figure 4.9

Spectre de fluorescence de N_2 pur à une pression de $1.2 \cdot 10^{-2}$ mbar, faisceau d'électrons $14keV$ et temps d'acquisition 1 seconde : Identification des bandes de vibration $N_2 1N$ et $N_2 2P$

La bande principale à 391,14 nm correspond à la transition vibrationnelle $N_2^+, B^2\Sigma_u^+ \rightarrow N_2^+, X^2\Sigma_g^+$ (0-0). Il y a également la bande correspondant à la séquence vibrationnelle (0-1) du premier système négatif à 427 nm et celle correspondant à la transition (1-0) à 358 nm. Le deuxième système positif $N_2, C^3\Pi_g \rightarrow N_2, B^3\Pi_g$ quant à lui, a sa bande principale (0-0) à 337 nm, sa bande (0-1) à 357 nm et (1-0) à 315 nm. Le Tableau 4-1 regroupe les données de nos mesures sur les différentes bandes de vibration de ces deux systèmes :

$N_2^+, B^2\Sigma_u^+ \rightarrow N_2^+, X^2\Sigma_g^+$						$N_2, C^3\Pi_g \rightarrow N_2, B^3\Pi_g$					
Band	Band origin (nm)	Relative Intensity	Band	Band origin (nm)	Relative Intensity	Band	Band origin (nm)	Relative Intensity	Band	Band origin (nm)	Relative Intensity
0-0	391,14		2-0	330,62		0-0	337,04		2-0	297,67	
0-1	427,44		2-1	356,18		0-1	357,55		2-1	313,55	
0-2	470,37		2-2	385,5		0-2	380,25		2-2	330,88	
0-3	521,91		2-3	419,46		0-3	405,54		2-3	349,86	
0-4	585,00		2-4	459,25		0-4	433,86		2-4	370,74	
1-0	357,99		3-0	307,67		1-0	315,85		3-0	382,01	
1-1	388,16		3-1	329,69		1-1	333,79		3-1	396,23	
1-2	423,24		3-2	354,66		1-2	353,50		3-2	311,65	
1-3	464,52		3-3	383,20		1-3	375,25		3-3	328,43	
			3-4	416,14		1-4	399,38		3-4	346,76	

Tableau 4-1

Données expérimentales (intensités relatives et longueur d'onde centrale) des différentes bandes de vibration des systèmes $N_2^+, B^2\Sigma_u^+ \rightarrow N_2^+, X^2\Sigma_g^+$ et $N_2, C^3\Pi_g \rightarrow N_2, B^3\Pi_g$

En utilisant le réseau de 2400 traits qui offre la meilleure résolution, on observe la structure rotationnelle de la transition vibrationnelle (0-0) du premier système négatif : $N_2^+, B^2\Sigma_u^+ \rightarrow N_2^+, X^2\Sigma_g^+$ ($v' = 0 \rightarrow v'' = 0$) (Figure 4.10).

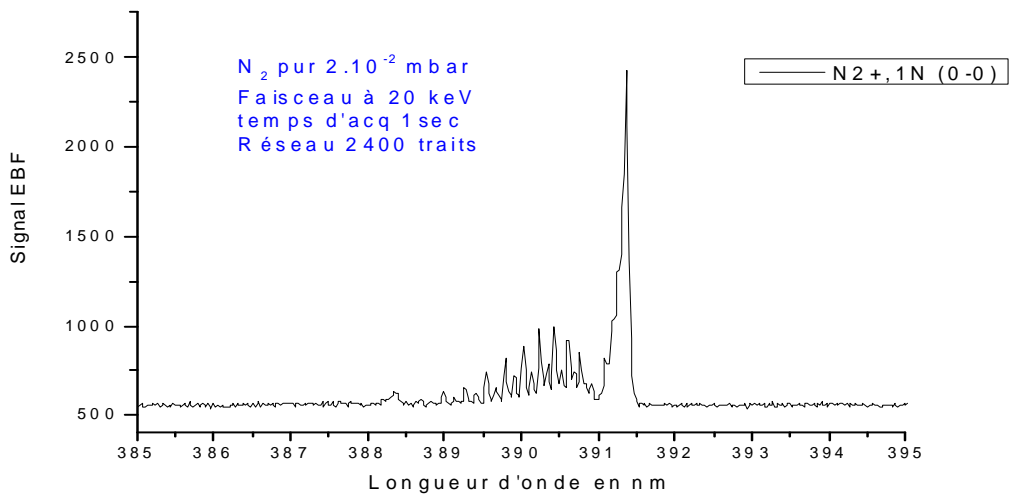


Figure 4.10

Spectre de fluorescence de N_2 pur à 2.10^{-2} mbar : Structure rotationnelle du premier système négatif $N_2^+, B^2\Sigma_u^+ \rightarrow N_2^+, X^2\Sigma_g^+$

En mesures statiques et à température ambiante (300 K), on admet que $T_V=T_R$ (équilibre entre température de vibration et température de rotation) dans le calcul qui sera utilisé pour le spectre simulé aux spectres obtenus expérimentalement. On étudiera également cette structure en écoulement (Chapitre 5).

4.3.2 Le monoxyde de carbone (CO)

Le monoxyde de carbone (CO) est formé par dissociation de CO_2 dans des conditions hors équilibre dans les écoulements. Lago [4.20] a mesuré les taux de formation de CO à partir d'un mélange de composition martienne. Dans le cadre de cette étude nous avons étudié la fluorescence de cette molécule entre 185 nm et 650 nm couvrant ainsi la zone u.v-visible.

Pour la fluorescence de CO et CO^+ , les transitions principales entre différents états vibrationnels et rotationnels, sont indiquées dans la Figure 4.11. Les systèmes vibrationnels les plus connus sont les suivants :

- Premier système négatif de CO^+
- Système de Baldet-Johnson
- Système de Marchand d'Incan-Janin
- Le Comet-tail system
- Les bandes du 4^{ième} positif de CO
- Les bandes du 3^{ième} positif de CO

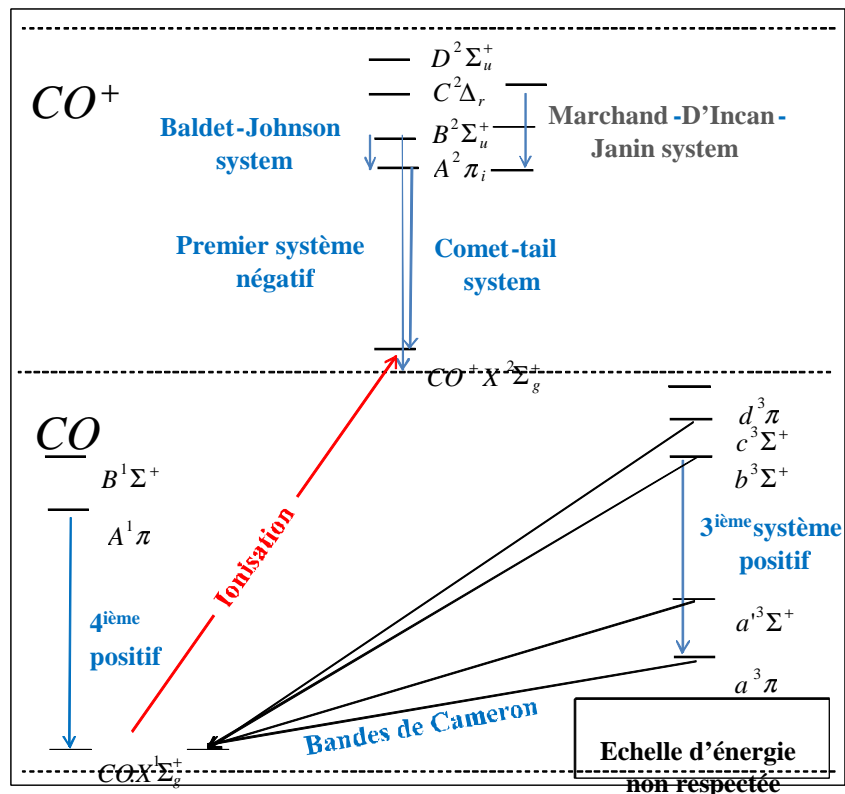
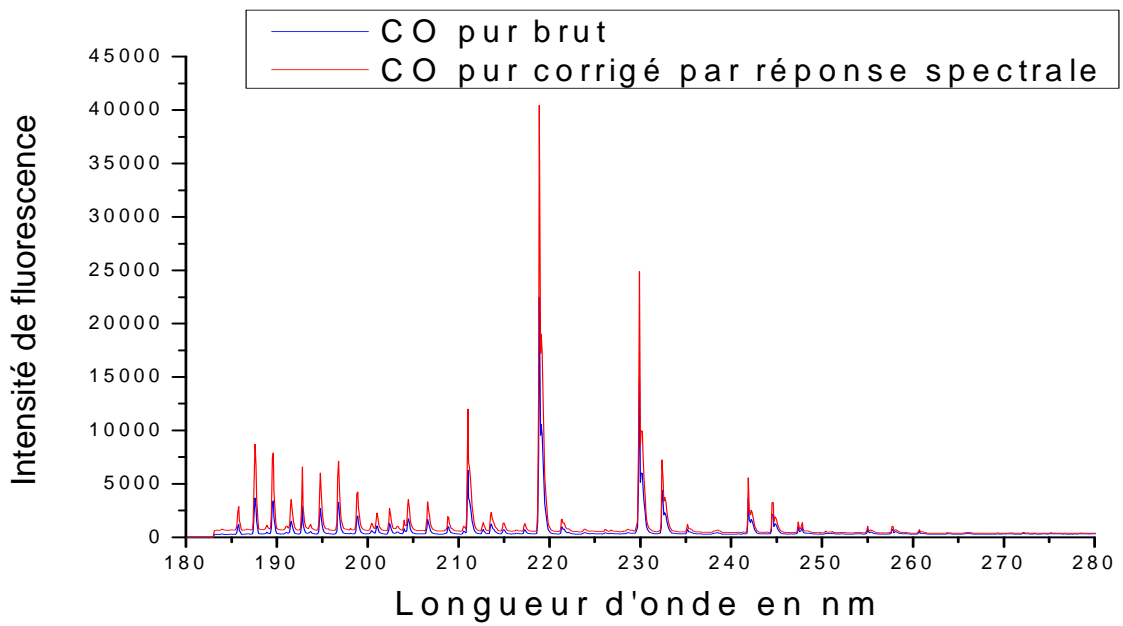


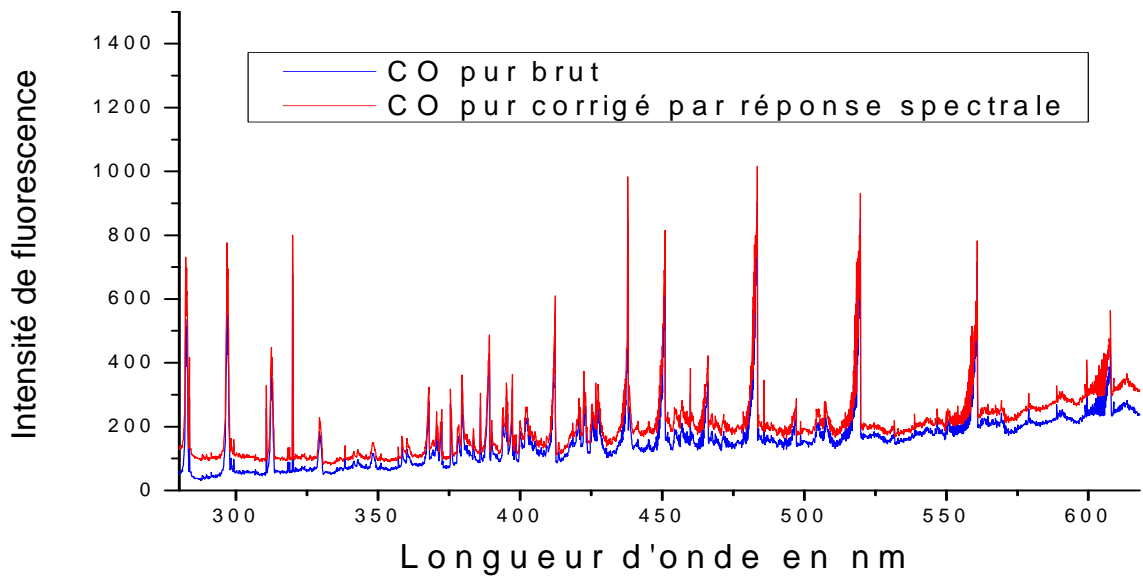
Figure 4.11

Diagramme d'états et de transitions électroniques de CO et CO^+

L'analyse spectrale de la fluorescence de CO s'est faite avec le même dispositif expérimental que pour N_2 . La pression en CO fixée à 10^{-2} mbar; soit une densité de $2,4 \cdot 10^{14}$ molécules. cm^{-3} en statique à 300 K (Figure 4.12 (a) et (b)) :



(a)



(b)

Figure 4.12

Spectre de fluorescence de CO pur à $2,4 \cdot 10^{14}$ molécules.cm⁻³ (10^{-2} mbar) en statique à une température de 300 K : spectre brut et spectre corrigé en longueur d'onde et en réponse spectrale. La correction par la fonction d'appareil est réalisée avec la réponse du réseau de 2400 traits (a) zone 180 nm-280 nm et (b) 280 nm-600 nm (Figure 4.7)

La Figure 4.13 présente une première identification des bandes de vibration issues des transitions électroniques et vibrationnelles de *CO* et *CO⁺* à différentes pressions (10^{-2} mbar, $2 \cdot 10^{-2}$ mbar et $4 \cdot 10^{-2}$ mbar). Les principales bandes de vibration entre 180 nm et 450 nm sont notées.

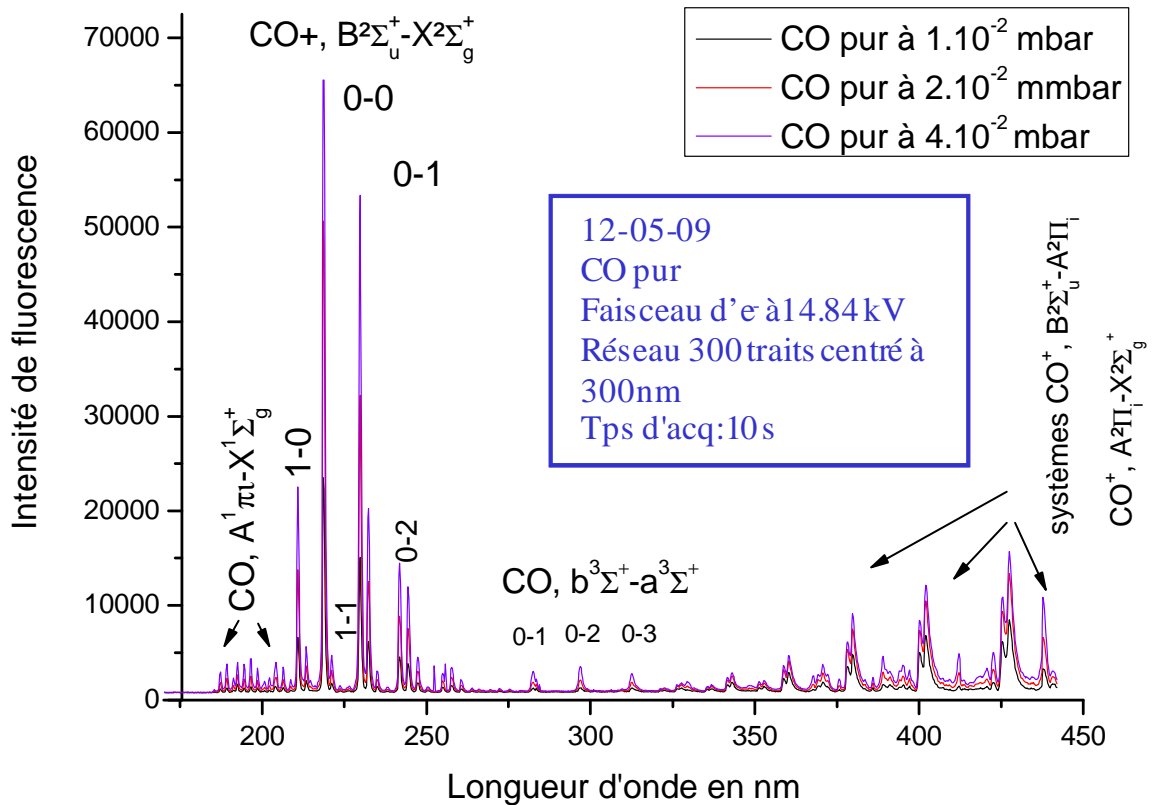


Figure 4.13

Spectre expérimental de fluorescence de CO pur à différentes pressions

La variation de l'intensité de fluorescence avec la pression est mesurée sur les amplitudes maximales des différentes séquences vibrationnelles du premier système négatif (entre 200 et 240 nm).

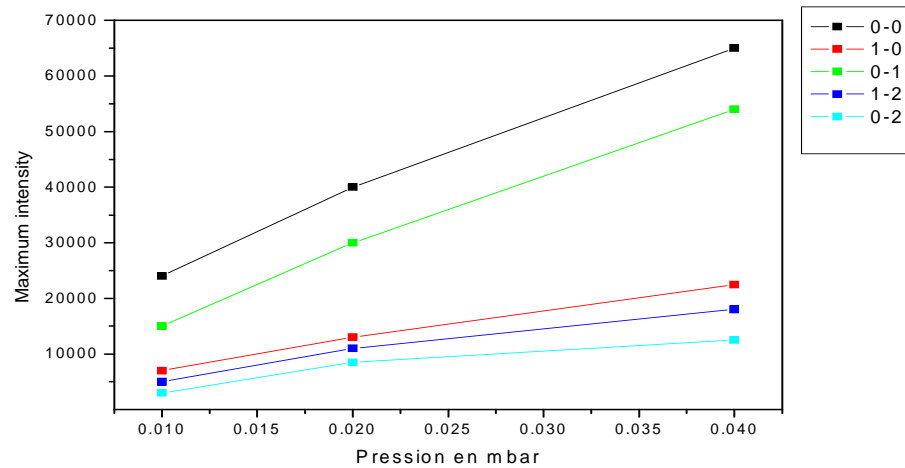


Figure 4.14

Variation de l'intensité de fluorescence en fonction de la densité de gaz : amplitudes maximales des différentes séquences vibrationnelles ((0-0), (1-0), (0-1), (1-2), (0-2)) du système $CO^+, B^2\Sigma_u^+ \rightarrow CO^+, X^2\Sigma_g^+$

En première approximation, on peut dire que l'intensité de fluorescence est proportionnelle à la densité de CO . Les phénomènes de quenching ou de création d'électrons secondaires ne sont pas très importants dans cette gamme de pressions (1 à $4 \cdot 10^{-2}$ mbar).

A des pressions plus élevées, proches de 1 mbar, on commence à observer des non-linéarités (Figure 4.15) sur l'intensité de la bande principale d'émission de l'ion CO^+ .

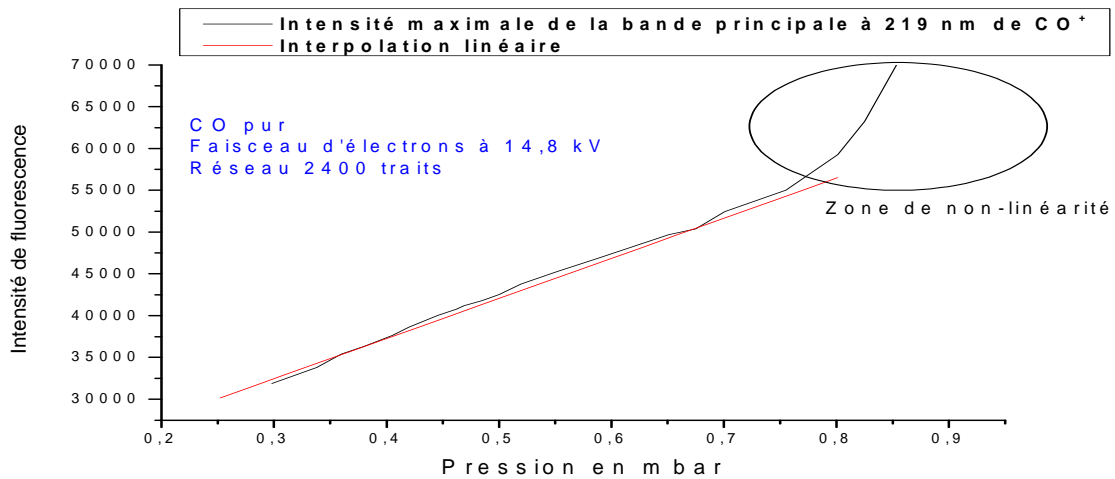


Figure 4.15

Intensité de fluorescence de la bande de vibration $CO^+, B^2\Sigma_u^+ \rightarrow CO^+, X^2\Sigma_g^+$ (0-0) en fonction de la pression de CO

L'intensité de fluorescence n'est plus linéaire en densité au-delà de 0,8 mbar. Cette non-linéarité est due à la fluorescence induite par les excitations dues aux électrons secondaires mais également à la dispersion du faisceau d'électrons.

Nous allons maintenant donner plus de détails pour les différentes transitions vibrationnelles identifiées dans la fluorescence induite par le faisceau d'électrons, peuvent être regroupées en quatre groupes selon leur position entre 185 nm et 650 nm (Figure 4.13) :

- Le système vibrationnel du 4^{ième} positif : $CO, A^1\Pi_i \rightarrow CO, X^1\Sigma_g^+$ entre 185 nm et 200 nm (4^{ième} positif)
- Le système vibrationnel : $CO^+, B^2\Sigma_u^+ \rightarrow CO^+, X^2\Sigma_g^+$ entre 200 nm et 280 nm (premier système négatif)
- Le système vibrationnel : $CO, b^3\Sigma_u^+ \rightarrow CO, a^3\Sigma_u^+$ entre 280 nm et 360 nm (3^{ième} positif)

- Les systèmes vibrationnels : $CO^+, B^2\Sigma_u^+ \rightarrow CO^+, A^2\Pi_i$ (système de Baldet-Johnson) et $CO^+, A^2\Pi_i \rightarrow CO^+, X^2\Sigma_g^+$ (comet-tail system) entre 360 et 620 nm

Nous avons simulé ces différents systèmes avec notre code *SPECVIB* dans les mêmes conditions que l'expérience et avec les constantes moléculaires et probabilités de transitions trouvées dans la littérature (des tables de constantes moléculaires utilisées dans ce programmes sont disponibles en *Annexes E / Constantes Moléculaires*). L'élargissement utilisé est celui de Voigt (Eq. 4-13).

L'identification des différentes bandes a été effectuée par comparaison avec des spectres expérimentaux acquis avec différents réseaux : 300 et 2400 traits.

4.3.2.1 Réseau de 300 traits :

La Figure 4.15 représente le spectre de vibration de *CO* pur à 0,35 mbar excité par un faisceau d'électrons de 14,84 keV et enregistré en une seconde à l'aide du réseau de 300 traits.

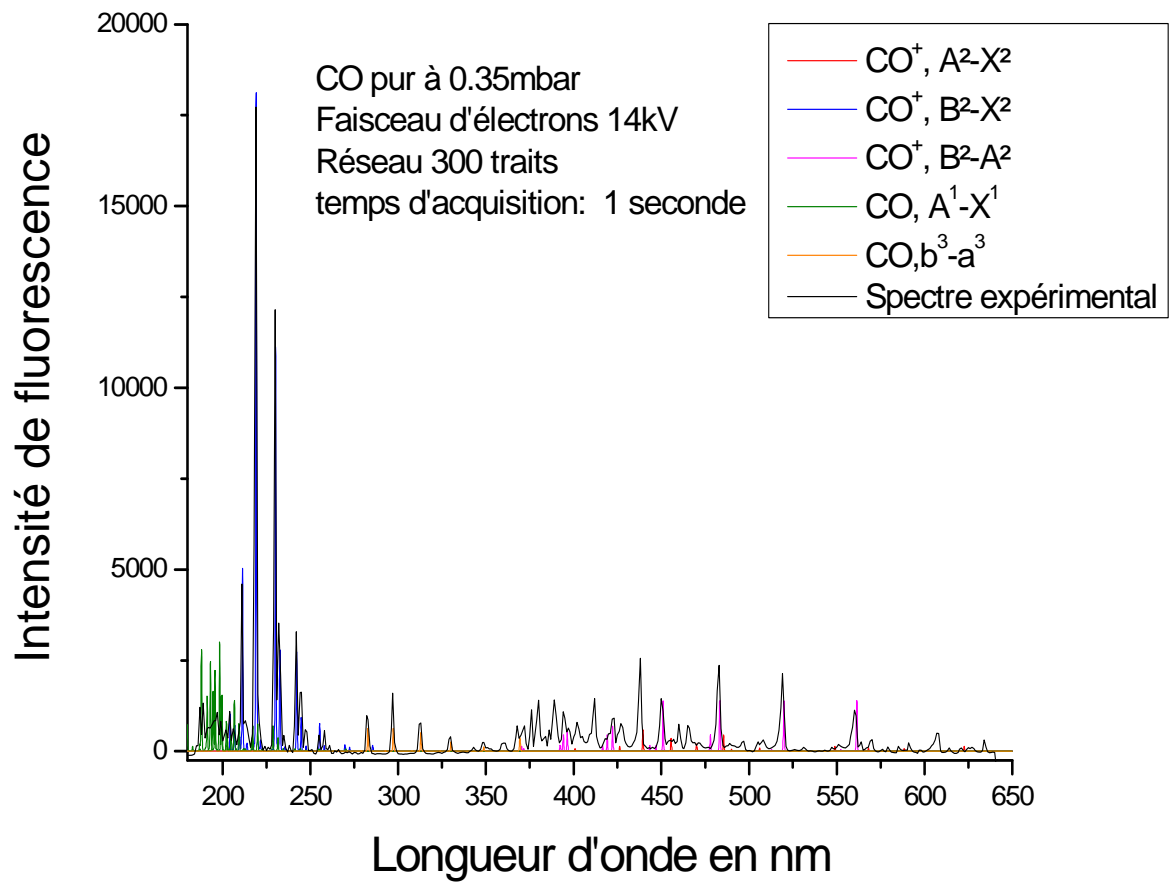


Figure 4.16

*Spectre de fluorescence de CO pur à 0,35 mbar enregistré avec un réseau de 300 traits :
Spectre expérimental et simulation des différentes bandes de vibrations*

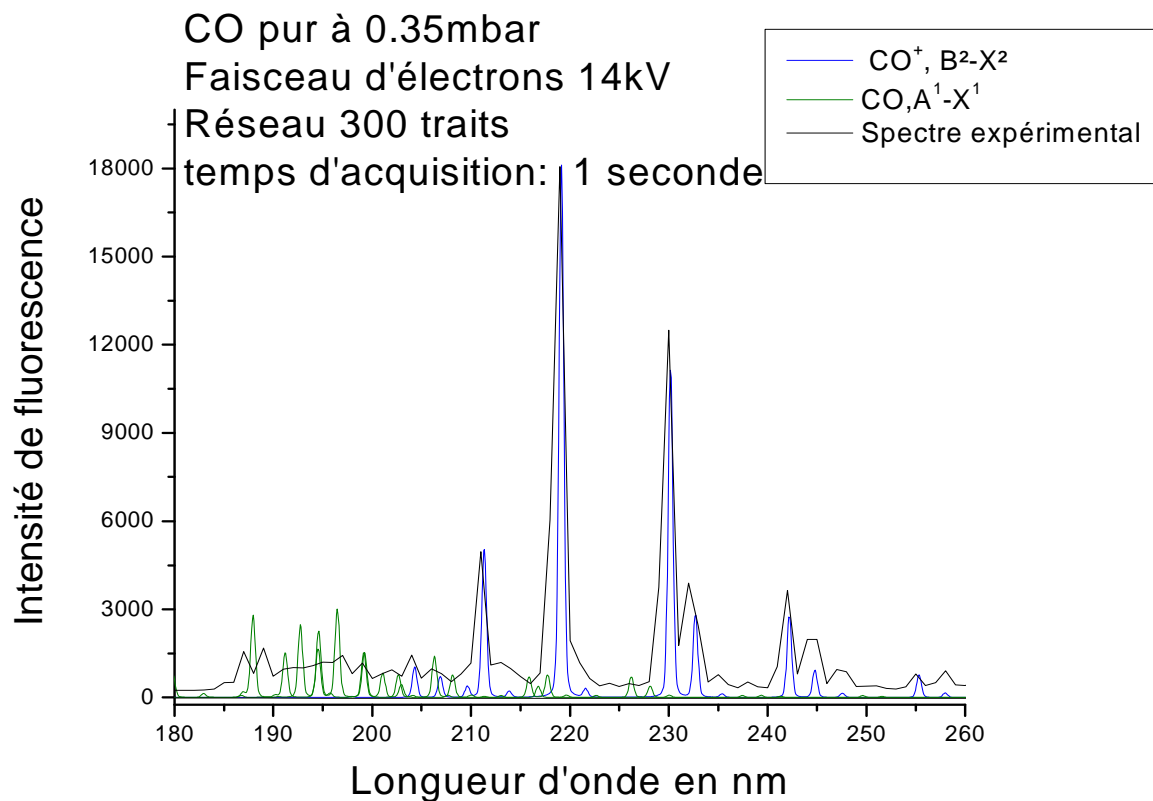


Figure 4.17

*Spectre de fluorescence de CO pur à 0,35 mbar enregistré avec un réseau de 300 traits :
Spectre expérimental et simulation des différentes bandes de vibrations dans la zone 180 nm-
260 nm*

Avec le réseau de 300 traits, la structure vibrationnelle du 4^{ème} système positif de CO est peu résolue entre 180 nm et 210 nm. Pour identifier complètement les bandes de vibrations et observer la structure rotationnelle de certains systèmes, on utilise un réseau de 2400 traits. Les spectres expérimentaux sont ensuite comparés à *SPECVIB* tout d'abord pour la vibration puis *SPECROT* pour la rotation.

Le réseau de 2400 traits permet de mieux voir la structure vibrationnelle dans la zone 180 nm-210 nm et facilite l'identification des principaux systèmes dans cette zone.

4.3.2.2 Réseau de 2400 traits :

Simulation *SPECVIB*

Toutes les simulations de cette section ont été effectuées à $T_V=T_R=300$ K.

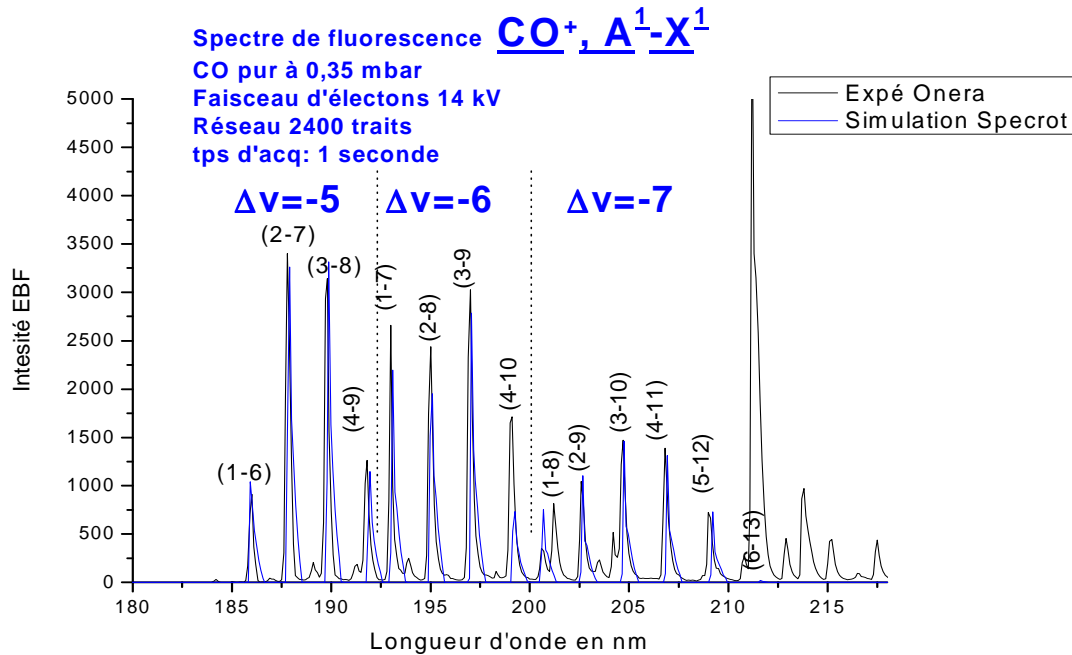


Figure 4.18

Comparaison entre simulation SPECROT et expérience : Identification des bandes de vibration des principaux transitions électroniques du $\text{CO}, 4^+$

Le 4ⁱème système positif de CO ($\text{CO}, A^1\Pi_1 \rightarrow \text{CO}, X^1\Sigma_g^+$) situé entre 140 nm et 210 nm n'est pas ici totalement observé à cause de la limite de sensibilité du spectromètre en dessous de 180 nm. On observe néanmoins les bandes de vibration correspondant à des transitions aux Δv élevés.

Comme vérifié auparavant sur les simulations SpecAir (Logiciel de simulation développé par C.Laux [4.22], à $T_V(A^1) > 1000$ K, on observe des transitions $\Delta v = -5, -6$ et -7 .

Ci-dessous, des spectres simulés avec le logiciel SpecAir[®], montrant la présence du quatrième système positif à des longueurs d'ondes inférieures à 180 nm (domaine v.u.v).

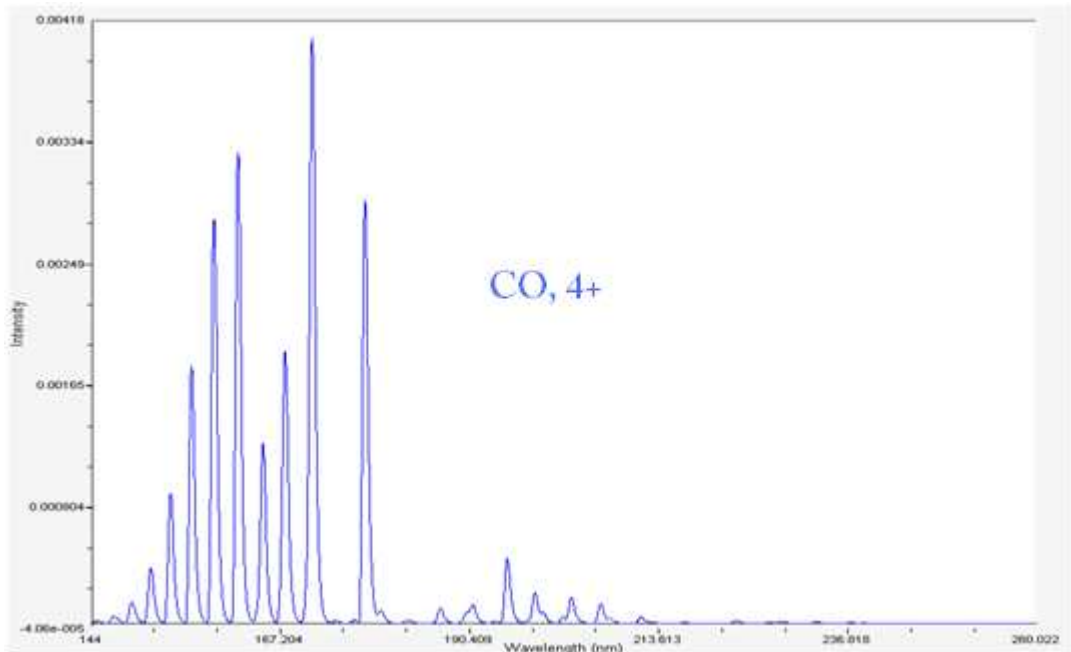


Figure 4.19

Simulation SPECAIR des bandes vibrationnelles du 4^{ième} système positif de CO : système CO, (4+) avec $T_R=300\text{ K}$, $T_V(A^1)=1200\text{ K}$

Pour valider le code *SPECVIB*, nous comparons également les positions des bandes de vibration de ces différents systèmes au spectre expérimental mais également à d'autres données expérimentales issues du laboratoire *ICARE* qui confirme bien l'identification du 4^{ième} système positif de *CO* entre 180 et 210 nm (Tableau 4-2).

Lambda Exp Onera	Lambda Exp Icare	Lambda théorique	bandes de vibration v',v''
185,512	185,7926	185,96	1,6
187,833	187,6032	187,85	2,7
189,690	189,6011	189,8	3,8
191,771	191,599	191,82	4,9
192,858	192,7853	193,07	1,7
195,1450	194,8145	195,007	2,8
196,912	196,8124	197,01	3,9
199,042	198,904	199,08	4,1
200,762	200,9956	200,65	1,8
202,446	202,4004	202,64	2,9
204,492	204,491	204,63	3,10
206,612	206,6147	206,76	4,11
208,831	208,8	208,99	5,12
210,922	210,9852	211,37	6,13
213,247	213,607	213,7	7,14

Tableau 4-2

Position en longueur d'onde des têtes de bandes du système vibrationnel du 4^{ième} positif de CO : Comparaison entre valeurs expérimentales ONERA, ICARE et valeurs théoriques

Sur ce spectre on identifie également quelques transitions vibrationnelles du premier système négatif de CO : $CO^+, B^2\Sigma_u^+ \rightarrow CO^+, X^2\Sigma_g^+$ ($\Delta v=+2$ et $\Delta v=+1$) à 201 nm et 211 nm.

La plupart des bandes de vibration du premier système négatif CO : $CO^+, B^2\Sigma_u^+ \rightarrow CO^+, X^2\Sigma_g^+$ sont situées entre 210 nm et 260 nm (Figure 4.20).

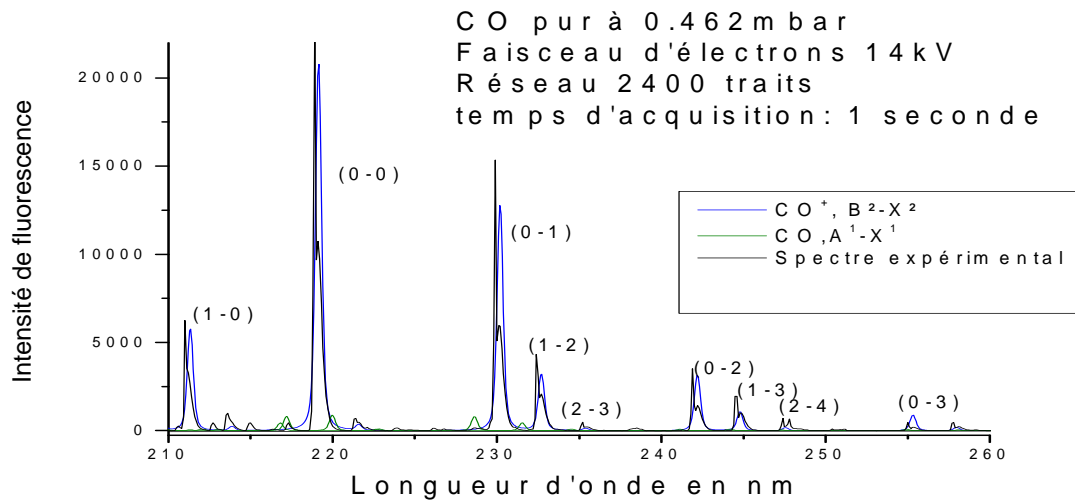


Figure 4.20

Comparaison entre simulation SPECVIB et expérience: Identification des bandes de vibration des principales transitions électroniques : $CO^+, B^2\Sigma_u^+ \rightarrow CO^+, X^2\Sigma_g^+$

En effet, le premier système négatif $CO^+, B^2\Sigma_u^+ \rightarrow CO^+, X^2\Sigma_g^+$, situés entre 185 nm et 260 nm, est la principale structure CO^+ . Elle a été étudiée par Szajna et Kepa [4.23] et [4.24]. Belikov [4.25] montre que 85 % de la fluorescence du premier système négatif de CO^+ est dû aux électrons primaires. La séquence vibrationnelle de ce système est semblable à celle du premier négatif de N_2^+ . Cela est due au fait que CO et N_2 ont la même configuration électronique et la même disposition des électrons sur les orbitales moléculaires. Une conséquence importante pour notre étude concerne, la mesure de la température de rotation à partir de la structure rotationnelle de sa bande principale $CO^+, B^2\Sigma_u^+ \rightarrow CO^+, X^2\Sigma_g^+$ (0-0) la tête de bande est à 219,1 nm. Sur la Figure 4.20, on a comparé les spectres expérimentaux et une simulation des séquences vibrationnelles du système $CO^+, B^2\Sigma_u^+ \rightarrow CO^+, X^2\Sigma_g^+$.

Sur cette portion de spectre, on obtient un bon accord expérience-théorie. On identifie les transitions (2-0), (1-0), (0-0), (0-1), (0-2), (0-3) ainsi que les autres séquences Δv correspondantes. Les rapports entre les amplitudes des bandes de vibration donnent la

température de vibration T_v . Les positions des têtes de bandes de vibration du premier système négatif de CO^+ sont regroupées dans le Tableau 4-3.

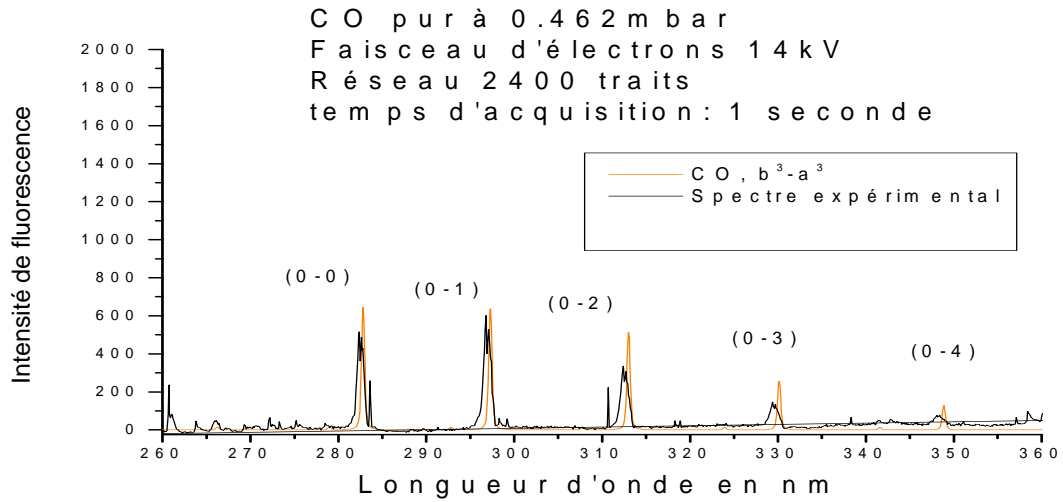


Figure 4.21

Comparaison entre simulation SPECVIB et expérience : Identification des bandes de vibration des principales transitions électroniques : $CO, b^3\Sigma_u^+ \rightarrow CO, a^3\Sigma_u^+$

Les bandes de vibration correspondant au système $CO, b^3\Sigma_u^+ \rightarrow CO, a^3\Sigma_u^+$ (Figure 4.21) se traduisent principalement par la séquence (0-0), (0-1), (0-2), (0-3), (0-4).

Le système $CO^+, A^2\Pi_i \rightarrow CO^+, X^2\Sigma_g^+$ a été étudié essentiellement entre 300 nm et 670 nm. Dans la bibliographie, ce système est utilisé pour déterminer la composition CO dans des comètes. Les publications [4.26], [4.27] et [4.28] donnent des tableaux de moments et des probabilités de cette transition. Le système $CO^+, A^2\Pi_i \rightarrow CO^+, X^2\Sigma_g^+$ est plus difficile à observer car, il se trouve dans la même gamme de longueur d'onde que le second ordre du premier système négatif. Il y a également le système de Baldet-Johnson $CO^+, B^2\Sigma_u^+ \rightarrow CO^+, A^2\Pi_i$ (Figure 4.22) dont les bandes de vibration sont situées entre 350 nm et 550 nm. L'expérience montre que pour ce système, on observe des transitions jusqu'à $(\Delta v = -5)$. Les coefficients FC de ces bandes sont pris dans les publications de Nicholls [4.29] et [4.30] et reportés en annexes.

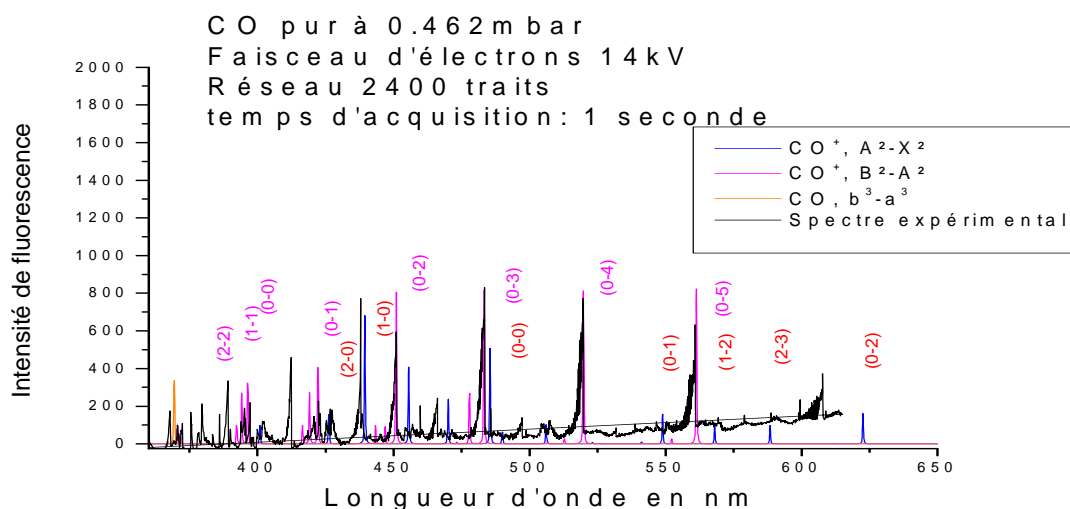


Figure 4.22

Comparaison entre simulation SPECVIB et expérience: Identification des bandes de vibration des principales transitions électroniques : $CO^+, B^2\Sigma_u^+ \rightarrow CO^+, A^2\Pi_i$

Les positions des têtes de bandes de Baldet-Johnson sont regroupées dans le Tableau 4-4

$CO^+, B^2\Sigma_u^+ \rightarrow CO^+, X^2\Sigma_g^+$						$CO, b^3\Sigma_u^+ \rightarrow CO, a^3\Sigma_u^+$		
Band $v'-v''$	Band ori in nm	Relative Intensity	Band	Band origin (nm)	Relative Intensity	Band	Band origin (nm)	Relative Intensity
0-0	219,1	100	1-0	211,1	59,43			
0-1	230,1	9,72	1-1	221,4	9,19			
0-2	241,9	34,63	1-2	232,4	41,90			
0-3	255,4	4,61	1-3	244,6	20,48			
0-4	269,3	3,03	1-4	257,8	6,99			
2-0	204,5	16,49	3-0	198,1	3,67			
2-1	213,6	11,79	3-1	206,6	15,71	4-0	192,25	2,86
2-2	223,9	4,16	3-2	216,3	3,49	4-1	200,7	3,86

Chapitre IV: Spectroscopie vibrationnelle et rotationnelle

2-3	235,2	7,22	3-3	226,8	3,74	4-2	209,69	3,12
2-4	247,4	9,17	3-4	238,5	4,14	4-3	219,41	45,40
2-5	260,7	4,92	3-5	250,5	3,72	4-4	229,9	

Tableau 4-3

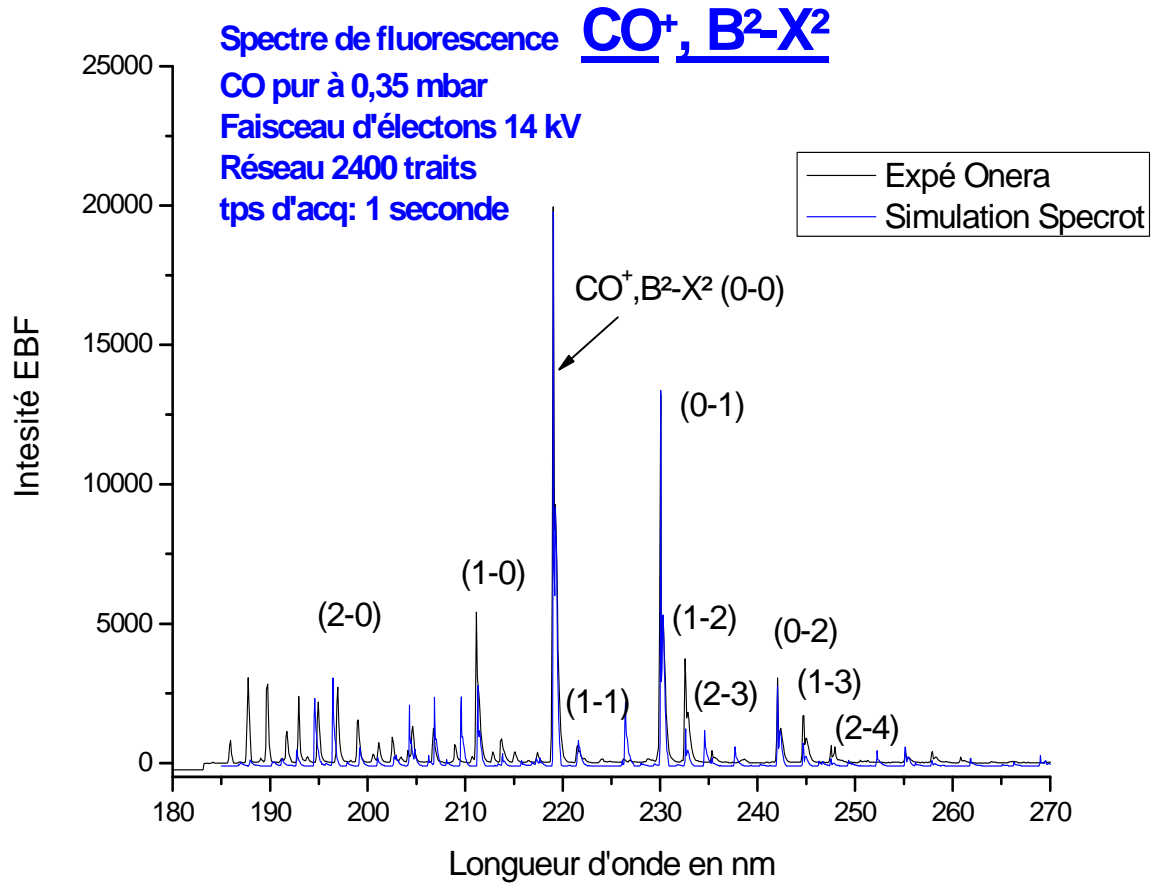
Données expérimentales (intensités relatives et longueur d'onde centrale) des différentes bandes de vibration des systèmes $CO^+, B^2\Sigma_u^+ \rightarrow CO^+, X^2\Sigma_g^+$ et $CO, b^3\Sigma_u^+ \rightarrow CO, a^3\Sigma_u^+$

$CO^+, B^2\Sigma_u^+ \rightarrow CO^+, A^2\Pi_i$					
Band	Band origin (nm)	Relative Intensity	Band	Band origin (nm)	Relative Intensity
0-0	397,2	5,39	2-0	350,6	3,09
0-1	422,4	5,4	2-1	370,6	4,31
0-2	451	8,79	2-2	392	3,45
0-3	482,7	8,98	2-3	416,4	3,42
0-4	519	8,76	2-4	442,8	3,64
1-0	372	4,06	3-0	332,3	2,89
1-1	394,16	4,48	3-1	350,16	3,02
1-2	418,98	3,79	3-2	369,6	3,56
1-3	446,55	3,59	3-3	390,9	3,47
1-4	477,4	3,76	3-4	414,3	3,28

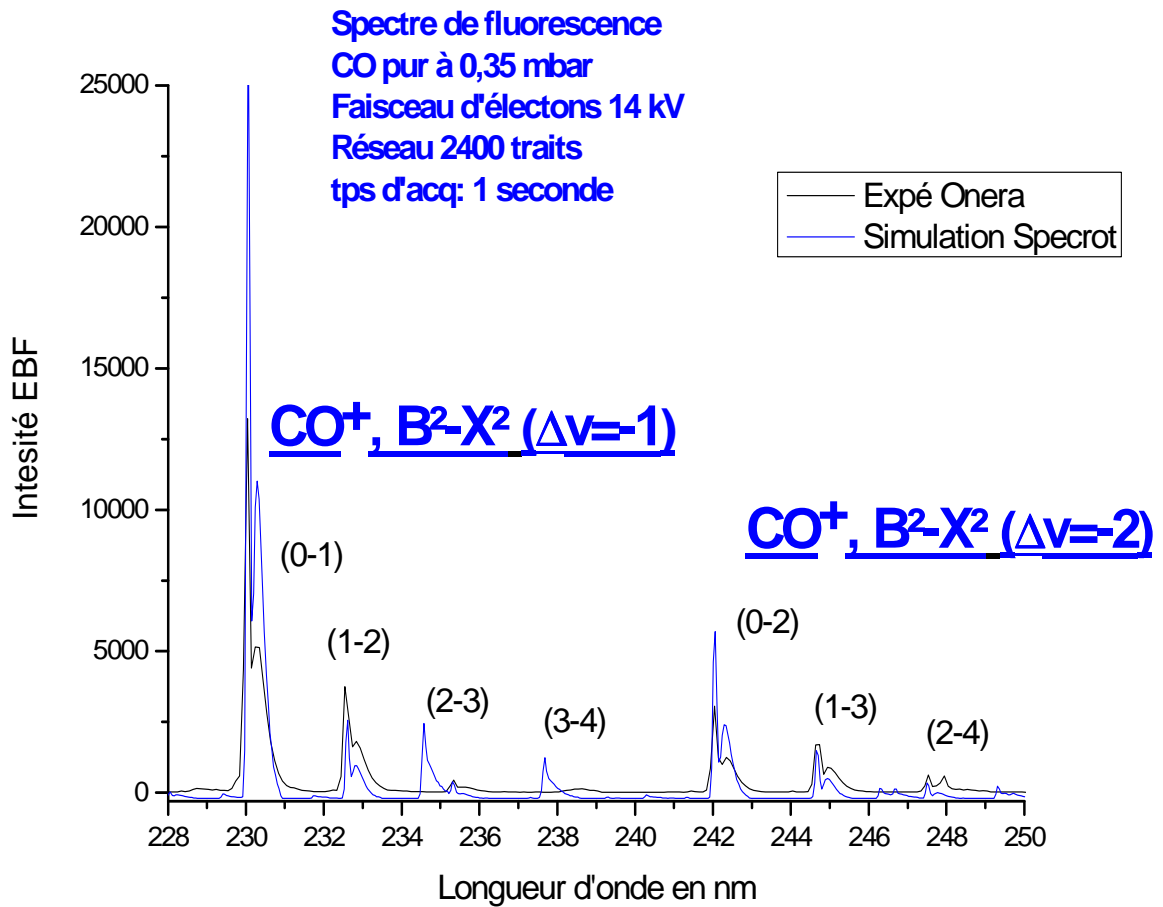
Tableau 4-4

Données expérimentales (intensités relatives et longueur d'onde centrale) des différentes bandes de vibration du système $CO^+, B^2\Sigma_u^+ \rightarrow CO^+, A^2\Pi_i$

Simulation *SPECROT*



(a)



(b)

Figure 4.23

Comparaison entre simulation SPECROT et expérience : Identification des bandes de vibration des principales transitions électroniques $\text{CO}^+, \text{B}^2\Sigma_u^+ \rightarrow \text{CO}^+, \text{X}^2\Sigma_g^+$: (a) zone 180nm-270 nm et (b) structure rotationnelle des systèmes $\Delta v=-1$ et $\Delta v=-2$

La structure rotationnelle d'une des bandes de vibration du premier système négatif peut être exploitée pour déterminer la température de rotation T_R . Il faudra néanmoins un spectromètre beaucoup plus résolvant (par exemple 3600 traits). Sur la Figure 4.23, l'élargissement a été choisie de manière à avoir la même résolution du spectre expérimental.

D'autres systèmes peuvent également être exploités pour la détermination de la structure rotationnelle; Il s'agit des bandes de vibration du 3^{ème} système (Figure 4.24).

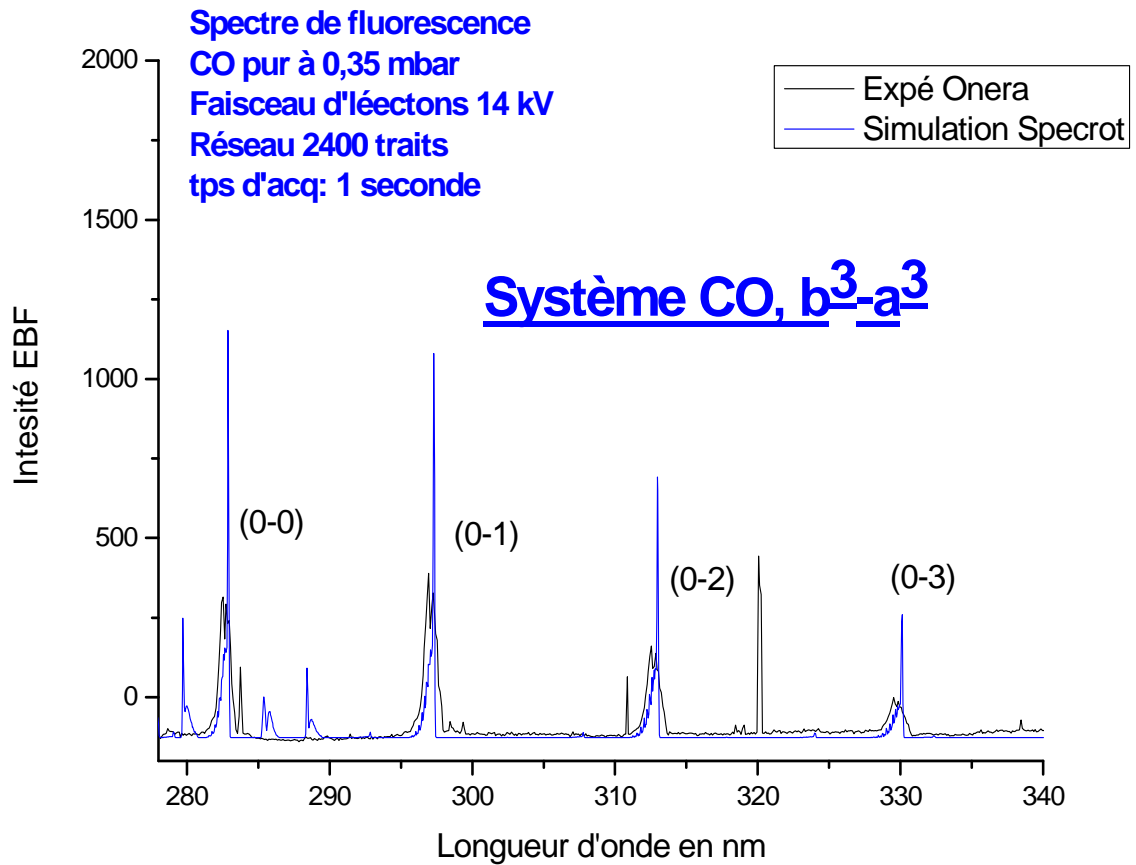


Figure 4.24

Comparaison entre simulation SPECVIB et expérience : Identification des bandes de vibration du système : $CO, b^3\Sigma_u^+ \rightarrow CO, a^3\Sigma_u^+$

Une mesure relative des intensités des différents systèmes de vibration (Δv) permet de remonter aux températures de vibration. La structure rotationnelle n'est pas bien résolue.

Les bandes Δv élevés (0-4) et (0-5) du système de Baldet-Johnson ci-dessous présentent une structure rotationnelle suffisamment résolue pour la détermination de la température de rotation. Nous n'avons pas pu explorer cette piste par manque de temps

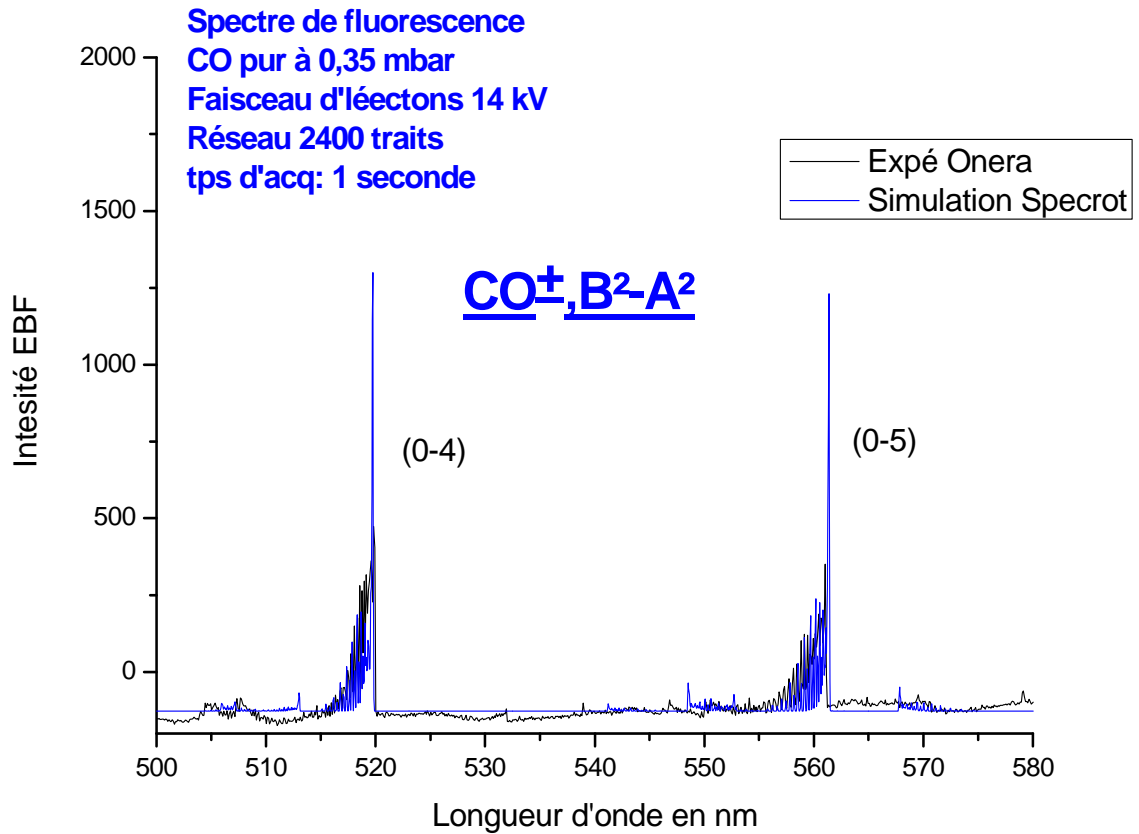


Figure 4.25

Comparaison entre simulation SPECROT et expérience : Identification des bandes de vibration des principales transitions électroniques : $CO^+, B^2\Sigma_u^+ \rightarrow CO^+, A^2\Pi_i$

En résumé, nous avons trouvé un bon nombre de bandes vibrationnelles relativement bien isolées, notamment celles du premier système négatif et de Baldet-Johnson, qui sont des candidats très favorable pour la mesure de T_R avec un spectromètre à bonne résolution spectrale. Nous n'avons malheureusement pas pu vérifier cette mesure avec le spectromètre

qui était à notre disposition. De même, la température de vibration peut être déterminée par rapport aux bandes (0-1), (1-2), (2-3) etc. de ce système car ces bandes sont isolées.

4.3.3 Le dioxyde de carbone (CO_2)

Le dioxyde de carbone (CO_2), est le gaz majoritaire de l'atmosphérique de Mars (97 %) et de Venus (96 %). Cependant, il a été peu étudié par FFE. Le CO_2 appartient au groupe de symétrie $D_{\infty h}$ (Annexes D/ Configuration électronique des atomes et molécules).

La fluorescence du CO_2 se traduit essentiellement par deux transitions électroniques de l'ion CO_2^+ (Figure 4.22) :

1. le système doublet ultraviolet de $CO_2^+, B^2\Sigma_u^+ \rightarrow CO_2^+, X^2\Sigma_g^+$ à 288,3 nm et 289,2 nm.
2. le système de Fox-Duffendack-Barker $CO_2^+, A^2\Pi_u \rightarrow CO_2^+, X^2\Pi_g$ avec des transitions de type $u \rightarrow g$ appartenant aux mêmes sous niveaux de spins ($1/2 \rightarrow 1/2$ et $3/2 \rightarrow 3/2$) entre 300 nm et 560 nm

Les transitions vibrationnelles de ces deux systèmes ont été étudiées par Kim, S.J. [4.31], McCallum [4.31] et [4.33], Mrozowski [4.34], [4.35] et [4.36] qui ont fourni les données expérimentales les plus récentes de leurs constantes moléculaires. D. Farley a démontré dans sa thèse [0.9] la possibilité de mesurer la température de rotation de CO_2 en analysant la structure rotationnelle de la transition $CO_2^+, A^2\Pi_u \rightarrow CO_2^+, X^2\Pi_g$.

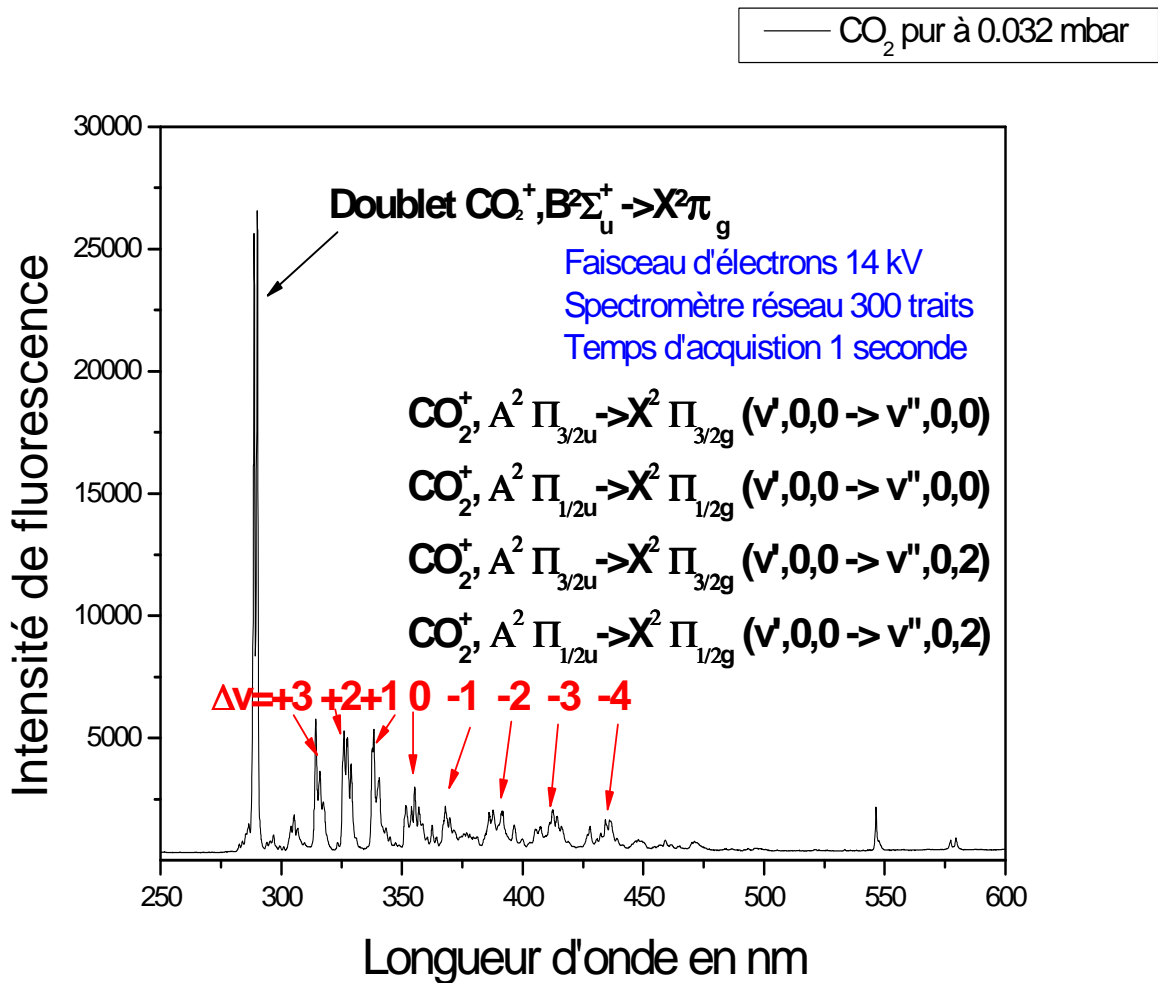


Figure 4.26

Spectre expérimental de fluorescence de CO₂ pur : Identification des systèmes vibrationnels

$CO_2^+, B^2\Sigma_u^+ \rightarrow CO_2^+, X^2\Sigma_g^+ (0,0,0 \rightarrow 0,0,0)$, $CO_2^+, A^2\Pi_{3/2u} \rightarrow X^2\Pi_{3/2g} (v',0,0 \rightarrow v'',0,0)$, $CO_2^+, A^2\Pi_{1/2u} \rightarrow X^2\Pi_{1/2g} (v',0,0 \rightarrow v'',0,0)$, $CO_2^+, A^2\Pi_{3/2u} \rightarrow X^2\Pi_{3/2g} (v',0,0 \rightarrow v'',0,2)$ et $CO_2^+, A^2\Pi_{1/2u} \rightarrow X^2\Pi_{1/2g} (v',0,0 \rightarrow v'',0,2)$

Le réseau de 2400 traits utilisé ici, ne permet pas de résoudre la structure rotationnelle. Dans les spectres expérimentaux de la référence [4.38], on observe cette structure rotationnelle ainsi

que les bandes de Renner-Teller. Lorsqu'il est centré à 289 nm, ce réseau permet de visualiser uniquement le doublet du CO_2^+ . Celui-ci est constitué de deux bandes vibrationnelles, qui partent de (0,0,0) vers (0,0,0) dans le sous-système CO_2^+ , $B^2 \Sigma_{3/2u}^+ \rightarrow CO_2^+$, $X^2\Pi_{3/2g}$ à 288,3 nm et $B^2 \Sigma_{1/2u}^+ \rightarrow X^2\Pi_{1/2g}$ à 289,6 nm

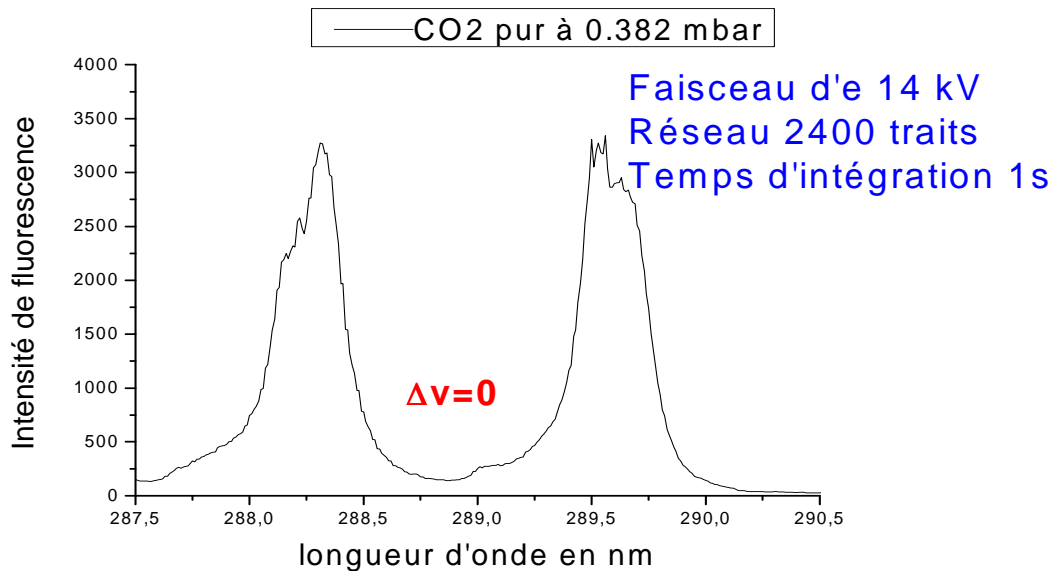


Figure 4.27

Doublet du CO_2^+ , $B^2 \Sigma_u^+ \rightarrow CO_2^+$, $X^2 \Sigma_g^+$ avec un réseau de 2400 traits centré à 289 nm.

Sur la Figure 4.26, on observe aussi la structure des différents systèmes vibrationnels de CO_2^+ , $A^2 \Pi_u \rightarrow X^2 \Pi_g$ avec des spins $1/2 \rightarrow 1/2$ et $3/2 \rightarrow 3/2$ autour de 355 nm. La Figure 4.28 montre la structure fine observée entre 337 nm et 341 nm (a) avec une comparaison ainsi qu'une observation similaire (b) de Cattolica [4.38]

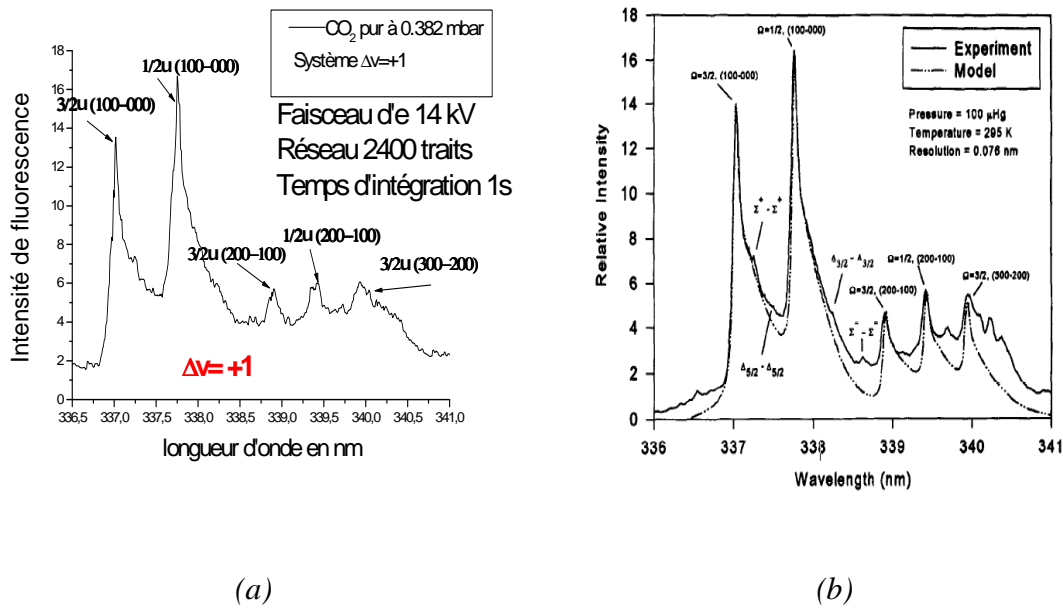


Figure 4.28

Séquences vibrationnelles vérifiant $\Delta v = +1$ du système CO_2^+ , A-X. (a) Spectre expérimental enregistré avec un réseau de 2400 traits et (b) modèle et spectre expérimental de Farley et Cattolica [4.38]

La molécule de CO_2 , de structure $O=C=O$, possède, pour chaque état électronique, trois modes de vibration ν_1 , ν_2 et ν_3 associés aux couples $O-O$, $O-C$ et $C-O$ respectivement. La vibration 1-3 (vibration entre les atomes d'oxygène par rapport à l'atome central de carbone) est symétrique alors que les vibrations (1-2) et (2-3) (vibrations entre l'atome de carbone et les atomes d'oxygène) sont dissymétriques. Les bandes de vibration les plus intenses sont celles associées aux liaisons symétriques $C-O$ (mode de vibration ν_1). Les vibrations associées aux liaisons dissymétriques (ν_2 et ν_3) ne contribuent pas de manière significative à l'ensemble des raies d'émission de fluorescence [4.33], [4.35].

L'énergie d'un niveau de vibration donnée par le développement de Dunham :

$$G(v_1, v_2, v_3) = \begin{aligned} & w_1 \cdot \left(v_1 + \frac{1}{2}\right) + w_2 \cdot \left(v_2 + \frac{1}{2}\right) + w_3 \cdot \left(v_3 + \frac{1}{2}\right) \\ & + \\ & x_{11} \cdot \left(v_1 + \frac{1}{2}\right)^2 + x_{22} \cdot \left(v_2 + \frac{1}{2}\right)^2 + x_{33} \cdot \left(v_3 + \frac{1}{2}\right)^2 \\ & + \\ & x_{12} \cdot \left(v_1 + \frac{1}{2}\right) \cdot \left(v_2 + \frac{1}{2}\right) + x_{13} \cdot \left(v_1 + \frac{1}{2}\right) \cdot \left(v_3 + \frac{1}{2}\right) + x_{23} \cdot \left(v_2 + \frac{1}{2}\right) \cdot \left(v_3 + \frac{1}{2}\right) \\ & + \\ & \dots \end{aligned} \quad \text{Eq. 4-32}$$

La molécule de CO_2 est considérée comme un oscillateur anharmonique (vibrateur unidimensionnel) constituée de deux atomes d'oxygènes périphériques avec comme centre de masse la molécule de carbone et une masse réduite de 32 a.m.u. Dans un modèle spectroscopique simplifié, on néglige ainsi les vibrations antisymétriques (v_2 et v_3). La distance internucléaire $C-O$, égale à 1.177 Å, est considérée comme le rayon internucléaire du niveau fondamental du modèle équivalent de la molécule diatomique.

D'après l'équation Eq. 4-32, l'état fondamental (0, 0, 0) correspond à :

$$G(0,0,0) = \frac{1}{2}w_1 + \frac{1}{2}w_2 + \frac{1}{2}w_3 + \frac{1}{4}x_{11} + \frac{1}{4}x_{22} + \frac{1}{4}x_{33} + \frac{1}{4}x_{12} + \frac{1}{4}x_{13} + \frac{1}{4}x_{23} \quad \text{Eq. 4-33}$$

On observe deux types de transitions vibrationnelles :

Sur la transition B-X, il s'agit des vibrations avec un seul degré de liberté ($v' \rightarrow v''$)

Sur la transition A-X, on observe trois fréquences de vibration avec l'approximation $v_2 = 0$ et $v_3 = 0$: $v', 0, 0 \rightarrow v'', 0, 0$ et quelques transitions $v', 0, 0 \rightarrow v'', 0, 2$.

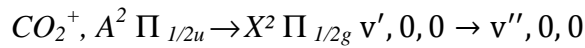
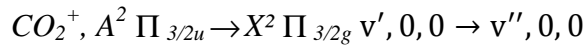
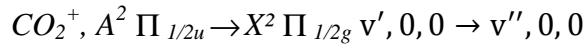
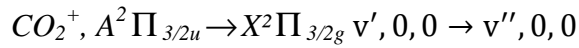
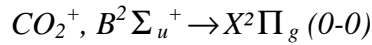
La référence [4.31] donne les valeurs des constantes moléculaires associées aux états électroniques fondamentaux :

$w_1=1352,2 \text{ cm}^{-1}$	$w_2=672,2 \text{ cm}^{-1}$	$w_3=2396,4 \text{ cm}^{-1}$
$x_{11}=-0,3$	$x_{22}=-1,3$	$x_{33}=-1,2$
$x_{12}=5,7$	$x_{13}=-21,9$	$x_{23}=-11,0$

Tableau 4-5

Constantes moléculaires de l'état fondamental de CO₂ (Kim [4.31])

En résumé, les transitions vibrationnelles suivantes sont observées (Figure 4.26) :



On utilise l'expression de Farley et Cattolica [4.38] pour simuler ces bandes. L'intensité des raies de rotation du niveau excité k' est donnée par :

$$I_{v'v''}(k') \approx \frac{\sum_{v'} q_{vv'} \cdot \rho(k) \cdot q_{v'v''} \cdot S^{RQP}}{2k' + 1} \quad \text{Eq. 4-34}$$

où $I_{v'v''}(k')$ est l'intensité des branches R, P et Q de nombre quantique de rotation k' de la transition vibrationnelle $v' \rightarrow v''$. S^{RQP} sont les coefficients Holn-London appelés forces de raies et donnés dans le paragraphe 4.1.10.

Le doublet à 289 nm correspond à la transition vibrationnelle à un seul degré de liberté ($v' \rightarrow v''$). Il sera utilisé pour mesurer la densité de CO₂ mais également pour la détermination de la température de vibration T_V à partir du rapport d'amplitude entre les systèmes B-X et A-X. La résolution du spectromètre ne permet pas de mesurer T_R.

La Figure 4.29 montre une comparaison entre le spectre simulé et le spectre expérimental de la transition vibrationnelle $\Delta v = 0$ du système $CO_2^+, B^2\Sigma_u^+ \rightarrow CO_2^+, X^2\Sigma_g^+$.

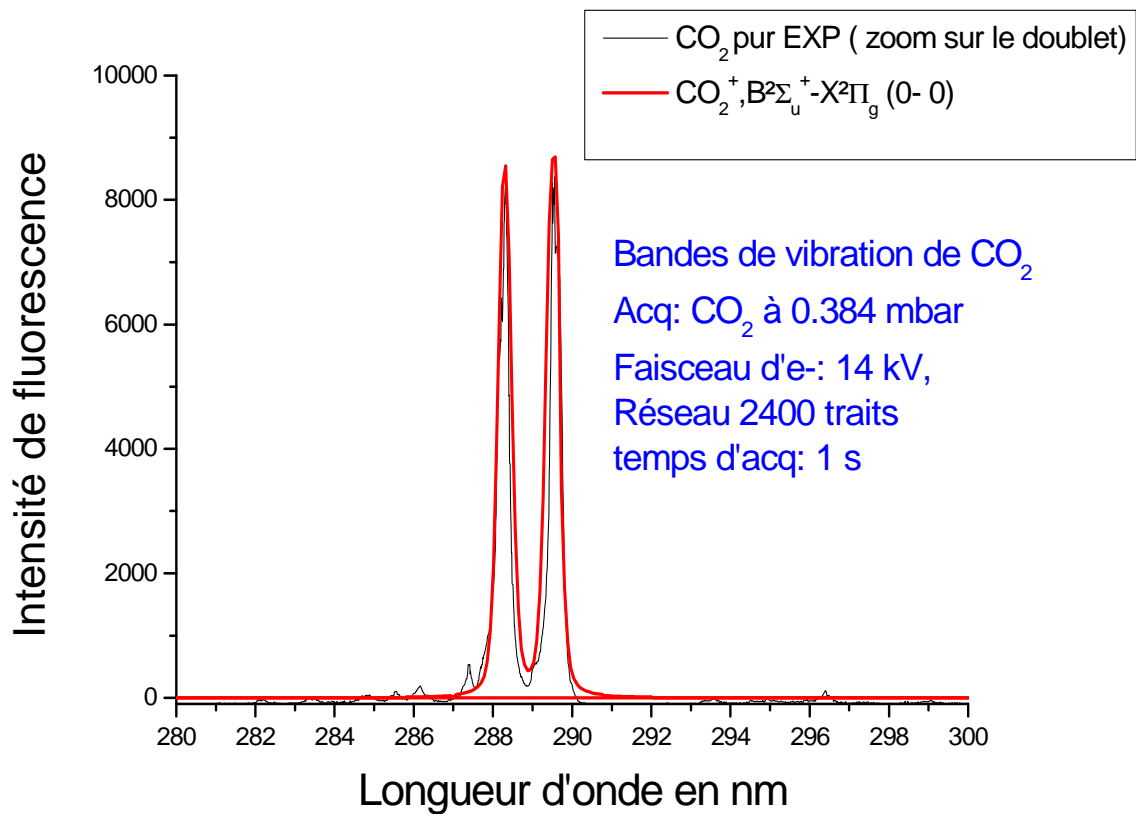


Figure 4.29

Doublet à 289 nm : Comparaison entre le spectre simulé et le spectre expérimental de la transition vibrationnelle (0-0) du système $CO_2^+, B^2\Sigma_u^+ \rightarrow CO_2^+, X^2\Sigma_g^+$

Le système vibrationnel A-X comporte sept séquences allant de $\Delta v = -3$ à $\Delta v = +3$. A température normale, les états vibrationnels sont peuplés jusqu'à $v = 5$.

Δv	$\Delta v = -3$	$\Delta v = -2$	$\Delta v = -1$	$\Delta v = 0$	$\Delta v = +1$	$\Delta v = +2$	$\Delta v = +3$
Gamme de longueur d'onde (nm)	403 – 407	383 – 390	366 – 372	350 – 360	337 – 343	324 – 329	313 – 319
Transitions $\pi_{3/2}$ et $\pi_{1/2}$	0,0,0 \rightarrow 3,0,0 1,0,0 \rightarrow 4,0,0 2,0,0 \rightarrow 5,0,0 3,0,0 \rightarrow 6,0,0	0,0,0 \rightarrow 2,0,0 1,0,0 \rightarrow 3,0,0 2,0,0 \rightarrow 4,0,0 3,0,0 \rightarrow 5,0,0	0,0,0 \rightarrow 1,0,0 1,0,0 \rightarrow 2,0,0 2,0,0 \rightarrow 3,0,0 3,0,0 \rightarrow 4,0,0	0,0,0 \rightarrow 0,0,0 1,0,0 \rightarrow 1,0,0 2,0,0 \rightarrow 2,0,0 3,0,0 \rightarrow 3,0,0 4,0,0 \rightarrow 4,0,0	0,0,0 \rightarrow 1,0,0 1,0,0 \rightarrow 2,0,0 2,0,0 \rightarrow 3,0,0 3,0,0 \rightarrow 4,0,0	0,0,0 \rightarrow 2,0,0 1,0,0 \rightarrow 3,0,0 2,0,0 \rightarrow 4,0,0,3,0,0 \rightarrow 5,0,0	0,0,0 \rightarrow 3,0,0 1,0,0 \rightarrow 4,0,0 2,0,0 \rightarrow 5,0,0,3,0,0 \rightarrow 6,0,0

Tableau 4-6

*Séquences vibrationnelles Δv associées aux systèmes $CO_2^+, A^2\Pi_{3/2u} \rightarrow CO_2^+, X^2\Pi_{3/2g}$,
 $CO_2^+, A^2\Pi_{1/2u} \rightarrow CO_2^+, X^2\Pi_{1/2g}$*

Ce tableau regroupe les différentes séquences vibrationnelles prises en compte pour la simulation de la fluorescence de CO_2^+ .

La Figure 4.30 montre une comparaison entre le spectre simulé et le spectre expérimental des systèmes $CO_2^+, A^2\Pi_{3/2u} \rightarrow CO_2^+, X^2\Pi_{3/2g}$ et $CO_2^+, A^2\Pi_{1/2u} \rightarrow CO_2^+, X^2\Pi_{1/2g}$:

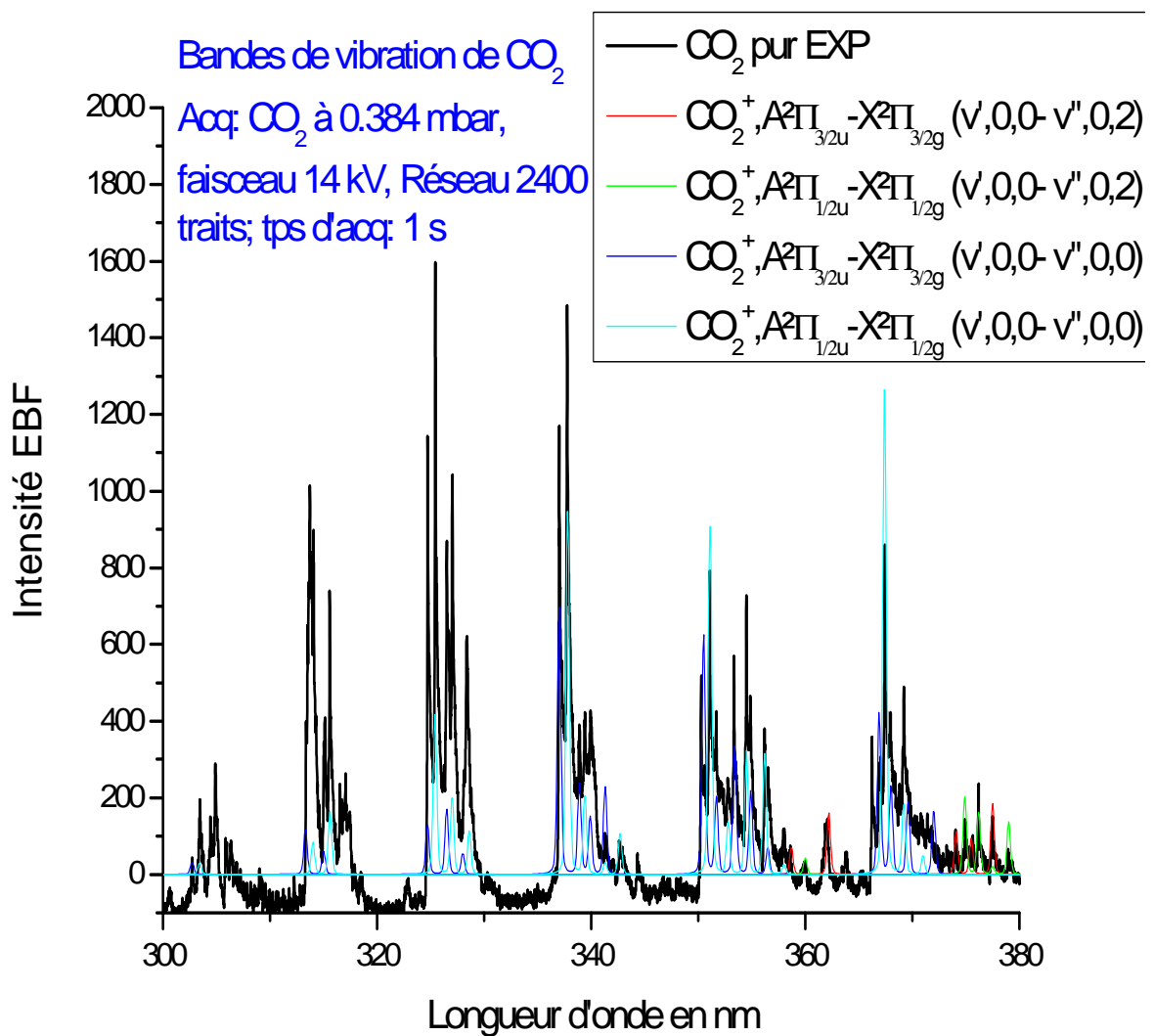


Figure 4.30

Comparaison entre le spectre simulé et le spectre expérimental des systèmes $\text{CO}_2^+, A^2\Pi_{3/2u} \rightarrow \text{CO}_2^+, X^2\Pi_{3/2g}$ et $\text{CO}_2^+, A^2\Pi_{1/2u} \rightarrow \text{CO}_2^+, X^2\Pi_{1/2g}$

En conclusion, il ressort qu'il est possible d'étudier la structure rotationnelle du doublet à 289 nm pour déterminer des températures de rotation mais, avec un spectromètre adapté. La structure rotationnelle du système A-X est beaucoup plus dense car elle regroupe plusieurs sous-systèmes : $CO_2^+, A^2\Pi_{3/2u} \rightarrow CO_2^+, X^2\Pi_{3/2g}$ et $CO_2^+, A^2\Pi_{1/2u} \rightarrow CO_2^+, X^2\Pi_{1/2g}$. L'étude et l'analyse complète de la fluorescence de CO_2 nécessitent une meilleure connaissance des valeurs des constantes moléculaires et probabilités de transition théoriques. Les seules constantes disponibles sont celles de Farley et Cattolica ([4.37] à [4.39]).

4.3.4 Mélanges de gaz

L'étude des mélanges de gaz décrite plus haut, a été faite à l'aide des débitmètres massiques (Brooks[®]) pour contrôler avec une bonne précision les concentrations relatives des espèces.

Les débitmètres massiques sont calibrés sur un gaz, en général on utilise un facteur de correction spécifique pour chaque gaz.

Le Tableau 4-7 donne les facteurs de correction de différents gaz utilisés par rapport à N_2 .

En guise d'exemple, le pourcentage en CO_2 dans un mélange N_2/CO_2 est donné par :

$$fdc = \frac{100}{\frac{d(N_2)}{d(CO_2)} + fdc}$$

où fdc est le facteur de correction donné par le fabricant. Il y a aussi une correspondance entre le débit continu en SCCM et les pressions partielles de gaz et pression totale du mélange. La correspondance entre le débit en SCCM du gaz fixé et la pression affichée par la jauge donne la pression initiale. La pression au cours du mélange à débit variable d'un des gaz peut ainsi être déterminée.

Gaz	N_2	NO	CO	CO_2
Facteur de correction débitmètre calibré sur N_2	1,00	1,1	1,32	0,93

Tableau 4-7

Facteurs de correction de débit réel de gaz avec un débitmètre calibré sur N_2

Sur les graphes suivants, on représente les spectres de fluorescence de différents mélanges de gaz. Il s'agit des mélanges N_2/NO , N_2/CO , N_2/CO_2 et $N_2/CO_2/CO$. L'objectif de cette analyse spectroscopique des mélanges est d'étudier l'influence des proportions de différentes espèces sur le spectre de fluorescence du mélange afin d'évaluer la faisabilité d'une mesure de concentration.

➤ N_2+NO

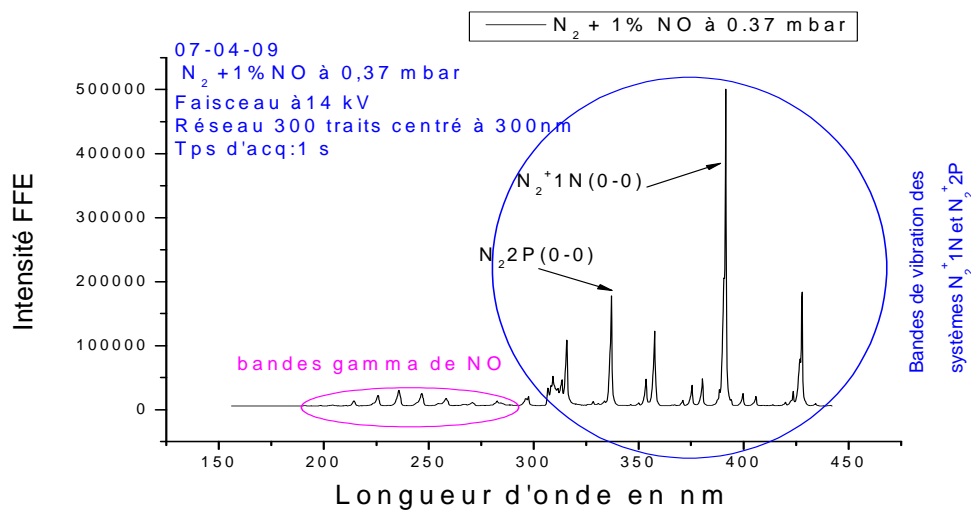


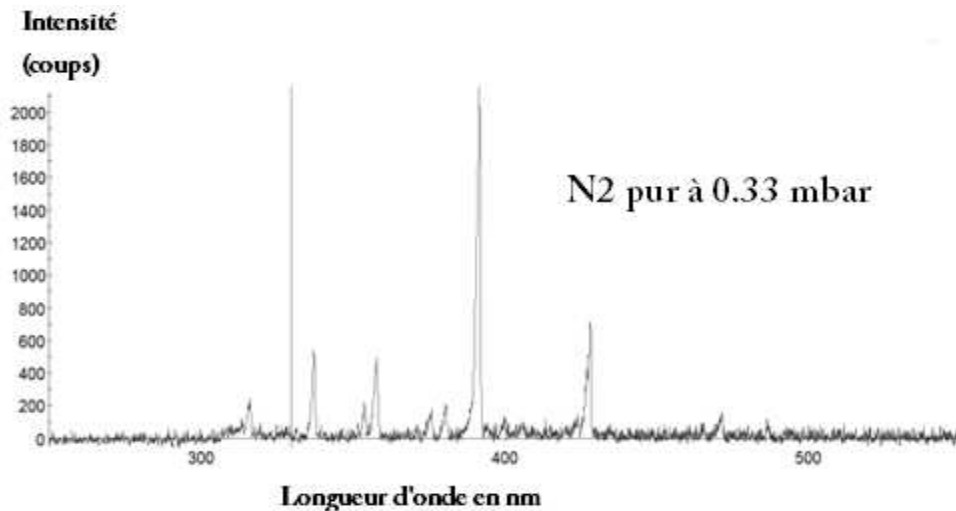
Figure 4.31

Spectre de fluorescence d'un mélange $N_2^+ 1\% NO$ à 0,37 mbar

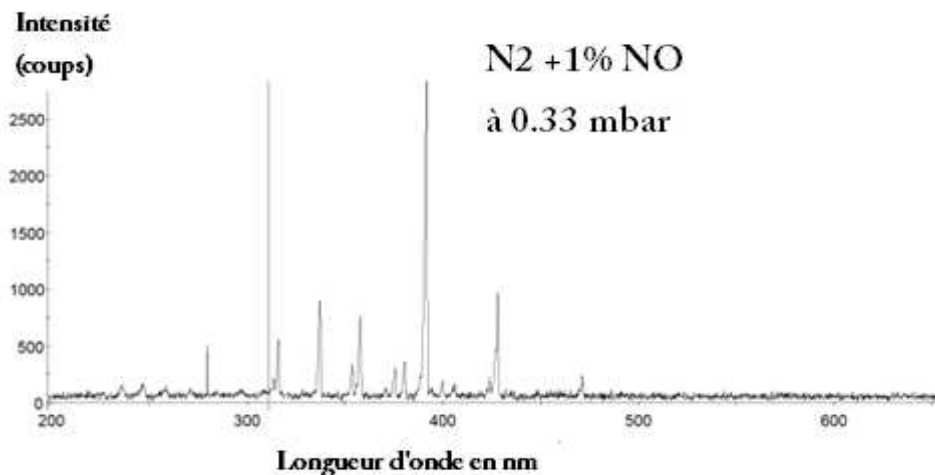
Chapitre IV: Spectroscopie vibrationnelle et rotationnelle

Avec le réseau de 300 traits centré à 300 nm, on identifie clairement les bandes de vibration du premier système négatif de N_2 (N_2^+1N) et du deuxième système positif (N_2^+2P) entre 275 nm et 450 nm, alors qu'entre 200 nm et 275 nm la fluorescence est dominée par les bandes gamma de NO . Ces deux systèmes se trouvant dans des gammes de longueur d'ondes distinctes, il n'y a pas d'interférences et ils peuvent être traités simplement.

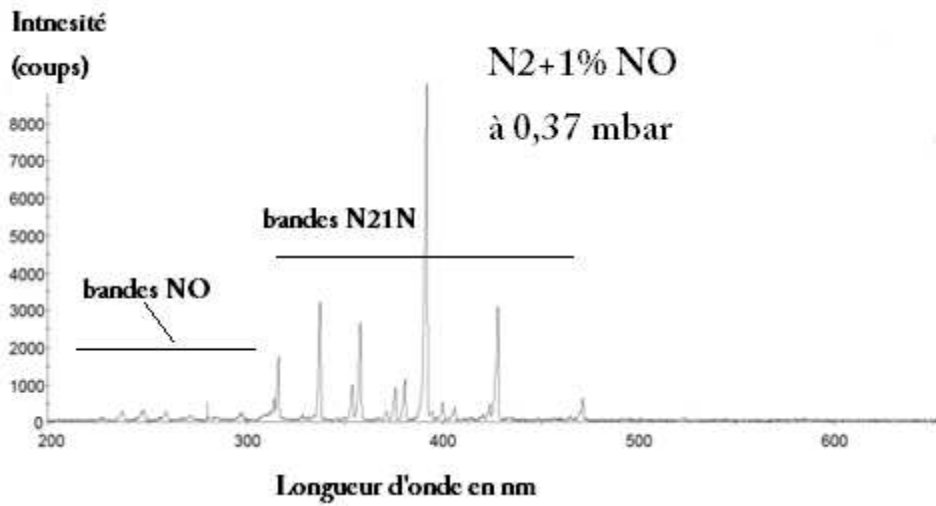
On observe également une linéarité par rapport à la pression totale du mélange en proportion constante.



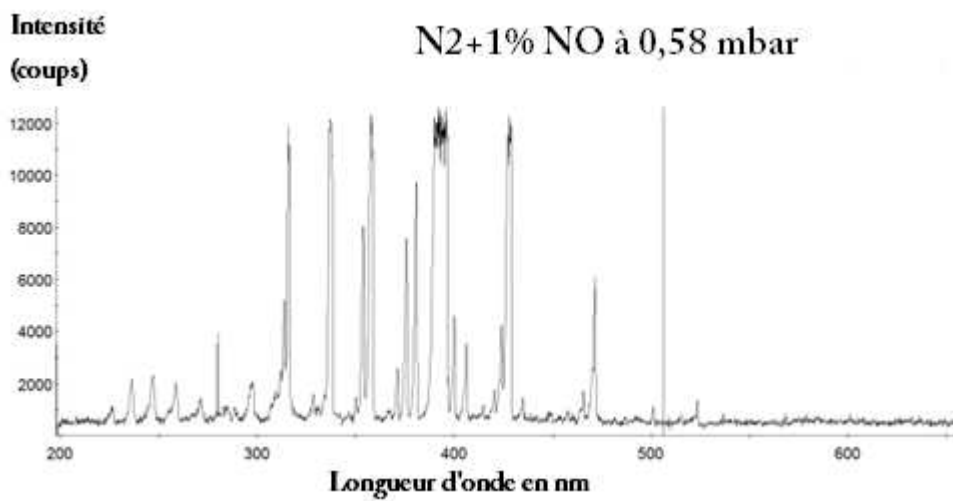
(a)



(b)



(c)



(d)

Figure 4.32

Différents spectres de (a) N₂ pur, (b) mélange N₂+1% NO à 0,33 mbar, (c) à 0,37 mbar et (d) à 0,58 mbar

➤ N_2/CO

Le mélange N_2/CO a déjà été étudié par Park, S.[4.40] dans un tube à choc à des vitesses de choc variant entre 3,45 et 6,4 km/s qui correspondent aux vitesses de rentrée martienne. Les conditions génératrices dans un mélange N_2/CO (22%/78%) engendrent la création des espèces C , N , O , CN , CO_2 etc. comme le montre la Figure 4.33.

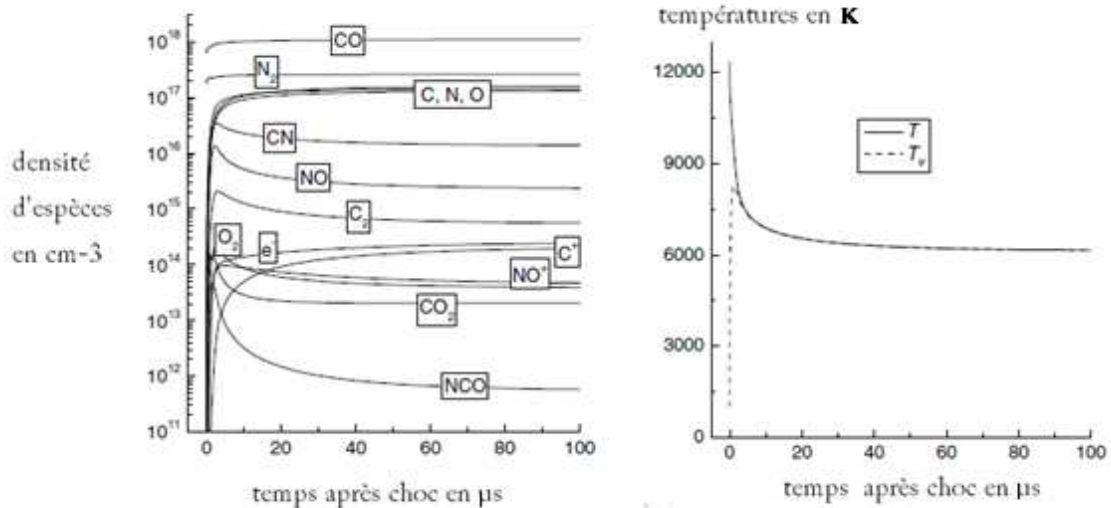


Figure 4.33

Mélange N_2/CO dans un tube à choc, vitesses 3,45 km/s : (a) Densités d'espèces : Taux de formation de CN et C₂ dans un mélange N_2/CO et (b) Températures de vibration (T_v) et de translation-rotation (T) données par (Park [4.40])

Ci-dessous un spectre de mélange N_2/CO acquis avec un faisceau d'électrons de 14 keV et un réseau de 300 traits. Le mélange est fait à partir d'un débit continu de 13,2 SCCM de N_2 et de CO jusqu'à 10 SCCM correspondant à un rapport 50%-50% en proportions de N_2/CO

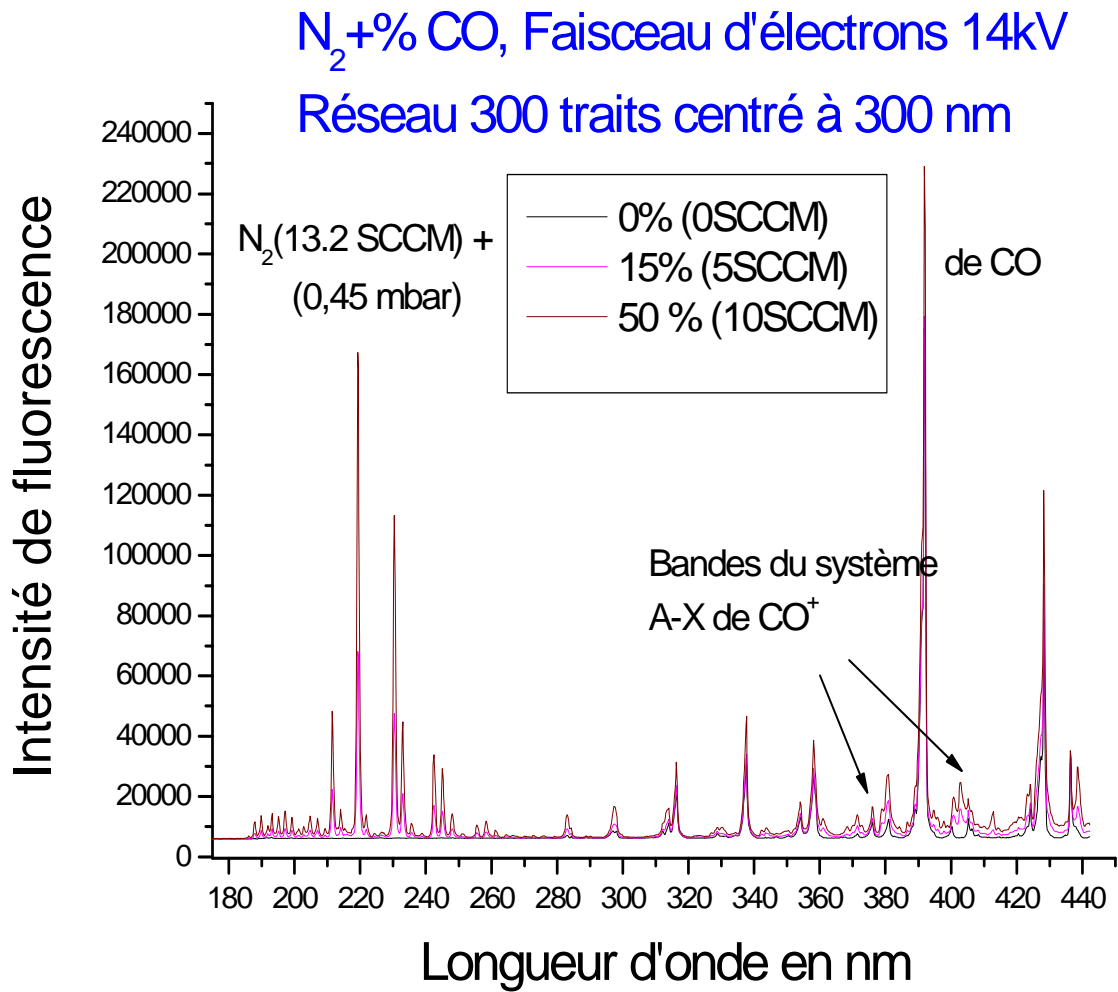


Figure 4.34

Spectre de fluorescence d'un mélange N_2/CO obtenu avec un faisceau d'électrons de 14 keV et d'un réseau de 300 traits. Le rapport 10 SCCM de CO / 13,2 SCCM de N_2 correspond à un mélange 50% / 50 % entre ces deux gaz.

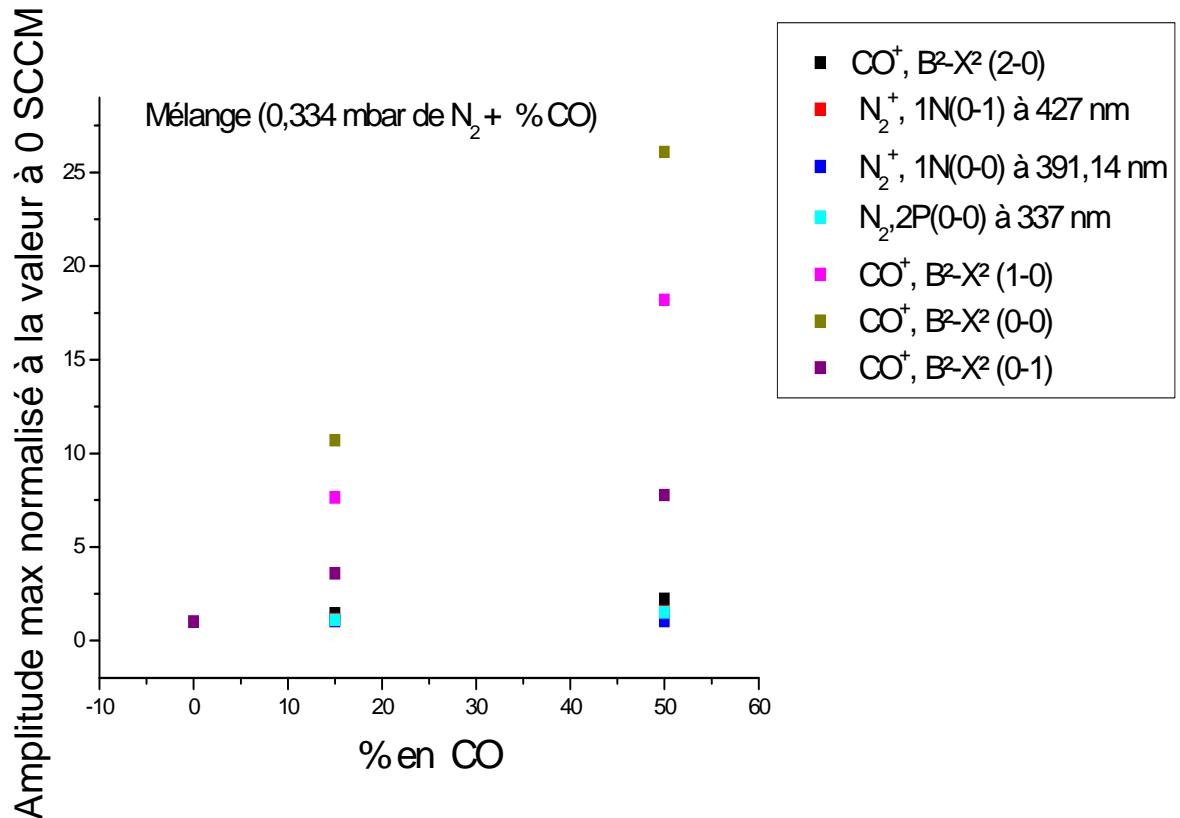


Figure 4.35

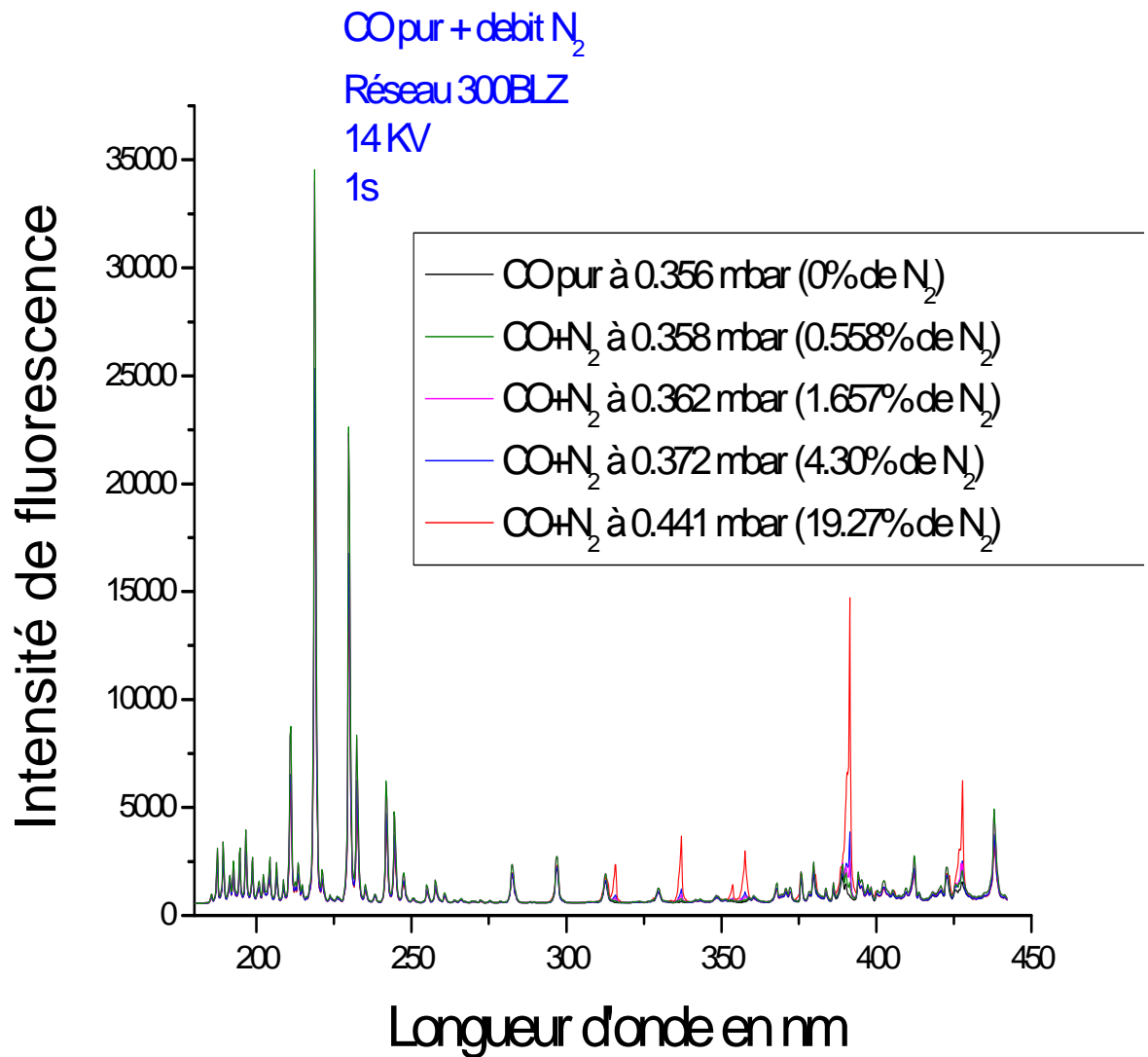
Evolution des amplitudes de têtes de différents systèmes vibrationnels de N_2 et CO en fonction du pourcentage de CO dans le mélange N_2/CO .

On observe la linéarité de l'intensité des bandes de CO en fonction de son pourcentage injecté alors que l'amplitude des bandes de N_2 reste constante (Figure 4.35). Cela montre que qu'il n'y a pas de phénomènes de quenching entre ces deux molécules.

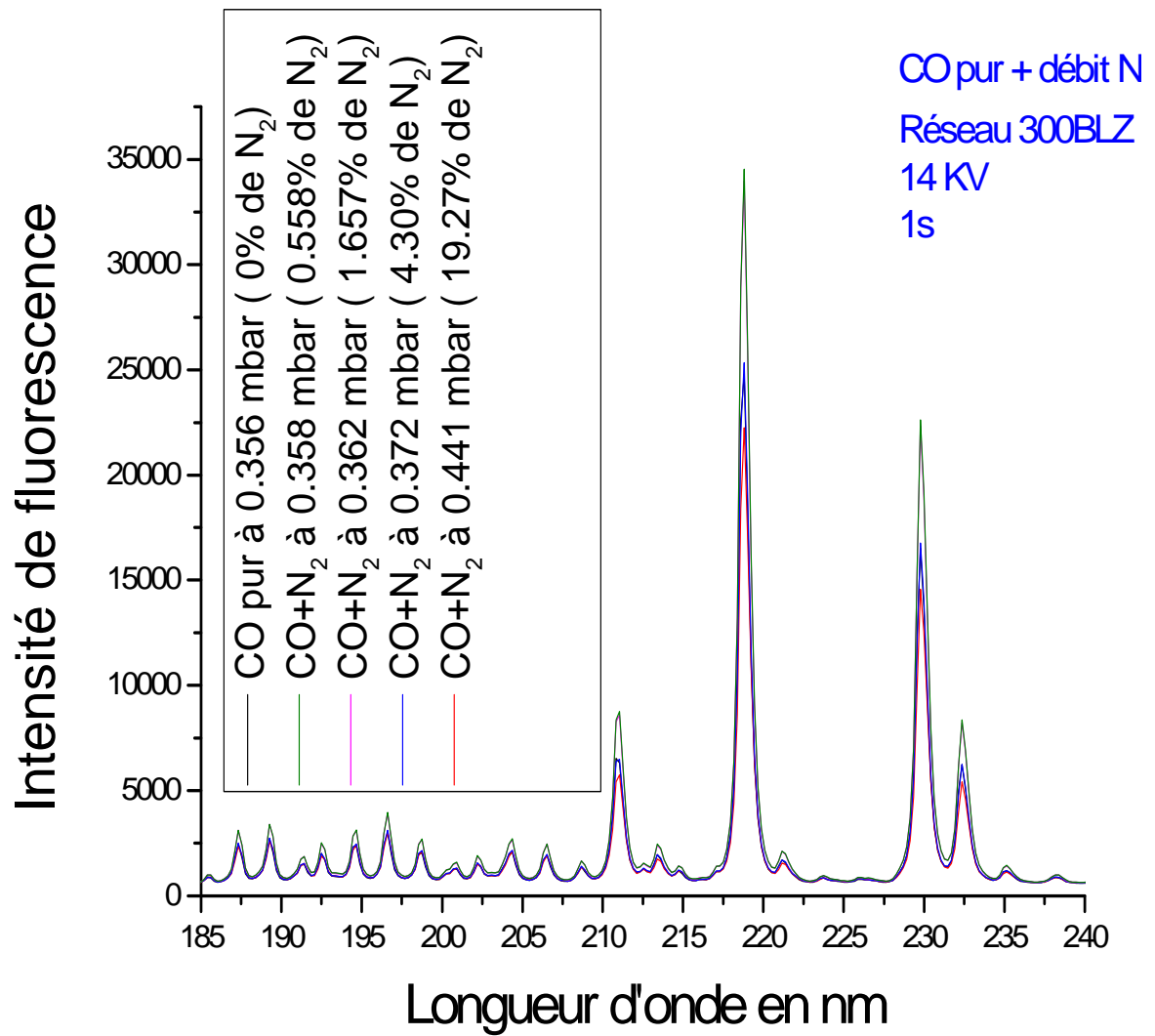
A 50 %, le rapport d'intensité N_2/CO est de 0,77 (Figure 4.34). Ceci correspond au rapport des sections efficaces de collisions entre ces deux molécules, taux proche de celui de Park [4.40]. En statique, on n'observe pas de dissociation, ni de formation de CN ou C_2 , comme dans le tube à choc.

Chapitre IV: Spectroscopie vibrationnelle et rotationnelle

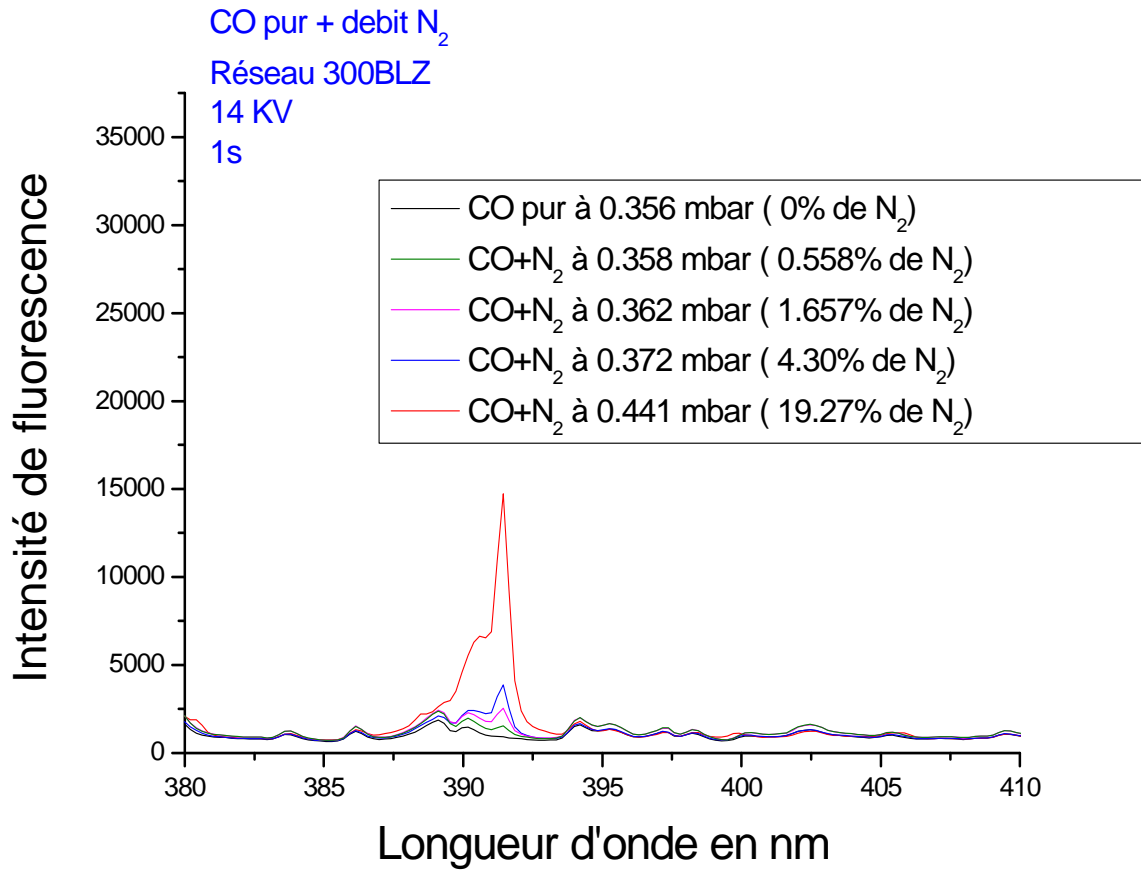
On refait la même opération mais avec N_2 comme gaz minoritaire (injecté de 0 à 20%). La Figure 4.36 (a) représente différents spectres de fluorescence de ce mélange selon le pourcentage de N_2 dans le mélange N_2/CO .



(a) Spectre FFE du mélange N₂/CO avec 0%, 0,56%, 1,66%, 4,3% et 19% N₂



(b) Spectre FFE du mélange N₂/CO : zoom sur la zone 185 nm-240 nm



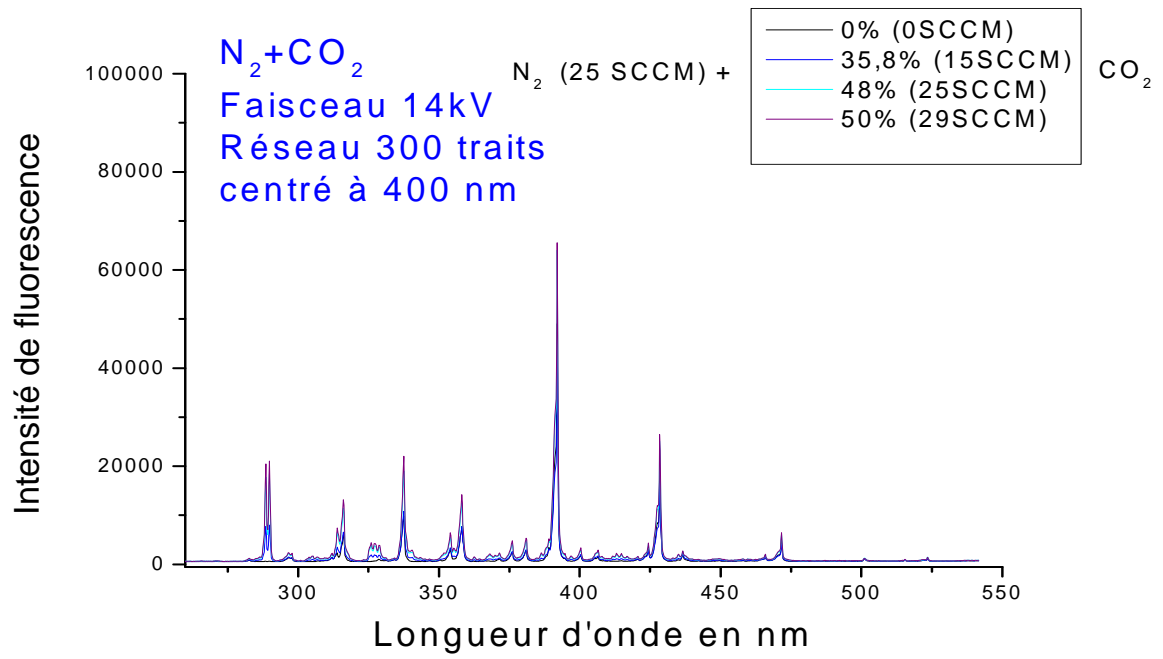
(c) Spectre FFE du mélange N_2/CO : zoom sur la zone 380 nm- 410 nm

Figure 4.36

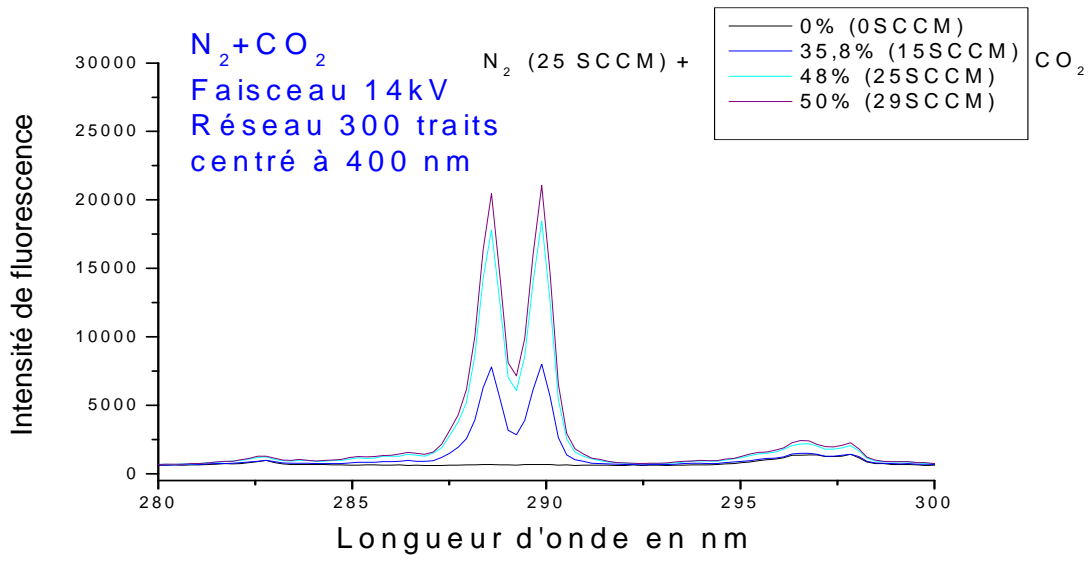
Spectre de fluorescence d'un mélange N_2/CO obtenu avec un faisceau d'électrons de 14 keV et un réseau de 300 traits pour différents pourcentage en N_2 : 0%, 0,56%, 1,66%, 4,3% et 19,27%

➤ N_2/CO_2

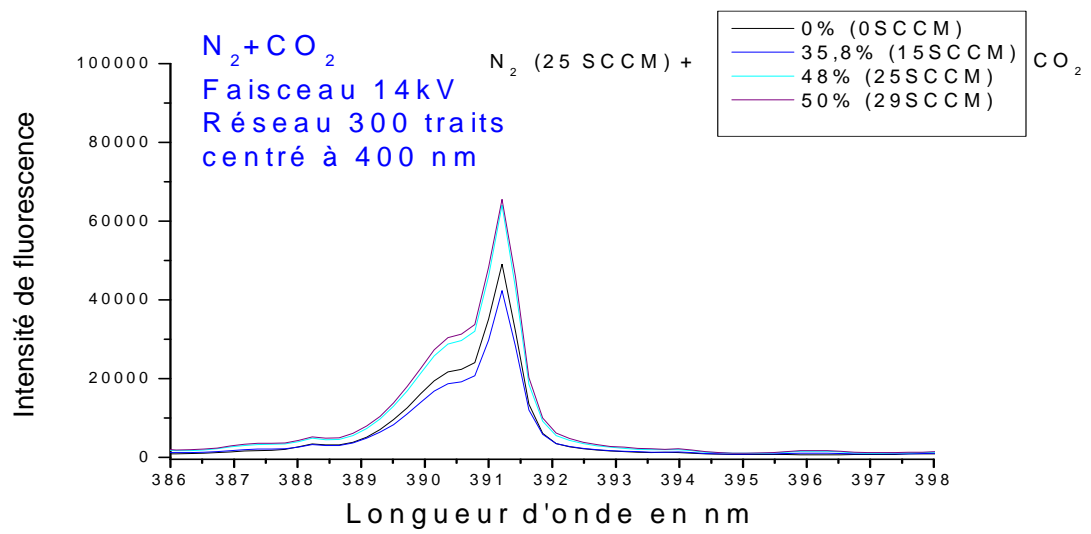
On effectue la même opération pour le mélange N_2/CO_2 .



(a)



(b)



(c)

Figure 4.37

Spectre de fluorescence d'un mélange N_2/CO_2 obtenu avec un faisceau d'électrons de 14 keV et un réseau de 300 traits. Mélange N_2/CO_2 : 25 SCCM de N_2 + 0, 15, 25 et 29 SCCM de CO_2

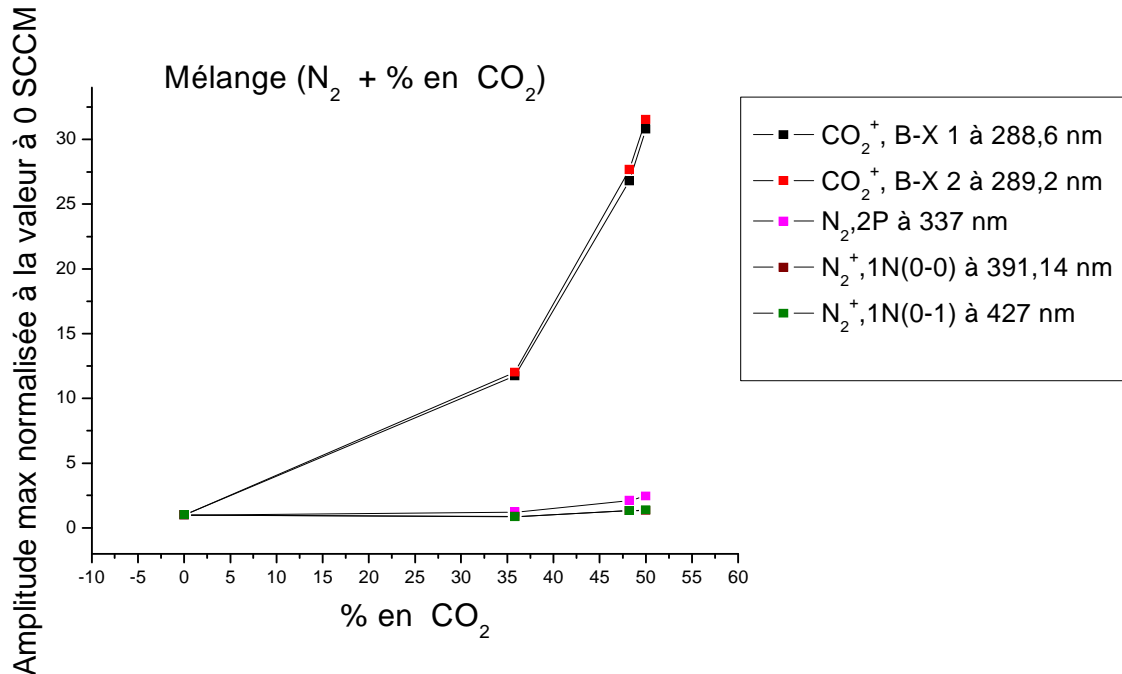


Figure 4.38

Evolution des amplitudes de têtes de différents systèmes vibrationnels de N_2 et CO_2 en fonction du pourcentage de CO_2 dans le mélange N_2/CO_2 . Le rapport 29 SCCM de CO_2 / 25 SCCM de N_2 correspondant à un mélange 50% / 50 %

Les bandes A-X de CO_2 s'ajoutent à celles du système $N_2 2P$ entre 300 nm et 389 nm mais ne perturbent pas celle de $N_2 1N$ à 50%-50% (Figure 4.38). Cependant, quand N_2 est minoritaire par rapport à CO_2 comme c'est le cas dans la composition de *Mars*, ces bandes A-X de CO_2 peuvent perturber le premier système négatif de N_2 à 391,14 nm rendant celui-ci inexploitable pour la détermination des températures, d'où l'utilisation du doublet B-X de CO_2 pour mesurer T_V et T_R mais aussi la densité. En effet, sur la Figure 4.38, la pente linéaire correspondant aux amplitudes du doublet à 289 nm correspond à la variation de pression de CO_2 .

Dans le cas d'un mélange N_2/CO_2 avec N_2 comme gaz minoritaire, on observe également une linéarité des bandes de N_2^+1N par rapport au pourcentage en N_2 dans le mélange comme on peut le voir sur la Figure 4.39 :

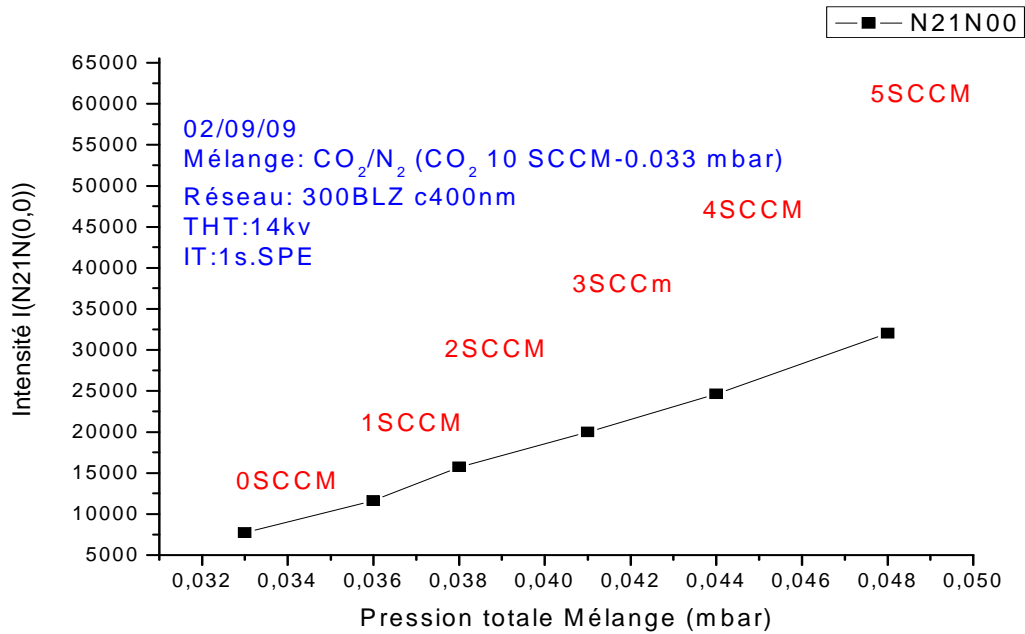


Figure 4.39

Linéarité de l'amplitude maximale de la bande principale N_2^+1N (0-0) du premier système négatif de N_2 par rapport au pourcentage en N_2 du mélange

➤ $N_2/CO_2/CO$

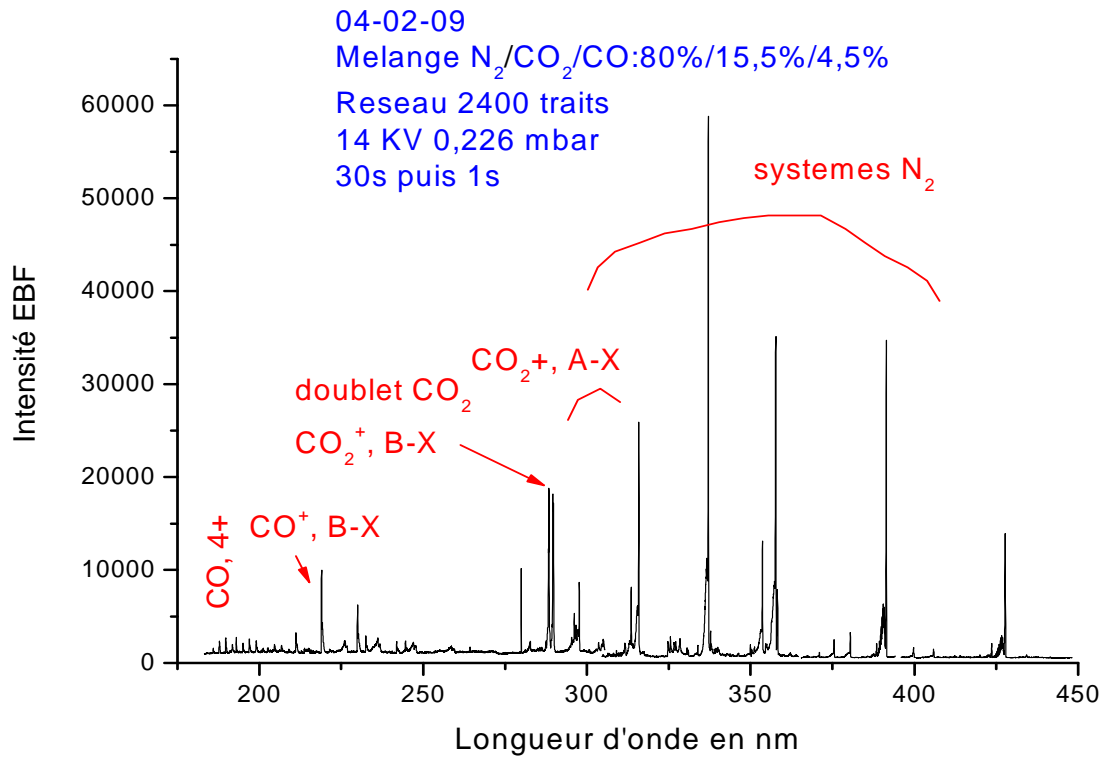


Figure 4.40

Spectre de fluorescence d'un mélange $N_2/CO_2/CO$: 80%/15,5%/4,5% à l'aide d'un faisceau d'électrons de 14 keV et d'un réseau de 2400 traits

On identifie les différentes transitions vibrationnelles et rotationnelles des différentes espèces. Tout d'abord entre 185 nm et 260 nm, on retrouve les bandes du premier système négatif $CO^+, B^2\Sigma_u^+ \rightarrow CO^+, X^2\Sigma_g^+$ Le système $CO^+, A^2\Pi_i \rightarrow CO^+, X^2\Sigma_g^+$ appelé comet-tail système entre 300 et 500 nm et le système vibrationnel : $CO, b^3\Sigma_u^+ \rightarrow CO, a^3\Sigma_u^+$ entre 280 nm et 360 nm se mélangent avec les bandes de vibration du premier système négatif de N_2 dont la bande principale se trouve à 391,14 nm.

4.4 Inversion des spectres

Le programme d'inversion *INVF_LMS* est une extension des programmes *SPECVIB* et *SPECROT* pour la détermination de paramètres tels que la température de vibration ou de rotation. La détermination de ces paramètres se fait par la méthode des moindres carrés. Cette méthode consiste à faire converger les spectres simulés vers les spectres expérimentaux par itération sur les différents paramètres. Une fois la convergence obtenue, on détermine par inversion les paramètres optimisés.

La comparaison entre un spectre simulé et un spectre expérimental peut être représenté par la relation vectorielle suivante tirée de [4.42].

$$I_e = I_S(P) + E \quad \text{Eq. 4-35}$$

où le vecteur I_e contient toutes les intensités discrètes I_e^i de chaque point expérimental; I_S , les intensités calculées en utilisant le modèle d'émission pour les spectres simulés.

Le vecteur P est une matrice colonne regroupant les différents paramètres du modèle et E les erreurs entre les spectres simulés et spectres expérimentaux.

Soit Σ matrice de la variance de I_e , soit $P(I_e)$ la probabilité de l'évènement I_e , l'expression de la variance peut être donnée par :

$$\Sigma = \int (I_e - I_e^0) \cdot (I_e - I_e^0) P(I_e) \delta I_e \quad \text{et la déviance donnée par : } Z_0 = {}^t E W E \text{ où } W = \Sigma^{-1}$$

A partir d'un ensemble de paramètres initiaux regroupés au sein de la matrice P_0 , on peut utiliser un développement de Taylor pour linéariser l'équation Eq. 4-35. On obtient ainsi :

$$I_e = I_S(P_0) + \frac{dI_S(P_0)}{dP} (P - P_0) + E \quad \text{Eq. 4-36}$$

où le terme $\frac{dI_S(P_0)}{dP}$ est appelé Jacobien et noté J , matrice des dérivées partielles des P_0 (densités, températures, etc.)

Soit P_1 une matrice de paramètres optimisés. Les éléments de cette matrice P_1 sont déterminés par une itération de chacun des paramètres à partir de leurs valeurs initiales et de l'erreur acceptable définie auparavant dans le programme d'inversion. L'erreur minimale s'obtient en minimisant la différence $I_e - I_S$. On en déduit ainsi P_1 à partir de l'équation :

$$P_1 - P_0 = ({}^t J \cdot W J)^{-1} {}^t J_1 \cdot W \cdot (I_e - I_S) \quad \text{Eq. 4-37}$$

Ci-dessous, une capture d'écran du programme d'inversion utilisé pour déterminer les températures de vibration et de rotation à partir de la fluorescence de N_2 .

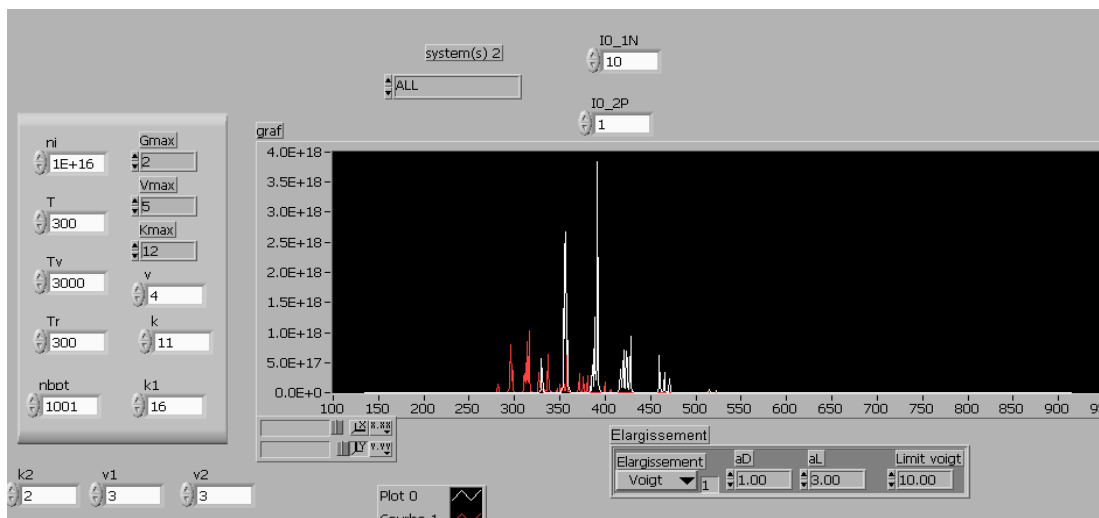


Figure 4.41

Capture d'écran de la partie simulation du programme d'inversion de la température de vibration et de rotation

Conclusion :

L'objectif de ce chapitre était l'analyse spectroscopique de la fluorescence des différents gaz étudiés en rentrée atmosphérique (terrestre ou martienne). Nous avons donc identifié les

systemes vibrationnels et rotationnels les plus importants pour N₂, NO, CO et CO₂. Les programmes SPECVIB, SPECROT et INV_F_LMS développés ont été validés en caisson à vide statique à 300 K. Les deux premiers programmes permettent de simuler de nombreux systemes vibrationnels et rotationnels et, nous ont permis de voir quels sont les systemes qui permettent de déterminer par inversion les paramètres du gaz. INV_F_LMS a été utilisé pour la détermination des températures de vibration et de rotation à partir de spectre de fluorescence acquis en caisson à vide. A la suite de ces développements de codes, nous avons décidé d'effectuer d'autres mesures expérimentales pour une validation notamment dans le cas de mélanges de gaz en écoulement; ce sera l'objet du cinquième chapitre.

4.5 Bibliographie - Chapitre 4

- [4.1] Fantz, U., “ Basics of plasma spectroscopy”, *Plasma Sources Sci. Technol.* **15**, S137–S147, 2006
- [4.2] Fujimoto, T., *Plasma Spectroscopy*, (Oxford : Clarendon), 2004
- [4.3] Griem, H.R., *Plasma Spectroscopy*, (New York : McGraw-Hill), 1964
- [4.4] Lochte-Holtgreven, W., *Plasma Diagnostics*, (Amsterdam : North-Holland), 1968
- [4.5] Griem, H.R., *Principles of Plasma Spectroscopy*, (Cambridge : Cambridge University Press), 1997
- [4.6] Thorne, A., Litzen, U. and Johansson, S., *Spectrophysics : Principles and Applications*, (Berlin : Springer), 1999
- [4.7] Ogier, M-D., “La théorie des orbitales moléculaires et l'émergence de la chimie quantique”, *Thèse de doctorat Université Nancy 2, Juin 2003*
- [4.8] Heisenberg, W., *Zeitschrift für Physik*, **33**, 879, 1925
- [4.9] Born, M., et Jordan, P., *Zeitschrift für Physik*, **34**, 858, 1925
- [4.10] Born, M., Heisenberg, W. et Jordan, P., *Zeitschrift für Physik*, **35**, 557, 1926

- [4.11] Schrödinger, E., “über das verhältnis der Heisenberg-Born-Jordanschen Quantenmechanik zu der meinen”, *Annalen der Physik*, 79, 737-756, 1926
- [4.12] Dunham, L., *Phys. Rev.*, 41, 713 et 721, 1932
- [4.13] Richards, W.G. ,RAFTERY, J., et HINKLEY, R.K.”, The Calculation of Spectroscopic Constants”, *Theoretical chemistry, volume 1, Quantum chemistry*, 162 pages, 1974
- [4.14] Pawlowski, F. et al. , “Accuracy of spectroscopic constants of diatomic molecules from ab initio calculations”, *Journal of chemical physics, volume 118, number 6*, 2003
- [4.15] Querci, M., “Annales d’astrophysique sur les Facteurs FC des molécules diatomiques”, *Provided by the NASA Astrophysics data system*
- [4.16] Hui, A.K., Armstrong, B.H. et Wray, A.A., “Rapid computation of the Voigt and complex error functions”, *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer Volume 19, Issue 5, , Pages 509-516, May 1978*
- [4.17] Herzberg, G., “Molecular Spectra and Molecular Structure. Vol.I. Spectra of Diatomic Molecules”, 2nd Ed., *D. Van Nostrand Co., New York, 1950*
- [4.18] NIST, Molecular Database : <http://webbook.nist.gov/cgi/cbook.cgi>
- [4.19] Gilmore, F.R., Laher, R.R., Espy, P.J., “Franck-Condon factors, r-centroids, Electronic transition moments and Einstein’s coefficients for many Nitrogen and Oxygen band systems”, *J.Phys.Chem.Ref.Data.*, Vol.21, No.5, 1992
- [4.20] Cooley, J.W., Numerov, *Math. Comp.* **15**, 363, 1961
- [4.21] Lago, V. et al., “Electron and vibrational temperatures in hypersonic CO₂-N₂ plasma jets”, *Plasma Sources Sci. Technol.* **16** 139, 2007
- [4.22] Laux, C.O., *von Karman Institute Lecture Series 2002-07*“Radiation and Nonequilibrium Collisional-Radiative Models,”

- [4.23] Szajna, W., Kepa, R., Zachwieja, M., “The first negative ($B^2\Sigma^+ \rightarrow X^2\Sigma^+$) system of CO^+ : excitation of higher vibrational levels”, *Journal of Molecular Spectroscopy*, Volume 223, Issue 2, Pages 125-131, February 2004
- [4.24] Szajna, W., Kepa, R., Zachwieja, M., “Reinvestigation of the $B^2\Sigma^+ \rightarrow X^2\Sigma^+$ system in the CO^+ molecule : The $B^2\Sigma^+ \rightarrow X^2\Sigma^+$ system in CO^+ ”, *The European physical journal. D, Atomic, molecular and optical physics*, vol. 30, n°1, pp. 49-55, 2004
- [4.25] Belikov, A.E., “The electron beam technique in carbon monoxide : Density and quenching rates” *Journal of Electron Spectroscopy and Related Phenomena*, Vol.105, Issues 2-3, pp. 239-244, December 1999
- [4.26] Maier, B., Holland, R.F., “Electronic transition moment for the comet tail system of CO^+ ”, *J. Phys. B* :, 5, 118, 1972
- [4.27] Jain, D.C., “Einstein A coefficients, band oscillator strengths and absolute band strengths for the comet-tail band system of CO^+ ”, *J. Phys. B* :, 5, 199, 1972
- [4.28] Judge, D.L., Lee, L.C., “Electronic transition moments for the $A \rightarrow X$, $B \rightarrow X$, and $B \rightarrow A$ transitions in CO^+ and the $A \leftarrow B$ and $B \leftarrow X$ moments for the $CO \rightarrow CO^+$ systems; absolute cross sections for the absorption processes”, *J. Chem. Phys.* , 57, 455, 1972
- [4.29] Nicholls, R.W., “Franck-Condon factors for ionizing transitions of O_2 , CO , NO and H_2 and for the NO^+ ($A^1\Sigma-X^1\Sigma$) band system”, *J. Phys. B : At. Mol. Phys.* 1 1192-1211, 1968
- [4.30] Nicholls, R.W., “Franck-Condon factors and r-centroids to high vibrational quantum numbers for three band systems of CO^+ and absolute band strengths for the comet-tail system”, *Can. J. Phys.*, 40, 1772, 1962
- [4.31] Kim, S.J., “Fluorescence efficiencies of the A-X and B-X of CO_2^+ in comets”, *Earth Planets Space*, 51,139-145, 1999

- [4.32] McCallum, J.C. and Nicholls, R.W., “Relative intensity measurements on the Fox-Duffendack-Barker $A^2\pi_u \rightarrow X^2\pi_g$ and the ultraviolet doublet $B^2\Sigma_u^+ \rightarrow X^2\pi_g$ band systems of CO_2^+ ”, *J. Phys. B : Atom.Phys.Vol.5, July 1972*
- [4.33] McCallum, J.C. and Nicholls, R.W., “Franck-Condon factors and related quantities for the Fox-Duffendack-Barker $A^2\pi_u \rightarrow X^2\pi_g$ and the ultraviolet doublet $B^2\Sigma_u^+ \rightarrow X^2\pi_g$ band systems of CO_2^+ ”, *J. Phys. B : Atom.Phys.Vol.4, 1971*
- [4.34] Mrozowski, S., “On the $^2\pi_u \rightarrow ^2\pi_g$ bands of CO_2^+ , Part. I”, *Physical Review, Vol.60, Nov.1941*
- [4.35] Mrozowski, S., “On the $^2\pi_u \rightarrow ^2\pi_g$ bands of CO_2^+ , Part. II”, *Physical Review, Vol.62, Sept.1942*
- [4.36] Mrozowski, S., “On the $^2\pi_u \rightarrow ^2\pi_g$ bands of CO_2^+ , Part. III”, *Physical Review, Vol.60, Oct.1947*
- [4.37] Farley, D.R., “Electron Beam Fluorescence of Carbon Dioxide with Application to the Atmosphere of Mars”, *PhD Dissertation, University of California at San Diego, 1996*
- [4.38] Farley, D.R. & Cattolica, R.J., “Spectroscopic modeling of the $CO_2^+ A^2P - X^2P$ (110-010) Renner-Teller bands in the electron beam fluorescence of carbon dioxide”, *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer, 1997*
- [4.39] Farley, D.R. & Cattolica, R.J., “Collisional quenching and excitation cross-sections of the $CO_2^+ A^2P$ (1-3,0,0) and B^2S^+ (0,0,0) excited states from electron-impact ionization”, *Chemical Physics Letters, 1997*
- [4.40] Park, S. “Shock tube determination of CN formation rate in N_2/CO mixture”, *Journal of thermophysics and heat transfer, Vol. 21, No. 1, January–March 2007*
- [4.41] Barbosa, E.B. Lopez, Dudeck, M., Kaminska, A., and Izrar, B., “Numerical Simulation of Non-Equilibrium Hypersonic Flow in a Convergent-Divergent Nozzle : Application to Mars Atmospheric Entry Simulation”, *Proceedings of the 8th*

International Symposium on Experimental and Computational Aerothermodynamics of Internal Flows, Lyon, July 2007

- [4.42] Mohamed, A.K., “MSTP Phase 2 Progress Report. Infrared Diode Laser Absorption Spectroscopy in Wind Tunnels. I-Experimental Setup, II-Data Reduction Procedures” (ESA -HTTN- E34-701&702&703-ONERA), *ONERA Technical Report no 8 and 9 /7301 PY, 1996.*

Chapitre V

5. Chapitre 5 : Etude d'un mélange $N_2/CO_2/CO$ dans la soufflerie *MARHy*

Dans ce chapitre nous présentons les résultats de la campagne de tests en soufflerie continue MARHy du laboratoire ICARE au CNRS à Orléans.

5.1 Objectifs de la campagne de tests

L'objectif de cette campagne de tests en soufflerie est de valider le nouveau prototype de canon à électrons développé à l'ONERA mais également d'effectuer des analyses spectroscopiques de l'air et d'un mélange de gaz de rentrée de type martien ($N_2/CO_2/CO$) en régime continu. L'obtention des spectres en statique, a permis de mettre au point les procédures d'enregistrement et de dépouillement des spectres et l'obtention des mesures en soufflerie permet, de se rapprocher au mieux des conditions thermodynamiques de la rentrée.

5.2 Description de la soufflerie *MARHy*

Le moyen d'essai *MARHy* (*Mach Adaptable for Rarefied Hypersonic*) est une soufflerie continue disposant d'un ensemble de tuyères couvrant une large gamme de conditions d'écoulements : $0,6 < Mach < 21,1$ et $10^2 Re L < 10^5$ ($L=10$ cm) (Figure 5.1 (a)). Anciennement connu sous le nom de *SR3* (Soufflerie Raréfiée 3), son fonctionnement continu est assuré par un groupe de pompage débitant jusqu'à $43m^3/s$. Les conditions d'écoulement s'étendent du régime de gaz raréfié hypersonique jusqu'au régime continu, permettant ainsi l'étude, entre autres, du régime intermédiaire de la transition entre un écoulement continu et un écoulement raréfié. Le fonctionnement en continu donne plus de temps pour les mesures contrairement aux souffleries à rafales (durée de quelques centaines de millisecondes).

Le système de pompage est composé au maximum de 2 pompes primaires, de 2 pompes de type «roots» assurant le vide intermédiaire et de 12 pompes «roots» pour le vide secondaire. L'alimentation en gaz (air ou autre mélange) est assurée par débit réglable à l'aide de vannes papillon. Ces pompes permettent d'atteindre des vides de l'ordre de 10^{-3} mbar. Le tableau de

la Figure 5.1 (b) donne les conditions de fonctionnement nominales réalisables selon la pression de gaz et le type de tuyère utilisé. La soufflerie *MARHy* est composée, d'une part de la chambre de tranquillisation ou caisson génératrice et, d'autre part, d'un caisson d'expérience de 8 m³ de volume (Figure 5.2). Pour une tuyère donnée, l'ajustement des pressions génératrices et pression dans le caisson d'expérience permet l'utilisation en mode adapté. Le réglage de ces deux pressions est réalisé d'une part, par une vanne d'entrée du gaz qui permet d'ajuster la pression génératrice et d'autre part, par la puissance de pompage qui dépend du nombre de pompes «roots» sélectionnés et de l'ouverture de la vanne d'évacuation. Le mélange de gaz se fait au préalable avant introduction dans la chambre de tranquillisation. Une description plus détaillée de l'installation *MARHy* est disponible dans le manuscrit de thèse d'Eric Menier [5.1].

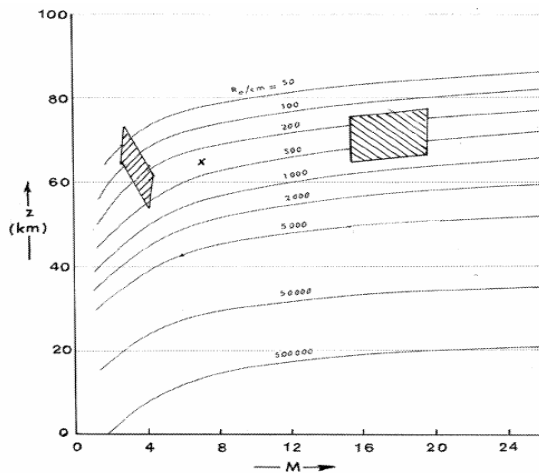
La tuyère à Mach 2

Un des paramètres les plus pertinents pour caractériser un écoulement dans une soufflerie est le nombre de Reynolds Re , défini par :

$$Re = \frac{\rho \cdot U \cdot L}{\mu} = \frac{U \cdot L}{\nu} \quad \text{Eq. 5-1}$$

où ρ est la masse volumique du gaz, μ sa viscosité dynamique, ν sa viscosité cinématique et L , une longueur caractéristique du problème étudié.

Lors de notre étude, pour des raisons de logistique, on a fait l'ensemble des tests avec une tuyère Mach 2 à une pression génératrice de 63 Pa et une pression de sortie de 7,9 Pa. On maintient cette pression dans le caisson avec une configuration de pompes de type 2-2-6 (X-X-X, nombre de pompes sélectionnées). Cet écoulement permet d'étudier le comportement du faisceau d'électrons dans un milieu de densité comparable à celui d'une rentrée atmosphérique terrestre à des altitudes variant entre 70 et 50 kilomètres (ou à des altitudes plus basses pour une rentrée martienne). Un nombre de Reynolds entre 50 et 500 correspond à des nombres de Mach entre 1 et 4 (zone d'étude à gauche sur la Figure 5.1 (a))



(a)

Mach	conditions génératrices			Paramètres dans l'écoulement						
	Po (Pa)	To (K)	Oc (g/s)	P1 (Pa)	P1 (μ mHg)	T1 (K)	Re (cm-1)	V1 (m/s)	Lp (mm)	GAZ
2	20.86	293	1.2	2.666	20	182.78	26.3	511.43	1.129	air
2	41.722	293	1.98	5.332	40	182.78	52.7	511.43	0.563	air
2	62.58	293	3.38	7.99	60	182.78	79	511.43	0.375	air
4	404.79	293	1	2.66	20	69.76	186.6	689.61	0.3318	air
4	809.59	293	2	5.332	40	69.76	373.3	689.61	0.159	air
4	1214.38	293	2.98	7.998	60	69.76	559.9	689.61	0.106	air
6.8	17297.98	1000	2.46	5.021	37.85	97.58	355.2	1368.88	0.284	azote
14.8	2000000	1000	24.19	3.172	23.79	22.03	4584.9	1425.03	0.043	azote
16.3										
18.4	8000000	1200	28.84	0.073	0.55	13.58	293.3	1501.96	1.01	azote
20.2	350000	1100	2.06	0.068	0.51	13.32	284.8	1502.14	1.052	azote

(b)

Figure 5.1

Régime de fonctionnement de la soufflerie selon le type de tuyère utilisée :

(a) Zones de tests (altitude et pression) possibles avec la soufflerie MARHy pour une rentrée martienne et (b) paramètres d'écoulement pour les différentes tuyères associées à MARHy

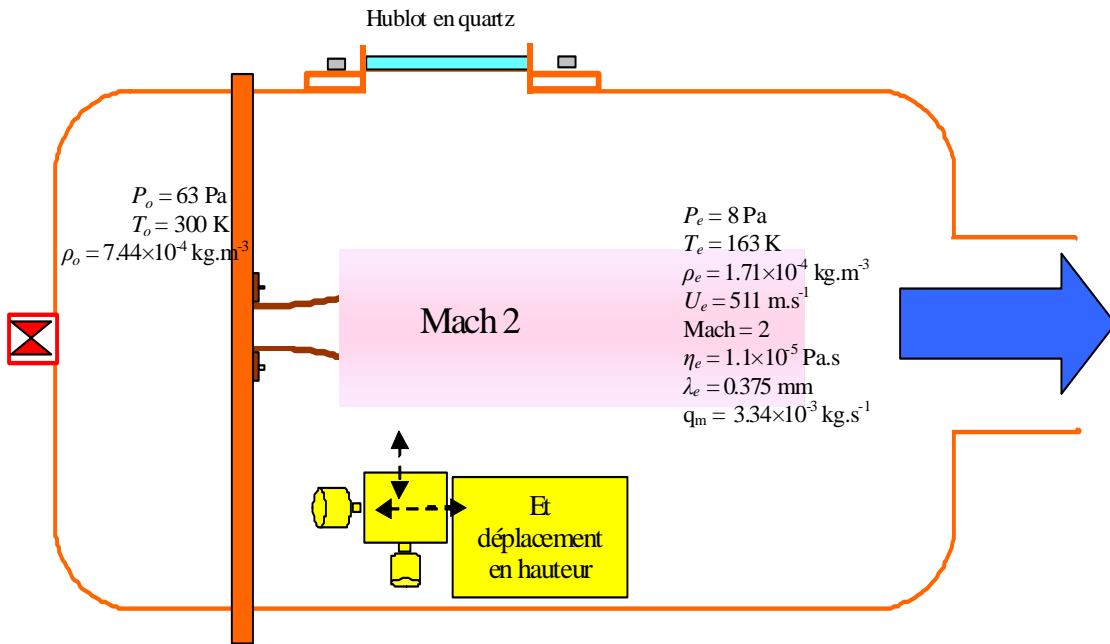


Figure 5.2

Soufflerie MARHy-CNRS/ICARE : Chambre de tranquillisation et caisson d'expérience-conditions de fonctionnement avec la tuyère à Mach 2 (Lago [5.4])

Pour ces essais, la température génératrice ainsi que celle du caisson, à l'extérieur de l'écoulement est égale à 293 K alors que la température au sein de l'écoulement libre est de 163 K (tableau de la Figure 5.2). Ces valeurs sont contrôlées par des thermocouples placés au sein de la chambre de test.

5.3 Adaptation du canon à électrons dans la soufflerie *MARHy*

Le dispositif d'adaptation comprend la fixation mécanique du canon, placé au dessus de la tuyère de façon à extraire un faisceau d'électrons descendant perpendiculairement à l'axe d'écoulement (Figure 5.3). Il comprend toutes les traversées nécessaires au système de commande, d'acquisition et du hublot de visualisation. Le canon à électrons est posé sur deux bras fixés à un support pouvant se déplacer verticalement ou horizontalement par rapport au sens de l'écoulement. La translation de l'ensemble est contrôlée par une commande externe

pilotée par ordinateur. On peut ainsi déplacer le faisceau d'électrons pour le positionner dans les zones de l'écoulement où l'on veut effectuer les mesures.

Une cage de Faraday placée à 30 centimètres de la sortie du faisceau permet de collecter les électrons après traversée de l'écoulement. Cette cage de Faraday repose sur le bloc du canon, l'ensemble se déplaçant simultanément.

Deux thermocouples placés respectivement sur le boîtier d'alimentation haute tension et sur la pompe turbo, permettent de contrôler la température d'échauffement de ces composants durant les essais. Un autre thermocouple placé dans une zone libre du caisson donne la température dans le caisson.

Un système de refroidissement comprenant des serpentins avec une circulation d'eau à 14 °C, permet de maintenir la température de la pompe turbo à 25 °C. Sans ce système de refroidissement, elle peut monter jusqu'à 50 °C.

Les connections avec le système d'acquisition sont réalisées grâce à des connecteurs Geiger étanches (6 ou 12 pins). Afin de minimiser les fuites, on limite le nombre de connections avec l'extérieur. Les connecteurs Geiger transfèrent ainsi les câbles d'alimentation mais aussi les thermocouples, données USB, IEEE etc.

La représentation schématique de l'installation du canon à électrons et de l'ensemble du système de commande et d'acquisition de données est présentée, sur la Figure 5.3.

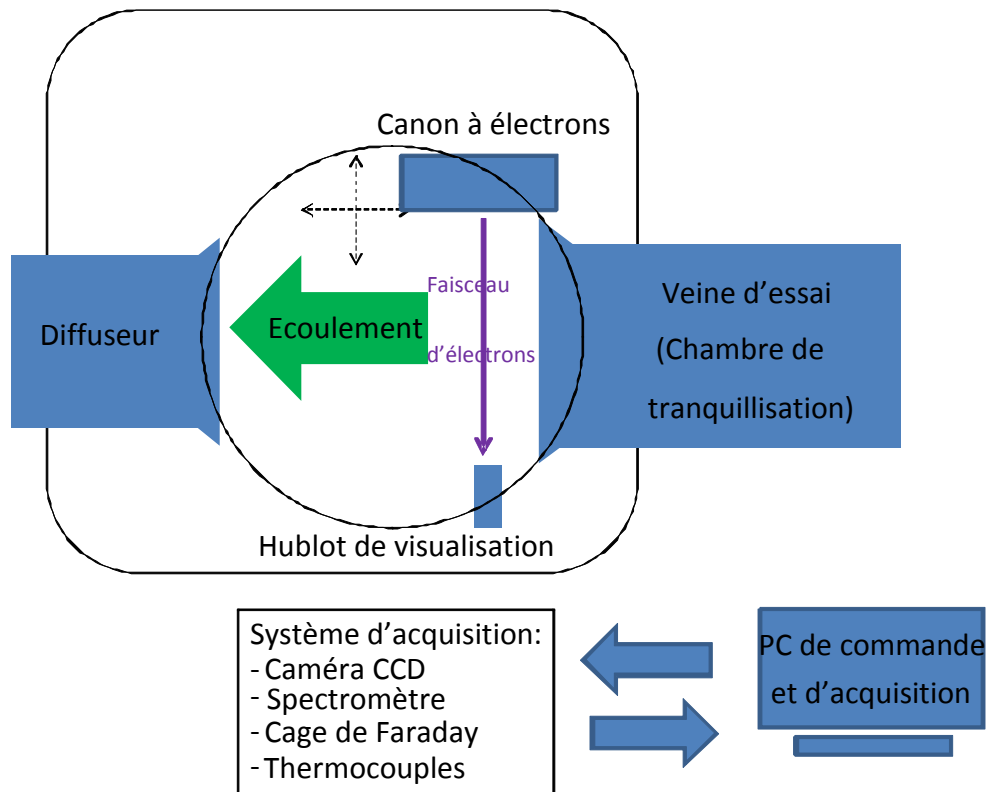


Figure 5.3

Soufflerie Hypersonique MARHy (installation- adaptation du canon à électrons et du système d'acquisition)

5.4 Les conditions expérimentales des mesures

La mise en route du système de pompage permet ensuite de maintenir le vide nécessaire aux mesures. La procédure de mise en route du système de pompage du canon est décrite plus en détail en *Annexes B2/ Installation et procédure d'allumage canon à électrons dans MARHy*.

Le prototype de canon à électrons utilisé pour ces tests, peut fonctionner jusqu'à 20 keV, mais pour minimiser la production de rayonnement X, le point de fonctionnement a été limité à

14 keV \pm 0,2 keV pour un courant de faisceau de 1 mA. Le diamètre de sortie du faisceau est de 3 mm. Le diamètre utile du faisceau dépend de la densité de gaz traversé et de la distance de propagation. Généralement, aux pressions de gaz étudiés, on peut effectuer des mesures jusqu'à une trentaine de centimètres de propagation sans trop de dispersion. Au-delà, le faisceau est dispersé et ne permet plus d'effectuer des mesures locales.

Le canon à électrons est relié à un système de détection placé dans la soufflerie. Il s'agit d'une mini-caméra CCD Basler Scout et d'un mini spectromètre HR4000.

Le système d'acquisition externe est composé de :

- Une caméra CCD PIMAX[®] 1024X1024 pixels placée à l'extérieur et permet de visualiser le faisceau à travers un hublot. Le hublot d'origine en quartz a été remplacé par un hublot en Fluorine (CaF_2) qui a une transmission entre 170 nm et 7800 nm, couvrant ainsi notre zone d'étude.
- Un spectromètre ACTON Insight[®] SP2750A équipé d'une caméra CCD PIXIS[®] 1340X400 pixels avec différents réseaux :
 - 300 traits de transmission maximale à 300 nm
 - 1200 traits de transmission maximale à 300 nm
 - 1200 traits de transmission maximale à 750 nm
 - 2400 traits de transmission maximale à 240 nm

Avant toute mesure, le système optique (système de conjugaison lentille et spectromètre) est étalonné avec des lampes spectrales. L'utilisation de ces différents réseaux permet de choisir la résolution des mesures pour soit observer toutes les bandes vibrationnelles, soit s'intéresser uniquement à la structure rotationnelle. Comme on a vu au Chapitre 4, la résolution spectrale dépend aussi du type de molécule étudiée. Le choix s'effectue donc en fonction de la résolution nécessaire à la mesure mais aussi de l'espèce moléculaire étudiée.

Par exemple avec un réseau de 1200 traits, on observe la bande de vibration principale du premier système négatif de N_2^+ par contre, sa structure rotationnelle n'est pas complètement

résolue. Le réseau de 2400 traits permet de résoudre cette structure. Dans le cas de CO , ce réseau ne permet pas de résoudre complètement la structure rotationnelle du premier système négatif.

Une lentille v.u.v (CaF_2 f-90 mm puis SiO_2 f-80 mm, Annexes F/ Courbe de transmission de quelques matériaux) est placée devant le spectromètre et le couplage permet de collecter la lumière au centre du faisceau d'électrons avec la meilleure résolution spatiale possible. Cette résolution spatiale dépend de la lentille, de l'ouverture de la fente du spectromètre mais également du diamètre du faisceau d'électrons. Elle est placée à environ 10 cm de la fente du spectromètre et à 2 m du centre du faisceau d'électron Figure 5.4.

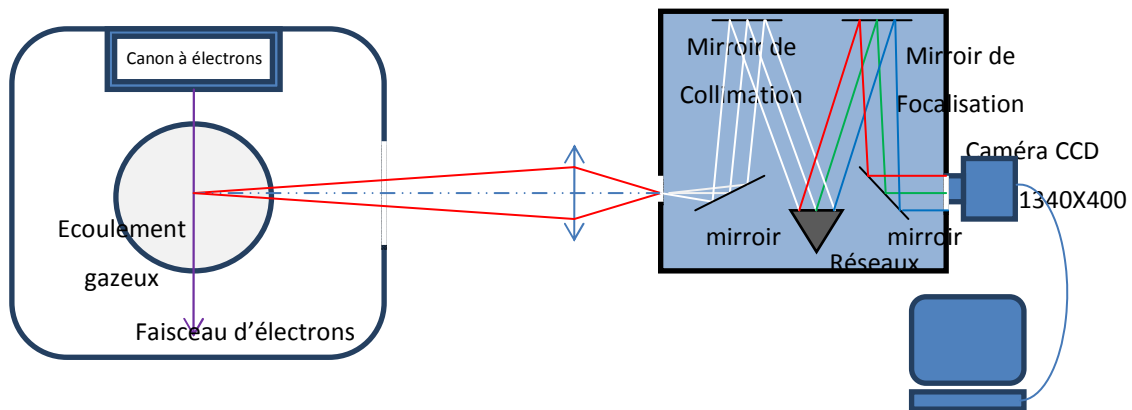


Figure 5.4

Analyse spectroscopique par la FFE : Système de conjugaison du faisceau d'électrons, de la lentille et de la fente du spectromètre.

Avant les mesures, et après chaque changement de réseau on enregistre le bruit de fond (spectre ou image sans faisceau d'électrons). De plus, tous les spectres sont moyennés sur dix acquisitions. Ce bruit sera ensuite soustrait de la mesure.

Comme pour les expériences en statique décrites au chapitre précédent, la calibration en longueur d'onde s'effectue avec une lampe au Mercure. La calibration de l'intensité de la réponse spectrale est effectuée avec une lampe au Deutérium pour la zone u.v [185 nm- 400 nm] et une lampe Halogène pour la zone visible [400 nm- 650 nm] (Figure 5.5).

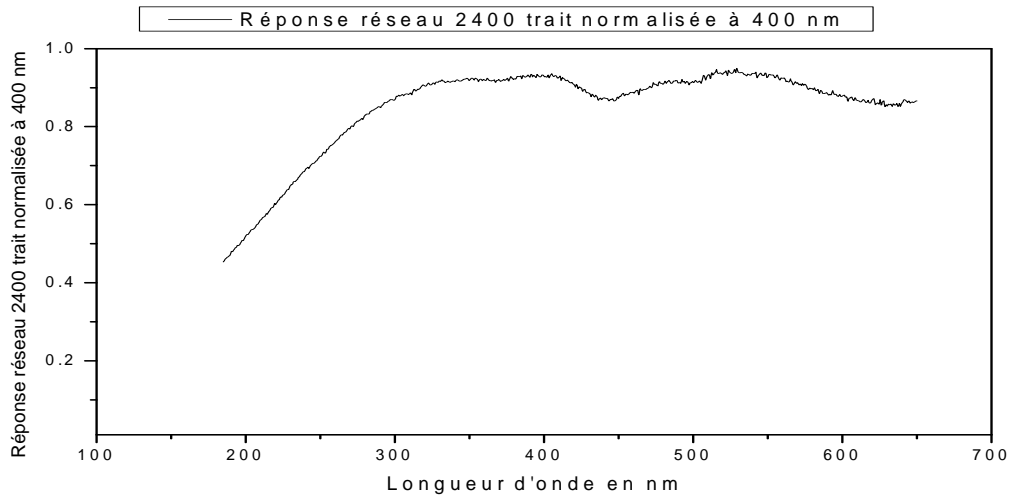


Figure 5.5

Réponse du réseau de 2400 traits : Courbe de réponse spectrale normalisée à 400 nm avec la lampe Deutérium entre 185 nm et 400 nm et la lampe halogène entre 400 nm et 650 nm

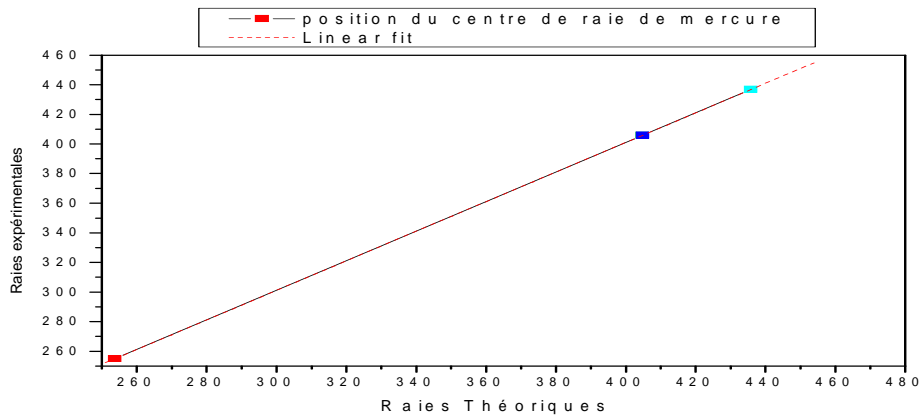


Figure 5.6

Etalonnage en longueur d'onde du spectromètre équipé sur les trois raies principales de la lampe à vapeur de mercure.

L'étalonnage en longueur d'onde s'est fait sur les trois raies connues du mercure (253,6 nm, 365 nm et 435,8 nm). Lors du dépouillement, une série de correction est appliquée aux spectres ou images bruts (soustraction du bruit et correction en réponse).

5.5 Gaz et mélanges étudiés

Durant cette campagne de tests l'air et un mélange appelé Crystal ($N_2/CO_2/CO$) composé de 60% de CO_2 , 37 % de CO et 3% de N_2 ont été étudiés. Les écoulements à grandes vitesses et hautes températures (haute enthalpie) sont le siège de processus physico-chimiques (excitation vibrationnelle, dissociation, ionisation et autres réactions complexes). Dans le cas du phénomène de dissociation dans l'atmosphère de *Mars* (composé de CO_2 97 % et N_2 3%), de nombreuses analyses spectroscopiques Park [5.2], Lago [5.3] et [4.19] ont mis en évidence la formation de CO suite à la dissociation des molécules de CO_2 . L'écoulement dans *MARHy* étant un écoulement froid (163 K), ces phénomènes de dissociation ne sont pas observés. Notre choix s'est porté sur l'étude d'un mélange «pré-dissocié» incluant 37 % de CO et correspondant au degré de dissociation observé dans les mêmes conditions à Mach 2 [5.4] en faisant un rapprochement avec les taux mesurés par Park [4.40].

La masse molaire de ce mélange Crystal est donnée par :

$$M = \frac{60}{100} \cdot 44,01 + \frac{37}{100} \cdot 28,01 + \frac{3}{100} \cdot 28,02 = 37,61 \text{ g. mol}^{-1}$$

On obtient une constante spécifique $R_S = \frac{R}{M} = 221 \text{ J. kg}^{-1}. \text{K}^{-1}$

où $R = 8,31 \text{ J. mol}^{-1}. \text{K}^{-1}$ est la constante des gaz parfait.

Dans ce qui suit, on utilise les paramètres : P la pression, T la température R_e le nombre Reynolds et v la vitesse. Les indices 0 et ∞ représentent respectivement les conditions génératrices et les conditions de l'écoulement libre. La masse volumique est donnée par l'équation des gaz parfaits :

$$\rho_0 = \frac{P_0}{R_S \cdot T_0} \quad \text{Eq. 5-2}$$

où $\rho_0 = 7,442.10^{-4} kg.m^{-3}$ à $P_0 = 62,8 Pa$ et $T_0 = 293 K$ et $R_s = 287,1 J.kg^{-1}.K^{-1}$, la constante spécifique de l'air sec. R_s est calculé à partir de la masse molaire de l'air sec qui vaut $28,97 g.mol^{-1}$ et de la constante des gaz parfait R .

5.6 Conditions générales dans l'écoulement

Les conditions dans les écoulements Mach 2 d'air et du mélange CRYSTAL sont regroupées dans ce tableau suivant :

<i>Conditions génératrices</i>	<i>Air</i>	<i>Mélange Crystal</i>
$T_0 (K)$	293	293
$P_0 (Pa)$	62,6	62,3
Masse molaire mol	28,958	37,61
$R_s (J.kg^{-1}.K^{-1})$	287,11	221,06
$\rho_0 (kg.m^{-3})$	7,442E-04	9,619E-04
<i>Conditions de d'écoulement</i>	<i>Air</i>	<i>Mélange Crystal</i>
M_∞	2	2
$T_\infty (K)$	162,8	162,8
$P_\infty (Pa)$	8	8
$\rho_\infty (kg.m^{-3})$	1,712E-04	2,223E-04
$v_\infty (s^{-1})$	511,61	448,93
$\mu_\infty (Pa.s)$	7,18E-03	5,648E-03
$n_\infty (m^{-3})$	$3,56.10^{21}$	$3,56.10^{21}$

Tableau 5-1

Conditions génératrices et dans l'écoulement libre de l'air et du mélange Crystal

La vitesse d'écoulement est de 511,6 m/s dans l'air contre 448,9 m/s dans le mélange CO_2 . Ces deux gaz n'ayant pas la même viscosité dynamique, le nombre de Reynolds est plus important dans le mélange Crystal, il s'y produit plus de phénomènes réactionnels.

5.7 Résultats et discussions

5.7.1 Tenue sous vide des différents composants

Au terme de cette campagne de tests, il ressort que l'ensemble des composants moléculaires associées au canon à électrons (alimentation haute tension, alimentation source d'ions, pompe turbo, jauge et capteur de pression, caméra Basler Scout, spectromètre HR4000) fonctionne dans une ambiance de vide allant jusqu'à 10^{-2} mbar (1 Pa) à l'exception de la pompe turbo pour laquelle il faut ajouter un système de refroidissement avec une circulation d'eau à 14 °C.

Le faisceau d'électrons de 14 keV reste stable sur toute la durée des tests (parfois jusqu'à 30 minutes). Le pompage différentiel permet de maintenir la pression dans la chambre d'ionisation autour de 2 Pa.

En mode statique, en faisant varier la pression dans le caisson, nous avons déterminé la plage de fonctionnement de la chambre d'ionisation :

- Pour une pression dans le caisson d'essai entre 10^{-1} et 1 mbar, la pompe turbo tourne à grande vitesse et assure le pompage différentiel en maintenant une pression de quelques Pascals (entre 2 et 8 Pa) dans la chambre d'ionisation ce qui assure un bon rendement d'ionisation et un bon rendement d'extraction d'électrons, on obtient ainsi un faisceau d'électrons stable.
- Pour une pression dans le caisson d'essai entre 10^{-2} et 10^{-1} mbar, il n'est pas nécessaire de faire fonctionner la pompe turbo-moléculaire à grande vitesse. Le mode de fonctionnement à vitesse moyenne ou «standby mode» (66 % de sa vitesse maximale c'est-à-dire à $60000 \text{ tr.min}^{-1}$) ne permet pas de maintenir la pression dans la plage de fonctionnement autour de 2 Pa. Avec une telle vitesse de pompage, la chambre d'ionisation se vide très vite ce qui affaiblit le rendement d'ionisation. Il en résulte un faisceau d'électrons instable voire une perte totale du faisceau. Pour pallier ce problème

nous avons dû introduire une faible quantité de gaz directement dans la chambre d'ionisation via une fuite réglable. Cette solution n'est pas sans problème. En effet, la fuite étant réglée de l'extérieur à partir d'une vanne, il subsiste une instabilité temporaire due au temps de réponse et de stabilisation de la pression dans la chambre d'ionisation.

- Enfin lorsque la pression dans le caisson est inférieure à 10^{-2} mbar, la chambre d'ionisation travaille dans sa plage de fonctionnement.

En résumé la stabilité du faisceau d'électrons dépend fortement de la pression dans la chambre d'ionisation, donc du pompage différentiel qui doit maintenir cette chambre entre 2 et 8 Pa quel que soit la pression extérieure dans l'écoulement.

Trois adaptations sont donc envisageables :

- Utiliser une pompe turbo-moléculaire avec une vitesse de pompage réglable pour adapter la vitesse de pompage par rapport à la pression dans le caisson.
- Pour garder la stabilité et réagir de façon efficace par rapport aux variations de pressions dans l'écoulement (présence d'une onde de choc, variation brusque de pression), il faudrait asservir le système de pompage avec une fréquence très grande, de l'ordre du temps caractéristique de l'écoulement.
- Introduire de l'air dans la chambre d'ionisation par une petite fuite réglable et assez proche de la chambre d'ionisation. Nous avons testé cette fuite lors de notre campagne (grâce à une vanne réglable manuellement) mais en conditions réelles ou en soufflerie à rafales il faudra l'asservir de manière à suivre des variations de pression rapides.

5.7.2 Visualisation d'écoulement devant un obstacle

Nous nous sommes intéressés aux conditions d'écoulements Mach 2 de l'air sec et du mélange Crystal. La Figure 5.7 montre un exemple d'image (caméra CCD PIMAX[®]) de la distribution spatiale du faisceau d'électrons d'énergie de 14 keV dans un écoulement Mach 2 du mélange Crystal.

Sur la Figure 5.7 (a) l'intensité maximale d'émission du faisceau varie avec la distance de propagation. Il y a en effet, une modification de la distribution des électrons le long de l'axe de propagation suite à la dispersion du faisceau d'électrons.

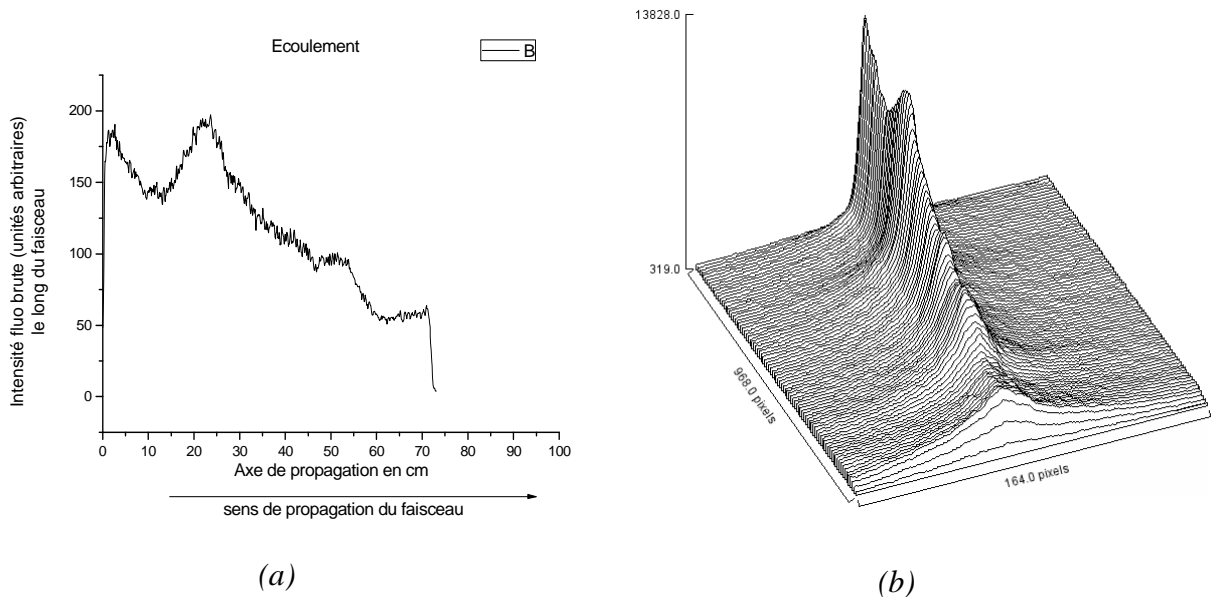


Figure 5.7

Distribution d'intensité du faisceau d'électrons dans un écoulement libre Mach 2 du mélange Crystal

Dans les figures suivantes, on présente les images du faisceau à proximité de l'obstacle. On visualise aussi l'onde de choc provoquée par cet obstacle. Il s'agit d'un disque non réfléchissant de 3 cm de diamètre. Cette onde de choc provoque un phénomène de post-luminescence. En effet, le plasma créé par le faisceau après excitation par les électrons primaires, reste actif jusqu'à destruction des électrons secondaires pouvant ré-exciter le gaz et c'est la convection de ce plasma suivant la vitesse et la densité de l'écoulement qui est ainsi *visible*. Certains électrons secondaires à plus grande vitesse que l'écoulement peuvent partir aussi en amont; ce peut expliquer la luminescence, qui est plus faible, en amont et tout autour du faisceau.

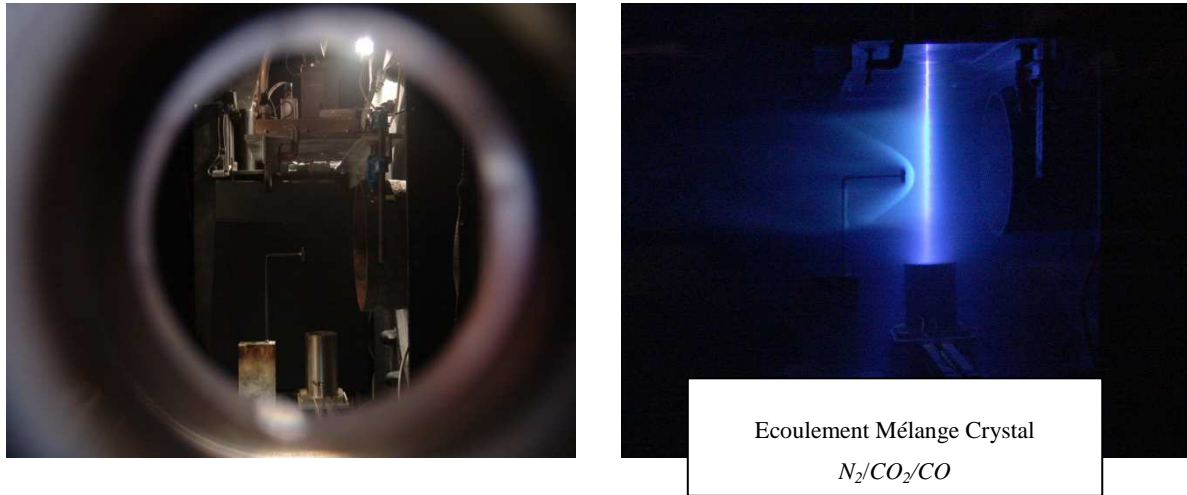


Figure 5.8

Visualisation à travers le hublot, du faisceau d'électrons placé devant un obstacle (image de gauche) et de la fluorescence induite par un mélange Crystal à Mach 2 (image de droite)

On compare les images obtenues avec l'air et le mélange Crystal (Figure 5.9 et Figure 5.10).



Figure 5.9

Exemple de faisceau d'électrons dans un écoulement Mach 2 à 9 cm de la sortie de veine et à 3 cm d'un obstacle.

La masse volumique du mélange Crystal est supérieure à celle de l'air sec. Les bandes CO_2 du mélange Crystal sont ainsi plus intenses que celles de N_2 dans l'air sec car il y a plus d'électrons secondaires, l'onde de choc est plus prononcée pour le mélange. La fluorescence avec le mélange Crystal est caractérisée par la couleur bleue distinctive du système A-X de CO_2^+ alors que la couleur violette de l'air sec est principalement due à la bande 391,14 nm du premier système négatif de N_2^+ .

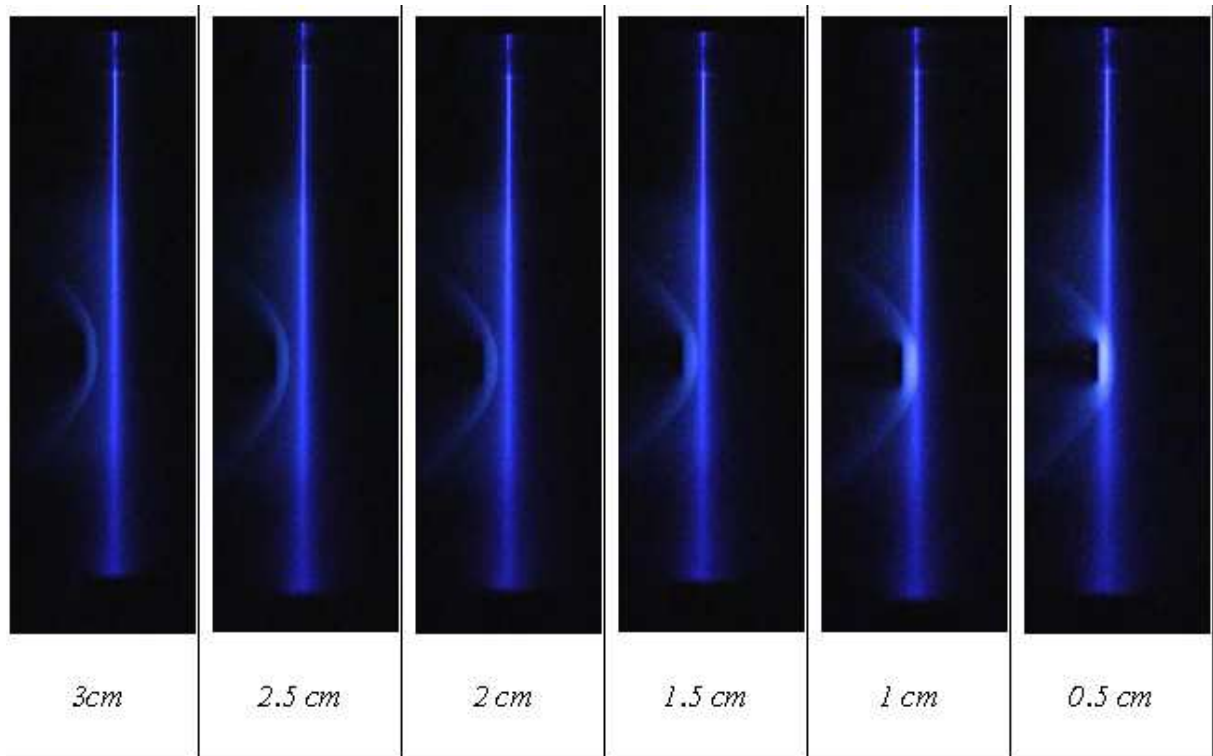


Figure 5.10

Écoulement devant un obstacle placé à 12 cm de la sortie de veine. Faisceau d'électrons initialement à 3 cm de l'obstacle puis déplacement vers l'obstacle : visualisation de l'onde de choc pour le mélange Crystal à Mach 2

En déplaçant le faisceau vers l'onde de choc avec une vitesse lente pour qu'il reste stable, on obtient le profil de densité de l'écoulement jusque devant l'obstacle.

5.7.3 Analyse spectroscopique

5.7.3.1 Spectroscopie de l'air sec

5.7.3.1.1 Statique et en écoulement libre Mach 2

Le faisceau d'électrons est placé initialement à 9 cm de la sortie de veine. Le réseau de 1200 traits a été choisi pour visualiser les bandes correspondant au système vibrationnel de N_2^+ (le premier négatif N_2^+1N et second positif N_22P). Ce système et son intervalle de longueur d'onde (300 nm- 400 nm) sont très utilisés; dans la plupart des mesures *FFE* dans l'air ou d'autres mélanges contenant des proportions importantes de diazote (N_2).

La Figure 5.11 présente le spectre obtenu dans l'écoulement d'air à Mach 2 de *MARHy*.

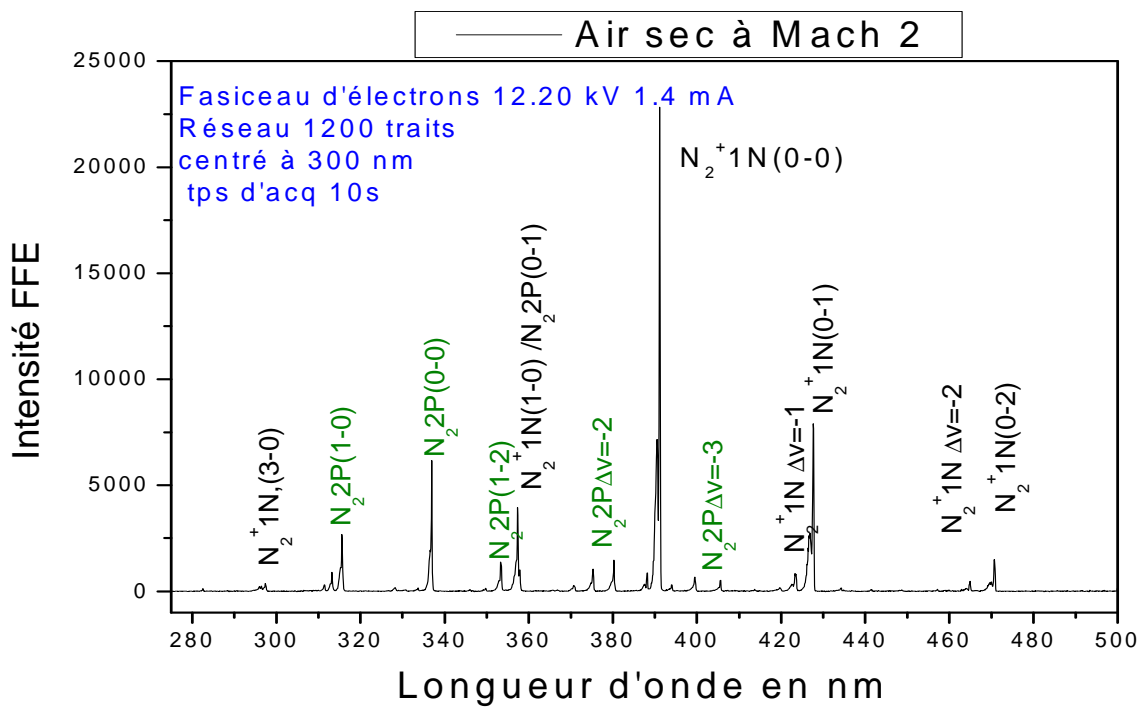


Figure 5.11

Systèmes de vibration dans le cas d'un écoulement d'air sec à Mach 2 avec un faisceau d'électrons de 12.20 keV et un temps d'acquisition de 10 secondes.

On retrouve les séquences des bandes $\Delta v = -2, \Delta v = -1, \Delta v = 0, \Delta v = +1, \Delta v = +2$ etc. du premier système négatif N_2 , $1N$ (avec sa bande principale $N_2^+, 1N(0-0)$ centré à 391,14 nm) et du second système positif N_2 , $2P$ (avec sa bande principale centrée à 337 nm) avec le réseau de 1200 traits.

En utilisant le réseau de 2400 traits centré à 390 nm (Figure 5.12), on peut résoudre la structure rotationnelle de la bande principale du premier système négatif $N_2^+, 1N(0-0)$. La Figure 5.12 représente les spectres rotationnels de fluorescence de ce système en statique et en écoulement Mach 2. En écoulement froid (163 K), la distribution de population rotationnelle est concentrée sur les premiers niveaux, contrairement au cas statique où celle-ci est beaucoup plus étalée Figure 5.13. La Figure 5.14 présente la différence de distribution entre spectres de rotation d'un gaz statique et d'un écoulement Mach 2 d'air (dans les mêmes conditions de faisceau d'électrons).

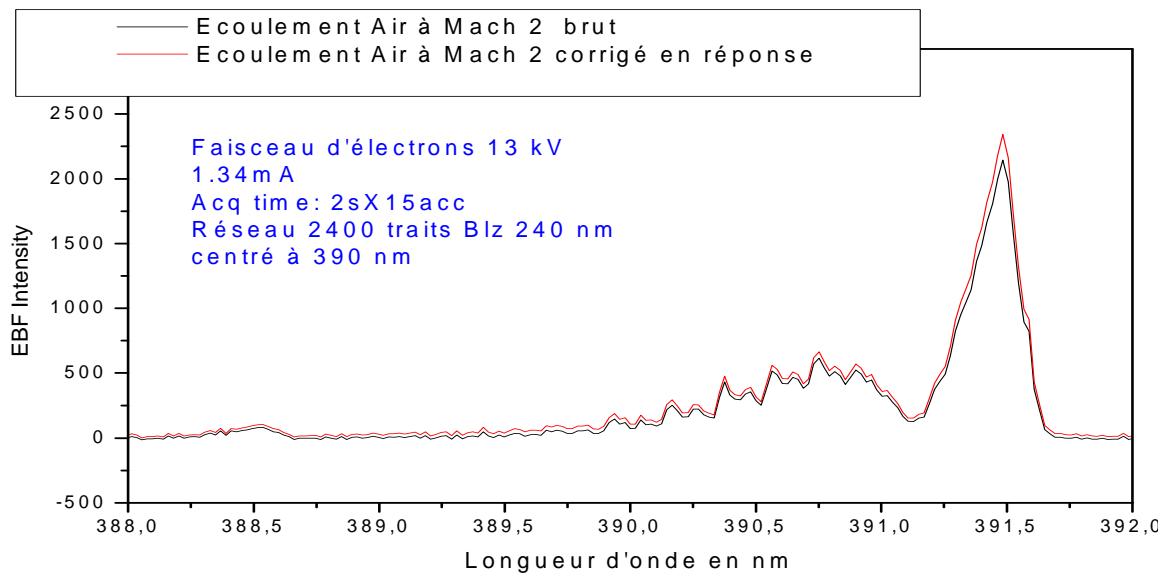


Figure 5.12

Structure rotationnelle de $N_2^+ 1N(0,0)$ d'un écoulement d'air à Mach 2 : Spectre brut et spectre FFE corrigé en réponse spectrale

La correction en intensité est prise en compte sur la Figure 5.13.

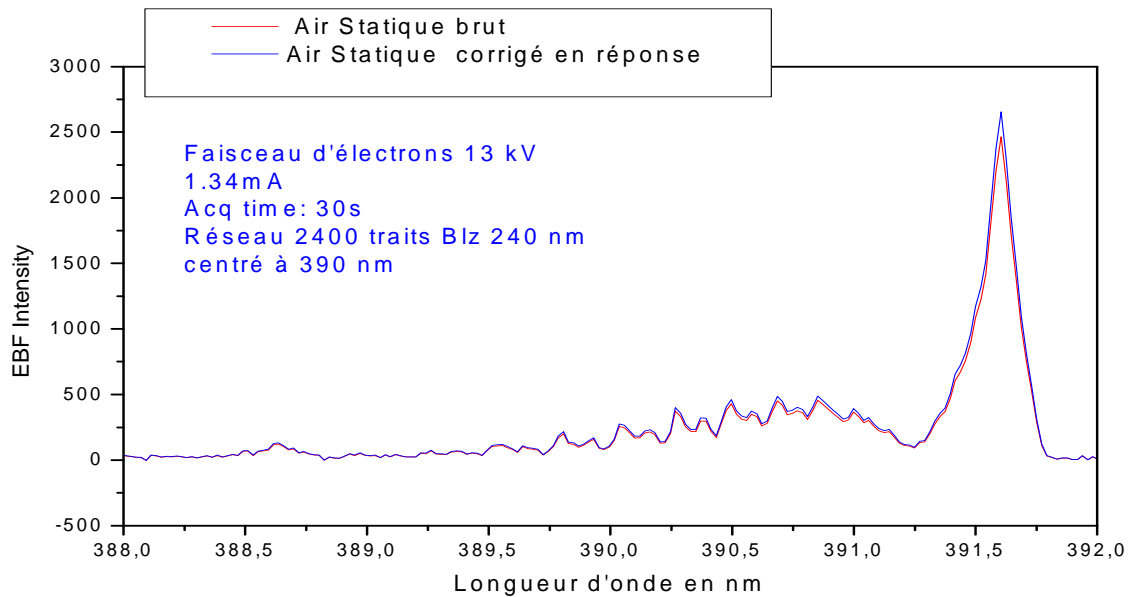


Figure 5.13

Structure rotationnelle de N_2^+ 1N(0,0) de l'air statique : Spectre brut et spectre FFE corrigé par la réponse spectrale

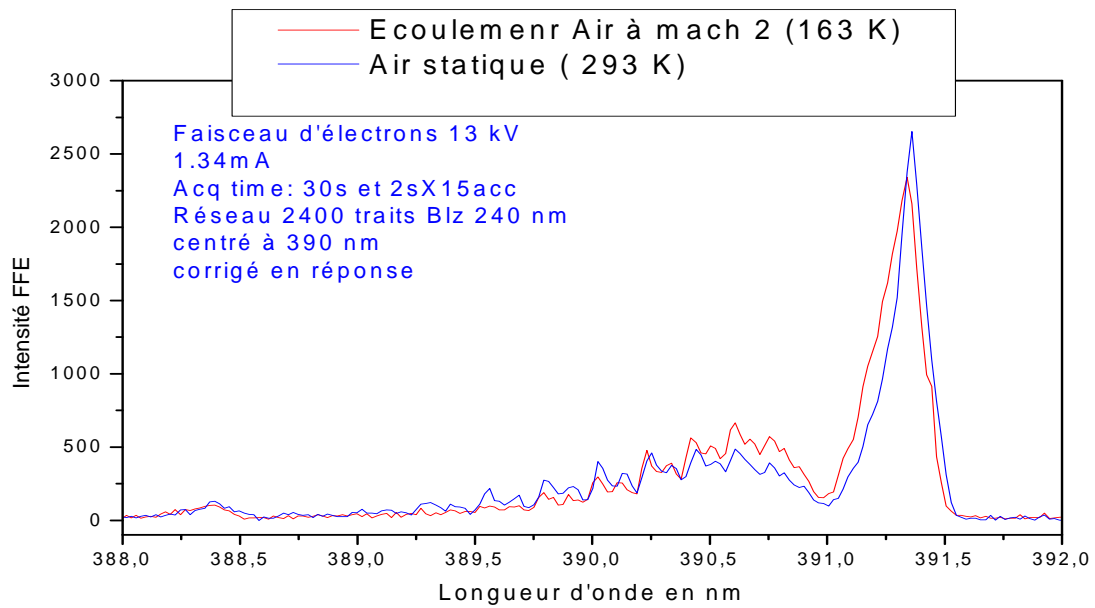


Figure 5.14

Structure rotationnelle de la bande principale du premier système négatif de $N_2^+ : N_2^+, 1N(0-0)$ en statique et en écoulement libre Mach 2 au centre du faisceau à 9 cm de la sortie de veine (à l'aide du réseau de 2400 traits)

La structure fine rotationnelle n'étant pas la même dans un gaz statique et dans un écoulement Mach 2, on peut mesurer la variation de température de rotation T_R .

L'utilisation du programme d'inversion *INVF_LMS* permet de déterminer les températures expérimentales de rotation.

Une convergence des spectres simulés vers les spectres expérimentaux de rotation, a permis de trouver des températures de 298 K en statique et 164,9K en écoulement libre³ Mach 2 soit un écart de 1,1 % par rapport aux valeurs théoriques (300 K et 163 K) (Figure 5.15 et Figure 5.16).⁴

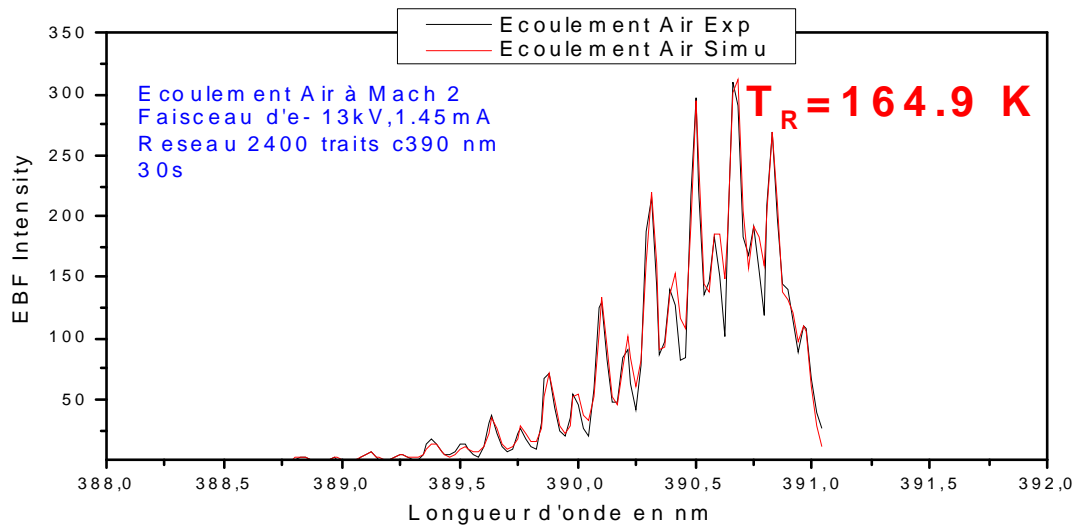


Figure 5.15

Détermination (par la méthode d'inversion) de la température de rotation à partir de la structure rotationnelle de la bande (0-0) du premier système négatif $N_2^+ 1N$ dans un écoulement libre d'air à Mach 2.

³ La température de rotation T_R est déterminée après une convergence du spectre simulé vers s spectre expérimental corrigé. Une itération avec comme paramètre T_R permet de trouver la température de convergence qui correspond à l'écart minimal entre ces différents spectres

⁴ 163 K correspond à la température de fonctionnement nominale dans l'écoulement, déterminée lors de l'installation et des premiers tests avec la tuyère à Mach 2 [5.1]

Le spectre ci-dessus simulé (en rouge) correspond à la meilleure convergence vers le spectre expérimental (en noir).

On procède la même manière pour déterminer la température de rotation dans le cas d'un gaz statique d'air sec à 8 Pa. La Figure 5.16 présente le spectre simulé convergeant vers un spectre expérimental d'air statique à 8 Pa acquis avec un faisceau d'électrons de 13 keV et un réseau de 2400 traits.

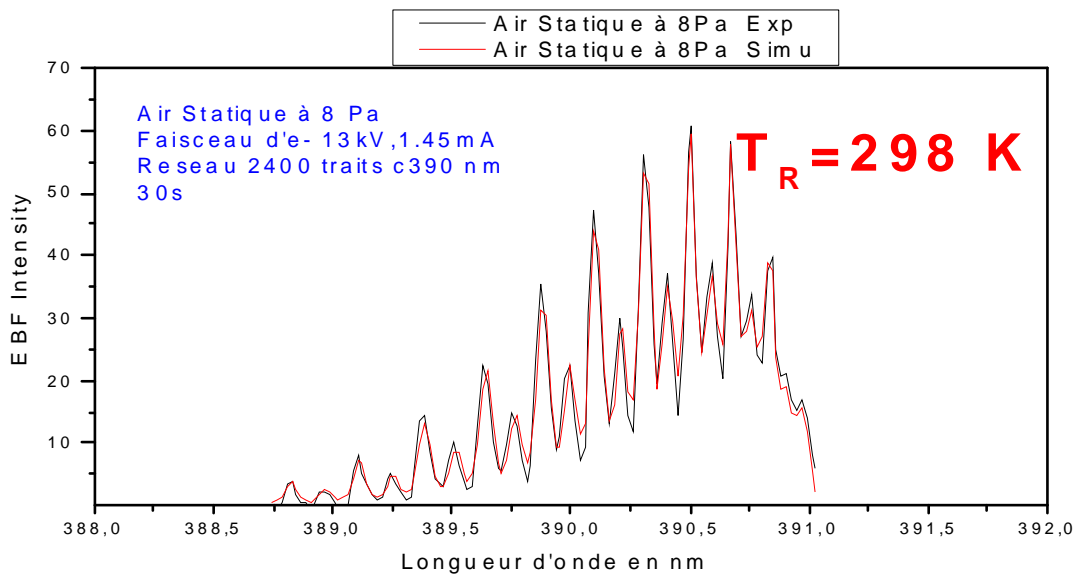


Figure 5.16

Détermination par la méthode d'inversion de la température de rotation à partir de la structure rotationnelle de la bande (0-0) du premier système négatif N_2^+ , 1N dans l'air statique. Convergence du spectre simulé vers le spectre expérimental

Comparons les transitions de la branche R sur les spectres des Figure 5.15 et Figure 5.16. Dans l'air sec statique ($T_R=298$ K) on observe les transitions jusqu'à $\Delta k= \pm 11$ contre seulement $\Delta k= \pm 8$ pour l'écoulement Mach 2 ($T_R=164$ K). Cependant les intensités correspondant à ces branches sont plus importantes dans le cas de l'écoulement. Ceci confirme l'observation déjà faite concernant l'étalement de la structure rotationnelle avec la

température. Ainsi des transitions $k' - k''$ s'étalent jusqu'à 388,75 nm pour le gaz statique alors qu'elles sont presque nulles à 389,25 nm pour l'écoulement Mach 2.

Une comparaison a également été faite avec *LIFBASE*[®], qui est un logiciel de simulation directe de spectres de fluorescence de molécules diatomiques. Les figures suivantes représentent des spectres simulés avec les températures trouvées avec notre méthode d'inversion par le programme *INVF_LMS* (Figure 5.17 et Figure 5.18).

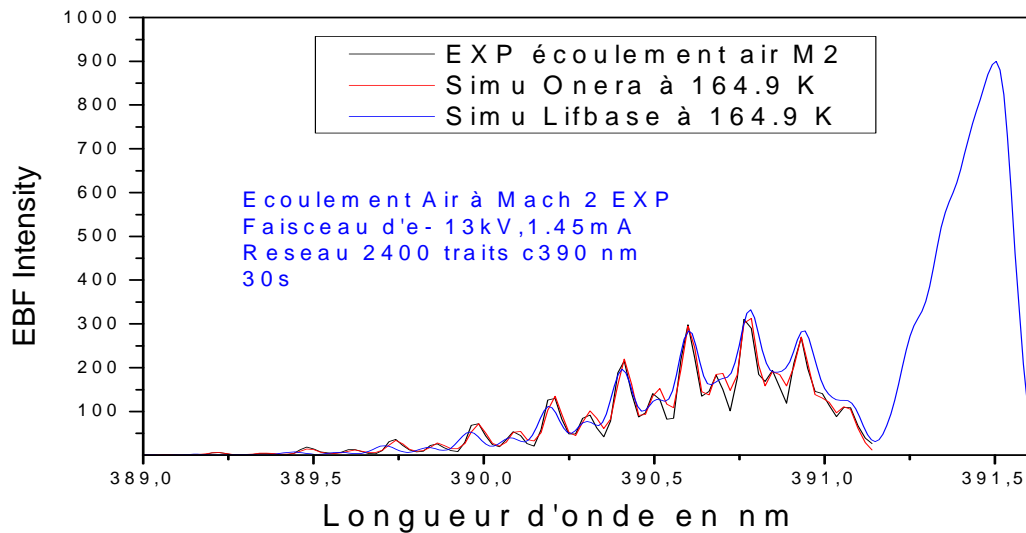


Figure 5.17

$N_2^+, B-X (0-0)$: spectre expérimental (écoulement Air Mach 2 FFE) et simulation ONERA et *LIFBASE*[®] à 164,9 K

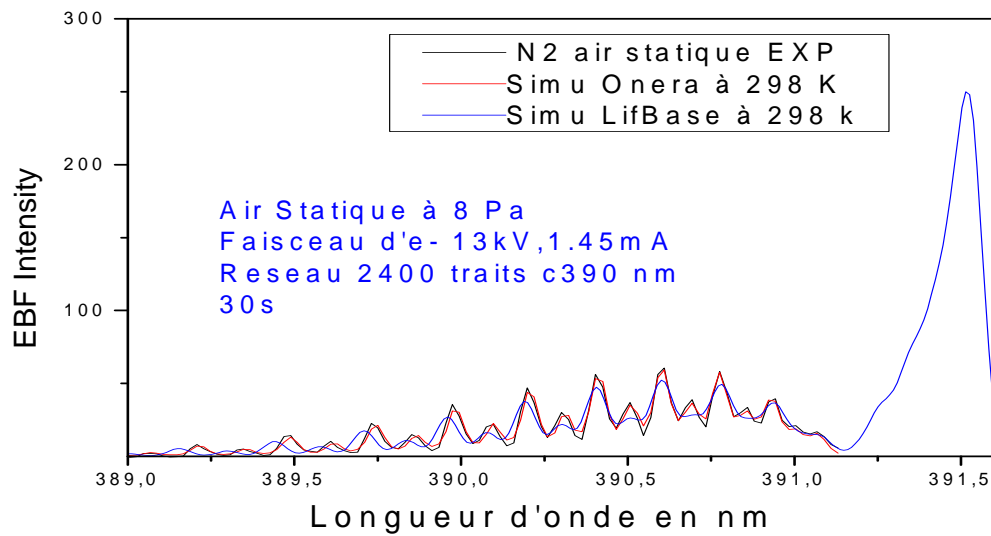


Figure 5.18

$N_2^+, B-X(0-0)$: spectre expérimental (Air Statique FFE) et simulation ONERA et LIFBASE[®] à 298 K

Cette simulation *LIFBASE* est faite avec une température T_R pour l'état B de l'ion N_2^+ . Cette température s'avère être peu différente de la température T_R de l'état fondamental de N_2 utilisée par la méthode *INVF_LMS*. Mais cette dernière méthode est assez lourde à mettre en œuvre et pour la suite des essais nous avons utilisé *LIFBASE* pour une évaluation rapide de l'ordre de grandeur de T_R .

5.7.3.1.2 Ecoulement devant un obstacle

Les spectres suivants ont été acquis dans les conditions d'écoulement devant un obstacle placé à 12 cm de la sortie de veine, le faisceau d'électrons se trouvant initialement à 9 cm de la sortie de veine et se déplaçant vers l'obstacle (Figure 5.19).

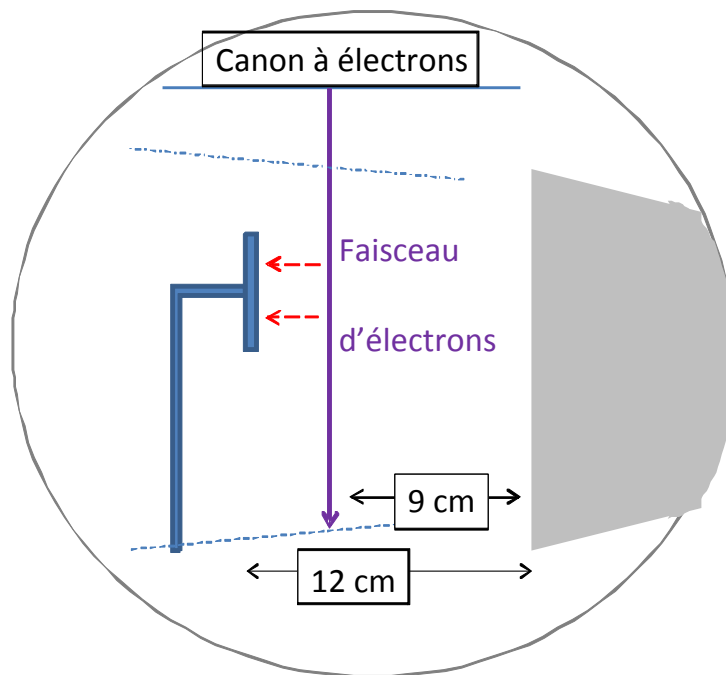


Figure 5.19

Écoulement Mach 2 devant un obstacle placé à 12 cm de la sortie de veine. Le faisceau initialement à 9 cm⁵ de la sortie de veine d'électrons se déplace vers l'obstacle.

Les spectres de rotation (Figure 5.21) ont été acquis avec le réseau de 2400 traits centré à 390 nm, le faisceau se déplaçant vers l'obstacle. Une comparaison avec une simulation *LIFBASE*[®] met en évidence la remontée de la température dans l'onde de choc créée par l'obstacle.⁵

⁵ Le canon à électrons a été placé initialement à 9 centimètres de la sortie de veine car cela a été plus pratique pour les mesures de profil de densité pour pouvoir les comparer avec les profils Pitot réalisés par E.Menier [5.1]

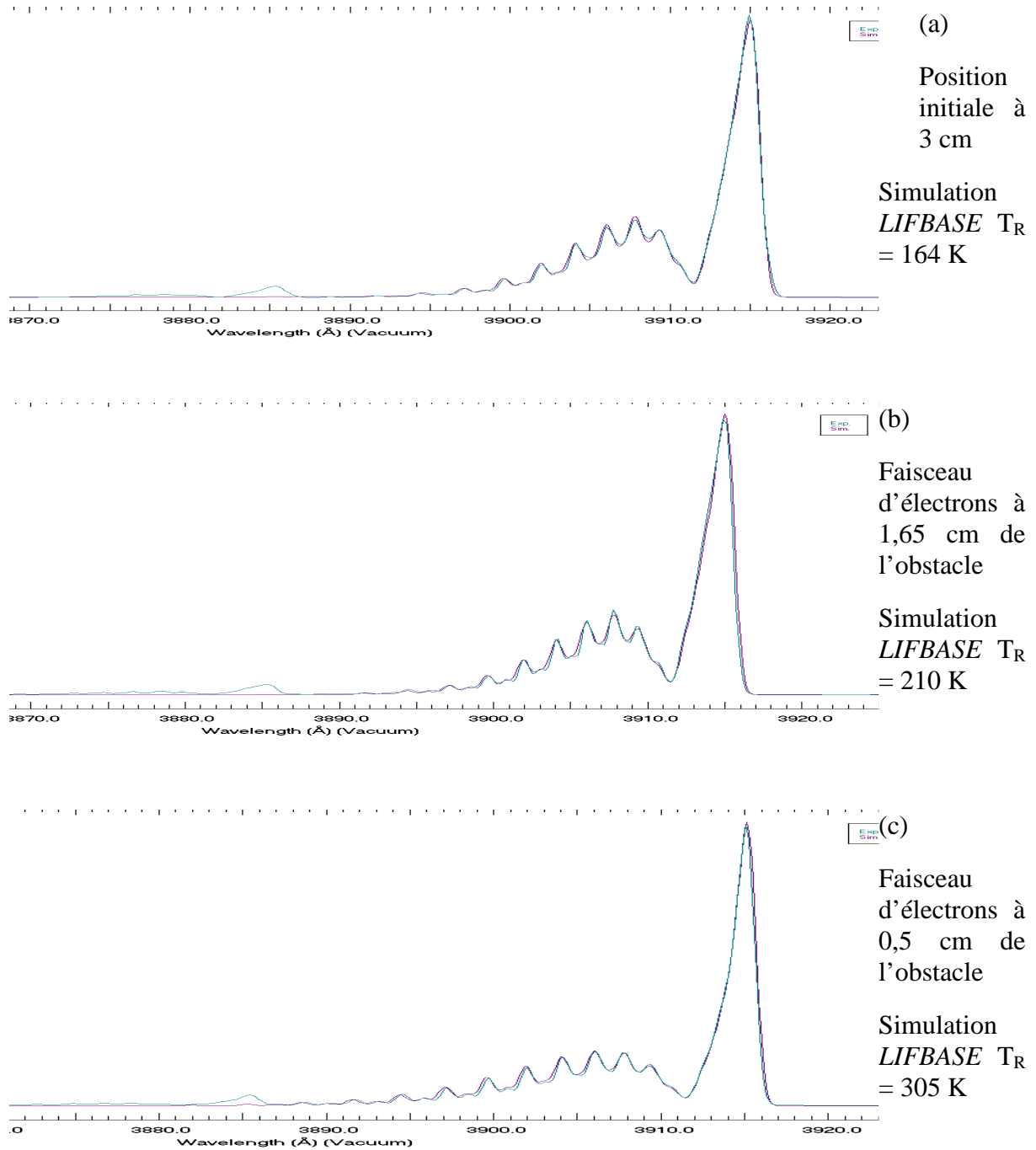


Figure 5.20

*Spectre de rotation de la bande principale à 391,14 nm du système N_2^+ , 1N (0-0) à différentes positions du canon à électrons par rapport à l'obstacle (placé à 12 cm de la sortie de veine) :
Spectre pour un faisceau à (a) 3 cm, (b) 1,65 cm et (c) 0,5 cm de l'obstacle*

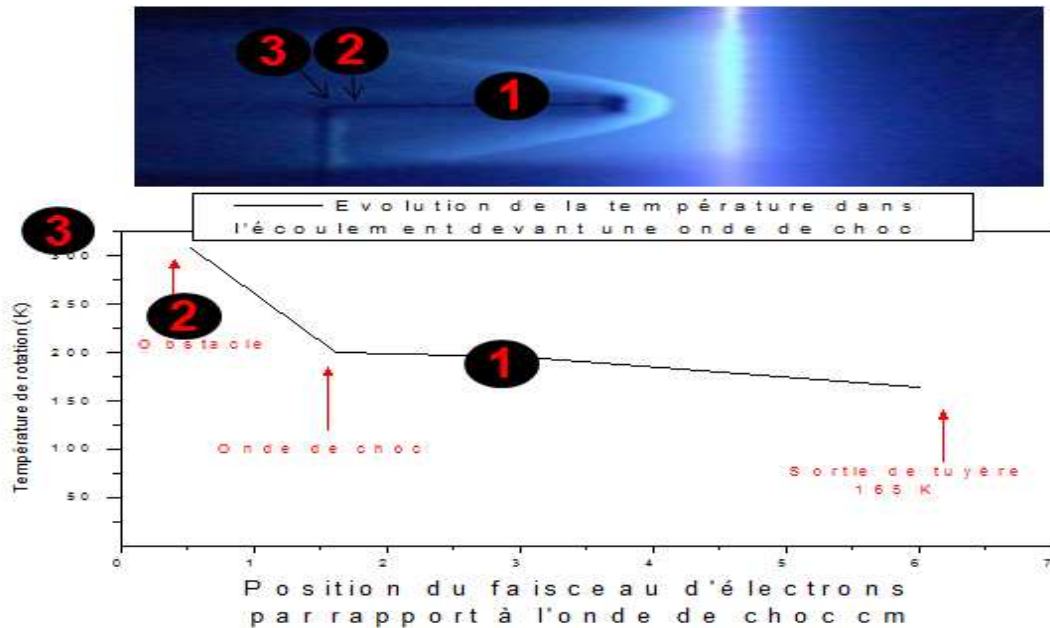


Figure 5.21

Variation de la température de rotation de N_2^+ , $1N(0-0)$ en fonction de la distance par rapport à l'onde de choc. Le faisceau d'électrons se déplace vers l'onde de choc.

La température de rotation, estimée à 163 K à la sortie de veine, augmente vers l'onde de choc. Elle vaut 195 K à 3 cm de l'obstacle, 210 K à 1,65 cm de l'obstacle et 305 K à 0,5 cm de l'obstacle (Figure 5.20).

A la traversée de l'onde de choc, l'écoulement ralentit et il y a conversion de l'énergie cinétique (de la vitesse) en énergie thermique (ce qui fait monter T_R), la densité augmente car pour un même débit, la densité augmente quand la vitesse diminue.

En résumé, à l'aide d'un balayage du faisceau d'électrons, nous avons pu déterminer un profil de température de l'écoulement, de la sortie de veine à l'obstacle.

Cette étude a été faite uniquement dans le cas de l'air sec. Dans le mélange Crystal, les faibles proportions de N_2 , ne permettent pas de mesurer la température de rotation. Il faudra

s'intéresser à d'autres systèmes rotationnels notamment ceux du premier système négatif de CO^+ ou ceux du Baldet-Johnson.

5.7.3.2 Spectroscopie du mélange CRYSTAL

La spectroscopie de fluorescence du mélange Crystal (60 % CO_2 , 37 % CO et 3 % N_2) (Figure 5.22) montre les transitions vibrationnelles des ions CO^+ , CO_2^+ et molécules neutres CO . Les transitions ne sont pas identifiables du fait de la faible proportion de N_2 dans le mélange mais également de la présence des bandes A-X de CO_2^+ et CO^+ dans la zone d'émission de N_2^+ . On identifie ainsi les transitions vibrationnelles correspondants à l'ion CO^+ :

- Le comet-tail system CO^+ , $A^2\Pi_i \rightarrow CO^+$, $X^2\Sigma_g^+$
- Le premier système négatif CO^+ , $B^2\Sigma_u^+ \rightarrow CO^+$, $X^2\Sigma_g^+$
- Le système de Baldet-Johnson CO^+ , $B^2\Sigma_u^+ \rightarrow CO^+$, $A^2\Pi_i$

mais aussi les systèmes vibrationnels du CO neutre :

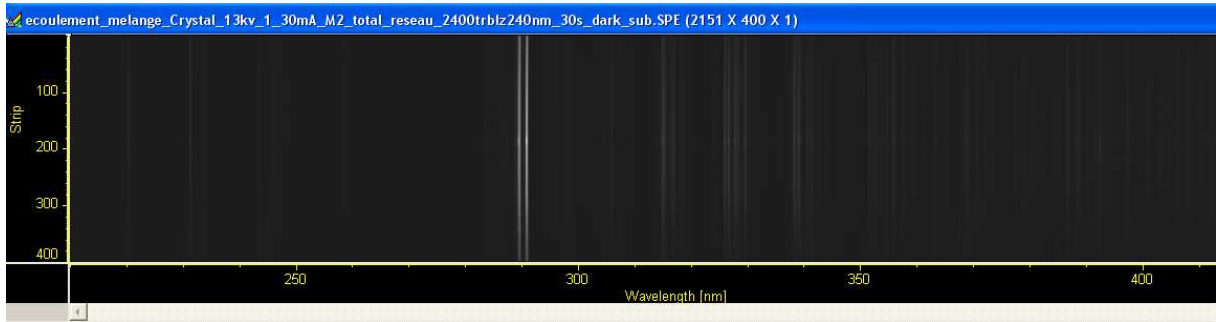
- Le système CO , $b^3\Sigma_u^+ \rightarrow CO$, $a^3\Sigma_u^+$
- Les bandes du 4ième positif CO , $A^1\Pi_i \rightarrow CO$, $X^1\Sigma_g^+$

et les transitions vibrationnelles de CO_2^+ :

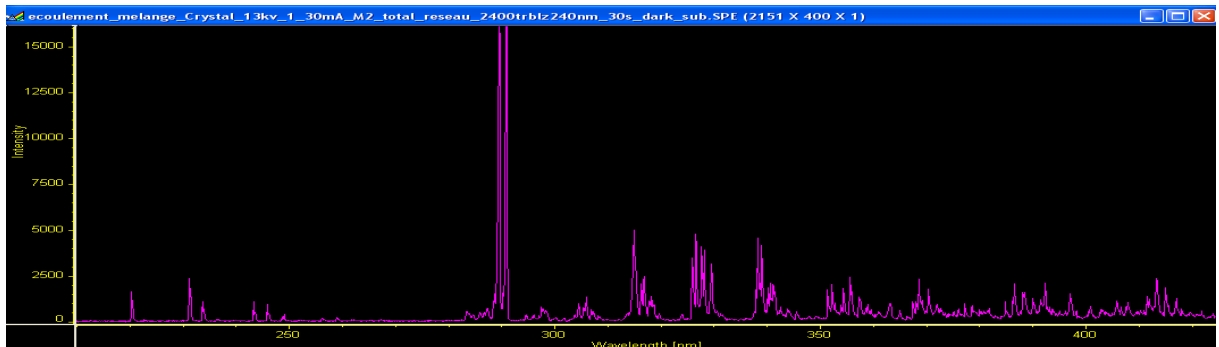
- Le doublet CO_2^+ , $B^2\Sigma_u^+ \rightarrow CO_2^+$, $X^2\Sigma_g^+$ à 188,3 nm et 189,2 nm
- Le système de Fox-Duffendack-Barker CO_2^+ , $A^2\Pi_u \rightarrow CO_2^+$, $X^2\Pi_g$, $A^2\pi_u \rightarrow X^2\pi_g$ entre 300 nm et 560 nm

L'observation de la zone sub-200 nm n'a été possible qu'en remplaçant le hublot en silice par un hublot en silice u.v et l'utilisation d'une lentille u.v également pour la conjugaison avec le spectromètre (Figure 5.23).

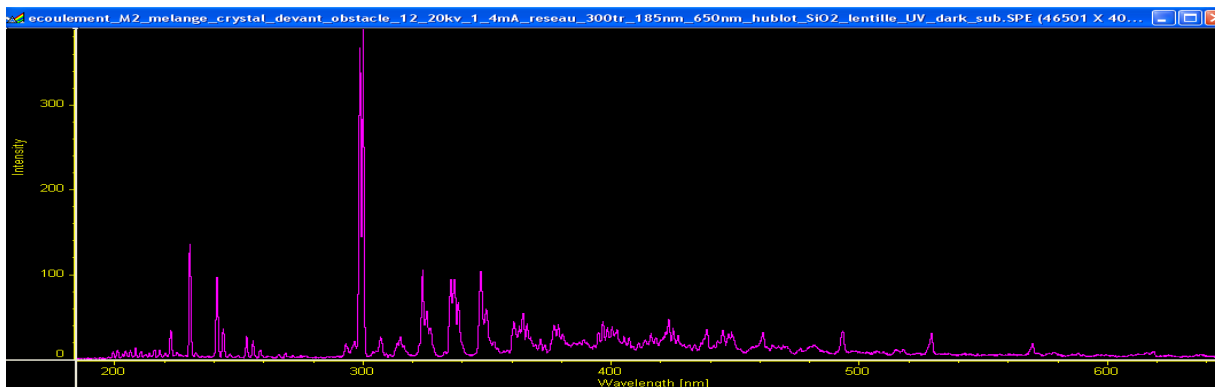
Les images montrent ces différentes transitions à travers les fentes avec les réseaux de 2400 traits et de 300 traits et de la caméra *CCD*.



(a)



(b)



(c)

Figure 5.22

Spectre de vibration (réseau de 2400 traits) du mélange Crystal en écoulement Mach 2 au sein de MARHy. Faisceau d'électrons 13 keV, 1,3 mA et temps d'acquisition de 30 secondes :

(a) image caméra CCD à travers les fentes du réseau de 2400 traits du spectromètre, (b) hublot en silice puis en silice u.v et (c) avec lentille u.v.

On observe une atténuation et même une absence de quelques bandes de vibration de CO due à l'utilisation d'un hublot standard et d'une lentille en u.v qui coupent l'émission dans la zone sub-200 nm (*Annexes F/ Courbe de transmission de quelques matériaux*).

Les spectres suivants seront donc acquis uniquement avec des hublots et lentille en silice u.v.

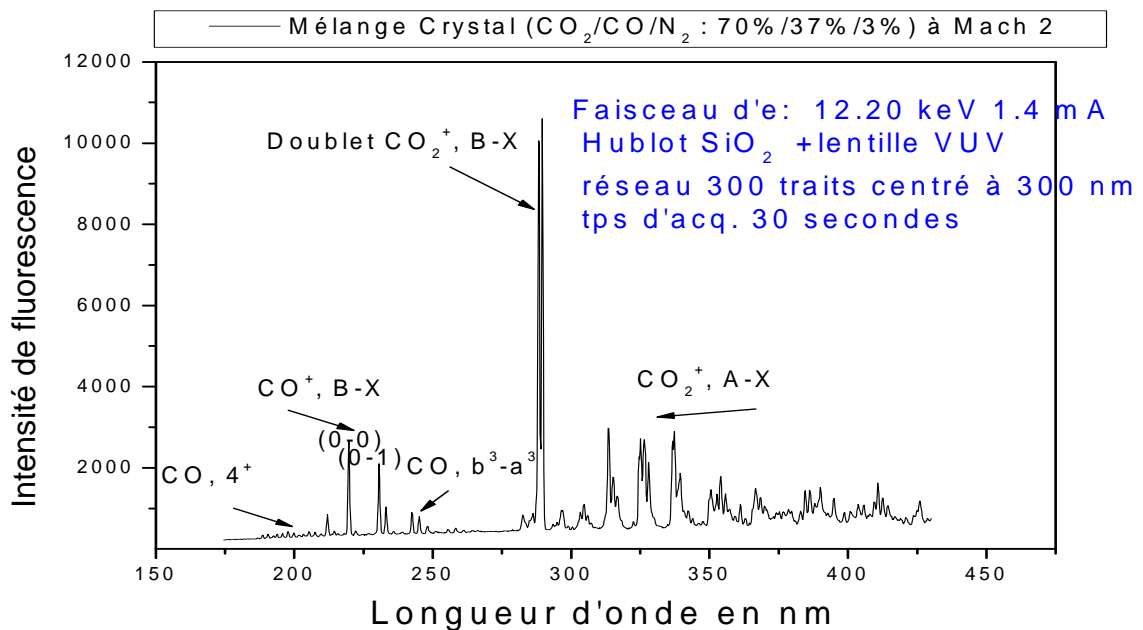


Figure 5.23

Spectre de vibration (réseau de 300 traits) du mélange Crystal en écoulement Mach 2 au sein de MARHy. Faisceau d'électrons 12,2 keV, 1,4 mA et temps d'acquisition de 30 secondes.

Hublot et lentille v.u.v SiO_2

5.7.3.3 Etude des bandes de CO

L'utilisation de lentille et de hublots u.v sont nécessaires à l'étude des bandes de CO car celles-ci sont placées à des longueurs d'ondes inférieures à 250 nm. On utilise un réseau de 2400 traits.

Une correction en réponse est nécessaire dans cette zone de longueur d'onde. La Figure 5.24 présente le spectre de fluorescence du premier système négatif de CO^+ : spectre brut et spectre corrigé en réponse.

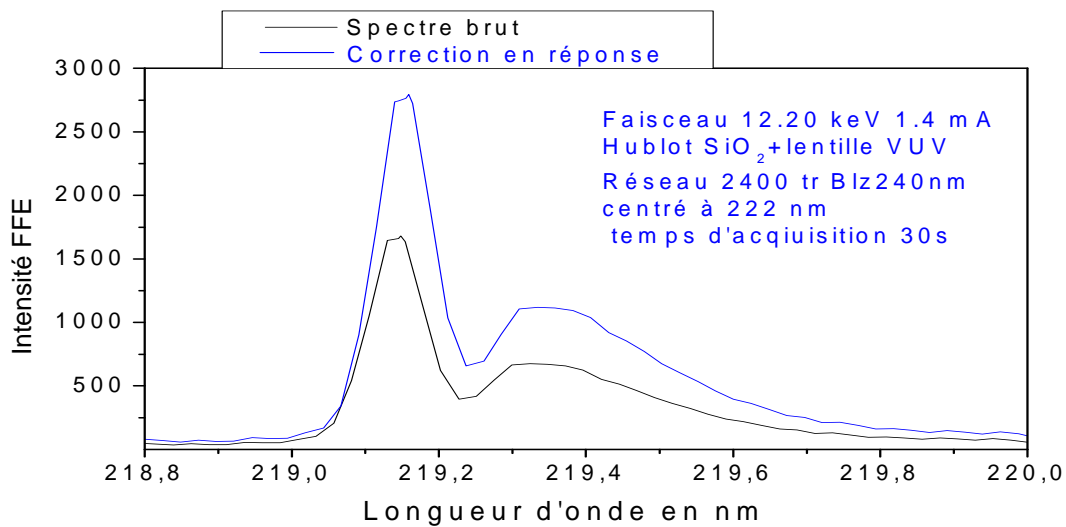


Figure 5.24

Spectre d'émission de fluorescence du premier système négatif de CO^+ dans le cas d'un écoulement libre Mach 2. Avec un faisceau de 12,20 keV et le spectromètre avec le réseau de 2400 traits centré à 220 nm.

Le réseau de 2400 traits ne permet pas de résoudre complètement la structure rotationnelle de cette bande. Des spectres d'émission (traités en bruit, en réponse et en longueur d'onde) ont été acquis à différentes positions du faisceau d'électrons par rapport à l'obstacle (à 3 cm, 1,65 cm et 0,5 cm) (Figure 5.25).

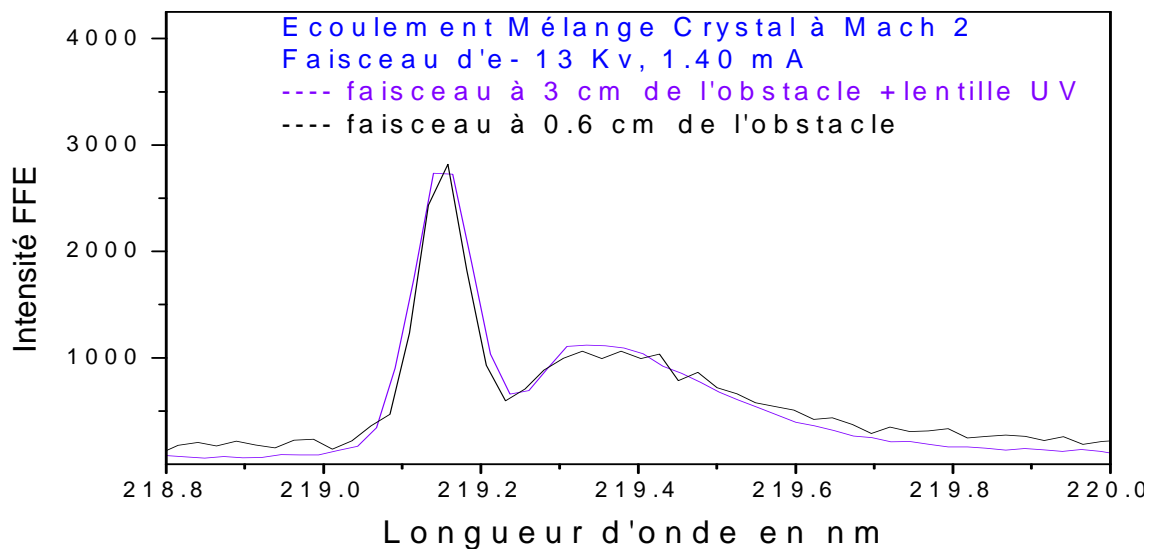


Figure 5.25

Structure de bande (vibration) du premier système négatif de CO^+ avec lentille et Hublot v.u.v à 3 cm et 0,6 cm de l'obstacle dans un écoulement Mach 2 du mélange Crystal

Les niveaux de rotation d'une molécule dipolaire (séparation $2 B_v (k+1)$) s'écartent les uns des autres à mesure que k augmente. Pour la molécule de CO , les deux niveaux les plus proches ($k=0$) sont séparés de $2B_v$. Il faudrait donc un spectromètre avec réseau de 3600 traits minimum pour résoudre la structure rotationnelle du premier système négatif de CO^+ .

Néanmoins, une inversion de spectre expérimental à 2400 traits a été réalisée avec le code du laboratoire *ICARE* [4.20] dans les conditions d'écoulement Mach 2 à 3 cm devant l'obstacle et la température de rotation mesurée est égale à 200 K (Figure 5.26). En toute rigueur, c'est la température de rotation de l'état B de l'ion CO^+ .

La température trouvée dans le cas de l'air avec le premier système négatif de N_2^+ est de 195 K contre 200 K pour CO^+ dans le mélange Crystal.

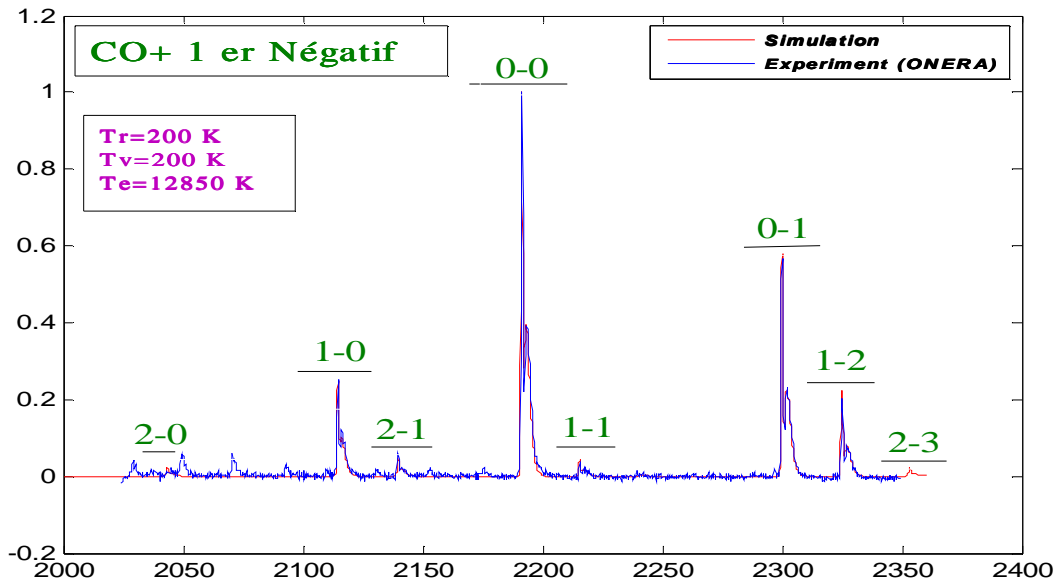


Figure 5.26

Inversion de spectre de rotation du premier système négatif de CO^+ par le code ICARE dans le cas d'un faisceau à 3 cm de l'obstacle dans un écoulement Mach 2 du mélange Crystal

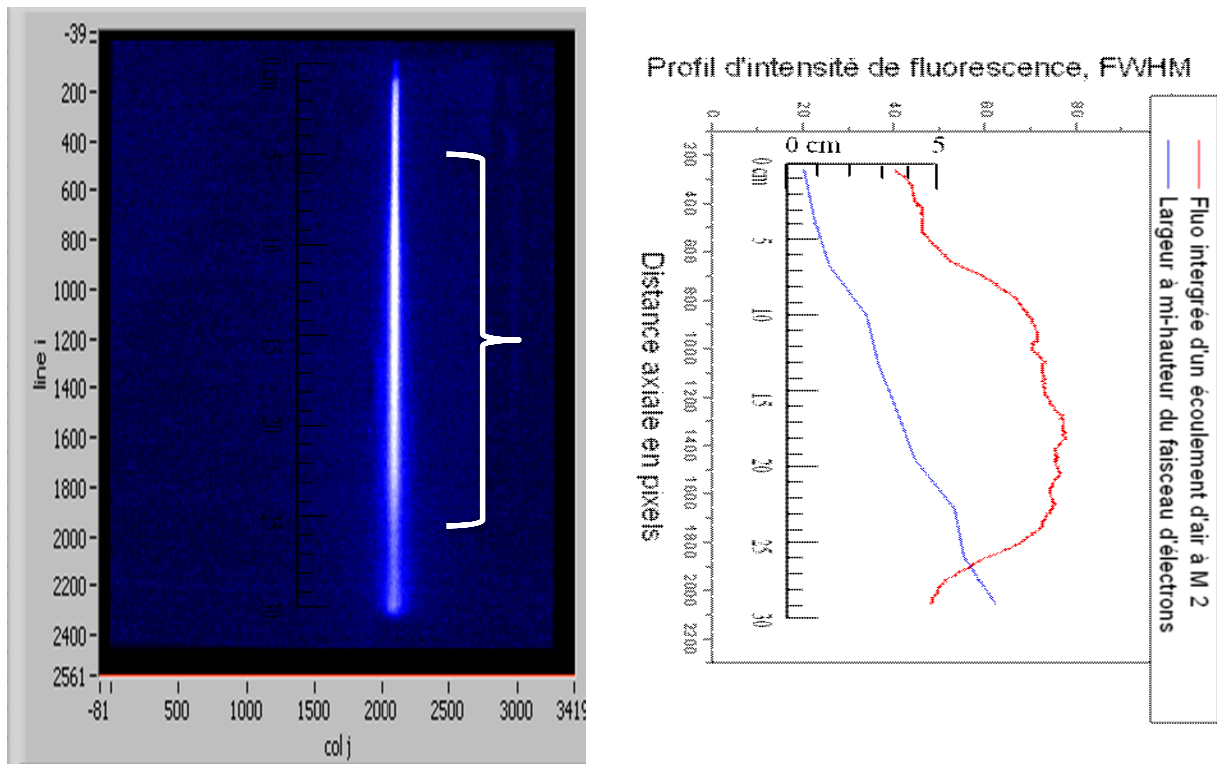
Les bandes de CO_2 (majoritaire dans le mélange Crystal) ont déjà été étudiées en statique. Elles ne sont pas représentées ici.

En résumé pour l'étude complète de spectroscopie du mélange Crystal, il faut un réseau d'au moins 3600 traits pour résoudre la structure rotationnelle des bandes de CO et de plus, il faut inclure aux programmes de simulation, les constantes moléculaires et coefficients de transitions correspondant aux transitions rotationnelles; ce qui n'est pas tâche aisée car cette zone a été très peu étudiée et peu de données sont disponibles dans la littérature.

5.7.4 La dispersion du faisceau dans l'écoulement libre

Dans ce paragraphe nous étudions la dispersion du faisceau d'électrons à travers la largeur à mi-hauteur de sa distribution transversale sur l'axe de propagation.

Cette largeur à mi-hauteur est déterminée à partir de la répartition transversale de l'intensité de fluorescence (images caméra CCD) et présentée sur la *Figure 5.27 (a)*. On a aussi tracé l'évolution de cette largeur à mi-hauteur à 9 cm de la sortie de veine dans l'écoulement libre à Mach 2 (en bleu) et le profil d'intensité de fluorescence intégré sur chaque ligne transversale (en rouge) *Figure 5.27 (b)*.



(a)

(b)

Figure 5.27

Images CCD du faisceau d'électrons (13,52 keV, 1,3 mA) (a) traversant un écoulement Mach 2 du mélange Crystal) (b) et profil intégré d'intensité de fluorescence et largeur à mi-hauteur en fonction de l'axe de propagation

La Figure 5.27 (a), une ligne «i» correspond à une distance de propagation z.

Sur la Figure 5.27 (b), on représente l'évolution de la largeur à mi-hauteur (en centimètre) du faisceau d'électrons et de la fluorescence intégrée (somme des intensités des pixels de toutes colonnes j d'une ligne i) en fonction de l'axe de propagation z. On remarque que la

distribution de densité de l'écoulement est liée à la largeur à mi-hauteur du faisceau d'électrons (déjà vu au chapitre 3).

On peut ainsi déterminer le profil de densité selon l'axe perpendiculaire à la propagation du faisceau et par translation (balayage), un profil à deux dimensions de l'écoulement. Cette méthode a été présentée à la fin du chapitre 3.

5.7.5 Détermination du profil de densité par la technique de *FFE*

Le profil de densité le long du faisceau peut être obtenu directement par intégration de l'intensité de fluorescence par rapport à l'axe de propagation de celui-ci. Cette intensité de fluorescence est directement proportionnelle à la densité totale de gaz en dessous de 1 mbar. Cette méthode est plus rapide mais moins robuste du fait de sa sensibilité vis-à-vis des phénomènes de dispersion de faisceau d'électrons et de création d'électrons secondaires.

Les figures suivantes représentent des profils extraits d'images de la caméra *PIMAX®* intégrées sur des lignes perpendiculaires au faisceau. Ces images ont été, au préalable, traitées (sélection de plusieurs lignes, intégration, accumulation et moyenne, correction en bruit de fond, luminescence parasite), (Figure 5.28 et Figure 5.29).

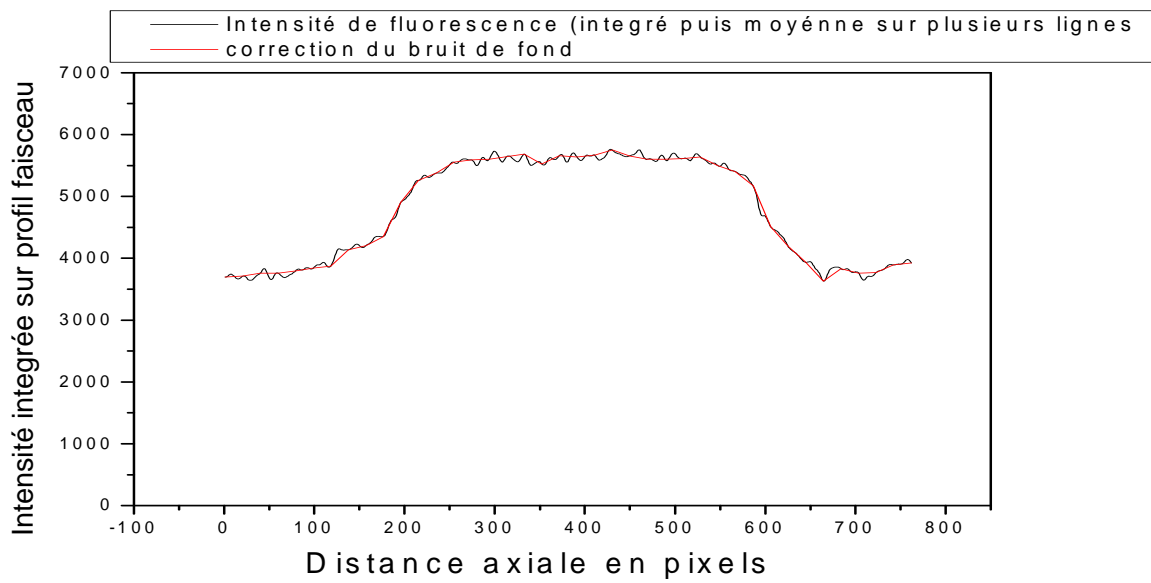


Figure 5.28

Profil intégré sur une ligne de l'intensité de fluorescence collectée (intégration, accumulation, moyenne et suppression du bruit de fond)

Une normalisation est effectuée pour permettre la comparaison avec un profil de densité réalisé par une étude précédente (E.Menier) grâce à des sondes Pitot.

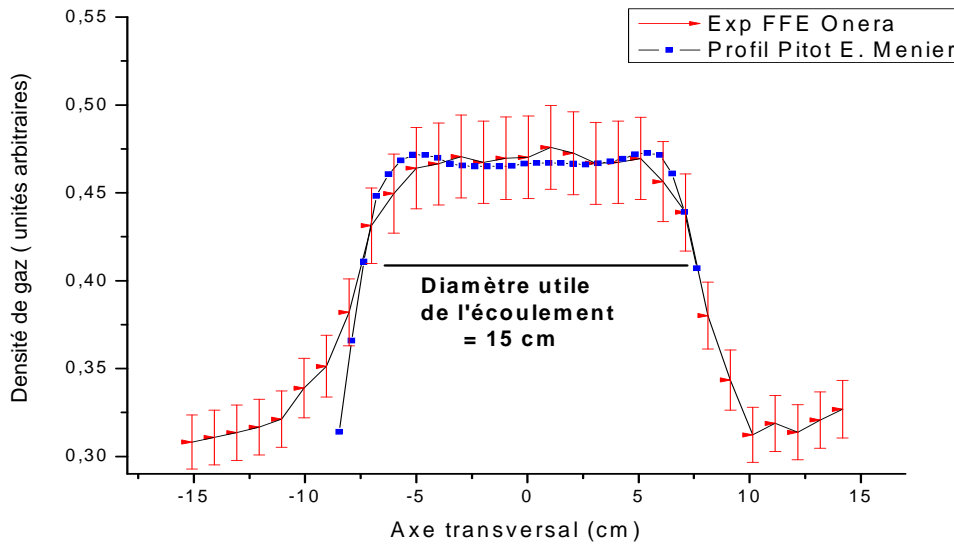


Figure 5.29

Profils comparés de l'écoulement avec la tuyère à Mach 2 : mesure d'Eric Menier avec des sondes Pitot (en bleu) et (en rouge) profil transversal mesuré en FFE.

Barres d'erreurs +/- 5 %

On détermine ainsi le diamètre utile de l'écoulement, à 11,5 cm de la sortie de la tuyère. Ce diamètre utile est estimé à 150 mm avec cette tuyère. Le profil est symétrique par rapport à l'axe de l'écoulement (75 mm de chaque côté). Cette zone correspond à une zone où l'écoulement est homogène et de densité quasi-constante.

La même opération est effectuée devant l'obstacle. Sur les figures suivantes on représente des images prises avec une caméra CCD pour diverses positions du faisceau d'électrons se déplaçant vers l'obstacle placé à 12 cm de la sortie de veine (Figure 5.30 et Figure 5.31).

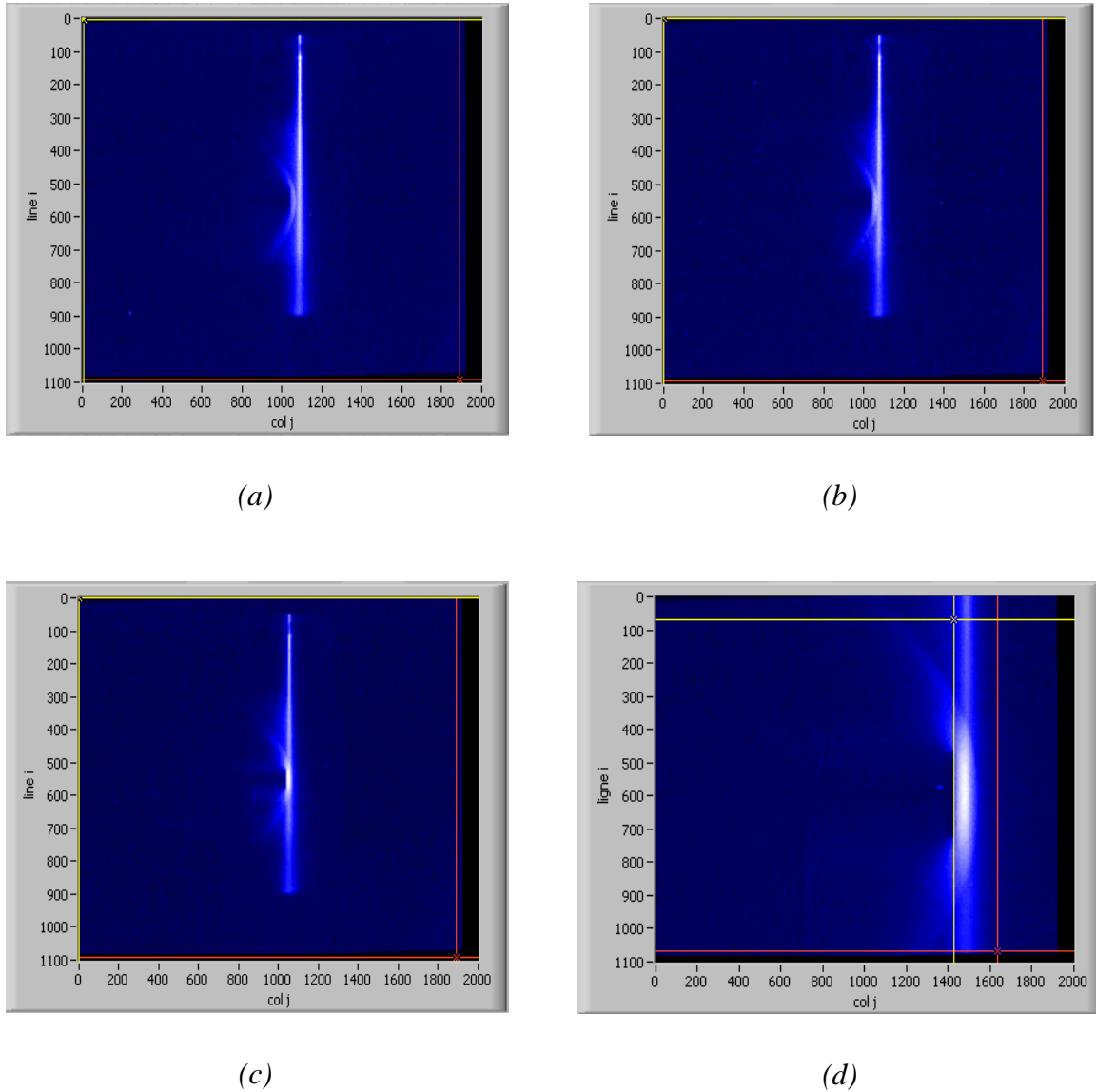


Figure 5.30

Déplacement du faisceau d'électrons vers l'obstacle

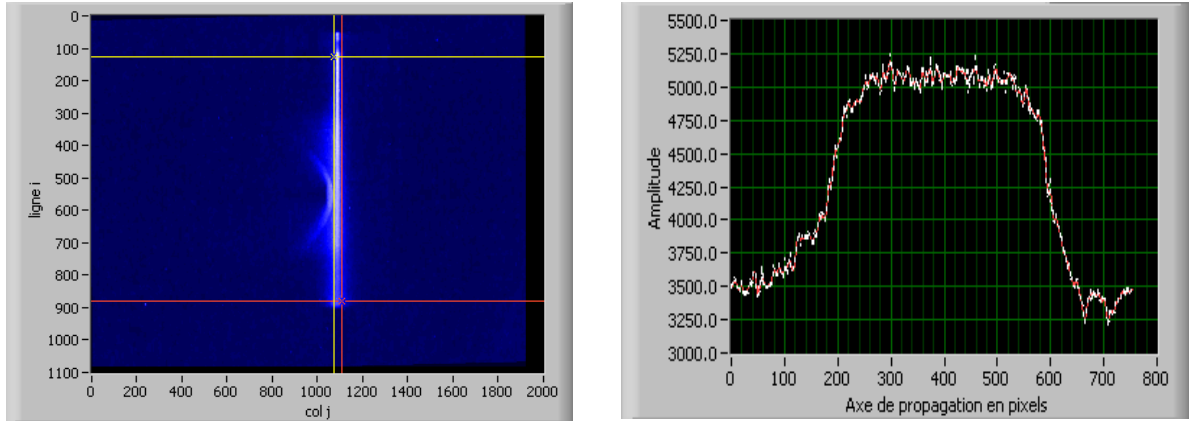
La distance entre le faisceau d'électrons et l'obstacle est de

(a) : 1,5 cm, (b) : 0,65 cm, (c) : 0,3 cm et (d) : 0,1 cm

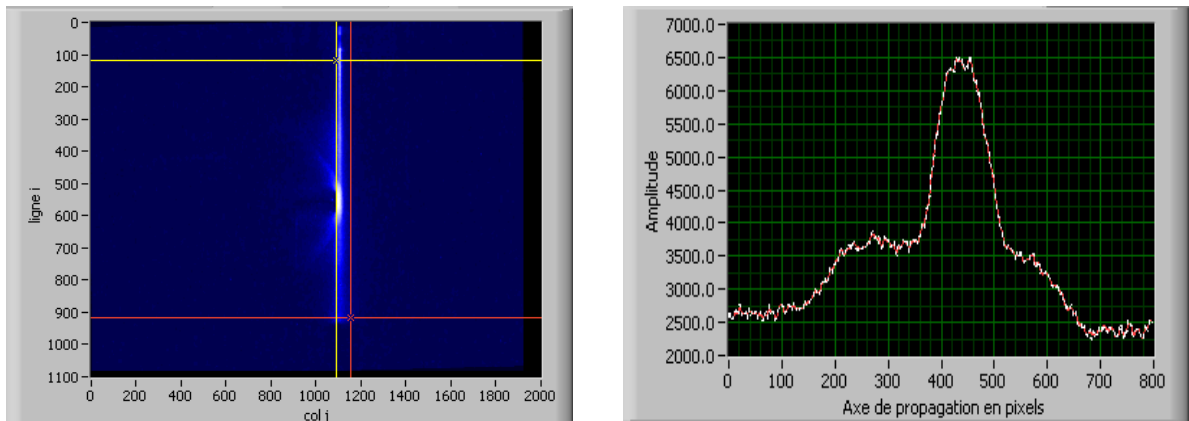
A partir des images (de (a) à (d)) de la Figure 5.30, on détermine la distribution de l'intensité le long de l'axe de propagation du faisceau. La zone de profil intégré correspond à la zone

choisie, autour du faisceau délimitée par les curseurs sur les figures suivantes. De ces profils d'intensité intégrée, on tire le profil de densité de l'écoulement gazeux dans cette zone.

On peut comparer deux profils d'écoulement sur la Figure 5.31 :



(a)



(b)

Figure 5.31

Images de fluorescence d'un faisceau d'électrons à 1,5 cm (a) puis (b) à 0,3 cm devant un obstacle. Dans le mélange à Mach 2. Les figures de droite représentent les profils de densité déterminés à partir du profil intégré selon chaque ligne perpendiculaire à l'axe de propagation

Le profil de la figure (a) représente un exemple de profil de densité dans l'écoulement libre loin de l'obstacle. La valeur de l'intensité en amplitude dans le plateau (ici 5000) correspond à une valeur de normalisation de la densité dans l'écoulement libre. Le profil de la figure (b) quant à lui présente un saut de densité correspondant à la surpression devant l'obstacle.

En répétant la même procédure, on peut ainsi déterminer le profil de densité à différentes positions par rapport à l'obstacle (Figure 5.32).

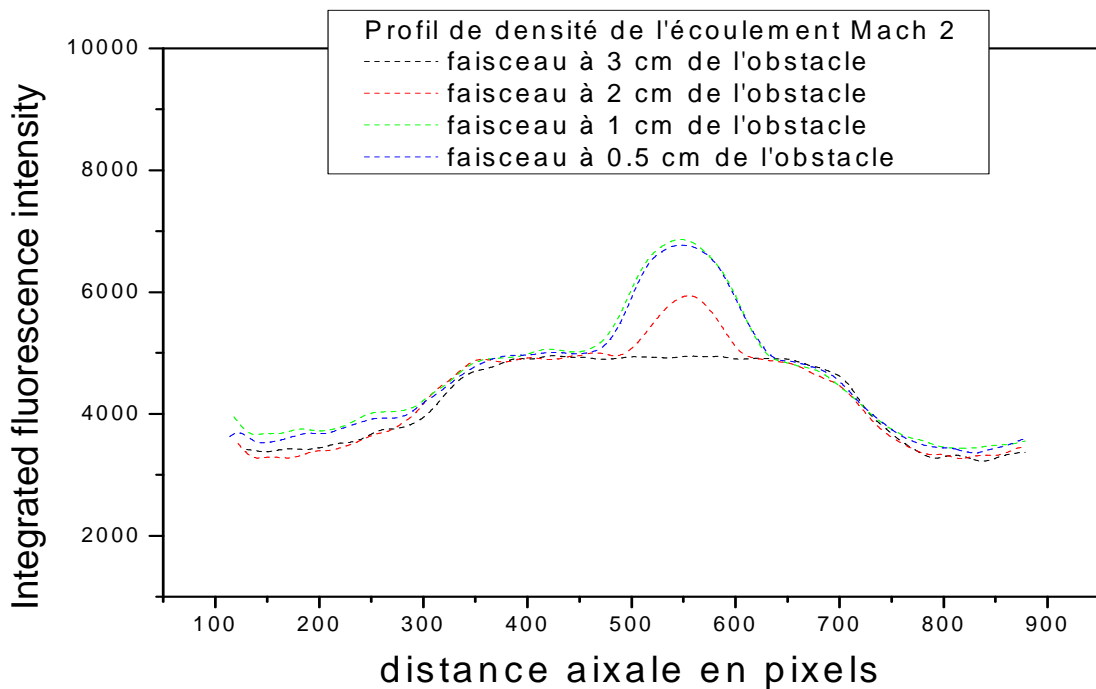


Figure 5.32

Profil de densité le long d'un écoulement mach 2 du mélange $N_2/CO_2/CO$ par imagerie FFE : Faisceau d'électrons 12 keV, temps d'acq 30 s à différentes positions par rapport à l'obstacle se trouve à 9 cm de la sortie de veine.

Conclusions :

Cette campagne de tests dans la soufflerie MARHy a été l'occasion de tester le nouveau prototype de canon à électrons et du comportement de l'ensemble de ces composants dans un environnement électromagnétique proche des conditions de rentrée atmosphérique.

Le fonctionnement en continu de cette soufflerie nous a permis d'étudier des écoulements Mach 2 d'air sec et d'un mélange $N_2/CO_2/CO$ (Mélange Crystal). Ainsi, on a pu maintenir un faisceau d'électrons de l'ordre de 14keV stable dans l'écoulement dont le diamètre utile est de 15 centimètres. Ceci a permis l'analyse spectroscopique de la fluorescence induite et d'en déduire les températures de rotation mais aussi des profils de densité en écoulement libre et en présence d'un obstacle. Le déplacement du faisceau d'électron vers l'obstacle permet de mettre en évidence la présence d'une onde de choc devant l'obstacle, caractérisée par des hausses de densité et de températures.

5.8 Bibliographie - Chapitre 5

- [5.1] Menier, E., "Influence d'une décharge électrique continue sur un écoulement supersonique", *Thèse de doctorat soutenue le 20 décembre 2007*
- [5.2] Lee, E.S., Park, S. and Chang, K.S., "Shock-Tube Determination of CN", *HEAT TRANSFER, Vol. 21, No. 1, January–March 2007*
- [5.3] Barbosa, E., Lopez, B., Dudeck, M., Kaminska, A. and Izrar, B., "Numerical Simulation of Non-Equilibrium Hypersonic Flow in a Convergent-Divergent Nozzle : Application to Mars Atmospheric Entry Simulation", *Proceedings of the 8th International Symposium on Experimental and Computational Aerothermodynamics of Internal Flows Lyon, July 2007*
- [5.4] Lago, V., Barbosa, E., Passarinho, F. and Martin, J.P., "Electron and vibrational temperatures in hypersonic CO_2-N_2 plasma jets", *Plasma Sources Science and Technology, Volume 16, Number 1, p.139, 2007*

Conclusions

6. Chapitre 6 : Conclusions générales

La technique de Fluorescence par Faisceau d'Electrons (*FFE*) a été appliquée au diagnostic des écoulements hypersoniques grâce au développement d'un nouveau prototype de canon à électrons ainsi que de nouvelles procédures de dépouillement de spectres.

La première partie, consacrée à la conception du prototype d'instrument en vue d'une expérience embarquée, a permis de choisir les différents composants ayant des spécifications techniques compatibles avec le cahier des charges d'un instrument spatial. Les tests de qualification et de stabilité du faisceau d'électrons du nouveau prototype de canon ont permis de valider le bon fonctionnement de cet instrument. Ce canon peut émettre un faisceau d'électrons jusqu'à 30 keV avec un courant entre 1 et 2 mA se propageant, avec une bonne stabilité, sur une distance de 30 cm sans grande dispersion pour des pressions inférieures à 1 mbar. Des modules d'automatisation et de contrôles de paramètres comme la pression et la haute tension ont été développés pour permettre un pilotage à distance.

Le prototype a été utilisé sur différents gaz et mélanges statiques et le nouveau modèle de dispersion du faisceau d'électrons a été validé à partir du modèle de Clapp. Ce modèle prend en compte les collisions élastiques et inélastiques et du profil de densité rencontré par le faisceau dans un gaz non homogène. Ce modèle a été testé pour différents types de profils de densité de gaz en écoulement. La méthode inverse qui consistera à déterminer le profil point-à-point de la densité à partir de la variation de la largeur à mi-hauteur du faisceau d'électrons a été développée. Ce programme d'inversion n'est pas encore opérationnel.

La deuxième partie du travail consiste à l'analyse spectroscopique u.v-visible des systèmes vibrationnels et rotationnels de la fluorescence induite par divers mélanges gazeux (N_2 , CO et CO_2). Des codes de simulation de spectres de vibration et de rotation ont été développés puis complétés par des procédures d'inversion de spectres. Les paramètres tels que les températures et densités seront mesurables dans un écoulement autour d'un objet de rentrée. La validation de ces codes a été effectuée en gaz statique dans un caisson à vide à l'*ONERA* avant leur exploitation en soufflerie.

La troisième partie du travail concerne les deux campagnes de mesures effectuées dans les installations *MARHy* du *CNRS* et *F4* de l'*ONERA*. Les tests ont démontré le bon

Conclusions générales

fonctionnement du prototype sous vide et/ ou en conditions d'écoulements. Les codes de simulation et d'inversion de spectres ont permis de mesurer les densités et températures de rotation dans un écoulement de gaz constitué d'air sec et d'un mélange $N_2/CO_2/CO$ à Mach 2 libre et en présence d'une onde de choc.

En termes de perspectives d'amélioration, les codes de simulations doivent être complétés par de nouvelles données spectroscopiques notamment en y incluant certains systèmes de CO et de CO_2 .

Une véritable validation en soufflerie à haute enthalpie du prototype mis au point reste à faire. La soufflerie *F4* n'a été que peu disponible durant la thèse. Le passage dans une soufflerie continue à haute enthalpie comme l'installation *LBK* du *DLR*, est aussi préconisé pour ce type de validation.

Les travaux de cette thèse ont permis de fournir un instrument de canon à électrons opérationnel pour des applications en soufflerie et bien adapté pour les mesures en vol. L'optimisation des codes de dépouillement donne à cette technique de Fluorescence par Faisceau d'électrons une souplesse d'utilisation qui était nécessaire au début de la thèse.

Annexes

7. Chapitre 7 : Annexes

7.1 Annexes A/ Assemblage du canon à électrons

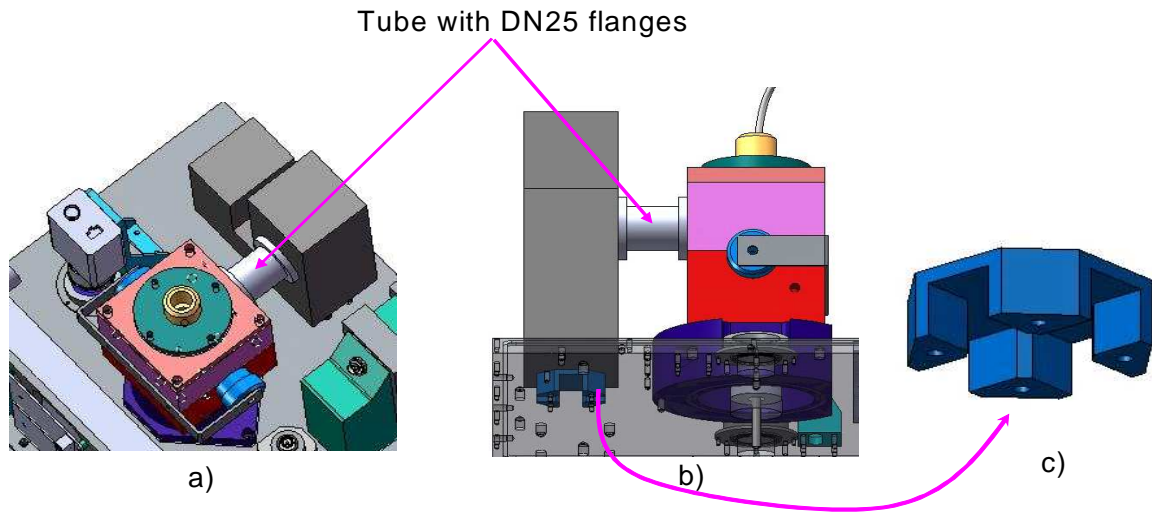


Figure 7.1

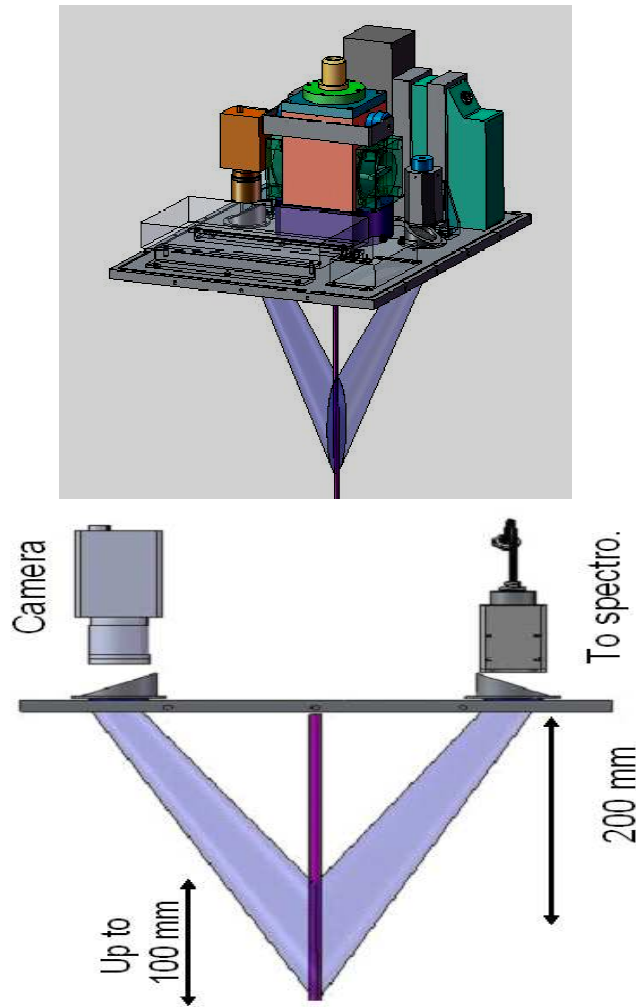


Figure 7.2

*Le canon à électrons et son système de détection. Angle de vue des différents détecteurs :
caméra CCD et spectromètre*

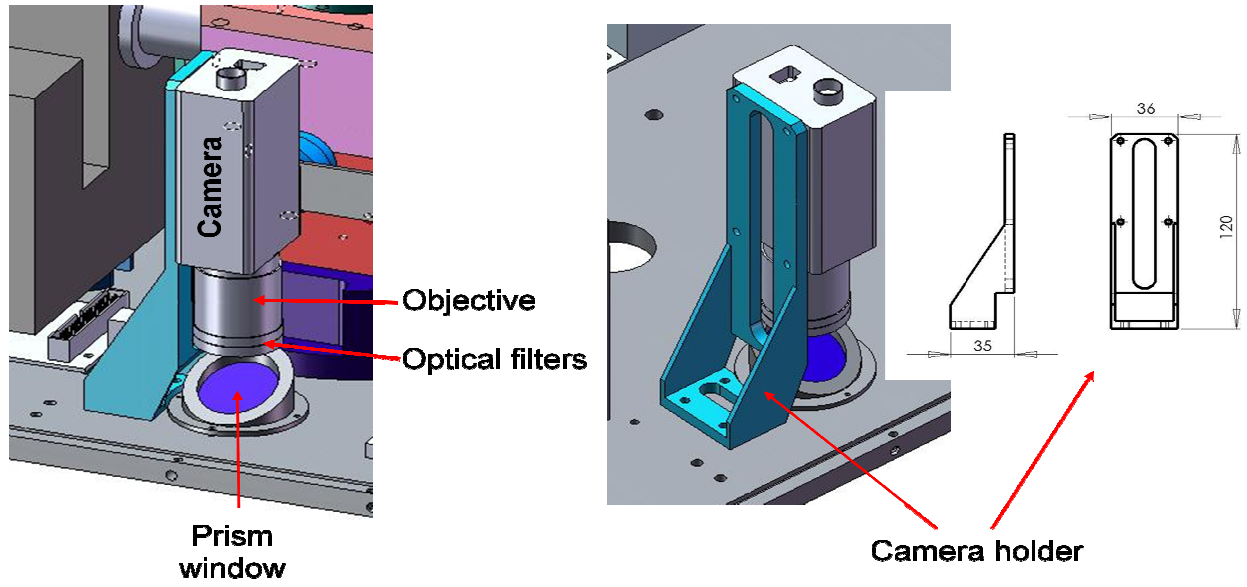


Figure 7.3

La caméra CCD miniature Basler

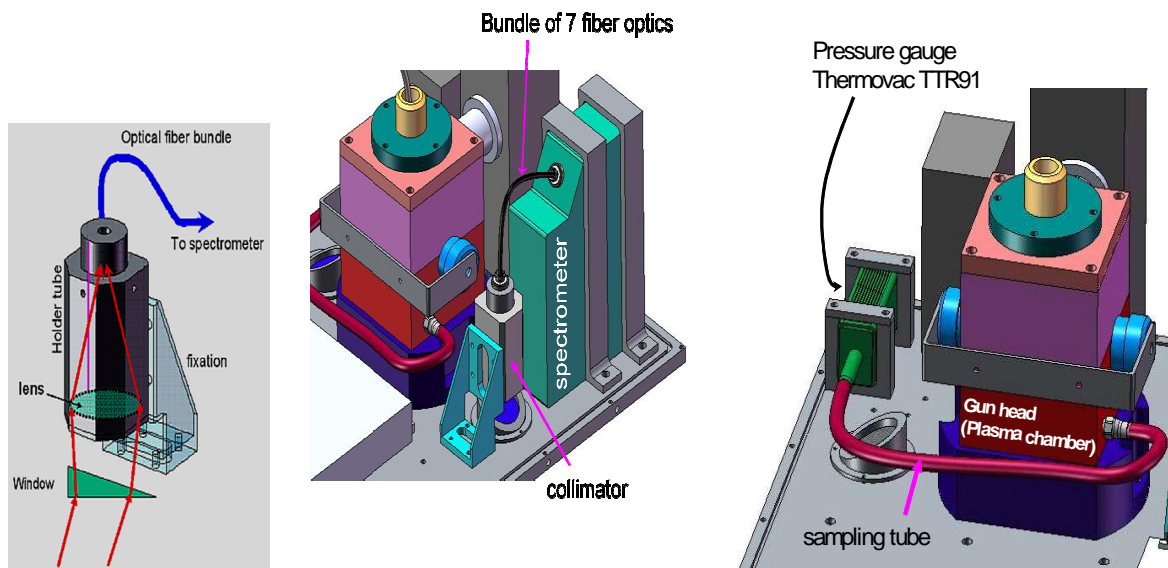


Figure 7.4

Connectique : Système de fibres optiques entre l'entrée du spectromètre HR4000 et son système optique constitué de lentilles et de collimateur. Gauge de pression pour contrôler la pression dans la chambre d'ionisation

Ces schémas ont été réalisés sous Solidworks®

7.2 Annexes B/ Procédure d'allumage du canon à électrons

7.2.1 Annexes B1/ Installation et procédure d'allumage canon à électrons dans le caisson à vide

Ci-dessous les paramètres de fonctionnement du canon dans le caisson à vide :

- Tension entre 10 et 15 kV (cathode mise entre -10 et -15 kV)
- Courant de faisceau entre 0,13 mA et 1 mA
- Pression source min : 10^{-2} mbar
- Pression dans le caisson à vide : entre 10^{-3} et 0,7 mbar
- Faisceau en mode continu ou pulsé (acq image ON/OFF 10 Hz)

Mesures effectuées :

Etude et modélisation de la dispersion du faisceau d'électrons :

- Images *CCD* de la zone de fluorescence
 - Caméra *CCD* avec ou sans trigger (pour images ON/OFF)
 - Détermination de la distribution radiale et axiale du faisceau
 - Etude de la largeur à mi hauteur en fonction de l'axe de propagation
 - Validation du modèle de section efficace de collision, section efficace différentielle de collision élastique et inélastique
- Système de détection

Analyse spectroscopique : gaz purs et mélanges entre 185 nm et 650 nm :

- Calibration des spectromètres, choix de réseaux pour V et/ou R
- Calibrage spectromètre en longueur d'onde et réponse spectrale : lampes Mercure, Deutérium et Halogène. Réseau 300, 2400 traits, temps d'acq. entre 1 et 10 secondes
- Détermination de la courbe de linéarité entre l'intensité du faisceau et pression de gaz

Annexes

- Détermination de la courbe de linéarité entre l'intensité du faisceau et HT
- Spectroscopie N_2 pur, NO pur, CO pur, CO_2 pur et mélanges: N_2/NO : 99 %-1 % et $N_2/CO_2/CO$: 85 %/10,5 %/4,5 %/
- Spectroscopie N_2/CO , N_2/CO_2 , CO/CO_2 avec proportions variées (de 0% à 50 %, réglages par 2 régulateurs de débit massique)

7.2.2 Annexes B2/ Installation et procédure d'allumage canon à électrons dans MARHy

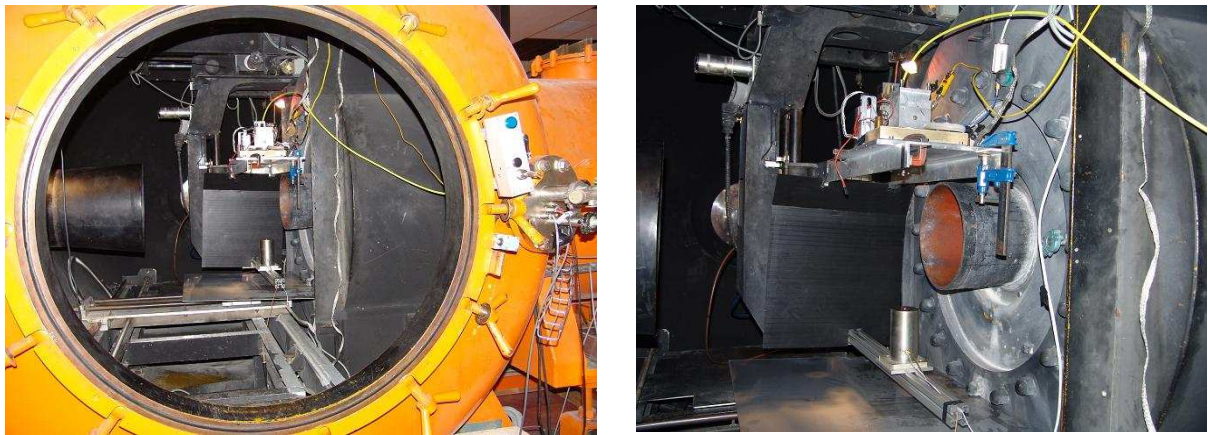


Figure 7.5

Prototype EGUN v.1 du canon à électrons dans la soufflerie MARHy : Installation et fixation mécaniques

- Le canon est maintenu par des fixations ou supports mécaniques
- Le faisceau est perpendiculaire à l'écoulement (de haut en bas)
- Montage de la tuyère à Mach 2
- Analyse de la fluorescence en jet libre et en présence d'une onde de choc
- L'énergie des électrons du faisceau est fixée à 14 keV +/- 0,2 keV

Annexes

- La pression de gaz souhaité est entre 0,1 et 1 mbar en statique et 8.10^{-2} mbar en écoulement Mach 2
- Système de détection :
 - Caméra *CCD* externe 300X1400 pixels + mini caméra Basler à l'intérieur
 - Spectromètres : Acton Princeton : réseaux 300, 1200 et 2400 traits déjà calibrés + mini- spectromètre HR4000 à l'intérieur

A chaque utilisation :

- Background, Spectre brut
- Acquisition 10 spectres accumulés (moyenne)

Temps d'acquisition : selon gamme de longueur d'onde entre 1 et 10 secondes

Camera embarqué et Spectromètre HR4000 à l'intérieur pour vérifier leur fonctionnement sous vide

Alimentation extérieur : traversée étanches pour câbles et USB

Analyse spectroscopique :

- Mélange CRYSTAL: $N_2/CO_2/CO$: 3%/70%/37%/

7.2.3 Annexes B3/ Installation et procédure d'allumage canon à électrons dans F4

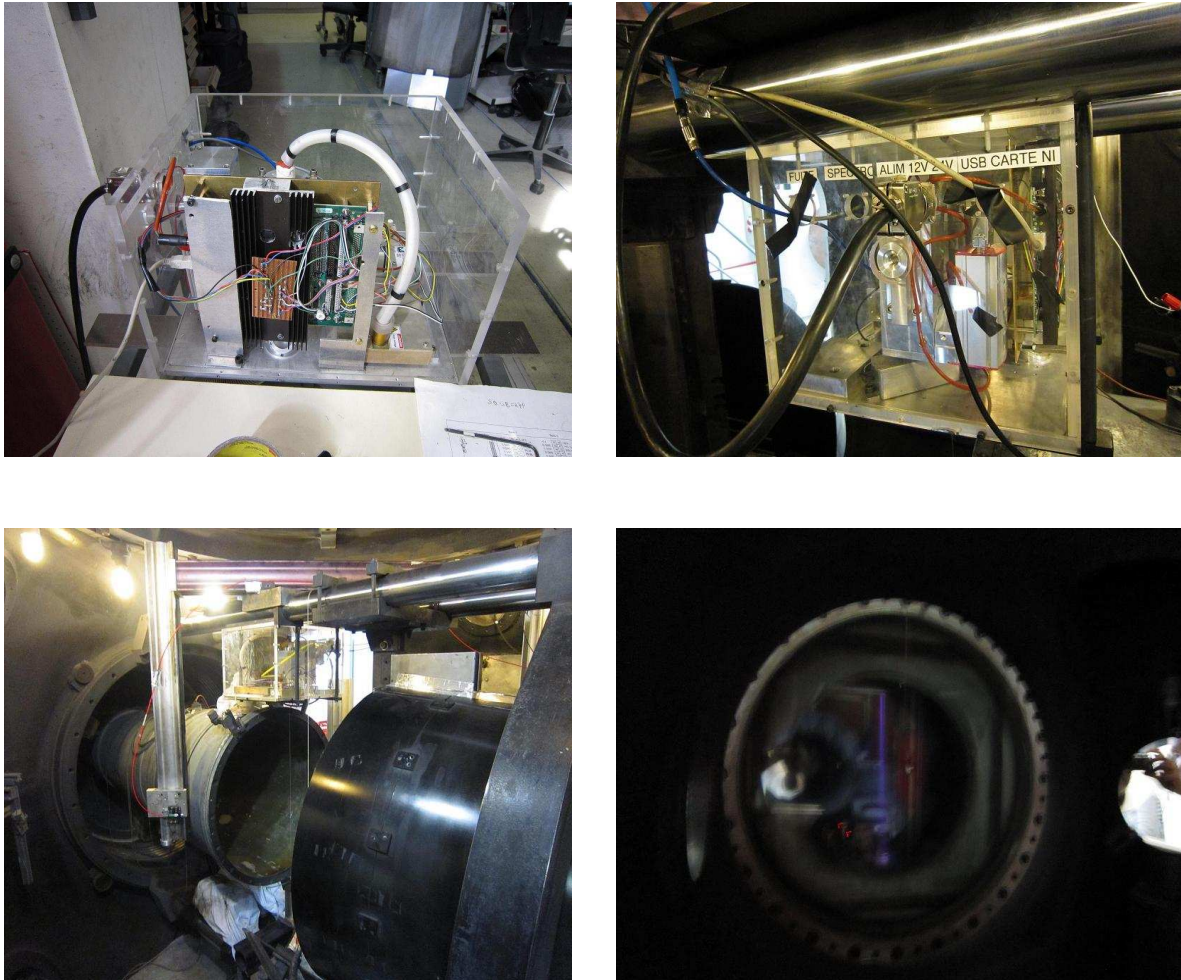


Figure 7.6

Prototype EGUN v.2 automatisé au sein de la soufflerie F4

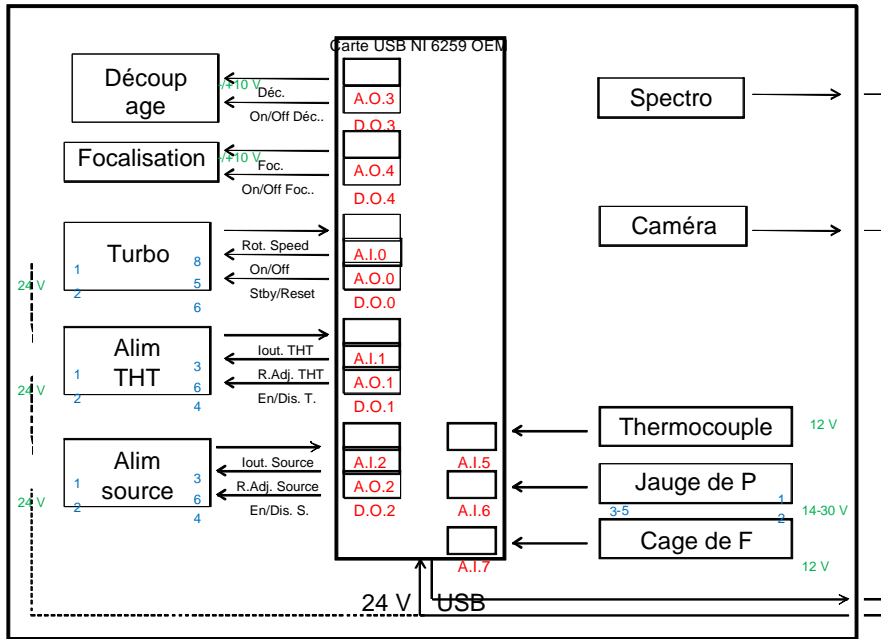


Figure 7.7

Schéma électrique du câblage entre la carte électronique et les différents composants du canon à électrons

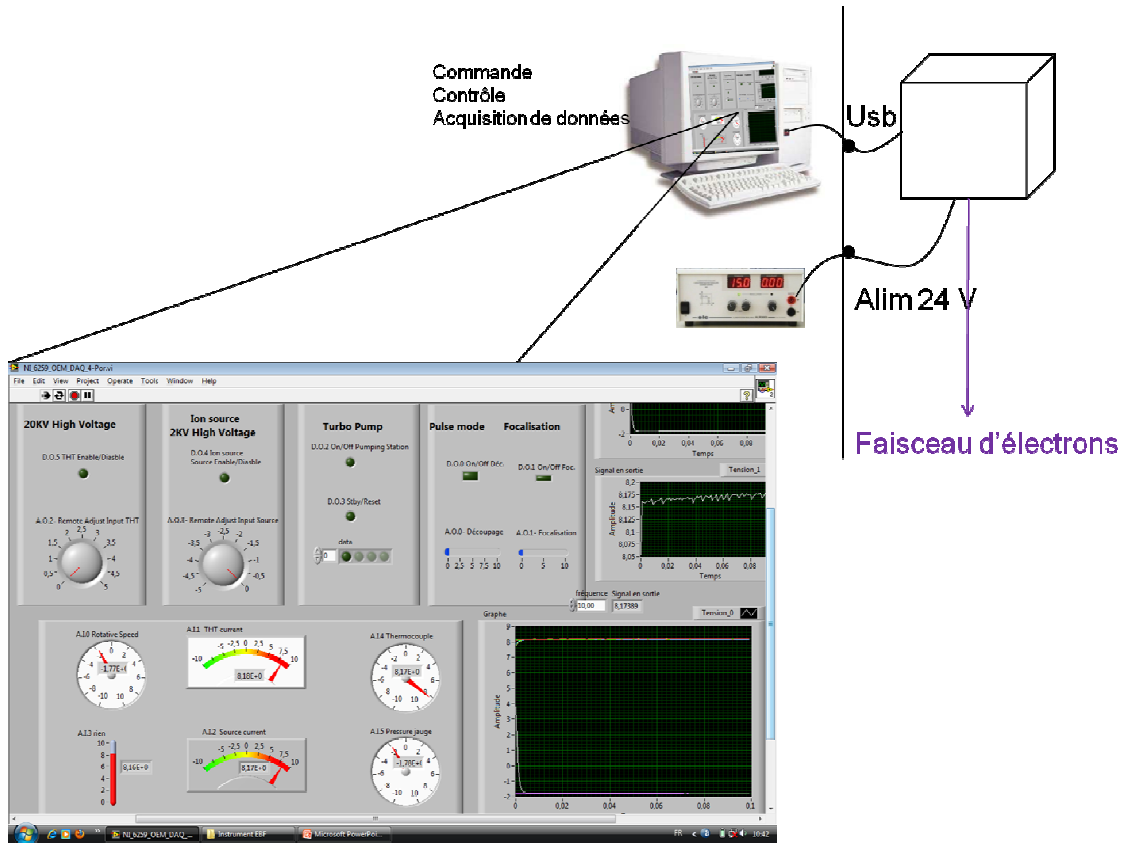


Figure 7.8

Programme de commande et d'acquisition du prototype automatisé

- Pré-allumage
- Connecter alim 24 V et Carte USB NI
- Ouvrir le programme labview (NI_6259_OEM_DAQ)
- Mise sous tension alim 24 V
- Vérifier que le voyant lumineux de la pompe clignote
- Vérifier que le voyant lumineux de la carte s'est allumé (ou carte détectée par l'ordinateur)

Annexes

- Exécuter NI_6259_OEM_DAQ en continu (auparavant vérifier qu'aucun voyant vert n'est allumé)
- Mise en route des différents composants : (après pompage primaire)

Pompe turbo :

- ✓ **On Pompe turbo** (vitesse à 66 % par défaut (60000 rpm))
- ✓ **On Stby/reset** : Vitesse à 100 % (90000 rpm)
- Si possible vérifier que le voyant lumineux vert est fixe
- Contrôler la pression avec **Pressure jauge**

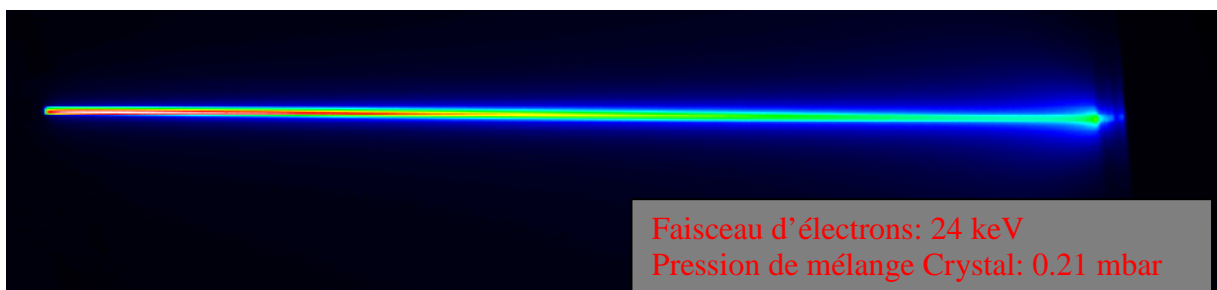
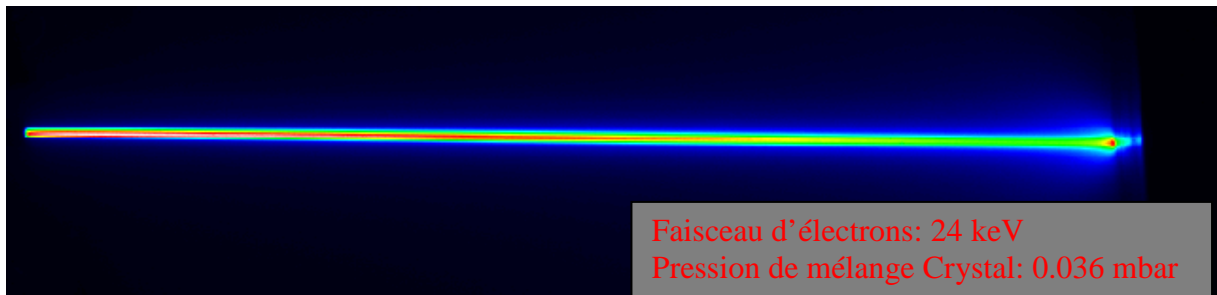
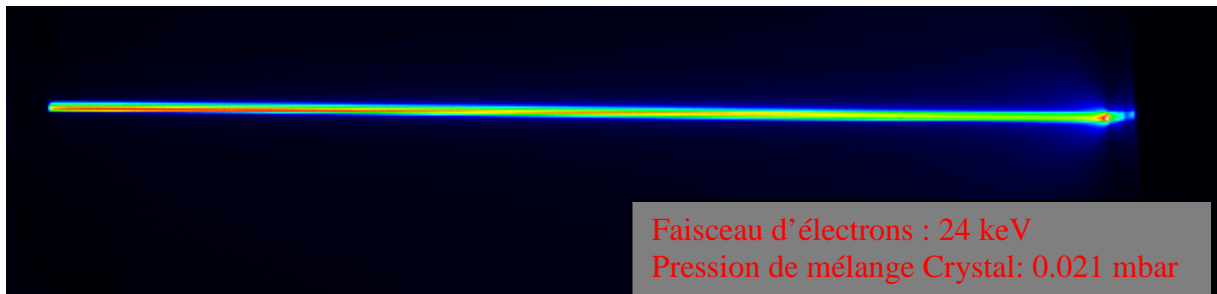
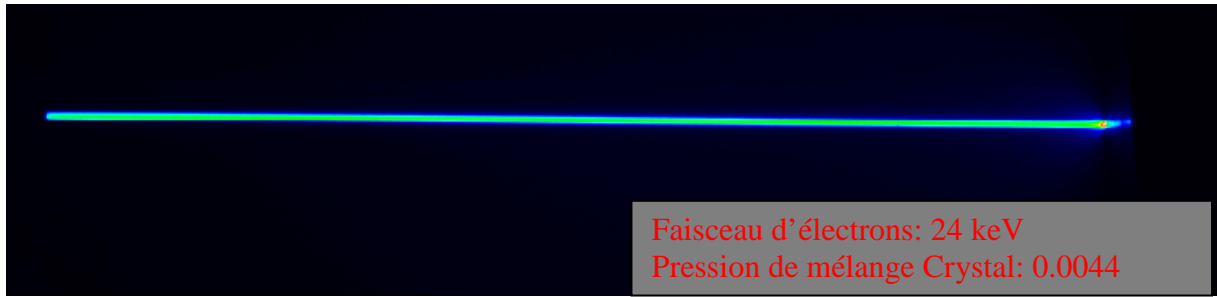
Alimentation Source :

- Mise sous tension de l'alim source en allumant le voyant **Enable/Disable Source**
- Faire varier la commande numérique **Remote Adjust Input source** (de 0 à 5 V correspondant à une variation de 0 % à 100 % entre 0 kV et 2 kV)
- Vérifier que la tension (**Eout Monitor**) varie également

Alimentation HT :

- Mise sous tension de l'alim HT en allumant le voyant **Enable/Disable HT**
- Faire varier la commande numérique **Remote Adjust Input HT** (de 5 à 0 V correspondants à une variation de 0 % à 100 % entre 0 kV et 20 kV)
- Vérifier que la tension (**Eout Monitor**) varie également

7.3 *Annexes C/ Dispersion du faisceau d'électrons*



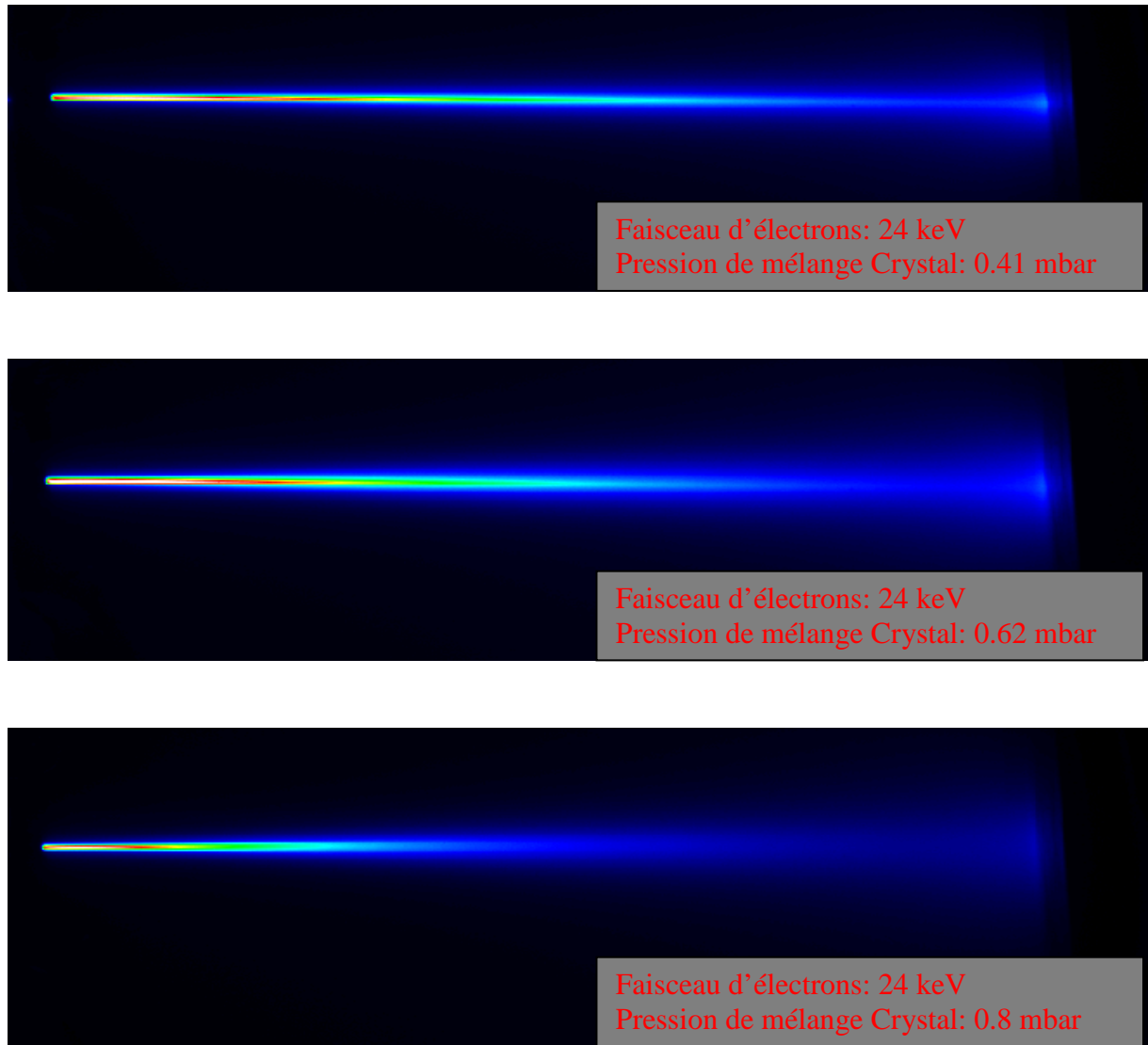


Figure 7.9

Dispersion d'un faisceau d'électrons de 24 keV dans un mélange de gaz $N_2/CO_2/CO$ à différentes pression. Images acquises grâce à une caméra CCD 1340X400 pixels

7.4 Annexes D/ Configuration électronique des atomes et molécules

7.4.1 Eléments de symétrie moléculaire : théorie des groupes

Une molécule présente quatre types d'éléments de symétrie : l'axe de symétrie, l'axe de symétrie alternée, le plan de symétrie et le centre de symétrie :

L'axe de symétrie : La molécule peut effectuer une rotation C_n d'angle $\frac{2\pi}{n}$ autour de cet axe de symétrie. La *Figure 7.10* ci-dessous montre l'exemple de la molécule H_2O et N_2 qui présentent respectivement un axe de symétrie de type C_2 et C_∞ ou encore de la molécule de NH_3 non linéaire et qui présente un axe de symétrie de type C_3 .

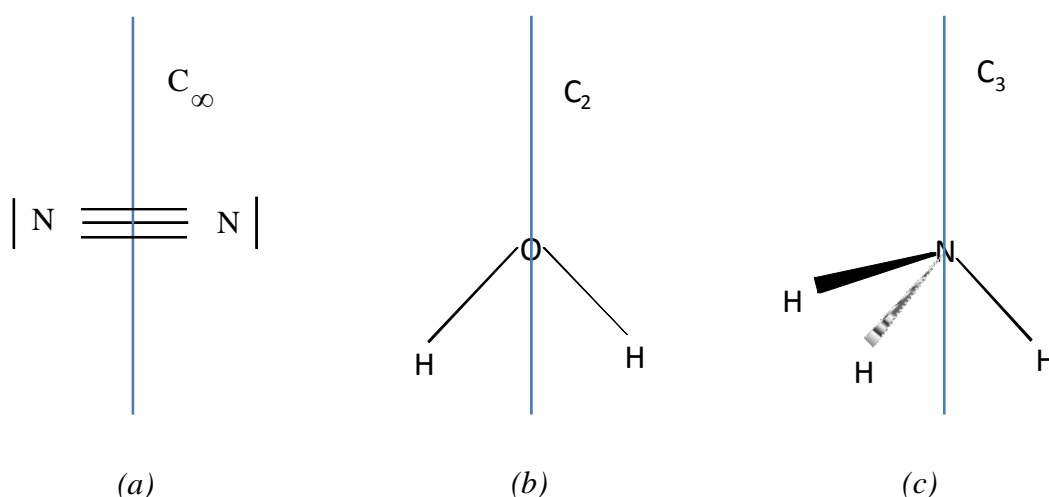


Figure 7.10

Exemple de molécules présentant un axe de symétrie : H_2O , NH_3 et N_2

Les molécules linéaires possèdent un axe de symétrie qui les fait coïncider avec elles-mêmes quelque soit l'angle de rotation : on les note C_∞ . C'est l'exemple de toutes les molécules symétriques diatomiques comme N_2 , CO ou CO_2 .

Le plan de symétrie : On note σ_h le plan de symétrie horizontal, perpendiculaire à l'axe principal et σ_v le plan de symétrie vertical contenant l'axe principal.

Si on reprend les exemples, la molécule de H_2O présente deux plans σ_v , NH_3 en présente 3 (Figure 7.11).

Axe de symétrie alternée : Noté S_n , il définit une opération de rotation C_n suivie d'une réflexion par rapport à un plan σ_h

Le centre de symétrie : Appelé aussi centre d'inversion, il est noté i . Dans le cas de la molécule de CO_2 , l'atome de carbone représente le centre de symétrie.

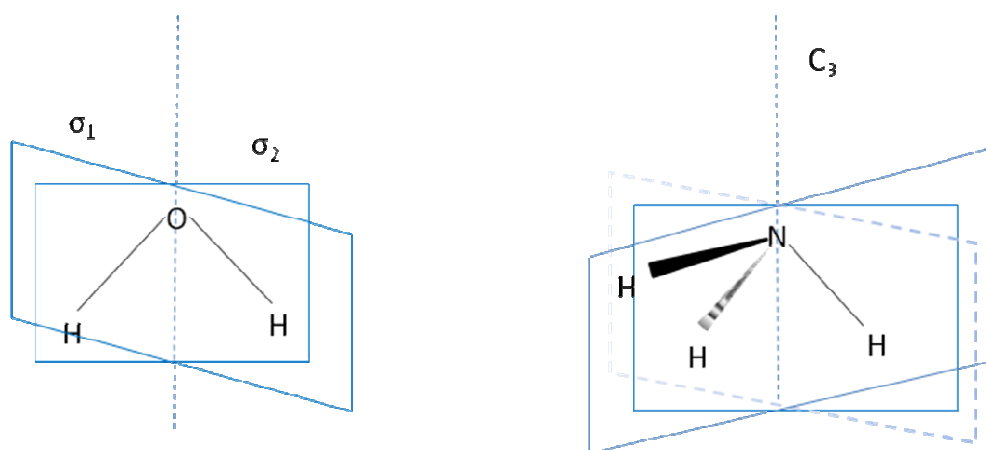


Figure 7.11

Molécules présentant des plans de symétrie : Exemple de H_2O et NH_3

7.4.2 Configuration électronique des molécules diatomiques : exemple de N_2

Si l'on considère la molécule de N_2 (Figure 7.10 (a)); sa base d'OA est constituée par les orbitales de valence de chaque atome 1 et 2, notées ϕ_1 et ϕ_2 . L'atome d'azote (N) a une configuration électronique de type $1s^2 2s^2 2p^3$ ($z=7$). La molécule de N_2 a une configuration de type $(1s\sigma)^2(1s\sigma^*)^2(2s\sigma)^2(2s\sigma^*)^2(1\pi)^4(3\sigma)^2$ dans son état fondamental selon le diagramme de la Figure 7.12.

Les orbitales moléculaires (OM) sont de la forme : $\Psi = \sum_i c_i \cdot \phi_i = c_1 \phi_1 + c_2 \phi_2$

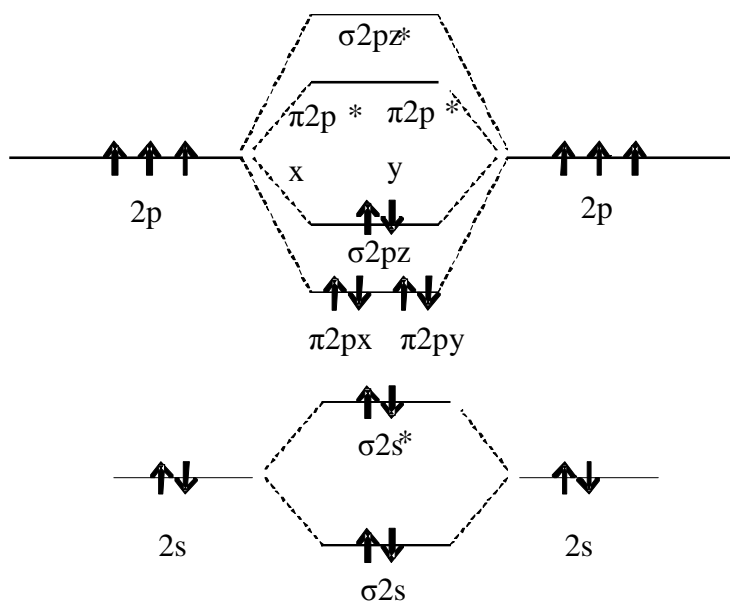


Figure 7.12

Configuration électronique de la molécule de N_2

L'ion N_2^+ se forme à partir de la molécule de N_2 qui perd un électron par ionisation. Sa

configuration électronique est donc du type : $(1s\sigma)^2(1s\sigma^*)^2(2s\sigma)^2(2s\sigma^*)^2(1\pi)^4(3\sigma)^1$

On obtient ainsi deux orbitales moléculaires associées aux liaisons liantes et non liantes. Sur les deux figures (Figure 7.13), l'énergie des niveaux σ et π varie avec la distance internucléaire d . Lorsque d tend vers l'infini, E et E^* tendent vers H_{11} . Lorsque d diminue, E diminue et tend vers une limite finie pour $d=0$; E^* augmente et tend vers l'infini quand d tend vers 0. La figure de droite montre la variation de l'énergie potentielle pour l'état fondamental σ^2 et pour l'état excité $\sigma^1\pi^1$. L'énergie potentielle de l'état fondamental atteint un minimum lorsque la distance internucléaire est égale à la distance internucléaire d'équilibre de la

molécule de N_2 qui est $1,098 \text{ \AA}$ dans son état fondamental. Cette courbe est connue sous le nom de courbe de *Morse*.

A l'état excité, le niveau anti-liant étant plus déstabilisé que le niveau liant n'est stabilisé, l'énergie électronique est toujours supérieure à sa valeur asymptotique. Lorsqu'on excite la molécule elle tend ainsi à se dissocier.

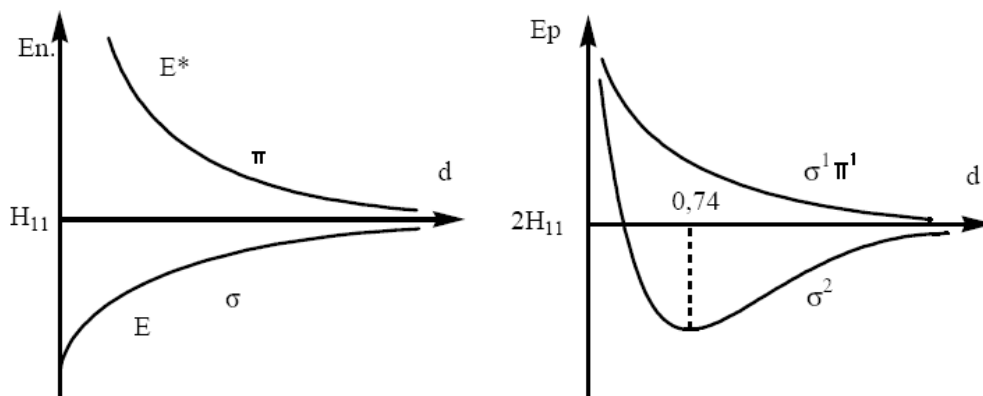


Figure 7.13

Variation de l'énergie en fonction de la distance internucléaire d . A gauche l'énergie des orbitales moléculaires σ et π et à droite l'énergie potentielle totale à l'état fondamental σ^2 et $\sigma^1 \pi^1$

7.5 Annexes E / Constantes Moléculaires

7.5.1 N₂

Molécule (ion)	N ₂ ⁺
Etat électronique	X ² Σ _g ⁺
Auteur (année)	Herzberg(1971)
Constantes	Unité cm ⁻¹
T _e	0,00
w _e	2,21E+03
w _e x _e	1,62E+01
w _e y _e	4,00E-03
B _e	1,93E+00
D _e	5,92E-06
H _e	0,00E+00
α _e	-1,88E-02
β _e	-3,90E-08
γ _e	-6,77E-05

Molécule(ion)	N ₂ ⁺
Etat électronique	X ² Σ _g ⁺
Auteur (année)	Lavrov(1991)
Constantes	Unité cm ⁻¹
T _e	0,00
w _e	2,36E-03
w _e x _e	1,43E+01
w _e y _e	-2,26E-03
B _e	2,00E+00
D _e	5,76E-06
H _e	0,00E+00
α _e	-1,73E-02
β _e	0,00E+00
γ _e	0,00E+00

Molécule (ion)	N ₂ ⁺
Etat électronique	B ² Σ _u ⁺
Auteur (année)	Herzberg(1971)
Constantes	Unité cm ⁻¹
T _e	25461,11
w _e	2,42E+03
w _e x _e	2,41E+01
w _e y _e	-3,00E-01
B _e	2,09E+00
D _e	-8,80E-05
H _e	-7,05E-12
α _e	2,12E-02
β _e	6,27E-06
γ _e	-5,00E-04

Molécule (ion)	N ₂
Etat électronique	A ³ Σ _u ⁺
Auteur (année)	Lavrov(1991)
Constantes	Unité cm ⁻¹
T _e	50203,66
w _e	1,46E+03
w _e x _e	1,40E+01
w _e y _e	2,40E-02
B _e	1,45E+00
D _e	5,84E-06
H _e	-7,05E-12
α _e	1,75E-02
β _e	3,00E-08
γ _e	-1,40E-04

Molécule (ion)	N ₂
Etat électronique	B ³ Π _u ⁺
Auteur (année)	Lavrov(1991)
Constantes	Unité cm ⁻¹
T _e	59619,09
w _e	1,73E+03
w _e x _e	1,44E+01
w _e y _e	-3,30E-03
B _e	1,64E+00
D _e	5,53E-06
H _e	-7,05E-12
α _e	1,75E-02
β _e	1,64E+00
γ _e	-5,00E-04

Molécule (ion)	N ₂
Etat électronique	C ³ Π _u ⁺
Auteur (année)	Lavrov(1991)
Constantes	Unité cm ⁻¹
T _e	89136,88
w _e	2,05E+03
w _e x _e	2,89E+01
w _e y _e	2,25E+00
B _e	1,83E+00
D _e	5,15E-06
H _e	0,00E+00
α _e	2,40E-02
β _e	2,13E-06
γ _e	1,90E-03

Annexes

Molécule (ion)	N ₂
Etat électronique	X ²
Auteur (année)	Nist
Constantes	Unité cm ⁻¹
T _e	0,00
w _e	2,36E+03
w _e x _e	1,43E+01
w _e y _e	-2,26E-03
B _e	2,00E+00
D _e	5,76E-06
H _e	0,00E+00
α _e	1,73E-02
β _e	
γ _e	0,00E+00

Molécule (ion)	N ₂
Etat électronique	B ³ Σ _u ⁺
Auteur (année)	Nist
Constantes	Unité cm ⁻¹
T _e	25461,11
w _e	2,42E+03
w _e x _e	2,41E+01
w _e y _e	-3,00E-01
B _e	2,09E+00
D _e	-8,80E-05
H _e	-7,05E-12
α _e	2,12E-02
β _e	6,27E-06
γ _e	-5,00E-04

N2(C-B)						N2+(B-X)						N2+(B-X) muntz					
2p_tet						1n_tet						1n_tet					
3371,30	3576,90	3804,90	4059,40	4343,60		3914,40	4278,10	4709,20	5228,30	5864,70		3914,40	4278,10	4709,20	5228,30	5864,70	
3159,30	3338,90	3536,70	3755,40	3998,40		3582,10	3884,30	4236,50	4651,80	5148,80		3582,10	3884,30	4236,50	4651,80	5148,80	
2976,80	3136,00	3309,00	3500,50	3710,50		3308,00	3563,90	3857,90	4199,10	4599,70		3308,00	3563,90	3857,90	4199,10	4599,70	
2819,80	2962,00	3116,70	3285,30	3469,00		3078,20	3298,70	3548,90	3835,40	4166,80		3078,20	3298,70	3548,90	3835,40	4166,80	
2687,00	2814,00	2953,00	3104,00	3268,10		2881,60	3076,40	3293,40	3538,30	3818,10		2881,60	3076,40	3293,40	3538,30	3818,10	
2p_ajk						1n_ajk						1n_ajk					
1,39E+7	8,88E+6	3,34E+6	9,60E+5	5,20E+4		1,24E+7	3,70E+6	7,34E+5	1,20E+5	1,72E+4		1,24E+7	2,20E+6	5,01E+5	1,05E+5	1,00E+0	
1,38E+7	5,30E+5	5,49E+6	4,62E+6	2,12E+6		5,86E+6	4,87E+6	4,40E+6	1,49E+6	3,44E+5		3,42E+6	2,68E+6	2,66E+6	1,93E+6	2,74E+5	
4,81E+6	1,14E+7	1,00E+6	1,65E+6	3,80E+6		7,90E+5	8,25E+6	1,50E+6	3,77E+6	1,95E+6		8,26E+5	4,79E+6	7,82E+5	2,32E+6	1,31E+5	
6,40E+5	8,68E+6	6,40E+6	3,34E+6	8,90E+5		2,02E+4	1,77E+6	8,80E+6	2,77E+5	2,78E+6		1,00E+0	1,88E+6	5,19E+6	1,00E+0	1,00E+0	
1,00E+0	1,48E+6	1,04E+7	3,04E+6	4,28E+6		1,00E+0	1,00E+0	1,00E+0	1,00E+0	1,00E+0		1,00E+0	1,00E+0	1,00E+0	1,00E+0	1,00E+0	

2p_fff					1N_fff														
5,487E-1	3,450E-1	9,128E-2	1,363E-2	1,300E-3	8,91190E-1	9,73040E-2	1,04740E-2	9,49140E-4	7,20490E-5	4,17190E-5	1,14110E-7	7,41310E-10	4,05460E-9	1,2570E-9	4,37490E-10				
3,016E-1	8,287E-2	3,626E-1	1,957E-1	4,265E-2	1,07030E-1	7,16330E-1	1,49240E-1	2,42180E-2	2,88750E-3	2,75560E-4	1,89050E-5	6,24830E-7	2,98000E-9	2,50300E-8	1,21170E-8				
1,052E-1	2,733E-1	1,654E-2	2,422E-1	2,661E-1	1,75140E-3	1,82700E-1	5,88990E-1	1,72790E-1	3,76060E-2	5,49700E-3	6,24450E-4	4,99780E-5	1,92100E-6	6,95000E-9	6,65470E-8				
2,907E-1	1,844E-1	1,416E-1	5,577E-1	1,088E-1	2,68530E-5	3,52030E-3	2,36450E-1	5,22790E-1	1,78600E-1	4,90480E-2	8,37820E-3	1,09890E-3	9,97190E-3	4,35540E-6	1,26910E-8				
7,223E-3	7,743E-2	1,965E-1	3,723E-2	1,394E-1	1,79660E-5	1,47960E-4	4,39070E-3	2,74140E-1	4,76950E-1	1,73300E-1	5,80860E-2	1,11740E-2	1,63500E-3	1,66780E-4	3,09430E-5				
					5,54820E-8	5,73240E-6	4,62030E-4	4,05220E-3	2,99160E-1	4,54420E-1	1,60960E-1	6,48510E-2	1,36090E-2	2,24000E-3	2,46210E-4				
					1,04850E-9	5,36310E-7	8,87670E-6	1,07090E-3	5,69470E-2	3,19130E-1	4,50640E-1	1,44070E-1	6,97680E-2	1,54470E-2	7,80340E-3				
					3,27270E-10	1,41160E-9	2,25520E-6	6,61610E-6	2,03600E-3	3,88960E-4	3,16430E-1	4,62530E-1	1,24190E-1	7,33940E-2	1,67170E-2				
					5,21120E-12	2,71280E-9	9,34000E-10	6,45490E-6	4,61600E-7	3,32560E-3	6,32500E-6	3,08700E-1	4,87790E-1	1,0210E-1	7,63370E-2				
					1,85240E-13	1,12440E-10	1,04010E-8	5,02330E-8	1,38880E-5	1,01280E-5	4,76850E-3	1,17860E-3	2,80270E-1	5,24240E-1	7,98010E-2				
					4,92450E-14	1,02070E-13	9,68090E-10	2,43040E-8	4,60980E-7	2,31780E-5	8,77190E-5	6,03580E-3	6,10370E-3	2,57020E-1	5,69190E-1				

7.5.2 NO

Molécule (ion)	NO
Etat électronique	$X^2\Sigma^+$
Auteur (année)	Nist
Constantes	Unité cm^{-1}
T_e	0,00
w_e	1,90E+03
$w_e X_e$	1,41E+01
$w_e Y_e$	1,00E-02
B_e	1,70E+00
D_e	5,47E-06
H_e	0,00E+00
α_e	1,75E-02
β_e	1,70E-08
γ_e	-1,49E+00

Molécule (ion)	NO
Etat électronique	$A^2\Sigma^+$
Auteur (année)	Nist
Constantes	Unité cm^{-1}
T_e	43965,70
w_e	2,37431Z3
$w_e X_e$	1,02E+01
$w_e Y_e$	-4,65E-02
B_e	2,00E+00
D_e	5,40E-06
H_e	0,00E+00
α_e	1,92E-02
β_e	0,00E+00
γ_e	0,00E+00

Molécule (ion)	NO
Etat électronique	$B^2\Pi_r^+$
Auteur (année)	Galluster(1982)
Constantes	Unité cm^{-1}
T_e	45932,30
w_e	1,04E+03
$w_e X_e$	7,77E+00
$w_e Y_e$	1,16E-01
B_e	1,12E+00
D_e	5,15E-06
H_e	0,00E+00
α_e	1,34E-02
β_e	1,40E-08
γ_e	2,99E-05

Molécule (ion)	NO
Etat électronique	$C^2\Pi_r^+$
Auteur (année)	Galluster(1982)
Constantes	Unité cm^{-1}
T_e	52179,00
w_e	2,38E+03
$w_e X_e$	1,57E+01
$w_e Y_e$	0,00E+00
B_e	2,02E+00
D_e	5,80E+00
H_e	0,00E+00
α_e	3,00E-02
β_e	0,00E+00
γ_e	0,00E+00

Molécule (ion)	NO
Etat électronique	$D^2\Sigma_r^+$
Auteur (année)	Huber(1979)
Constantes	Unité cm^{-1}
T_e	53084,70
w_e	2,32E+03
$w_e X_e$	2,29E+01
$w_e Y_e$	0,00E+00
B_e	2,00E+00
D_e	5,80E-06
H_e	0,00E+00
α_e	2,18E-02
β_e	0,00E+00
γ_e	0,00E+00

Annexes

Avv'' NO A-X							Avv'' NO B-X						
0	9,5260E+	1,4160E+	1,2100E+	7,7340E+	4,0500E+	1,8510E+	0	4,2940E+	4,8410E+	2,6800E+	9,5540E+	2,4320E+	4,6770E+
1	2,0630E+	5,7810E+	4,5950E+	3,4310E+	6,3580E+	6,2940E+	1	3,8900E+	3,5860E+	1,5840E+	4,3440E+	8,0360E+	1,0270E+
2	1,9960E+	1,3940E+	9,6300E+	3,4590E+	3,6140E+	1,4730E+	2	1,8650E+	1,3920E+	4,8210E+	9,8500E+	1,2370E+	8,8700E+
3	1,1890E+	1,4775E+	3,6170E+	3,3370E+	7,1920E+	1,8270E+	3	6,3000E+	3,7690E+	1,0000E+	1,4520E+	1,0920E+	2,6440E+
4	4,7380E+	1,6910E+	1,5950E+	9,9870E+	3,9590E+	5,5050E+	4	1,6870E+	7,9910E+	1,5600E+	1,5070E+	5,0640E+	4,9180E+
5	7,6720E+	6,8500E+	9,8670E+	2,3010E+	3,2610E+	6,9880E+	5	3,8190E+	1,4130E+	1,9870E+	1,0910E+	4,6770E+	3,3700E+

Avv'' NO C-X						
0	3,1530E+	5,2190E+	4,8410E+	3,3140E+	1,8750E+	9,3330E+
1	7,3560E+	2,7940E+	1,0190E+	1,0610E+	2,3330E+	2,4110E+
2	6,4000E+	3,1210E+	3,2820E+	1,7530E+	4,2890E+	5,4730E+
3	2,6300E+	4,7300E+	7,7380E+	9,0900E+	2,3300E+	9,5370E+
4	5,8420E+	4,6830E+	1,8590E+	2,2070E+	9,5150E+	1,4000E+
5	0,0000E+	0,0000E+	0,0000E+	0,0000E+	0,0000E+	0,0000E+

7.5.3 CO

Molécule (ion)	CO ⁺
Etat électronique	X ² Σ ⁺
Auteur (année)	Nist
Constantes	Unité cm ⁻¹
T _e	0,00
w _e	2,21E+03
w _e x _e	1,52E+01
w _e y _e	0,00E+00
B _e	1,98E+00
D _e	6,35E-06
H _e	0,00E+00
α _e	1,89E-02
β _e	3,33E-07
γ _e	-1,49E+00

Molécule (ion)	CO ⁺
Etat électronique	A ² Π _i
Auteur (année)	Bembenek
Constantes	Unité cm ⁻¹
T _e	20733,30
w _e	1,56E+03
w _e x _e	1,36E+01
w _e y _e	2,43E-02
B _e	1,59E+00
D _e	6,50E-06
H _e	0,00E+00
α _e	1,95E-02
β _e	4,30E-08
γ _e	9,20E-06

Molécule (ion)	CO ⁺
Etat électronique	B ² Σ ⁺
Auteur (année)	Bembenek
Constantes	Unité cm ⁻¹
T _e	45876,70
w _e	1,73E+03
w _e x _e	2,82E+01
w _e y _e	3,99E-01
B _e	1,80E+00
D _e	7,55E-06
H _e	0,00E+00
α _e	2,98E-02
β _e	3,33E-07
γ _e	2,99E-05

Annexes

Molécule (ion)	CO ⁺
Etat électronique	c ² D _r
Auteur (année)	Nist
Constantes	Unité cm ⁻¹
T _e	63012,00
w _e	1,14E+03
w _e x _e	3,30E+01
w _e y _e	3,99E-01
B _e	1,35E+00
D _e	7,55E-06
H _e	0,00E+00
α _e	2,40E-02
β _e	3,33E-07
γ _e	-1,49E+00

Molécule (ion)	CO
Etat électronique	x ¹ Σ ⁺
Auteur (année)	Nist
Constantes	Unité cm ⁻¹
T _e	0,00
w _e	1,21E+00
w _e x _e	1,33E+01
w _e y _e	0,00E+00
B _e	1,93E+00
D _e	6,12E+06
H _e	0,00E+00
α _e	1,75E-02
β _e	0,00E+00
γ _e	0,00E+00

Molécule (ion)	CO
Etat électronique	A ¹ π _i
Auteur (année)	Bembenek
Constantes	Unité cm ⁻¹
T _e	65075,70
w _e	1,51E+03
w _e x _e	1,94E+01
w _e y _e	0,00E+00
B _e	1,61E+00
D _e	7,33E-06
H _e	0,00E+00
α _e	2,33E-02
β _e	0,00E+00
γ _e	0,00E+00

Molécule (ion)	CO
Etat électronique	B ¹ Σ ⁺
Auteur (année)	Bembenek
Constantes	Unité cm ⁻¹
T _e	91916,50
w _e	2,18E+03
w _e x _e	1,48E+01
w _e y _e	0,00E+00
B _e	1,95E+00
D _e	6,20E-06
H _e	0,00E+00
α _e	1,96E-02
β _e	0,00E+00
γ _e	0,00E+00

Molécule (ion)	CO
Etat électronique	C ¹ Σ ⁺
Auteur (année)	Bembenek
Constantes	Unité cm ⁻¹
T _e	86945,20
w _e	2,11E+03
w _e x _e	1,52E+01
w _e y _e	0,00E+00
B _e	1,96E+00
D _e	7,10E-06
H _e	0,00E+00
α _e	2,61E-02
β _e	0,00E+00
γ _e	0,00E+00

Annexes

Molécule (ion)	CO
Etat électronique	$a^3\pi_r$
Auteur (année)	Nist
Constantes	Unité cm^{-1}
T_e	48686,00
w_e	1,74E+03
$w_e x_e$	1,44E+01
$w_e y_e$	0,00E+00
B_e	1,69E+00
D_e	6,36E-06
H_e	0,00E+00
α_e	1,90E-02
β_e	0,00E+00
γ_e	0,00E+00

Molécule (ion)	CO
Etat électronique	$e^3\Sigma^-$
Auteur (année)	Nist
Constantes	Unité cm^{-1}
T_e	64230,20
w_e	1,12E+03
$w_e x_e$	1,07E+01
$w_e y_e$	0,00E+00
B_e	1,28E+00
D_e	6,77E-06
H_e	0,00E+00
α_e	1,90E-02
β_e	0,00E+00
γ_e	1,75E-02

Molécule (ion)	CO
Etat électronique	$b^3\Sigma^+$
Auteur (année)	Bembenek
Constantes	Unité cm^{-1}
T_e	83814,00
w_e	2,20E+03
$w_e x_e$	0,00E+00
$w_e y_e$	0,00E+00
B_e	1,99E+00
D_e	0,00E+00
H_e	0,00E+00
α_e	4,20E-02
β_e	0,00E+00
γ_e	0,00E+00

Molécule (ion)	CO
Etat électronique	$c^3\pi_r$
Auteur (année)	Nist
Constantes	Unité cm^{-1}
T_e	93158,00
w_e	0,00E+00
$w_e x_e$	0,00E+00
$w_e y_e$	0,00E+00
B_e	0,00E+00
D_e	6,00E-06
H_e	0,00E+00
α_e	0,00E+00
β_e	0,00E+00
γ_e	0,00E+00

Molécule (ion)	CO
Etat électronique	$a^3\pi_r$
Auteur (année)	Nist
Constantes	Unité cm^{-1}
T_e	55825,00
w_e	1,23E+03
$w_e x_e$	1,05E+01
$w_e y_e$	0,00E+00
B_e	1,34E+00
D_e	6,41E-06
H_e	0,00E+00
α_e	1,89E-02
β_e	0,00E+00
γ_e	0,00E+00

Annexes

CO+ (A-X)							CO+ (B-X)						
In_tet							In_tet						
4900,20	5486,00	6218,50	7159,40	0,00	0,00		2191,40	2301,00	2420,90	2551,40	2694,57	2852,31	
4558,00	5061,00	5677,60	6451,80	7452,88	0,00		2113,80	2216,00	2326,50	2446,80	2578,15	2722,19	
4265,90	4703,00	5231,40	5881,70	6702,40	7771,41		2043,80	2139,00	2242,00	2353,50	2474,78	2607,20	
4013,50	4398,00	4856,80	5412,50	6099,83	697,27		1980,30	2070,00	2165,90	2269,80	2382,34	2504,81	
3793,30	4135,00	4538,00	5019,40	5605,20	6333,79		1922,50	2007,00	2096,90	2194,10	2299,10	2412,96	
3599,20	3906,00	4263,00	4685,10	5191,48	5810,66		1869,40	1949,00	2033,90	2125,20	2223,63	2329,97	
0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00		0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	
0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00		0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	
0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00		0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	
In_ajk							In_ajk						
3,95E+3	9,97E+2	9,97E+2	1,00E+3	1,26E+4	1,20E+3		1,30E+5	7,97E+4	1,97E+4	5,50E+3	1,26E+3	1,20E+3	
1,32E+3	1,81E+3	5,83E+3	1,12E+2	1,03E+4	7,64E+3		1,32E+5	1,81E+4	5,83E+4	4,12E+4	1,03E+4	7,64E+3	
2,29E+5	1,26E+5	4,26E+2	5,21E+4	2,86E+4	9,22E+2		6,29E+5	1,26E+5	4,26E+2	7,21E+4	8,86E+4	9,22E+2	
2,72E+5	2,74E+4	6,77E+4	6,04E+4	1,38E+2	1,94E+4		2,72E+5	4,74E+6	6,77E+4	6,04E+4	1,38E+2	1,94E+4	
2,50E+5	2,71E+3	1,24E+5	3,99E+3	4,46E+4	1,98E+4		2,50E+5	2,71E+3	3,24E+7	3,99E+3	4,46E+4	1,98E+4	
1,89E+5	5,21E+4	8,31E+4	2,64E+4	5,78E+4	1,29E+3		1,89E+5	5,21E+4	8,31E+4	2,64E+4	5,78E+4	1,29E+3	
1,22E+5	1,10E+5	1,78E+4	9,01E+4	9,77E+3	4,26E+4		1,22E+5	1,10E+5	1,78E+4	9,01E+4	9,77E+3	4,26E+4	
6,73E+4	1,32E+5	1,45E+3	9,47E+4	1,02E+4	5,46E+4		6,73E+4	1,32E+5	1,45E+3	9,47E+4	1,02E+4	5,46E+4	
3,20E+4	1,15E+5	3,03E+4	4,57E+4	6,20E+4	1,38E+4		3,20E+4	1,15E+5	3,03E+4	4,57E+4	6,20E+4	1,38E+4	

CO+ (B-A)							CO+ (C-A)						
In_tet							In_tet						
3964,16	4220,47	4506,20	4826,77	5189,14	5602,45	607,89	2377,27	2467,12	2562,09	2662,63	2769,31	2882,81	
3717,21	3941,68	4189,80	4465,55	4773,99	5121,59	0,00	2318,01	2403,36	2318,01	2588,51	2689,23	2796,13	
3506,06	3705,07	3923,47	4164,27	4431,24	4729,17	0,00	2265,14	2346,57	2432,32	2522,76	2618,33	2719,56	
3323,38	3501,65	3696,10	3909,05	4143,38	4402,72	0,00	2217,99	2296,00	2378,04	2464,41	2555,53	2651,87	
3163,60	3324,74	3499,54	3689,86	3897,95	4126,63	0,00	2175,98	2251,02	2329,81	2412,66	2499,92	2592,04	
3022,45	3169,19	3327,63	3499,25	3685,85	3889,67	0,00	2138,65	2211,09	2287,06	2366,85	2450,77	2539,24	
0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	
0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	
0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	
In_ajk							In_ajk						
4,00E+3	5,00E+3	1,00E+4	1,00E+4	1,00E+4	1,00E+4	5,00E+4	2,00E+3	5,00E+3	5,00E+3	2,00E+3	1,00E+3	1,00E+3	
5,00E+3	3,00E+4	3,00E+4	1,00E+4	3,00E+4	3,00E+3	3,00E+3	1,00E+4	1,00E+4	1,00E+4	1,00E+4	5,00E+3	1,00E+3	
1,00E+4	8,00E+4	1,00E+5	1,00E+5	1,00E+5	1,00E+4	1,00E+4	1,00E+4	1,00E+4	1,00E+4	1,00E+4	1,00E+4	1,00E+4	
1,00E+4	1,00E+4	3,00E+4	1,00E+4	1,00E+4	1,00E+4	1,00E+4	1,00E+4	1,00E+4	6,77E+4	1,00E+4	1,00E+4	1,00E+4	
1,00E+4	1,00E+4	1,24E+5	1,00E+4	1,00E+4	1,00E+4	1,00E+4	1,00E+4	1,00E+4	1,24E+5	1,00E+4	1,00E+4	1,00E+4	
1,00E+4	1,00E+4	8,31E+4	1,00E+5	1,00E+4	1,00E+4	1,00E+4	1,00E+4	1,00E+4	8,31E+4	1,00E+4	1,00E+4	1,00E+4	
1,00E+4	1,00E+4	1,78E+4	1,00E+4	1,00E+4	1,00E+4	1,00E+4	1,00E+4	1,00E+4	1,78E+4	1,00E+4	1,00E+4	1,00E+4	
1,00E+4	1,00E+4	1,45E+3	1,00E+4	1,00E+4	1,00E+4	1,00E+4	1,00E+4	1,00E+4	1,45E+3	1,00E+4	1,00E+4	1,00E+4	
1,00E+4	1,00E+4	3,03E+4	1,00E+4	1,00E+4	1,00E+4	1,00E+4	1,00E+4	1,00E+4	3,03E+4	1,00E+4	1,00E+4	1,00E+4	

CO+ A-X fcfactors v'v' 2											
4,0000E-2	1,5000E-1	2,5000E-1	0,0000E+1	0,0000E+1	0,0000E+1		1,1000E-1	1,9000E-1	8,0000E-2	0,0000E+1	0,0000E+1
1,6000E-1	9,0000E-2	0,0000E+1	1,0000E-1	0,0000E+1	0,0000E+1		1,8000E-1	1,0000E-2	7,0000E-2	6,0000E-2	0,0000E+1
1,8000E-1	1,0000E-2	7,0000E-2	6,0000E-2	0,0000E+1	0,0000E+1		1,6000E-1	0,0000E+1	9,0000E-2	0,0000E+1	0,0000E+1
1,2000E-1	4,0000E-2	4,0000E-2	0,0000E+1	0,0000E+1	0,0000E+1		0,0000E+1	0,0000E+1	0,0000E+1	0,0000E+1	0,0000E+1
0,0000E+1	0,0000E+1	0,0000E+1	0,0000E+1	0,0000E+1	0,0000E+1		0,0000E+1	0,0000E+1	0,0000E+1	0,0000E+1	0,0000E+1
0,0000E+1	0,0000E+1	0,0000E+1	0,0000E+1	0,0000E+1	0,0000E+1		0,0000E+1	0,0000E+1	0,0000E+1	0,0000E+1	0,0000E+1
0,0000E+1	0,0000E+1	0,0000E+1	0,0000E+1	0,0000E+1	0,0000E+1		0,0000E+1	0,0000E+1	0,0000E+1	0,0000E+1	0,0000E+1

CO+ X-A fcfactors vv'											
7,9063E-2	2,1903E-1	2,8251E-1	2,2517E-1	1,2413E-1	5,0209E-2	1,5431E-2	3,6816E-3	6,9102E-4	1,0279E-4	1,2156E-5	
1,7572E-1	1,8316E-1	2,3120E-2	3,6418E-2	1,6693E-1	2,0040E-2	1,3252E-1	5,8176E-2	1,8350E-2	4,3324E-3	7,8327E-4	
2,1490E-1	4,0087E-2	4,9141E-2	1,3150E-1	2,5386E-2	2,7080E-2	1,4695E-1	1,8026E-1	1,1701E-1	4,9264E-2	1,4649E-2	
1,9213E-1	2,2952E-3	1,1812E-1	1,4836E-2	5,7352E-2	1,0411E-1	8,8383E-3	4,5664E-2	1,5538E-1	1,6164E-1	9,3067E-2	
1,4082E-1	5,2102E-2	6,3667E-2	2,6610E-2	8,6592E-2	2,6286E-5	8,2746E-2	7,0347E-2	7,2616E-5	8,1879E-2	1,6514E-1	
8,9987E-2	1,0297E-1	4,9548E-3	8,4707E-2	7,8075E-3	6,5420E-2	4,1801E-2	1,6291E-2	9,6347E-2	2,8589E-2	1,7044E-2	
5,2079E-2	1,1683E-1	1,0888E-2	6,3060E-2	2,0184E-2	5,9928E-2	7,6691E-3	7,7470E-2	3,9879E-3	5,8203E-2	7,6371E-2	
2,8006E-2	1,0660E-1	5,0774E-2	1,3738E-2	6,6125E-2	3,6187E-3	6,3748E-2	9,9000E-3	4,9995E-2	4,3097E-2	1,0113E-2	
1,4252E-2	7,3249E-2	8,1269E-2	1,1727E-3	5,7616E-2	1,7382E-2	4,2039E-2	1,9898E-1	4,9168E-2	7,3963E-3	6,9376E-2	
6,9567E-3	4,7534E-2	8,7462E-2	2,4445E-2	1,9161E-2	5,4181E-2	1,5075E-3	5,7397E-2	3,7455E-4	5,8479E-2	4,9653E-3	
3,2911E-3	2,8425E-2	7,5545E-2	5,3931E-2	9,8036E-5	5,1361E-2	1,5426E-2	3,0034E-2	2,8433E-2	2,4497E-2	2,8166E-2	

Annexes

CO+B-X fcfactors v'v''

0	5,3087E-1	3,1783E-1	1,1157E-1	3,0600E-2	7,3164E-3	1,6264E-2	9,9700E+	9,9700E+
0	3,3836E-1	5,9195E-2	2,6917E-1	2,0184E-1	8,9570E-2	3,0179E-2	9,9700E+	9,9700E+
	1,0533E-1	3,1515E-1	1,3358E-2	1,0888E-1	2,0298E-1	1,4413E-1	9,9700E+	9,9700E+
	2,1644E-2	2,1511E-1	1,5259E-1	1,0971E-1	8,4361E-3	1,2595E-1	9,9700E+	9,9700E+
	3,3365E-3	7,3089E-2	2,5416E-1	2,4980E-2	1,6169E-1	1,6563E-2	9,9700E+	9,9700E+
	4,1368E-4	1,6442E-2	1,4131E-1	2,0331E-1	5,2403E-3	1,1931E-1	9,9700E+	9,9700E+
	4,2200E-5	2,7671E-3	4,5565E-2	1,9564E-1	1,0255E-1	6,2209E-2	9,9700E+	9,9700E+
	3,5873E-6	3,6660E-4	1,0290E-2	9,0807E-2	2,0484E-1	1,9904E-3	9,9700E+	9,9700E+
	2,5506E-7	3,9880E-5	1,7360E-3	2,7233E-2	1,4141E-1	1,5903E-1	9,9700E+	9,9700E+
	6,7600E-8	3,5210E-6	2,3260E-4	5,8710E-3	5,6930E-2	1,7690E-1	9,9700E+	9,9700E+
	7,9030E-9	2,4080E-7	2,5670E-5	9,7260E-4	1,5740E-2	9,1800E-2	9,9700E+	9,9700E+

CO+X-B fcfactors vv'

0	6,8748E-1	2,5289E-1	5,0649E-2	7,8660E-3	1,0044E-3	1,0991E-4	1,0655E-5	9,1459E-7	7,1263E-8	4,9996E-9	3,1996E-1
0	2,4881E-1	2,3263E-1	3,4228E-1	1,3540E-1	3,3624E-3	6,2207E-3	9,2913E-4	1,1794E-4	1,2931E-5	1,2561E-6	1,0857E-7
	5,2331E-2	3,2818E-1	2,1063E-2	2,7710E-1	2,1238E-1	8,1910E-2	2,1446E-2	4,2951E-3	7,0459E-4	9,7556E-5	1,1725E-5
	9,0564E-3	1,3746E-1	2,5322E-1	1,0020E+	1,3446E-1	2,3354E-1	1,4232E-1	5,2602E-2	1,4039E-2	2,9584E-3	5,1404E-4
	1,4825E-3	3,7574E-2	2,0602E-1	1,1026E-1	1,1140E-1	2,1596E-2	1,7849E-1	1,8642E-1	9,9204E-2	3,5458E-2	9,6035E-3
	2,6237E-4	8,6506E-3	8,7406E-2	2,0948E-1	1,0912E-2	1,6357E-1	6,5267E-3	7,9640E-2	1,8137E-1	1,4676E-1	7,1604E-2
	5,4515E-5	1,9445E-3	2,7947E-2	1,4113E-1	1,3813E-1	1,5114E-2	1,1935E-1	6,6971E-2	7,7541E-3	1,9150E-1	1,6726E-1
	1,3620E-5	4,7159E-4	8,0084E-3	6,3055E-2	1,6399E-1	4,2657E-2	8,3528E-2	3,2977E-2	1,1359E-1	1,2741E-2	3,7679E-2
	3,9894E-6	1,3027E-4	2,2955E-3	2,3288E-2	1,0558E-1	1,2945E-1	4,9936E-7	1,1845E-1	8,8107E-4	8,4732E-2	6,8350E-2
	1,3134E-6	4,1323E-5	7,0600E-4	8,0359E-3	5,1236E-2	1,3028E-1	5,4744E-2	3,6415E-2	7,3028E-2	4,4108E-2	1,8931E-2
	4,6990E-7	1,4739E-5	2,4109E-4	2,3051E-3	2,1750E-2	8,6090E-2	1,1006E-1	2,4860E-3	8,9138E-2	9,1358E-3	8,1880E-2

CO (B-X)

1n_tet						
0	1544,50	2467,12	2562,09	2662,63	2769,31	2882,81
0	2318,01	2403,36	2318,01	2588,51	2689,23	2796,13
	2265,14	2346,57	2432,32	2522,76	2618,33	2719,56
	2217,99	2296,00	2378,04	2464,41	2555,53	2651,87
	2175,98	2251,02	2329,81	2412,66	2499,92	2592,04
	2138,65	2211,09	2287,06	2366,85	2450,77	2539,24
	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
1n_ajk						
0	1,00E+5	1,00E+3	1,00E+3	3,00E+3	1,00E+3	1,00E+3
0	5,00E+2	1,00E+3	1,00E+4	1,00E+4	1,00E+3	1,00E+3
	1,00E+4	1,00E+4	1,00E+4	1,00E+4	1,00E+4	1,00E+4
	1,00E+4	1,00E+4	6,77E+4	1,00E+4	1,00E+4	1,00E+4
	1,00E+4	1,00E+4	1,24E+5	1,00E+4	1,00E+4	1,00E+4
	1,00E+4	1,00E+4	8,31E+4	1,00E+4	1,00E+4	1,00E+4
	1,00E+4	1,00E+4	1,78E+4	1,00E+4	1,00E+4	1,00E+4
	1,00E+4	1,00E+4	1,45E+3	1,00E+4	1,00E+4	1,00E+4
	1,00E+4	1,00E+4	3,03E+4	1,00E+4	1,00E+4	1,00E+4

Annexes

CO (A-X)															
In_tet															
0	1544,50	1597,30	1653,00	1711,80	1774,20	1844,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
0	1510,00	1560,40	1613,50	1669,60	1728,90	1791,70	1859,60	1930,70	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
0	1477,90	1526,10	1576,90	1630,40	1686,80	1630,40	0,00	1878,50	1950,07	2024,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
0	1447,80	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	1898,00	1970,10	2046,30	0,00	0,00	0,00	0,00
0	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	1918,20	0,00	2067,60	0,00	0,00	0,00
0	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	2089,90	0,00	0,00	0,00
0	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	2113,70	0,00
0	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	2133,70
In_ajk															
0	0,00E+0	0,00E+0	0,00E+0	0,00E+0	0,00E+0	0,00E+0	0,00E+0	0,00E+0	0,00E+0	0,00E+0	0,00E+0	0,00E+0	0,00E+0	0,00E+0	0,00E+0
0	0,00E+0	0,00E+0	0,00E+0	0,00E+0	0,00E+0	0,00E+0	0,00E+0	3,00E+4	5,00E+4	2,00E+4	0,00E+0	0,00E+0	0,00E+0	0,00E+0	0,00E+0
0	0,00E+0	0,00E+0	0,00E+0	0,00E+0	0,00E+0	0,00E+0	0,00E+0	7,00E+5	5,00E+5	2,00E+5	0,00E+0	0,00E+0	0,00E+0	0,00E+0	0,00E+0
0	0,00E+0	0,00E+0	0,00E+0	0,00E+0	0,00E+0	0,00E+0	0,00E+0	0,00E+0	5,00E+6	4,00E+6	2,00E+6	0,00E+0	0,00E+0	0,00E+0	0,00E+0
0	0,00E+0	0,00E+0	0,00E+0	0,00E+0	0,00E+0	0,00E+0	0,00E+0	0,00E+0	0,00E+0	1,40E+7	1,00E+7	1,30E+7	0,00E+0	0,00E+0	0,00E+0
0	0,00E+0	0,00E+0	0,00E+0	0,00E+0	0,00E+0	0,00E+0	0,00E+0	0,00E+0	0,00E+0	0,00E+0	0,00E+0	0,00E+0	5,00E+7	0,00E+0	0,00E+0
0	0,00E+0	0,00E+0	0,00E+0	0,00E+0	0,00E+0	0,00E+0	0,00E+0	0,00E+0	0,00E+0	0,00E+0	0,00E+0	0,00E+0	0,00E+0	1,00E+7	0,00E+0
0	0,00E+0	0,00E+0	1,45E+3	0,00E+0	0,00E+0	0,00E+0	0,00E+0	0,00E+0	0,00E+0	0,00E+0	0,00E+0	0,00E+0	0,00E+0	0,00E+0	1,00E+7
0	0,00E+0	0,00E+0	3,03E+4	0,00E+0	0,00E+0	0,00E+0	0,00E+0	0,00E+0	0,00E+0	0,00E+0	0,00E+0	0,00E+0	0,00E+0	0,00E+0	0,00E+0

CO(a3-X1)						
In_tet						
0	2063,00	2158,20	2261,20	2372,70	2494,00	2626,20
0	1992,60	2081,40	2176,90	2280,10	2391,90	2513,20
0	1928,10	2011,10	2100,16	2196,04	2299,50	2411,46
0	1868,75	1946,57	2029,92	2119,36	2215,56	2319,31
0	1813,97	1887,21	1965,45	2049,18	2138,98	2235,52
0	1763,30	1832,42	1906,09	1984,74	2068,87	2159,05
0	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
0	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
0	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
In_ajk						
0	2,00E+3	1,00E+3	1,00E+3	1,00E+2	1,00E+2	1,00E+2
0	2,00E+4	1,00E+4	1,00E+4	5,00E+3	1,00E+3	5,00E+2
0	2,00E+5	1,00E+5	1,00E+4	1,00E+4	1,00E+4	5,00E+3
0	1,00E+5	3,00E+6	5,77E+5	1,00E+4	1,00E+4	1,00E+4
0	1,00E+4	3,00E+5	5,24E+7	9,00E+6	1,00E+4	1,00E+4
0	1,00E+4	1,00E+4	8,00E+6	1,00E+4	1,00E+4	1,00E+4
0	1,00E+4	1,00E+4	1,78E+4	1,00E+4	1,00E+4	1,00E+4
0	1,00E+4	1,00E+4	1,45E+3	1,00E+4	1,00E+4	1,00E+4
0	1,00E+4	1,00E+4	3,03E+4	1,00E+4	1,00E+4	1,00E+4

CO(c3-a3)						
In_tet						
0	2293,36	2387,05	2486,74	2592,98	2706,38	2827,62
0	2293,36	2387,05	2486,74	2592,98	2706,38	2827,62
0	2293,36	2387,05	2486,74	2592,98	2706,38	2827,62
0	2293,36	2387,05	2486,74	2592,98	2706,38	2827,62
0	2293,36	2387,05	2486,74	2592,98	2706,38	2827,62
0	2293,36	2387,05	2486,74	2592,98	2706,38	2827,62
0	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
0	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
0	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
In_ajk						
0	1,00E+4	2,00E+4	1,00E+4	1,00E+3	1,00E+3	3,00E+4
0	1,00E+4	1,00E+4	1,00E+4	1,00E+3	1,00E+3	1,00E+4
0	1,00E+4	1,00E+4	1,00E+4	1,00E+3	1,00E+3	1,00E+4
0	1,00E+4	1,00E+4	1,00E+4	1,00E+3	1,00E+3	1,00E+4
0	1,00E+4	1,00E+4	6,77E+4	1,00E+4	1,00E+3	1,00E+4
0	1,00E+4	1,00E+4	1,24E+5	1,00E+3	1,00E+3	1,00E+4
0	1,00E+4	1,00E+4	8,31E+4	1,00E+3	1,00E+3	1,00E+4
0	1,00E+4	1,00E+4	1,78E+4	1,00E+4	1,00E+4	1,00E+4
0	1,00E+4	1,00E+4	1,45E+3	1,00E+4	1,00E+4	1,00E+4
0	1,00E+4	1,00E+4	3,03E+4	1,00E+4	1,00E+4	1,00E+4

CO(a3-X1)						
In_tet						
0	1806,53	1879,51	1957,48	2040,93	2130,46	0,00
0	1767,97	1837,81	1912,29	1991,85	2077,03	0,00
0	1731,96	1798,93	1870,23	1946,26	2027,51	0,00
0	1698,29	1762,63	1831,02	1903,84	1981,51	0,00
0	1666,76	1728,69	1794,42	1864,31	1938,72	0,00
0	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
0	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
0	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
0	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
In_ajk						
0	1,00E+1	2,00E+3	1,00E+3	1,00E+2	1,00E+2	1,00E+2
0	1,00E+3	1,00E+2	1,00E+4	1,00E+4	1,00E+3	5,00E+3
0	1,00E+4	1,00E+5	2,00E+4	2,00E+5	6,00E+4	5,00E+3
0	1,00E+4	1,00E+4	1,77E+5	1,00E+5	1,00E+4	1,00E+4
0	1,00E+4	1,00E+4	1,24E+5	1,00E+4	1,00E+4	1,00E+4
0	1,00E+4	1,00E+4	8,31E+4	1,00E+4	1,00E+4	1,00E+4
0	1,00E+4	1,00E+4	1,78E+4	1,00E+4	1,00E+4	1,00E+4
0	1,00E+4	1,00E+4	1,45E+3	1,00E+4	1,00E+4	1,00E+4
0	1,00E+4	1,00E+4	3,03E+4	1,00E+4	1,00E+4	1,00E+4

CO(b3-a3)						
In_tet						
0	2828,15	2972,00	3128,13	3298,12	3483,78	3687,30
0	2662,82	2789,96	2927,11	3075,43	3236,26	3411,16
0	2515,97	2629,18	2750,63	2881,21	3021,90	3173,86
0	2384,66	2486,12	2594,45	2710,31	2834,44	2967,72
0	2266,54	2358,01	2455,24	2558,75	2669,11	2786,96
0	2159,70	2242,59	2330,36	2423,41	2522,18	2627,16
0	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
0	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
0	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
In_ajk						
0	5,00E+3	5,00E+3	4,00E+3	2,00E+3	1,00E+3	3,00E+3
0	1,00E+3	1,00E+3	1,00E+3	1,00E+3	1,00E+3	1,00E+3
0	1,00E+3	1,00E+3	1,00E+3	1,00E+3	1,00E+3	1,00E+3
0	1,00E+3	1,00E+3	6,77E+3	1,00E+3	1,00E+3	1,00E+3
0	1,00E+4	1,00E+3	1,24E+3	1,00E+3	1,00E+3	1,00E+3
0	1,00E+4	1,00E+3	8,31E+3	1,00E+3	1,00E+3	1,00E+3
0	1,00E+4	1,00E+3	1,78E+3	1,00E+3	1,00E+3	1,00E+3
0	1,00E+4	1,00E+3	1,45E+3	1,00E+3	1,00E+3	1,00E+3
0	1,00E+4	1,00E+3	3,03E+3	1,00E+3	1,00E+3	1,00E+3

Annexes

7.5.4 CN

Molécule (ion)	CN
Etat électronique	$\chi^2\Sigma^+$
Auteur (année)	Nist
Constantes	Unité cm^{-1}
T_e	0,00
w_e	2,07E+03
$w_e x_e$	1,31E+01
$w_e y_e$	-1,24E-02
B_e	1,90E+00
D_e	6,40E-06
H_e	0,00E+00
α_e	1,74E-02
β_e	1,20E+00
γ_e	0,00E+00

Molécule (ion)	CN
Etat électronique	$A^2\Pi_i$
Auteur (année)	Nist
Constantes	Unité cm^{-1}
T_e	9245,28
w_e	1,81E+03
$w_e x_e$	1,28E+01
$w_e y_e$	-6,66E-03
B_e	1,72E+00
D_e	5,93E-06
H_e	0,00E+00
α_e	1,71E-02
β_e	4,20E+00
γ_e	0,00E+00

Molécule (ion)	CN
Etat électronique	$B^2\Sigma^-$
Auteur (année)	Nist
Constantes	Unité cm^{-1}
T_e	27752,80
w_e	2,16E+03
$w_e x_e$	1,77E+01
$w_e y_e$	-4,67E-01
B_e	1,97E+00
D_e	-6,60E-06
H_e	0,00E+00
α_e	2,00E-02
β_e	0,00E+00
γ_e	0,00E+00

Av v'' CN violet							Av v'' N2+ C3-B3						
ν_1	ν_2	ν_3	ν_4	ν_5	ν_6	ν_7	ν_1	ν_2	ν_3	ν_4	ν_5	ν_6	ν_7
3,3600E-2	2,6620E-2	1,5600E-4	0,0000E+0	0,0000E+0	0,0000E+0	0,0000E+0	1,3370E+	8,9050E+	3,5320E+	1,0860E+	2,8630E+	6,8100E+	
2,9520E-3	2,7750E-2	4,5590E-3	4,1340E-4	0,0000E+0	0,0000E+0	0,0000E+0	1,2660E+	5,7920E+	5,5900E+	4,8850E+	2,3750E+	8,6760E+	
3,0800E-5	5,2300E-3	2,3000E-2	5,8220E-3	7,2780E-4	0,0000E+0	0,0000E+0	4,3230E+	1,0650E+	8,4610E+	1,7440E+	4,0450E+	3,0810E+	
0,0000E+0	6,4250E-5	6,9500E-3	1,9200E-2	6,5700E-3	1,0650E-3	0,0000E+0	5,7660E+	7,8580E+	6,1490E+	2,9920E+	1,1950E+	2,3810E+	
6,5700E-8	0,0000E+0	8,2200E-5	8,2020E-3	1,6170E-2	0,0000E+0	0,0000E+0	1,2970E+	1,3840E+	9,5900E+	3,0630E+	3,8640E+	1,2820E+	
0,0000E+0	0,0000E+0	0,0000E+0	7,6900E-5	9,0800E-3	1,3770E-2	0,0000E+0	0,0000E+	0,0000E+	0,0000E+	0,0000E+	0,0000E+	0,0000E+	
Av v'' N2+ B-X							Av v'' N2+ B3-A3						
ν_1	ν_2	ν_3	ν_4	ν_5	ν_6	ν_7	ν_1	ν_2	ν_3	ν_4	ν_5	ν_6	ν_7
1,2140E+	3,9180E+	8,1360E+	1,3670E+	2,0290E+	2,7690E+	0,0000E+	4,2580E+	2,3020E+	6,8890E+	1,4460E+	2,2140E+	2,2560E+	
6,3340E+	4,2570E+	4,5220E+	1,6390E+	3,9780E+	7,7970E+	0,0000E+	6,5130E+	2,4900E+	1,2010E+	9,2190E+	3,3630E+	7,8930E+	
1,0330E+	8,1100E+	9,6110E+	3,6900E+	2,1350E+	7,0490E+	0,0000E+	3,6760E+	4,6230E+	8,8700E+	1,7360E+	6,5620E+	4,3570E+	
4,7520E+	2,3690E+	8,7760E+	3,7290E+	2,5020E+	2,2510E+	0,0000E+	9,9750E+	6,4460E+	1,6380E+	2,0270E+	5,4200E+	2,4550E+	
0,0000E+	1,2510E+	3,5930E+	8,0710E+	1,1710E+	1,4740E+	0,0000E+	1,3950E+	2,8600E+	7,0600E+	1,1730E+	2,1170E+	5,3120E+	
1,8190E+	7,3800E+	1,8320E+	4,5020E+	7,2200E+	4,4640E+	0,0000E+	9,9460E+	5,5730E+	5,0230E+	5,8790E+	2,3480E+	1,3970E+	

Annexes

7.5.5 CO₂

CO2+ (A2Pi3/2u-x2Pi3/2g) (v',0,0)-(v'',0,0)							CO2+ (A2Pi1/2uX2Pi1/2g) (v',0,0)-(v'',0,0)						
In-tet							In-tet						
0	350,50	366,90	383,90	403,00	0,00	0,00	351,10	367,40	385,20	404,70	0,00	0,00	
0	337,00	351,70	368,00	385,60	405,10	0,00	337,80	352,80	369,20	387,10	406,80	0,00	
0	324,70	338,90	353,40	369,60	387,50	0,00	325,40	339,40	354,50	371,00	389,10	0,00	
0	313,30	326,50	339,90	354,90	372,00	0,00	314,00	327,00	341,30	356,20	0,00	0,00	
0	302,70	315,00	328,00	341,30	356,50	0,00	303,40	315,60	328,60	342,70	358,00	0,00	
0	293,30	304,40	316,50	0,00	344,30	0,00	293,60	304,90	317,00	0,00	0,00	0,00	
0	0,00	0,00	305,80	317,90	0,00	0,00	0,00	0,00	306,30	318,50	0,00	0,00	
0	0,00	0,00	295,90	307,20	0,00	0,00	0,00	0,00	296,20	307,50	0,00	0,00	
0	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	
In_ajk							In_ajk						
0	4,95E-4	3,33E-4	5,36E-4	1,33E-4	0,00E+0	0,00E+0	6,89E-4	9,60E-4	7,51E-4	5,49E-4	0,00E+0	0,00E+0	
0	5,56E-4	1,58E-4	1,81E-4	5,02E-4	1,93E-4	0,00E+0	7,00E-4	9,95E-5	1,37E-4	5,78E-4	1,83E-4	0,00E+0	
0	1,02E-4	1,87E-4	2,64E-4	1,51E-4	2,79E-4	0,00E+0	3,08E-4	1,53E-4	2,39E-4	3,65E-5	1,68E-4	0,00E+0	
0	9,24E-5	1,34E-4	1,18E-4	1,73E-4	1,32E-4	0,00E+0	6,21E-5	1,50E-4	2,27E-5	2,33E-4	0,00E+0	0,00E+0	
0	2,54E-5	4,76E-5	4,29E-5	1,81E-4	5,51E-5	0,00E+0	2,19E-5	1,23E-4	8,34E-5	7,88E-5	1,80E-5	0,00E+0	
0	1,41E-5	6,28E-5	1,32E-4	0,00E+0	2,32E-5	0,00E+0	7,18E-6	3,22E-5	5,42E-5	0,00E+0	0,00E+0	0,00E+0	
0	0,00E+0	0,00E+0	0,00E+0	6,68E-5	0,00E+0	0,00E+0	0,00E+0	0,00E+0	3,89E-5	2,36E-5	0,00E+0	0,00E+0	
0	0,00E+0	0,00E+0	1,45E+3	4,26E-5	0,00E+0	0,00E+0	0,00E+0	0,00E+0	2,17E-5	2,91E-5	0,00E+0	0,00E+0	
0	0,00E+0	0,00E+0	3,03E+4	0,00E+0	0,00E+0	1,00E+4	0,00E+0	0,00E+0	0,00E+0	0,00E+0	0,00E+0	0,00E+0	

CO2+ (A2Pi3/2uX2Pi3/2g) (v',0,0)-(v'',0,2)							CO2+ (A2Pi1/2uX2Pi1/2g) (v',0,0)-(v'',0,2)						
In-tet							In-tet						
0	390,50	409,50	430,60	0,00	0,00	0,00	391,50	410,90	432,20	0,00	0,00	0,00	
0	374,10	392,20	410,80	432,00	0,00	0,00	374,90	392,80	412,30	434,20	0,00	0,00	
0	358,70	375,50	0,00	412,20	434,00	0,00	360,00	376,20	394,20	414,20	436,10	0,00	
0	0,00	0,00	377,50	394,20	414,00	0,00	0,00	0,00	377,50	396,10	416,00	438,40	
0	0,00	0,00	362,20	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	379,00	0,00	418,20	
0	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	363,70	380,90	399,70	
0	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	
0	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	
0	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	
0	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	
In_ajk							In_ajk						
0	3,08E-4	3,38E-4	1,80E-4	0,00E+0	0,00E+0	0,00E+0	3,74E-4	5,42E-4	3,35E-4	0,00E+0	0,00E+0	0,00E+0	
0	8,88E-5	7,33E-5	2,18E-5	9,78E-5	0,00E+0	0,00E+0	1,59E-4	1,28E-4	1,48E-4	1,24E-4	0,00E+0	0,00E+0	
0	5,52E-5	7,39E-5	0,00E+0	2,10E-4	1,30E-4	0,00E+0	3,33E-5	1,27E-4	5,82E-5	1,69E-5	7,89E-5	0,00E+0	
0	0,00E+0	0,00E+0	1,43E-4	2,01E-4	9,14E-5	0,00E+0	0,00E+0	0,00E+0	1,54E-5	1,07E-4	5,50E-5	5,62E-5	
0	0,00E+0	0,00E+0	1,25E-4	0,00E+0	0,00E+0	0,00E+0	0,00E+0	0,00E+0	0,00E+0	1,07E-4	0,00E+0	1,92E-5	
0	0,00E+0	0,00E+0	0,00E+0	0,00E+0	0,00E+0	0,00E+0	0,00E+0	0,00E+0	0,00E+0	5,91E-5	0,00E+0	9,64E-5	
0	0,00E+0	0,00E+0	0,00E+0	0,00E+0	0,00E+0	0,00E+0	0,00E+0	0,00E+0	0,00E+0	0,00E+0	0,00E+0	0,00E+0	
0	0,00E+0	0,00E+0	0,00E+0	0,00E+0	0,00E+0	0,00E+0	0,00E+0	0,00E+0	0,00E+0	0,00E+0	0,00E+0	0,00E+0	
0	0,00E+0	0,00E+0	0,00E+0	0,00E+0	0,00E+0	0,00E+0	0,00E+0	0,00E+0	0,00E+0	0,00E+0	0,00E+0	0,00E+0	
0	0,00E+0	0,00E+0	0,00E+0	0,00E+0	0,00E+0	0,00E+0	0,00E+0	0,00E+0	0,00E+0	0,00E+0	0,00E+0	0,00E+0	

CO2+ (B2S+u-X2Pi3) (0,0)						
In-tet						
0	289,60	288,40	0,00	0,00	0,00	0,00
0	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
0	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
0	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
0	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
0	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
0	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
0	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
0	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
0	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
In_ajk						
0	4,66E-4	4,66E-4	0,00E+0	0,00E+0	0,00E+0	0,00E+0
0	0,00E+0	0,00E+0	0,00E+0	0,00E+0	0,00E+0	0,00E+0
0	0,00E+0	0,00E+0	0,00E+0	0,00E+0	0,00E+0	0,00E+0
0	0,00E+0	0,00E+0	0,00E+0	0,00E+0	0,00E+0	0,00E+0
0	0,00E+0	0,00E+0	0,00E+0	0,00E+0	0,00E+0	0,00E+0
0	0,00E+0	0,00E+0	0,00E+0	0,00E+0	0,00E+0	0,00E+0
0	0,00E+0	0,00E+0	0,00E+0	0,00E+0	0,00E+0	0,00E+0
0	0,00E+0	0,00E+0	0,00E+0	0,00E+0	0,00E+0	0,00E+0
0	0,00E+0	0,00E+0	0,00E+0	0,00E+0	0,00E+0	0,00E+0
0	0,00E+0	0,00E+0	0,00E+0	0,00E+0	0,00E+0	0,00E+0

7.6 Annexes F/ Courbe de transmission de quelques matériaux

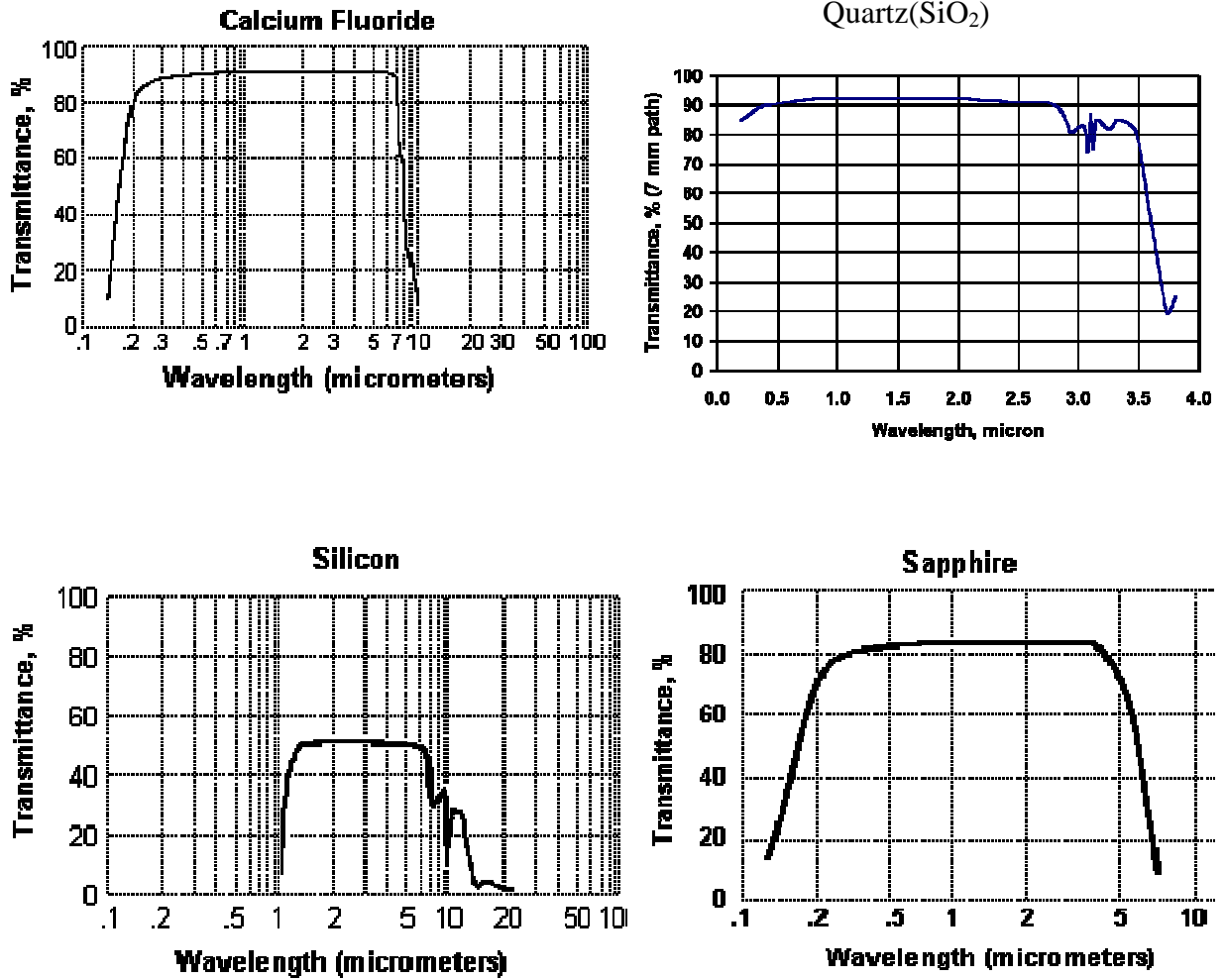


Figure 7.14

Courbe transmission des différents matériaux utilisés comme hublots, lentilles et autres systèmes optiques pour la détection u.v-visible (CaF₂, Quartz, SiO₂, Sapphire)

(Source <http://www.almazoptics.com/material.htm>)

7.7 Annexes G/ Publications scientifiques et communications

Publications scientifiques à des revues avec comité de lecture

- **Babacar Diop**, Jean Bonnet, Thomas Schmid and Ajmal Mohamed, “ **Compact Electron Gun Based on Secondary Emission Through Ionic Bombardment**”, Sensors 2011, 11, 5202-5214 , May, 11th 2011
<http://www.mdpi.com/1424-8220/11/5/5202/pdf>
- A.K. Mohamed, J. Bonnet, S. Larigaldie, T. Pot, J. Soutadé, **B. Diop** “**Mesures par la technique de Fluorescence par Faisceau d’Electrons (FFE) en hypersonique**” The ONERA Journal AerospaceLab, N°1, décembre 2009, <http://www.aerospacelab-journal.org/sites/www.aerospacelab-journal.org/files/AL1-08.pdf>
- **Babacar Diop**, Jean Bonnet, and Ajmal Mohamed, ”**Development of a compact Electron Beam Fluorescence Instrument for High Enthalpy Flows Characterization**”, NonEquilibrium Phenomena : Plasma Combustion Atmosphere edited by G. D. Roy, S. M. Frolov, A. M. Starik, Moscow : Torus Press Ltd, 2009, ISBN 978-5-94588-067-2, 49p- p247

Communications orales à des congrès nationaux et internationaux

- **MOTAR Meeting (Measurement and Observation Techniques for Aerospace Research), March, 29-30, 2010, ISL-Saint-Louis-FRANCE, Babacar Diop**, A. Mohamed, J. Bonnet, “Air and $CO_2/CO/N_2$ mixture analysis by Electron Beam Fluorescence (EBF) instrument in the *CNRS-ICARE-MARHY* hypersonic facility”
- **3rd NEPCAP (International Symposium on Non-equilibrium Processes, Plasma, Combustion, and Atmospheric Phenomena), October 5 – 9, 2009, Sochi (Dagomys), Russia, Babacar Diop**, A. Mohamed, J. Bonnet, “EBF instrument for high enthalpy flow characterization”
- **3rd EUCASS (European Conference for Aerospace Sciences), 6-9 July 2009, Palais des Congrès, Versailles- France, Babacar Diop**, A. Mohamed, J. Bonnet”A portable Electron Beam Fluorescence (EBF) instrument for field measurements in air and CO_2 flows”

- **MOTAR Meeting (Measurement and Observation Techniques for Aerospace Research), March 30-31, 2009, ONERA Toulouse – France, Babacar Diop, A. Mohamed, J. Bonnet, “Development of the Electron Beam Fluorescence technique to probe hypersonic flow : Study of CO/CO₂ mixture gases”**
- **6th ATD, Sixth European Symposium on Aerothermodynamics for Space Vehicles, 3-5 November 2008, Palais des Congrès, Versailles-France, Babacar Diop, A. Mohamed, J. Bonnet, “Development of an in-flight measurement instrument based on Electron Beam Fluorescence (EBF) for shock layer Characterization**