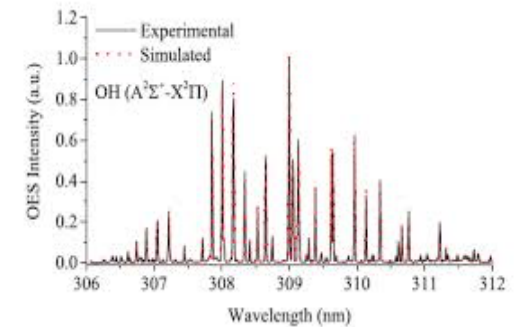
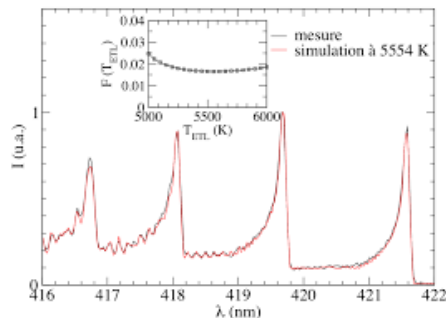




Simulation de spectres radiatifs : une aide précieuse pour le diagnostic des plasmas

Yann Cressault, laboratoire LAPLACE, Toulouse, équipe SCIPRA
cressault@laplace.univ-tlse.fr – 05.61.55.82.21





0-Brève introduction

1-La simulation de spectres radiatifs : les spectres moléculaires

2-La simulation de spectres radiatifs : les spectres de raies atomiques

3-La simulation de spectres radiatifs : le spectre du fond continu

4-La simulation de spectres radiatifs : le spectre total

5-Conclusion: les logiciels !

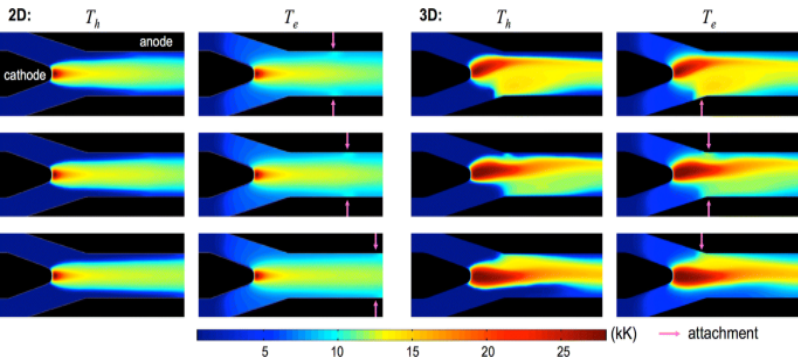


Plus d'infos:
Webséminaire de G.Henrion (site RPF)
Présentations N.Bonifaci + N. Sadeghi (RPF 2018)

Pourquoi faire de la simulation de spectres radiatifs

1/ Aide aux modèles numériques

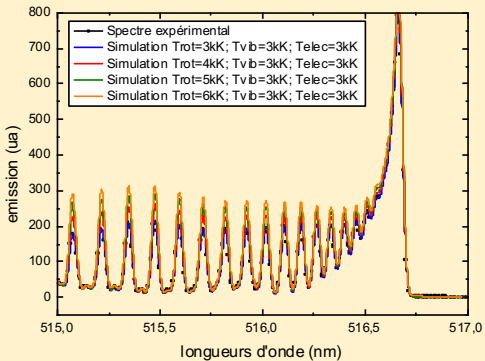
- Quantifier la puissance spectrale rayonnée à λ , ou sur $[\lambda_i, \lambda_{i+1}]$
- Quantifier la puissance totale rayonnée (intégrée)
- Quantifier la contribution de chaque phénomène radiatif
- Etudier le transfert radiatif d'un plasma, émission, absorption
- Réduire les coûts expérimentaux
- ...



J.P.Trelles, Nonequilibrium Phenomena in (Quasi-)thermal Plasma Flows, PCPP, 40, 727 (2020), non-transferred arc plasma torch model: (top to bottom) temporal sequence of the distributions of T_h and T_e obtained with 2D and 3D

2/ Aide aux diagnostics

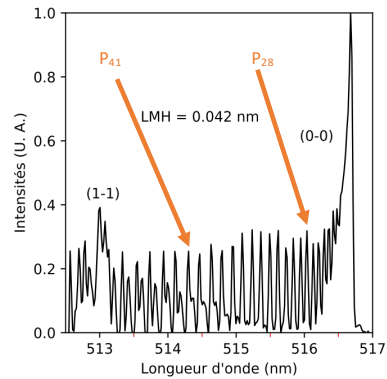
- Remonter aux températures du plasma (T_e , T_g , T_{elec} , T_{rot} , T_{vib} , T_{ex})
- Remonter aux densités des espèces
- Estimer l'auto-absorption dans un plasma
- Estimer l'absorption d'un plasma, sa dimension
- Juger de l'état du plasma (équilibre, non équilibre)
- Répondre aux questions sur le choix des raies, les spectres enregistrés



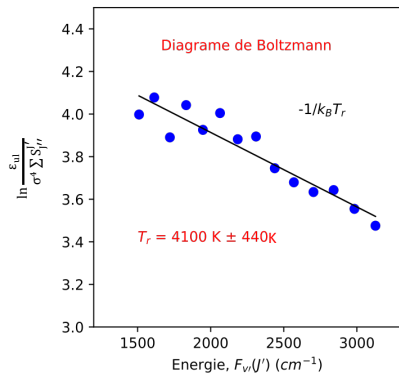
Méthodes de diagnostics usuelles

Raies rovibrationnelles

Ar-C, 300mbar (H.Hleli, Phd Thesis, 2019)

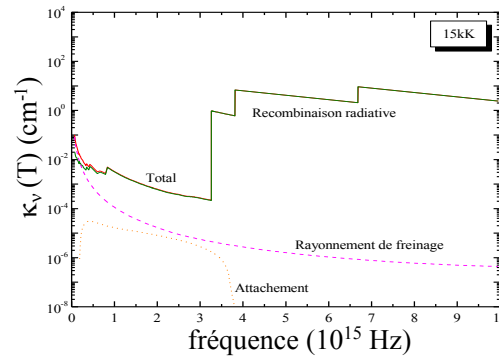


T_{rot} T_{vib}

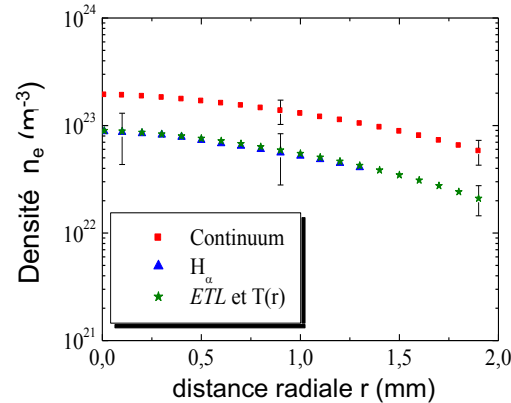


Fond continu

Ar-H₂, 1atm (Y.Cressault, Phd Thesis, 2001)

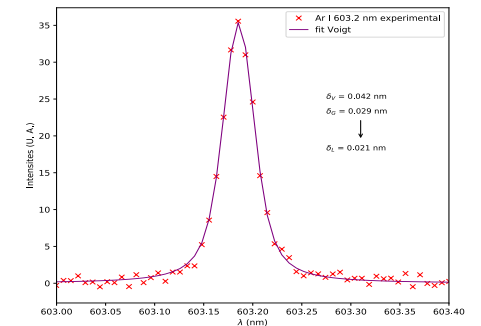


Densité électronique N_e



Elargissement de raie atomique

Ar-N₂, 1atm (A-M.Kassir, Phd Thesis, 2020)



Température T_e , T_g
($H_{\alpha,\beta}$) Densité électronique N_e

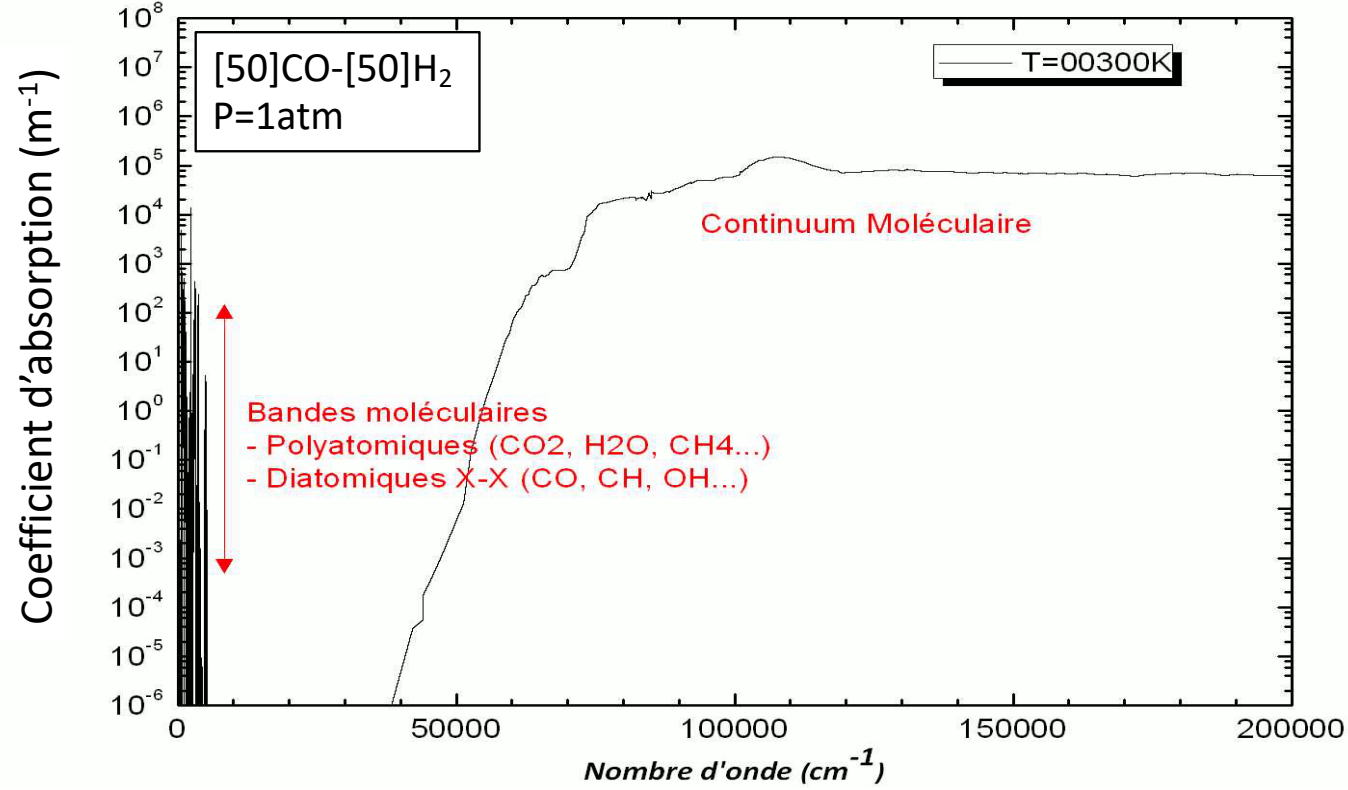
Ce n'est pas toujours possible :

- Superposition de systèmes moléculaires
- Gamme de températures inadaptées
- Variations rapides dans le temps
- Elargissements non négligeables
- Spectres radiatifs complexes (riches)

➡ Simulation et superposition

L'allure d'un spectre radiatif

Molécules neutres et chargées, des atomes neutres, des ions, et des électrons
Les contributions radiatives peuvent aider au diagnostic du plasma



CO-H₂, 1atm (T.Billoux, PhD Thesis, 2010)

1. La simulation de spectres radiatifs : **les spectres moléculaires**

- Comment simuler les bandes moléculaires ?
- Les limites de la simulation
- Comment utiliser les spectres simulés ?

1.1. Comment simuler des bandes moléculaires

Emissivité d'une raie rovibronique

$$\epsilon = \frac{1}{4\pi} N_u A_{ul} \Delta E_{ul}$$

$$N_u = g_u \frac{N_t}{Q(T)} \exp\left(-\frac{E_u}{k_B T}\right)$$

Plasma thermique

Plasma quasi-thermique
Non thermique

Température T

Températures

T_e, T_g
 T_{ex}, T_{vib}, T_{rot}



$$A_{ul} = \frac{64\pi^4 e^2 a_0^2}{3h} \sigma_{ul}^3 (R_e(r_{v'v''}))^2 q_{v'v''} \frac{\mathcal{S}(J', J'')}{2J' + 1}$$

$A_{v'v''}$ ⚠

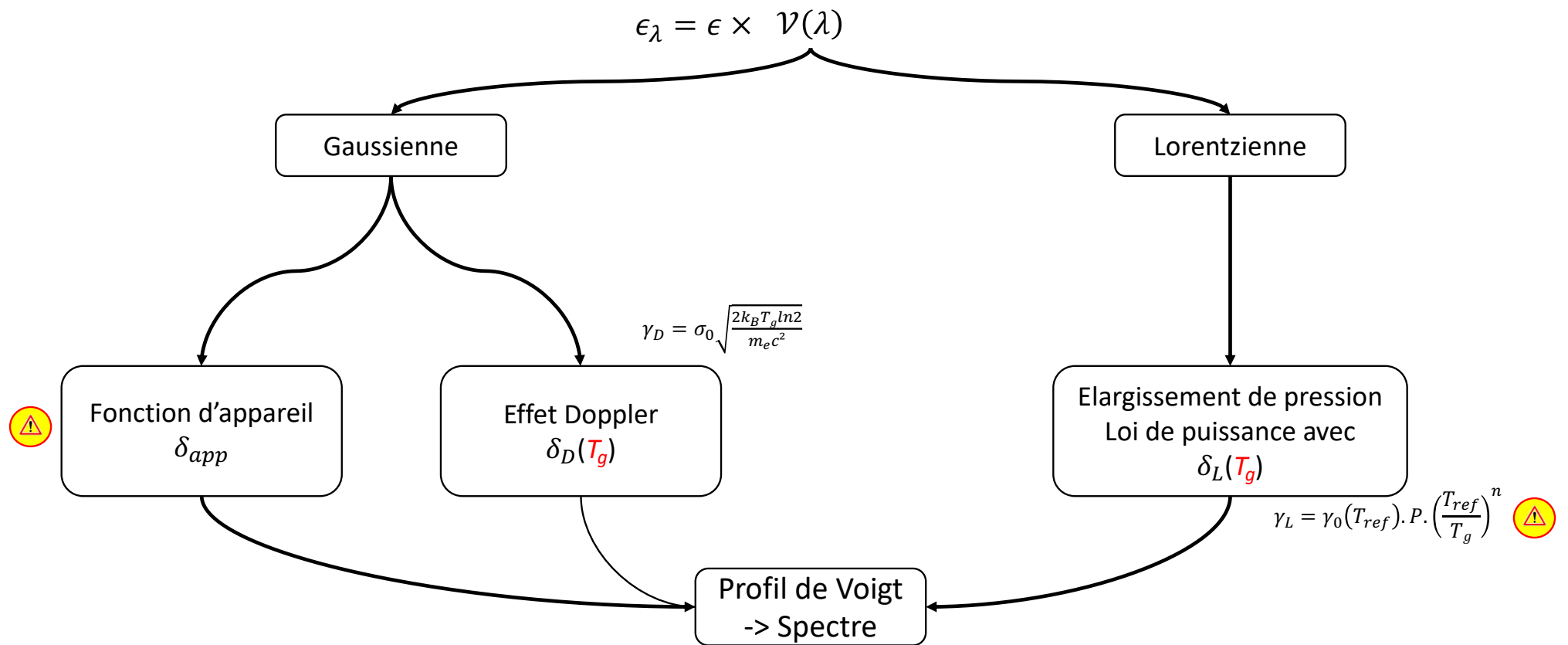
$$\Delta E_{ul} = hc\sigma_{ul} \text{ ⚠}$$

$$\sigma_{ul} = T_{e'} + G(v') + F_{v'}(J') - [T_{e''} + G(v'') + F_{v''}(J'')] + \text{couplages + perturbations}$$

Dirac

1.1. Comment simuler des bandes moléculaires

Emissivité spectrale d'une raie rovibronique



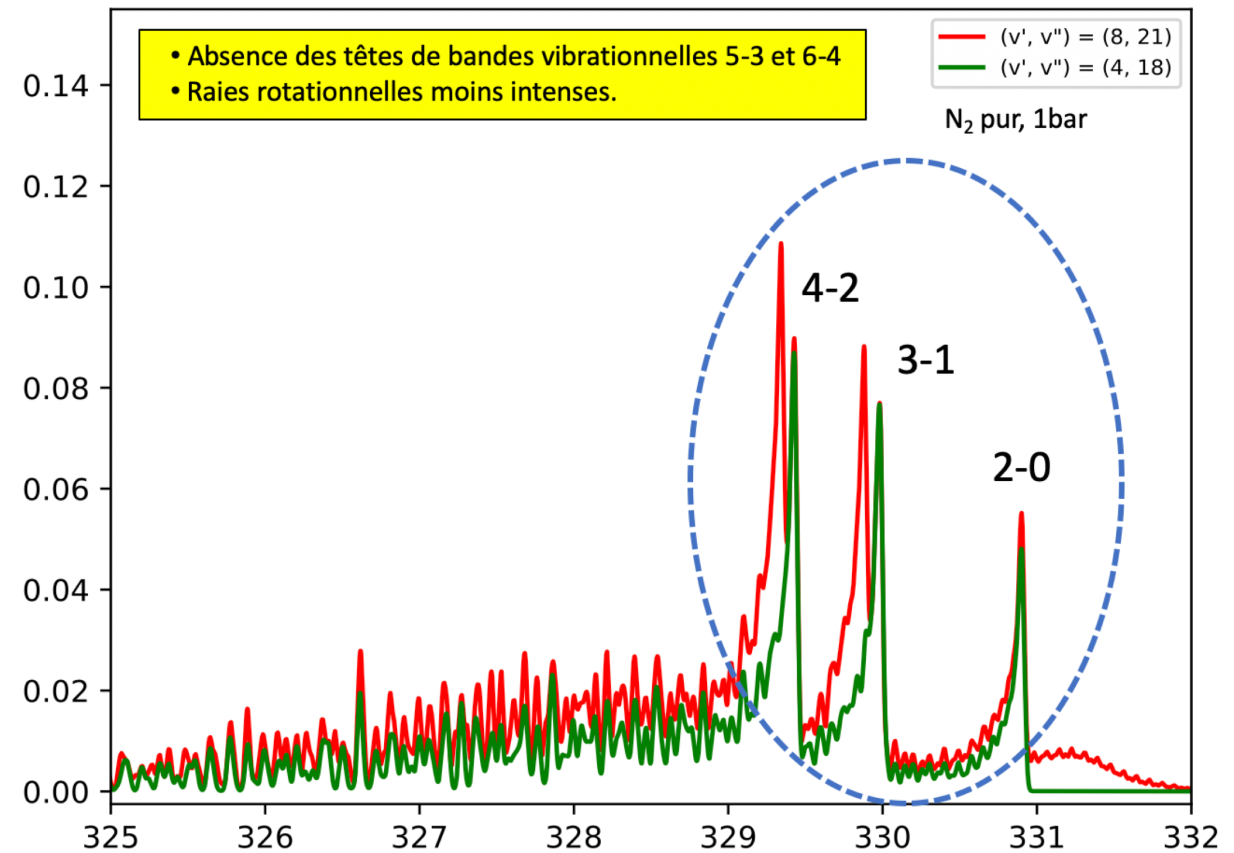
1.2. Les limites de la simulation des systèmes moléculaires

➔ « un spectre qui ne colle pas à l'expérimental, ne veut pas obligatoirement dire que la température de simulation est fausse! »

Sources d'erreurs possibles

- prise en compte des effets de structure fine ;
- cas de couplage de Hund considéré pour les états Π ;
- **les nombres quantiques limites de vibration et de rotation v_{max} et J_{max} ;**
- sources bibliographiques des probabilités de transition $A_{v'v''}$;
- sources bibliographiques des facteurs de Hönl-London $S(J', J'')$;
- prise en compte des branches satellites ;
- fonction mathématique utilisée pour le profil spectral de la fonction d'appareil ;
- composition, fonction de partition

Système N_2^+ Premier Négatif ($B^2\Sigma u^+ \rightarrow X^2\Sigma g^+$)
Nombre quantique limite v_{max}



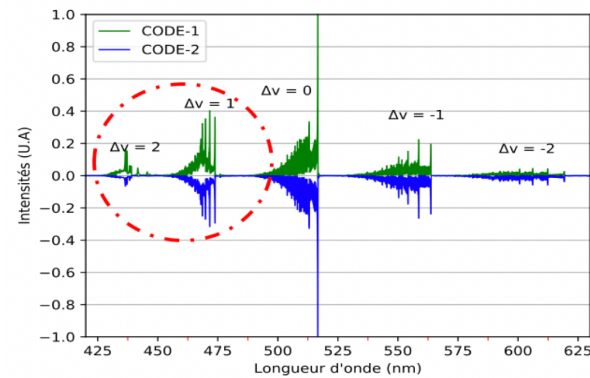
1.2. Les limites de la simulation des systèmes moléculaires

➔ « un spectre qui ne colle pas à l'expérimental, ne veut pas obligatoirement dire que la température de simulation est fausse! »

Sources d'erreurs possibles

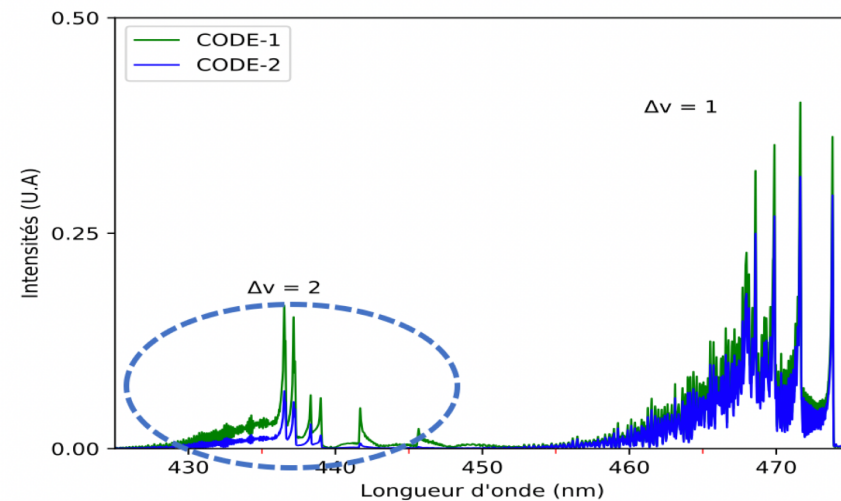
- prise en compte des effets de structure fine ;
- cas de couplage de Hund considéré pour les états Π ;
- les nombres quantiques limites de vibration et de rotation v_{max} et J_{max} ;
- **sources bibliographiques des probabilités de transition $A_{v'v''}$;**
- sources bibliographiques des facteurs de Hönl-London $S(J', J'')$;
- prise en compte des branches satellites ;
- fonction mathématique utilisée pour le profil spectral de la fonction d'appareil ;
- composition, fonction de partition

Système C_2 Swan ($d^3\Pi_g \rightarrow a^3\Pi_u$)
Probabilités de transition



CODE-1 : Facteurs de HL de Kovacs + Probabilités de transition de Cooper (SPARTAN)

CODE-2 : Facteurs de HL de Kovacs + Probabilités de transition de Babou



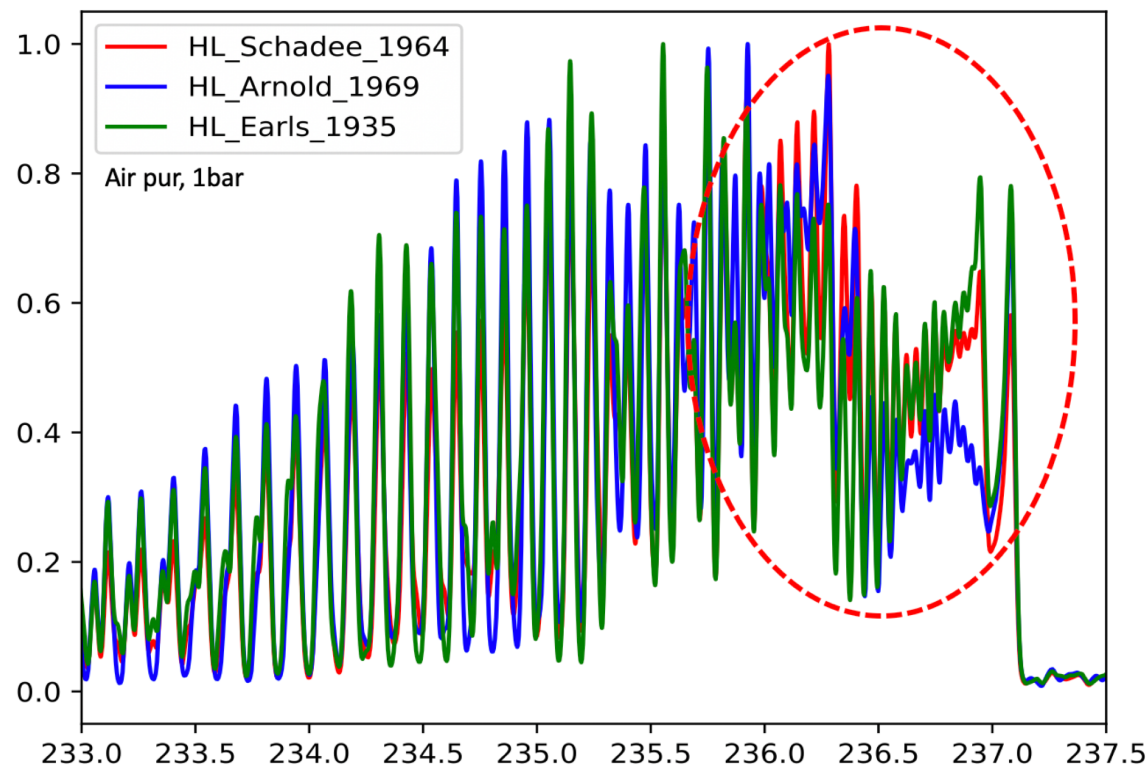
1.2. Les limites de la simulation des systèmes moléculaires

➔ « un spectre qui ne colle pas à l'expérimental, ne veut pas obligatoirement dire que la température de simulation est fausse! »

Sources d'erreurs possibles

- prise en compte des effets de structure fine ;
- cas de couplage de Hund considéré pour les états Π ;
- les nombres quantiques limites de vibration et de rotation v_{max} et J_{max} ;
- sources bibliographiques des probabilités de transition $A_{v'v''}$;
- **sources bibliographiques des facteurs de Hönl-London $S(J', J'')$;**
- prise en compte des branches satellites ;
- fonction mathématique utilisée pour le profil spectral de la fonction d'appareil ;
- composition, fonction de partition

Système NO γ ($A^2\Sigma^+ \rightarrow X^2\Pi$)
Facteurs de Hönl-London



- Modification de la structure rotationnelle au voisinage des deux têtes de bande ;
- Influence sur les intensités des raies rotationnelles de la bande (0-1).

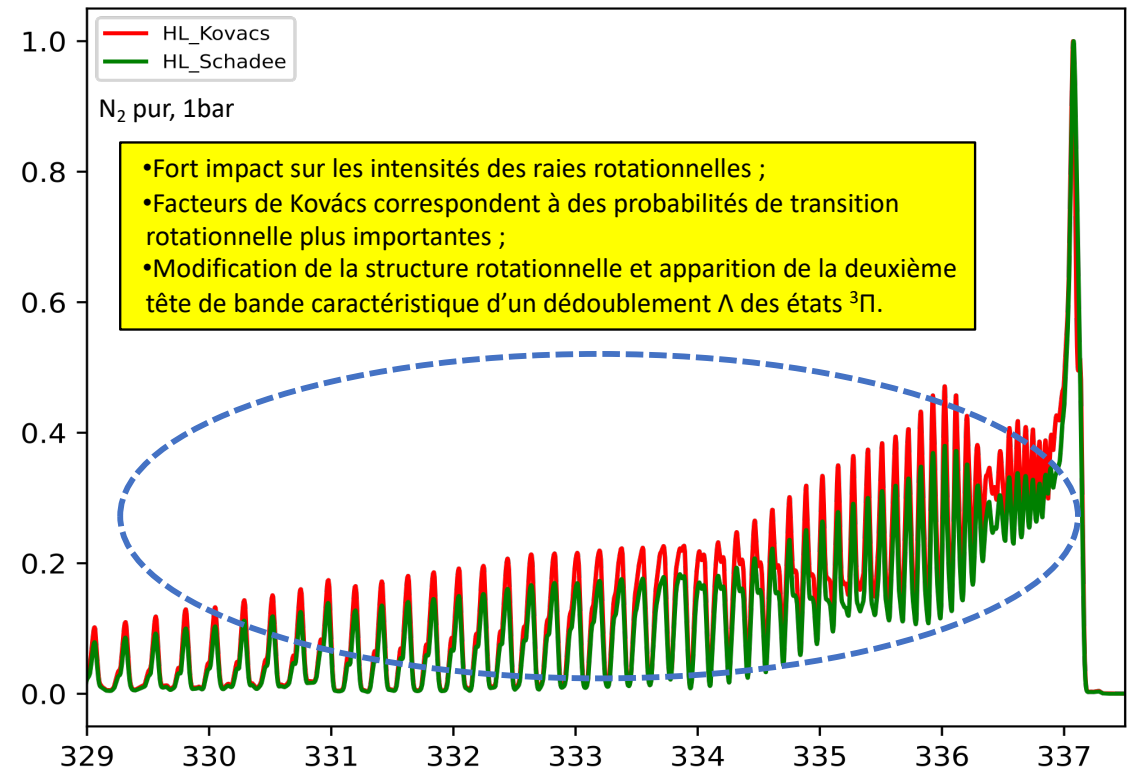
1.2. Les limites de la simulation des systèmes moléculaires

➔ « un spectre qui ne colle pas à l'expérimental, ne veut pas obligatoirement dire que la température de simulation est fausse! »

Sources d'erreurs possibles

- prise en compte des effets de structure fine ;
- cas de couplage de Hund considéré pour les états Π ;
- les nombres quantiques limites de vibration et de rotation v_{max} et J_{max} ;
- sources bibliographiques des probabilités de transition $A_{v'v''}$;
- **sources bibliographiques des facteurs de Hönl-London $S(J', J'')$;**
- prise en compte des branches satellites ;
- fonction mathématique utilisée pour le profil spectral de la fonction d'appareil ;
- composition, fonction de partition

Système N_2 Second Positif ($C^3\Pi_u \rightarrow B^3\Pi_g$) Facteurs de Hönl-London



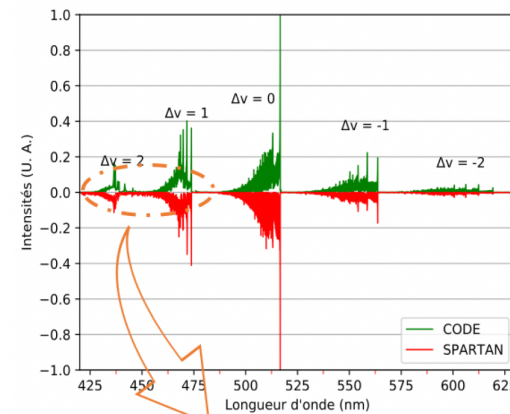
1.2. Les limites de la simulation des systèmes moléculaires

➔ « un spectre qui ne colle pas à l'expérimental, ne veut pas obligatoirement dire que la température de simulation est fausse! »

Sources d'erreurs possibles

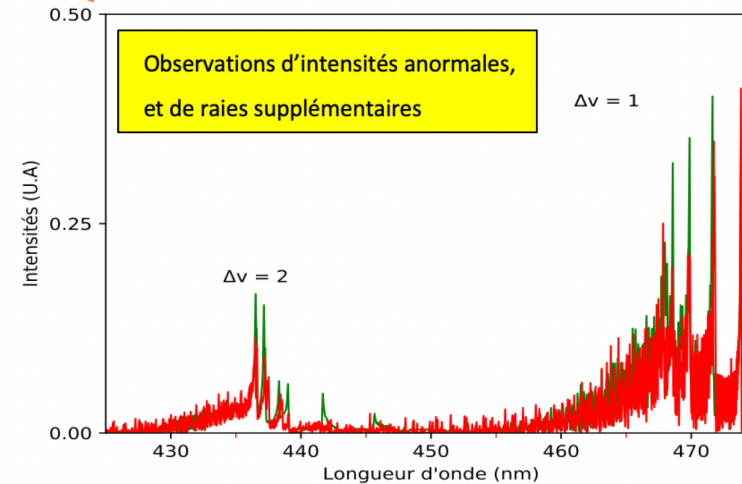
- prise en compte des effets de structure fine ;
- cas de couplage de Hund considéré pour les états Π ;
- les nombres quantiques limites de vibration et de rotation v_{max} et J_{max} ;
- sources bibliographiques des probabilités de transition $A_{v'v''}$;
- sources bibliographiques des facteurs de Hönl-London $S(J', J'')$;
- prise en compte des branches satellites ;
- fonction mathématique utilisée pour le profil spectral de la fonction d'appareil ;
- composition, fonction de partition

Système C_2 Swan ($d^3\Pi_g \rightarrow a^3\Pi_u$) Perturbations



CODE-1 : avec perturbations

CODE-2 : sans perturbation



1. La simulation de spectres radiatifs : les spectres moléculaires

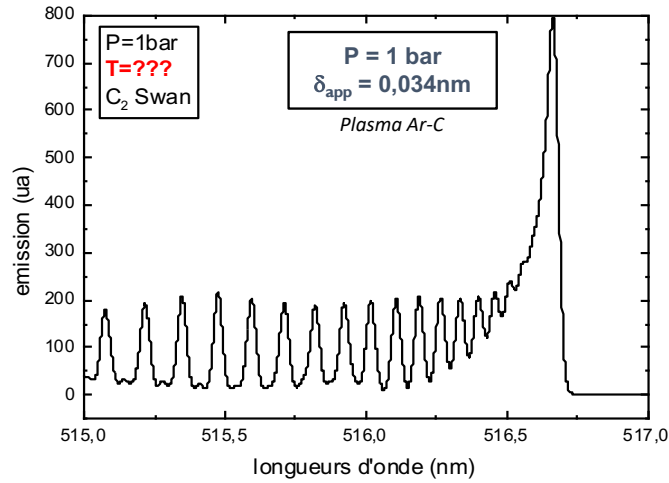
1.3. Utilisation de la simulation de spectres moléculaires

Spectre expérimental : Ar pur, + électrodes en graphite

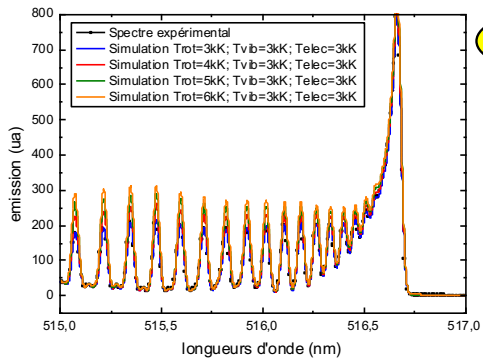
- Spectre enregistré

Questions :

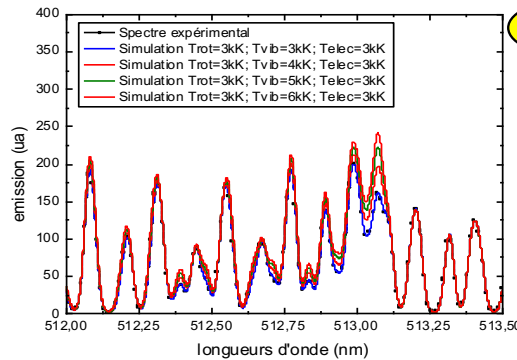
- 1/ Quelle est la/les T° ?
- 2/ Equilibre thermique ?



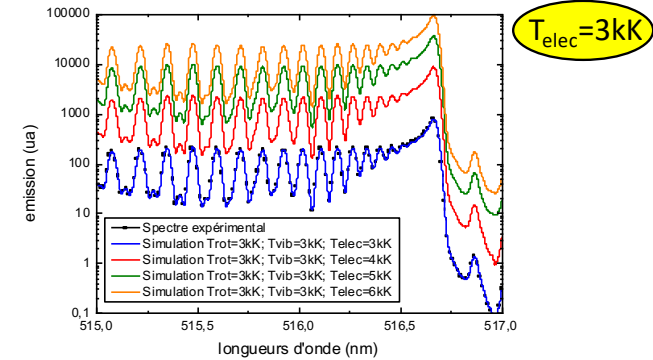
➤ Variation de T_{rot}



➤ Variation de T_{vib}



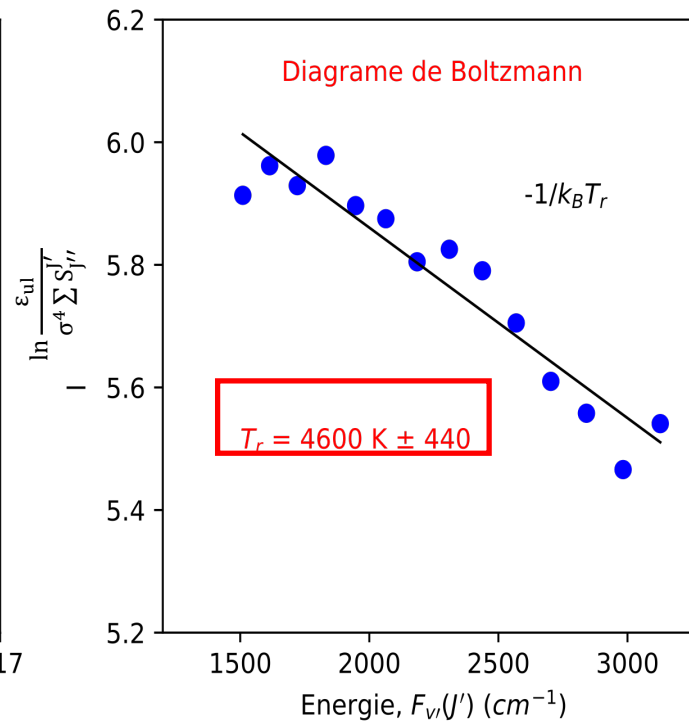
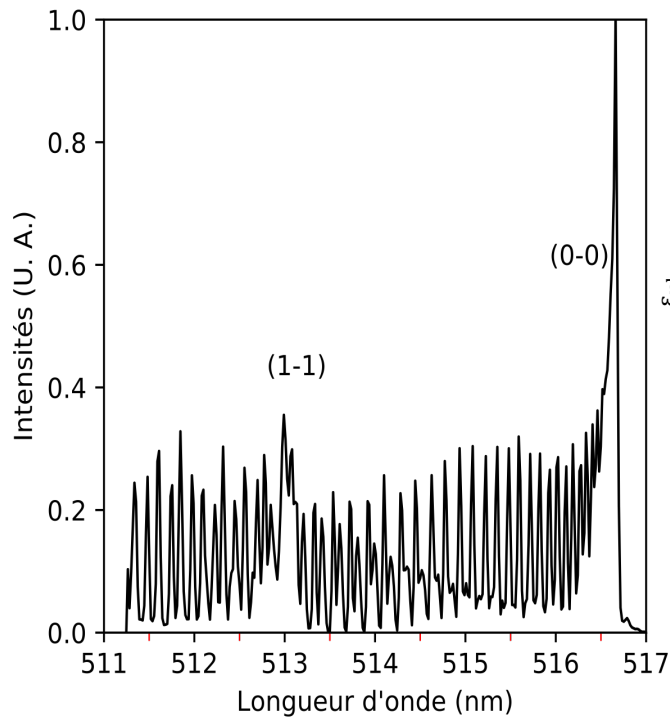
➤ Variation de T_{elec}



1. La simulation de spectres radiatifs : **les spectres moléculaires**

Spectre expérimental : N₂ pur, électrodes en graphite

Système C₂ Swan



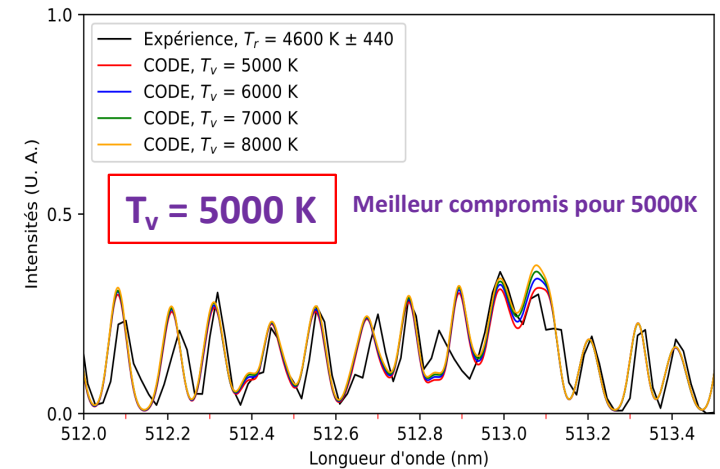
- ➡ T_{rot} obtenue par Diagramme de Boltzmann
- ➡ Impossible de remonter à la température vibrationnelle -> simulation



P = 0,2 bar
LMH = 0,042 nm



➤ **Variation de T_{vib}**



1. La simulation de spectres radiatifs : les spectres moléculaires

Etude d'une décharge arc électrique CO₂ à 3.5A (electrodes en Cu)

Simulation numérique arc électrique CO₂ +Cu

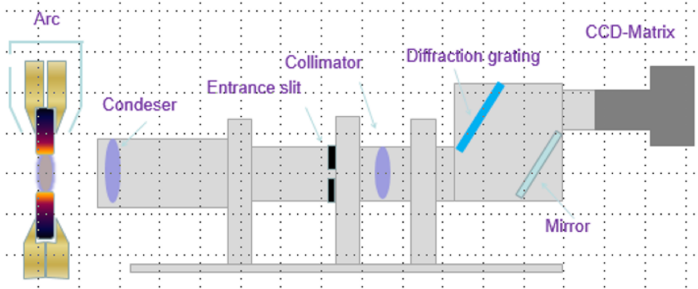


Figure 1: Optical scheme of the experimental setup

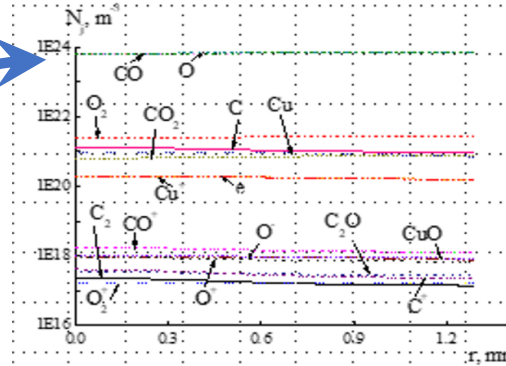


Figure 6: Plasma composition at arc current 3.5 A

Calcul de la composition ETL du plasma (selon T(r) et N_{Cu}(r)) → **99.5%CO₂-0.5%Cu**

Simulation du spectre

→ non cohérence

→ + air (0.05%)

→ non ETL

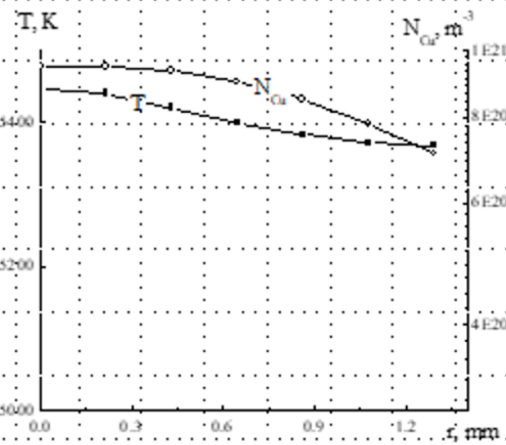


Figure 5: Radial profiles of plasma temperature ■ and copper atom concentration ○.

Boltzmann plot sur Cu
465.1 ; 510.5 ;
515.3 ; 521.8 ;
570.0 ; 578.2nm

N_{Cu} par spectroscopie absorption

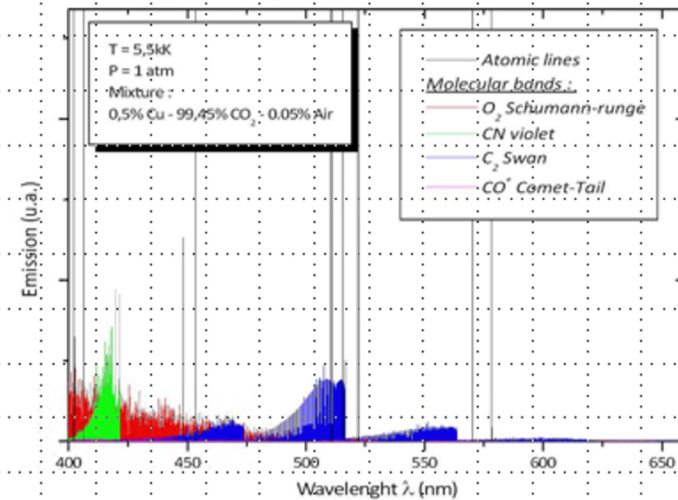


Figure 7: Theoretical emission spectrum of a CO₂-Cu(+air) plasma at 5.5kK, P=1atm.

2. La simulation de spectres radiatifs : **les spectres de raies atomiques**

- Comment simuler les raies atomiques ?
- Comment utiliser les spectres simulés ?

2.1. Comment simuler les raies atomiques

Emissivité d'une raie atomique

$$\epsilon = \frac{hc}{4\pi\lambda} N_u A_{ul} P_u$$

Probabilités de transition (NIST ...)

$$N_u = g_u \frac{N_t}{Q(T)} \exp\left(-\frac{E_u}{k_B T}\right)$$

Plasma thermique

Plasma quasi-thermique

Température T

Températures
 T_e, T_g, T_{ex}

Gaussienne

Lorentzienne

Fonction d'appareil δ_{app}

Elargissement Doppler (T_g)

Elargissement VdW (T_g)

Elargissement Stark (T_e)

Elargissement résonance (T_{ex})

Profil de Voigt
-> Spectre

2. La simulation de spectres radiatifs : **une aide pour sélectionner les raies atomiques**



* Je m'interroge sur l'utilisation d'une raie pour le diagnostic.
 Est-elle absorbée ? Un peu, beaucoup ? Comment corriger ?
 Est-elle symétrique ? -> inversion ABEL ?

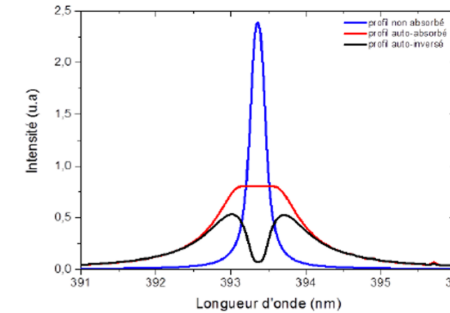


Fig. 2-3 : Profil d'émission avec et sans auto-absorption.

-> Simulation de la raie dans les conditions expérimentales

-> Utilisation du facteur de fuite (rapport entre l'émission de la raie sans absorption et l'émission de la raie avec absorption)

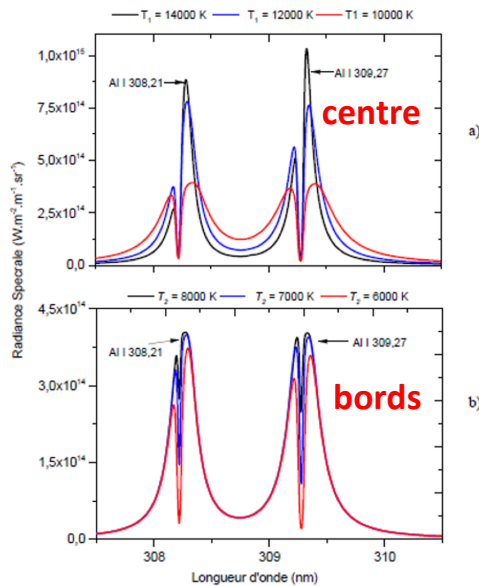
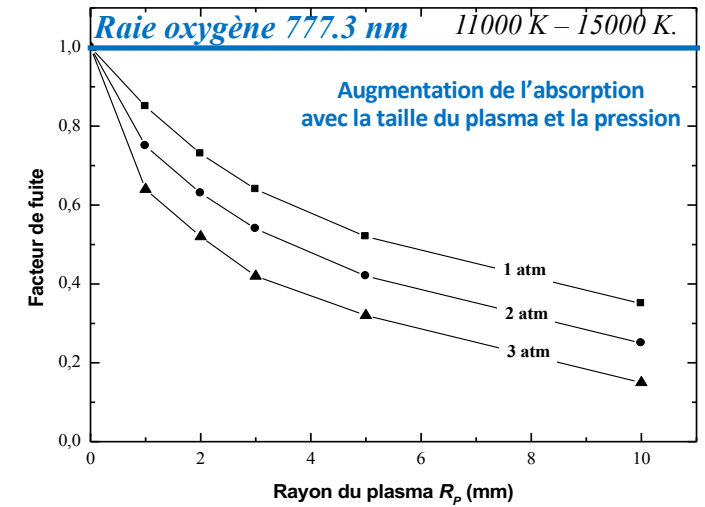
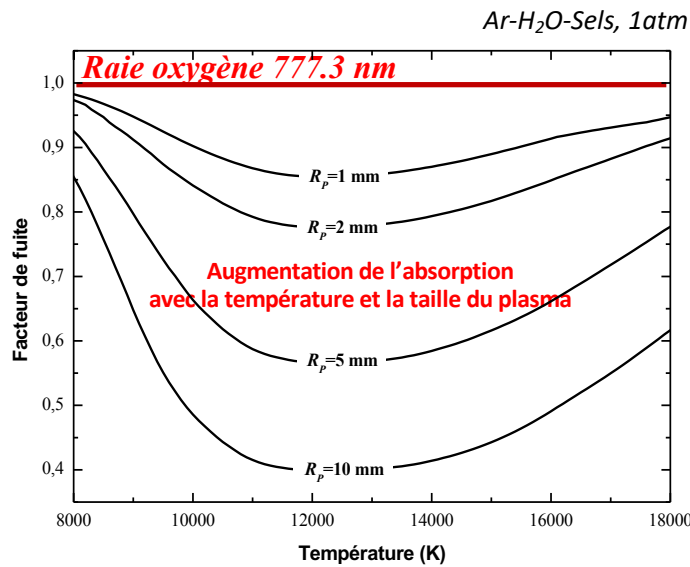


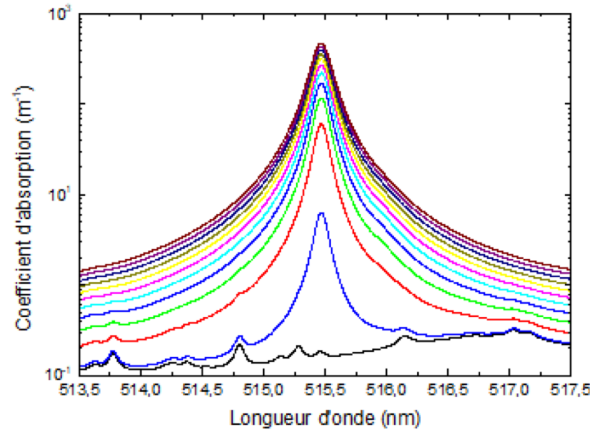
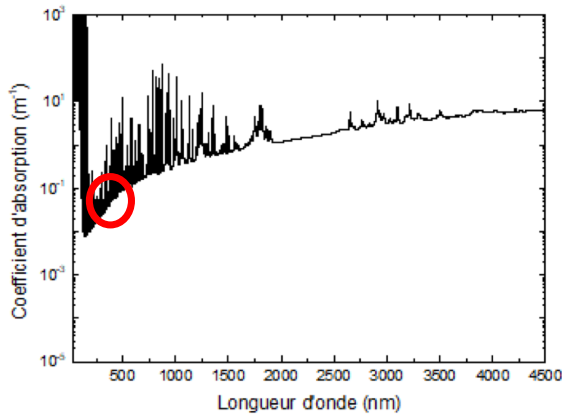
Fig. 2-7 : Impact de la température sur le profil spectral : a) impact de la température de la zone de cœur ; b) impact de la température de la zone périphérique. Les simulations sont faites pour les densités du cœur et de la périphérie qui valent respectivement $N_{e1} = 3 \cdot 10^{21} \text{ cm}^{-3}$ et $N_{e2} = 1 \cdot 10^{20} \text{ cm}^{-3}$ et pour $r_1 = r_2 = 0,5 \text{ mm}$.



2. La simulation de spectres radiatifs : les spectres de raies atomiques

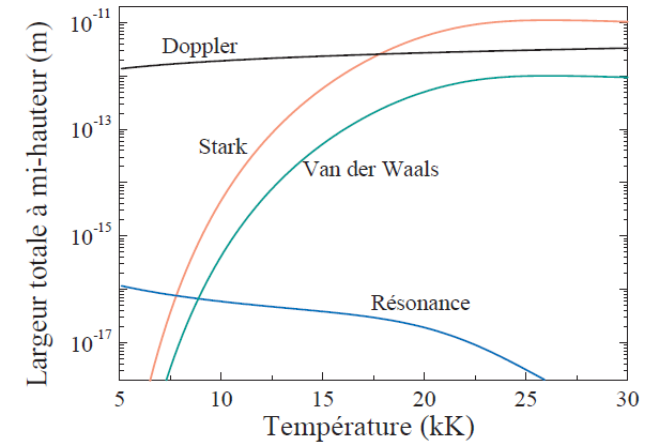


* Je m'interroge sur T_i , sur N_i



Largeur à mi-hauteur

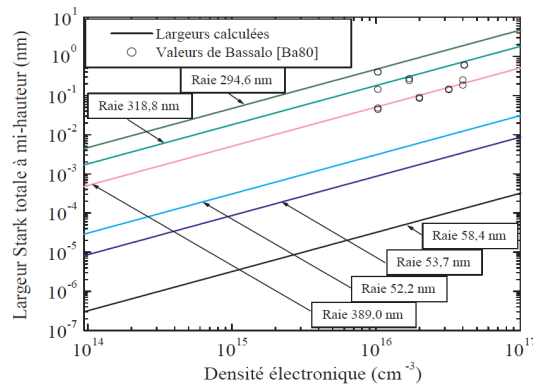
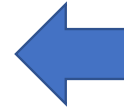
Questionnement sur l'élargissement



Aide à la détermination de T_e , T_g , N_e ...



Hypothèses (ETL, non-ETL, mince, épais...) + expressions théoriques



Ar-H₂-He,
1atm
(M-E Rouffet, PhD Thesis, 2008)

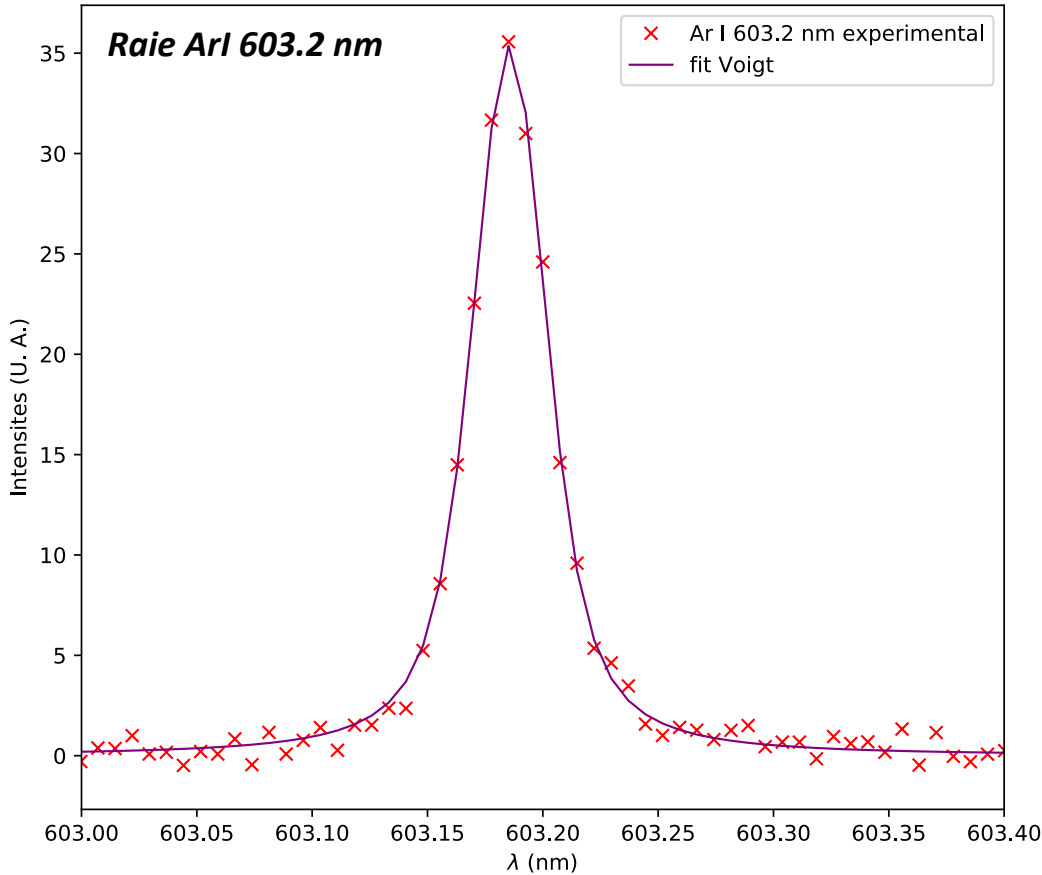


Les besoins : niveaux d'énergie, probabilités de transitions, dégénérescences, nombres quantiques

2. La simulation de spectres radiatifs : les spectres de raies atomiques



* Je m'interroge sur T_g



Ar-N₂, 1atm (A-M Kassir, PhD Thesis, 2020)

Expérimentalement

$$\delta_{app} = 0.029 \text{ nm}$$

$$\delta_{voigt} = 0.042 \text{ nm}$$

Simulation du profil gaussien

$$\delta_D = 7.16 \times 10^{-7} \lambda \sqrt{\frac{T_g}{M}} \text{ (nm)}$$

Obtenu par simulation

$$\text{Pour } T_g = [1000, 6000] \text{ K} \rightarrow \delta_D = [0.0022, 0.0053] \text{ nm}$$

$$\delta_D \ll \delta_{app} \rightarrow \delta_G = \delta_{app}$$

$$\text{déconvolution} \rightarrow \delta_L = 0.021 \text{ nm}$$

Simulation du profil lorentzien

$$\delta_L = \delta_{vdW} + \delta_S$$

Obtenu par simulation

$$\text{Pour } T_g = [1000, 6000] \text{ K} \rightarrow \delta_S \ll \delta_{vdW}$$

$$\text{Expression de Hindmarsh : } \delta_{vdW} = 8.16 \left(\frac{c_6}{h}\right)^{2/5} v^{3/5} n_{per} \frac{\lambda^2}{2\pi c}$$

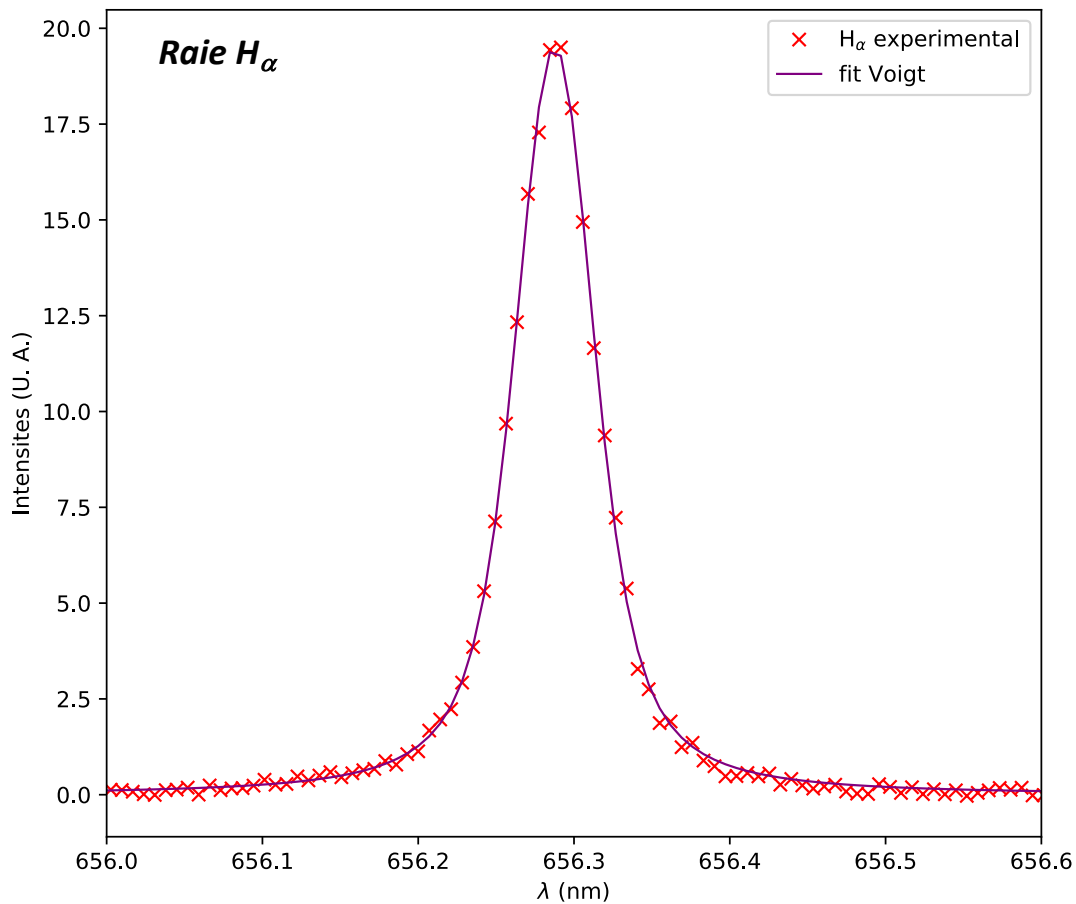
$$T_g = 2200 \pm 150 \text{ K}$$

$T_g^{3/10}$

T_g^{-1}

2. La simulation de spectres radiatifs : **les spectres de raies atomiques**

 * Je m'interroge sur N_e



Ar-N₂, 1atm (A-M Kassir, PhD Thesis, 2020)

Expérimentalement

$$\delta_{app} = 0.029 \text{ nm et } \delta_{voigt} = 0.059 \text{ nm}$$

Simulation du profil gaussien

$$\delta_D = 7.16 \times 10^{-7} \lambda \sqrt{\frac{T_g}{M}} \text{ (nm)} \quad \rightarrow \delta_D = 0.026 \text{ nm}$$

$$\delta_D \sim \delta_{app} \rightarrow \delta_G^2 = \delta_D^2 + \delta_{app}^2 \rightarrow \delta_G = 0.038 \text{ nm}$$

$$\text{déconvolution} \rightarrow \delta_L = 0.036 \text{ nm}$$

Simulation du profil lorentzien

$$\delta_L = \delta_{vdW} + \delta_S$$

$$\delta_{vdW} \ll \delta_S \quad \text{Obtenu par simulation}$$

$$\text{Expression de Konjevic : } n_e = 10^{17} \left(\frac{\delta_S(\text{nm})}{1.098} \right)^{1.47135}$$

$$n_e = 6.5 \pm 0.2 \times 10^{14} \text{ cm}^{-3}$$

↳ Simulation ETL + composition connue $\rightarrow T_e$

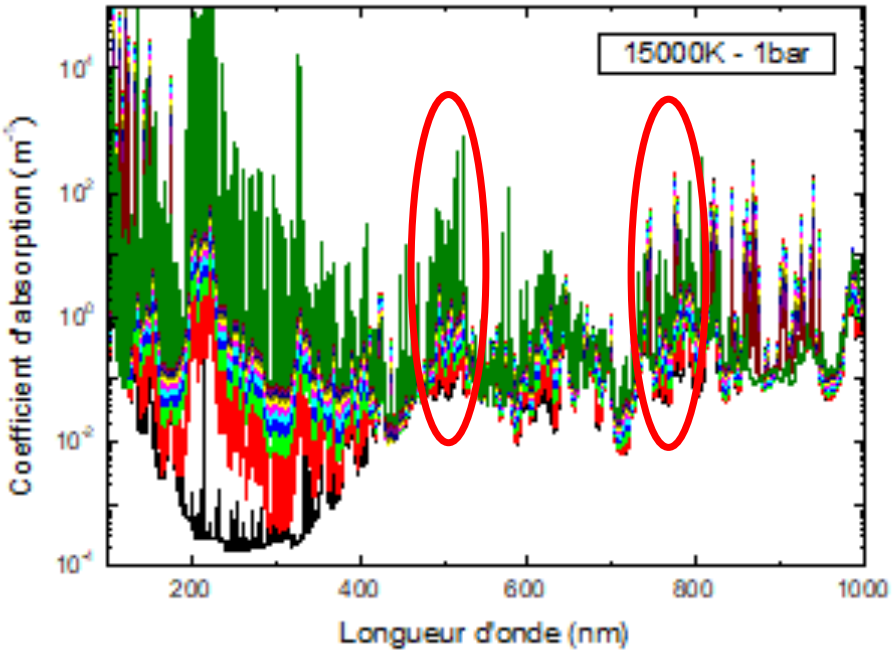
↳ Simulation ETL + T_e connue \rightarrow composition

2. La simulation de spectres radiatifs : les spectres de raies atomiques

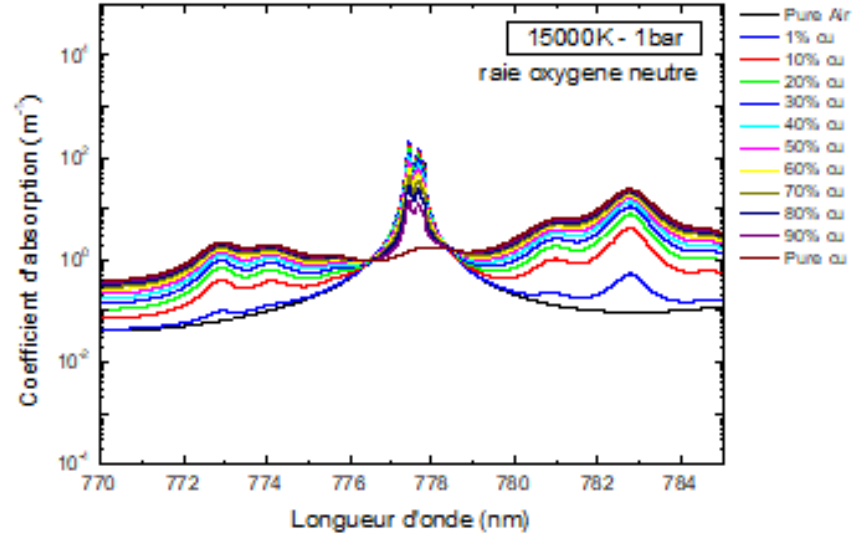
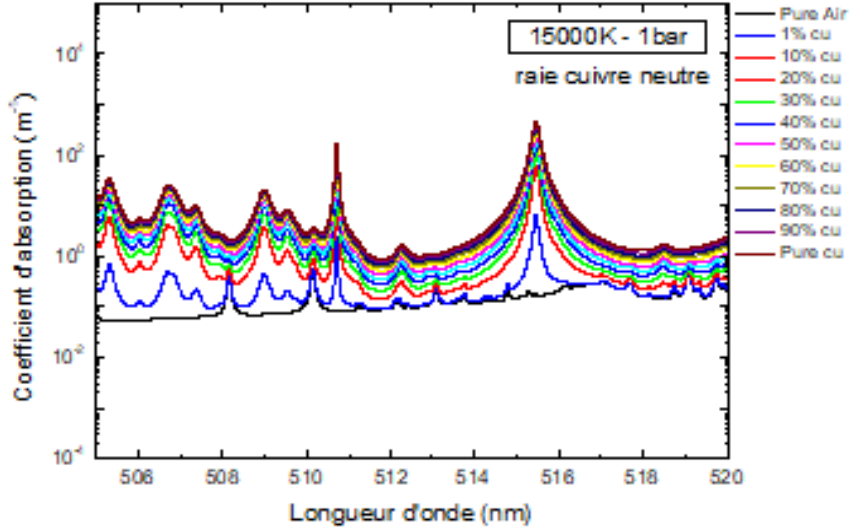


* Je m'interroge sur la composition

Mélange Air-Cu, 1atm, 15000K

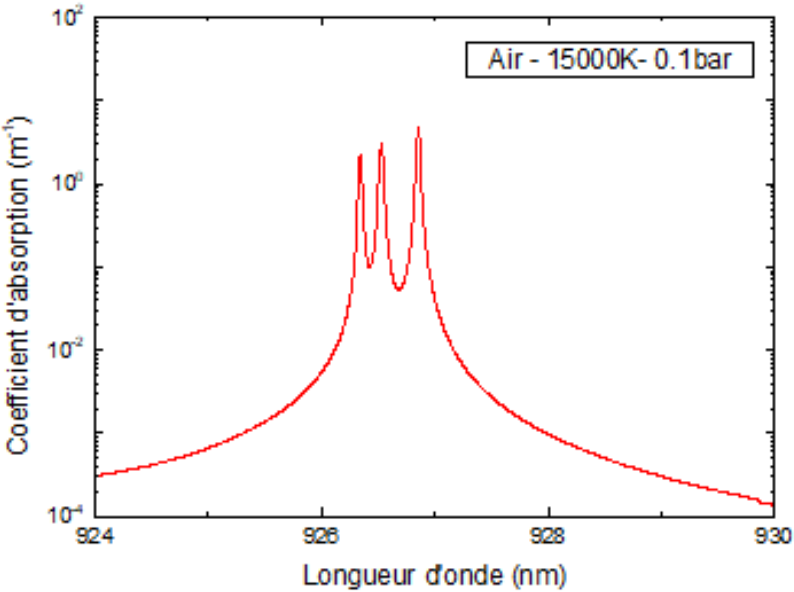


➡ Simulation d'un spectre en absorption
Si températures et pression connues



2. La simulation de spectres radiatifs : **une aide pour déterminer la pression à partir d'une raie atomique**

 * Je m'interroge sur la pression



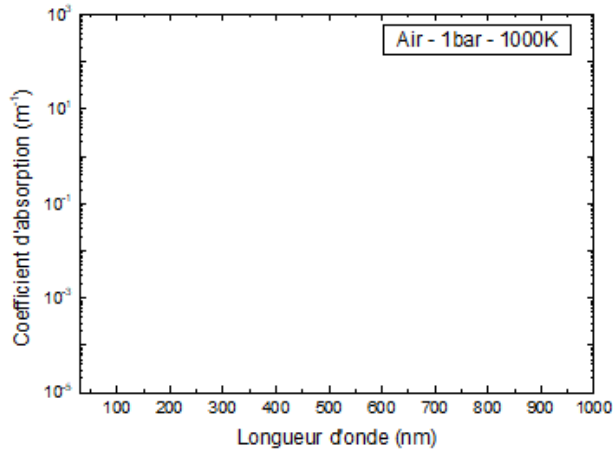
* Si températures et compositions connues

$$\kappa'_\sigma = n_b \left(\frac{\pi e^2}{m_e c} f_{bh} \right) \frac{P(\sigma - \sigma_0)}{100 c} \left(1 - e^{\frac{-100hc\sigma}{k_B T}} \right)$$

3. La simulation de spectres radiatifs : **le spectre continu**

- Comment simuler le fond continu ?
- Comment utiliser les spectres simulés ?

3. La simulation de spectres radiatifs : **le spectre continu**



Attachement radiatif (lié-libre)

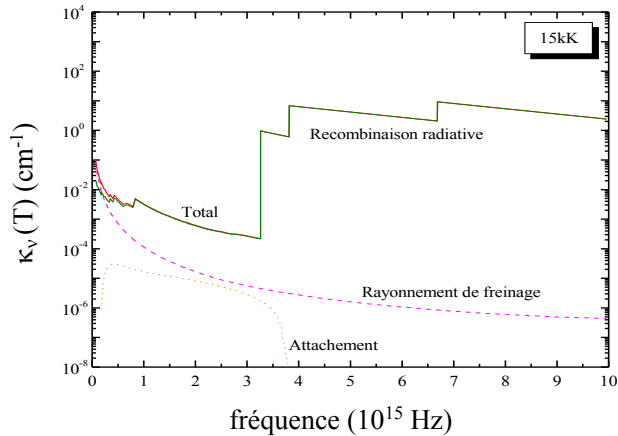
$$\epsilon_{\lambda}^{photo\ det}(T) \propto N_A^-(T) \times \sigma^{photo\ det}(\lambda)$$

Rayonnement freinage e-atome (libre-libre)

$$\epsilon_{\lambda}^{ea}(T) \propto N_a N_e T^{3/2} \times G(\lambda, T)$$

Rayonnement freinage e-ion (libre-libre)

$$\epsilon_{\lambda}^{ei}(T) \propto N_e N^{Z+} T^{-1/2} \times G^{Z+}(\lambda, T)$$



Recombinaison radiative (lié-libre)

$$\epsilon_{\lambda}^{rec} \propto N_e N^{Z+} T^{-1/2} \cdot \xi_Z(\lambda, T)$$

Les besoins : densités des espèces, fonctions de partition, sections efficaces (LxCat, Nist, Kurucz), niveaux d'énergie, dégénérescences...

3. La simulation de spectres radiatifs : le spectre continu

Etude d'un plasma [90]Ar-[10]H₂, 1atm

(Y. Cressault, PhD Thesis, 2001)

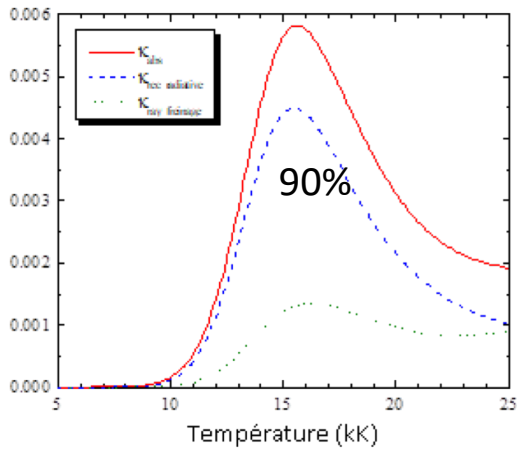


Fig. VI-7: Contributions des différents phénomènes au coefficient total K_{obs} au voisinage de 727.2nm pour un plasma 90%Ar-10%H₂.

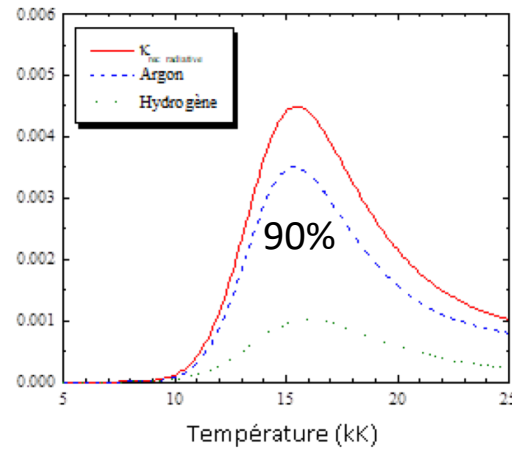
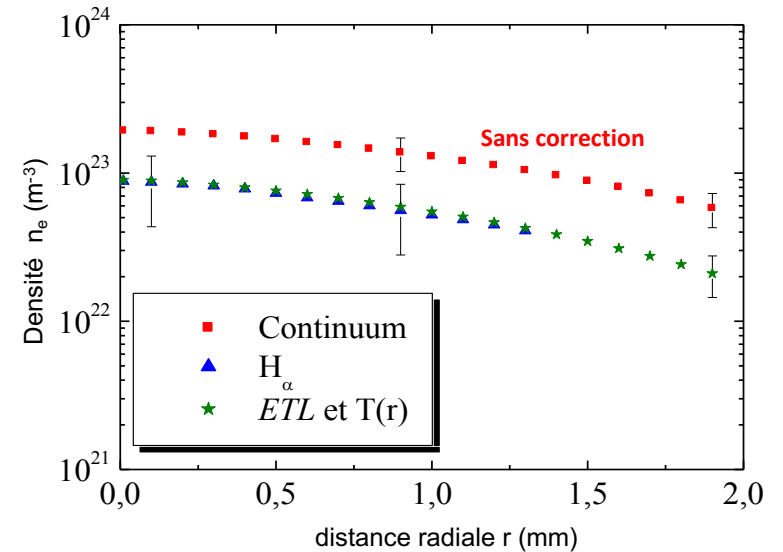
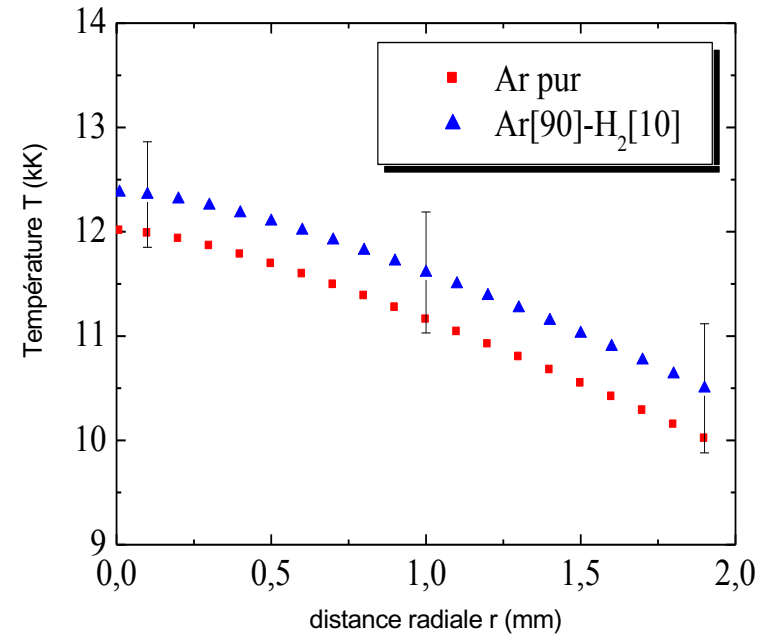


Fig. VI-8: Comparaison de la recombinaison radiative de l'argon et de l'hydrogène au voisinage de 727.2nm pour un plasma 90%Ar-10%H₂.

$$\mathcal{E}_\lambda^{rec} \propto N_e N^{Z^+} T^{-1/2} \cdot \xi_Z(\lambda, T)$$

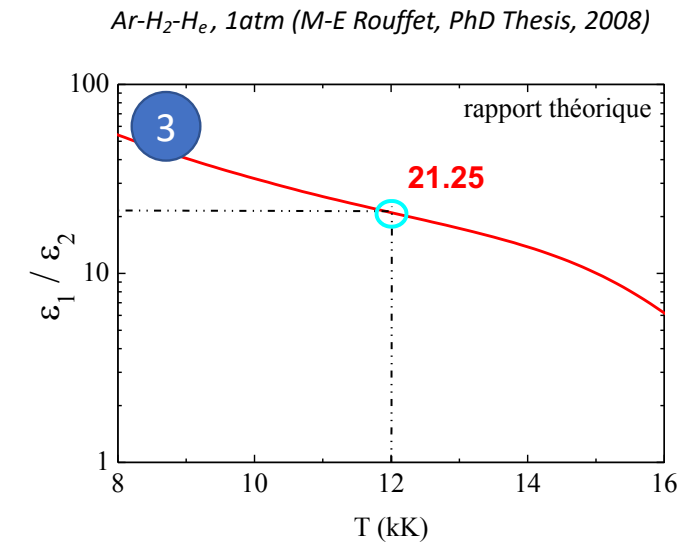
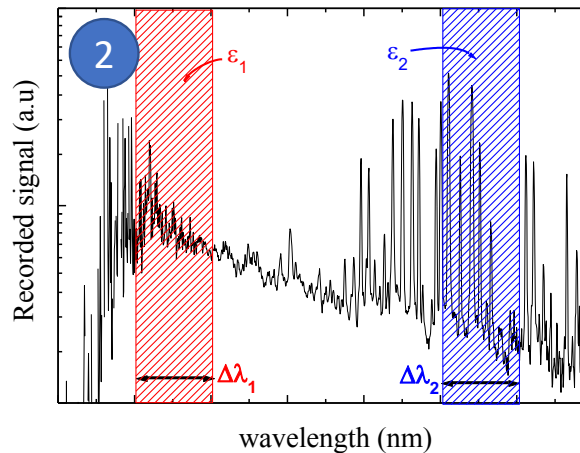
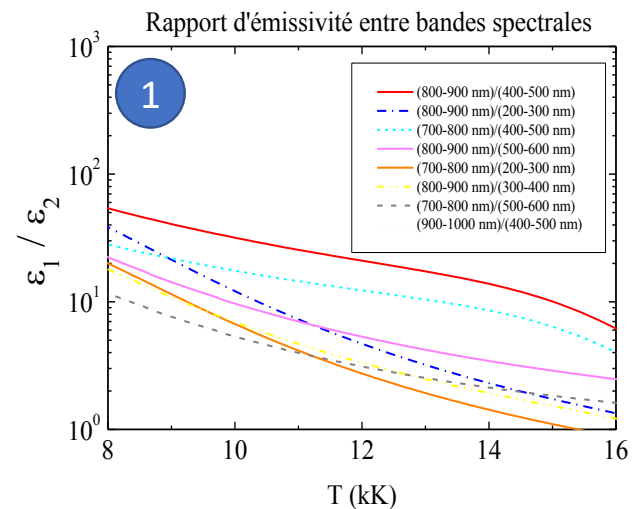
$N_e = N_{Ar^+}$ Rec_Rad=81% total mesuré



4. La simulation de spectres radiatifs : **le spectre total**

4. La simulation de spectres radiatifs : **une aide pour développer de nouvelles méthodes de diagnostics (ETL)**

- 1 Simulation du spectre sur plusieurs intervalles spectraux, plusieurs température.
Simulation de la variation des ratios : on veut la plus forte pente (pour avoir la plus faible erreur sur la température)
Aide au choix des intervalles spectraux à étudier expérimentalement, ou choix des filtres
- 2 Enregistrement des spectres expérimentaux sur les intervalles spectraux **conseillés**
Intégration et calcul du ratio expérimental
- 3 Report du ratio expérimental sur la courbe théorique la plus prometteuse
Détermination de la température



5. Conclusion : **et les logiciels?**

C'est rapide, c'est facile, c'est du clic bouton, mais parfois c'est....



5. Conclusion : **et les logiciels?**

SPECAIR : Laux et al, Air (Christophe O Laux, Radiation and nonequilibrium collisional radiative models. In: von Karman Institute Lecture Series 7 (2002)) + CO Laux et al., Optical diagnostics of atmospheric pressure air plasmas. In: Plasma Sources Science and Technology 12.2 (2003), p. 125)

LIFBASE : Luque et Crosley (Jorge Luque and David R Crosley. LIFBASE: Database and spectral simulation program (version 1.5), SRI international report MP 99.009 (1999))

SESAM : Lino da Silva et al (Mars) (Mario Lino da Silva and Michel Dudeck, A line-by-line spectroscopic code for the simulation of plasma radiation during planetary entries: the SESAM Code, 35th AIAA Plasmadynamics and Lasers Conference. 2004, p. 2157)

SPARTRAN : Lino da Silva et al (Mário Lino da Silva, Bruno Lopez, and Susana Espinho. SPARTAN 2.5 User's Manual, 2013)

MONSTER : Surzhikov (rentrées atmosphériques) (Sergey T Surzhikov, Computing system for solving radiative gas dynamic problems of entry and re-entry space vehicles. In Radiation of High Temperature Gases in Atmospheric Entry. Vol. 533. 2003, pp. 111–118.)

PASTIS : Rond (CO₂) (Catherine Rond, Etude expérimentale et numérique de la cinétique chimique et radiative hors d'équilibre à l'aval d'une onde de choc stationnaire. Application aux entrées atmosphériques de Mars et Titan. Thèse de doctorat. Université de Provence - Marseille, 2006.)

PARADE : Smith (N₂, NO, CN, CO₂) (AJ Smith., Plasma Radiation DatabasE (PARADE). Development history, status, current developments and future prospects. In: Radiation of High Temperature Gases in Atmospheric Entry. Vol. 533. 2003, pp. 75–83.)

MassiveOES : Vorac et al (Jan Voráč et al., Batch processing of overlapping molecular spectra as a tool for spatio-temporal diagnostics of power modulated microwave plasma jet, Plasma Sources Science and Technology 26.2 (2017), p. 025010.) + Jan Voráč et al., State-by-state emission spectra fitting for nonequilibrium plasmas: OH spectra of surface barrier discharge at argon/water interface? In: Journal of Physics D: Applied Physics 50.29 (2017), p. 294002)

RADIS : Pannier et Laux (CO₂, CO + HITRAN) (Erwan Pannier and Christophe O Laux, RADIS: A nonequilibrium line-by-line radiative code for CO₂ and HITRAN-like database species, Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer 222 (2019), pp. 12–25.)

DUO : Yurchenko et al (Sergei N Yurchenko et al., Duo: A general program for calculating spectra of diatomic molecules, Computer Physics Communications 202 (2016), pp. 262–275)

PGOPHER : Western (Colin M Western, PGOPHER: A program for simulating rotational, vibrational and electronic spectra, Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer 186 (2017), pp. 221–242)

5. Conclusion : **et les logiciels?**

- **Multitude de logiciels**
- **Systèmes moléculaires disponibles ?**
- **Quels paramètres/constantes spectro ?**
- **Quel couplage ?**
- **Quelle fonction d'appareil ?**
- **Quelles hypothèses ???**

LIFBASE

TABLEAU 1.1 Molécules et systèmes traités dans le logiciel LIFBASE

Molécule	Transition	Système	v_{max}
OH	A-X	Violet	8
OD	A-X		3
NO	A-X	γ	5
	B-X	β	7
	C-X	δ	1
	D-X	ϵ	5
CH	A-X		3
	B-X		1
	C-X		2
CN	B-X	Violet	8
CF	A-X		3
	B-X		5
SiH	A-X		2
N_2^+	B-X	Premier Négatif	6

SPECAIR

TABLEAU 1.2 Molécules et systèmes traités dans le logiciel SPECAIR

Molécule	Système	Version <i>demo</i>
OH	Violet	✓
	Meinel	×
C_2	Swan	×
CN	Violet	✓
	Rouge	×
CO	Infrarouge, Quatrième Positif	✓
N_2	Premier Positif, Second Positif	×
N_2^+	Meinel	×
	Premier Négatif	✓
NH	A-X	×
NO	Infrarouge, γ, β	✓
	$\delta, \epsilon, \beta', \gamma'$	×
O_2	Schumann-Runge	×
Raies atomiques	C, N, O	✓

SPARTRAN

TABLEAU 1.3 Molécules et systèmes traités dans le logiciel SPARTAN

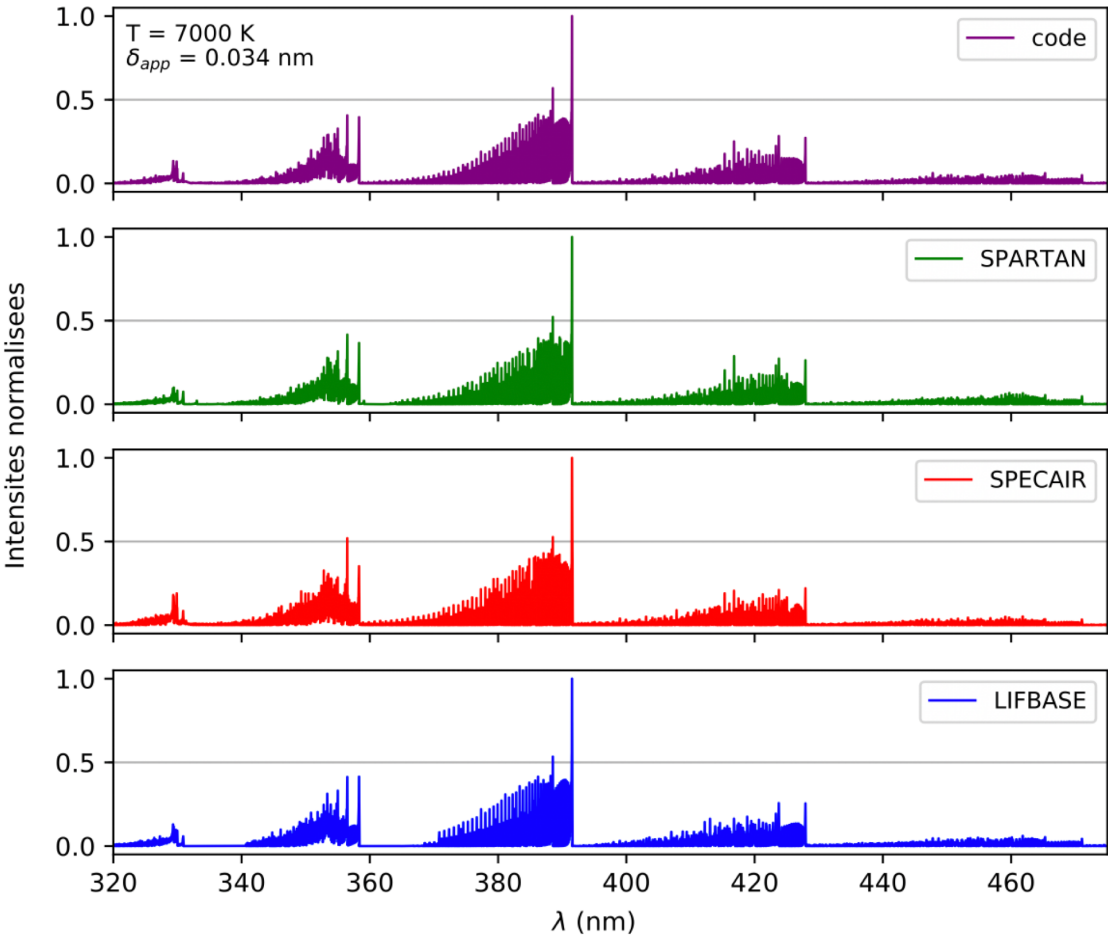
Molécule	Système
CO_2	Infrarouge
H_2	Lyman, Werner
C_2	Swan, Philips, Mulliken,
	Deslandres-D'Azambuja, Fox-Herzberg,
	Ballik-Ramsay
CN	Violet, Rouge
CO	Infrarouge, Quatrième Positif,
	Angstrom, Troisième Positif,
	Triplet, Asundi
CO^+	B-A, B-X, Comet Tail
N_2	Premier Positif, Second Positif
N_2^+	Premier Négatif
NO	$\gamma, \beta, \delta, \epsilon, \beta', \gamma'$
O_2	Schumann-Runge,
	Schumann-Runge Continuum
Raies atomiques	H, C, C^+ , N, N^+ , O, O^+ , Ar, Ar^+ , Hg, Xe, Xe^+
Photo-ionisation	H, C, C^+ , N, N^+ , O, O^+ , Ar, Ar^+ $CO_2, C_2, N_2, O_2, CO, CN, NO$
Photo-détachement	C^-, N^-, O^-
Bremsstrahlung	N, O, N_2, O_2

MASSIVE OES

TABLEAU 1.4 Systèmes traités dans le logiciel *massiveOES*

Molécule	Transition	Système	Base de données	Réfs.
N_2^+	B-X	Premier Négatif	LIFBASE	[LC99a]
OH	A-X	Violet	LIFBASE	[LC99a]
N_2	C-B	Second Positif	→	[LK92], [FS98], [Nas+04]
NH	A-X		PGOPHER	[Len73], [SPS94], [RB10], [Wes17]
NO	B-X	β	LIFBASE	[LC99a]

5. Conclusion : **et les logiciels?**



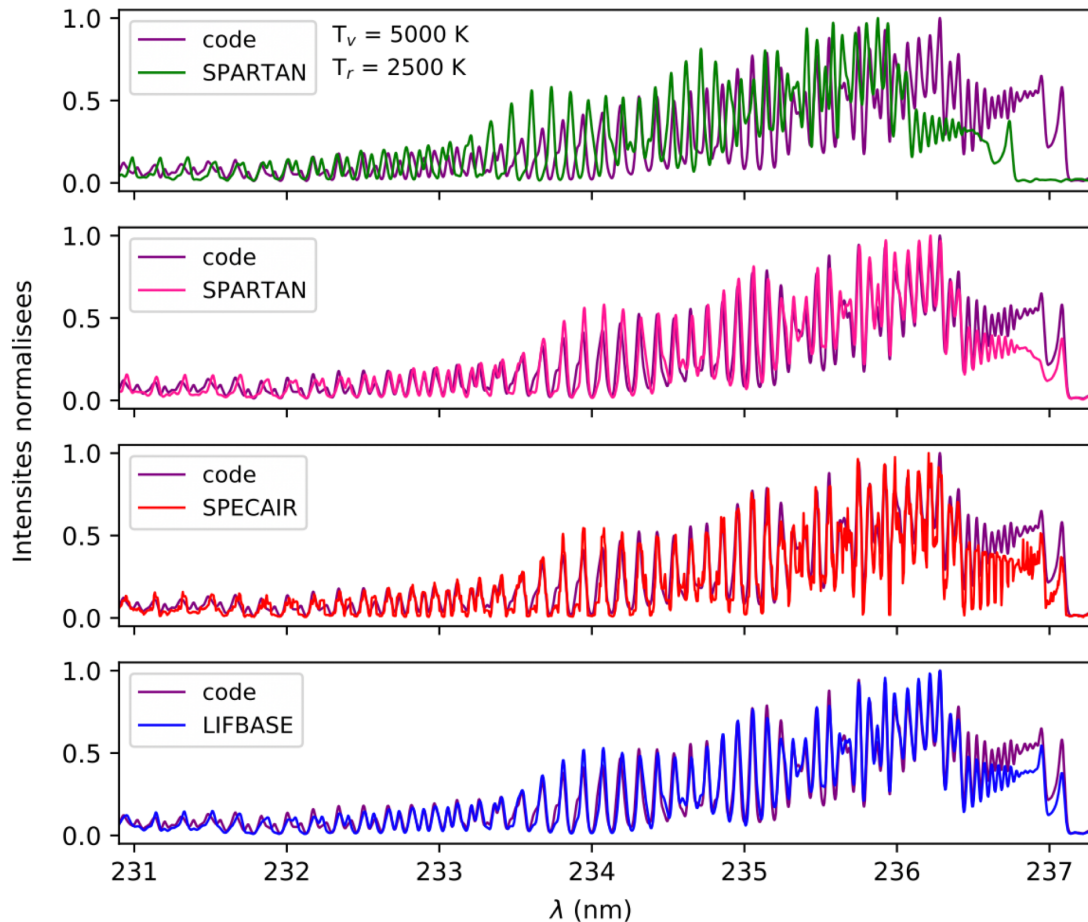
Ar-N₂, 1atm (A-M Kassir, PhD Thesis, 2020)

Système Premier Négatif de l'ion moléculaire N₂⁺
Cas d'un plasma thermique



Quand ca marche plutôt bien.

5. Conclusion : **et les logiciels?**



Ar-N₂, 1atm (A-M Kassir, PhD Thesis, 2020)











Système γ du radical NO
Cas d'un plasma thermique



Quand ca marche pas !!!

- Décalage en longueur d'onde de 0.235 nm ;
- Pas de dédoublement Λ dans l'état $^2\Pi$.
- Cas de couplage de Hund considéré pour le niveau fondamental ;
- Facteurs de Hönl-London différents.

5. Conclusion : **et les logiciels?**

	LIFBASE	SPECAIR	SPARTAN	Concordance
NO γ (A—X)	included	included	Included	
NO β (B—X)	included	included	Included	
NO δ (C—X)	included	included	Included	
NO ϵ (D—X)	included	included	Included	
NO β' (B'—X)	-	included	Included	
NO γ' (E—X)	-	included	Included	
NO 11000 Å (D—A)	-	included	-	-
NO Infrarouge (X—X)	-	included	-	-
N_2^+ Meinel (A—X)	-	included	-	-
N_2^+ Premier Négatif (B—X)	included	included	Included	
N_2 Premier Positif (B—A)	-	included	Included	
N_2 Second Positif (C—B)	-	included	Included	
O_2 Schumann-Runge (B—X)	-	included	Included	



Laplace
Etude des molécules diatomiques
C-H-O-N

- Comparaisons des logiciels
- Etudes expérimentales

Ar-N₂, 1atm (A-M Kassir, PhD Thesis, 2020)

5. Conclusion : **et les logiciels?**

Massive OES

massiveOES :

- Logiciel développé par Voráč *et al.* dédié à la caractérisation expérimentale ;
- Libre accès sur Bitbucket ;
- Détermination des températures T_{rot} et T_{vib} par la méthode de superposition de spectres théoriques et expérimentaux.

Base de données	
N_2^+ B—X (Premier Négatif)	LIFBASE
OH A—X (Violet)	LIFBASE
N_2 C—B (Second Positif)	Laux <i>et al.</i> , Faure <i>et al.</i> , Nassar <i>et al.</i>
NH A—X	PGOPHER
NO B—X (β)	LIFBASE

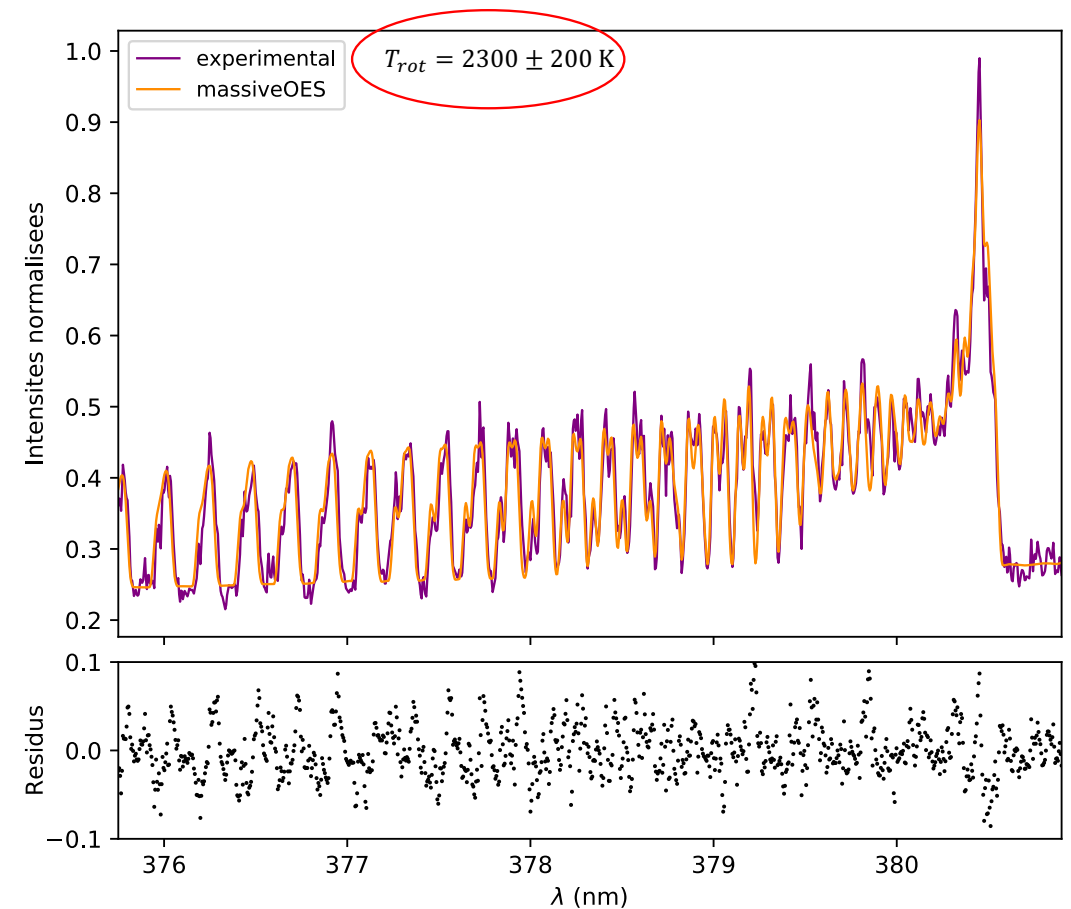
5. Conclusion : **et les logiciels?**

Massive OES

Détermination de la température de rotation T_{rot} – Second Positif

Méthode de superposition avec *massiveOES* :

1. générer le spectre théorique
2. fixer la ligne de base à celle de l'expérience
3. demi-largeur à mi-hauteur de la fonction d'appareil
4. calculer la différence entre les deux spectres
5. *fit* de la bande (0-2) par minimisation des moindres carrés en fonction de T_{rot}



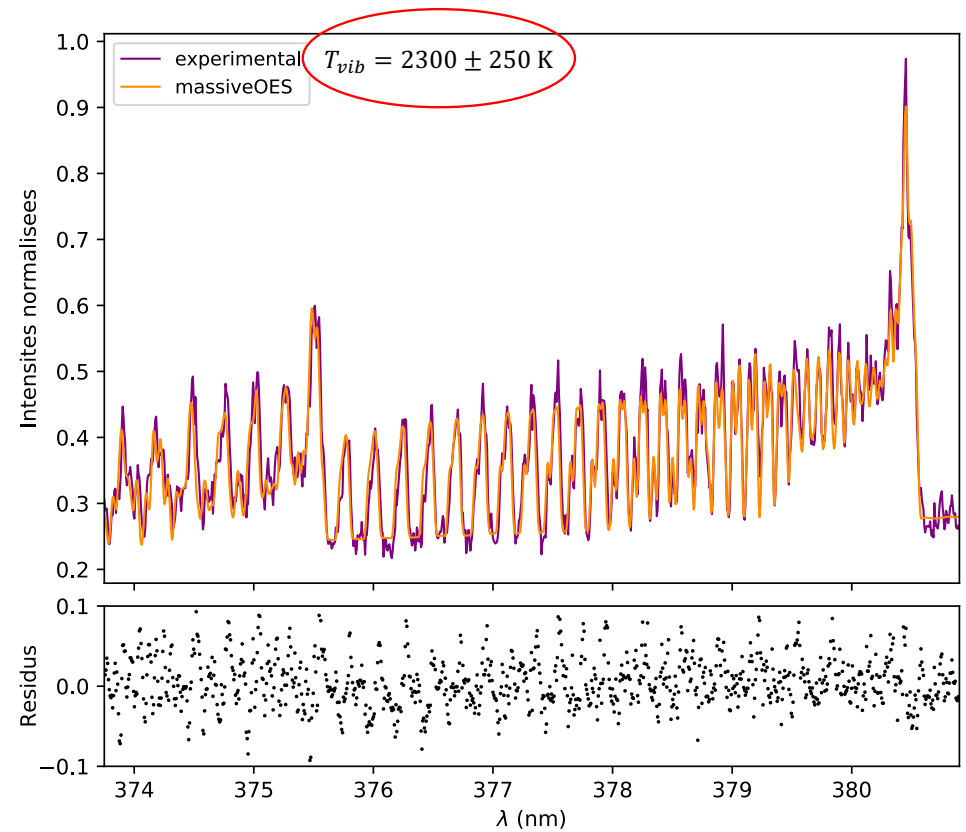
5. Conclusion : **et les logiciels?**

Massive OES

Détermination de la température de rotation T_{vib} – Second Positif

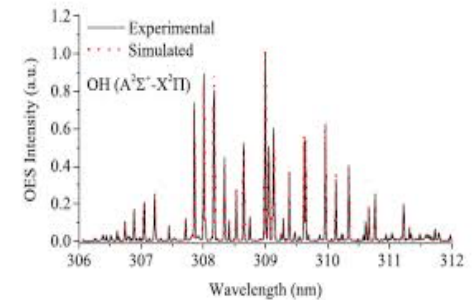
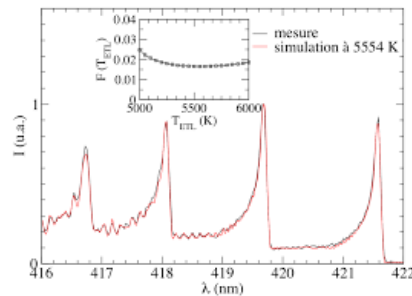
Méthode de superposition avec *massiveOES* :

6. fixer T_{rot} à la valeur trouvée à l'étape 5
7. recalculer la différence entre les deux spectres
8. minimiser la différence en fonction de T_{vib}



Simulation de spectres radiatifs : une aide précieuse pour le diagnostic des plasmas

Yann Cressault, laboratoire LAPLACE, Toulouse, équipe ScIPRA
cressault@laplace.univ-tlse.fr



5. Conclusion : **et les logiciels?**

SPARTAN	SPECAR	LIFBASE
<ul style="list-style-type: none"> • Spectres d'émission et d'absorption • Plasmas d'air et plasmas carbonés • Diagnostics ; rentrées atmosphériques terrestres • Fonction d'appareil de profil <u>gaussien</u> • Distribution de Boltzmann • Prise en compte des perturbations 	<ul style="list-style-type: none"> • Spectres d'émission et d'absorption • Plasmas d'air et plasmas carbonés • Diagnostics ; rentrées atmosphériques terrestres ; propulseurs à effet Hall • Fonction d'appareil de profil <u>trapèze</u> • Distribution de Boltzmann • Prise en compte des perturbations 	<ul style="list-style-type: none"> • Spectres d'émission et d'absorption • <u>Quelques molécules importantes dans la plasma-chimie</u> • Diagnostics • Fonction d'appareil de profil <u>gaussien</u> • Distribution de Boltzmann • <u>Perturbations non modélisées</u>

Ar-N₂, 1atm (A-M Kassir, PhD Thesis, 2020)