

République Algérienne Démocratique Et Populaire
Ministère De L'Enseignement Supérieure Et De La Recherche Scientifique
Université Des Sciences Et De La Technologie D'Oran



Mohamed Boudiaf
Faculté De Génie Electrique
Département D'électrotechnique



MEMOIRE EN VUE DE L'OBTENTION DU DIPLOME DE MAGISTER

SPECIALITE : Electrotechnique

OPTION : Ingénierie Des Plasmas et Des Décharges

PRESENTE PAR

M^{elle} : MISSOUM FATMA

SUJET DE MEMOIRE

**ETUDE ET SIMULATION DES PARAMETRES DE
TRANSPORT ELECTRONIQUE DANS LE CH4
SOU MIS A UN CHAMP ELECTRIQUE UNIFORME**

Soutenu le 27/02/2013 devant le jury composé de :

A.SETTAOUTI	PROF	USTO (M.B.)	PRESIDENT
L.SETTAOUTI	MCA	USTO (M.B.)	RAPPORTEUR
A.W.BELARBI	PROF	USTO (M.B.)	EXAMINATEUR
A.HAMID	PROF	USTO (M.B.)	EXAMINATEUR

Dédicaces

Je dédie ce travail à :

Mes très chers parents pour tout leur soutien moral durant ces années d'études et l'amour qu'ils m'ont toujours témoigné.

Mon cher frère et mes amis (Amina, Fatiha, Moukhtaria, Nadia, nafissa, Khalil, Tarik Karim et saad).

Tous ce qui me sont chers

Remerciements

j'exprime ma très grande gratitude à madame **SETTAOUTI** maître de conférence pour toute l'attention qu'elle a apporté à la direction de ce travail, pour son aide, sa disponibilité et ses précieux conseils, qu'elle veuille bien trouver ici l'expression de mon profond respect et de ma reconnaissance.

J'exprime ma gratitude à Monsieur **A.W BELARBI** professeur pour avoir accepté bien voulu examiner ce travail.

Mes remerciements les plus sincère vont aussi à Monsieur **A. SETTAOUTI** professeur de m'avoir fait l'honneur de présider le jury de mon mémoire.

Mes remerciements vont également à Monsieur **A. HAMID** professeur pour avoir bien voulu examiner ce travail.

Enfin je ne pourrai m'empêcher de remercier tous mes amis qui m'ont aidé de près ou de loin à la réalisation de ce mémoire.

SIMULATION DU PHENOMENE DE TRANSPORT ELECTRONIQUE DANS LE CH4

Résumé

Le présent travail est consacré à l'étude et simulation des paramètres de transport électronique dans le CH₄ (méthane) soumis à un champ électrique uniforme par la méthode de Monté Carlo qui est un outil puissant dans le domaine de la physique des plasmas. La procédure de calcul prend en compte la marche aléatoire des électrons et l'influence des paramètres de transport exprimés en fonction du temps et en fonction du champ réduit E/N (E : champs électrique appliqué, N : la densité) du gaz.

La simulation consiste à simuler le mouvement d'un grand nombre d'électrons un par un, donc suivi depuis son émission jusqu'à sa disparition. Au cours de la simulation on relève à chaque temps de vol et pour chaque électron la position et la vitesse de ce dernier. La connaissance de ces grandeurs permet à l'aide des moyennes statique appropriées et à l'aide des méthodes d'échantillonnage de calculer les paramètres de transport électronique dans le gaz considéré en prenant en considération les processus collisionnels intervenant.

-
- Mots clés :**
- Equation de Boltzmann.**
 - Méthode de Monte-Carlo.**
 - Sections efficaces de collision.**
 - Collision nulle.**
 - Décharges électriques.**

TABLE DES MATIERES

Table des matières

INTRODUCTION GENERALE.....	1
----------------------------	---

Chapitre I : MECANISMES MICROSCOPIQUES LORS D'UNE DECHARGE ELECTRIQUE

I.1 INTRODUCTION	5
------------------------	---

I.2 Mécanismes microscopiques élémentaires.....	5
---	---

I.2.1 Excitation atomique.....	5
--------------------------------	---

I.2.2 L'ionisation.....	6
-------------------------	---

I.2.3 Photoionisation	7
-----------------------------	---

I.2.4 Attachement.....	8
------------------------	---

I.2.5 Détachement.....	10
------------------------	----

I.2.6 Recombinaison.....	10
--------------------------	----

I.2.7 Interaction coulombienne	12
--------------------------------------	----

I.2.8 Diffusion.....	13
----------------------	----

I.2.9 Dissociation.....	13
-------------------------	----

I.3 Section efficace de collision	15
---	----

I.3.1 Section efficace de collision différentielle	15
--	----

I.3.2 Section efficace de collision totale.....	17
---	----

I.3.3 Section efficace de collision élastique	18
---	----

I.3.4 Section efficace de collision inélastique	18
---	----

I.4 Claquage électrique des gaz	20
I.4.1 Définition et critère du claquage	20
I.4.2 limitation du mécanisme de Townsend	23
I.4.3 Les coefficients α, η et leurs relations avec les sections efficaces.....	24
I.5 Conclusion	26

Chapitre II : METHODES DE CALCUL DES FONCTIONS DE DISTRIBUTION ET PARAMETRES DE TRANSPORT

II.1 INTRODUCTION	28
II.2 Equation de Boltzmann	29
II.2.1 Généralité	29
II.2.2 Operateur de collision	30
II.2.3 Théorie cinétique	37
II.2.3.1 Développement de la fonction de distribution $f(v, r, t)$ en série de gradients spéciaux	39
II.2.3.2 développement de la fonction de distribution en série de gradients temporels	41
II.2.3.3 développement en série de polynômes de Legendre des fonctions d'ordre zéro $F^{(0)}(v, t)$ et $G^{(0)}(v, z)$	43

II.3 La méthode de Monte Carlo	45
II.3.1 Histoire de la méthode de monte calo	45
II.3.2 Principe de la méthode	45
II.3.3 Générateur de nombre aléatoire	46
II.3.4 relation entre la méthode de Monte Carlo et les mesures de probabilités	47
II.4 Conclusion	50

Chapitre III : CALCUL DES PARAMETRES DE TRANSPORT PAR LA METHODE DE MONTE CARLO

III.1 INTRODUCTION	50
III.2 Méthode simulation de Monte Carlo	51
III.2.1 Approche du libre parcours moyen	51
III.2.2 Approche du Temps de vol moyen	51
III.2.3 La technique de collision nulle	54
III.2.4 Le mouvement de l'électron entre deux collisions successives	57
III.2.5 Détermination de la nature de collision	57
III.2.6 Vitesse et direction de l'électron après collision	60
III .2.6.1 Détermination de l'angle polaire et l'angle azimutal	60
III.2.6.2 Détermination du module de la vitesse après le choc	62
III.2.6.2.1 Collisions élastiques	62
III.2.6.2.1 Collisions inélastiques	63

III.2.7 Organigramme de Monte Carlo	63
III.2.8 Calcul des paramètres de transport	66
III.2.8.1 Paramètres de transport	66
III.3 Choix du gaz et section de collision	70
III.3.1 Le méthane	70
III.3.2 La section efficace de collision	70
III.4 Résultat et discussions	72
III.4.1 Résultat et discussions.....	72
III.4.2 Cas d'un champ électrique nul.....	72
III.4.2 Cas d'un champ réduit E/N faible.....	75
III.4.3 La vitesse de dérive et l'énergie moyenne en fonction du champ réduit.....	78
III.5 Conclusion	93
CONCLUSION GENERALE	95
BIBLIOGRAPHIE	98

INTRODUCTION GENERALE

Lorsqu'un gaz isolant est soumis à une tension électrique suffisante, un courant de particules chargées électriquement devient possible par l'ionisation partielle du milieu. On parle ainsi de décharge électrique. Ce phénomène est particulièrement intéressant, car bien que rencontré dans l'expérience commune et utilisé dans de nombreuses applications technologiques, il n'est que rarement vulgarisé. Il prend en effet une multiplicité de formes différentes et sa description fait appel à de nombreux champs de la physique.

L'étude scientifique des décharges électriques a commencé au XVIII^e siècle par l'observation expérimentale d'étincelles produites par des générateurs électrostatiques et des éclairs d'orages. Ensuite l'invention de piles suffisamment puissantes a permis à V.V. Petrov de produire le premier arc électrique en 1803 dans l'air. Humphrey Davy en fit ensuite l'étude. Mais ce fut Michael Faraday qui, entre 1831 et 1835, découvrit et commença l'étude des décharges luminescentes en utilisant des tubes contenant des gaz à une pression de l'ordre de 100 Pa sous 1000 V. Par la suite, à la fin du XIX^e siècle et au début du XX^e siècle, la physique des décharges électriques dans les gaz a permis à la physique atomique de faire ses premiers progrès avec les travaux de William Crooke et de Thomson, avec en particulier la mise en évidence du rôle fondamental des électrons dans la décharge et la mesure du rapport e/m . Vers 1900, un élève de Thomson, Townsend, réalisa la première modélisation d'une décharge, correspondant au cas de la décharge luminescente en champ uniforme. Langmuir travailla aussi sur ces décharges et introduisit le concept du plasma. Au cours du XX^e siècle on passa à l'exploration des décharges en fonction de la fréquence, tandis que la modélisation progressait en raison du développement d'applications de plus en plus nombreuses des décharges [13].

Ce travail de recherche est consacré pour l'étude et simulation des paramètres de transport électronique dans le (CH₄) soumis à un champ électrique uniforme

Ce mémoire est divisé en trois chapitres :

Le premier chapitre on donne une présentation générale de quelques mécanismes microscopiques lors d'une décharge électrique qui est basée sur la connaissance des processus physiques importants pour la modélisation, ces processus sont liés aux sections efficaces de collision, connaître toutes les sections efficaces en fonction de l'énergie est indispensable pour le calcul des paramètres de transport tels que la vitesse de dérive, l'énergie moyenne, coefficient d'ionisation, de recombinaison ex....., à la fin de ce chapitre, on discute le problème du claquage électrique dans le gaz et son développement.

Le deuxième chapitre est concernant la description de l'équation de Boltzmann, cette équation est utilisée pour étudier le comportement des électrons dans les gaz à difficultés pour la résolution dans le cas général. Les hypothèses simplificatrices admises qui concernent en premier lieu le terme de droite de cette équation (opérateur de collision), sont explicitées en même temps que les principaux types de collision.

La deuxième partie de ce chapitre, on décrit la méthode de simulation statique de Monte Carlo on commence par les principes de cette méthode et un ensemble d'événements difficilement réalisable par un autre ensemble d'événements facilement réalisables, on donne ensuite un aperçu sur les principes de la méthode et on donne la relation entre la méthode de Monte Carlo et les mesures de probabilités.

A la fin le troisième chapitre est consacré à l'étude par la méthode de Monte-Carlo qui est facile à développer dans les régimes hydrodynamiques. Cette méthode permettra le calcul des paramètres de transport électronique dans le CH₄ soumis à un champ électrique uniforme par la technique de collision nulle durant chaque temps du vol. La position et la vitesse de chaque électron avant collision sont déterminées par les lois de la mécanique classique, tandis que la nature de collision et la vitesse juste après chaque collision dépendent des sections efficaces du gaz considéré. Grâce à ces grandeurs, on peut calculer les paramètres de transport électronique (la vitesse de dérive et l'énergie moyenne).

L'étude du mouvement des électrons dans le CH₄ nous a permis d'évaluer les paramètres de transport tel que la vitesse de dérive et l'énergie moyenne dont le but est de diminuer l'utilisation de SF₆ et ceci à cause de ces retombées environnementales.

Chapitre I

MECANISMES MICROSCOPIQUES LORS D'UNE DECHARGE ELECTRIQUE

I.1 Introduction :

Dans ce chapitre on va présenter quelques processus physiques de base qui sont très utiles dans la modélisation des décharges électriques. Ce sont surtout les collisions élastiques et inélastiques dominants dans les milieux gazeux qui nous intéressent et puis on donne une idée très brève du phénomène de claquage dans un gaz est important dans une décharge électrique.

En générale, l'étude des décharges électriques est basée sur la connaissance des processus physique qui sont important pour la modélisation, il s'agit des mécanismes élémentaires microscopiques tels que l'ionisation, l'excitation, l'attachement, recombinaison et il s'agit aussi des collisions élastiques et inélastiques qui dominent le milieu.

En effet sachant que chaque section efficace représente un processus collisionnel spécifique dépendant de l'énergie incidente, connaître toutes les sections efficaces [11] en fonction de l'énergie est indispensable pour le calcul des paramètres de transport tels que la vitesse de dérive, l'énergie moyenne et l'explication du phénomène de claquage dans un gaz.

I.2 Mécanismes microscopiques élémentaires :

I.2.1 Excitation atomique :

Un atome neutre peut être excité soit par collision avec électron, soit par l'absorption d'un photon dans le premier cas, la création s'écrit :



Cette réaction n'est possible que si l'énergie cinétique de l'électron incident soit au moins égale à l'énergie d'excitation.

Dans le deuxième cas la réaction s'écrit :

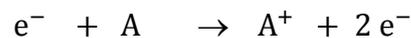


L'énergie d'excitation a pour valeur $h \nu$, h étant la constante de Planck égale $6.625 \cdot 10^{-34}$ (S.I), ν la fréquence du photon.

I.2.2 L'ionisation : [23,24]

Si un atome, absorbe une énergie assez suffisante, il perd un électron il devient une particule chargée positivement. On dit qu'il est ionisé

L'ionisation d'un gaz par les électrons libres accélérés dans le champ électrique est le processus essentiel de la formation des paires ions positifs –électron la réaction s'écrit :



L'ionisation d'un atome par un choc électronique n'est possible que si l'énergie cinétique de l'électron incident soit au moins à l'énergie d'ionisation de l'atome considéré. Cette condition est nécessaire mais elle n'est pas suffisante car l'échange d'énergie entre un électron et un atome lors d'une collision dépend de certaines probabilités. Ceci dit que sur un faisceau d'électrons monénergétiques injecté dans un gaz avec une énergie d'ionisation, seulement quelques électrons seront capables d'ioniser les molécules du gaz.

- Ionisation thermique :

Une élévation de température conduit à une agitation thermique croissante qui rend ce processus efficace, surtout si la pression est élevée. Dans ce cas l'ionisation ne se produit pas au cours d'un seul choc. Mais le résultat d'excitations successives.

- Ionisation par choc :

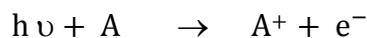
Un électron peut ioniser une particule neutre à condition qu'il ait une énergie cinétique supérieure à l'énergie d'ionisation de la particule neutre. Dans le cas d'une collision avec une particule excitée, l'énergie requise est faible donné par :

$$\frac{1}{2}mv^2 = E_i - E_e$$

I.2.3 Photoionisation : [23,24]

L'ionisation d'une particule gazeuse par absorption d'un photon ne peut se produire que si l'énergie du photon incident soit au moins égale à l'énergie d'ionisation de la particule considérée.

La réaction s'écrit :



L'électron éjecté peut emporter l'excédent d'énergie sous forme d'énergie cinétique. La probabilité pour qu'un photon ionise un atome ou une molécule est au maximum lorsque la différence entre l'énergie du photon et l'énergie d'ionisation est petit (0.1-1 eV).

La Photoionisation peut se produire non seulement à partir de radiation extérieure mais aussi à partir de radiation émise du gaz lorsque les atomes excités retournent à l'état fondamental ou lorsque les atomes ionisés se recombinent avec les ions former des molécules neutres.

I.2.4 L'attachement : [23,24]

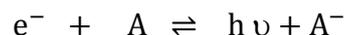
L'attachement d'un électron sur un atome ou une molécule neutre conduit à la formation d'un ion négatif .Ce processus n'aura pas lieu si les électrons sont très énergétiques.

L'attachement n'est important que pour les gaz électronégatifs, il augmente leur rigidité en entraînant un frein à la croissance des avalanches.

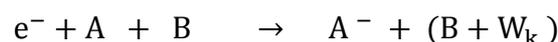
- *Modes de formation d'ion négatif :*

1) L'énergie de l'ion négatif formé lors d'une collision d'attachement est inférieure à l'énergie de la particule neutre L'excès d'énergie est libéré sous forme de photon.

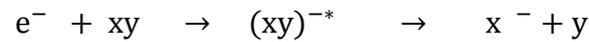
Ce type d'attachement est connu comme « attachement radiatif ». Le processus inverse est dit photodétachement. La réaction s'écrit :



2) L'excès d'énergie libéré après une collision d'attachement peut être aussi acquis par une troisième particule comme énergie cinétique W_k , ceci est connu comme : « collision d'attachement à trois corps ». La réaction s'écrit :



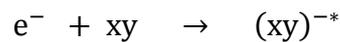
3) L'excès d'énergie est utilisé pour séparer deux atomes d'une même molécule en atome neutre et ion négatif. Ce type de processus est appelé « attachement dissociatif », le processus inverse est le détachement associatif.



4) Dans le stade intermédiaire de la réaction précédente, l'ion négatif moléculaire est à un niveau d'énergie potentielle élevé. Ceci est dû à son excitation vibrationnelle.

Lors de la collision d'ion négatif avec une autre particule A l'énergie d'excitation peut être transférée à la particule A sous forme d'énergie potentielle W_p et/ou énergie cinétique W_K .

Les deux réactions s'écrivent :

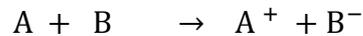


5) Les ions négatifs peuvent être créés après une collision d'un électron avec une molécule, dans cette collision la molécule est divisée en deux ions, un ion positif et l'autre négatif sans qu'il y ait attachement de l'électron incident, ce processus est appelé « production de pair ion »

La réaction s'écrit :



6) Finalement, dans l'absence d'électrons libres, un transfert de charge peut se produire, la réaction s'écrit :



Pour les faibles pressions, les attachements radiatifs et dissociatifs (processus 1 et 3) sont dominants, par contre sous pressions élevées les modes (2) et (4) sont probables.

I.2.5 Détachement : [23,24]

C'est le processus inverse du précédent : un ion négatif perd son électron supplémentaire. Les processus de détachement peuvent être résumés comme suit :

- Photodétachement par absorption de radiations,
- Collisions des ions avec molécules,
- Détachement associatif,
- Collision des ions négatifs moléculaires des atomes excités, ce qui mène à une excitation vibrationnelle des ions négatifs et par suite la libération des électrons,
- Recombinaison des ions atomiques positifs et négatifs pour former une molécule diatomique neutre par collision à trois corps avec des électrons ce processus est le plus probable pour les plasmas au-dessus de quelques torr.

I.2.6. Recombinaison : [23,24]

La neutralisation par un ion positif avec électron libre ou ion négatif est appelée recombinaison.

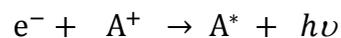
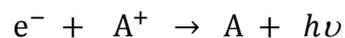
Dans le cas de la recombinaison entre ion positif et ion négatif, la réaction s'écrit :



Les deux particules, possédant des charges de signe différent ces charges pour revenir à l'état neutre, en libérant une certaine énergie, soit sous forme de photon, soit sous forme d'énergie cinétique cédée à une molécule de gaz voisine.

Ces réaction se produisent d'autant mieux que les particules en présence sont moins énergétiques.

Dans le cas de la combinaison entre ion positif- électron, la réaction s'écrit :



L'électron se recombine avec un ion positif pour donner un neutre ou excité, la réaction libère une énergie forme d'un photon, si elle est supérieure à l'énergie d'ionisation, le photon peut ioniser le gaz à une certaine distance.

Dans les gaz ou les ions négatifs peuvent se former facilement, la recombinaison d'ions positifs prend place plus rapidement que dans le cas d'un gaz ou les ions négatifs ne peuvent pas se former (comme dans les gaz rares). Ceci dit que la recombinaison de deux ions d'un même gaz mais de signes différents est plus probable de se produire que la recombinaison d'ion positif avec électron libre.

Le taux de recombinaison est directement proportionnel aux concentrations des ions positifs et des ions négatifs ou électrons.

$$\frac{dn^+}{dt} = \frac{dn^-}{dt} = Rn^+n^- \quad (\text{I.1})$$

n^+ : densité de charges positives (cm^{-3})

n^- : densité de charges négatives (cm^{-3})

R : coefficient de recombinaison ($\text{cm}^3 \text{s}^{-1}$)

I.2.7 Interaction coulombiennes :[19]

Ce genre est totalement différent des autres types de collisions électrons –atomes ou atomes –atomes. La différence essentielle due à la longue portée du potentiel coulombien (potentiel en $1/r$ ou r représente la distance inter-particule) .En effet dans le cas d'une collision électron –atome, le potentiel d'interaction est un potentiel dit à courte portée (potentiel du type Lennard –Jones par exemple) .Ce qui signifie que tant que l'électron se trouve l'ion de l'atome , il n'y a pas d'interaction .Mais dès que l'électron se trouve à proximité de l'atome il y a une interaction ; c'est pourquoi l'interaction électron –atome peut être considérée comme collision binaire avec toutes les implications de la mécanique classique qui en découlent .En avalanche , dans le cas des interactions entre particules chargées .Les électrons interagissant en permanence avec un grand nombre d'électron et d'ions du milieu.

Les interactions coulombiennes (surtout électron-électron) jouent un rôle important dans l'équilibre énergétique. En effet, elles permettent des échanges des énergies directs entre les électrons du milieu.

I.2.8 Diffusion : [24 , 25, 28]

C'est l'une des propriétés macroscopiques d'un gaz n'étant pas uniformément répartie à travers le volume considéré, il apparaîtrait un flux moyen de cette propriété, tendent à uniformiser les conditions en toutes point.

Dans les décharges électriques, quand il y a une concentration non uniforme d'ions il y aura déplacement des ions des régions à concentration élevée vers les régions à faible concentration. Ce processus, qui est appelé diffusion, donne naissance à un effet d'ionisation dans les régions à faible concentration. La diffusion est relativement faible à pression élevée pour laquelle la recombinaison est particulièrement importante.

L'équation de diffusion en trois dimensions s'écrit :

$$\frac{\partial n}{\partial t} = \nabla^2(D v) \quad (\text{I.2})$$

D est une constante alors

v : vitesse des particules.

Si D est une constante alors :

$$\frac{\partial n}{\partial t} = D \nabla^2 v \quad (\text{I.3})$$

Si on considère un gaz contenant une densité appréciable d'ions positifs et d'ions négatifs, leurs mobilités sont différentes et en générales les ions négatifs diffusent plus rapidement, les séparations de charges résultante de la diffusion rapide des ions négatifs produits un champ électrique. Ce dernier exerce des forces qui tendent à augmenter la vitesse de dérive avec la même vitesse.

Ce processus est appelé « diffusion ambipolaire »

$$v^+ = -\frac{D^+ \partial n^+}{n^+ \partial x} + K^+ E \quad (\text{I.4})$$

$$v^- = -\frac{D^- \partial n^-}{n^- \partial x} - K^- E \quad (\text{I.5})$$

v^+ : vitesse des ions positifs.

v^- : vitesse des ions négatifs.

K^+ : Mobilité des ions positifs.

K^- : Mobilité des ions négatifs.

E : Champ électrique appliqué.

Par élimination de E est mettent :

$$\left\{ \begin{array}{l} n^+ = n^- = n \\ \frac{dn^+}{dx} = \frac{dn^-}{dx} = \frac{dn}{dx} \\ v^+ = v^- = v \end{array} \right.$$

La vitesse moyenne des ions devient :

$$v = \frac{D^+ K^- + D^- K^+}{n(K^+ + K^-)} \frac{\partial n}{\partial x} \quad (\text{I.6})$$

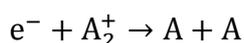
Le coefficient de diffusion est :

$$D_a = \frac{D^+ K^- + D^- K^+}{(K^+ + K^-)} \quad (\text{I.7})$$

I.2.9 Dissociation : [20]

La dissociation d'une molécule en deux ou plusieurs constitue un phénomène assez probable car l'énergie nécessaire pour le réaliser est rarement supérieure à 10 eV

La recombinaison dissociative



La dissociation peut donner naissance soit à des ions ou molécules neutres, soit à des particules chargées des deux signes.

Elle peut être accompagnée d'ionisation ou d'attachement



I.3 Section efficace de collision : [28]

La section efficace de collision est un concept dextrement utile et largement adopté. Les particules sont représentées par le modèle de sphères rigides, les collisions sont bien définies par ce modèle, lorsque la distance devra se produire.

Bien que le modèle de sphère rigide et le processus de collision ne soient en aucune manière descriptive des événements atomiques, ils nous aident à faire une description de ces événements. Le processus réel entraîne des interactions de valence dans leurs proximités, l'étude physique des collisions atomiques et moléculaires devrait être traitée par la mécanique ondulatoire.

I.3.1 Section efficace différentielle :

La section efficace différentielle permet de calculer la section totale et la section efficace pour le transfert de quantité de mouvement soit pour un choc élastique soit pour un choc inélastique.

Les mesures de sections efficaces différentielles sont en grande majorité anciennes (1930 environ). Une expérience typique nécessite un faisceau de particules monoénergétique. Le système de coordonnées est montré dans la Figure I.1. On suppose que le rayon du faisceau est R , le centre de la particule cible est sur le même axe x .

La particule incidente, ayant une vitesse v , dévie après interaction avec la particule cible. Dans l'expérience typique, les particules diffusées sont comptées dans un détecteur qui est loin de la particule cible. La vitesse finale des particules diffusées est v' ; l'angle entre v et v' est l'angle de diffusion θ .

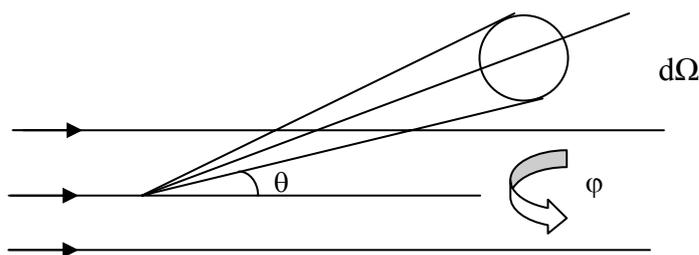


Figure I.1 Diffusion des particules incidentes

Les particules incidentes sont diffusées dans les diverses directions.

On suppose que la particule cible est beaucoup plus massive que le faisceau de particules ce qui veut dire que la cible est considérée comme fixe. Ces considérations impliquent que la vitesse initiale et la vitesse finale des particules incidentes sont égales.

Soit $\frac{dN}{N}$ le nombre diffusées par unité de temps à l'intérieur de l'angle solide $d\Omega$ autour d'une direction donnée. Cette direction sera repérée par rapport à celle du faisceau incident au moyen de deux angles θ et ϕ ou ϕ est l'angle azimutal.

On définit alors la section efficace différentielle par le rapport du nombre de particules incidentes qui sont dérivées dans l'angle solide $d\Omega$. On l'exprime ci-dessous par la relation :

$$\frac{dN}{N} = n \sigma(\theta) d\Omega \quad (\text{I.8})$$

dN : nombre de particules diffusées dans l'angle solide $d\Omega$.

N : nombre totale des particules tests.

n : nombre de particules cibles par unité de surface.

L'équation (I-8) montre la quantité σ à la dimension de surface. De plus, on pourra considérer qu'elle ne dépend pas de l'azimutal ϕ mais uniquement de l'angle de déviation θ , donc on aura la définition suivante :

$$\frac{dN}{N} = n \sigma(\theta) \sin \theta d\theta d\phi \quad (\text{I.9})$$

Avec : $d\Omega = \sin \theta d\theta d\phi$

I.3.2 Section efficace totale :

La section efficace totale est définie comme :

$$\sigma_t = \sum \int_0^\pi \sigma(\theta) d\Omega \quad (\text{I.10})$$

$$\sigma_t = \sum \int_0^\pi \sigma(\theta) 2\pi \sin \theta d\theta \quad (\text{I.11})$$

Le signe \sum indique la sommation des intégrales relatives à chaque type possible d'interaction élastique et inélastique.

Le concept de la section efficace de collision peut être utilisé dans la description du processus d'impact et son produit. Si un électron, par exemple, lors de son trajet dans le gaz, effectue des collisions inélastiques et élastiques avec les molécules du gaz alors la section efficace totale :

$$\sigma_t = \sum_j \sigma_j \quad (\text{I.12})$$

J : symbole qui désigne le type de collision.

La probabilité de collision du type j est :

$$P_j = \frac{\sigma_j}{\sigma_t} \quad (\text{I.13})$$

Un autre terme, largement utilisé dans la description du phénomène de collision, est la fréquence de collision ν_c . Elle est définie comme étant le nombre de collision par unité de temps :

$$\nu_c = \langle v \rangle N \sigma \quad (\text{I.14})$$

Où $\langle v \rangle$ est la vitesse moyenne de la particule incidente et N la densité du gaz est le nombre de collision par unité de longueur défini toujours comme étant l'inverse du libre parcours moyen λ

$$\lambda = 1/N\sigma \quad (\text{I.15})$$

I.3.3 Section efficace de collision élastique :

La mesure de section efficace élastique atomique et moléculaire, due à l'impact électronique peut être faite par plusieurs manières, mais habituellement deux méthodes sont utilisées :

- 1- En utilisant l'atténuation d'un faisceau d'électron dans un gaz d'une pression donnée.
- 2- Dans les expériences dites « transport électrons » , les sections efficaces pour le transfert de la quantité de mouvement peuvent être déterminées. La section efficace de collision élastique est le produit d'une diffusion non symétrique d'un électron. tous les gaz possèdent une section efficace de collision variable avec un maximum aux faibles énergies d'électrons (quelques eV).

I.3.4 Section efficace de collision inélastique :

Afin de mesurer σ_{ex} ou σ_{ion} (section efficace d'excitation ou section efficace d'ionisation) , il est essentiel de séparer le nombre des électrons diffusés en conséquence.

Pour mesurer σ_{ion} , on compte le nombre d'ion positifs de l'ionisation, tandis que la mesure de σ_{ex} est faite par des méthodes optiques aux pressions, en comptant le nombre de photons émis lorsque les états excités des molécules reviennent aux états fondamentaux .

Il est importante signaler que dans des cas , la recombinaison entre un électron et un ion positif peut prendre place (ceci est possible lorsque l'électron a une faible énergie , a ce qu'il réside alentours de l'atome pour un temps de l'ordre de 10^{-8} s) .De même quelques atomes tendent à attirer des électrons de faible énergies pour former des ions négatifs .La formation des ions négatifs st un processus essentiel de suppression d'électrons du faisceau , ce processus doit être pris en compte dans telles mesures .

La relation entre le coefficient de recombinaison R et la section de recombinaison σ_r

Est donnée par :

$$R = \langle v \rangle \sigma_r \quad (\text{I. 16})$$

$\langle v \rangle$ la vitesse moyenne de l'ion.

La section efficace d'attachement est donnée par :

$$\frac{dn}{dt} = -\sigma_{at}Nnv \quad (\text{I.17})$$

$$\frac{dn}{dt} = -P_a\sigma_tNnv \quad (\text{I.18})$$

v : la vitesse des électrons.

n : densité d'électrons.

N : la densité des atomes.

P_a : probabilité d'une collision d'attachement.

$$P_a = \frac{\sigma_{at}}{\sigma_t} \quad (\text{I.19})$$

I.4 Claquage électrique des gaz : [16, 17,25 et 29]

I.4.1 Définition et critère du claquage :

Un claquage électrique dans un gaz est une séquence rapide des événements irréversibles qui conduisent une transition du gaz de son état isolant un autre de conductivité élevé .La valeur de tension à laquelle le claquage se produit « tension de claquage » dépend du gaz, sa densité, la distance inter-électrode .La forme et la composition des électrodes et la nature de la tension applique.

Dans l'absence d'électrons libres , diélectrique reste dans l'état isolant même si la tension est supérieur à la section de claquage V_c .Lorsque la tension appliquée v dépasse V_c , le claquage peut être enclenché par un seul électron qui , accéléré par le champs électrique applique a des énergies supérieures au seuil de l'énergie d'ionisation du gaz produit , après collisions avec atomes et molécules du gaz , des électrons libres supplémentaires ; ces derniers à leurs tour , emmènent à une multiplication d'électrons qui forment une avalanche et éventuellement un canal conducteur.

Ce processus de multiplication d'électrons par ionisation peut se représenter par :

$$n = n_0 \exp(\alpha d) \quad (\text{I.20})$$

n : nombre d'électrons à la distance $x=d$.

n_0 : nombre d'électrons à la distance $x=0$.

α : nombre d'électrons créés pour un électron dérivant de 1 cm dans la direction du champ électrique.

Le coefficient α , est défini comme étant le premier coefficient d'ionisation de Townsend.

Si, en plus de l'ionisation par impact d'électrons, d'autres processus secondaires tels que les collisions des ions positifs, photons et espaces métastables avec la cathode, et/ou photoionisation et ionisation de Penning dans le gaz contribuent à la production d'électrons donc :

$$n = n_0 \frac{\exp(\alpha d)}{1 - \gamma[\exp(\alpha d) - 1]} \quad (\text{I.21})$$

γ : Nombre d'électrons arrachés à la cathode par ion positif.

Le coefficient γ est défini comme étant le deuxième coefficient de Townsend.

Le courant de décharge sera donc :

$$i = i_0 \frac{\exp(\alpha d)}{1 - \gamma[\exp(\alpha d) - 1]} \quad (\text{I.22})$$

Avec, i_0 le courant initial produit par la source.

La transition du gaz de l'état isolant à l'état conducteur est postulée pour se produire lorsque $n \rightarrow \infty$

C'est-à-dire : $\gamma[\exp(\alpha d) - 1] = 1$ (I.23)

Ce critère est connu sous le nom de critère de claquage de Townsend.

Etant donné que la valeur de α , à laquelle correspond le claquage, est définie par

$\exp(\alpha d) \gg 1$, les relations se simplifient suit :

$$n = n_0 \frac{\exp(\alpha d)}{1 - \gamma[\exp(\alpha d) - 1]}$$

$$\gamma[\exp(\alpha d) - 1] = 1$$

Selon [1], Loeb a expliqué le critère de Townsend pour le claquage comme suit :

- a) Pour $\exp(\alpha d) \ll 1$, le courant de décharge n'est pas automatiquement pour le claquage c'est-à-dire que la source de production du courants est élevée, il cesse de circuler.
- b) Pour $\gamma[\exp(\alpha d) - 1] = 1$, le nombre de paires électrons -ions produits dans l'intervalle par le passage d'une seule avalanche est suffisamment grand pour que les ions positifs résultants, en bombardant la cathode, soient capables d'arracher un électron secondaire et par conséquent causent une répétition du processus d'avalanche. La décharge est donc automaintenue et peut continuer dans absence de la source qui produit i_0 .
- c) Pour $\exp(\alpha d) > 1$, l'ionisation produite par des avalanches successives est cumulative. La décharge se développée rapidement.

Le traitement susmentionné n'a pas considéré le rôle crucial du phénomène d'attachement dans les gaz électronégatifs. Le critère de claquage a été en 1950 par Geballe et Harrison, en introduisant le processus d'attachement dans la théorie de Townsend, la relation devient

$$\eta \exp(\alpha - \eta)d = 1 - \frac{\eta}{\alpha} \quad (\text{I.24})$$

Où η est le coefficient d'attachement, défini comme l'inverse de la distance moyenne traversée dans la direction du champ électron libre avant d'être attaché.

A l'équilibre les quantités η/N et $(\alpha - \eta)/N$ sont toujours exprimées en fonction de E/N seulement (E est le champ électrique appliqué, N la densité du gaz).

La valeur de E/N pour la quelle $(\alpha - \eta)/N = 0$ est la valeur minimale du champ électrique réduit pour avoir un claquage, c'est une condition nécessaire mais elle n'est pas suffisante, car la présence du claquage dépend de la probabilité d'existence d'un électron et que cet électron peut donner naissance à une avalanche de taille suffisante pour le développement d'un canal conducteur dans le gaz.

I.4.2 Limitation du mécanisme de Townsend :

A cause de l'invalidité de quelques suppositions faites pour formuler de l'expression théorique et en vue de l'avancement considérable dans le domaine de la physique atomique, le mécanisme de Townsend est incapable d'expliquer plusieurs phénomènes dans le processus de claquage.

Le résultat le plus contradictoire pour le temps nécessaire pour la formation d'un canal d'une décharge auto maintenue. Par l'application d'une tension supérieure à la tension de claquage, il était observé que les temps formatifs sont plus courts que trouvés par l'approche de Townsend.

Ces courts temps empêchent la participation des ions positifs et limitent le rôle attribué à la formation des avalanches d'électrons.

Ces conclusions étaient en connaissant la mobilité d'ions et la vitesse de dérive des électrons sous l'influence d'un champ électrique donné.

Une autre difficulté dans la justification du mécanisme de Townsend repose sur la considération que le canal de la d'charge est droit (perpendiculaire aux électrodes), ceci n'est pas vrai dans plusieurs cas, il est soit sous forme de branche, soit il se développe en zigzag. Le mécanisme de Townsend avec ses versions ne peut pas donner une explication d'un tel comportement.

La même difficulté existe dans le cas d'un champ électrique non uniforme, spécialement aux grandes valeurs de pd (p : la pression, d : la distance inter-électrodes). En plus du fait que le canal n'est, par d'aucune manière, droit, le matériau de la cathode semble en avoir une petite influence sur les valeurs du claquage, ceci limite l'influence du matériau de la cathode.

Tout ces conclusions rendent difficile la réconciliation de plusieurs observations expérimentales avec la théorie de Townsend, bien que ce mécanisme fournisse une excellente interprétation de plusieurs phénomènes observés. Donc, les autres mécanismes de claquage ne peuvent pas, d'une manière ou d'une autre, remplacer complètement le mécanisme de Townsend, ils le complètent dans les cas où n'est pas applicable

I.4.3 Les coefficients α , η et leurs relations avec les sections efficaces :

Si pour un gaz donné, on connaît les sections efficaces des processus microscopiques, on peut les utiliser avec les équations de conservation de charge pour modéliser le développement et le comportement de la décharge. mais en pratique, ceci est difficile vu le manque des données dans la littérature.

On à souvent, recours aux coefficients de transport dissociation, détachement et réactions ions-molécules, en plus du premier coefficient quantités correspondent aux sections efficaces respectives.

Si pour un gaz pur, par exemple, on considère e un électron avec une énergie $\varepsilon > I$, ou I est le seuil de l'énergie d'ionisation, le nombre des collision d'ionisation par seconde est

$$\sigma_{ion}(\varepsilon)Nv = \sigma_{ion}(\varepsilon)N\left(\frac{2\varepsilon}{m}\right)^{1/2} \quad (\text{I.25})$$

Ou m : est la masse d'électron

Par conséquent, le nombre moyen des événements ionisants causes par un électron par unité de distance est :

$$\int_l^\infty \left[\sigma_{ion}(\varepsilon)N\left(\frac{2\varepsilon}{m}\right)^{1/2} \right] v_d^{-1} f\left(\varepsilon, \frac{E}{N}\right) d\varepsilon = \alpha \quad (\text{I.26})$$

Ou v_d est la vitesse de dérive de l'électron .les relations de α et η avec les sections efficaces d'ionisation $\sigma_{ion}(\varepsilon)$ et d'attachement $\sigma_{at}(\varepsilon)$ et la fonction de distribution sont respectivement :

$$\frac{\alpha}{N} \left(\frac{E}{N}\right) = \left(\frac{2}{m}\right)^{1/2} v_d^{-1} \int_l^\infty f\left(\varepsilon, \frac{E}{N}\right) \varepsilon^{1/2} \sigma_{ion}(\varepsilon) d\varepsilon \quad (\text{I.27})$$

$$\frac{\eta}{N} \left(\frac{E}{N}\right) = \left(\frac{2}{m}\right)^{1/2} v_d^{-1} \int_l^\infty f\left(\varepsilon, \frac{E}{N}\right) \varepsilon^{1/2} \sigma_{at}(\varepsilon) d\varepsilon \quad (\text{I.28})$$

I.5 Conclusion :

Au début de ce chapitre, il nous a été nécessaire de faire une description des processus, en suite on a donné un aperçu sur la notion des sections efficaces de collision microscopiques de base qui sont présentées par des collisions élastiques et inélastiques.

A la fin de ce chapitre, on a fait une représentation du phénomène de claquage, sa définition, donc en conclure la modélisation des décharges ou bien le calcul des coefficients de transport comme la vitesse de dérive, l'énergie moyenne, coefficients de diffusion ainsi que les coefficients d'ionisation et d'attachement.

Dans le chapitre suivant, on va décrire les méthodes généralement utilisées pour simuler le transport des électrons dans un milieu gazeux, ainsi le calcul des coefficients de transport et simuler les décharges électriques.

Chapitre II

METHODE DE CALCUL DES FONCTIONS DE DISTRIBUTIONS ET PARAMETRES DE TRANSPORT

II.1 Introduction :

L'équation de Boltzmann la plus utilisée pour la description de l'évolution de la fonction de distribution des vitesses des divers particules. Cette équation traduit le fait que la fonction de distribution dans un élément de volume de l'espace des phases (\vec{r}, \vec{v}) des positions et vitesses, varie d'une part en raison du mouvement libre de ces particules (en présence des force extérieures appliquées), sous l'effet des collisions.

Ce chapitre est consacré à la description de l'équation de Boltzmann utilisé pour étudier le comportement des électrons dans le gaz et les difficultés rencontrées pour la résolution dans le cas général. Les hypothèses simplificatrices admises, qui concernent en premier le terme de droite de cette équation (opérateur de collision), sont explicitées en même temps que principaux types de collision susceptibles de changer directement ou indirectement la fonction de distribution des électrons. Après, les hypothèses simplificatrices qui concernant le terme de gauche de cette équation sont abordées dans le cadre de la théorie classique. Cette théorie est établie aussi bien dans le cas d'un milieu homogène et non stationnaire (cas relatif à la simulation des expériences de mesure des paramètres de transport dites TOF : temps de vol) que dans le cas d'un milieu stationnaire et non-homogène (cas relatif à la simulation des expériences de mesure de paramètres de transport dites ATS correspondant à l'expérience de Townsend en régime stationnaire dans laquelle un spectre d'arrivée à l'anode du nuage électronique est analysé). La méthode de résolution numérique des équations de transport établies dans le cas TOF et dans le cas ATS est en suite brièvement décrite.

En suite on décrit la méthode de simulation statique de Monte Carlo qui est basée sur les lois de probabilité et de statistique. Cette méthode consiste à simuler un ensemble d'événements difficilement réalisables par autre ensembles d'événement facilement réalisables, ceci est fait par des tirages des nombres aléatoires, on donne un aperçu sur les principes de la méthode et on définit la relation entre la simulation de Monté Carlo et les mesures de probabilité.

II.2 Equation de BOLTZMANN :

II.2.1 Généralités :

Le milieu étudié est constitué de plusieurs espèces de particules, électriquement chargées ou non. Sous l'action d'une force extérieure d'accélération γ , les électrons se déplacent et effectuent des collisions avec toutes les espèces de particules.

Le nombre portable d'électrons à un instant « t » occupant dv est :

$$dn(r, v, t) = f(r, v, t) dv \quad (\text{II. 1})$$

Avec $dr = dx dy dz$ et $dv = dv_x dv_y dv_z$ en coordonnées cartésiennes

$f(r, v, t)$ est fonction de distribution des électrons dans l'espace des phases.

Dans l'espace des phases à n'importe quel instant t est donné par :

La définition de la fonction de distribution des électrons $f(r, v, t)$ repose sur notions de probabilité, et toute expression dans laquelle elle sera figurée par exemple l'expression, des paramètres de transport, va être relative au comportement moyen des électrons. A chaque instant, cette fonction dépend du vecteur position r qui sont des variables indépendantes de l'espace des phases (espace des positions et des vitesses)

Cette fonction induit à l'équation de Boltzmann :

$$\frac{df}{dt} = \frac{\partial f}{\partial t} + v \frac{\partial f}{\partial r} + \gamma \frac{\partial f}{\partial v} = C(f) \quad (\text{II. 2})$$

Avec $v = \delta r / \delta t$ et $\gamma = \frac{\delta v}{\delta t}$

L'équation (II.2) est une équation de continuité dans l'espace des phases.

Les collisions représentées par l'opérateur $C(f)$ sont à l'origine de la modification du nombre de particules dans le volume élémentaire dv de l'espace des phases. Cette modification est composée de terme :

- ❖ Un terme de diffusion spatiale $v \frac{\partial f}{\partial r}$ traduisant la tendance du gaz à relaxer vers un état homogène dans l'espace.
- ❖ Un terme de force extérieure $\gamma \frac{\partial f}{\partial v}$ exprimant l'action du champ électrique sur les particules du gaz.
- ❖ Un terme de collision $C(f)$ représenté sous la forme d'un opérateur agissant sur $f(r, v, t)$

La plus ou moins grande difficulté pour résoudre l'équation **(II.2)** dépend de l'écriture plus ou moins complexe de l'opérateur de collision, mais également de la plus ou moins considérer. Dans ce qui suit, on va d'abord décrire les hypothèses simplificatrices utilisées simplifiée de l'équation de Boltzmann, ainsi que la forme intégral-différentielle finale sous la quelle l'équation de Boltzmann peut être numériquement résolue.

II.2.2 Opérateur de collision :[19]

Afin de lineariser l'opérateur de collision, une première série d'hypothèses simplificatrices concernant la nature des collisions est nécessaire :

- ❖ Le milieu gazeux est supposé assez dilué si bien que seules les collisions binaires sont prises en compte.
- ❖ Les collisions sont supposées instantanées et locales de sorte que l'opérateur de collisions agisse sur la fonction de distribution des électrons par l'intermédiaire de la vitesse seulement.
- ❖ La fonction de distribution des atomes (ou molécules) neutres (excités ou non) est supposée maxwellienne à la température T du gaz.

Dans ces conditions l'expression suivante :

$$C(f) = J(f) - \nu(v) f$$

Peut être considérée comme une bonne approximation de collision.

$J(f) dv$ représente le nombre d'électron peuplant l'élément de volume dv de l'espace des phases à l'instant t .

$\nu(v) f dv$ est le nombre d'électrons qui dépeuplent le volume à ce même instant.

$\nu(v) f$ est le produit de la fréquence de collision totale $\nu(v)$ qui dépend de la vitesse v et la fonction de distribution $f(r, v, t)$. La fréquence de collision totale représente l'ensemble des processus de collision électron-atome et d'interaction coulombienne (électron-ion, électron-électron).

Contrairement au terme de dépeuplement ou les collisions atome-atome ne jouent aucun rôle, le terme de peuplement inclut non seulement les collisions électron-atome, électron-électron, et électron-ion mais aussi les collisions atome-atome qui entraînent l'apparition de nouveaux électrons dans le système :

$$J = J_{e-at} + J_{col} + J_{at-at}$$

Les termes de peuplement qui vont suivre sont écrits dans le cas d'un mélange gazeux inclut le gaz (le gaz 'ig' à une masse M_{ig} et une pression partielle (N_{ig}/N)).

Ces termes dépendent uniquement de la partie isotrope $\phi_0(r, v, t)$ de la fonction de distribution $f(r, v, t)$ vu que la diffusion des électrons après un choc électron-atome est supposée isotrope.

- **Terme de peuplement relatif aux électron-atome J_{e-at}**

$$J_{e-at} = J_{el} + J_{ex} + J_{sup} + J_{ion} + J_{cu}$$

*Le terme J_{el} représente le peuplement par collisions élastiques ce décompose en un premier terme qui exprime la rotation du vecteur vitesse au cours du choc, un deuxième terme qui exprime l'échange d'énergie et un troisième terme relatif à l'agitation thermique du gaz cible :

$$NJ_{ex}(\phi_0(r, v, t)) = \frac{1}{v} \sum_{ig=1}^{ng} \left\{ N_{ig} \sum_{j=1}^{n_{ex}^{ig}} V_{ex,j}^2 \sigma_{ex,j}^{ig}(v_{ex,j}) \phi_0(r, v_{ex,j}, t) \right\}$$

$$NJ_{el}(\phi_0(r, v, t)) = \sum_{ig=1}^{ng} \left\{ N_{ig} v \sigma_m^{ig}(v) \phi_0(r, v, t) \right\} \\ + \frac{m_e N_{ig}}{M_{ig}} \frac{\partial}{v^2 \partial v} \left\{ v^4 \sigma_m^{ig} \phi_0(r, v, t) + \frac{KT}{m_e v} \frac{\partial}{\partial v} \phi_0(r, v, t) \right\}$$

σ_m^{ig} : la section efficace de transfert de la quantité de mouvement par collision élastique.

K : constante de Boltzmann.

T : température du mélange gazeux.

m_e : masse de l'électron.

*Le terme J_{ex} représente le peuplement par excitation électronique des atomes à partir du niveau fondamental :

$$NJ_{ex}(\phi_0(r, v, t)) = \frac{1}{v} \sum_{ig=1}^{ng} \left\{ N_{ig} \sum_{j=1}^{n_{ex}^{ig}} V_{ex,j}^2 \sigma_{ex,j}^{ig}(v_{ex,j}) \phi_0(r, v_{ex,j}, t) \right\}$$

$$\text{Avec : } V_{ex,j}^2 = v^2 + \frac{2}{m_e} \varepsilon_{ex,j}^{ig}$$

$\varepsilon_{ex,j}^{ig}$: L'énergie d'excitation de seuil des atomes du gaz ig du niveau fondamental au niveau excite j.

n_{ex}^{ig} : Le nombre de niveaux excite d'un atome du gaz ig.

$\sigma_{ex,j}^{ig}$: La section efficace d'excitation du niveau fondamental au niveau excite j.

* Le terme J_{sup} représente le peuplement par collision super-élastiques

$$NJ_{sup}(\phi_0(r, v, t)) = \frac{1}{v} \sum_{ig=1}^{ng} \left\{ \sum_{j=1}^{n_{ex}^{ig}} N_{ig}^j V_{sup,j}^2 \sigma_{sup,j}^{ig}(v_{sup,j}) \phi_0(r, v_{sup,j}, t) \right\}$$

$$\text{Avec } V_{sup,j}^2 = v^2 + \frac{2}{m_e} \varepsilon_{sup,j}^{ig}$$

$\varepsilon_{sup,j}^{ig}$: L'énergie de destruction de seuil de l'état excite j par collision super-élastique.

N_{ig}^j : La densité des atomes du gaz ig dans leurs excites.

$\sigma_{sup,j}^{ig}$: La section efficace de destruction de l'état excite j par collision super-élastique.

* Le terme J_{ion} est peuplement par ionisation des atomes à partir de leurs niveaux fondamentaux :

$$NJ_{ion}(\phi_0(r, v, t)) = \frac{1}{v} \sum_{ig=1}^{ng} N_{ig} \left\{ \frac{1}{\Delta} v_1^2 \sigma_{ion}^{ig}(v_1) \phi_0(r, v_1, t) + \frac{1}{1-\Delta} v_2^2 \sigma_{ion}^{ig}(v_2) \phi_0(r, v_2, t) \right\}$$

$$\text{Avec : } v_1^2 = \frac{1}{\Delta} v^2 + \frac{2}{m_e} \varepsilon_{ion}^{ig} \quad \text{et} \quad v_2^2 = \frac{1}{1-\Delta} v^2 + \frac{2}{m_e} \varepsilon_{ion}^{ig}$$

σ_{ion}^{ig} : La section efficace d'ionisation à partir de l'état fondamental.

* Le terme J_{cu} représente le peuplement par ionisation cumulative :

$$NJ_{cu}(\phi_0(r, v, t)) = \frac{1}{v} \sum_{ig=1}^{ng} \sum_{j=1}^{n_{ex}^{ig}} N_{ig}^j \left\{ \frac{1}{\Delta} v_{1cu,j}^2 \sigma_{cu,j}^{ig}(v_{1cu,j}) \phi_0(r, v_{1cu,j}, t) + \frac{1}{1-\Delta} v_{2cu,j}^2 \sigma_{cu,j}^{ig}(v_{2cu,j}) \phi_0(r, v_{2cu,j}, t) \right\}$$

$$\text{Avec : } v_{1cu,j}^2 = \frac{1}{\Delta} v^2 + \frac{2}{m_e} (\varepsilon_{ion}^{ig} - \varepsilon_{ex,j}^{ig}) \text{ et } v_{2cu,j}^2 = \frac{1}{1-\Delta} v^2 + \frac{2}{m_e} (\varepsilon_{ion}^{ig} - \varepsilon_{ex,j}^{ig})$$

Δ est un paramètre qui caractérise la répétition de l'énergie entre deux électrons diffusé et éjecté :

$$\frac{\text{énergie de l'électron diffusé}}{\text{énergie de l'électron éjecté}} = \frac{\Delta}{1-\Delta}$$

$\sigma_{cu,j}^{ig}$: la section efficace d'ionisation à partir du même niveau .

- **Terme de peuplement relatif aux collisions atome-atome J_{at-at}**

$$J_{at-at} = J_{pen} + J_{mm}$$

*Le terme J_{at-at} correspond au peuplement par collisions penning J_{pen} et par collisions entre deux atomes métastables J_{mm} qui entraînent la création de nouveaux électrons dans le milieu. Ce terme, contrairement aux termes précédents. Ne dépend pas directement de la fonction de distribution $\phi_0(v, r, t)$, il dépend uniquement des pressions partielles des atomes mis en jeu dans les réactions atome-atome et des fréquences de collision correspondants.

*Le terme J_{pen} représente le peuplement par collisions Penning :

$$NJ_{pen} = \sum_{ig=1}^{ng} \frac{N_{ig}}{n_e} \sum_{ig=1}^{ng} X_{ig-jg}^{pen} v_{ig-jg}^{pen}(t) \delta(v - v_{pen})$$

Avec : $v_{pen}^2 = \frac{2}{m_e} (\varepsilon_{met}^{ig} - \varepsilon_{ion}^{jg})$ et $v_{ig-jg}^{pen} = N_{jg} v_{ig-jg}^r \sigma_{ig-jg}^{pen}$

ε_{met}^{ig} : l'énergie d'excitation du niveau métastable d'un atome du gaz " ig " .

ε_{ion}^{jg} : L'énergie d'ionisation d'un atome du gaz " jg " .

σ_{ig-jg}^{pen} : La section efficace de collision entre un atome du gaz ig dans un état métastable, et un atome du gaz jg dans son état fondamentale.

v_{ig-jg}^r : La vitesse relative moyenne entre les atomes du gaz ig et ceux du gaz " jg " .

$$X_{ig-jg}^{pen} = 1 \text{ si } \varepsilon_{met}^{ig} > \varepsilon_{ion}^{jg} \text{ si non } X_{ig-jg}^{pen} = 0$$

*Le terme J_{mm} représente le peuplement par collisions entre atomes métastables :

$$NJ_{mm} = \sum_{ig=1}^{ng} \frac{N_{ig}}{n_e} \sum_{jg=1}^{ng} X_{ig-jg}^{mm} v_{ig-jg}^{mm}(t) \delta(v - v_{mm})$$

Avec : $v_{mm}^2 = \frac{2}{m_e} (\varepsilon_{met}^{ig} + \varepsilon_{met}^{jg} - \varepsilon_{ion}^{jg})$ et $v_{ig-jg}^{mm} = N_{ig}^m(t) v_{ig-jg}^r \sigma_{ig-jg}^{mm}$

σ_{ig-jg}^{mm} : est la section efficace de collision entre deux atomes, dans des états métastables, des deux gaz "ig " et " jg " .

$$X_{ig-jg}^{mm} = 1 \text{ si } (\varepsilon_{met}^{ig} + \varepsilon_{met}^{jg}) > \varepsilon_{ion}^{jg} \quad . \text{ Si non } X_{ig-jg}^{mm} = 0$$

Pour expliquer les rapports du nombre d'atomes métastables du gaz " ig " sur celui des électrons N_{ig}^m/n_e , il est nécessaire de coupler, à l'équation de Boltzmann, les équations de conservation de différentes espèces participantes à la création et à la disparition des électrons et atomes métastables.

▪ **Terme de peuplement par interactions coulombiennes J_{coul}**

$$J_{coul} = J_{e-e} + J_{e-ion}$$

Le problème des interactions coulombiennes est que le champ coulombien de l'électron projectile interagit simultanément avec le champ de l'ensemble des particules chargées se trouvant dans son rayon d'action. Cela implique une notion d'interactions coulombiennes sont une succession d'interaction binaires entraînant de faibles dérivation après le choc.

Dans ces conditions, le terme de collisions coulombien peut être déduit de l'opérateur de Fokker-Planck écrit dans le cas de collision entre particules chargées [19].

L'opérateur coulombien dans le cas des interactions électron-électron :

$$NJ_{e-e}(\phi_0(r, v, t)) = \frac{1}{2v^2} \frac{\partial}{\partial v} \left\{ v_{e-e} v^3 \left[A_1(v, t) + A_2(v, t) + A_3(v, t) v \frac{\partial}{\partial v} \right] \phi_0(r, v, t) \right\}$$

Avec :

$$A_1(v, t) = \frac{4\pi}{n_e} \int_0^v \phi_0(r, v', t) v'^2 dv'$$

$$A_2(v, t) = \frac{4\pi}{3v^2 n_e} \int_0^v \phi_0(r, v', t) v'^4 dv'$$

$$A_3(v, t) = \frac{4\pi}{3n_e} \int_0^\infty \phi_0(r, v', t) v'^2 dv'$$

Dans le cas des interactions électron-ion :

$$NJ_{e-ion}(\phi_0(r, v, t)) = \sum_{ig=1}^{ng} \left\{ N_{ig}^+ v \sigma_{e-ion}^{ig}(v) \phi_0 + \frac{m_e}{M_{ig}} \frac{N_{ig}^+}{v^2} \frac{\partial}{\partial v} \left\{ v^4 \sigma_{e-ion}^{ig}(v) \left[\phi_0 + \frac{KT}{m_e v} \frac{\partial}{\partial v} \phi_0 \right] \right\} \right\}$$

II.2.3 Théorie cinétique : [7,12,19]

Dans ce qui précède, c'est l'opérateur de collision de l'équation de Boltzmann qui vient d'être explicite. Sa linéarisation moyennant un certain nombre d'hypothèses a permis une écriture de cet opérateur relativement simple et accessible du point de vue du calcul numérique.

Maintenant, il reste à transformer le terme de gauche de l'équation (II. 2) car dans la pratique, il est inutile de résoudre l'équation de Boltzmann sous sa forme complète spatio- temporelle.

Dans ce qui suit, on va utiliser des simplifications possibles grâce à des conditions physique assez particulière (régime stationnaire ou milieu spatialement infini ou régime hydrodynamique ou géométrie mono-dimensionnelle, géométrie révolution, etc. .) .Ces simplifications sont envisagées dans le cadre de la théorie cinétique classique du régime hydrodynamique .Il s'agit du développement de la fonction de distribution $f(r, v, t)$ en série de gradients spatiaux de la densité électronique $n(r, t)$.D'autres simplifications sont également possibles dans le cadre d'une approche cinétique plus récente basée su un développement de la fonction de distribution $f(r, v, t)$ en série de gradients temporels la densité électronique $n(r, t)$.

Pour des raison de simplifications d'écriture des équations, nous allons intéresser au cas d'une géométrie mono-dimensionnelle (l'axe Oz choisi correspond à la direction de l'accélération des forces extérieures γ) .donc la fonction de distribution $f(r, v, t)$ peut être développée :

- Soit en série de gradients spatiaux de la densité $n(z, t)$:

$$f(z, v, t) = \sum_{i=0}^{\infty} F^{(i)}(v, t) \Theta (-\partial_z)^i n(z, t) \quad (\text{II.3})$$

Les fonctions de distribution $F^{(i)}(v, t)$ d'ordre i vérifient les conditions de normalisation suivantes :

$$F^{(0)}(v, t) = \frac{1}{n(t)} \int_{-\infty}^{+\infty} f(z, v, t) dz$$

Avec :

$$n(t) = \int_{-\infty}^{+\infty} n(z, t) dz \quad \text{et} \quad \int F^{(i)}(v, t) dv = \begin{cases} 1 & \text{si } i = 0 \\ 0 & \text{si } i \neq 0 \end{cases}$$

Θ représente le produit tensoriel contracté d'ordre i (le résultat du produit est toujours un scalaire).

- Soit en série de gradients temporels de la densité $n(z, t)$:

$$f(z, v, t) = \sum_{i=0}^{\infty} G^{(i)}(v, z) \Theta (-\partial_t)^i n(z, t) \quad (\text{II.4})$$

Avec :

$$n(z) = \int_0^{+\infty} n(z, t) dt \quad \text{et} \quad \int G^{(i)}(v, z) dv = \begin{cases} 1 & \text{si } i = 0 \\ 0 & \text{si } i \neq 0 \end{cases}$$

Le développement (II.3) est valable lorsque les gradients spatiaux de la densité sont relativement faibles (les électrons sont suffisamment éloignés de la source d'électrons).

Il permet la simulation des expériences de mesures des paramètres de transport dites (time of flight (TOF) dans lesquelles la résolution spatiale du spectre électronique en fonction du temps est observée.

Tandis que le développement (II.4) est valable lorsque les gradients temporels de la densité sont à leur tour relativement faibles .Il permet la simulation des expériences de mesure des paramètres de transport dites « Arrival time spectre (ATS) dans lesquelles la résolution temporelle du spectre électronique est observée.

II.2.3.1 Développement de la fonction de distribution $f(z, v, t)$ en série de gradients spatiaux :

Tout d'abord écrivons l'équation de continuité des électrons obtenue en intégrant l'équation de Boltzmann (II.2) dans l'espace des vitesses :

$$\frac{\partial n(z, t)}{\partial t} + \frac{\partial \phi(z, t)}{\partial z} = \int C(f) dv \quad (\text{II.5})$$

$\phi(z, t)$ Représente le flux d'électron et $\int C(f) dv$ le taux d'ionisation net.

$$\phi(z, t) = \int v_z f(z, v, t) dv \quad \text{et} \quad \int C(f) dv = n(z, t) \Omega^{(0)}(z, t)$$

v_z Représente la projection du vecteur vitesse sur l'axe Oz

Si le développement de l'équation (II.3) est injecté dans l'équation de continuité on obtiendra l'équation suivante :

$$\left[\frac{\partial}{\partial t} - \sum_{i=1}^{\infty} \Omega^{(i)} \Theta (-\partial_z) \right] n(z, t) = 0 \quad (\text{II.6})$$

$\Omega^{(1)}(t)$ sont les paramètres de transport d'ordre i à l'instant t .

Si le développement (II.6) est tronqué à l'ordre 2, on obtiendra l'équation de conservation classique qui est appelée de diffusion généralisée :

$$\frac{\partial}{\partial t} n(z, t) - \Omega^{(0)}(t) n(z, t) + \Omega^{(1)}(t) \frac{\partial}{\partial z} n(z, t) - \Omega^{(2)}(t) \frac{\partial^2}{\partial z^2} n(z, t) = 0 \quad (\text{II.7})$$

Avec

$$\Omega^{(0)}(t) = \frac{1}{n(t)} \frac{dn(t)}{dt}$$

$$\Omega^{(1)}(t) = v_a(t) = \frac{d\langle z \rangle(t)}{dt}$$

$$\Omega_L^{(2)}(t) = \Omega^{(2)}(t) = D_L(t) = \frac{d}{2dt} \langle z^{*2} \rangle(t)$$

$$\Omega_T^{(2)}(t) = \Omega^{(2)}(t) = D_T(t) = \frac{d}{4dt} [\langle x^{*2} \rangle(t) + \langle y^{*2} \rangle(t)]$$

$\Omega^{(0)}(t)$ est la fréquence d'ionisation nette,

$\Omega^{(1)}(t)$ est la vitesse de dérive relative a l'expérience TOF

$\Omega_L^{(2)}(t)$ est le coefficient de diffusion longitudinal,

$\Omega_T^{(2)}(t)$ est coefficient de diffusion transversal,

Avec $\langle z^* \rangle = z - \langle z \rangle$

Finalement, les équations cinétiques vérifiant les fonctions de distribution $F^{(i)}(v, t)$ s'obtiennent en multipliant l'équation (II. 2) par z^i et en l'intégrant dans l'espace des positions dz , il vient :

Pour $i = 0$:

$$[\partial_t + \gamma \nabla_v + \Omega^{(0)}(t) + v - J] F^{(0)}(v, t) = 0 \quad (\text{II. 8. 1})$$

Pour $i > 0$

$$[\partial_t + \gamma \nabla_v + \Omega^{(0)}(t) + v - J] F^{(i)}(v, t) = v F^{(i-1)}(v, t) - \sum_{j=1}^i \Omega^{(j)}(t) F^{(i-j)}(v, t) \quad (\text{II. 8. 2})$$

II.2.3.2 Développement de la fonction de distribution $f(z, v, t)$ en série de gradients Temporels :

Si on utilise de la relation (II. 4) , puis on l'injecte dans l'équation de continuité, on obtient l'équation de conservation classique qui s'écrit lorsque le développement est tronqué à d'ordre de 2 :

$$\frac{\partial}{\partial z} n(z, t) - \alpha^{(0)}(z) n(z, t) + \alpha^{(1)}(z) \frac{\partial}{\partial z} n(z, t) - \alpha^{(2)}(z) \frac{\partial^2}{\partial z^2} n(z, t) = 0 \quad (\text{II. 9})$$

Les coefficients $\alpha^{(i)}(z)$ sont les paramètres de transport d'ordre i relatifs à l'analyse du spectre électronique sur le plan z .

$\alpha^{(0)}(z) = \frac{1}{n(z)} \frac{dn(z)}{dz}$: est le coefficient d'ionisation nette.

$\alpha^{(1)}(z) = \frac{d\langle t \rangle(z)}{dz}$: L'inverse de la vitesse de dérive moyenne relative à l'expérience ATS .

$\alpha^{(2)}(z) = \frac{d}{2dz} \langle t^{*2} \rangle(z)$: est la qualité symétrique au coefficient de diffusion longitudinal par apport à t et t_z

$$t^* = t - \langle t \rangle \quad \text{et} \quad \langle t \rangle = \frac{1}{n(z)} \int_0^{+\infty} tn(z, t) dt$$

$n(z)$ est le nombre total d'électrons qui traverse le plan « Z » de $t = 0$ à $+\infty$.

$$n(z) = \int_0^{+\infty} dt n(z, t)$$

Finalement, les équations cinétiques vérifiant les fonctions de distribution des électrons $G^{(i)}(v, z)$ s'obtiennent en multipliant l'équation (II. 2) de départ par t^i et en intégrant dans l'espace des temps dt , il vient :

Pour $i = 0$:

$$[v_z \partial_z + \gamma \nabla_v + v_z \alpha^{(0)} + v - J] G^{(0)}(v, z) = 0 \quad (\text{II. 10. 1})$$

Pour $i > 0$:

$$[v_z \partial_z + \gamma \nabla_v + v_z \alpha^{(0)} + v - J] G^{(i)}(v, z) = v G^{(i-1)}(v, z) - v_z \sum_{j=1}^i \alpha^j G^{(i-j)}(v, z) \quad (\text{II. 10. 2})$$

II.2.3.3 Développement en série de polynôme de Legendre des fonctions d'ordre zéro

$F^{(0)}(v, t)$ et $G^{(0)}(v, Z)$

a) Développement de $F^{(0)}(v, t)$:

La fonction $F^{(0)}(v, t)$ peut être décomposée en série de polynôme de Legendre $P_L(\cos\theta)$ d'ordre 1 (θ : l'angle entre v et l'axe Oz) :

$$F^{(0)}(v, t) = \phi_0^0(v, t) + \cos\theta \phi_1^0(v, t)$$

$$\text{Avec } \phi_0^0(v, t) = \frac{2L+1}{2} \int_{-1}^{+1} P_L(\cos\theta) F^{(0)}(v, t) d(\cos\theta); \quad L = 0 \text{ et } 1$$

ϕ_0^0 représente la partie isotrope de la fonction de distribution $F^{(0)}(v, t)$.

ϕ_1^0 représente la partie anisotrope de la fonction de distribution $F^{(0)}(v, t)$.

L'intérêt de ce développement est de faciliter la résolution numérique de l'équation de départ **(II.8.1)** en effet, la fonction $F^{(0)}(v, \theta, \varphi, t)$ en coordonnées sphériques est remplacée par les fonctions $\phi_0^0(v, t)$ et $\phi_1^0(v, t)$.

En conséquence, la réduction du nombre des variables à considérer. Les équations vérifiant les fonctions $\phi_0^0(v, t)$ et $\phi_1^0(v, t)$ sont obtenues en multipliant l'équation **(II.8.1)** par d'abord $P_0(\cos\theta)$ et en intégrant le tout par rapport à l'espace angulaire ($\cos\theta$) :

$$\frac{\partial \phi_0^0(v, t)}{\partial t} + \frac{\gamma}{3v^2} \frac{\partial v^2 \phi_1^0(v, t)}{\partial v} + \phi_0^0(v, t) [\Omega^{(0)}(t) + v(v)] = NJ(\phi_0^0(v, t)) \quad \text{(II.11.1)}$$

En suite multipliant la même équation par $P_1(\cos\theta)$ et en l'intégrant par rapport à $(\cos\theta)$

$$\frac{\partial \phi_1^0(v, t)}{\partial t} + \gamma \frac{\partial \phi_0^0(v, t)}{\partial v} + \phi_1^0(v, t) [\Omega^{(0)}(t) + u(v)] = 0 \quad (\text{II. 11. 2})$$

b) *Développement* de $G^{(0)}(v, Z)$:

De la même manière que le développement de $F^{(0)}(v, t)$ on procède au développement de $G^{(0)}(v, z)$:

$$G^{(0)}(v, z) = g_0^0(z, v) + \cos\theta g_1^0(z, v)$$

Avec $g_1^0(z, v) = \frac{2L+1}{2} \int_{-1}^{+1} P_1(\cos\theta) G^{(0)}(z, v) d(\cos\theta)$; $L=0$ et 1

Les équations vérifiant les fonctions de distribution $g_0^0(z, v)$ et $g_1^0(z, v)$ sont obtenus en multipliant l'équation (II. 10. 1) par $P_L(\cos\theta)$ (avec $L=0$ puis $L=1$)

En intégrant l'ensemble par rapport a l'espace angulaire ; il vient :

$$\frac{v}{3} \frac{\partial g_1^0(z, v)}{\partial z} + \frac{\gamma}{3v^2} \frac{\partial v^2 g_1^0(z, v)}{\partial v} + \frac{v}{3} \alpha^{(0)}(z)(z, v) + u(v) g_0^0(z, v) = NJ(g_0^0(v, t)) \quad (\text{II. 12. 2})$$

Les équations (II.11.1) et (II.11.2) ainsi que les équations (II.12.1) et (II.12.2) forment deux système à deux équations aux dérivées partielles du premier ordre en t (ou en z) et du second en v.

Les solutions $\phi_0^0(v, t)$ et $\phi_1^0(v, t)$ (ou $g_0^0(z, v)$ et $g_1^0(z, v)$) sont étroitement couplées. Ces systèmes peuvent être résolus par une méthode numérique aux différences finies.

Pour plus de détails sur la méthode de calcul de la fonction de distribution des électrons par résolution de l'équation de Boltzmann, le lecteur pourra consulter la référence [17], [22] et [29].

Dans ce qui précède, on a décrit la méthode de calcul des fonctions de distribution des électrons par résolution directe de l'équation de Boltzmann. Les limites des informations apportées par les fonctions de distribution sont atteintes dès l'on s'intéresse à leur évolution spatio-temporelle. Or, il y a des décharges qui ne peuvent être décrites que si on tient compte du régime hors-équilibre dans l'espace temps et position.

La prise en compte du non-temporel est beaucoup plus facile à l'aide de la méthode de Monte - Carlo, que par la résolution directe de l'équation de Boltzmann.

II.3 La Méthode De Monte Carlo :

II.3.1 Historique :

La méthode de Monte Carlo est une méthode ancienne, son développement et son usage ne sont pas récents. En effet, c'est au début du 20^{ème} siècle qu'elle a été utilisée pour examiner l'équation de Boltzmann. En 1908 le fameux statisticien Student l'a employée pour l'estimation du coefficient de corrélation dans sa distribution "t". Plus tard, le terme "Monte Carlo" était introduit par Von Newman et Ulam durant la deuxième guerre mondiale, comme un " mot de passe" dans le travail secret à Los Alamos ; et c'est à partir de 1944, dans le domaine de neutronique, que les méthodes de Monte Carlo ont connu un véritable essor, elles étaient appliquées aux problèmes liés à la bombe atomique, en simulent directement le comportement de la diffusion aléatoire des neutrons dans les matériaux fissionnables. Par la suite elles étaient utilisées pour évaluer les intégrales complexes multidimensionnelles et simulation du mouvement de particules dans un fluide.

La méthode de Monte Carlo continue jusqu'à présent à avoir une importance croissante. Cette importance est d'une part à l'évolution de plus rapide des calculateurs et d'autre part à l'amélioration des technique Monte Carlo.

II.3.2 Principe de la méthode :

La méthode de Monte Carlo est basée sur les lois de probabilité et de statistique. Elle consiste, en général, à simuler un ensemble d'événement difficilement réalisable, par un autre ensemble d'événements plus facilement réalisables.

Cette simulation est réalisée en faisant correspondre à un événement du premier ensemble (ensemble à simuler) un ou plusieurs événements du deuxième. Son but est de réaliser, de façon fictive, des événements en connaissant par avance leurs probabilités d'apparitions. En général, cette simulation est faite par des tirages de nombres aléatoires compris entre 0 et 1. Les nombres aléatoires sont en pratique générés sur calculateur à l'aide de formule mathématique simple.

Ce sont en réalité des nombres pseudo aléatoires car la séquence de nombres générés est reproductible dès lors qu'elle est initialisée avec le même nombre «germe».

Cette séquence est également périodique avec une période qui doit être la plus longue possible car pour période donnée, la qualité du résultat recherché augmente en même temps que le nombre de tirage.

II.3.3 Générateur de nombres aléatoires :

Le générateur de nombres aléatoires est inclus dans plusieurs langages de programmation, il est généralement basé sur une méthode linéaire simple. Dans cette méthode chaque terme dans la séquence peut être trouvé suivant le terme précédent par la relation :

$$x_{n+1} = (ax_n + c) \text{ mod } m$$

Où x_0 est le nombre germe, a , c , m des entiers positifs.

$\gamma = x \text{ mod } m$ signifie que, si x est supérieur à m , alors γ est égale au reste de la division de x par m .

Les nombres aléatoires r compris entre 0 et 1 sont donnés par :

$$r_n = \frac{x_a}{m}$$

La période, en général, dépend des trois paramètres :

- Le multiplicateur a .
- L'incrément c .
- Le modulo m .

Si on choisit soigneusement a , c et m tel que la période maximale est obtenue, alors tous les entiers possibles entre 0 et $m-1$ doivent se produire dans cette séquence et par conséquent avoir un nombre maximum de nombres aléatoires r_n dans l'intervalle $[0,1[$.

II.3.4 Relation entre la méthode de Monte Carlo et les mesures de probabilités :

Soit un ensemble bien défini d'événements incompatibles E_i ($i=1,n$). A l'issue d'une expérience, un seul de ces événements est réalisé. Cette épreuve est répétée N fois.

Si l'événement E_i est réalisé N_i fois, alors la probabilité de l'événement E_i :

$$P_i = \frac{N_i}{N}$$

Avec $\sum_{i=1}^n P_i = 1$

De plus, nous savons qu'au cours de ces expériences, un événement donné E , ayant une probabilité de réalisation P_i non nulle, sera tôt ou tard réalisée. Par conséquent, plus l'événement en question tarde à se produire plus la chance de le voir apparaître augmente, et cette chance est d'autant plus grande que la probabilité de cet événement est grande.

La simulation Monte Carlo est basée sur un principe similaire. Son but, à l'inverse des expériences de mesure de probabilité, est de réaliser de façon fictive les événements en connaissant par avance leurs probabilités d'apparition. Ces événements sont associés au tirage de nombres aléatoires de distribution uniforme comprise entre 0 et 1 et pour l'événement E_i bien déterminé et de probabilité bien connue P_i (comprise entre 0

et 1) et d'après le principe ci-dessus, tôt ou tard les nombres aléatoires tomberont dans le sous intervalle correspondant à P_i (figure II.1).

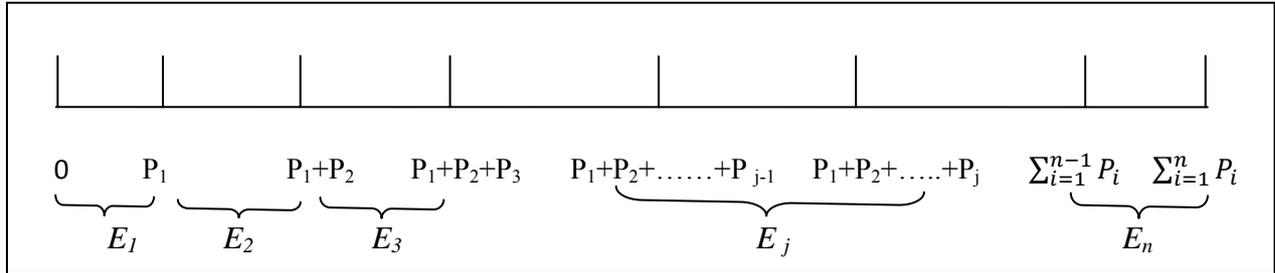


Figure (II.1) Représentation schématique des événements E_i et les sous intervalles correspondant aux probabilités d'occurrence P_i .

Il est évident que le nombre de réalisation de l'évènement E_i est directement proportionnel à la probabilité P_i . Donc, connaissant la probabilité P_i de chaque évènement E_i la simulation Monte Carlo de l'ensemble des évènements peut se faire en représentant la probabilité de chaque évènement par un sous-intervalle à l'intérieur de l'intervalle $[0,1]$, puis on tire un nombre aléatoire R compris entre 0 et 1. Ce nombre R appartient nécessairement à l'un des sous intervalles correspondant aux différentes probabilités P_i , ensuite c'est l'évènement correspondant E_i qui est supposé de produire.

Cette manière de simuler des évènements peut être considérée comme une générale à suivre pour appliquer la méthode de Monte Carlo tout en rappelant que l'ensemble des évènements à étudier doit être incompatible et les probabilités d'occurrence de chaque évènement doivent être connues par avance.

Le principe fondamental de la méthode de Monte Carlo appliquée à un nombre très grand de collisions successives dans des petits intervalles de temps, peut être formulé d'une manière brève comme suit :

On affecte, arbitrairement, une variable x de l'intervalle $[0, x_m]$ aux évènements de collisions

$C_1, C_2, C_3, \dots, C_m$.

Avec : $K - 1 \leq x < K$ représente l'événement C_k .

Si $P(x) dx$ est la probabilité pour que x soit entre x et $x + dx$, avec :

$a \leq x < b$ et

$$\int_a^b P(x) dx = 1$$

Alors, le nombre aléatoire R est défini par la fonction de distribution de probabilité

$$R = \int_a^x P(x) dx$$

x est donc déterminé uniquement comme une fonction de R .

Si R est uniformément distribué dans l'intervalle $[0, 1[$ alors x tombe dans l'intervalle $[x, x + dx[$

avec une fréquence de $P(x) dx$.

Les problèmes traités par les méthodes de Monte Carlo sont nombreux et variés (le lecteur intéressé pourra consulter les ouvrages suivant : Hummersly [13], Ridley [15], Rubinstein [18], Claude [24]), cette méthode a donné entière satisfaction dans la simulation du mouvement de particules dans un fluide et problème liés aux intégrales multiples. La simulation du déplacement des électrons dans un milieu gazeux sous l'effet des collisions et l'action de champ électrique consiste à suivre l'évolution d'un grand nombre d'électrons, depuis leur création jusqu'à leur disparition par collision ou dépassement des limites spatiales ou temporelles fixées au début de la simulation.

Dans leur déplacement, les électrons suivent des trajectoires entièrement déterminées par le champ électrique appliqué, suivi d'un choc avec les molécules de gaz. En fait, la simulation par une méthode Monte Carlo nécessite tout simplement la connaissance de la trajectoire de la vitesse de coordonnées v_x, v_y , et v_z de chaque électron à tout instant t et en tout point r de (x, y, z) . Au cours de cette simulation, on relève pour chaque électron, les composantes de son vecteur position et son vecteur vitesse, en fonction du temps.

II.4 Conclusion :

Dans ce chapitre, on décrit deux méthodes de calcul des fonctions de distribution des électrons, soit par résolution directe de l'équation de Boltzmann soit par simulation de Monte Carlo.

On commence par quelques considérations sur l'équation de Boltzmann, les difficultés rencontrées pour la résolution dans le cas général, les hypothèses simplificatrices admises concernant l'opérateur de collision et le terme de gauche de l'équation de Boltzmann.

En suite, on a décrit dans le cas général, la méthode de Monte Carlo cette méthode est un outil puissant pour la simulation des électrons dans un milieu gazeux, vu quelle consiste à suivre l'évolution spatio-temporelle d'un grand nombre d'électrons depuis leur création jusqu'à leur disparition.

Dans le chapitre suivant on va détailler cette méthode de simulation pour le calcul des fonctions de distribution et les paramètres de transport électronique dans un gaz.

Chapitre III

CALCUL DES PARAMETRES DE TRANSPORT PAR LA METHODE DE MONTE -CARLO

III.1 Introduction :

La modélisation des décharges électriques dans un milieu gazeux, on doit savoir un nombre de données de base tels que : sections efficaces de collision électronique et coefficient de transport.

La connaissance de toutes les sections efficaces en fonction de l'énergie est indispensable pour calculer les paramètres de transport.

Dans ce chapitre on va décrire une méthode de simulation de Monte -Carlo qui capable de suivre le mouvement des électrons depuis leur émission jusqu'à leurs disparition (collision élastique, ionisation, attachement).

Le développement du comportement électronique par ionisation ou n'importe quel type de collision de l'électron dans le gaz comprend des paramètres de transport fondamentaux tel que la vitesse de dérive et l'énergie moyenne.

III.2 Méthode de simulation de Monte -Carlo :

La méthode de monte Carlo est appliquée dans les problèmes de la décharge électriques dans un gaz. On considère un gaz dans un champ électrique uniforme et dans la direction z normale aux électrodes à $t= 0$. Les n_0 électrons initiaux sont libres de la cathode avec une énergie initiale ϵ_0 , ils sont répartis aléatoirement entre les électrodes.

L'électron se déplace dans un pas dt ou une distance ds sous l'action des champs électriques E , d'où on parle l'approche du temps de vol moyen et l'approche du libre parcours moyen et la technique de collision nulle .La nouvelle position de l'électron sont calculées selon l'équation de mouvement ; la probabilité de collision et la nature de collision sont déterminer par comparaison avec des nombre aléatoires génères par ordinateur. Les procédures des approches du libre parcours moyen, du temps de vol moyen et la technique de collision nulle son ne discute séparément ci –dessous.

III.2.1 Approche du libre parcours moyen :

Le libre parcours moyen exprime la distance moyenne parcourue une particule entre deux chocs du à un processus donné.

Dans le cas ou le champ électrique est uniforme, l'électron se déplace suivant une orbite parabolique , jusqu'à ce qu'il rentre en collision, avec une des molécules du gaz .

Le libre parcours moyen est donné par :

$$\lambda = \frac{1}{N \sigma_T(\epsilon)} \quad (\text{III. 1})$$

Le libre parcours moyen sera inversement proportionnel à la somme de ces différentes sections efficaces de collision.

$\sigma_T(\epsilon)$: La section efficace totale de collision en fonction de l'énergie.

N : La densité du gaz.

ε : L'énergie de l'électron en (eV).

La section efficace est en fonction de l'énergie de l'électron, ce qui implique que le libre parcours moyen dépend aussi de l'énergie de l'électron.

Le libre parcours moyen est divisé en petites fractions ds tel que :

$$ds = \frac{\lambda}{k} \quad (\text{III. 2})$$

k : est généralement choisi entre 10 et 100.

La probabilité que l'électron entre en collision avec une des molécules de gaz dans cette marche de distance ds est calculée comme suit :

$$P_1 = \frac{ds}{\lambda} \quad (\text{III. 3})$$

Plus ds est petite plus le temps de calcul augmente et on obtient une meilleure approximation de simulation.

L'événement de la collision est décidé par un nombre aléatoire. Si aucune collision ne se produit dans la distance ds , le mouvement de l'électron pour le pas suivant sera simulé. Dans le cas où une collision se produit, les paramètres de mouvement de l'électron vont être modifiés selon le type de collision qui s'est produit et ce type de collision est décidé par un autre nombre aléatoire, ainsi la nouvelle direction de l'électron après la collision est assignée selon une distribution isotrope. La procédure est répétée pour le pas suivant jusqu'à ce que la seconde électrode soit atteinte.

III.2.2 Approche du temps de vol moyen :

Le temps de vol moyen à la période pendant la quelle une particule ne fait pas de collision et n'est plus soumise qu'aux lois de la mécanique classique. Le temps de vol est bien entendu lié aux sections efficaces, le temps de vol moyen de l'électron qui se déplace avec une vitesse

$v(\varepsilon)$ est :

$$T_m = \frac{1}{N \sigma_T(\varepsilon) v(\varepsilon)} \quad (\text{III. 4})$$

$\sigma_T(\varepsilon)$: La section efficace totale.

N : La densité du gaz.

ε : L'énergie de l'électron en (eV).

$v(\varepsilon)$: la vitesse de l'électron.

Le temps réel de vol actuel est donné comme suit :

$$T_a = -T_m \ln R$$

R Est un nombre aléatoire compris entre 0 et 1.

Cependant cette constante n'est pas applicable pour plusieurs gaz Braglia [8] devise $T_m(\varepsilon_0)$ a t_0 ou l'électron est au début de son libre de parcours moyen le nombre k suffisamment grand.

$$dt = \frac{T_m(\varepsilon_0)}{k}$$

La fréquence de collision est suppose constante dans l'intervalle dt et la probabilité de collision dans l'intervalle dt et :

$$P1 = 1 - \text{EXP} \left[-\frac{dt}{T_m} \right]$$

III.2.3 La technique de collision nulle :

Les deux méthodes citées ci- dessus ont l'inconvénient que le temps de calcul sur ordinateur nécessaire pour le mouvement de l'électron est excessivement long. Ce problème est surmonte par la technique de collision nulle. On introduit un nouveau type de collision tel que l'électron ne change ni de trajectoire ni vitesse et la section efficace de collision tel que l'électron ne change totale de collision soit constante. Quand l'électron effectue des collisions est choisie de façon que la molécule du gaz, la fréquence de collision nulle v_{nulle} est

$$\sum v_1(\varepsilon) + v_{el}(\varepsilon) + v_{nulle}(\varepsilon) = v_{max}(\varepsilon) \quad (\text{III. 5})$$

$v_{el}(\varepsilon)$: Fréquence de collision élastique.

v_1 : Fréquence de collision inélastique du processus 1.

Si nous trouvons une meilleure limite de fréquence de collision v_{max} tel que :

$$v_{max} = \max[N \sigma_T(\varepsilon)v(\varepsilon)] \quad (\text{III. 6})$$

Dans ce cas la constante du temps du vol est $:\frac{1}{v_{max}}$ et le temps du vol réel est :

$$dt = -\frac{\text{Ln}R}{v_{max}} \quad (\text{III. 7})$$

La section efficace totale est : $\sigma'_T = \sigma_T + \sigma_{nulle}$

La position et l'énergie d'un électron dans l'intervalle de temps dt subissent les variations suivantes :

$$dx = v_{x0} dt$$

$$dy = v_{y0} dt$$

$$dz = v_{z0} dt + \frac{1}{2} \frac{eE}{2m_e} (dt)^2$$

$$d\varepsilon = m_e e E dz$$

Avec :

m_e : La masse de l'électron.

e : La charge de l'électron.

E : Le champ électrique.

dx, dy, dz : les distances traversées le long des directions x, y, z

v_{x0}, v_{y0}, v_{z0} : Les composantes initiales de la vitesse de l'électron au début de l'intervalle de temps dt .

On peut déterminer si la collision est nulle ou réel en déminant que la collision est faire après un certain intervalle dt , la probabilité de collision P_1 est :

$$P_1 = \frac{\sigma_T}{\sigma'_T}$$

Pour $P_1 > R$ la collision est réelle, autrement la collision est nulle, et on procède vers la collision suivante sans changer l'énergie et la direction de l'électron.

La nature de collision est déterminée de la manière suivante :

On définit la probabilité pour que la collision de processus j existe

$P_{2,j}$, ou $j = 1, 2, \dots, N$

$$P_{2,j} = \frac{\sigma_j}{\sigma'_T}$$

$$\sum_{j=1}^N P_{2,j} = 1$$

Tel que :

$$P_{2,1} \leq P_{2,2} \leq P_{2,j} \leq P_{2,N}$$

Si la relation suivante est vérifiée :

$$P_{2,1} + P_{2,2} + P_{2,j-1} \leq R \leq P_{2,1} + P_{2,2} + P_{2,j-1} + \dots P_{2,j}$$

Ceci détermine le processus de collision j.

III.2.4 Le mouvement de l'électron entre deux collisions successives :

Le mouvement entre deux électrons successive est déterminée par la résolution de l'équation de mouvement s'écrit :

$$F = m_e \frac{dv}{dt} = -eE$$

Dans le cas d'un champ électrique antiparallèle à l'axe Oz, les composantes électriques de la force électrique s'écrivent :

$$m_e \frac{dv_x}{dt} = 0$$

$$m_e \frac{dv_y}{dt} = 0$$

$$m_e \frac{dv_z}{dt} = -eE$$

Pour connaître la position et la vitesse de l'électron entre deux collisions successives on doit résoudre le système d'équations.

Si t_0 correspondant au début du temps de vol libre ou l'électron est dans la position r_0 de composantes x_0, y_0, z_0 avec une vitesse v_0 de composantes v_{x0}, v_{y0}, v_{z0} , alors la vitesse et la position à l'instant t_1 correspondant à la fin du temps de vol libre sont données par :

$$\begin{cases} v_{x1} = v_{x0} \\ v_{y1} = v_{y0} \\ v_{z1} = v_{z0} + \frac{eE}{m_e} \end{cases}$$

$$\begin{cases} x_1 = x_0 + v_{x0} dt \\ y_1 = y_0 + v_{y0} dt \\ z_1 = z_0 + v_{z0} dt + dt^2 \frac{1}{2} \frac{eE}{m_e} \end{cases}$$

v_{x1}, v_{y1}, v_{z1} : les composantes du vecteur vitesse v_1 à la fin du temps de vol .

x_1, y_1, z_1 : les composantes du vecteur position r_1 au même temps.

L'instant t_1 l'énergie de l'électron est donnée par la relation suivante

$$\varepsilon_1 = \frac{1}{2} m_e v_1^2$$

III.2.5 Détermination de la nature de collision :

A un instant t_1 l'électron va subir une collision .On connaît la position r_1 et la vitesse v_1 de cet électron juste avant la collision (à un instant t_1) d'après l'équation de mouvement maintenant, le calcul de la vitesse de l'électron juste après la collision nécessite la connaissance de la nature de collision.

On suppose que la collision est locale et quasi-instantanée c'est -à- dire la position et le temps ne change pas au cours de la collision .Par conséquent, aux cous du choc seule la vitesse peut changer en module et en direction (dérivation de l'électron) selon le type de la collision effectuée.

- Si $P_1 < R$: pas de collision.
- Si $P_1 \geq R$: il existe une collision dans l'intervalle de temps dt .

Maintenant pour déterminer le type de collision, il faut calculer de chaque processus de collision.

La probabilité d'avoir une collision de type j est

$$P_{2,j} = \frac{\sigma_j(\varepsilon_1)}{\sigma'_T(\varepsilon_1)}$$

J=1,2,3,4.....,N , j compris la collision nulle , les collision élastiques , vibrationnelles d'excitation , d'attachement , rotationnelles , dissociation , ionisation

σ_j : section efficace de collision du processus j.

σ'_T : section efficace totale de collision : $\sigma'_T = \sum \sigma_j$.

La probabilité de chaque événement est présenté par un sous intervalle du segment [0.1], On connait que la somme des probabilités de collision est égale à l'unité :

$$\sum_{j=1}^N P_{2,j} = 1$$

Les sous intervalles du segment [0,1] sont définis pour différentes collisions de la manière suivante :

$$S_1 = [0, P_{2,1}]$$

$$S_2 = [P_{2,1}, P_{2,1} + P_{2,2}]$$

$$S_3 = [P_{2,1} + P_{2,2}, P_{2,1} + P_{2,2} + P_{2,3}]$$

$$S_4 = [P_{2,1} + P_{2,2} + P_{2,2}, P_{2,1} + P_{2,3} + P_{2,4}]$$

$$S_j = [P_{2,1} + P_{2,2} + \dots + P_{2,j-1}, P_{2,1} + P_{2,2} + \dots + P_{2,j-1} + P_{2,j}]$$

$$S_N = [P_{2,1} + P_{2,2} + \dots + P_{2,N-1}, 1]$$

La nature de la collision est obtenue par un simple tirage d'un nombre aléatoire R_{coll} qui est uniformément distribué dans l'intervalle [0,1] et on procède comme suit :

Le type de collision qui se produit est celui qui correspond à l'intervalle où tombe R_{coll}

Si R_{coll} tombe dans l'intervalle S_1 donc la première collision il s'agit.

Si R_{coll} tombe dans l'intervalle S_3 donc la troisième collision il s'agit.

Et ainsi de suite jusqu'à terminer les sous intervalles définis.

Une fois on a trouvé la nature de collision, on doit savoir la vitesse et la direction de l'électron après collision.

III.2.6 Vitesse et direction de l'électron après collision :

On considère que la position de l'électron juste après la collision et même que celle juste avant la collision, donc pendant le choc seule vitesse peut changer en module et en direction (dérivation de l'électron) d'après le type de collision effectuée.

Si d'autre surviennent alors la vitesse de l'électron après collision dépendra de la nature de collision qui lieu, dans ce cas on déterminera l'angle polaire θ et l'angle azimutal ϕ de l'électron.

III.2.6.1 Détermination de l'angle polaire et l'angle azimutal :

L'angle azimutal ϕ est suppose tout au long de ce travail suivre une distribution uniforme entre 0 et 2π , tandis que l'angle polaire θ suit une distributions entre 0 et π , on suppose que direction de l'électron après collision suit une distribution isotrope ,c'est-à-dire que la probabilité de la diffusion de l'électron est uniformément distribuée dans tous les directions

La Probabilité de la diffusion de l'électron après collision est $P(\theta, \phi) d\theta d\phi$

$$P(\theta, \phi) d\theta d\phi = \frac{d\Omega}{4\pi} \quad (\text{III. 8})$$

$d\Omega$: L'angle solide élémentaire. $d\Omega = \sin\theta d\theta d\phi$.

On a:

$$P(\theta, \phi) = \frac{\sin\theta}{4\pi} \quad (\text{III. 9})$$

Les densités de probabilité pour θ et ϕ sont obtenus par :

$$P(\theta) = \int_0^{2\pi} P(\theta, \phi) d\phi = \frac{\sin\theta}{2} \quad (\text{III. 10})$$

$$P(\phi) = \int_0^{2\pi} P(\theta, \phi) d\phi = \frac{1}{2\pi} \quad (\text{III. 11})$$

Pour trouver l'angle polaire θ et l'angle azimutal ϕ , on va introduire deux nombre aléatoires R_1 et R_2 uniformément distribués dans l'intervalle [0.1].

L'angle polaire θ est donnée par :

$$R_1 = \int_0^\theta P(\theta) d\theta \quad (\text{III. 12})$$

Après avoir intégré on trouve :

$$\cos \theta = 1 - 2 R_1 \quad (\text{III. 13})$$

L'angle azimutale ϕ est donnée par :

$$R_2 = \int_0^\phi P(\phi) d\phi \quad (\text{III. 14})$$

Après l'intégration on trouve :

$$\phi = 2\pi R_2 \quad (\text{III. 15})$$

Une fois on a déterminé l'angle polaires θ et l'angle azimutal ϕ de l'électron après collision, on est amené à trouver le module de la vitesse de l'électron après la collision.

III.2.6.2 Détermination du module de la vitesse après le choc :

III .2.6.2.1 Collision élastiques:

La connaissance des deux angles θ et ϕ ainsi l'utilisation des lois de conservation de conservation de la quantité de mouvement après la collision.

Lors des collisions élastiques, les échanges énergétiques sont généralement faibles par rapport aux énergies mises en jeu. Dans ce cas, ces collisions entraînent principalement une distribution angulaire de l'électron projectile.

Le traitement de ces collisions peut être effectuée en négligeant la vitesse de la cible (molécule), la fraction d'énergie est comme suit :

$$\frac{\varepsilon_1' - \varepsilon_1}{\varepsilon_1} = 2 \frac{m_e}{(m_e + M)^2} (1 - \cos \theta)$$

Avec :

ε_1 : l'énergie de l'électron juste avant la collision.

ε_1' : l'énergie de l'électron juste après la collision .

θ : l'angle entre le vecteur vitesse et le vecteur champ électrique.

M : masse de la molécule.

Comme $\frac{m_e}{M} \ll 1$, on aura :

$$\varepsilon_1 = \varepsilon_1 [1 - ((2 m_e/M)(1 - \cos \theta))]$$

Donc la vitesse de l'électron après une collision élastique est suivante :

$$v_1' = v_1 [1 - 2 m_e/M (1 - \cos \theta)]^{1/2}$$

III .2.6.2.2 Collision inélastiques conservatives :

Il s'agit des collisions qui conduisent à l'excitation des molécules c'est-à-dire la perte d'énergie. Dans notre cas ce sont les collisions d'excitation électronique, vibrationnelle, et rotationnelles. Lors de ces collisions, les énergies échangées sont prises en compte.

Les pertes d'énergie par excitation sont égales aux énergies des niveaux excités considérés. Le module de la vitesse de l'électron après une excitation est déduit comme suit :

L'énergie de l'électron après une collision d'excitation est :

$$\varepsilon' = \varepsilon_1 - \Delta \varepsilon_j$$

Où $\Delta \varepsilon_j$ représente l'énergie d'excitation de seuil des molécules du niveau fondamental au niveau excité j .

Le module de la vitesse de l'électron après une excitation est :

$$v'_1 = \left[v_1^2 - \frac{2\Delta \varepsilon_j}{m_e} \right]^{1/2} \quad (\text{III. 16})$$

III.7 Organigramme de Monte Carlo :

Dans ce qui suit, on va décrire en détail les différentes étapes du déroulement de l'organigramme de la méthode de Monte -Carlo Figure III.1, et ceci dans le cas des collisions électron-molécule.

Quelle que soit la nature de collision à l'instant t_1 , on connaît les composantes de la vitesse de l'électron testent après collision. Par la suite, on peut traiter la collision la collision suivante avec comme nouvelles initiales les composantes de cette vitesse v_1' :

$$\begin{cases} v_{x0} = v_1' \sin \theta \cos \phi \\ v_{y0} = v_1' \sin \theta \sin \phi \\ v_{z0} = v_1' \cos \theta \end{cases}$$

Et les composantes de la nouvelle position :

$$\begin{cases} x_0 = x_1 \\ y_0 = y_1 \\ z_0 = z_1 \end{cases}$$

Si on a une collision d'ionisation, on traite également l'électron éjecté à son tour.

Avec ces nouvelles conditions initiales. On détermine ensuite la nature de la collision, après on calcul la vitesse la vitesse après le choc. Cette procédure est répétée jusqu'à atteindre la limite temporelle t_{max} ou spatiale z_{max} qui est fixée au début de la simulation et jusqu'à ce qui est fixée au début de la simulation et jusqu'à ce que tous les électrons créés par ionisation soient épuisés.

Les différentes étapes qui correspondent à l'organigramme de la simulation de Monte Carlo sont illustrées sur la Figure III.1

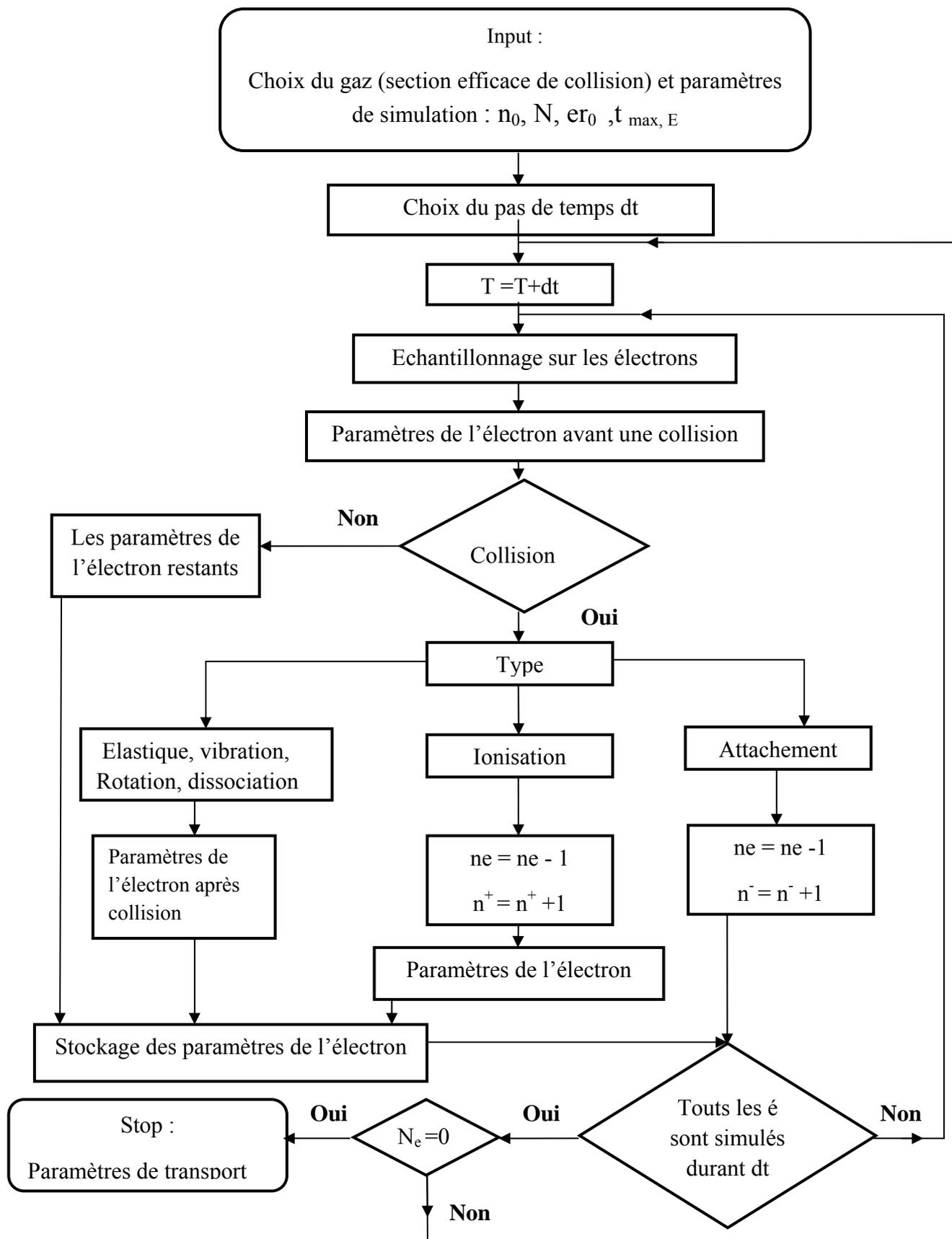


Figure III .1 : L'organigramme de la méthode de simulation de Monte –Carlo

III.2.8 Calcul des paramètres de transport :

Pour chaque électron on relève les composantes de son vecteur position et son vecteur vitesse en fonction du temps pendant la simulation. Connaître les grandeurs de cet électron nous permet, à l'aide du calcul des moyennes statistiques appropriées et à l'aide de méthodes d'échantillonnage, de calculer les paramètres de transport électronique dans les gaz.

III.2.8.1 Paramètres de transport :

Les paramètres de transport hydrodynamiques sont obtenus à l'aide des grandeurs stockées à chaque collision. Il faut discrétiser l'intervalle de temps $[0, t_{max}]$ en n_t .

Pour avoir la variation temporelle de ces paramètres :

$$[0, t_{max}] = [t_0, t_1, t_2, \dots, t_{s-1}, t_s, t_{s+1}, \dots, t_{max}]$$

$$t_{s+1} - t_s = dt$$

On va introduire une grandeur $R_{ij}^{S+\frac{1}{2}}$ relative à l'électron numéro j dans les relations qui sont décrites dans le deuxième chapitre paragraphe concernant les coefficients II.2.3.1 de transport.

Cette grandeur va effectuer une collision i dans l'intervalle $[t_s, t_{s+1}]$, sa valeur moyenne $(R)^{S+\frac{1}{2}}$ dans l'intervalle $[t_s, t_{s+1}]$ est obtenue par la relation classique donnant la moyenne sur les électrons et les collisions.

La vitesse de dérive :

$$v_d^{S+\frac{1}{2}} = \frac{1}{N_e^{S+\frac{1}{2}}} \sum_{j=1}^{N_e^{S+\frac{1}{2}}} \frac{1}{N_{coll}^{S+\frac{1}{2}}} \sum_{i=1}^{N_{coll}^{S+\frac{1}{2}}} v_{z(S+\frac{1}{2})} \quad (\text{III. 17})$$

Autrement :

$$v_d^{S+\frac{1}{2}} = \frac{1}{dt} \frac{1}{N_e^{S+\frac{1}{2}}} \sum_{j=1}^{N_e^{S+\frac{1}{2}}} \frac{1}{N_{coll}^{S+\frac{1}{2}}} \sum_{i=1}^{N_{coll}^{S+\frac{1}{2}}} z_{(S+\frac{1}{2})}$$

L'énergie moyenne :

$$\langle \mathcal{E} \rangle^{S+\frac{1}{2}} = \frac{1}{N_e^{S+\frac{1}{2}}} \sum_{j=1}^{N_e^{S+\frac{1}{2}}} \frac{1}{N_{coll}^{S+\frac{1}{2}}} \sum_{i=1}^{N_{coll}^{S+\frac{1}{2}}} \frac{m_e}{2} \left[v_{x(S+\frac{1}{2})}^2 + v_{y(S+\frac{1}{2})}^2 + v_{z(S+\frac{1}{2})}^2 \right]$$

Coefficient de diffusion longitudinal :

$$D_l^{S+\frac{1}{2}} = \frac{1}{2dt} \frac{1}{N_e^{S+\frac{1}{2}}} \sum_{j=1}^{N_e^{S+\frac{1}{2}}} \frac{1}{N_{coll}^{S+\frac{1}{2}}} \sum_{i=1}^{N_{coll}^{S+\frac{1}{2}}} \left[z_{(S+\frac{1}{2})}^2 + \langle z \rangle_{(S+\frac{1}{2})}^2 \right] \quad (\text{III. 20})$$

Coefficient diffusion transversale :

$$D_t^{s+\frac{1}{2}} = \frac{1}{4dt} \frac{1}{N_e^{s+\frac{1}{2}}} \sum_{j=1}^{N_e^{s+\frac{1}{2}}} \frac{1}{N_{coll}^{s+\frac{1}{2}}} \sum_{i=1}^{N_{coll}^{s+\frac{1}{2}}} \left[x_{(s+\frac{1}{2})}^2 - \langle x \rangle_{(s+\frac{1}{2})}^2 + y_{(s+\frac{1}{2})}^2 - \langle y \rangle_{(s+\frac{1}{2})}^2 \right] \quad (\text{III. 21})$$

Coefficient d'ionisation :

$$\alpha^{s+\frac{1}{2}} = \frac{\text{Ln} \left[\frac{n^+}{n_0^-} + 1 \right]}{\langle z \rangle}$$

Avec :

$$\langle z \rangle = \frac{1}{N_e^{s+\frac{1}{2}}} \sum_{j=1}^{N_e^{s+\frac{1}{2}}} \frac{1}{N_{coll}^{s+\frac{1}{2}}} \sum_{i=1}^{N_{coll}^{s+\frac{1}{2}}} \quad (\text{III. 22})$$

Coefficient d'attachement :

Sans ionisation :

$$\eta = \frac{n^- 1}{n_0 \langle z \rangle} \quad (\text{III. 23})$$

Avec ionisation :

$$\eta = \frac{n^-}{n^+} \alpha \quad (\text{III. 24})$$

Ou:

$N_e^{s+\frac{1}{2}}$: est le nombre d'électrons dans l'intervalle de temps $[t_s, t_{s+1}]$,

$N_{coll}^{s+\frac{1}{2}}$: est le nombre de collision effectuée par un seul électron dans l'intervalle de temps

$[t_s, t_{s+1}]$,

$v_x^{s+\frac{1}{2}}, v_y^{s+\frac{1}{2}}, v_z^{s+\frac{1}{2}}$ sont les composantes du vecteur de vitesse de l'électron relevées pour chaque collision dans l'intervalle de temps $[t_s, t_{s+1}]$,

$x^{s+\frac{1}{2}}, y^{s+\frac{1}{2}}, z^{s+\frac{1}{2}}$ sont les composantes du vecteur position de l'électron relevées pour chaque collision dans l'intervalle de temps $[t_s, t_{s+1}]$,

n_0 représente le nombre d'électrons initiaux,

n^+, n^- représente les nombres des ions positifs et négatifs générés dans l'intervalle de temps

$[t_s, t_{s+1}]$.

III.3 Choix du gaz et section de collision :

III.3.1 Le méthane :

Gaz sans couleur se composant de molécules de quatre atomes d'hydrogène et d'un atome de carbone. Le méthane est le constituant principal du gaz naturel, combustible. C'est un gaz électronégatif et il efficace dans le ralentissement des électrons. Depuis le début de la Révolution Industrielle, la concentration atmosphérique en méthane à plus que doublée.

III.3.2 La section efficace de collision :

Pour la modélisation des décharges électrique dans un milieu gazeux et pour le calcul des paramètres de transport par la méthode de Monte- Carlo, on doit savoir un grand nombre de données de base et tels que les sections efficaces de collision des gaz que les paramètres de transport calculés dans chaque gaz s'approchent plus possible des paramètres de transport qui existent dans la littérature .

Les sections efficaces de collision électron –molécule en fonction de l'énergie de l'électron sont données dans ce paragraphe pour le gaz utilisé.

Les processus collision représentées par la Figure III.2 concernent le méthane par l'intermédiaire de leurs sections efficaces de collision en fonction de l'énergie de l'électron.

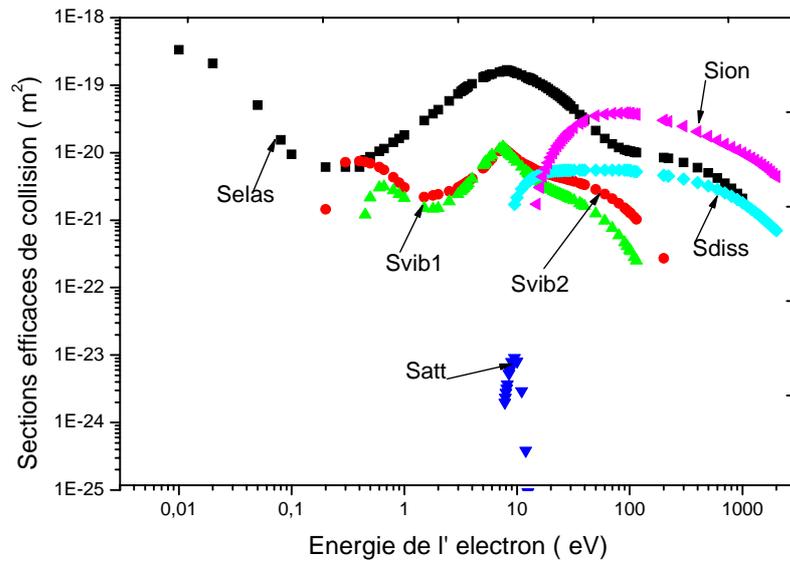


Figure III.2 Sections efficaces de collision en fonction de l'énergie de l'électron
 Sion - ionisation, Svib1- vibration1, Svib2 – vibration 2, Sela – élastique,
 Satt – attachement, Sdiss- dissociation.

III.4 Résultat et discussions :

Après avoir suivi les électrons et ceci depuis leur création jusqu'à leur disparition on a pu obtenir les paramètres de transport électronique dans CH₄.

Parmi ces paramètres on va déterminer la vitesse de dérive des électrons et leur énergie moyenne.

Les électrons se déplacent dans un pas de temps dt sous l'effet d'un champ électrique appliqué.

Etant donné la complexité de la méthode de Monte -Carlo, on a constaté qu'un certain nombre de testes de validité est nécessaire pour vérifier si la méthode réagit correctement dans quelque cas classique ou la solution cherchée est déjà connue soit analytiquement, soit expérimentalement.

III.4.1 Cas d'un champ électrique nul :

Un faisceau d'électron n_0 est libéré avec une énergie er_0 , une densité N et un temps de simulation maximal t_{\max} .

On donne :

$$N = 3.29 \cdot 10^{22} \text{ m}^{-3}.$$

$$n_0 = 10000.$$

$$er_0 = 2 \text{ eV}.$$

$$t_{\max} = 50 \cdot 10^{-9} \text{ s}.$$

Les électrons testes ne à l'instant $t=0$ s sont émis de la cathode sous condition de champ réduit $E/N = 0 \text{ Td}$ ($1 \text{ Td} = 10^{-21} \text{ V} \cdot \text{m}^2$).

Les figures III.3 et III.4 montrent les vibrations temporelles de vitesse de dérive et de l'énergie moyenne des électrons avec un champ nul.

Les particules chargées dans le gaz n'auront pas une direction préférée de leur mouvement, après avoir effectué peu de collisions leurs vitesses initiales deviennent rapidement négligeables. On signale que le comportement des électrons décrit à un champ nul est vrai quelque soit le gaz choisi et quelque soit la nature des collisions effectuées .L'énergie moyenne atteint sa valeur d'équilibre.

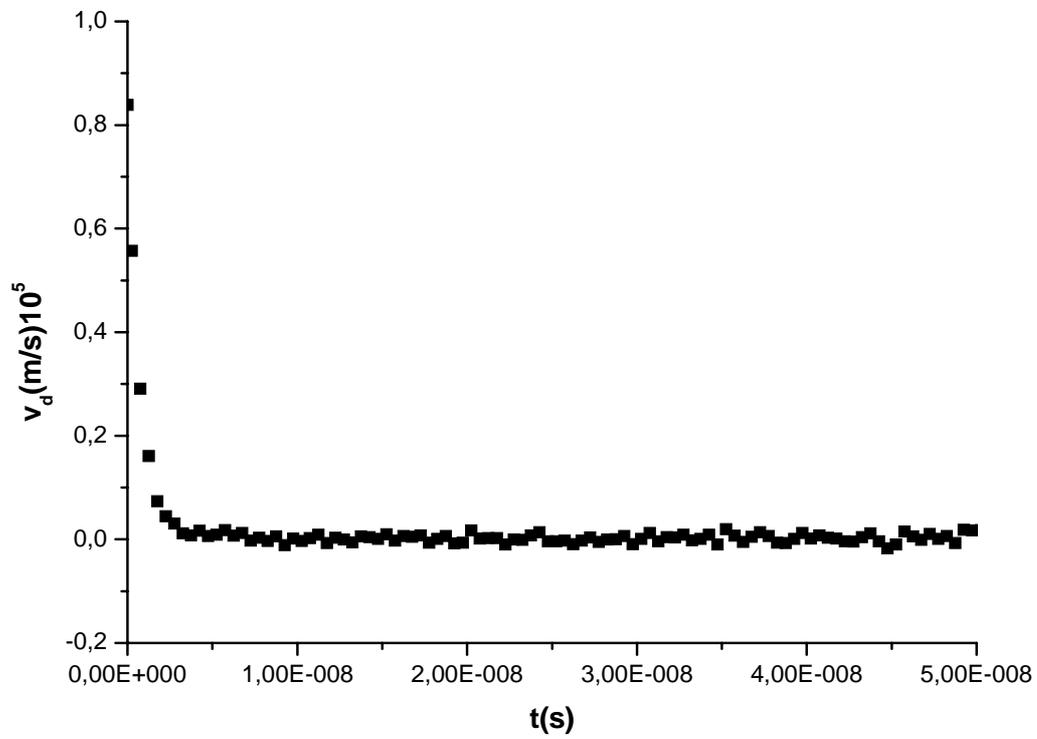


Figure III.3 Vitesse de dérive V_d en fonction du temps

$$E/N = 0Td.$$

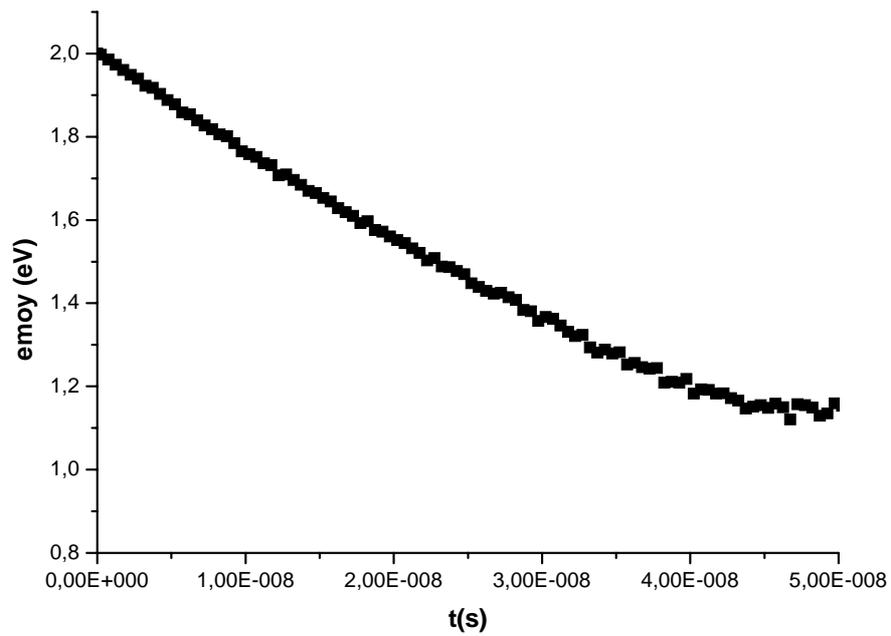


Figure III.4 Energie moyenne $emoy$ en fonction du temps

$$E/N = 0Td.$$

III.4.2 Cas d'un champ réduit E/N faible :

Dans le cas d'un champ réduit faible qu'on prendra égal à 10 Td, on déterminera la vitesse de dérive et l'énergie moyenne en fonction du temps.

Les électrons effectuent des collisions électriques, rationnelles et des collisions vibrationnelles.

Les électrons ne peuvent acquérir une énergie suffisante pour occasionner des collisions d'ionisation.

Les figures III.5 et III.6 montrent les vibrations temporelles de la vitesse de dérive et l'énergie moyenne des électrons dans le gaz considéré pour 10 Td.

La vitesse de dérive en fonction du temps qui comme cas d'un champ nul après quelques collisions tend vers des valeurs presque nulles.

L'énergie moyenne tend vers l'énergie du gaz qui un peu supérieure a celle d'un cas nulle.

Les électrons injectés avec une énergie voient leurs énergie diminuer avec le temps.

Les fluctuations statiques des coefficients de transport pour le champ réduits faibles sont attribuées au premier temps au non équilibre de distribution de l'énergie,

Ensuite ces fluctuations sont dues l'éparpillement statique puisque le nombre d'électrons diminue rapidement et ceci est du au phénomène d'attachement qui surgit.

Les grande fluctuations peuvent donner des vitesses de dérive négatives on les remarques plus dans le cas de la vitesse de dérive que dans le cas d'énergie moyenne car la vitesse de dérive est le moyenne statistique de la composante de vitesse long l'axe z, alors que l'énergie moyenne est le moyenne carre détroits composantes de la vitesse.

Afin de réduire ces fluctuations, il faut injecter un grand nombre d'électrons car durant notre simulation quand on augmentait le nombre d'électrons initiaux on abouti à moins de fluctuations statistiques.

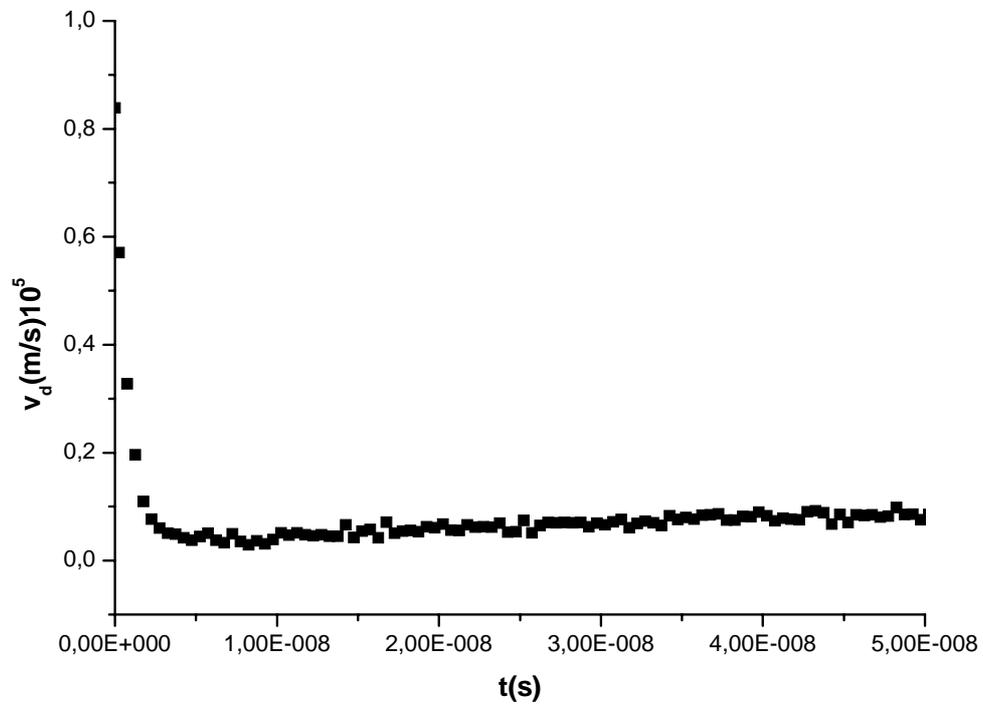


Figure III.5 Vitesse de dérive V_d en fonction du temps

$$E/N = 10 \text{ Td.}$$

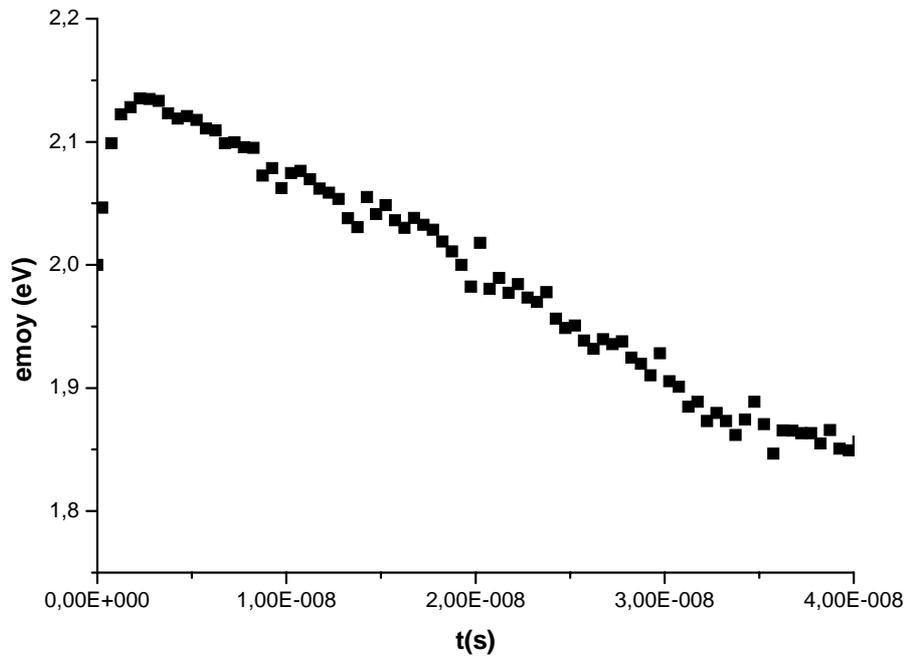


Figure III.6 Energie moyenne $emoy$ en fonction du temps

$$E/N = 10 \text{ Td.}$$

III.4.3 La vitesse de dérive et l'énergie moyenne en fonction du champ réduit :

La variation de la vitesse de dérive et l'énergie moyenne en fonction du temps est étudiée avant de voir comment elles varient en fonction du champ réduit.

Les électrons testes sont injectés à l'instant initial, on a travaillé, on a pris des valeurs de champs réduits E/N : 100Td, 200Td, 300Td, 400Td, 500Td, 600Td, 700Td, 800Td,

900Td, 1000Td.

Les figures III.7 à III.16 montrent les variations temporelles de la vitesse de dérive et l'énergie moyenne ou nous remarquons que ces paramètres passent par un régime transitoire puis un régime permanent (état d'équilibre hydrodynamique).

Le processus d'attachement des électrons avec les molécules de CH_4 est le plus dominant dans les premiers temps de simulation, tant que le champ réduit augmente le phénomène d'attachement se néglige, la vitesse de dérive et l'énergie moyenne augmentent.

Le choix du nombre d'électrons tests n_0 est important vu les fluctuations qu'on peut observer dans les paramètres obtenus en augmentant n_0 les fluctuations diminuent et le temps de calcul augmente et au contraire si on diminue le nombre d'électrons tests les fluctuations augmentent et le temps de calcul diminue.

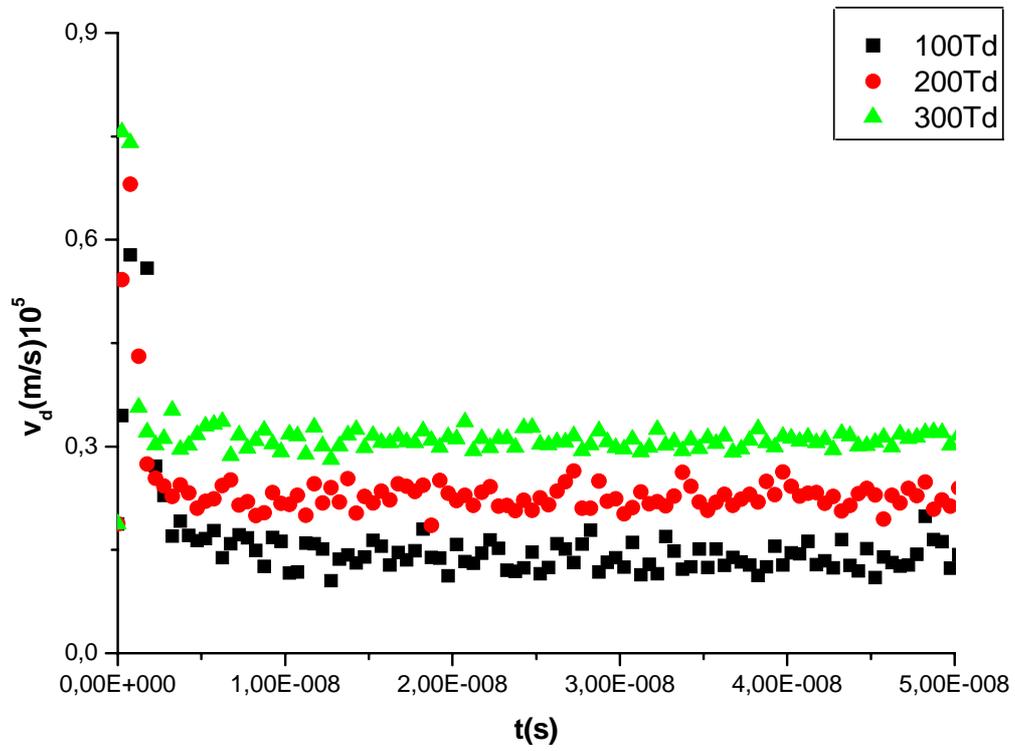


Figure III.7 Vitesse de dérive V_d en fonction du temps

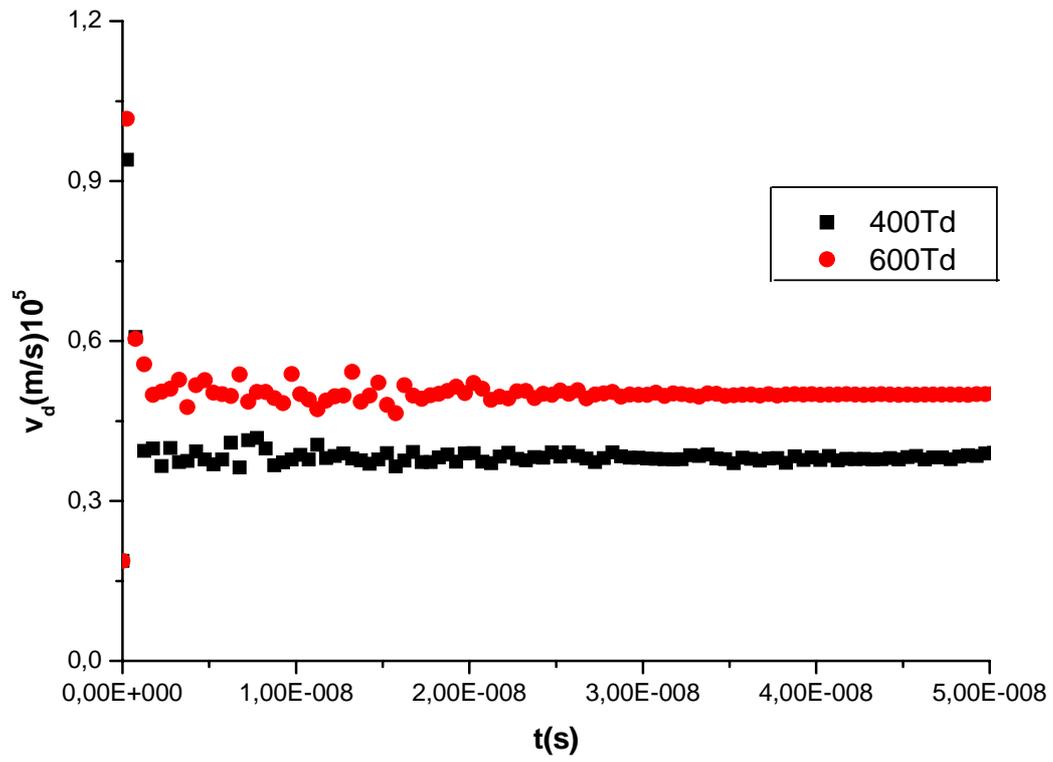


Figure III.8 Vitesse de dérive V_d en fonction du temps

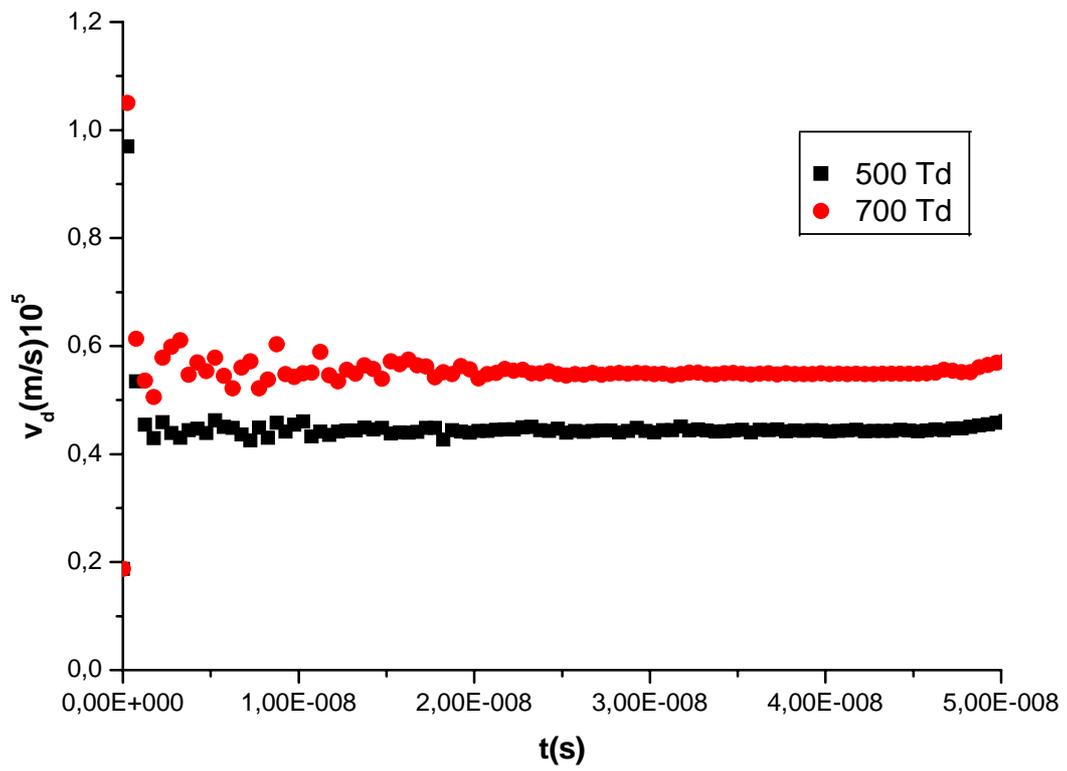


Figure III.9 Vitesse de dérive V_d en fonction du temps

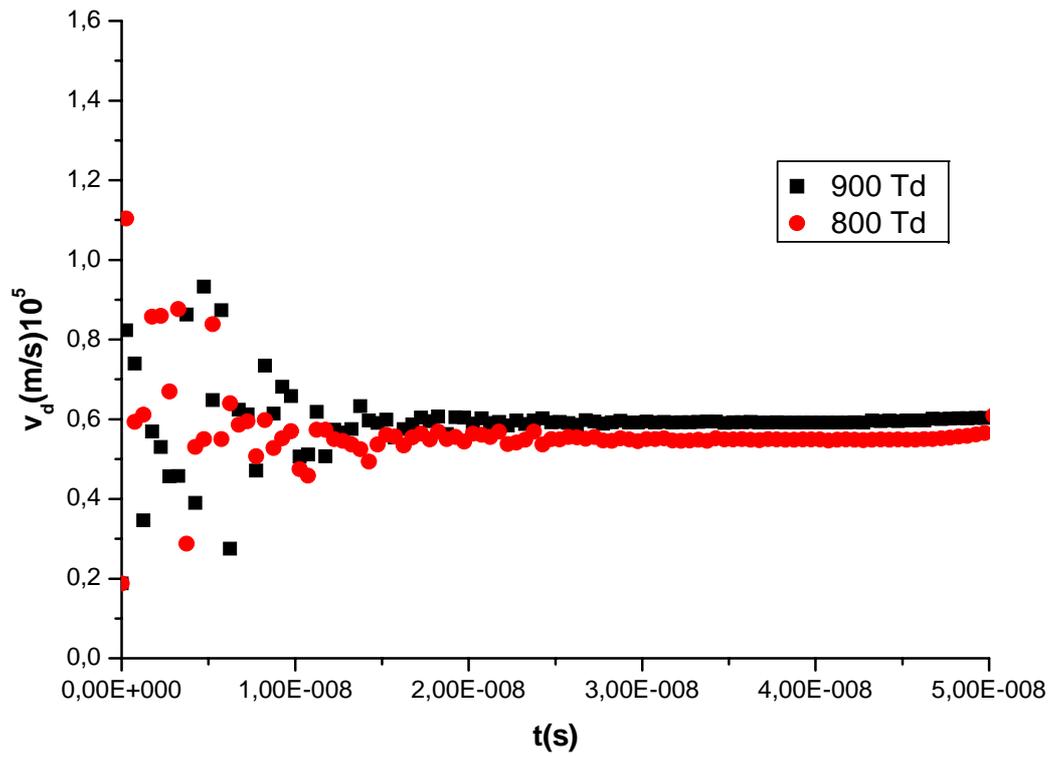


Figure III.10 Vitesse de dérive V_d en fonction du temps

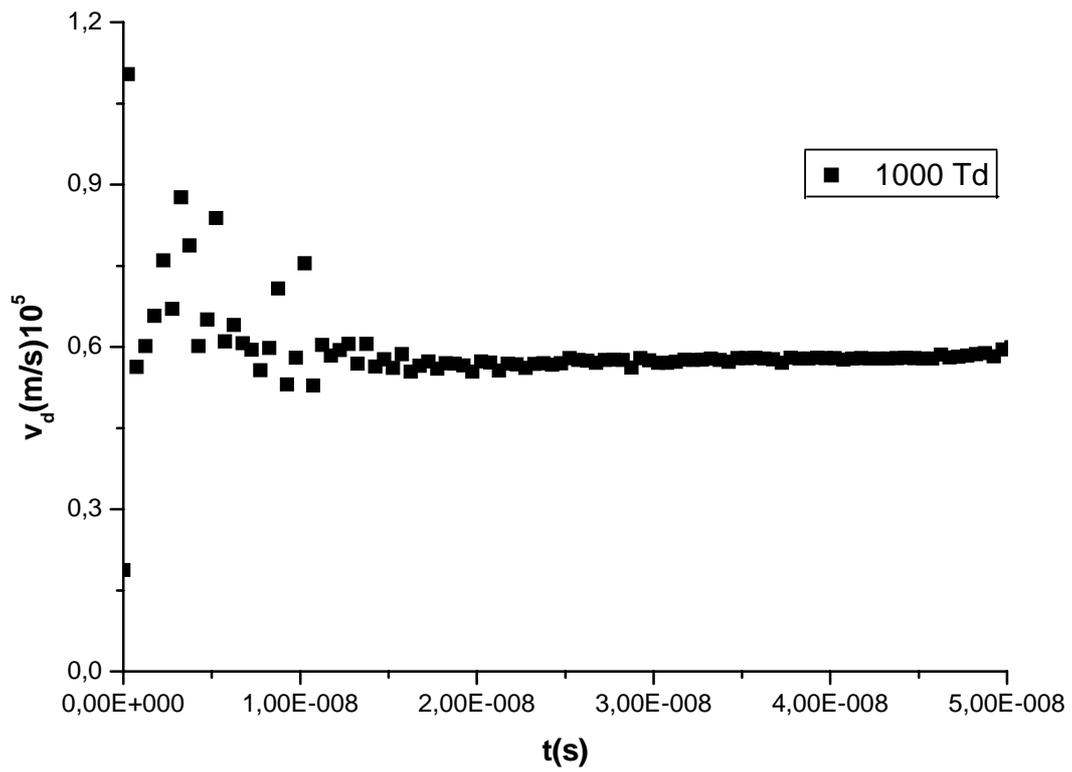


Figure III.11 Vitesse de dérive V_d en fonction du temps

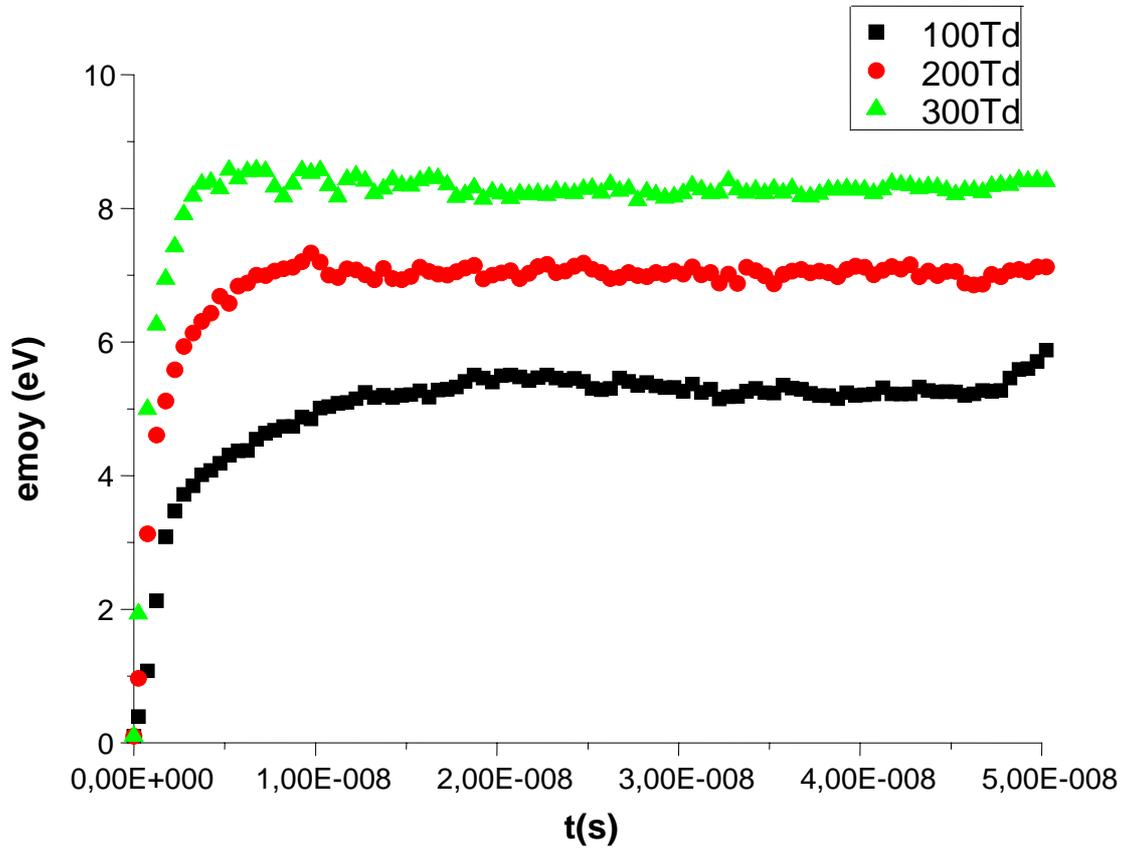


Figure III.12 Energie moyenne emoy en fonction du temps

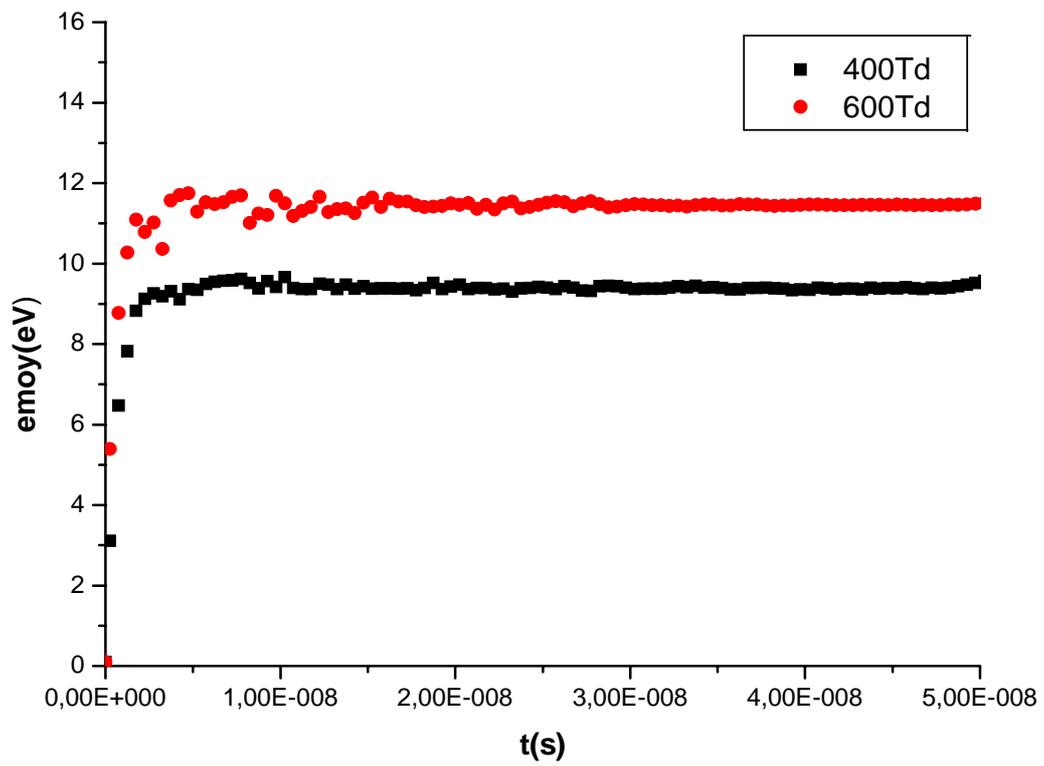


Figure III.13 Energie moyenne $emoy$ en fonction du temps

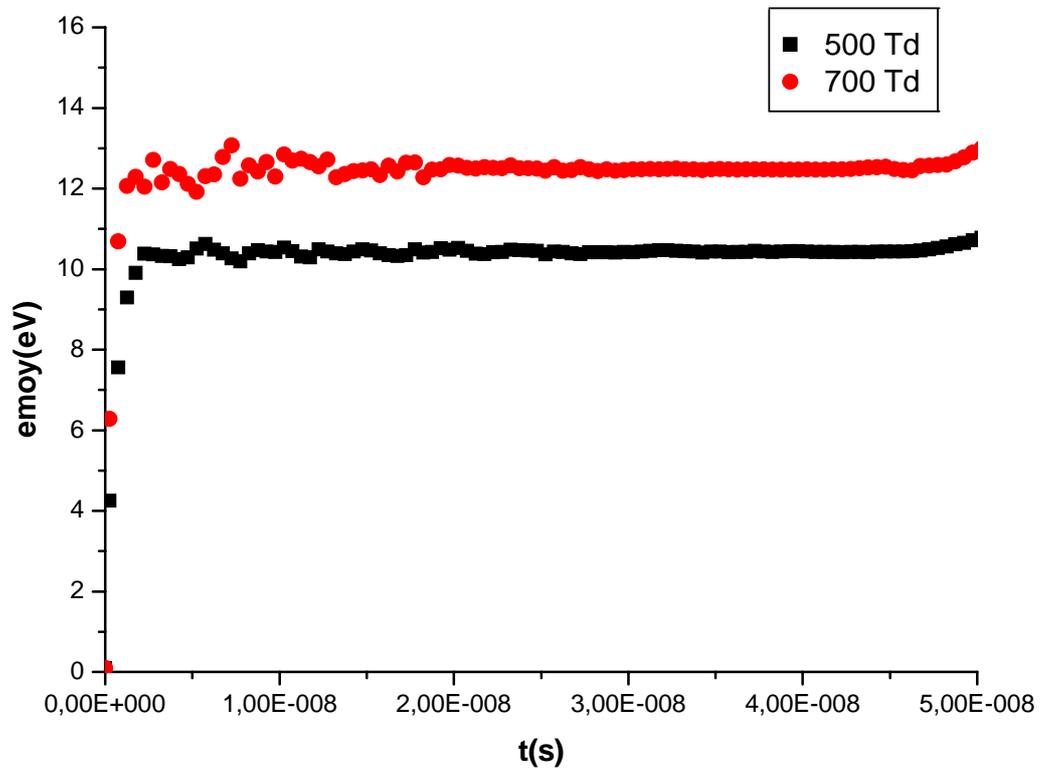


Figure III.14 Energie moyenne $emoy$ en fonction du temps

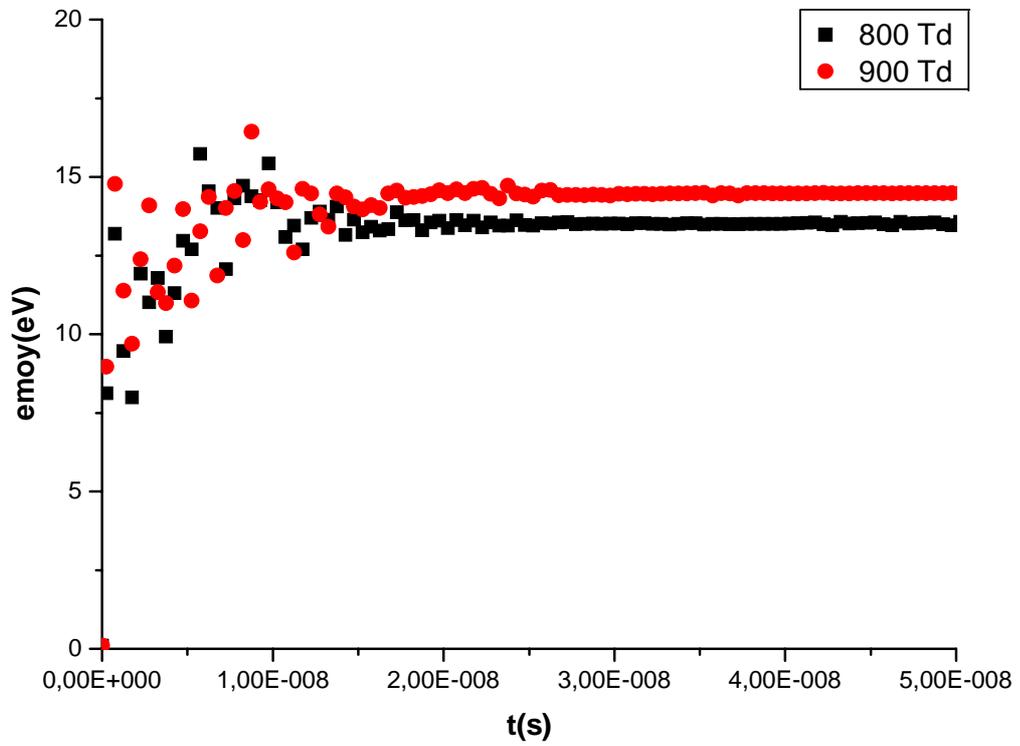


Figure III.15 Energie moyenne $emoy$ en fonction du temps

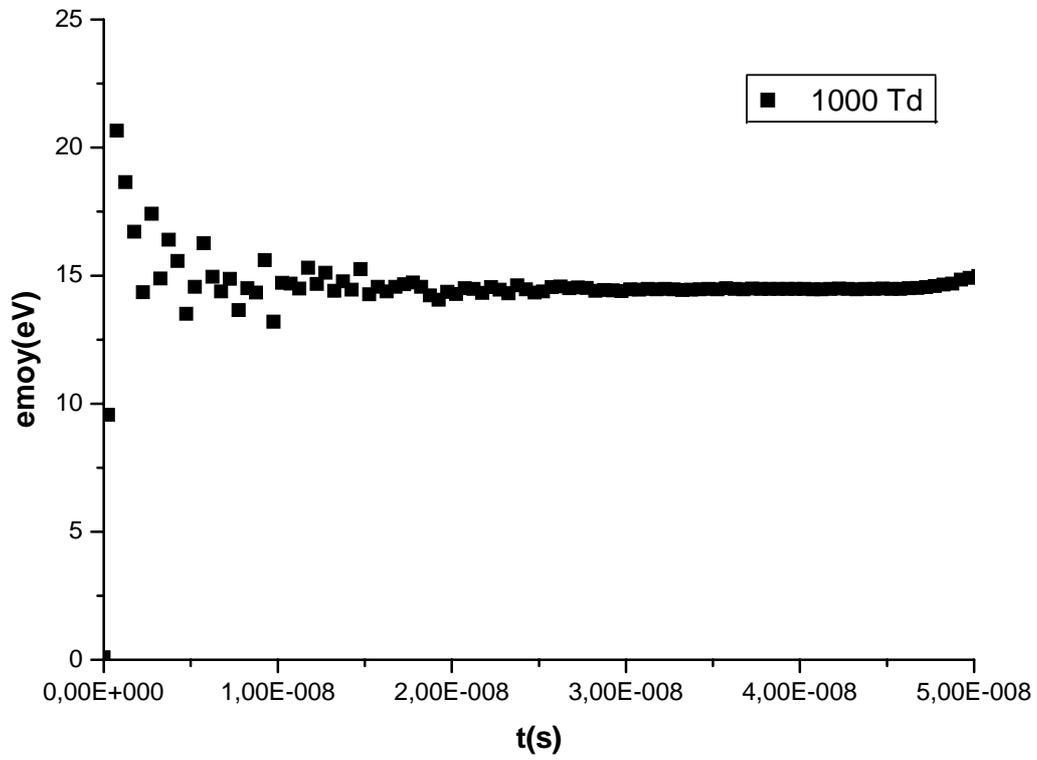


Figure III.16 Energie moyenne emoy en fonction du temps

Les figures III.17 et III.18 montrent respectivement la variation de la vitesse de dérive et l'énergie moyenne en fonction du champ réduit.

La vitesse de dérive des électrons croît presque linéairement avec le champ réduit la même tendance de croissance est observée pour l'énergie moyenne.

Rn générale, la comparaison de résultats obtenus montre une bonne concordance avec les résultats expérimentaux et théoriques tout en constant, légère différence entre nos résultats et ceux qu'on trouve dans littérature, ceci est du peut être aux choix des sections efficaces prises, au choix du nombre d'électron injectes ou bien du phénomène d'attachement qui surgit et peut arrêter la simulation.

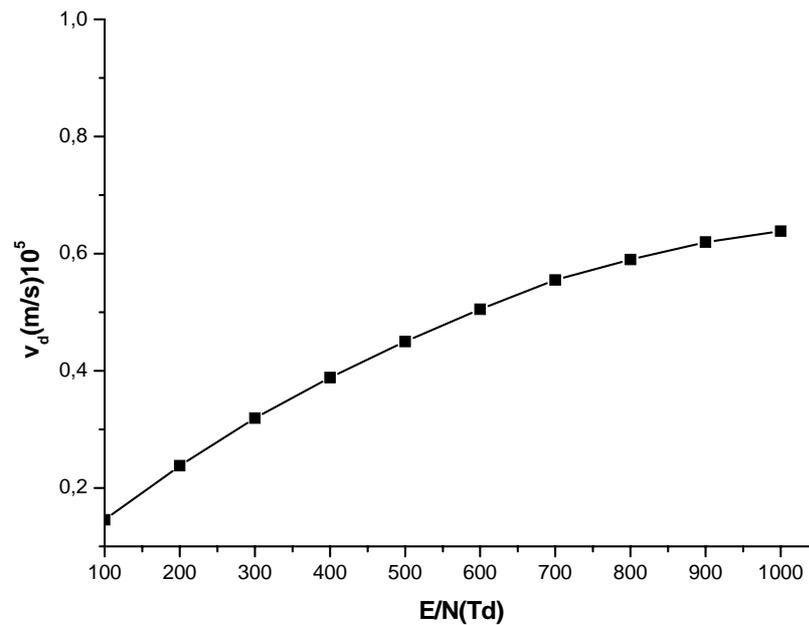


Figure III.17 Vitesse de dérive V_d en fonction du champ réduit

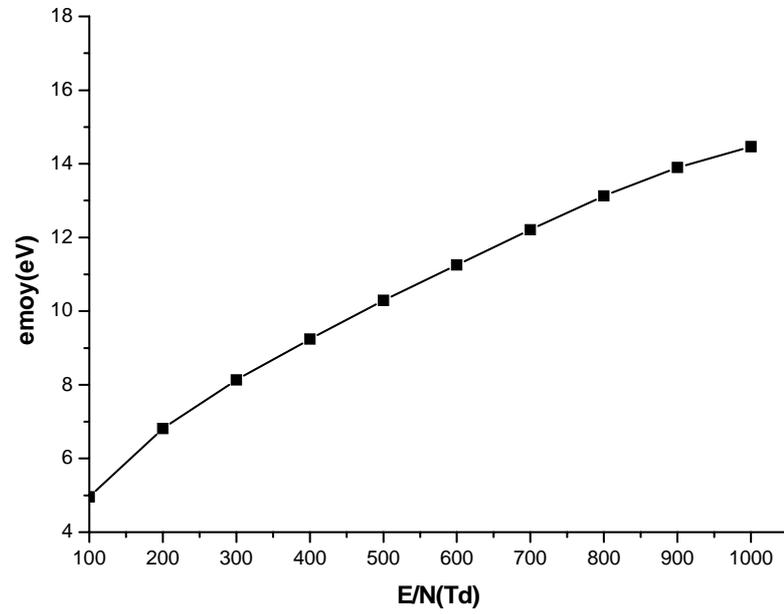


Figure III.18 Energie moyenne e_{moy} en fonction du champ réduit

III.5 Conclusion :

Le transport des électrons dans une décharge électrique est plus souvent caractérisé par un ensemble de grandeur appelées paramètres de transport comme la vitesse de dérive et l'énergie moyenne.

Dans ce chapitre on à présenté les résultats de notre simulation du gaz CH₄. Garce à la méthode de Monte Carlo, qui nous permis de traite les phénomènes microscopiques dans les décharges électriques, sans doute cette méthode connait actuellement son importante application et sa meilleur justification.

CONCLUSION GENERALE

Dans ce travail nous avons développé la simulation pour le calcul des fonctions de distribution et les paramètres de transport.

Dans le premier chapitre on a présenté quelques processus physiques de base qui sont très utiles dans la modélisation des décharges électriques. Ce sont surtout les collisions élastiques et inélastiques dominants dans les milieux gazeux.

Dans le deuxième chapitre, on s'est intéressé à la description de l'équation de Boltzmann la plus utilisée pour la description de l'évolution de fonction de distribution ce chapitre est consacré à la description de l'équation de Boltzmann utilisée pour étudier le comportement des électrons dans le gaz et la difficulté rencontrée pour la résolution dans le cas général. Les hypothèses simplificatrices admises, qui concernent en premier le terme de droite de cette équation (opérateur de collision) et les hypothèses simplificatrices qui concernent le terme de gauche de cette équation sont abordées dans le cadre de la théorie classique.

Dans le troisième chapitre on a appliqué la méthode de Monte-Carlo qui est capable de suivre le mouvement des électrons depuis leurs émissions jusqu'à leurs disparitions (collision élastique, ionisation, attachement), cette méthode permet de calculer les paramètres de transport électronique dans le gaz considéré.

Grâce à la technique de collision nulle, on a étudié le mouvement des électrons depuis leur apparition jusqu'à ce qu'ils atteignent la limite temporelle fixée au début de la simulation, on a trouvé les positions et les vitesses de chaque électron durant chaque temps du vol, ceci nous a permis de déterminer les fréquences de collision et les probabilités qui peuvent se produire et par comparaison d'un nombre aléatoire avec ces probabilités, on a pu trouver le type de collision qui s'est produit et les vitesses des électrons avant collision et aussi après le choc.

On à suivre le découlement des électrons même lors d'une collision d'ionisation les électrons crée sont traité à leur tour.

On à abouti à des résultats qui sont comparables avec les résultats théoriques de plusieurs auteurs, ceci nous permet d'apprécier la puissance et la richesse de la méthode de Monte Carlo.

BIBLIOGRAPHIE

- [1] **JP.Novak et M.F.frechette (Transport coefficients of SF6 and SF6-N2 mixtures from Revised Data), J.Appl.Phys, Vol 55 N°1pp 107-116.1984.**
- [2] **J.L.Delacroix (Physique des Plasmas), Tome 2, Dunod1996.**
- [3] **Laurence E.klineet john G.Siambis (Computer Simulation Of Electrical Break DownInGases: Avalanche And Streamer Formation), Physical Review, Vol5, pp794-805, 1972.**
- [4] **Y.Hoshnia, M.Sato, H.Murase .Toyoda, A.Kobayashi (Dielectric Properties of SF6/N2 Gas Mextues On Ful Scale Model Of Gas-Insulated Busbar) Toshiba Corporation ,Japan ,2000 IEEE,pp2129-2134.**
- [5] **A.STAOUTI and L.SETAOUTI (Simulation Of Electron Swarm Parameters In SF6), Electrotechnic Department, University Of Science End Technology, PO.Box.1505,El-Mnaour , Oran , Algeria .FIZIKA A121-136 .2001.**
- [6] **A.SETAOUTI and L.SETAOUTI (Sewarm Studies On Elementary Processus In Nitrogen), Electrotechnic Department,University of science And Technology, P.O.Box .1505, El-Mnaour , Oran , Algeria .FIZIKA A134-pp225-264 .2005.**
- [7] **ALI .HENNAD (Cinétique Des Ions Dans Les Gaz Moléculaires Par Simulation De Monte-Carlo Classique Et Optimisée : Détermination Des Données De Base Dans L'air), Thèse De Doctorat De L'université Paul SABATIER, 1996.**
- [8] **G.R.Gonvinda Raju et Jianfen .Liu (Simulation Of Electrical Discharges In Gases: Uniform Electric fields), IEEE Transactions in dielectrics and Electrical Insulation, Vol 2 N°5, pp1004-1015, 1995.**

- [9] **B.Hosnia(Simulation Du Phénomène De Transport Electronique Dans SF6, N2 et Mixtures de SF6/N2. Oran, Alegria.**
- [10] **Annemie Bogaerts, Renaat Gijbels(Numerical Modeling Of Gas Discharge Plasmas For Various Application), Science Direct Vol 69, pp 37–52, 2003.**
- [11] **L.G.Christophorou et L.A Pinnaduwege (Basic Physique Of Gaseous Dielectrics), IEEE Transactions On Dielectrics And Electrical Insulation Vol 25 N ° 1, pp55-55, 1990.**
- [12] **ADIL.Gaouar (Théorie Cinétique Et Données Des Electrons Dans Les Plasmas Non Thermiques : Application Aux Milieu D'excitation Des Lasers A Excimeres), Thèse De Doctorat De L'université Paul SABATIER, 1995.**
- [13] **J.M Hammersley etD.C .Handscomb (Monte Carlo Methods), London Chapman And Hall, 1964.**
- [14] **A.Lemzadmi et M.Nemamcha (Mobilités Des Porteurs De Charges Dans Le SF6 Et Le Mélange Sf6/N2 A Pressions Elevées), pp85-88,Troisième Conférence Nationale Sur La Haute Tension (CNHT), GUELMA 16et 17 novembre 1999.**
- [15] **BrianD.Ripley (Stochastic Simulation), Weley series In Probability And Mathematical Statistics, 1987.**
- [16] **Cédric Punset (Modélisation Bidimensionnelle Fluide D'un Ecran A Plasma), Thèse De Doctorat De L'université PAUL SABATIER, 1998.**
- [17] **Essam Nasser (Fundamentals Of Gaseous Ionization And Plasma Electronics), Wiley –Interscience, 1971.**

- [18] Reuven Y. Rubinstein (Simulation And The Monte Carlo Method), WileySeries In Probability And Mathematical Statistics, 1981.
- [19] Aissa. Alkaa (Etude Des Fonctions De Distribution Des Electrons Dans Les Plasmas Froid Composées De Mélanges De Gaz Rares Avec Les Vapeurs Métalliques Ou Des Gaz Electronégatifs), Thèse De Doctorat L'université PAUL SABATIER , 1991.
- [20] Lahouaria Aouabdi (Simulation D'une Décharge Electrique Radio Fréquence Par La Méthode De Monte Carlo), Thèse De Magistère,USTO 2001.
- [21] M .S. Dincer et G.R Govinda Raju (Monte Carlo Simulation Of The Motion Of Electronics In SF6 In Uniform Electric Fields), J.Appl.Phys, Vol 54 N °1 ,pp 6311-6316.1983.
- [22] Harvey Gould (An Introduction To Computer Simulation Methods, Application To Physical Systems), Addition Wesley Publishing Company, 2^{ème} Edition, 1996.
- [23] Sidi Mohamed Remoun (Amorçage Dans La Grands Intervalles D'air : Application A La Protection Contre La Foudre), Mémoire De Magister,USTO1993.
- [24] Claude .Gary et Maurice .Magnien (Les Propriétés Diélectrique De L'air Et Les Très Hautes Tensions), Collection De La Direction Des Etudes Et Recherches D'électricité De FRANCE,EYROLLES 1984.
- [25] E.kuffel etM. Abdullah (High Voltage Engineering), Pergamon Press.

- [26] P. Laborie, J.M. Rocard et J.A. Rees (Sections Efficaces Electroniques Coefficients Macroscopiques : 1- Hydrogène Et Gazes Rares), Duond, 1968.
- [27] H. BAHOUHE (Contribution A La Modélisation D'une Décharge Continue D'un Gaz Moléculaire CH₄-SF₆), Thèse De Magister, Université Mentouri CONSTANTINE, 2010.
- [28] TAHINA HARINJA BEZANAHARY (Modélisation Du Comportement De La Colonne Positive D'un Plasmas De Décharge Dans Les Gaz Rares Pures : Application A L'étude Des Lampes) Basse pression Sans Mercure, Thèse De Doctorat De L'université PAUL SABATIER, 2003.
- [29] L.G. CHRISTOPHOUROU ET R.J. VAN BRUNT (SF₆ Mixtures: Basic And HV Insulation Properties), IEEE Transactions On Dielectrics And Electrical Insulation, Vol 2 N° 5, pp 952-1003, 1995.
- [30] T.R. HAYES, R.C. WETZEL AND R.S.F. REUND (Absolute Electron - Impact- Ionization Cross section measurement of the halogen atoms), Phy. Rev, Vol 35 N° 2, pp 578- 584, 1987.
- [31] AKINORI ODA, YOSHIYUKI SUDA, ATSUSHI OKITA (Numerical Analysis Of Pressure Dependence On Carbon Nano Tube Growth In CH₄/H₂ Plasmas), Thin Solid Films 516, pp (6570–6574), 2008.
- [32] I.B. DENYSENKO, S. XU, J.D. LONG, P.P. RUTKEVYCH, N.A. Azarenkov, K. Ostrikov (Inductively Coupled Ar/CH₄ /H₂ Plasmas For Low-Temperature Deposition Of Ordered Carbon Nanostructures), Journal Of Applied Physics Vol 95, NO 5, pp (2713-2724), 2004.

- [34] XIAOHUI YUAN, LAXMINARAYAN L. RAJA (Computational Study Of Capacitively Coupled High - Pressure Glow Discharges in Helium),IEEE Transactions On Plasma Science,Vol 31, N°4, pp 495-503, 2003.
- [35] Deng-Ming Xiao , Yi Yin And Xu –Guang Li(An Improved Monte Carlo Method For Simulation Electron Transport In SF6- N2 Gas Mixture), Proceeding Of International Conference On Proprieties And Application Of Dielectric Materials, NAGOYA , pp 32-245,junel -5 2003.
- [36] F.Belarbi(Etude Et Simulation Des Paramètres De Transport Electronique Dans Le CF4 Dans Champs Électrique Uniforme), Thèse De Magistère, USTO,2010
- [37] B.T. Wu, D- M. Xiao, Andl-C. Zhang (Electron Swarm Coefficient In SF6 And CF4 GasMixtures From Monte Carlo Method) Eur. Phys. J. Apply. Phys.35,37-60 ,2006.
- [38] Deng-Ming Xiao , Yi Yin And Xu –Guang Li(Electron Swarm Parameters In Sf6 And CF4 gas mixtures) Japanese Journal Of Applied Physics Vol 43, N° 3A , 2004, pp.L369-L371 2004 The Japan Society Of Applied physics .