

Avis de soutenance

Madame Cyrine Merhaben

Soutiendra publiquement ses travaux de thèse intitulés

Nonequilibrium kinetics and radiation of high-temperature N₂/CH₄ plasmas

Cinétique et rayonnement des plasmas N₂/CH₄ hors-équilibre à haute température

Thèse dirigée par **Sean McGuire** et **Christophe LAUX**.

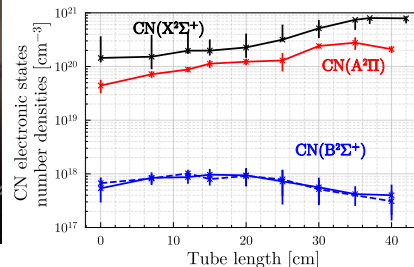
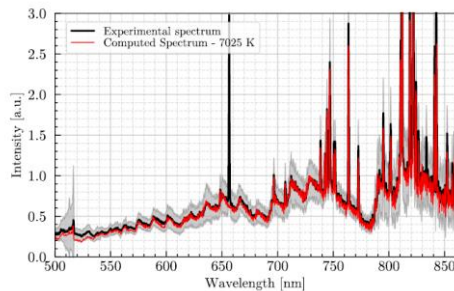
Le **mardi 14 avril 2026** à 14h00 en **Amphithéâtre I**

A CentraleSupélec, bâtiment Eiffel

3, rue Joliot-Curie 91190 Gif-sur-Yvette

Retransmission via le lien suivant :

[Soutenance Cyrine MERHABEN | Réunion-Joindre | Microsoft Teams](#)



Composition du jury :

Viviana Lago	<i>Ingénieure de recherche, Laboratoire ICARE– CNRS Orléans</i>	Rapporteuse
Thierry Magin	<i>Professeur, VKI</i>	Rapporteur
Brett Cruden	<i>Ingénieur de recherche, NASA Ames Research Center</i>	Examineur
Arnaud Bultel	<i>Professeur, Université de Rouen Normandie</i>	Examineur
Khaled Hassouni	<i>Professeur, Université Sorbonne Paris Nord</i>	Examineur
Annarita Laricchiuta	<i>Ingénieure de recherche, ISTP (CNR Bari)</i>	Invitée
Aaron Brandis	<i>Ingénieur de recherche, NASA Ames Research Center</i>	Invité
Philippe Tran	<i>Ingénieur Expert, ArianeGroup</i>	Invité

Titre : Cinétique et rayonnement des plasmas N_2/CH_4 hors-équilibre à haute température

Mots clés : plasma de N_2/CH_4 , molécule CN, modèle collisionnel-radiatif, recombinaison, dissociation, rentrée atmosphérique

Résumé : La prédiction des transferts d'énergie entre un plasma de N_2/CH_4 et son environnement, ainsi que la caractérisation précise de son état thermo-chimique, constituent un enjeu majeur dans de nombreuses applications, telles que la conversion du méthane, le traitement de surface ou encore l'étude de la formation des tholins. Ces problématiques reposent notamment sur une description détaillée des mécanismes de dissociation et de recombinaison au sein des plasmas de N_2/CH_4 . Le présent travail se concentre plus particulièrement sur le cas de la rentrée atmosphérique sur Titan. Dans ce contexte, le dimensionnement du bouclier thermique de la sonde requiert une estimation fiable des flux convectifs et radiatifs générés par le plasma. Toutefois, l'évaluation du flux radiatif demeure aujourd'hui entachée d'incertitudes significatives, que cette étude vise à analyser et à réduire.

Cette étude vise donc à développer et valider un modèle collisionnel-radiatif (CR) de plasmas N_2/CH_4 à haute température, dans les cas d'un écoulement dissociatif et d'un écoulement en recombinaison.

Le modèle CR développé inclut toutes les espèces globales pertinentes ainsi que les états électroniques $CN(X^2\Sigma^+)$, $CN(A^2\Pi)$, $CN(B^2\Sigma^+)$, $CN(a^4\Pi)$ et $CN(D^2\Pi)$. La prédiction des densités de ces états électroniques est confrontée à deux jeux de données expérimentales complémentaires : (1) des mesures réalisées dans un plasma N_2/CH_4 en recombinaison, et (2) des mesures effectuées par Fagnani *et al.* dans un plasma dissociatif obtenu dans le Low-Density Shock Tube (LDST) à NASA Ames Research Center. Afin de comparer le modèle CR et les mesures dans le tube à choc, un solveur unidimensionnel de type space marching est développé et couplé au modèle CR.

Dans l'expérience de recombinaison, un plasma de $N_2/CH_4/Ar$ est généré avec une torche radio-fréquence inductive de 50 kW. Le plasma est ensuite injecté dans un tube refroidi à l'eau, durant la traversée duquel il se recombine. L'évolution de la température et composition chimique du plasma lors de son refroidissement est étudiée en faisant varier la longueur du tube. Des mesures de spectroscopie d'émission et d'absorption spatialement résolues des systèmes rouge ($A^2\Pi - X^2\Sigma^+$) et violet ($B^2\Sigma^+ - X^2\Sigma^+$) de CN sont réalisées afin de déterminer les températures rovibrationnelles et les densités des états électroniques $CN(X^2\Sigma^+)$, $CN(A^2\Pi)$ et $CN(B^2\Sigma^+)$ lors de l'évolution du plasma dans le tube.

La comparaison des prédictions du modèle avec les mesures obtenues dans le LDST révèle des écarts allant jusqu'à un facteur deux pour les émissions de $CN(A^2\Pi)$ et $CN(B^2\Sigma^+)$. Afin de comprendre et de corriger ces écarts, une analyse cinétique et des études de sensibilité sont menées. Les réactions identifiées par cette analyse sont utilisées dans une analyse quasi-Monte-Carlo (QMC) afin d'optimiser les taux de réactions pour améliorer l'accord avec les densités mesurées de $CN(A^2\Pi)$ et $CN(B^2\Sigma^+)$ dans le tube à choc. En ajustant les coefficients dans leurs limites d'incertitude – notamment en réduisant le taux d'excitation entre $CN(A^2\Pi)$ et $CN(B^2\Sigma^+)$ de plus d'un facteur 30 – le modèle reproduit les mesures du tube à choc pour $CN(A^2\Pi)$ et $CN(B^2\Sigma^+)$ avec une précision d'environ 20 %.

Ensuite, les prédictions du modèle CR sont comparées aux mesures obtenues dans le tube de recombinaison. En suivant la même démarche, une analyse QMC montre que, pour réduire les écarts entre les prédictions du modèle et les mesures dans le tube de recombinaison, il est nécessaire d'augmenter le coefficient de recombinaison dans $CN(A^2\Pi)$ d'au moins un facteur 200.

Enfin, une analyse QMC «globale» est réalisée pour identifier les modifications de taux de réactions permettant d'obtenir un meilleur accord avec à la fois les mesures dans le tube de recombinaison et dans le tube à choc. L'étude révèle que l'augmentation du coefficient de dissociation de $\text{CN}(A^2\Pi)$ conduit à une sous-estimation du pic initial de $\text{CN}(A^2\Pi)$ et n'est donc pas recommandée pour le cas du tube à choc. Cette différence s'explique par la présence de chemins réactionnels distincts en recombinaison et en dissociation. Ainsi, il est possible d'obtenir un bon accord avec les expériences de recombinaison et de dissociation en utilisant le même mécanisme, à condition d'augmenter le taux de recombinaison/dissociation de $\text{CN}(A^2\Pi)$ d'un facteur 700, uniquement dans la configuration de recombinaison.

La thèse se conclut par la proposition d'un mécanisme, intégrant les ajustements mis en évidence par l'analyse QMC, qui améliore les prédictions du modèle collisionnel-radiatif pour les plasmas N_2/CH_4 à haute température, représentatifs des conditions d'entrée atmosphérique sur Titan.

Title: Nonequilibrium kinetics and radiation of high-temperature N_2/CH_4 plasmas

Keywords: N_2/CH_4 plasmas, CN molecule, collisional-radiative model, recombination, dissociation, atmospheric reentry

Abstract: The prediction of energy transfer between an N_2/CH_4 plasma and its surroundings, as well as the accurate characterization of its thermochemical state, constitute a major challenge in many applications, such as methane conversion, surface treatment, and the study of tholin formation. These issues rely on a detailed description of dissociation and recombination mechanisms within N_2/CH_4 plasmas.

The present work focuses more specifically on the case of atmospheric entry into Titan. In this context, the design of the spacecraft thermal protection system (TPS) requires a reliable estimation of the convective and radiative heat fluxes generated by the plasma. However, the prediction of radiative heat flux remains affected by significant uncertainties, which this study aims to analyze and reduce. The goal of the present work is to develop and validate a collisional-radiative (CR) model for high-temperature N_2/CH_4 plasmas, suitable for both dissociating and recombining flows.

The developed CR model tracks all relevant global species as well as the $\text{CN}(X^2\Sigma^+)$, $\text{CN}(A^2\Pi)$, $\text{CN}(B^2\Sigma^+)$, $\text{CN}(a^4\Pi)$ and $\text{CN}(D^2\Pi)$ electronic states. The densities of CN electronic states predicted by the model are compared with two complementary experimental data sets: (1) measurements in a recombining N_2/CH_4 plasma and (2) measurements performed by Fagnani et al. in a dissociating plasma obtained with the Low Density Shock Tube (LDST) of NASA Ames Research Center. Comparisons between the CR model and LDST measurements are enabled by developing a 1D-space marcher coupled with the CR model.

The experimental setup of the recombining plasma consists of a 50 kW inductively coupled plasma torch that generates a $\text{N}_2/\text{CH}_4/\text{Ar}$ plasma at atmospheric pressure and near local thermodynamic equilibrium at approximately 7,000 K. The plasma is subsequently passed through a water-cooled tube, where recombination processes occur. The temporal evolution of the temperature and chemical composition of the recombining plasma are investigated by using tubes of various lengths. Spatially resolved emission and absorption spectroscopy of the CN red ($A^2\Pi - X^2\Sigma^+$) and violet ($B^2\Sigma^+ - X^2\Sigma^+$) systems are carried out to fit the rovibrational temperatures and densities of $\text{CN}(X^2\Sigma^+)$, $\text{CN}(A^2\Pi)$ and $\text{CN}(B^2\Sigma^+)$ as the plasma traverses the tube.

Model-experiment comparisons in the LDST highlighted discrepancies by up to a factor of two for the emission of $\text{CN}(A^2\Pi)$ and $\text{CN}(B^2\Sigma^+)$. To understand and remedy these discrepancies, a kinetic analysis is performed to understand the reactions responsible for the formation and depletion of the CN electronic states in the shock tube. In addition, sensitivity studies are used to pinpoint the most influential rate coefficients. These sensitivity analysis are used to guide a quasi-Monte-Carlo (QMC) optimization of the rate coefficients to improve agreement with the measured $\text{CN}(A^2\Pi)$ and $\text{CN}(B^2\Sigma^+)$ densities. By adjusting coefficients within their uncertainty bounds—most notably reducing the $\text{CN}(A^2\Pi) - \text{CN}(B^2\Sigma^+)$ excitation rate by a factor of about 30, the model reproduces the shock tube measurements of $\text{CN}(A^2\Pi)$ and $\text{CN}(B^2\Sigma^+)$ densities within 20 %.

Next, the CR model predictions are compared with recombination tube measurements of $CN(X^2\Sigma^+)$, $CN(A^2\Pi)$ and $CN(B^2\Sigma^+)$ densities. Following the same approach as above, a Quasi Monte Carlo analysis demonstrates that, to reduce the residuals between model predictions and recombination measurements, the recombination rate coefficients of $CN(A^2\Pi)$ must be increased by a factor of at least 200.

Finally, we perform a “global” QMC analysis to identify the modifications to the rate coefficients that enable better agreement with both sets of measurements: the recombination tube and shock tube cases. The study shows that increasing the dissociation rate coefficient of $CN(A^2\Pi)$ leads to an under-estimation of the initial peak in the post-shock measurements and is therefore not recommended in the shock tube case. This can be explained by a difference in the recombination and dissociation pathways. Accordingly, good agreement with both the recombining and dissociating experiments can be obtained by using the same mechanism, except that the $CN(A^2\Pi)$ recombination/dissociation rate ($C + N + M \leftrightarrow CN(A^2\Pi) + M$) should be increased by a factor 700 in the recombination experiment.

The thesis culminates in a recommended mechanism, incorporating the adjustments identified by the QMC analysis, that improves CR predictions for high-temperature N_2/CH_4 plasmas representative of Titan entry conditions.