

Etude par dynamique moléculaire de la réactivité des espèces neutres principales d'un plasma Ar/CH₄

G. Otakandza Kandjani¹, P. Brault¹, M. Mikikian¹, G. Tétard², A. Michau², K. Hassouni², J. Mougenot²

¹ GREMI UMR7344 CNRS/Université d'Orléans, 45067 Orléans, France

² LSPM UPR3407 CNRS/Université Sorbonne Paris Nord, 93430 Villetaneuse, France

mél: glenn.otakandza@etu.univ-orleans.fr

Les plasmas hydrocarbonés sont des gaz faiblement ionisés contenant des électrons, des espèces moléculaires neutres et chargées, de grands clusters et, éventuellement, des particules solides. Ils constituent aujourd'hui un outil majeur pour l'élaboration de matériaux et de nanostructures avancés en carbone et plusieurs applications clés en électronique. La chimie des hydrocarbures conduisant à de grandes espèces moléculaires est également d'un grand intérêt en astrophysique, dans les atmosphères planétaires. Malgré leur grand intérêt, ces plasmas restent très mal compris car ils sont régis par des phénomènes de nature très diverse et se déroulant à des échelles allant de la molécule à la taille du plasma, c'est-à-dire des processus de collision en phase gazeuse, par exemple des dissociations, excitations et ionisations d'électrons-atomes/molécules, des collisions d'ions (radicaux), des processus d'interaction plasma-surface, la croissance et la dynamique des nanoparticules (NP), des phénomènes de transport, des effets de plasma collectif et poussiéreux, etc. Ainsi, les plasmas hydrocarbonés sont souvent utilisés comme des boîtes noires, limitant leur extraordinaire potentiel qui ne peut être exploité sans une réelle percée dans la compréhension des processus fondamentaux qui régissent leur physique et leur chimie.

Parmi les processus fondamentaux d'intérêt, la nucléation et la croissance de nanoparticules est d'une importance capitale. En raison de sa nature moléculaire, les simulations de dynamique moléculaire réactive sont très pertinentes pour décrire de tels phénomènes [1]. De plus, des champs de force performants existent pour décrire les interactions entre hydrocarbures [2]. Parmi eux, le potentiel REBO (Reactive Empirical Bond Order) est bien adapté à la description des interactions des radicaux d'hydrocarbures avec les surfaces. La plupart de leurs caractéristiques sont cohérentes avec les calculs DFT [2].

La réactivité des espèces neutres du plasma, dont la composition a été déterminée par un modèle 1D, est étudiée en déterminant la distribution des clusters de carbone, leur ordre de liaisons et l'évolution des molécules initiales en fonction du temps.

Ce travail a été soutenu par l'Agence Nationale des Bourses du Gabon (ANBG) et l'Agence Nationale de la Recherche Française (ANR) : projet MONA (ANR-18-CE30-0016).

Références

[1] E. Neyts, P. Brault, *Plasma Processes and Polymers* 14 (2017) 1600145

[2] M. Zarshenas et al, *J. Phys Chem. C* 122 (2018) 15252-15263

Statut : doc2