

REPUBLIQUE ALGERIENNE DEMOCRATIQUE ET POPULAIRE
MINISTERE DE L'ENSEIGNEMENT SUPERIEUR ET DE LA RECHERCHE SCIENTIFIQUE
UNIVERSITE ABOUBAKR BELKAID DE TLEMCEN
FACULTE DES SCIENCES
DEPARTEMENT DE PHYSIQUE
LABORATOIRE DE PHYSIQUE THEORIQUE

THESE

Présenté pour obtenir le diplôme de

Doctorat en Physique
Option : Physique de Gaz et des plasmas

Par

M^r Ardjani Benamar

THEME

**Etude des Paramètres qui Influencent sur l'Equilibre Thermique dans les
Décharges Electriques**

Soutenue le 27 Juin 2012 devant le jury :

Président	Mr. Mokhtar INAL..... Professeur : U AB Tlemcen
Directeur de thèse	Mr. Bachir LIANI Professeur : U AB Tlemcen
Examineur	Mr. Zine El Abidine BENTALHA...M C A : U AB Tlemcen
Examineur	Mr. Ahmed. BELASRI..... Professeur : USTO Oran
Examineur	Mr. Tewfik BABA-HAMED M C A : USTO Oran
Examineur	Mr. Boumdienne LASRI M C A : U Saida

Remerciements

Ce travail a été réalisé au laboratoire de Physique Théorique de la faculté des sciences de l'Université Abou Bakr Belkaid de Tlemcen, sous la direction du professeur B. LIANI. Je tiens à leur exprimer mes sincères remerciements ainsi que ma profonde gratitude pour leurs suivis constants et leurs précieux conseils qui m'ont permis de mener à bien ce travail.

Je remercie vivement monsieur le Professeur M INAL, pour avoir bien voulu accepter de présider le jury de cette thèse.

Mes sincères remerciements vont également à Messieurs A. BELASRI et T. BABA-HAMED professeurs à l'Université de Mohamed BOUDIAF d'Oran (USTO) pour avoir accepté de se déplacer à Tlemcen pour juger ce travail.

J'exprime ma profonde gratitude à Messieurs et B. LASRI Maitre de conférences à l'Université de Saida et Z. BENTALHA, Maitre de conférences à l'Université Abou Bakr Belkaid de Tlemcen pour avoir accepté d'examiner ce travail.

Je voudrais aussi présenter mes remerciements à tous les membres du laboratoire et tous les amis.

Résumé

L'équilibre thermique des électrons dans le plasma est très important puisque s'il est réalisé plusieurs approximations peuvent être utilisées et plusieurs problèmes peuvent être résolus. L'état d'équilibre des électrons est étudié dans le cas des décharges DC et AC. Plusieurs paramètres expérimentaux qui influencent sur l'état d'équilibre des électrons sont étudié tel que: La densité du gaz, l'énergie initiale des électrons primaires, le champ électrique et les champs magnétiques transversal et longitudinal. Comme outil de simulation la méthode de Monte Carlo est utilisée. Le gaz utilisé est l'azote. Il est confirmé que :

Dans le cas des décharges DC :

- L'état d'équilibre peut être réalisé par l'augmentation de la densité du gaz ou de la distance inter-électrodes.
- Si la densité du gaz ou la distance inter-électrodes ne sont pas suffisant l'état d'équilibre peut être réalisé par l'augmentation du champ électrique.
- L'énergie initiale des électrons primaires a un grand effet sur l'état d'équilibre si le champ électrique est bas et la différence entre l'énergie initiale et l'énergie moyenne est grande, mais ce problème peut être résolu par le prolongement du temps.
- Il est nécessaire de faire une meilleure combinaison entre la densité du gaz, la distance inter-électrodes et le champ électrique pour faire une meilleure modélisation par la méthode fluide model dans des meilleurs cas de l'état d'équilibre.

Concernant l'effet du champ magnétique:

- Quand la fréquence de cyclotron est très inférieure à la fréquence de collision les champs magnétiques transversal et longitudinal n'ont aucun effet sur l'état d'équilibre.
- Dans la présence du champ magnétique transversal l'EEDF est Maxwellienne si $E/B > 251000$ Volt/Tesla et $E/N \geq 500$ Td, tous les paramètres de transport sont dans l'état d'équilibre et diminuent si B_T augmente sauf le coefficient de diffusion transversal, encore l'énergie moyenne des électrons quitte l'état d'équilibre si $E/B \leq 251000$ Volt/Tesla.
- Le champ magnétique longitudinal n'a aucun effet sur l'EEDF et sur la plupart des paramètres de transport sauf le coefficient de diffusion transversal, il décroît si B_L augmente mais reste en état d'équilibre.
- Généralement sous l'action du champ magnétique tous les paramètres de transport sont dans l'état d'équilibre si le temps est suffisant sauf le coefficient de diffusion transversal dans le cas du champ magnétique transversal significative.

Dans le cas des décharges AC :

- Si la densité de gaz augmente ou l'amplitude du champ électrique augmente l'énergie moyenne des électrons, la fréquence d'ionisation et le coefficient d'ionisation tendent vers le comportement sinusoïdal régulier et le déphasage entre le champ électrique et ces paramètres de transport décroît.
- Les coefficients de diffusion tendent vers des valeurs approximativement constant si la densité de gaz augmente.

Mots clés : Paramètres de transport, Etat d'équilibre, Equation de Boltzmann, Fluide model, décharges DC et AC, champ magnétique.

Abstract

The thermal equilibrium of the electrons in the plasma is very important since if it is sustained many approximations can be used and many problems can be solved. Steady state is studied in the case of DC and AC discharges. Several experimental parameters that influence on the steady state are studied in this work such as: the gas density, the initial energy of the primary electrons, the electric field and magnetic field (transverse and longitudinal). As tool of simulation the Monte Carlo method is used. The gas used is the nitrogen. It is confirmed that:

In the case of DC discharges:

- The steady state can be achieved by increasing the gas density or the inter-electrode distance.
- If the gas density or the inter-electrode distance are not sufficient, steady state can be achieved by increasing the electric field.
- The initial energy of the electrons has great effect on the steady state if the electric field is weak and the difference between the initial energy and the electrons mean energy is great, but this problem can be solved by extending the time.
- It is necessary to make a best combination between the gas density, the inter-electrode distance and the electric field to make a modeling by the fluid model method in the best cases of the steady state.

Concerning the magnetic field:

- When the cyclotron frequency is very inferior to the collision frequency the transverse and the longitudinal magnetic fields have no effect on the transport parameters.
- In the presence of the transverse magnetic field the electron energy distribution function (EEDF) is Maxwellian if $E/B > 251000$ Volt/Tesla and $E/N \geq 500Td$, all the transport parameters are in the steady state and decreases if B_T increases except the transverse diffusion coefficient, also the electron energy leaves the steady state if $E/B \leq 251000$ Volt/Tesla.
- The longitudinal magnetic field has no effect on the eedf and the most of the transport parameters except the transverse diffusion coefficient; it decreases if B_L increases but remains in the steady state.
- Generally under the magnetic field all the transport parameters are in the steady state if the time is sufficient except the transverse diffusion coefficient in the case of the significant transverse magnetic field.

In the case of AC discharges:

- If the gas density or the electric field amplitude increases: mean electrons energy, drift velocity, ionization frequency and ionization coefficient tend

toward a regular sinusoidal behavior and the phase shift between these parameters and the electric field decreases.

- The diffusion coefficients tend toward approximately a constant values if the gas density increases.

Key words: Transport parameters, Steady state, Boltzmann equation, Fluid model, DC and AC discharges, magnetic field.

Table des matières

Contenues :	Page:
Remerciements	
Résumé	
Abstract	
Table des matières.....	9
Introduction	13
Chapitre I : Sources de plasmas	19
I-1. Introduction:.....	21
I-2. Classification des Plasmas :.....	22
I-3. Méthodes de production :.....	23
I-4. Décharges de courant continue (DC discharges) :	24
I-4-1. Description macroscopique:	24
I-4-2. Classification des DC décharges électriques :	25
I-4-3. L'amorçage de la décharge :	26
I-4-4. Le claquage :	26
I-4-5. Le phénomène d'avalanche :	27
I-5. Les différents types de décharges électriques dans les gaz :	28
I-5-1. Les décharges de Townsend :	28
I-5-2. Les décharges luminescentes :	28
I-5-3. La décharge d'arc électrique :	30
I-6. Décharges de courant alternatif (AC discharges) :	32

I-6-1. Décharges capacitivement couplées (CCDs) :	32
I-6-2. Décharges inductivement couplées (ICDs) :	33
I-6-3. Décharges hélicon (HDs) :	34
I-6-4. Décharges micro-onde (MDs) :	35
I-6-5. Décharges ECR (ECRDs) :	35
I-6-6. Décharges de l'onde surface (SWDs) :	36
I-7. Application des plasmas froids :	37

CHAPITRE II : Modélisation des décharges de gaz

II-1. Introduction :	41
II-2. L'objectif de la modélisation numérique :	41
II-3. L'équation de Boltzmann :	42
II-4. Résolution de l'équation d Boltzmann :	44
II-4-1. Les méthodes d'expansion :	45
II-4-2. Les méthodes de fluide :	48
II-5. Méthodes de prélèvement :	50
II-6. Combinaisons de ce qui précède :	50

CHAPITRE III : Processus de Collisions de l'Azote

III-1. Introduction :	55
III-2. Sections efficaces total de dispersion :	55
III-3. Sections efficaces de la collision élastique :	56
III-3-3.1 Sections efficaces de dispersion élastique :	56
III-3-3.2 Sections efficaces de transfert de mouvement :	57
III-4. Excitation :	58
III-4-1. Excitation rotationnel :	58
III-4-2. Excitation vibrationnel :	59
III-4-3. Les états électroniques excités :	60
Les états excités bas :	60
Les états excités élevés :	62

III-5. Ionisation :	64
CHAPITRE IV : Mouvement d'un électron dans un champ Electromagnétique	67
IV-1. Introduction :	69
IV-2. Cas d'un champ électrique et champ magnétique nul :	69
IV-3. Cas d'un champ magnétique transversal :	70
IV-4. Cas d'un champ magnétique longitudinal :	72
IV-5. Cas particulier :	74
IV-5-1. Cas du champ magnétique transversal :	75
IV-5-2. Cas du champ magnétique longitudinal :	76
CHAPITRE V : Méthode de Monte Carlo pour le calcul des paramètres de transport des électrons	77
V-1. Introduction :	79
V-2. Méthode de Monte Carlo :	79
V-2-1. Description :	79
V-2-2. Principe de la méthode de Monte Carlo :	80
V-2-3. Génération des nombres aléatoires :	80
V-2-4. Calcul de temps entre deux collisions successives :	80
V-3. Traitement de collisions :	81
V-3-1. Processus de collision choisie :	81
V-3-2. Traitement des interactions électron–molécules :	82
Les collisions élastiques électron–molécule (e–M) :	82
Les interactions inélastique électron–molécule (e–M) :	85
V-4. Les équations de mouvement :	85
V-4-1. Cas d'un champ électrique et champ magnétique nul :	85
V-4-2. Cas d'un champ électrique et champ magnétique longitudinal :	86
V-4-3. Cas d'un champ électrique et champ magnétique transversale :	87
V-4-4. Cas d'un champ électrique sinusoïdal :	87
V-5. Calcul des paramètres de transport :	88

V-5-1. Fonction de distribution :	88
V-5-2. Vitesse de dérive :	88
V-5-3. Coefficient de diffusion transversal :	89
V-5-4. Coefficient de diffusion longitudinal :	90
V-5-5. Coefficient d'ionisation (de Townsend) :	90
L'organigramme de Monte Carlo :	92
CHAPITRE VI : Résultats et discussions	
	93
VI-1. Introduction :	95
VI-2. Conditions expérimentales et comparaison :	95
VI-3. Etude de l'équilibre des décharges de courant continu (décharges DC) :	98
VI-3-1. L'effet de la densité du gaz :	98
VI-3-2. L'effet de l'énergie initiale des électrons primaires :	99
VI-3-3. L'effet du champ électrique :	103
VI-3-4. L'effet du champ magnétique :	104
VI-3-4-1. L'effet du champ magnétique transversal :	104
VI-3-4-2. L'effet du champ magnétique longitudinal :	110
VI-4. Etude de l'équilibre des décharges de courant alternatif (décharge AC) :	112
VI-4-1. l'effet de la densité de gaz :.....	113
VI-4-2. L'effet de l'amplitude du champ électrique :.....	118
Conclusion:	119
Références:	125

Introduction

Généralement dans les plasmas les électrons sont supposés à l'équilibre thermique, avec cette approximation plusieurs approximations peuvent être utilisés et plusieurs problèmes peuvent être résolues comme: la possibilité d'utiliser les approximations du régime hydrodynamique. Egalement, dans ces conditions la fonction de distribution des électrons peut être prise Maxwellienne. La simulation de la densité des électrons par la méthode fluide model et l'équation de Boltzmann devient alors possible.

En outre des décharges électriques continues sont souvent utilisées pour créer des états d'équilibre dynamique où il y a un équilibre entre la production (sources) et la perte [1]. Un nombre de chercheurs ont étudié l'EEDF (la fonction de distribution d'énergie d'électron) de l'état d'équilibre dans diverses décharges de gaz sous un champ électrique DC appliqué. Par exemple Engelhardt and Phelps [2] ont dérivé un ensemble de sections efficaces élastiques et inélastique pour les électrons dans H et D, par la résolution de l'équation de Boltzmann en utilisant l'approximation de deux termes. Nighan [3] a étudié l'EEDF et les taux de collisions dans les gaz N_2 , CO et CO_2 . Tagashira, Sakai, and Sakamoto [4] ont résolu l'équation de Boltzmann pour un champ électrique réduit élevé (E/N) dans Ar. Yachi et al [5] ont utilisé l'approximation multi-termes pour résoudre l'équation de Boltzmann. Yochida et al [6] ont étudié l'effet des électrons produit par l'ionisation sur la distribution d'énergie d'électron.

L'étude de l'état d'équilibre des paramètres de transport à partir de la résolution direct de l'équation de Boltzmann a fait l'objet d'un grand nombre de travaux mais il y a peu de travaux qui traitent l'état d'équilibre on utilisant la méthode de Monte Carlo. Dans ce travail la méthode de Monte Carlo est utilisée, les avantage de cette méthode est que la fonction de distribution est un résultat de la simulation mais n'est pas outil de la simulation, encore il y a moins d'approximations pour être considéré dans la simulation, troisièmement elle peut être utilisé dans le régime non hydrodynamique.

Dans ce travail on va étudier les paramètres expérimentaux principaux qui influent sur l'état d'équilibre des électrons dans deux types de décharges : les décharges de courant continue (les décharges DC) et les décharges de courant alternatif (les décharges AC).

Dans le cas des décharges DC les paramètres expérimentaux étudiés sont : la densité de gaz, l'énergie initiales des électrons primaires gagné par le rayonnement d'initiation de décharge, le champ électrique et le magnétique (transversal et longitudinal). Le champ magnétique à un grand intérêt dans la physique de plasmas froids particulièrement le décharge RF inductivement couplé.

Dans le cas des décharges AC les paramètres expérimentaux étudiés sont : la densité de gaz et l'amplitude du champ électrique. Dans ces types de décharges la plus part des paramètres de transport ont un comportement sinusoïdal, plus rigoureusement l'effet de la densité de gaz et l'amplitude du champ électrique sur le comportement sinusoïdal des paramètres de transport est étudié. L'étude des paramètres de transport dans le cas des décharges AC donne une très bonne compréhension du comportement des électrons dans ces types de décharges.

Dans ce travail on s'intéresse seulement à l'étude de l'état d'équilibre pour les électrons, on néglige totalement l'état d'équilibre des ions ou l'état d'état d'équilibre des neutre. On néglige aussi la contribution des ions et des neutres dans les décharges parce qu'il rend le système plus complexe.

Dans le premier chapitre on va voir différents types de décharges objectives d'étude précédemment et actuellement est sont intérêt dans l'industrie.

Dans le deuxième chapitre deux on va voir les types de simulation de décharges dans la physique des plasmas froids tel que la modélisation par la résolution de l'équation de Boltzmann et la méthode fluide model qui nécessitent la supposition de l'état d'équilibre pour un espèce à étudier.

Dans le troisième chapitre on va voir les différents types de processus de collisions de l'azote puisque le gaz utilisé dans ce travail est l'azote.

Dans le quatrième chapitre on va voir les équations de mouvement qui gèrent le mouvement de l'électron dans le cas du champ électrique et dans le cas du champ électromagnétique.

Dans le cinquième chapitre on va voir la méthode de simulation en détail comme la méthode de Monte Carlo de collision (MCC) et les équations utilisées pour déterminer les paramètres de transport.

Dans le dernier chapitre les résultats sont interprétés et discutés dans les différents cas: l'effet de la densité de gaz, l'effet de l'énergie initiale des électrons primaires, l'effet du champ électrique et l'effet du champ magnétique (transversal et longitudinal) pour une décharge DC, et l'effet de la densité de gaz et l'amplitude du champ électrique pour une décharge AC.

Chapitre I

Sources de plasmas

I-1. Introduction :

Les plasmas sont le quatrième état de la matière et représentent près de 99 % de l'Univers. Ils existent soit à l'état naturel (couronne solaire, Soleil, intérieur des étoiles, ionosphère, intérieur des naines blanches...), soit en laboratoire où ils sont généralement produits par des décharges électriques. Ce sont des gaz contenant des atomes, des molécules et des ions dans l'état fondamental ou dans un état excité, des électrons et des photons qui proviennent de la désexcitation des états excités. Les électrons, particules très légères par rapport aux ions et aux neutres, sont fortement accélérés par les champs électriques et/ou magnétiques et jouent un rôle tout particulier.

Il y a de diverses manières d'assurer l'énergie nécessaire pour la génération de plasma à un gaz neutre. Une possibilité doit assurer l'énergie thermique, par exemple en flammes, où des réactions chimiques exothermiques des molécules sont employées comme source d'énergie principale. La compression adiabatique du gaz est également capable de chauffer le gaz jusqu'au point de génération de plasma.

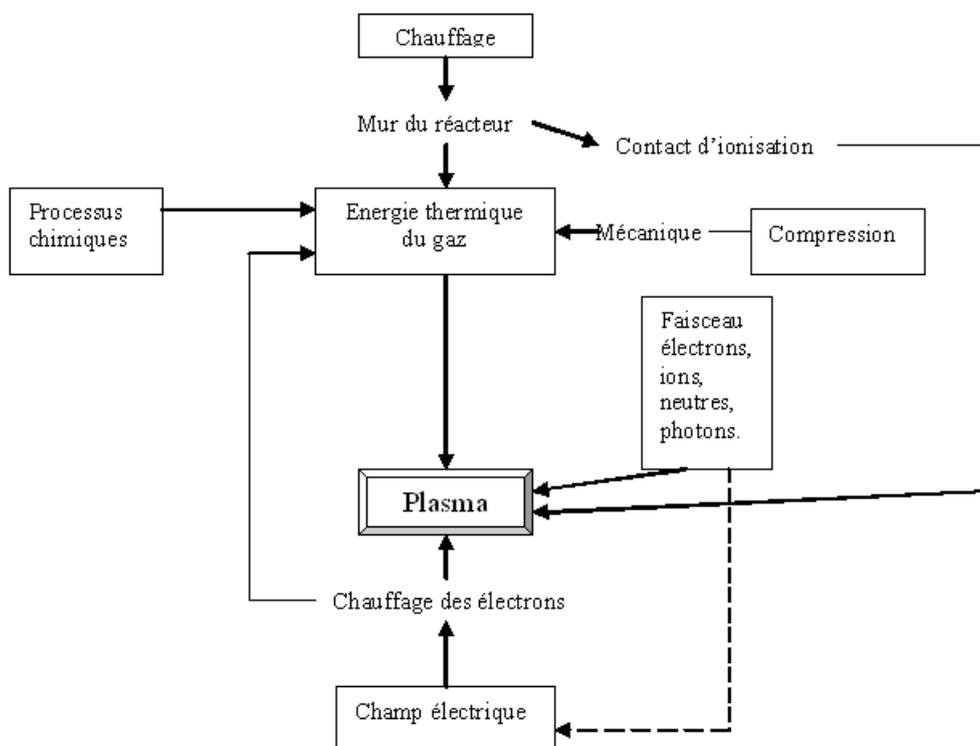


Figure I-1 : Principe de génération de plasmas.

Encore une autre manière d'assurer l'énergie à un réservoir de gaz est par l'intermédiaire des faisceaux énergiques qui se transforme dans le volume de gaz. Les faisceaux des particules neutres ont l'avantage supplémentaire d'être non perturbé par les champs électriques et magnétiques.

Des faisceaux de particules neutres sont principalement employés pour soutenir des plasmas ou pour le chauffage de plasma dans des dispositifs de fusion. La génération d'un plasma en employant des faisceaux de particules, particulièrement des électrons chargés, sera discutée dans ce chapitre. La figure I-1 résume les différentes méthodes de génération de plasmas.

I-2. Classification des Plasmas :

Il est possible de distinguer deux grandes catégories de plasma, selon la température et leurs différentes composantes : plasma thermique et non-thermique. Les plasmas thermiques sont caractérisés par une seule température de gaz T_g , la température des électrons T_e , est très voisine de la température des espèces lourdes (les ions et les neutres).

Ces plasmas froids thermiques sont donc généralement à l'équilibre thermodynamique local (ETL). En revanche, cet équilibre thermodynamique est loin d'être réalisé dans le cas des plasmas froids non thermiques qui nous intéressent dans le cadre de cette étude. Ces plasmas non thermiques sont naturellement caractérisés par plusieurs températures. La température des électrons T_e est très grande devant celle de gaz T_g qui reste assez proche de la température ambiante, il y a également une température des ions qui peut être assez grande par rapport à celle du gaz surtout à basse pression ainsi qu'une température propre aux états excités notamment les états vibrationnels qui sont un réservoir d'énergie souvent à l'origine de la dynamique du gaz provoquée au sein de ces plasmas froids non-thermiques. Ce sont donc des plasmas en régime hors équilibre thermodynamique mais aussi réactifs parce que la micro-réversibilité n'est naturellement pas vérifiée lors des collisions inélastiques.

Connaissant la densité d'électrons n_e et la densité de neutres n_0 , on peut définir le degré d'ionisation d'un gaz α par :

$$\alpha = \frac{n_e}{n_e + n_0}$$

On parle de gaz faiblement ionisés lorsque $\alpha \leq 10^{-4}$ (principales interactions de type collisions électron-neutre) et de gaz partiellement voire fortement ionisés lorsque $\alpha_i > 10^{-4}$ où les interactions coulombiennes ne sont plus négligeables (collision électron-électron ou électron-ion).

Dans les plasmas froids hors équilibre, les électrons peuvent pouvoir acquérir des énergies suffisamment élevées pour induire des collisions inélastiques générant des radicaux, des ions et des espèces métastables. L'énergie électrique est dans ce cas transformée en énergie chimique entraînant de l'ionisation, de la dissociation et de l'excitation des atomes et des molécules du gaz.

I-3. Méthodes de production :

Très souvent deux catégories de plasmas sont définies : les plasmas naturels et les plasmas créés par l'homme. Ils sont produits dans une gamme de pression si importante qu'on les caractérise généralement en fonction de la température des électrons T_e et de la densité des électrons n_e .

Les **plasmas peuvent être générés** en faisant passer un courant électrique à travers un gaz. Comme les gaz à température ambiante sont des excellents isolants, il convient de générer un nombre suffisant de porteurs de charge pour rendre le gaz conducteur. Cela est connu sous le nom de phénomène de **claquage électrique** et peut être accompli de différentes manières (le claquage crée un chemin conducteur entre une paire d'électrodes et induit une décharge dans le gaz).

En **courant continu ou alternatif**, il existe une très grande variété de décharges qui dépendent du courant qui peut varier entre 9–10 et 105 A.

Naturellement les plasmas peuvent être produits aussi par la **focalisation de faisceaux laser**, par des **ondes de choc**, par des **flames** éventuellement dopées avec des matériaux facilement ionisables ou la **fusion nucléaire**.

I-4. Décharges de courant continu (DC discharges) :

I-4-1. Description macroscopique :

Considérons un gaz à une pression 'P' compris entre deux électrodes métalliques planes parallèles séparées par une distance 'd'. Une tension 'V' est appliquée entre les deux électrodes. La figure I-2 représente le dispositif expérimental schématisé de la manière suivante:

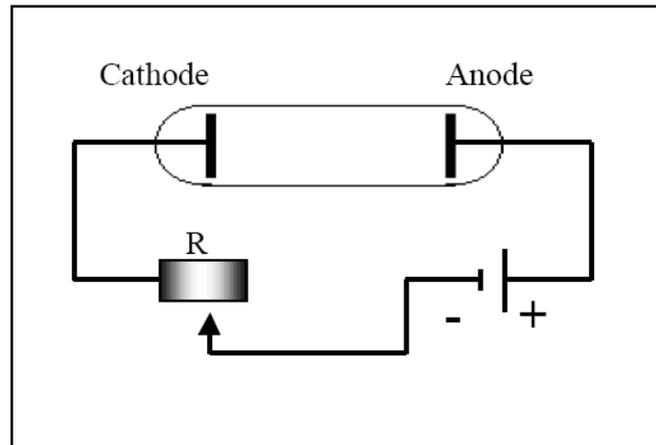


Figure I-2 : Dispositif expérimental pour l'étude des décharges électriques.

Naturellement, le gaz étant de bons isolants aucun courant ne traverse le gaz. Des instruments perfectionnés peuvent détecter un courant de l'ordre de 10^{-15} A (figure I-3) dû aux charges générées par les rayons cosmiques ou la radioactivité. Mais si la tension dépasse une valeur critique V_d , il y a claquage (appelé aussi *rupture*) : on mesure brutalement une intensité dans le circuit et on observe une émission lumineuse. Tant que la source ne limite pas le courant, le gaz reste conducteur; une décharge électrique autonome a lieu.

Le phénomène observé s'interprète comme la traversée du gaz par des électrons accélérés par le champ électrique, provenant initialement de la cathode (électrode négative) et qui par un phénomène d'avalanche se multiplie en produisant une ionisation du gaz.

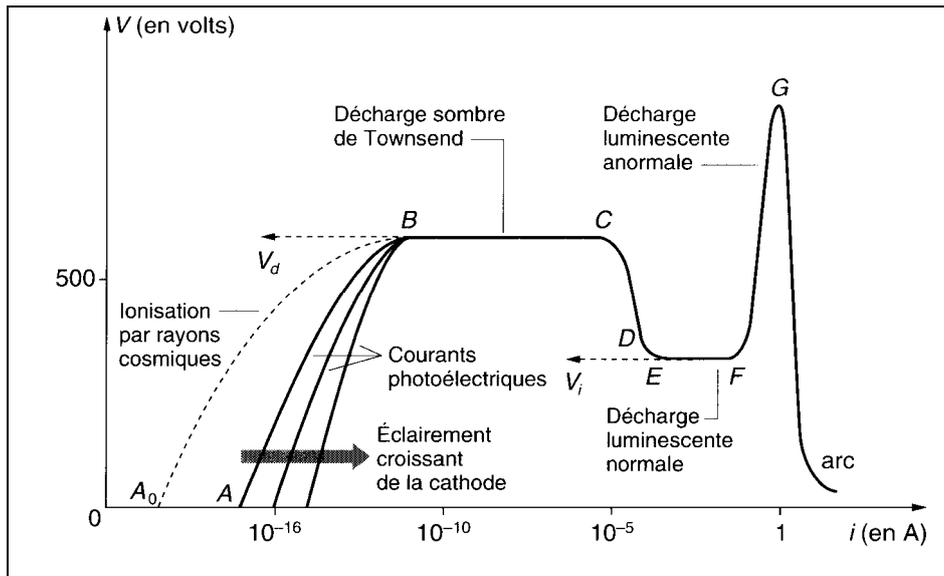


Figure I-3 : Caractéristique $V(i)$ des décharges autonomes à la décharge électrique.

I-4-2. Classification des DC décharges électriques :

On distingue plusieurs types de décharges électriques autonomes générées par une tension continue.

A **faible pression** de l'ordre de 1000 Pa et **courant faible** inférieur au dixième d'ampère, on observe dans les tubes appropriés une colonne neutre uniforme lumineuse diffuse constituée d'un plasma faiblement ionisé occupant le volume total du tube, sauf au voisinage des électrodes. On parle alors de **décharge lumineuse** (*glow discharge*). Ce type de décharges se rencontre par exemple dans les tubes Néon ou les lampes à vapeur de sodium.

Pour une pression plus importante proche de la **pression atmosphérique** et une **intensité** importante de l'ordre de **l'ampère**, on obtient rapidement **une décharge d'arc** ou arc électrique (*arc discharge*), qui sont produits en général à partir d'une tension modérée d'une dizaine de volts. L'arc se présente comme un filament incandescent qui dégage une forte puissance thermique. Il est d'usage courant dans l'industrie pour la métallurgie, la soudure à arc, la chimie, la découpe, le chauffage...

Ensuite, à **haute pression** et à **très haute tension** avec une distance inter-électrode importante, on observe une étincelle (*spark*), qui est une décharge électrique transitoire. Un canal de plasma croît rapidement d'une électrode à l'autre, pour permettre le passage des

porteurs de charge au moment du claquage (*breakdown*). Les **éclairs** ont la forme la plus intense et la plus grande de ce type de décharge.

Enfin à **très haute tension** et à **haute pression**, lorsque le champ électrique est fortement inhomogène d'après la forme et la configuration des électrodes, on peut observer une décharge **couronne** (*corona*), qui adopte une forme complexe et véhicule et un courant très faible. Ce phénomène peut s'expliquer par l'apparition de claquages en des points très localisés entre les électrodes.

I-4-3. L'amorçage de la décharge :

Les phénomènes d'initiation des décharges électriques (encore appelés claquage) sont de plusieurs types et peuvent différer pour le même système selon les conditions expérimentales de pression, puissance, tension et distance inter-électrodes, ...

La condition générale d'initiation et de maintien la décharge peut être cependant formulé en disant que le taux de production des électrons doit compenser leur taux de pertes par des recombinaisons homogènes en volume ou sur les parois entourant la décharge.

Le scénario d'établissement de la décharge peut être synthétisé de la manière suivante. En présence d'un champ électrique, les quelques électrons présent dans le gaz plasmagène, ceux créés par le rayonnement cosmique par exemple, vont être accélérés et acquérir de l'énergie jusqu'à dépasser la valeur correspond au seuil d'ionisation du gaz. Ces électrons vont pouvoir ioniser le gaz et créer d'autres électrons qui seront à leur tour chauffés par le champ et devenir source d'ionisation. Cette première étape est régie par le champ Laplacien imposé dans le système. Quand la densité des électrons devient suffisamment importante, les phénomènes collectifs deviennent dominants et le champ de charge d'espace induit par le plasma, permettra d'entretenir l'ionisation et maintenir le plasma.

I-4-4. Le claquage :

Si le gaz est partiellement ionisé, il devient conducteur et la décharge se produit. Il faut donc étudier les différents mécanismes de production et de destruction des espèces chargées dans le gaz et aux électrodes. Dans le gaz, les processus d'ionisation par collisions et photo-ionisation permettent d'augmenter la densité de charges à partir des électrons venant de la

cathode. Le processus majoritaire provient de la collision d'un électron rapide sur une molécule du gaz.

I-4-5. Le phénomène d'avalanche :

Le claquage électrique (ou rupture), visible à l'oeil nu par l'étincelle ou la décharge produite, correspond au moment où le champ électrique dépasse la valeur seuil nécessaire à l'amorce de la décharge. En effet le processus d'ionisation augmente alors considérablement. Les électrons sont suffisamment accélérés par le champ pour produire d'autres électrons par des collisions, qui à leur tour acquerront par le champ électrique assez d'énergie pour ioniser d'autres atomes, et ainsi de suite. C'est ce phénomène, dite avalanche, qui provoque un accroissement exponentiel de la densité de charge électronique lorsqu'on s'éloigne de l'électrode. Le claquage a donc lieu du fait du phénomène d'avalanche. Ce n'est pas le processus de recombinaison qui s'y oppose, car la densité électronique avant le claquage est beaucoup trop faible, mais les pertes d'énergie des électrons par collisions, l'excitation des molécules du gaz et la diffusion. Le champ électrique doit en effet apporter assez d'énergie aux électrons pour compenser ces facteurs et diriger les électrons à l'anode.

La figure I-4 donne l'allure de la courbe de Paschen pour l'air et pour de faible produit pd . Celle ci passe d'un minimum qui correspond, pour l'électron, aux conditions optimales de gain d'énergie entre deux collisions.

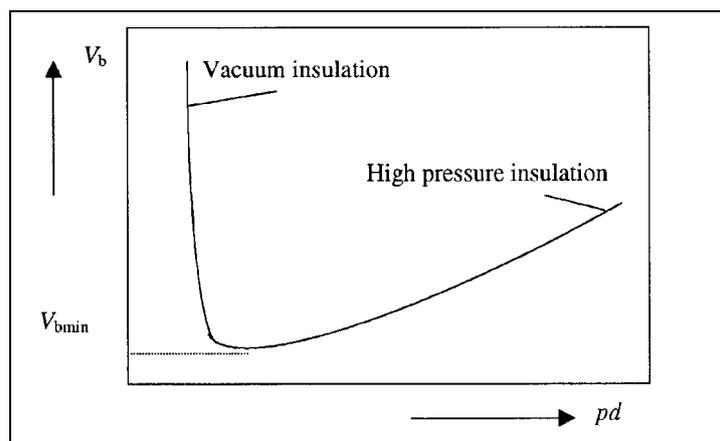


Figure I-4 : Courbe de Paschen [1]

I-5. Les différents types de décharges électriques dans les gaz :

I-5-1. Les décharges de Townsend :

Comme on peut voir sur la figure I-3 cette décharge est caractérisée par une résistance interne dynamique soit $dV/dI = 0$ quelque soit la force électromotrice de la source, la différence de potentiel aux bornes de la décharge est fixe et constante. Elle est appelée tension d'amorçage statique V_s . La courbe illustré précédemment sur la figure 3 ne peut être décrite qu'en faisant varier I .

I-5-2. Les décharges luminescentes :

Ce type de décharges a connu historiquement une grande importance car elle constituait une application de l'étude des plasmas faiblement ionisés hors d'équilibre, relativement simple à mettre en oeuvre. Considérons le dispositif expérimental cité précédemment (Figure I-2), avec une pression P comprise usuellement entre 1 et 1000 Pa. La tension requise pour entretenir la décharge est de l'ordre de quelques centaines de volts. Le courant est alors typiquement de $[10^{-1} \text{ à } 10^{-4}] \text{ A}$.

Si nous nous intéressons à présent de plus près à la décharge luminescente. En effet, on peut distinguer tour à tour des régions sombres et lumineuses. Cela est dû aux variations suivant l'axe du champ électrique et du potentiel. Chacune de ces régions présente des propriétés qui lui sont propres. Le schéma suivant précise et présente les grandeurs caractéristiques qui leur sont associées.

La décharge obtenue à l'issue de l'étape d'initiation présente une structure relativement complexe avec différentes zones lumineuses (figure I-5). La formation de ces zones s'explique par la différence de mobilité entre les électrons et les ions : la mobilité des électrons est environ 100 fois plus importante que celle des ions positifs. Le schéma ci-dessus montre les différentes zones pour ce type de décharge.

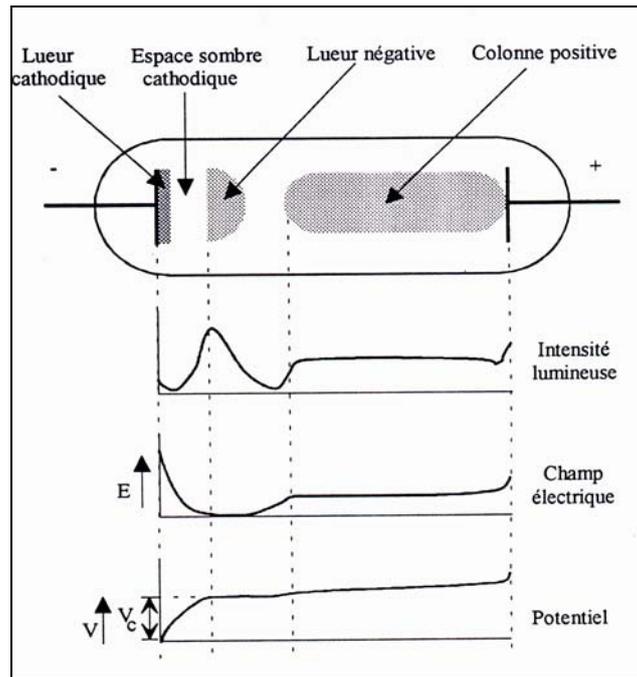


Figure I-5: Différentes régions de la décharge luminosité, champ électrique et potentiel [1]

Les régions les plus importantes qui jouent un rôle important dans le maintien de la décharge sont l'espace sombre cathodique, appelé encore chute cathodique et la lueur négative. La zone appelée colonne positive a également été beaucoup étudiée. Elle présente en effet la particularité de posséder un champ électrique constant qui en fait un outil de choix pour la mise en œuvre d'études académiques assez détaillées sur les phénomènes collisionnels et hors équilibre dans les décharges électriques.

La chute cathodique ou gaine cathodique se caractérise par un champ électrique important. Dans cette zone, la densité ionique est beaucoup plus importante que la densité électronique du fait de la différence de mobilité. La valeur du champ électrique dans cette région qui concentre l'essentiel de la chute de potentiel est beaucoup plus importante que le champ géométrique car la charge créée par la différence de densité positive et négative conduit à l'augmentation du champ électrique local.

Sous l'effet de ce champ intense, les ions acquièrent une énergie cinétique importante et lorsqu'ils bombardent la surface de la cathode, produisent une émission d'électrons secondaires. Ces derniers sont à leur tour accélérés vers le cœur de la décharge. Leur énergie reste cependant trop faible dans la zone cathodique où ne règne pratiquement pas

d'excitation ou d'ionisation. Aucune lumière n'est donc observée dans cette zone qui présente un aspect sombre. Par contre, la lueur négative caractérisée par une forte intensité lumineuse correspond à la zone où les électrons arrivant de la cathode ont atteint des énergies considérables leur permettant l'excitation et l'ionisation des molécules du gaz. Après cette zone lumineuse, les électrons ont perdu une grande partie de leur énergie et ne peuvent plus exciter les molécules neutres, c'est l'espace sombre de Faraday.

La dernière zone est la colonne positive dans laquelle le champ électrique est constant. Il se stabilise à une valeur relativement faible mais supérieure à celle de la lueur négative de manière à ce que la création de charges par ionisation locale compense la perte de charge par recombinaison ou destruction sur les parois. Les densités de particules sont importantes dans cette zone mais le plasma est électriquement neutre. La fonction de cette zone est très variable suivant les conditions de décharges.

I-5-3. La décharge d'arc électrique :

La différence essentielle entre la décharge d'arc et la décharge luminescente se situe au niveau de l'émission cathodique. L'apparition de l'arc est conditionnée par celle des phénomènes thermiques qui sont dominants. Lorsque l'émission de courant devient très intense, la température s'élève localement, et, contrairement au cas de la décharge luminescente (où la totalité de la cathode est émissive), l'émission s'effectue ici à partir d'une région très localisée, et souvent très mobile, appelée spot cathodique.

Ils existent pour une pression de l'ordre de la pression atmosphérique et une intensité de l'ordre de 1A.

Les propriétés thermiques avec une température du milieu élevée, et chimiques avec des conditions idéales pour certaines réactions des arcs, leur donnent de multiples applications, en particulier dans le secteur de la métallurgie, dont on peut citer, les appareils de coupure, les lampes à arc et soudure (Figure I-6).



Figure I-6 : Représente un aperçu réel d'un arc électrique.

Il existe trois grandes méthodes pour amorcer un arc électrique :

- Transition continue, Le système est au départ dans un état de décharge luminescente. La cathode est recouverte par le plasma de décharge. Si on augmente l'intensité, la tension d'extraction des électrons augmente et la température s'élève. L'émission thermo-électronique devient majoritaire. On arrive ainsi, d'une manière continue, à passer d'une décharge luminescente à un arc électrique.
- Contact, Il est possible de déclencher l'arc par contact. On considère deux pastilles de métal traversées par un courant suffisant. Lorsqu'on les sépare, grâce aux irrégularités de la surface, le courant passe par un contact très fin; la température s'élève par effet joule jusqu'à la fusion du métal. On a donc un filet de métal fondu très fin par lequel passe tout le courant. Lors de la rupture du pont fondu, on est dans les conditions de formation d'un arc électrique.
- Surtension, Lorsque la tension dépasse la tension de claquage, une étincelle apparaît. On obtient alors un arc par phénomène d'avalanche.

Quand on annule le champ électrique entre les électrodes, le courant disparaît, mais le plasma subsiste encore quelque temps. Le temps de subsistance dépend de la vitesse de recombinaison électrons - ions et du refroidissement du gaz.

I-6. Décharges de courant alternatif (AC discharges) :

I-6-1. Décharges capacitivement couplées (CCDs) :

De telles décharges sont principalement employées pour la pulvérisation ou la gravure forte des ions réactifs [3], [4]. Le dispositif de base est montré dans la figure I-7. La gamme de fréquence est habituellement entre 1 et 100 MHz. Les longueurs d'onde correspondantes (300–3 m) sont grandes comparées aux dimensions du réacteur de plasma. La gamme de pression est typiquement entre 1 et 10 Pa. Les densités des électrons obtenues sont dans la gamme $10^9 - 10^{10} \text{ cm}^{-3}$. La puissance à une des électrodes est alimentée par un condensateur.

L'autre électrode est fondue. Un dispositif important de CCDs est qu'un grand, négatif, tension d'auto-polarisation se développe sur l'électrode de puissance en ce qui concerne le plasma (ou le fond). Ce potentiel aide à tirer dehors les ions du plasma et en raison de la grande chute de tension, ces ions acquièrent l'énergie suffisante (jusqu' à quelques centaines d'électron volts) pour causer la pulvérisation ou la gravure forte efficace de l'électrode. Les derniers sont donc employés comme matériel cible dans le processus.

Il peut se rappeler de la discussion antérieure sur les plasmas RF, qu'à ces fréquences les ions ne suivent pas le champ de RF, alors que les électrons sont encore perdus du système. En conséquence, le plasma développe un potentiel temps-moyenne qui aide l'expulsion des ions du plasma en conduisant les courants temps-moyenne d'ion aux deux électrodes.

Il peut noter que la tension d'auto-polarisation diminue à des pressions plus élevées, de sorte que l'énergie de bombardement d'ion réduite également. C'est dû au fait que pour $v_c \gg \omega$, les électrons n'obtiennent pas pour exécuter leur pleine oscillation. En conséquence, la perte d'électron diminue et le besoin de potentiels élevés de plasma pour conduire les ions hors du système disparaît également. Ainsi, la tension d'auto-polarisation est basse ou nominal, pour la plupart des applications liées à la gravure forte des ions réactifs, etc. La grande énergie de bombardement d'ion est désirable et ainsi pour telles applications une réduction de la tension d'auto-polarisation n'est pas un dispositif attirant. Une telle application peut donc, entrepris seulement dans des gammes très spécifiées de pression.

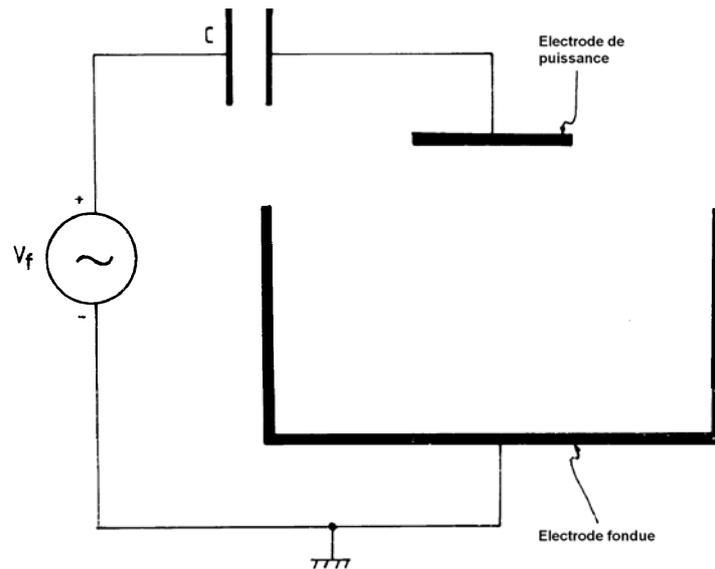


Figure I-7: Schéma du système de la décharge capacitivement couplée [7].

I-6-2. Décharges inductivement couplées (ICDs) :

Dans telles décharges (figure I-8), le RF est alimenté aux enroulements hélicoïdaux enroulés axialement autour d'un navire diélectrique cylindrique de plasma (habituellement de quartz) [8]. La puissance est couplée dans la décharge par l'action de transformateur (le couplément par rayonnement est faible pour la petite taille d'enroulement des rapports de longueur d'onde rf de l'espace libre utilisés). La gamme de fréquence est typiquement entre 1 et 100 MHz. A ces fréquences le couplément de transformateur est efficace, bien qu'un noyau magnétique de transformateur soit absent. Les lignes de champ électrique induites dans des boucles enfermées de forme ICDs (normal à l'axe d'enroulement), de sorte que les accélérations et les oscillations d'électron se produisent dans des orbites courbées. Ceci réduit de manière significative les pertes d'électron aux murs. C'est contrairement au CCDs, où ces oscillations sont linéaires et les pertes aux électrodes sont inévitables pour $x_0 > L/2$. (Dans CCDs et les décharges DC, le champ électrique fournit l'énergie exigée pour l'ionisation d'une part, aussi aide les électrons d'aller hors du système, en provoquant une perte plutôt lourde des électrons).

En raison de la perte réduite d'électrons dans ICDs, les densités de plasma atteignais dans ces derniers sont beaucoup plus hautes que ceux dans CCDs. Typiquement, les densités de plasma dans ICDs sont aussi hautes que 10^{12} cm^{-3} . En outre, pour des décharges en contact avec les électrodes fondées (comme dans la figure 8), les potentiels de plasma sont

également bas, puisque les ions ne doivent plus être conduits aux murs dans des grands nombres pour l'arrachement des électrons secondaires. ICDs ont été employés pour des applications telles que la déposition de couche mince, gravure forte de plasma et les sources d'ion pour l'analyse spectroscopique de masse [8].

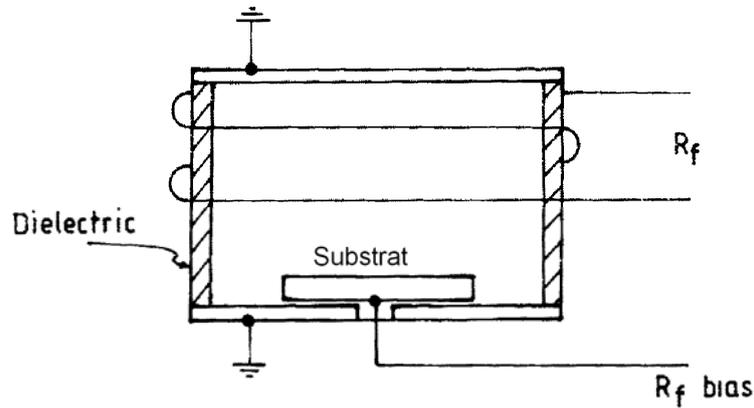


Figure I-8: Schéma de la décharge inductivement couplée [9].

I-6-3. Décharges hélicon (HDs) :

L'installation utilisée pour HDs semble similaire à celle utilisée pour ICDs, le principe de fonctionnement de l'ancien est tout à fait différents [10], [11]. Comme cité précédemment, la puissance de RF dans HDs est couplée via des ondes appropriées qui sont excitées et absorbées dans le plasma à la fréquence appliquée RF. Ceci rend le processus extrêmement efficace. Pour HDs typique, la fréquence de l'opération est entre 1 et 50 MHz. Il peut noter que pour qu'une onde soit efficacement absorbée dans le plasma, la longueur de la colonne de plasma devrait être plusieurs échelles de longueurs d'absorption. En outre, l'efficacité d'accouplement aux ondes, en utilisant les structures simples d'antenne, devrait être largement modérée. Dans la gamme choisie de fréquences, de telles ondes sont valables dans les plasmas magnétisés. En fait, les ondes en question sont les prétendues ondes hélicon qui sont des ondes de basse fréquence qui se propagent parallèle au champ magnétique appliqué très inférieur à la résonance cyclotron d'électron (ECR). Puisque les fréquences appliquées sont entre 1 et 50 MHz, un champ magnétique de 100–300 G généralement suffit. En général, les ondes hélicon sont les ondes polarisées droites-circulaire, bien que les ondes hélicon gauche-polarisés [12] sont également possibles dans les plasmas cylindriques liés. La fréquence de ces ondes est si basse que les girations d'électron dans le champ magnétique peut être négligées et seulement les mouvements de

centre de guidage sont maintenus. En outre, à ces basses fréquences, l'onde n'est pas purement électromagnétique, mais est partiellement électrostatique. Des ondes Hélicon sont excitées dans la décharge seulement à la puissance modérément très élevée (≥ 300 W). Aux basses puissances, le couplage est non-résonant et les densités de plasma obtenues sont basses. Un saut discontinu dans la densité a lieu quand la puissance est augmentée à quelques centaines de watts et les ondes hélicon sont excitées.

Pour voir les différentes structures des antennes pour exciter les ondes hélicon vous pouvez voir les travaux [8, 11].

I-6-4. Décharges micro-onde (MDs) :

Comme dans les décharges RF, les décharges micro-onde peuvent être opérées avec et sans les champs magnétiques externes. Sans les champs magnétiques externes dans les décharges micro-onde les fréquences sont habituellement utilisées entre quelques GHz et plusieurs GHz, la fréquence 2,45 GHz est la plus commune. En raison des hautes fréquences impliquées, la puissance est presque invariablement couplée par le rayonnement, qui dévie toutes les pertes de gaine. L'antenne peut être située à l'intérieur du navire ou à l'extérieur. (Dans l'un ou l'autre cas, l'installation entière a un bouclier électromagnétique pour éviter le risque de rayonnement.) Sur la pénétration dans le plasma, les couples micro-onde à un mode du plasma et l'absorption de ce mode par les particules de plasma aident à maintenir le plasma. L'absorption de puissance dépend de la pression. Aux pressions modérées l'absorption est par les collisions électron-neutre. L'amplitude d'oscillation pour des électrons dans les décharges micro-onde est environ 10–100 microns, de sorte que les pertes d'électron et les potentiels de plasma sont beaucoup inférieurs que dans des décharges rf. Les pertes d'électron sont principalement par diffusion dans ces décharges.

I-6-5. Décharges ECR (ECRDs) :

Les fréquences utilisées pour les applications de la résonance cyclotron d'électron (ECR) de base peuvent changer de quelques GHz à plusieurs dizaines de GHz. Dans les tokamaks, la pré-ionisation et le chauffage sont habituellement entrepris aux fréquences entre 30 et 100 GHz, selon la valeur du champ magnétique toroïdal. Dans des sources de faisceau ionique, les conditions sont pour les densités élevées de plasma et le chauffage efficace d'électron. Les fréquences utilisées sont inférieures (typiquement entre 10 et 18 GHz), puisque les

sources de plus basse fréquence sont les meilleurs marchés et les champs magnétiques exigés sont inférieurs. Dans les applications relatives de traitement de plasma, la fréquence est de quelques GHz, la valeur typique choisie étant 2,45 GHz.

I-6-6. Décharges de l'onde surface (SWDs) :

Il est bien connu que le rayonnement électromagnétique *ne puisse pas* propager dans le plasma illimité et non magnétisé, quand la fréquence du rayonnement est inférieure à la fréquence de plasma. D'autre part, les plasmas produits dans les expériences sont réellement *des plasmas limités* qui ont *des frontières* avec l'autre diélectrique (par exemple vide) ou les médias de conduite. Dans telles circonstances, quand il n'y a aucune difficulté pour que n'importe quel rayonnement propage dans le diélectrique, les courants induits dans le plasma empêchent le rayonnement de pénétrer le plasma, si la fréquence de rayonnement est inférieure à la fréquence de plasma. (C'est un effet purement inductif, semblable à celle produit dans la pénétration des ondes électromagnétique dans les médias de conduits.)

Dans certains cas, bien que le rayonnement ne puisse pas propager *dans* le plasma, il peut propager *le long* de l'interface vide-plasma. Des ondes sont localisées sur la surface de plasma et s'appellent *les ondes surfaces*. Les amplitudes de champ de ces ondes font une pointe habituellement à l'interface, et à la descente brusquement du côté de plasma. Du côté diélectrique, deux situations différentes peuvent surgir [9]. Si le diélectrique contigu ou le vide a la dimension infinie, alors les amplitudes d'onde se délabrent brusquement. Cependant, si le diélectrique est en contact avec un deuxième milieu qui conduit, les champs ne besoin plus de tomber brusquement loin du côté diélectrique. Il peut noter que les ondes surface dans les plasmas non magnétisés sont habituellement électromagnétiques en nature.

Les ondes surface gagnent leur importance du fait que dans les expériences, le rayonnement électromagnétique est habituellement lancé dans le vide, près de la surface de plasma. Dans ces circonstances, si les conditions sont régulières, le rayonnement lancé, au lieu de pénétrer le plasma, peut propager comme onde extérieure à l'interface plasma-vide. Cette situation peut surgir facilement quand le plasma est très dense, entouré par une couche diélectrique qui peut ou ne peut pas être en contact avec une autre surface de conduite.

Il est possible que des décharges soient soutenues par des ondes extérieures, ces décharges sont alors connues en tant que *décharges d'onde extérieures* (SWDs).

I-7. Application des plasmas froids :

A cause de leurs propriétés thermiques et réactives, les plasmas froids ont de nombreux domaines d'études et d'applications :

- traitement de matériaux :
 - projection plasma,
 - dépôt de couches minces (1 μm), intermédiaire (1 μm -100 μm) ou épaisse (>100 μm),
 - traitement de surface des métaux et polymères,

- environnement :
 - traitement des effluents polluants gazeux ou liquides,
 - vitrification et traitement de déchets (amiante, REFIOM...),
 - traitement de l'eau,
 - destruction des bactéries,
 - neutralisation des odeurs,

- aéronautique :
 - traitement de surface,
 - propulsion,
 - rentrée atmosphérique,

- soudage et découpe des métaux,

- source de chaleur pour les fours (fours verriers, hauts-fourneaux...),

- sources d'éclairage domestique ou scientifique,
- disjoncteurs de centrales électriques : problèmes d'érosion des contacteurs liés à la formation d'arc électrique.

CHAPITRE II

Modélisation des décharges dans les gaz

II-1. Introduction :

Multiplés applications font intervenir des procédés par Les plasmas froids, ces plasmas jouent un rôle majeur en micro-électronique, dans la fabrication des circuits intégrés, dans la dépollution, la stérilisation et le traitement des surface. Ils sont également dans la gravure anisotrope due aux impacts ioniques sur le substrat et dans la synthèse des radicaux réactifs activée par impacts électroniques.

Le coût croissant des réacteurs justifient de plus en plus des investissements dans la compréhension des plasmas froids. Cette compréhension passe nécessairement par la modélisation et la conception de codes en raison de la complexité des phénomènes physico-chimiques qui se produisent dans les réacteurs à plasma.

Les objectifs des efforts de modélisation des réacteurs à plasma commerciaux sont:

- Réduire le temps de commercialisation des nouveaux réacteurs.
- Augmenter l'efficacité et la flexibilité des réacteurs.
- Améliorer la capacité de tester rapidement de nouveaux procédés.
- Prédire l'évolution des réacteurs.

Dans ce chapitre on va voir l'importance de l'état d'équilibre thermique dans les différentes types de simulations numériques utilisés dans la physiques des plasmas froids, tels que la simulation en utilisant l'équation de Boltzmann et la méthode dites fluide model, ces deux méthode ne peut être utilisées seulement si l'état d'équilibre thermique est réalisé.

II-2. L'objectif de la modélisation numérique :

La physique expérimentale fournit les ingrédients essentiels à la compréhension des phénomènes naturels, tels que les décharges de gaz: les observations expérimentales mènent aux théories et ces théories peuvent être examinées et améliorées par des observations additionnelles. Les théories peuvent être formulées dans des équations

mathématiques et ceux-ci peuvent être manœuvrés et fournies de nouvelles compréhensions.

Cette approche cependant a des limites: souvent on ne peut pas observer directement une quantité d'intérêt, ils besoins d'être déduite par des interprétations qui présente des propositions. D'ailleurs, quand beaucoup de processus physiques conspirent à créer des phénomènes observés, il peut être difficile de fournir une solution analytique à l'énigme qu'ils posent.

La modélisation numérique fournit une manière de compléter les expériences et la théorie en produisant une solution à l'ensemble complet d'équations qui est censé pour décrire le système. Par l'opposition aux observations expérimentales, toutes les quantités peuvent être connues et on peut examiner comment elles influencent l'un à l'autre en les manipulant artificiellement. Les quantités observables peuvent être directement comparées aux données expérimentales et ceci peut augmenter la confiance en validité du modèle. En conclusion, les résultats modèles peuvent inspirer de nouvelles expériences et aider à interpréter des observations.

On l'identifie généralement que, en principe, la prétendue équation de Boltzmann ainsi l'équation de Poisson pour le champ électrique et les conditions de frontière appropriés, décrit la physique de beaucoup de décharges complètement. Dans la pratique, cependant, l'équation de Boltzmann est difficile à manipuler et ne peut pas être résolue sans lui faire des simplifications significatives.

II-3. L'équation de Boltzmann :

N'importe quel modèle d'une décharge de gaz doit être construit sur une description microscopique des particules dans la décharge. Suivant cet méthode en créant ou en analysant un modèle il faut s'assuré que les suppositions limitées du modèle deviennent claires.

La majorité de modèles de décharge de gaz sont établies sur l'équation de Boltzmann. Cette équation résulte de la notion d'un grand ensemble canonique, de l'équation de Liouville dans la mécanique statistique, et la supposition que l'ensemble de particules à l'étude est suffisamment grand pour s'assurer que des fluctuations statistiques sont assez petits pour être négligés. Les ordres des collisions sont supposés markoviens et ces interactions entre les particules sont court et brèves et n'impliquent pas plus de deux particules à la fois.

L'équation de Boltzmann décrit l'évolution de la densité $f(r, u, t)$ d'un seul espèce de particules dans l'espace de phase r et l'espace de vitesse u . Une forme souvent utilisée de l'équation [13]:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \nabla_x \cdot uf + \nabla_u \cdot af = \left(\frac{\delta f}{\delta t} \right)_{CR} \quad (2.1)$$

Le côté gauche représente l'écoulement des particules dans l'espace de phase, soumis aux forces macroscopiques qui causent l'accélération a de l'espèce. On peut penser à la gravité et aux forces électromagnétiques. Le côté droit de l'équation est abstractivement écrit en tant que $(\delta f/\delta t)_{CR}$ et indique l'effet que les collisions et le rayonnement microscopiques ont dans la fonction de densité de l'espace de phase.

Pour les forces centrales et magnétiques, l'écoulement dans l'espace de phase diverge librement (le théorème de Liouville), et ceci permet à l'équation (2,1) d'être écrite sous une forme plus commode:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + u \cdot \nabla_x f + a \cdot \nabla_u f = \left(\frac{\delta f}{\delta t} \right)_{CR} \quad (2.2)$$

Couplant les équations multiples de Boltzmann pour l'ensemble des espèces différentes par l'intermédiaire de leur côté droit est nécessaire pour décrire une décharge. Cependant, nous notons ici que jusqu'à présent cette équation sept-dimensionnelle ne peut pas être résolue complètement pour aucune application pratique, même pour une espèce simple. Les méthodes actuels permettent la solution

d'une forme réduite dans laquelle seulement deux ou au plus trois dimensions sont retenus.

II-4. Résolution de l'équation d Boltzmann :

La solution à l'équation de Boltzmann pour une position donnée dans l'espace et un moment de temps est une fonction de distribution de vitesse. Si cette fonction est isotrope dans un première ordre d'approximation on peut faire la substitution $\varepsilon = \frac{1}{2} m v^2$, avec ε est l'énergie et m est la masse des espèces, et résoudre l'équation pour $f(\varepsilon)$, la prétendue fonction de distribution d'énergie (edf). Cette fonction est particulièrement importante pour les électrons et l'abréviation eedf donc est généralement employée pour noter la fonction de distribution d'énergie d'électron.

Pour différentes situations spéciales une expression explicite peut être trouvée pour l'eedf: Dans le cas d'un gaz contient des électron dans l'équilibre thermique et en l'absence de toutes les forces macroscopiques, l'eedf est appelé Maxwellien:

$$f = C \sqrt{\varepsilon} \exp\left(-\frac{\varepsilon}{k_B T}\right) \quad (2.3)$$

Avec T la température et k_B le constant de Boltzmann. Il doit être noté que le concept de la température est seulement correct dans le cas où la distribution est Maxwellienne.

Quand la déviation de la distribution Maxwellienne est modérée, le terme 'température' peut encore être employé, mais T devrait être considéré comme une température 'effective', ce qui est vraiment plus une mesure de l'énergie moyenne $\bar{\varepsilon} = \frac{3}{2} k_B T$.

Pour les électrons une autre solution spéciale est intéressante: dans un champ électrique E , s'il est seulement supposé que les collisions élastiques se produisent et le libre parcours entre eux est constant, l'eedf est celui trouvé par Druyvesteyn [14]:

$$f = C \sqrt{\varepsilon} \exp\left(-\frac{3m_e}{M} \frac{\varepsilon^2}{\varepsilon_0^2}\right) \quad (2.4)$$

Avec $\varepsilon = eE\lambda$ et M est la masse des espèces du fond du gaz. Comparé à la distribution de Maxwell, la pente de la queue des distributions de Druyvesteyn est plus raide.

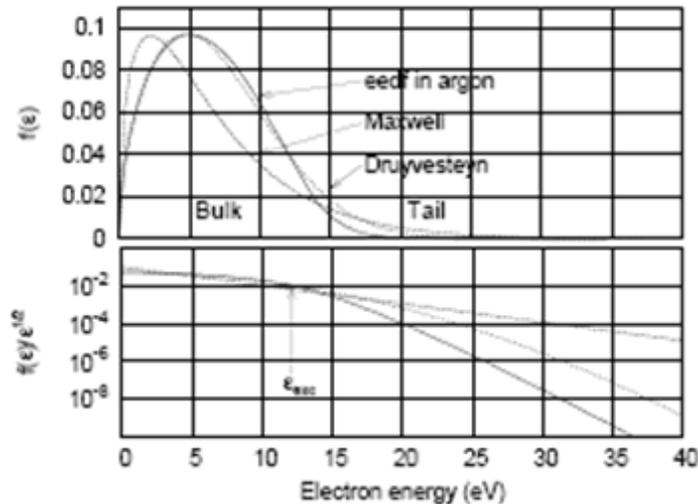


Figure II-1 : forme typique d'une fonction de distribution d'énergie d'électron.

Dans la figure II-1 l'eedf est tracé pour les électrons dans un champ électrique homogène de 100 Td dans l'argon. Pour la comparaison, la distribution Maxwellienne avec la même énergie moyenne est également montrée, aussi bien qu'une distribution de Druyvesteyn est adaptée. La figure II-1 donne également une illustration de la forme typique d'une fonction de distribution d'énergie d'électron. Cet eedf est celui trouvé dans l'argon pour un champ électrique de 100 Td, en résolvant l'équation de Boltzmann par l'intermédiaire d'une expansion de deux-termes. Le graphe supérieur montre $f(\varepsilon)$ à l'échelle linéaire, le graphe inférieur montre $f(\varepsilon)/\sqrt{\varepsilon}$ à l'échelle logarithmique. Pour la comparaison également une distribution Maxwellienne avec la même énergie moyenne et une distribution adaptée de Druyvesteyn sont montrées. Notez que dans le graphique inférieur l'eedf Maxwellienne est une ligne droite [13].

II-4-1. Les méthodes d'expansion :

Une approche commune pour obtenir une solution directe de l'équation de Boltzmann d'électron est via l'expansion de $f(u)$ dans une série de fonctions basses orthogonales [13]. Dans plusieurs cas il est possible de choisir les fonctions tels que les coefficients de

série tendront rapidement à zéro. Dans ces cas, la série peut être tronquée après quelques termes. La substitution de cette série permet à l'équation de Boltzmann d'être écrite comme petit ensemble d'équations différentielles pour les coefficients d'expansion, qui peut être résolue avec des techniques standard.

Pour les électrons, un bon choix des fonctions basses peut être trouvé en considérant ce qui suit: puisque la masse des électrons est petite comparée à celle des atomes, une collision élastique aura un effet sur la direction de vecteur vitesse d'un électron, mais à peine sur la grandeur. Par conséquent, si la majorité de collisions sont élastiques, leur effet se compose d'une redistribution des vectrices vitesses sur des surfaces sphériques dans l'espace de vitesse. En outre, dans le cas où le champ électrique réduit n'est pas très élevé, seulement un petit composant directionnel est ajouté à cette distribution isotrope des vecteurs vitesses. Ceci tient si l'énergie gagnée entre deux collisions est petite comparée à l'énergie moyenne.

On peut noter ça, une série appropriée de fonctions est constituée par les prétendus harmoniques sphériques [13]:

$$f = \sum_{lms} f_{lms}(x, u, t) Y_{lms} \quad (2.5)$$

Avec

$$Y_{lms} = P_l^m(\cos \theta) (\delta_{0s} \cos m\phi + \delta_{1s} \sin m\phi) \quad (2.6)$$

$P_l^m(\cos \theta)$ est le polynôme de Legendre. f_{000} représente la forme isotrope de f et les termes suivants dans (1.5) représentent les différents anisotropies. Pour un champ électrique réduit relativement petit et des collisions élastiques majoritaires il peut être supposer que la distribution est légèrement anisotrope et la série peut être tronquée après la deuxième limite:

$$f = f_0 + f_1 \cdot \frac{u}{|u|} \quad (1.7)$$

Avec f_0 une notation courte de f_{000} et f_1 un vecteur comprenant les composantes : $f_{1x} = f_{110}$, $f_{1y} = f_{111}$ et $f_{1z} = f_{100}$. $|u|$ est la valeur absolue de u .

Cette forme de f peut être substituée dans l'équation de Boltzmann et, après une certaine manipulation algébrique, les équations différentielles couplées de quatre premiers ordres résultent [13, 15] :

$$\begin{aligned} \frac{\partial f_0}{\partial t} + \frac{u}{3} \nabla \cdot f_1 + \frac{1}{3u^2} \frac{\partial}{\partial u} (u^2 a \cdot f_1) &= \frac{\mathcal{F}_0}{\mathcal{E}} \\ \frac{\partial f_1}{\partial t} + u \nabla \cdot f_0 + a \frac{\partial f_0}{\partial u} &= \frac{\mathcal{F}_1}{\mathcal{E}} \end{aligned} \quad (2.8)$$

On peut noter que ces équations sont souvent résolues pour un champ homogène et indépendant du temps, dans ce qui est appelé l'approximation du champ locale. Il est supposé que l'effet du mouvement spatial est négligeable comparé aux effets des collisions sur l'edf. Ceci peut être considéré le cas si les collisions sont fréquentes et effectives dans l'absorption de l'énergie qui est localement gagnée par le champ.

Si cette supposition est valable, f_1 est symétrique autour de la direction de ce champ et on peut se concentrer sur le composant le long de cette direction. Les équations ci-dessus peuvent alors être combinées dans une équation différentielle de second ordre, qui est une équation d'équilibre pour f le long de l'axe d'énergie [16]. Sa solution peut être employée pour déterminer des coefficients de taux de réaction et les coefficients de transport en fonction du champ électrique réduit, et peut, par exemple, être employée comme entrée aux fluides modèles. Un exemple de l'edf obtenu de telle manière est montré sur la figure II-1.

Il existe principalement deux types d'outils numériques d'étude des plasmas, correspondant aux deux modes de description, description fluide et description cinétique. Dans un cas comme dans l'autre, on cherche à modéliser l'évolution temporelle d'un plasma dont on se donne la configuration initiale. Les outils de simulation utilisant une description fluide sont proches des outils utilisés en

hydrodynamique des gaz ou des liquides. Les méthodes correspondant aux descriptions cinétiques sont plus originales : le plasma est échantillonné au travers de *macroparticules* dont les caractéristiques physiques, position et vitesse, sont tirées au hasard, avec une loi de probabilité correspondant à la condition initiale choisie : on parle alors de méthode Monte-Carlo, ou de méthode particulaire.

II-4-2. La méthode fluide :

Les modèles de fluide sont des modèles dans lesquels les diverses espèces de décharge sont décrites en termes de quantités hydrodynamiques moyennes telles que la densité, le moment et l'énergie. En prenant les moments de vitesse [13] de l'équation de Boltzmann (2.2) on arrive aux lois de conservation pour ces quantités. Par exemple, l'intégration de l'équation sur de l'espace de vitesse résulte dans le premier moment, l'équation d'équilibre de densité :

$$\frac{\partial n}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{\Gamma} = S \quad (2.9)$$

Avec $\mathbf{\Gamma} = n\mathbf{v}$ le flux, \mathbf{v} la vitesse moyenne et S le terme source due aux diverses réactions dans lesquelles les espèces sont créées ou détruites.

Le deuxième moment, l'équation d'équilibre du moment, est obtenu en multipliant l'équation (2.2) par $m\mathbf{v}$ et en l'intégrant sur l'espace des vitesses :

$$\frac{\partial nm\mathbf{v}}{\partial t} + \nabla \cdot (nm\mathbf{v}\mathbf{v}) = -\nabla \cdot \mathbf{P} + qn\mathbf{E} + \mathbf{R} \quad (2.10)$$

Avec \mathbf{P} le tenseur de pression, q et m la charge et la masse des espèces, \mathbf{E} le champ électrique et $\mathbf{R} = nm\mathbf{v}\nu_m$ le moment du source due au moment de transfert de collisions avec autre espèces, avec ν_m la fréquence du collision.

On multipliant avec $\varepsilon = \frac{1}{2}m\mathbf{v}^2$ et on intégrant sur l'espace des vitesses résulte dans le troisième moment, l'équation d'équilibre de l'énergie :

$$\frac{\partial n\varepsilon}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{q} = qn\mathbf{E} \cdot \mathbf{v} + S_\varepsilon \quad (2.11)$$

Avec $\mathbf{q} = n\epsilon\mathbf{v}$ le vecteur d'écoulement de la chaleur. Le premier terme dans le coté droit représente le travail effectué par le champ électrique et le deuxième terme S_ϵ l'énergie perdue ou gagné dans les réactions.

Chaque moment contient un paramètre qui peut être obtenu à partir du prochain, tel que le flux Γ dans l'équation d'équilibre de densité, qui peut être obtenue à partir de l'équation d'équilibre du moment. Des suppositions doivent être présentées afin de tronquer cette série. Elle est tout à fait commune pour faire ceci après le deuxième ou le troisième moment et pour spécifier la forme du l'edf et pour employer ceci pour déterminer les coefficients dans les équations d'équilibre. L'équation d'équilibre du moment est réduite à la prétendue l'équation de dérive-diffusion :

$$\Gamma = \pm\mu\mathbf{E}n - D\nabla n \quad (2.12)$$

Où $\mu = q/(mv_m)$ représente la mobilité, et $D = u^2/(3v_m)$ le coefficient de diffusion. Le signe \pm dans le terme de dérive indique le signe de la charge q est positive ou négative. L'avantage de cette forme est que ces coefficients de transport peut être mesuré directement dans l'expérience tube de dérive ou peut être obtenu à partir de la solution directe de l'équation de Boltzmann par l'expansion de deux ordre comme traité dans la section 3.

Les coefficients de transport μ et D , et les coefficients de taux de réaction k qui se produisent dans le terme source S peuvent être exprimés en fonctions du champ électrique réduit local E/N . Comme il est mentionné dans la section précédente, cette approximation du champ locale suppose que l'effet des collisions sur l'edf est dominant que l'effet du mouvement spatial.

En réalité il n'est pas rare que cette équilibration ne se produise pas sur les échelles de temps et de longueur qui sont caractéristiques de la décharge. Généralement, les électrons légers sont les premiers à souffrir de ceci. Si l'effet est petit, il peut être allégé en résolvant l'équation d'équilibre d'énergie et en exprimant les coefficients de

transport et de taux de réaction en fonction de l'énergie moyenne des particules. Si l'effet est grand, une autre méthode de solution doit être trouvée.

En outre on rappelle qu'on a supposé dans les équations ci-dessus que les propriétés des espèces sont isotropes. Le champ électrique réduit E/N présente des anisotropies dans l'edf des espèces et pour des valeurs trop élevées de E/N , on ne peut pas s'attendre que le fluide modèle décrive les espèces plus correctement.

II-5. Méthodes de prélèvement :

Une approche complètement différente en modélant des décharges est obtenue en suivant les différentes particules individuellement dans un gaz [17, 18]. Leurs trajectoires sont calculées en utilisant les lois de Newton et des interactions microscopiques entre les particules sont décrites par une méthode de Monte Carlo, dans laquelle des nombres aléatoires sont employés pour déterminer les résultats de ces collisions individuels.

La plupart des décharges contiennent un nombre très grand de particules pour pouvoir les suivre explicitement dans un programme machine. Au lieu de cela, un plus petit ensemble des particules de simulation est suivi et cet échantillon est pris pour être représentant de toutes les particules dans la décharge. Comme il est montré dans la référence [19], cette méthode est en effet une manière de résoudre l'équation de Boltzmann. La méthode est capable de traiter le comportement des espèces avec une quantité minimale de suppositions, où dépend cependant, à des temps de calcul significatifs.

Le chapitre 5 est entièrement consacré à la théorie et à l'implémentation de cette simulation de type Monte Carlo.

II-6. Combinaisons de ce qui précède :

D'après les méthodes de modélisation décrites ci-dessus, les modèles de fluides sont souvent les plus intéressants pour employer dans la description d'un système de décharge complet, la raison principale de ceci est qu'ils sont capables de modéliser des systèmes complexes dans des temps d'exécution moins que les autres méthodes.

La méthode fluide est extensivement utilisée dans la simulation des décharges électriques DC comme: les décharges streamers [20] et les décharges luminescents [21], et dans la simulation des décharges AC comme: la décharge radiofréquence (rf) capacitivement couplé (CCP) [22-24] et les décharges de barrière diélectrique (DBD) [25]. La méthode fluide peut être aussi utilisée dans la simulation des décharges du mélange gazeux et dans la simulation des plasmas magnétisés. Cette méthode permet de calculer les densités des électrons et des ions dans les différents types de décharges, pour cela l'équation utilisée est l'équation de continuité donnée par [26]:

$$\frac{\partial n_k}{\partial t} + \nabla \cdot j_k = R_{produit,k} - R_{perte,k} \quad (2.13)$$

Où n signifie la densité de nombre d'une espèce dans un plasma, j signifie le flux, R signifie le taux de production ou de perte et l'index k est référé aux différentes espèces.

Les équations de flux décrivent le transport basé sur la diffusion et sur la migration dans le champ électrique (pour l'espèce chargée) [26] :

$$j_k = \mu_k n_k E - D_k \nabla n_k \quad (2.14)$$

$$v_k = \mu_k E \quad (2.15)$$

Où E est le champ électrique, μ et D sont les coefficients de mobilité et de diffusion respectivement et v est la vitesse de dérive.

La différence entre la simulation des décharges DC et AC est la nature du champ électrique, dans les décharges DC le champ électrique est introduit dans l'équation (2.14) ou dans l'équation (2.15) constat E , mais dans les décharges AC le champ électrique est variable dans le temps il est introduit dans l'équation (2.14) ou dans l'équation (2.15) comme suit:

$$E = E_0 \sin(\omega \cdot t) \quad (2.16)$$

Où E_0 : est l'amplitude du champ électrique, $\omega = 2\pi f$ où f : est la fréquence du courant alternative.

Dans ce travail on s'intéresse seulement à la méthode de Monte Carlo décrite dans le chapitre 5, le but de présenter la méthode de Boltzmann et les méthodes de fluide c'est pour voir l'importance de l'état d'équilibre dans la simulation par ces deux méthodes.

Chapitre III

Processus de collisions de l'Azote

III-1. Introduction :

Les molécules d'azote sont le constituant le plus abondant de l'atmosphère de la terre. Les collisions d'électron avec les molécules d'azote jouent un rôle fondamental, par exemple, dans des phénomènes ionosphériques et auroraux dans l'atmosphère supérieure de la terre. Elles sont également des processus importants dans des décharges électriques impliquant les gaz atmosphériques. Ces décharges constituent une technique de base dans les domaines du traitement électronique gazeux et de plasma.

En raison de l'importance de la molécule d'azote, un test des sections efficaces pour les collisions $e+N_2$ a été essayé par plusieurs auteurs. Majeed et Strickland [27] ont publié un ensemble de sections efficaces pour les collisions $e+N_2$, mais principalement pour des processus inélastiques (c.-à-d. perte d'énergie d'électron). Zecca et al [28] et Brunger et Buckman [29] ont publié une compilation complète de données pour des collisions d'électron avec des diverses molécules, y compris N_2 . Les derniers auteurs ont concentré leur compilation sur les processus de la dispersion élastique et des excitations des états discrets (c.-à-d., rien n'étant inclus sur l'ionisation et la dissociation). La bibliographie récemment publiée par Hayashi [30] est également utile.

III-2. Sections efficaces total de dispersion :

Après une analyse soigneuse des méthodes expérimentales pour la détermination des sections efficaces totales de dispersion Q_T , Karwasz et al [31] ont déterminé les meilleures valeurs de sections efficaces pour un certain nombre de molécules. La crête à environ 2,3eV est due à la forme de résonance $^2\Pi_g$. La courbe des sections efficaces totales de dispersion en fonction de l'énergie d'électron est présentée dans la figure III-1.

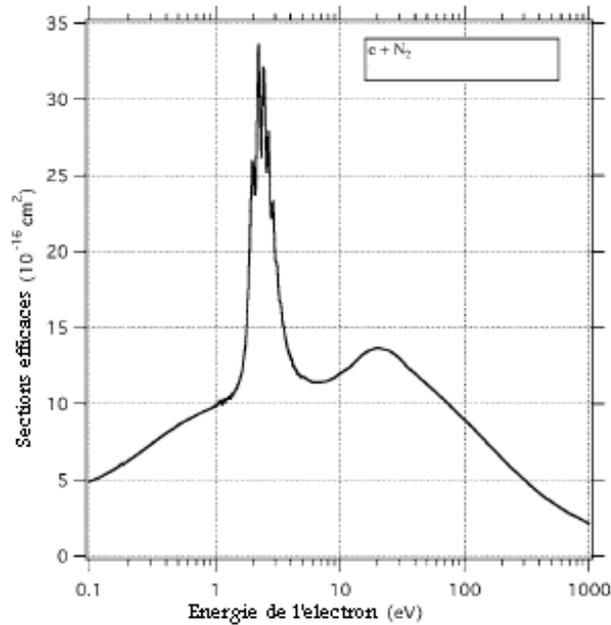


Figure III-1 : Sections efficaces total de dispersion Q_T de N_2 . Karwasz et al [31].

III-3. Sections efficaces de la collision élastique :

III-3-1. Sections efficaces de diffusion élastique :

La plupart des expériences de faisceau d'électrons ont l'énergie de résolution insuffisante pour résoudre chaque état de rotation de la molécule d'azote. Par conséquent la section efficace élastique obtenue expérimentalement représente souvent la section efficace élastique vibrationnel: c.-à-d., incluant les sections efficaces pour la transition de rotation, moyennées sur les états de rotation initiaux et additionnées sur les finals. Donc, Q_{elas} représente la section efficace vibrationnelle. Toutes les sections efficaces expérimentales employées ont été déterminées d'après les mesures de la section efficace différentielle. Dans la région de résonance, la section efficace dépend fortement de l'énergie d'incidence et de l'angle de dispersion. Il est, donc, très difficile la mesure de la section efficace différentielle pour déterminer la structure fine de la résonance dans la section efficace intégrée. Les sections efficaces entre 1 et 4eV tracées dans la figure III-2 montrent seulement un large ensemble de la résonance. Dans la figure 2, les sections efficaces recommandées de Buckman et al [29] (1-100eV) ont été prolongées jusqu'à 1000eV.

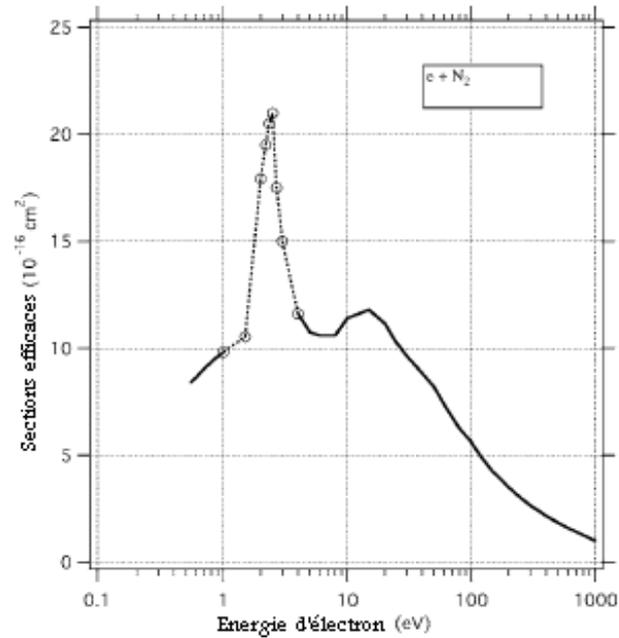


Figure III-2 : Sections efficaces de diffusion élastique Q_{elas} de N_2 , dans la région 1-4eV seulement les sections efficaces de résonance sont tracées. Buckman et *al* [29].

III-3-2. Sections efficaces de transfert de quantité de mouvement :

Elford et *al* [32] ont déterminé les valeurs recommandées de la section efficace de transfert de quantité de mouvement Q_m . Ils ont basé leur détermination sur l'expérience de transport par Haddad [33] pour 0.001–0.5eV, un calcul théorique par Sun et *al* [34] pour 0.5–3.0eV, et les mesures de faisceau de Sun et *al* [34] et de Srivastava et *al* [35] plus que 4eV. Dans ce travail, les sections efficaces de l'expérience de faisceau par Sun et *al* au lieu de leurs sections efficaces théoriques, ont été choisies dans la région de résonance (0,5–3,5eV). Les sections efficaces résultantes sont montrées dans la figure III-3.

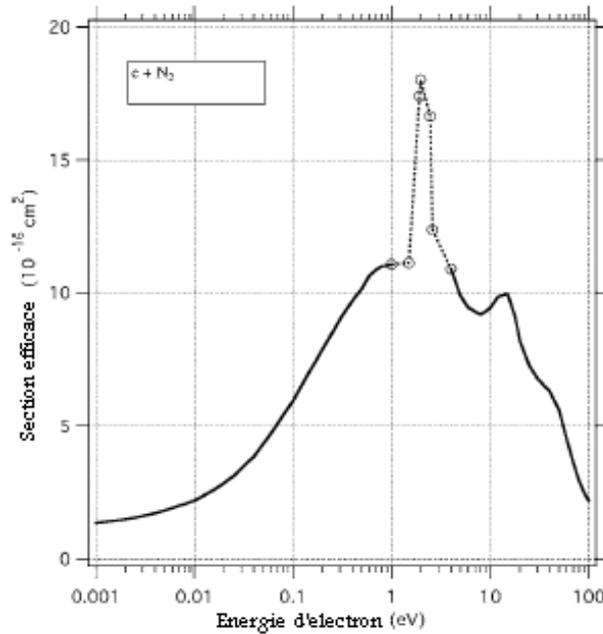


Figure III-3 : Sections efficaces de transfert de quantité de mouvement Q_m de N_2 , dans la région 1-4eVseulement les sections efficaces de résonance sont tracées. Elford et *al* [32].

III-4. Excitation :

III-4-1. Excitation rotationnel :

Brunger et *al* [36] ont déterminé les valeurs recommandées de la section efficace pour l'excitation rotationnel Q_{rot} pour $J = 0 \rightarrow 2$, où J est le nombre quantique de rotation de la molécule. Ils sont montrés dans la figure 4. Brunger et *al* ont basé leurs valeurs sur les sections efficaces théoriques obtenues par Morrison et *al* [37]. La validité de la section efficace actuelle a été confirmée avec une expérience de transport jusqu' à 0,2eV [38]. Kutz et Meyer [39] ont calculé Q_{rot} sur une gamme d'énergie (0,01–1000eV). Ils ont obtenu les sections efficaces pour les transitions de rotation, $J = 0 \rightarrow 0, 2, 4, 6$. La figure III-4 montre les valeurs représentatives de leurs sections efficaces.

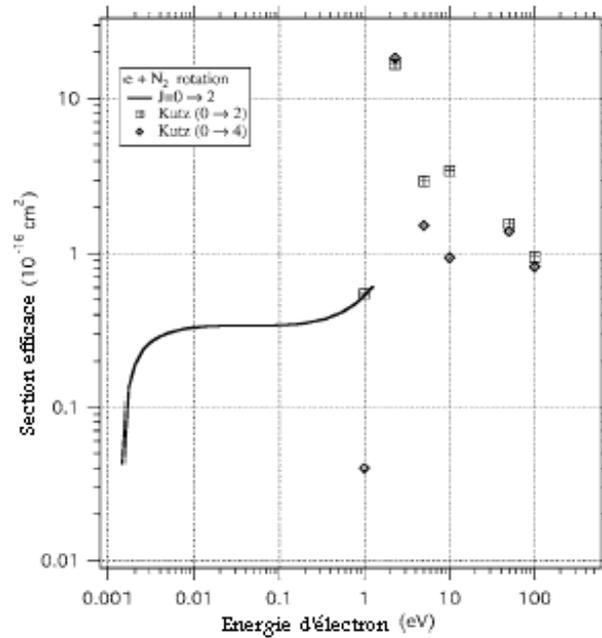


Figure III-4 : Sections efficaces de l'excitation rotationnel de N_2 . Ligne pour la transition $J = 0 \rightarrow 2$ Brunger et al [36]. Plus de 1eV sections efficaces calculées par Kutz et Meyer [39] pour les transitions $J = 0 \rightarrow 2,4$.

III-4-2. Excitation vibrationnel :

Pour l'excitation de l'état vibrationnel, $v = 0 \rightarrow 1$ (v étant le nombre quantique de vibration) nous adoptons les sections efficaces recommandées par Brunger et al [36], l'énergie d'excitation du processus $v = 0 \rightarrow 1$ est 0,289eV. Ils ont utilisé tous les résultats disponibles des expériences de faisceau: Sohn et al [40] pour l'énergies < 1eV, Brennan et al [41] et Sun et al [34] pour 1,5–5eV, et Tanaka et al [42] pour 7,5–30eV. Le Q_{vib} résultante est montrée dans la figure III-5. Des valeurs typiques pour les transitions $v = 0 \rightarrow 2,3$ sont montrées dans figure III-5, selon la compilation de Brunger et al [36].

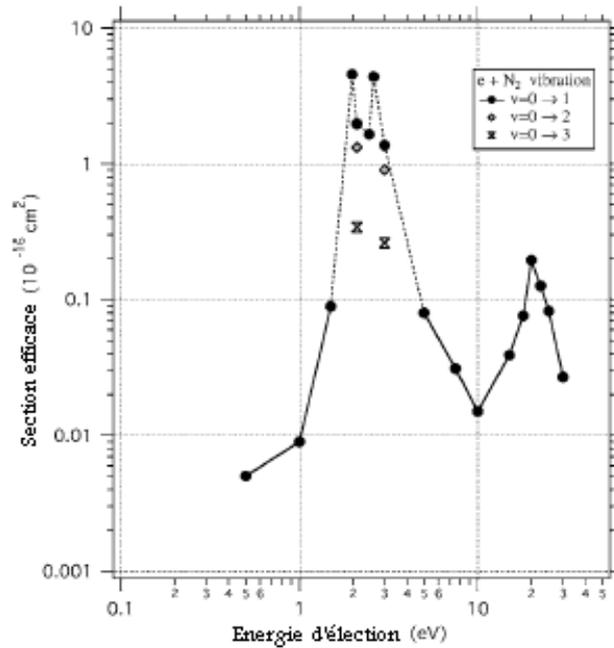


Figure III-5 : sections efficaces de l'excitation vibrationnel de N_2 ($v = 0 \rightarrow 1$). Valeurs typique des états excités ($v = 0 \rightarrow 2,3$) sont aussi montrés dans la région de résonance. Brunger et al [36].

III-4-3. Les états électroniques excités :

Dans le suivant, les sections efficaces sont discutées séparément pour les états bas (c.-à-d., inférieur de 12,5eV) et les plus élevés (supérieur de 12,5eV).

Les états excités bas :

En 1977, le JPL groupe [43, 44] ont publié leurs résultats des mesures étendues de la section efficace d'excitation, Q_{exc} des états électroniques de N_2 . Ils ont employé une mesure de perte d'énergie d'électron pour obtenir les sections efficaces. Une expérience de transport fournit aussi des données de section efficace pour des excitations des états électroniques. Ohmori et al [45] par exemple, ont fait une analyse étendue des données de transport pour déterminer les sections efficaces de N_2 . Récemment Brunger et al [36] ont déterminé les meilleures valeurs de Q_{exc} de N_2 sur la base des travaux: les deux ensembles de mesures de faisceau (Trajmar et al.[46] et Campbell et al.[47]), l'expérience de transport (Ohmori et al.[45]), et d'une théorie complète (Gillan et al.[48]). Les figure III-6 et III-7 montrent Q_{exc} des états excités : $A^3\Sigma_u^+$, $B^3\Pi_g$, $W^3\Delta_u^-$, $B'^3\Sigma_u^-$, $E^3\Sigma_g^+$, $a'^1\Sigma_u^-$, $w^1\Delta_u$, $a''^1\Sigma_g^+$.

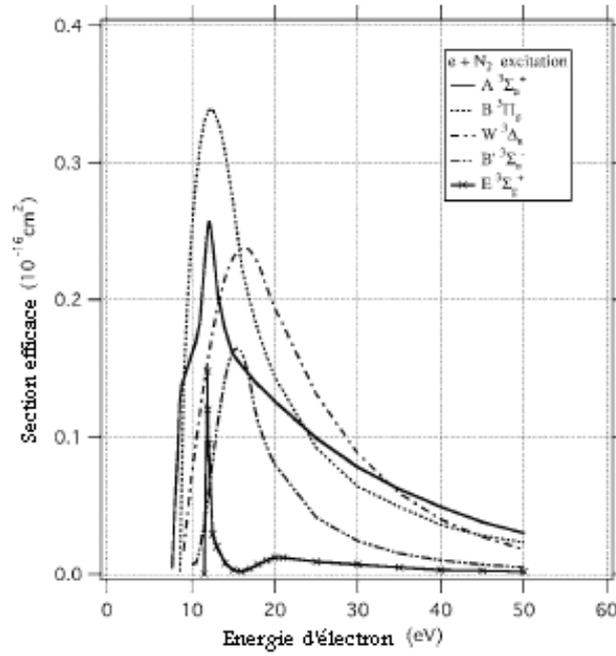


Figure III-6 : Sections efficaces de l'excitation des états excités de N_2 : $A^3\Sigma_u^+$, $B^3\Pi_g$, $W^3\Delta_u^-$, $B^1^3\Sigma_u^-$ et $E^3\Sigma_g^+$. Brunger et al [36].

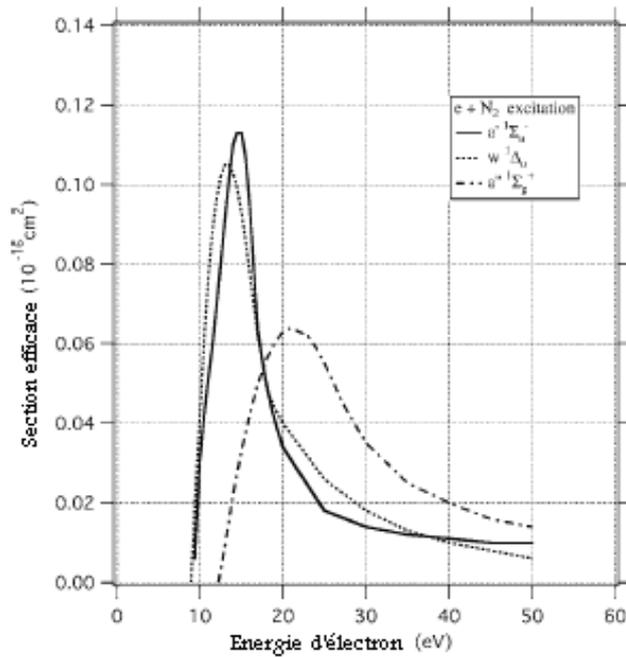


Figure III-7 : Sections efficaces de l'excitation des états excités de N_2 : $a^1\Sigma_u^-$, $w^1\Delta_u$ et $a''^1\Sigma_g^+$. Brunger et al [36].

Les états excités élevés :

Chutjian et al [49] ont mesuré les sections efficaces pour les transitions dans la région de perte d'énergie 12,5-14,2eV à deux points d'énergie incident: 40 et 60eV. Trajmar et al [46] ont les normalisés plus tard. Nous avons trois états excités élevés :

1- $b^1\Pi_u$ à partir du Q_{emis} pour Birge–Hopfield system, Q_{exc} pour l'état $b^1\Pi_u$ peut être déterminé. Figure III-8 montre Q_{exc} dérivé ainsi du Q_{emis} obtenu par James et al [50] en comparaison avec Q_{exc} rapporté par Trajmar et al [46] et un autres mesure par section efficace différentiel (DCS) a été rapporté par Ratliff et al [51].

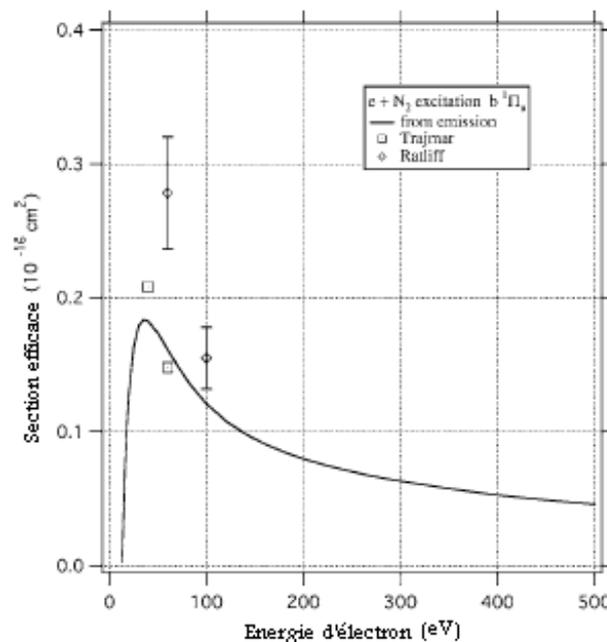


Figure III-8 : Sections efficaces d'excitation de l'états $b^1\Pi_u$ de N_2 . Ligne : James et al [50], carré : Trajmar et al [46], diamant : Ratliff et al [51].

2- $c'_4{}^1\Sigma_u^+$, à partir du Q_{emis} pour Carroll–Yoshino system, Q_{exc} pour l'état $c'_4{}^1\Sigma_u^+$ peut être déterminé. Figure 9 montre Q_{exc} déterminé à partir de la section efficace d'émission obtenue par Ajello et al [52] en comparaison avec les valeurs de Trajmar et al [46]. Il y a un grand désaccord entre les deux ensembles de sections efficaces à 40eV, mais à 60eV ils deviennent plus près l'un de l'autre.

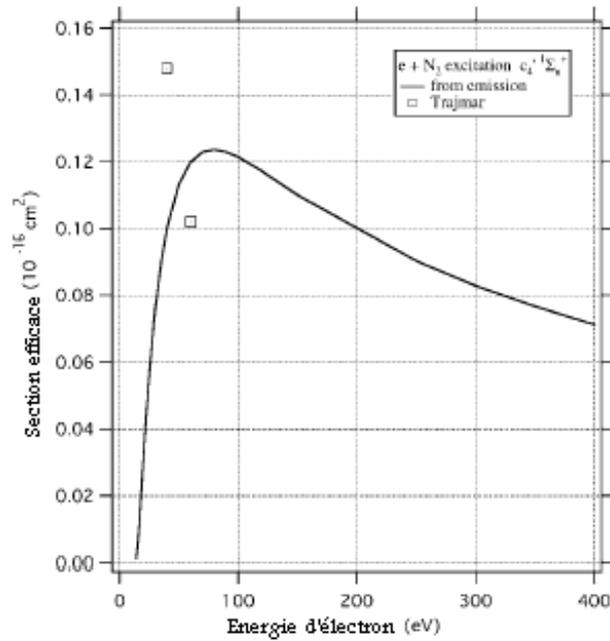


Figure III-9 : Sections efficaces d'excitation de l'états $c'_4 \ ^1\Sigma_u^+$ de N_2 . Ligne : Ajello et al [52], carré : Trajmar et al [46].

3- $b' \ ^1\Sigma_u^+$, à partir de Q_{emis} pour Birge–Hopfield II system, Q_{exc} de l'état $b' \ ^1\Sigma_u^+$ peut être obtenue. Figure III-10 compare Q_{exc} déterminé à partir de la mesure d'émission par Ajello et al [52] avec les valeurs de Trajmar et al [46]. Dans ce cas, les deux ensembles de sections efficaces sont conformes l'un à l'autre à 40eV, mais sont en désaccord considérablement à 60eV.

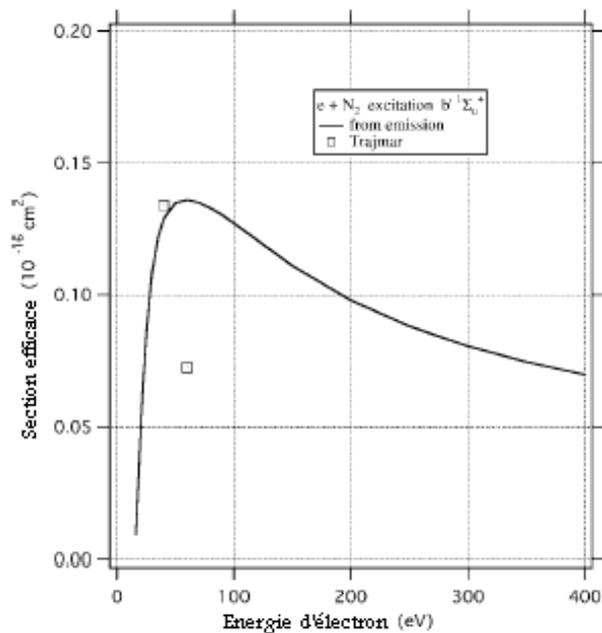


Figure III-10 : Sections efficaces d'excitation de l'états $b' \ ^1\Sigma_u^+$ de N_2 . Ligne : Ajello et al [52], carré : Trajmar et al [46].

III-5. Ionisation :

Après avoir passé en revue toutes les données expérimentales disponibles, Lindsay et Mangan [53] ont déterminé les valeurs recommandées des sections efficaces d'ionisation partielle et totale pour N_2 . Ils ont mis beaucoup d'effort sur la fiabilité des méthodes expérimentales utilisées. En particulier, des méthodes capables de rassembler tous les ions produits sont préférées et un grand poids est placé sur l'expérience qui ne se fonde pas sur la normalisation à d'autres travaux. En conséquence, leurs valeurs recommandées sont basées sur la mesure par Straub et al [54] qui ont utilisés un spectromètre de masse TOF pour détecter les ions produits. Il est bien noter que Straub et al ont fait leur sections efficaces absolument indépendamment, c.-à-d., sans utiliser n'importe quelles autres données pour la normalisation. Dans la région d'énergie moins de 25eV, la section efficace pour la production de N_2 est conforme complètement à la section efficace d'ionisation totale mesurée par Rapp et Englander-Golden [55]. Lindsay et Mangan ont adopté la section efficace totale d'ionisation de Rapp et Englander-Golden comme valeurs recommandées pour la production du N_2 en dessous de 25eV. Rapp et Englander-Golden ont obtenu leurs sections efficaces avec l'utilisation de la mesure du courant d'ion totale. Récemment Hudson et al [56] ont mesuré la section efficace d'ionisation totale en utilisant également la technique de la mesure du courant d'ion totale. La section efficace d'ionisation totale a été obtenue comme somme de toutes les sections efficaces partielles. La section efficace total résultante est comparée dans la figure III-11 aux valeurs de Rapp et Englander-Golden [55] et aux valeurs de Hudson et al [56].

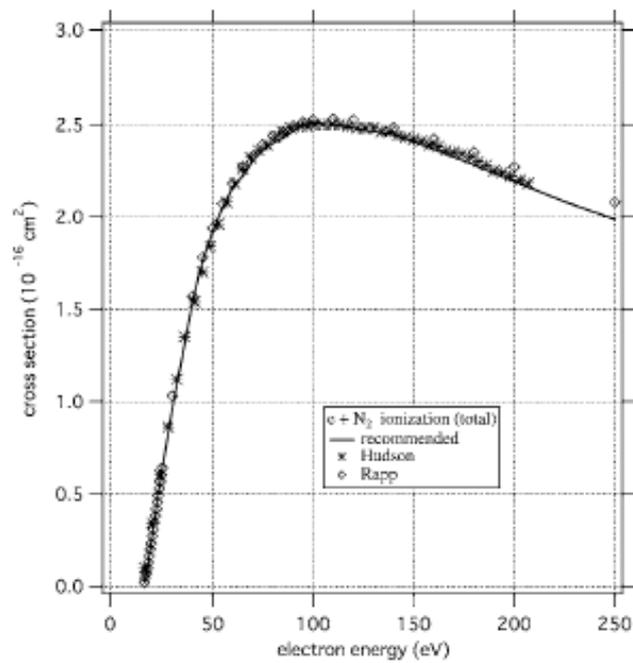


Figure III-11 : Sections efficaces totale d'ionisation de N_2 . Les valeurs recommandées de Lindsay et Mangan [53] sont comparées avec les résultats de mesure du courant d'ion totale par Rapp et Englander-Golden [55] et Hudson et al [56].

Chapitre IV

Mouvement d'un électron dans un champ électromagnétique

IV-1. Introduction :

La charge électrique est une source de champ électrique par laquelle chaque charge exerce des forces sur toutes les autres charges. En second lieu, les charges électriques sont soumises à des forces lorsqu'elles ont dans un champ électrique extérieurement imposé. Troisièmement, les charges qui se déplacent relativement aux champs magnétiques également exercent des forces. La force de Lorentz combine commodément les effets électriques et magnétiques pour une charge.

$$\vec{F} = q(\vec{E} + \vec{v} \times \vec{B}) \quad (4.1)$$

Dans lequel: q est la charge en coulomb; E est le champ électrique en volt par mètre; v est la vitesse en mètre par seconde; \times ici implique le produit vectorielle; B est le champ magnétique en teslas.

Dans notre cas on va étudier le transport des électrons dans un gaz sous les champs électrique et magnétique (longitudinal et transversal), donc la connaissance de la trajectoire de l'électron entre deux collisions successives sous les forces extérieures est nécessaire. Trois situations distinctes de champ électrique et magnétique vont être traitées dans ce qui suit :

- Cas d'un champ électrique et champ magnétique nul.
- Cas d'un champ magnétique perpendiculaire au champ électrique.
- Cas d'un champ magnétique parallèle au champ électrique.

IV-2. Cas d'un champ électrique et champ magnétique nul :

Dans le cas d'un électron, de charge $-e$ et de masse m , en mouvement dans un champ électrique E et magnétique B , la force de Lorentz s'écrit :

$$\vec{F} = -e(\vec{E} + \vec{v} \times \vec{B}) = m \frac{d\vec{v}}{dt} \quad (4.2)$$

Pour un champ magnétique $B=0$ et un champ électrique $-E // Oz$ les composantes de la force F dans le trièdre directe (x,y,z) s'écrivent :

$$\begin{cases} F_x = m \frac{dv_x}{dt} = 0 \\ F_y = m \frac{dv_y}{dt} = 0 \\ F_z = m \frac{dv_z}{dt} = eE \end{cases} \quad (4.3)$$

Ou bien :

$$\begin{cases} \frac{dv_x}{dt} = 0 \\ \frac{dv_y}{dt} = 0 \\ \frac{dv_z}{dt} = a_z \end{cases} \quad (4.4)$$

Où a_z est l'accélération suivant z , définie par :

$$a_z = \frac{e}{m} E \quad (4.5)$$

Si v_{x0} , v_{y0} , v_{z0} et x_0 , y_0 , z_0 , sont les trois composantes de la vitesse et de la position à l'instant t_0 , alors les nouvelles composantes de la vitesse s'écrivent :

$$\begin{cases} v_{x1} = v_{x0} \\ v_{y1} = v_{y0} \\ v_{z1} = v_{z0} + a_z \Delta t \end{cases} \quad (4.6)$$

Les nouvelles positions s'écrivent alors :

$$\begin{cases} x_1 = x_0 + v_{x0} \Delta t \\ y_1 = y_0 + v_{y0} \Delta t \\ z_1 = z_0 + v_{z0} \Delta t + \frac{1}{2} a_z \Delta t^2 \end{cases} \quad (4.7)$$

Avec $\Delta t = t_1 - t_0$

IV-3. Cas d'un champ magnétique transversal :

Comme le champ électrique est supposé anti-parallèle à l'axe Oz ($-E // Oz$) et le champ magnétique est parallèle à l'axe Oy ($B // Oy$), les composantes de la force F dans le trièdre directe (x,y,z) s'écrivent :

$$\begin{cases} F_x = m \frac{dv_x}{dt} = eBv_z \\ F_y = m \frac{dv_y}{dt} = 0 \\ F_z = m \frac{dv_z}{dt} = eE - eBv_x \end{cases} \quad (4.8)$$

Ou bien :

$$\begin{cases} dv_x / dt = \omega_c v_z & (4.9a) \\ dv_y / dt = 0 & (4.9b) \\ \frac{dv_z}{dt} = \frac{e}{m} E - \omega_c v_x & (4.9c) \end{cases}$$

Tel que : $\omega_c = \frac{e}{m} B$

ω_c : est la fréquence de Larmor ou la fréquence de cyclotron.

La variation de la vitesse au cours du mouvement libre de l'électron et sa trajectoire se détermine à partir de la résolution des équations de mouvements (4.9). A partir de l'équation (4.9b), il est facile de voir que la composante v_y de la vitesse reste constante au cours du mouvement libre. Ceci n'ai pas le cas des composantes v_x et v_z (voir les équation 4.9a et 4.9c). Pour résoudre ces deux équations on effectue le changement de variable suivant :

$$v(t) = v_x(t) + i v_z(t) \quad \text{avec : } i^2 = -1$$

Les équations (4.9a) et (4.9c) deviennent :

$$\frac{dv(t)}{dt} + i\omega_c v(t) = \frac{e}{m} E \quad (4.10)$$

La solution de cette équation différentielle du premier ordre entre l'instant initiale t_0 (celui de la dernière collision) et une instante t (avant la collision suivante) s'écrit :

$$v(t) = c \exp(-i\omega_c t) + \frac{eE}{m\omega_c} = c \exp(-i\omega_c t) + \frac{E}{B} \quad (4.11)$$

Avec
$$c = \left(v_0 - \frac{E}{B} \right) \exp(i\omega_c t_0)$$

Cette solution s'écrit à l'instant t_1 de la collision :

$$\boldsymbol{v}(t_1) = \left(\boldsymbol{v}_0 - \frac{\boldsymbol{E}}{B} \right) \exp(-i\omega_c \Delta t) + \frac{\boldsymbol{E}}{B} \quad (4.12)$$

Avec $\Delta t = t_1 - t_0$ et $\boldsymbol{v}_0 = \boldsymbol{v}(t_0) = v_{x0} + i v_{z0}$

Si on identifie $\boldsymbol{v}_1 = \boldsymbol{v}(t_1) = v_{x1} + i v_{z1}$ à l'équation (4.12), on obtient les composantes v_{x1} et v_{z1} à l'instant de la collision t_1 :

$$\begin{cases} v_{x1} = v_{x0} \cos(\omega_c \Delta t) + v_{z0} \sin(\omega_c \Delta t) + \frac{E}{B} (1 - \cos(\omega_c \Delta t)) \\ v_{y1} = v_{y0} \\ v_{z1} = -v_{x0} \sin(\omega_c \Delta t) + v_{z0} \cos(\omega_c \Delta t) + \frac{E}{B} \sin(\omega_c \Delta t) \end{cases} \quad (4.13)$$

Les équations (4.13) de la vitesse sont les mêmes trouvés dans la référence [57].

Par intégration de ces composantes entre t_0 et t_1 , on obtient les coordonnées x_1, y_1, z_1 de l'électron à l'instant de la collision t_1 (x_0, y_0 et z_0 étant les coordonnées à l'instant initial t_0) :

$$\begin{cases} x_1 = \frac{v_{x0}}{\omega_c} \sin(\omega_c \Delta t) + \frac{v_{z0}}{\omega_c} (1 - \cos(\omega_c \Delta t)) + \frac{E}{B} \Delta t - \frac{E}{B \omega_c} \sin(\omega_c \Delta t) + x_0 \\ y_1 = v_{y0} \Delta t + y_0 \\ z_1 = \frac{v_{x0}}{\omega_c} (\cos(\omega_c \Delta t) - 1) + \frac{v_{z0}}{\omega_c} \sin(\omega_c \Delta t) - \frac{E}{B \omega_c} (\cos(\omega_c \Delta t) - 1) + z_0 \end{cases} \quad (4.14)$$

Si le champ électrique E est nul ($E=0$) :

$$v_{x1}^2 + v_{y1}^2 + v_{z1}^2 = v_{x0}^2 + v_{y0}^2 + v_{z0}^2 = cste$$

Si le champ électrique est nul le module de la vitesse est constant.

IV-4. Cas d'un champ magnétique longitudinal :

Dans ce cas le champ électrique est supposé anti-parallèle à l'axe Oz ($-E // Oz$) et le champ magnétique est parallèle à l'axe Oz ($B // Oz$), les composantes de la force de Lorentz dans le trièdre direct (x, y, z) s'écrivent :

$$\begin{cases} F_x = m \frac{dv_x}{dt} = -eBv_y \\ F_y = m \frac{dv_y}{dt} = eBv_x \\ F_z = m \frac{dv_z}{dt} = eE \end{cases} \quad (4.15)$$

Ou bien :

$$\begin{cases} \frac{dv_x}{dt} = -\omega_c v_y \\ \frac{dv_y}{dt} = \omega_c v_x \\ \frac{dv_z}{dt} = a_z \end{cases} \quad (4.16)$$

On pose que : $v(t) = v_x + iv_y$

On obtient :

$$\frac{dv(t)}{dt} = \frac{dv_x}{dt} + i \frac{dv_y}{dt} \quad (4.17)$$

On remplace $\frac{dv_x}{dt}$ et $\frac{dv_y}{dt}$ dans (4.17) on trouve :

$$\frac{dv(t)}{dt} - i\omega_c v(t) = 0 \Rightarrow \frac{dv(t)}{v(t)} = i\omega_c dt \quad (4.18)$$

On intégrant on obtient :

$$v(t) = c \exp(i\omega_c t) \quad (4.19)$$

La vitesse v_0 à l'instant t_0 s'écrit comme suit :

$$v(t_0) = v_0 = c \exp(i\omega_c t_0) \Rightarrow c = v_0 \exp(-i\omega_c t_0) \quad (4.20)$$

La vitesse v_1 à l'instant t_1 s'écrit comme suit :

$$v_1 = v(t_1) = v_0 \exp(i\omega_c \Delta t) \quad (4.21)$$

Où : $\Delta t = t_1 - t_0$

On a : $v_0 = v_{x0} + iv_{y0}$, d'après l'équation (4.21) v_1 s'écrit alors :

$$v_1 = (v_{x0} + iv_{y0}) (\cos(\omega_c \Delta t) + i \sin(\omega_c \Delta t)) \quad (4.22)$$

Aussi on a: $v_1 = (v_{x1} + i v_{y1})$

On identifie la dernière équation de v_1 avec l'équation (4.22) on trouve les nouvelles composantes du vecteur vitesse comme suit :

$$\begin{cases} v_{x1} = v_{x0} \cos(\omega_c \Delta t) - v_{y0} \sin(\omega_c \Delta t) \\ v_{y1} = v_{x0} \sin(\omega_c \Delta t) + v_{y0} \cos(\omega_c \Delta t) \\ v_{z1} = v_{z0} + a_z \Delta t \end{cases} \quad (4.23)$$

On intégrant les composantes du vecteurs vitesse on trouve les nouvelle positions :

$$\begin{cases} x_1 = x_0 + \frac{1}{\omega_c} (v_{y0} (\cos(\omega_c \Delta t) - 1) + v_{x0} \sin(\omega_c \Delta t)) \\ y_1 = y_0 + \frac{1}{\omega_c} (-v_{x0} (\cos(\omega_c \Delta t) - 1) + v_{y0} \sin(\omega_c \Delta t)) \\ z_1 = z_0 + v_{z0} \Delta t + \frac{1}{2} a_z \Delta t^2 \end{cases} \quad (4.24)$$

On remarque, contrairement au cas d'un champ magnétique transverse, que le module v_1 de la vitesse v_1 à l'instant t_1 de la collision et la composante longitudinale v_{z1} de v_1 ne sont pas influencés par la présence d'un champ magnétique longitudinal. Par contre les coordonnées de l'électron à l'instant t_1 sont influencées par la présence d'un champ magnétique longitudinal, ce qui aura pour conséquence comme on va le voir, une influence sur les coefficients de diffusion électronique.

D'autre part, si $E=0$ le module de la vitesse reste constant.

IV-5. Cas particulier :

Quand le champ magnétique est faible les équations de mouvement tendent vers le cas du plasmas non magnétisés (il y a seulement le champ électrique), le champ magnétique faible signifie la valeur de B qui conduit à $\omega_c \cdot \Delta t \sim 0$, cette cas est obtenu quand la fréquence de cyclotron ω_c est très inférieur à la fréquence de collision ν_{tot} .

ν_{tot} : est la fréquence totale de collision (voir le chapitre 5).

IV-5-1. Cas du champ magnétique transversal :

$$\begin{cases} v_{x1} = v_{x0} \cos(\omega_c \Delta t) + v_{z0} \sin(\omega_c \Delta t) + \frac{E}{B}(1 - \cos(\omega_c \Delta t)) \\ v_{y1} = v_{y0} \\ v_{z1} = \left(\frac{E}{B} - v_{x0} \right) \sin(\omega_c \Delta t) + v_{z0} \cos(\omega_c \Delta t) \end{cases}$$

Quand B est faible $\omega_c \Delta t \sim 0$ donc $\sin(\omega_c \Delta t) \sim \omega_c \Delta t$ et $\cos(\omega_c \Delta t) \sim 1$, les équations de mouvement seront comme suit :

Pour u_{x1} :

$$v_{x1} = v_{x0} + v_{z0} \omega_c \Delta t$$

$\omega_c \Delta t \sim 0$ donc $v_{z0} \cdot \omega_c \Delta t$ est négligeable devant v_{x0} , on obtient:

$$v_{x1} = v_{x0}$$

Pour u_{z1} :

$$v_{z1} = \frac{E}{B} \omega_c \Delta t - v_{x0} \omega_c \Delta t + v_{z0}$$

$\omega_c \Delta t \sim 0$ donc $v_{x0} \cdot \omega_c \Delta t$ est négligeable devant les autres termes, on obtient:

$$v_{z1} = v_{z0} + \frac{E}{B} \omega_c \Delta t$$

On remplaçant ω_c par eB/m on trouve:

$$v_{z1} = v_{z0} + \frac{eE}{m} \Delta t$$

Finalement les équations de mouvement seront comme suit:

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

IV-5-2. Cas du champ magnétique longitudinal :

$$\begin{cases} v_{x1} = v_{x0} \cos(\omega_c \Delta t) - v_{y0} \sin(\omega_c \Delta t) \\ v_{y1} = v_{x0} \sin(\omega_c \Delta t) + v_{y0} \cos(\omega_c \Delta t) \\ v_{z1} = v_{z0} + \frac{eE}{m} \Delta t \end{cases}$$

Quand B est faible $\omega_c \cdot \Delta t \sim 0$, donc $\sin(\omega_c \cdot \Delta t) \sim \omega_c \cdot \Delta t$ et $\cos(\omega_c \cdot \Delta t) \sim 1$, les équations de mouvement seront comme suit :

$$\begin{cases} v_{x1} = v_{x0} - v_{y0} \omega_c \Delta t \\ v_{y1} = v_{x0} \omega_c \Delta t + v_{y0} \\ v_{z1} = v_{z0} + \frac{eE}{m} \Delta t \end{cases}$$

Puisque $\omega_c \cdot \Delta t \sim 0$ les termes $-v_{y0} \cdot \omega_c \cdot \Delta t$ et $v_{x0} \cdot \omega_c \cdot \Delta t$ sont négligeable par rapport aux autres termes, on obtient :

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

Dans les deux cas des champs magnétiques transversal et longitudinal quand B est faible les équations de mouvement tendent vers le cas du champ électrique seul, donc dans la présence du champ magnétique faible les paramètres de transport ne changent pas.

Chapitre V

Méthode de Monte Carlo pour le calcul des paramètres de transport des électrons

V-1. Introduction :

Dans ce chapitre on va voir la méthode de calcul des paramètres de transport par la méthode de Monte Carlo, pour étudier l'équilibre thermique des électrons seulement la fonction de distribution de l'énergie d'électron (EEDF) et l'évolution temporel de l'énergie moyenne sont nécessaires, mais on va présenter aussi les autres paramètres de transport pour voir leurs état d'équilibre particulièrement dans le cas du champ magnétique. Généralement dans un décharge sans champ magnétique quand l'état d'équilibre de l'énergie moyenne des électrons est réalisée les autre paramètres de transport sans aussi en état d'équilibre, mais dans la présence du champ magnétique pour certains valeurs quelque paramètres de transport ne sont pas en état d'équilibre comme les coefficients de diffusion.

V-2. Méthode de Monte Carlo :**V-2-1. Description :**

La méthode de Monte Carlo est une approche statistique permettant la résolution d'équations comportementales déterministes comme probabilistes. Son utilisation ne se limite pas à la physique, et encore moins à la modélisation des décharges. L'utilisation de cette méthode en physique des plasmas a permis le développement de modèles particuliers [58-60], simulant le comportement du plasma suivant une approche microscopique, par opposition aux modèles dits « fluides » qui traitent le plasma comme un fluide homogène en le caractérisant par des grandeurs moyennes. La simulation Monte Carlo d'un ensemble d'ions ou d'électrons présents dans un gaz dans lequel ils font des collisions et subissant une force due au champ électrique, permet de suivre l'évolution temporelle de ce groupe de particules dans l'espace des phases. Cette méthode est basée sur la génération de nombres aléatoires permettant de recréer un enchaînement d'évènements réels, comme par exemple le mouvement d'une particule accélérée dans un champ électrique et faisant des collisions.

Historiquement, l'idée d'utiliser des nombres aléatoires dans le calcul des quantités déterministes a été présentée la première fois par von Neumann et Ulam (voir [61-63]).

V-2-2. Principe de la méthode de Monte Carlo :

La méthode de Monte Carlo est basé sur le calcul ' des temps de vol libres ' pour la particule d'essai, entre deux collisions successives, le mouvement des particules est supposée uniforme. Ces temps sont calculés en produisant des nombres aléatoires prélevés d'une distribution uniforme. En outre, on suppose que les processus de collision sont binaires et instantanés. Cette technique de simulation est directe, mais peut numériquement conduire à des erreurs relatives sur les quantités macroscopiques dues aux fluctuations statistiques. Ces erreurs diminuent lentement avec le nombre n d'échantillons (de l'ordre de $n^{-1/2}$).

V-2-3. Génération des nombres aléatoires :

Les nombres aléatoires recommandés peuvent être calculés en utilisant le théorème suivant : donnant une collection de nombres aléatoires r_i avec une distribution uniforme entre 0 et 1, collection de nombres aléatoires y_i distribuée suivant la fonction $f(y)$ dans l'intervalle (a, b) , est donnée par [19] :

$$\int_a^{y_i} f(x) dx = r_i \int_a^b f(x) dx \quad (5.1)$$

Après le calcul de l'intégrale, l'équation (5.1) sera une équation de y_i qui doit être résolue. Selon le cas, l'intégration en (5.1) aussi bien que la solution de l'équation résultante sera effectuée analytiquement ou numériquement. Puisque la collection r_i peut être fournie par un générateur de nombre aléatoire par l'ordinateur, il est simple de réaliser n'importe quel processus physique aléatoire caractérisé par une distribution de probabilité connue.

V-2-4. Calcul de temps entre deux collisions successives :

Le temps à la prochaine collision électron-molécule doit être calculé en connaissant la fréquence de collision en fonction de la vitesse d'électron. Ce problème est résolu de la manière la plus simple par introduire *les espèces nuls* comme celui dans la collision électron-espèces nuls (*processus nul*) la vitesse d'électron ne change pas [64].

La section efficace pour la collision électron-espèce nul est choisie pour obtenir la fréquence de collision total v_{tot} , donné par [19] :

$$\nu_{tot} = \max_{x \in V, 0 \leq \varepsilon \leq \varepsilon_{lim}} \left(\left(\frac{2\varepsilon}{m_e} \right)^{1/2} \sum_p N_p(x) \sigma_p(\varepsilon) \right) \quad (5.2)$$

Où la somme est faite autour de chaque processus de collision p , $\sigma_p(\varepsilon)$ est la section efficace, N_p est la densité de nombre de collision, V est l'extension de l'espace du system, et ε_{lim} est la limite de l'échelle de l'énergie cinétique utilisé pour calculer ou interpoler les sections efficaces.

Pour une inspection soigneuse de l'équation (5.2) on peut noter une autre approximation qui est habituellement exécuté dans les simulations de Monte Carlo des électrons : puisque l'électron se déplace beaucoup plus rapide que les molécules, on peut simplifié le calcul des taux de collisions en supposant que les particule cible sont immobiles. Avec une fréquence de collision constante, les temps de collision sont distribués selon [19] :

$$f(t) = \nu_{tot} \exp(-\nu_{tot} t) \quad (5.3)$$

Le temps à la prochaine collision électron-molécule est alors obtenue en utilisant (5.1), dans la forme [19] :

$$t_{vol} = -\frac{1}{\nu_{tot}} \ln r_i \quad (5.4)$$

Où r_i est un élément d'un ensemble de nombres aléatoires uniformément distribués entre 0 et 1.

V-3. Traitement de collisions :

V-3-1. Processus de collision choisie :

Chaque processus de collision qui se produit après le vol libre est caractérisé par une fréquence relative de collision [19] :

$$\nu_k(\varepsilon) = \left(\frac{2\varepsilon}{m_e} \right)^{1/2} \sigma_k(\varepsilon) n_k(r) \quad (5.5)$$

Après avoir effectuer un deuxième tirage du nombre aléatoire r_i , le processus de collision choisi sera le $n^{ième}$ tels que [19] :

$$\sum_{k=1}^{n-1} \frac{v_k}{v_{tot}} < r_i < \sum_{k=1}^n \frac{v_k}{v_{tot}} \quad (5.6)$$

V-3-2. Traitement des interactions électron–molécules :

Deux classes d'interactions électron–molécule sont mises en application dans le programme :

- Collisions élastiques électron–molécule.
- Les interactions inélastiques électron–molécule.

Les interactions superélastiques électron–molécule et électron–ion n'ont pas été mises en application puisque ces interactions ont des influences mineures aux valeurs impliquées E/n .

Les collisions élastiques électron–molécule (e–M) :

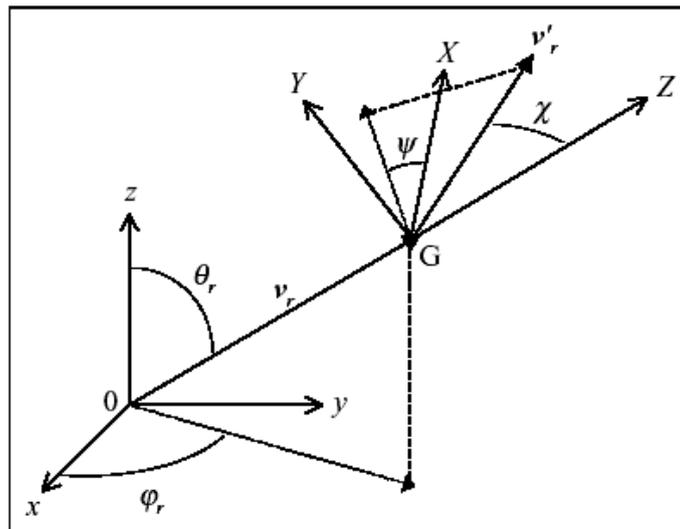


Figure V-1 : Vitesses relatives avant et après la collision, dans le référentiel du laboratoire (x,y,z) et du centre de masse (X,Y,Z).

La collision élastique nécessite le tirage d'un nombre aléatoire, R_χ pour déterminer l'angle de déviation χ dans le référentiel du centre de masse. Cet angle permet de calculer la répartition des vitesses, après la collision, entre la particule incidente et la particule cible. Un deuxième nombre aléatoire R_ψ permet de calculer l'angle azimutal ψ après la collision. Ces angles repèrent

le vecteur vitesse relative v_r' dans le référentiel du centre de masse. Ils sont déduits des relations :

$$R_\chi = \frac{\int_0^\chi \sin(\chi') d\chi'}{\int_0^\pi \sin(\chi') d\chi'} = \frac{1}{2} [1 - \cos(\chi')] \quad (5.7)$$

$$R_\psi = \frac{\int_0^\psi d\psi'}{\int_0^{2\pi} d\psi'} = \frac{\psi}{2\pi} \quad (5.8)$$

Ces expressions découlent du fait qu'on a assimilé la partie isotrope de la section efficace différentielle de collision à la collision élastique. On obtient finalement :

$$\chi = \arccos[1 - 2R_\chi] \quad (5.9)$$

$$\psi = 2\pi R_\psi \quad (5.10)$$

De plus, on définit ϑ_r et φ_r comme étant les angles polaire et azimutal repérant le vecteur vitesse relative v_r dans le référentiel du laboratoire :

$$\theta_r = \arccos \left[\frac{v_{zr}}{v_r} \right] \quad (5.11)$$

$$\varphi_r = \arccos \left[\frac{v_{xr}}{v_r \sin \theta_r} \right] \quad (5.12)$$

Sachant que, pour une collision élastique, le module de la vitesse relative se conserve, ses composantes cartésiennes après la collision s'écrivent [65] :

$$\begin{cases} v'_{xr} = v_r (\sin \chi \cos \psi \sin \varphi_r + \sin \chi \sin \psi \cos \theta_r \cos \varphi_r + \cos \chi \sin \theta_r \cos \varphi_r) \\ v'_{yr} = v_r (-\sin \chi \cos \psi \cos \varphi_r + \sin \chi \sin \psi \cos \theta_r \sin \varphi_r + \cos \chi \sin \theta_r \sin \varphi_r) \\ v'_{zr} = v_r (-\sin \chi \sin \psi \sin \theta_r + \cos \chi \cos \theta_r) \end{cases} \quad (5.13)$$

Les composantes de la vitesse de la particule projectile après la collision, dans le repère du laboratoire, sont finalement [65] :

$$\begin{cases} \mathbf{v}'_{xp} = r_p \mathbf{v}_{xp} + r_c \mathbf{v}_{xc} + r_c \mathbf{v}'_{xr} \\ \mathbf{v}'_{yp} = r_p \mathbf{v}_{yp} + r_c \mathbf{v}_{yc} + r_c \mathbf{v}'_{yr} \\ \mathbf{v}'_{zp} = r_p \mathbf{v}_{zp} + r_c \mathbf{v}_{zc} + r_c \mathbf{v}'_{zr} \end{cases} \quad (5.14)$$

Où r_p et r_c sont définis par :

$$r_p = \frac{m_p}{m_p + m_c} \quad (5.15)$$

$$r_c = \frac{m_c}{m_p + m_c} \quad (5.16)$$

De même, les composantes de la vitesse du neutre cible après collision, s'écrivent [65] :

$$\begin{cases} \mathbf{v}'_{xc} = r_p \mathbf{v}_{xp} + r_c \mathbf{v}_{xc} - r_p \mathbf{v}'_{xr} \\ \mathbf{v}'_{yc} = r_p \mathbf{v}_{yp} + r_c \mathbf{v}_{yc} - r_p \mathbf{v}'_{yr} \\ \mathbf{v}'_{zc} = r_p \mathbf{v}_{zp} + r_c \mathbf{v}_{zc} + r_p \mathbf{v}'_{zr} \end{cases} \quad (5.17)$$

Dans le cas où le neutre cible est supposé être au repos avant la collision, il est possible de relier la fraction d'énergie conservée par la particule incidente lors de la collision, à l'angle de déviation χ [65] :

$$\frac{\mathcal{E}'_p}{\mathcal{E}_p} = 1 + \frac{2m_p m_c}{(m_p + m_c)^2} (\cos \chi - 1) \quad (5.18)$$

Si le projectile (dans notre cas l'électron) est très petit devant la cible, ce rapport s'écrit alors :

$$\frac{\mathcal{E}'_p}{\mathcal{E}_p} = 1 + 2 \frac{m_p}{m_c} (\cos \chi - 1) \quad (5.19)$$

Les interactions inélastique électron–molécule (e–M) :

Les molécules neutres de gaz peuvent être excitées par des collisions inélastiques d'électron. Trois cas des processus de collision inélastiques sont distingués dans le programme :

Une excitation d'une molécule à un état uniquement défini (différentes rotations, vibrations et états électroniquement excités) diminue l'énergie de l'électron d'essai instantanément avec l'énergie qui est exigée pour exciter la molécule, ε_{exc} [66]:

$$\Delta\varepsilon = -\varepsilon_{exc} \quad (5.20)$$

En cas *d'ionisation* l'énergie restante est partagée entre l'électron d'essai et l'électron libérés de la molécule ionisée. Le changement d'énergie de l'électron d'essai devient (le signe moins implique une perte) [66] :

$$\Delta\varepsilon = -\varepsilon^{ion} - (\varepsilon - \varepsilon^{ion})r_i \quad (5.21)$$

Dans laquelle r_i est un nombre aléatoire uniforme entre 0 et 1.

L'énergie de l'électron libéré est [66] :

$$\varepsilon_s = (\varepsilon - \varepsilon^{ion})(1 - r_i) \quad (5.22)$$

L'attachement de l'électron d'essai mène à la perte de toute son énergie [66] :

$$\Delta\varepsilon = -\varepsilon \quad (5.23)$$

La simulation est continuée avec un nouveau électron d'essai, les électrons secondaire sont aussi prisent en compte.

V-4. Les équations de mouvement :

Entre deux collisions successives les mouvements de l'électron sont conditionnés par les forces extérieures d'origine électrique ou magnétique (les champs électrique et magnétique sont uniformes), on a considéré trois cas de ces forces dans notre simulation :

V-4-1. Cas d'un champ électrique et champ magnétique nul :

Dans le cas d'un champ électrique anti-parallèle à l'axe Oz et un champ magnétique nul, après un temps de vol initial les nouvelles composantes de la vitesse sont données par la loi de Newton comme suit :

$$\begin{cases} v_{x1} = v_{x0} \\ v_{y1} = v_{y0} \\ v_{z1} = v_{z0} + e \frac{E}{m} \Delta t \end{cases} \quad (5.24)$$

Les nouvelles positions s'écrivent comme suit :

$$\begin{cases} x_1 = x_0 + v_{x0} \Delta t \\ y_1 = y_0 + v_{y0} \Delta t \\ z_1 = z_0 + v_{z0} \Delta t + e \frac{E}{2m} \Delta t^2 \end{cases} \quad (5.25)$$

Avec $\Delta t = t_1 - t_0$ dans notre cas Avec $\Delta t = t_{vol}$.

V-4-2. Cas d'un champ électrique et champ magnétique longitudinal :

Dans le cas d'un champ électrique anti-parallèle à l'axe Oz et un champ magnétique longitudinal dirigés suivant Oz , on peut écrire les nouveaux vecteurs vitesse comme suit :

$$\begin{cases} v_{x1} = v_{x0} \cos(\omega_c \Delta t) - v_{y0} \sin(\omega_c \Delta t) \\ v_{y1} = v_{x0} \sin(\omega_c \Delta t) + v_{y0} \cos(\omega_c \Delta t) \\ v_{z1} = v_{z0} + a_z \Delta t \end{cases} \quad (5.26)$$

Les nouvelles positions sont tel que :

$$\begin{cases} x_1 = x_0 + \frac{1}{\omega_c} (v_{y0} (\cos(\omega_c \Delta t) - 1) + v_{x0} \sin(\omega_c \Delta t)) \\ y_1 = y_0 + \frac{1}{\omega_c} (-v_{x0} (\cos(\omega_c \Delta t) - 1) + v_{y0} \sin(\omega_c \Delta t)) \\ z_1 = z_0 + v_{z0} \Delta t + \frac{1}{2} a_z \Delta t^2 \end{cases} \quad (5.27)$$

V-4-3. Cas d'un champ électrique et champ magnétique transversale :

Dans le cas d'un champ électrique parallèle à l'axe Oz et un champ magnétique transversal (parallèle à Oy), les composantes de la vitesse sont données par :

$$\begin{cases} v_{x1} = v_{x0} \cos(\omega_c \Delta t) + v_{z0} \sin(\omega_c \Delta t) + \frac{E}{B} (1 - \cos(\omega_c \Delta t)) \\ v_{y1} = v_{y0} \\ v_{z1} = -v_{x0} \sin(\omega_c \Delta t) + v_{z0} \cos(\omega_c \Delta t) + \frac{E}{B} \sin(\omega_c \Delta t) \end{cases} \quad (5.28)$$

Les nouvelles positions sont comme suit :

$$\begin{cases} x_1 = \frac{v_{x0}}{\omega_c} \sin(\omega_c \Delta t) + \frac{v_{z0}}{\omega_c} (1 - \cos(\omega_c \Delta t)) + \frac{E}{B} \Delta t - \frac{E}{B\omega_c} \sin(\omega_c \Delta t) + x_0 \\ y_1 = v_{y0} \Delta t + y_0 \\ z_1 = \frac{v_{x0}}{\omega_c} (\cos(\omega_c \Delta t) - 1) + \frac{v_{z0}}{\omega_c} \sin(\omega_c \Delta t) - \frac{E}{B\omega_c} (\cos(\omega_c \Delta t) - 1) + z_0 \end{cases} \quad (5.29)$$

V-4-4. Cas d'un champ électrique sinusoïdal :

Le champ électrique sinusoïdal est donné par la relation suivante :

$$E(t) = (E_0/N) \cdot \sin(2\pi f t) \quad (5.30)$$

Où E_0/N : est l'amplitude du champ électrique sinusoïdal en Townsend ($1 \text{ Td} = 10^{-21} \text{ V.m}^2$), N : est la densité du gaz, f : est la fréquence du courant (dans ce travail $f = 10 \text{ MHz}$).

Concernant les équations de mouvement dans le cas du champ électrique sinusoïdal on utilise les équations (5.24) et (5.25) mais on remplace E par $E(t)$ [67]. L'utilisation direct du $E(t)$ est adopté on faisant une approximation par la supposition que le champ électrique sinusoïdal est constant entre deux collisions successives, ou d'une autre manière le champ électrique sinusoïdal est constant dans un intervalle du temps dt très petit [67].

Donc les composantes du vecteur vitesse sont donné comme suit :

$$\begin{cases} v_{x1} = v_{x0} \\ v_{y1} = v_{y0} \\ v_{z1} = v_{z0} + e \frac{E(t)}{m} \Delta t \end{cases} \quad (5.31)$$

Donc les composantes du vecteur vitesse sont donné comme suit :

$$\begin{cases} x_1 = x_0 + v_{x0} \Delta t \\ y_1 = y_0 + v_{y0} \Delta t \\ z_1 = z_0 + v_{z0} \Delta t + e \frac{E(t)}{2m} \Delta t^2 \end{cases} \quad (5.32)$$

V-5. Calcul des paramètres de transport :

Dans le cas de la simulation par la méthode de Monte Carlo on utilise seulement les formules physiques des paramètres de transport (c à d on utilise les lois de la mécanique classique). Les champs électrique et magnétique influencent directement sur les composantes du vecteur vitesse (c'est-à-dire influence aussi sur l'énergie cinétique) et sur les composantes du vecteur position.

V-5-1. Fonction de distribution :

Pour la fonction de distribution on utilise la fonction de distribution d'énergie d'électron l'EEDF, elle est définie tel que la fraction local des électrons qui ont l'énergie dans l'intervalle $[\varepsilon, \varepsilon+d\varepsilon]$ dans une instant t [19] :

$$f(t, \varepsilon) \varepsilon^{1/2} d\varepsilon \quad (5.33)$$

V-5-2. Vitesse de dérive :

La vitesse de dérive est calculée tel que la vitesse moyenne des vitesses de dérive des électrons:

$$W = \langle v_z \rangle \quad (5.34)$$

Donc :

$$W = \frac{1}{n_e} \sum_{i=1}^{ne} v_{zi} \quad (5.35)$$

Où v_{zi} sont les vitesses des électrons suivant l'axe Oz . n_e est le nombre d'électrons.

V-5-3. Coefficient de diffusion transversal :

Dans le régime hydrodynamique le tenseur de diffusion s'écrit [68] :

$$D = \frac{1}{2!} \frac{d}{dt} \langle r^* r^* \rangle \quad (5.36)$$

Le coefficient de diffusion transversal s'écrit alors sous la forme :

$$D_T = \frac{d\langle x^2 \rangle}{2dt} = \frac{d\langle y^2 \rangle}{2dt} \quad (5.37)$$

Pour un résultat plus rigoureux, on va prendre le coefficient de diffusion transversal comme suit :

$$D_T = \frac{d\langle x^2 \rangle + d\langle y^2 \rangle}{4dt} \quad (5.38)$$

Les moyennes des x^2 et des y^2 sont écrites sous les formes :

$$d\langle x^2 \rangle = \frac{1}{n_e} \sum_{i=1}^{ne} x_i^2 \quad (5.39)$$

$$d\langle y^2 \rangle = \frac{1}{n_e} \sum_{i=1}^{ne} y_i^2 \quad (5.40)$$

Donc le coefficient de diffusion transversal s'écrit comme suit :

$$D_T = \frac{1}{4dt} \left(\frac{1}{n_e} \sum_{i=1}^{ne} x_i^2 + \frac{1}{n_e} \sum_{i=1}^{ne} y_i^2 \right) \quad (5.41)$$

Finalement le coefficient de diffusion transversal est obtenu tel que :

$$D_T = \frac{1}{4dt} \left(\frac{1}{n_e} \sum_{i=1}^{ne} (x_i^2 + y_i^2) \right) \quad (5.42)$$

V-5-4. Coefficient de diffusion longitudinal :

D'après l'équation (5.33) le coefficient de diffusion longitudinal s'écrit comme suit :

$$D_L = \frac{d\langle z^{*2} \rangle}{2dt} \quad (5.43)$$

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

Donc :

$$D_L = \frac{d\langle z^2 - \langle z \rangle^2 \rangle}{2dt} \quad (5.44)$$

Avec :

$$\langle z \rangle^2 = \left(\frac{1}{n_e} \sum_{i=1}^{ne} z_i \right)^2 \quad (5.45)$$

Le coefficient de diffusion longitudinal s'écrit sous la forme suivante :

$$D_L = \frac{1}{2dt} \left(\frac{1}{n_e} \sum_{i=1}^{ne} (z_i^2 - \langle z \rangle^2) \right) \quad (5.46)$$

Enfin D_L est obtenu sous la forme :

$$D_L = \frac{1}{2dt} \left(\left(\frac{1}{n_e} \sum_{i=1}^{ne} z_i^2 \right) - \left(\frac{1}{n_e} \sum_{i=1}^{ne} z_i \right)^2 \right) \quad (5.47)$$

V-5-5. Coefficient d'ionisation (de Townsend) :

Le premier coefficient de Townsend est donné par [69] :

$$\alpha = \frac{N \langle v_{ion} \rangle}{W} \quad (5.48)$$

Où $\langle v_{ion} \rangle$ est la fréquence d'ionisation moyenne, N est la densité du gaz, W est la vitesse de dérive donné par l'équation (5.35).

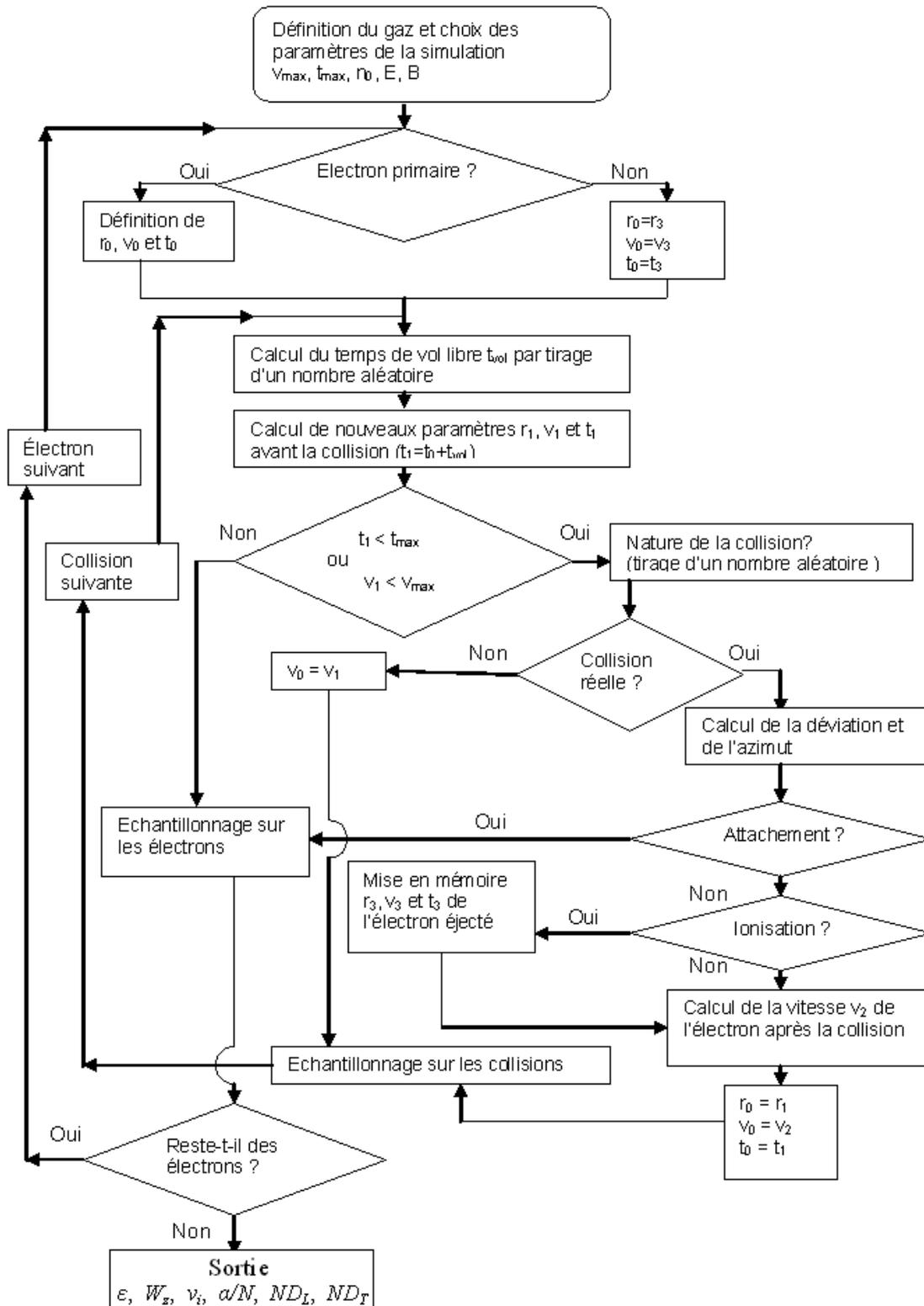
Pour le calcul de la fréquence d'ionisation moyenne par la méthode de Monte Carlo on va utiliser la fonction de distribution d'énergie d'électron donné par la relation (5.33), donc $\langle v_{ion} \rangle$ devient :

$$\langle v_{ion} \rangle = \int v_{ion} f(t, \varepsilon) \varepsilon^{1/2} d\varepsilon \quad (5.49)$$

Le coefficient d'ionisation sera comme suit :

$$\alpha = \frac{N \int v_{ion} f(t, \varepsilon) \varepsilon^{1/2} d\varepsilon}{W} \quad (5.50)$$

L'organigramme de Monte Carlo :



Chapitre VI

Résultats et discussions

VI-1. Introduction :

Au cours de ce chapitre, nous allons exposer les résultats relatifs aux paramètres de transport des électrons, présent dans un gaz faiblement ionisé ou plasma de décharges. Afin de décrire l'état d'équilibre atteint par ces particules et trouver les conditions d'établissement de cette situation stationnaire.

Nous allons également discuter sur les paramètres qui influencent ou écarte le plasma de cet état d'équilibre thermique.

VI-2. Conditions expérimentales et comparaison :

Initialement les électrons sont dirigés parallèle à l'axe z, mais après la première collision ils sont dispersés dans l'espace tridimensionnel. Le gaz utilisé est l'azote, les réactions considérées sont: transfert de moment, 1 rotation du molécule, 9 vibration des molécules, 2 excitations vibrationnels, 11 excitations et l'ionisation total; ils sont classées dans le tableau VI-1.

Tableau VI-1 : Réactions considérées pour l'azote avec les niveaux de vibrations et les gammes d'énergies [70].

Réactions	niveaux	Gamme d'énergie (eV)
Transfert du moment		0 – 1000
Rotation du molécule		0.03 – 3.6
Vibration du molécule	v = 1	0.3 – 50
Vibration du molécule	v = 1	1.65 – 3.6
Vibration du molécule	v = 2	1.8 – 3.5
Vibration du molécule	v = 3	2 – 3.3
Vibration du molécule	v = 4	2.1 – 3.2
Vibration du molécule	v = 5	2.2 – 3.3
Vibration du molécule	v = 6	2.3 – 3.1
Vibration du molécule	v = 7	2.4 – 3.4
Vibration du molécule	v = 8	2.6 – 3.4
Excitation vibrationnelle du Molécule		7 – 70
Excitation vibrationnelle du Molécule		7.3 – 70

Excitation de la molécule		8 – 70
Excitation de la molécule		8 – 100
Excitation de la molécule		8.1 – 70
Excitation de la molécule		9 – 70
Excitation de la molécule		9 – 150
Excitation de la molécule		9 – 1000
Excitation de la molécule		9.1 – 50
Excitation de la molécule		11.5 – 100
Excitation de la molécule		12.92 – 50
Excitation de la molécule		13 – 1000
Excitation de la molécule		14 – 1000
Ionization total		16 – 1500

Pour la comparaison des résultats avec les littératures valables, la figure VI-1 montre l'énergie d'électron et la vitesse de dérive calculé par notre code avec les calculs de Phelps et Pitchford [71], une bonne concordance est montrée particulièrement pour la vitesse de dérive.

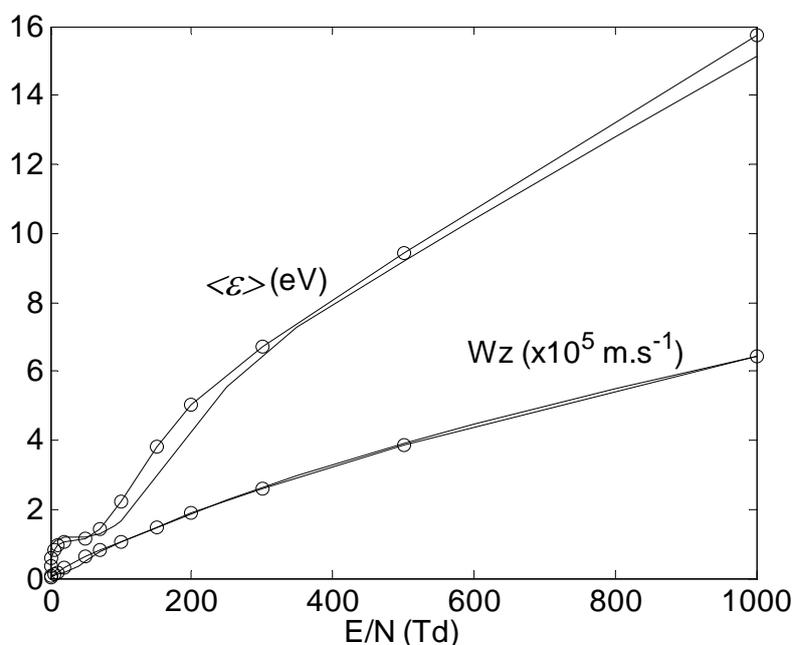


Figure VI-1 : L'énergie moyenne d'électron et la vitesse de dérive en fonction de E/N (Td) pour N₂: ligne ce travail, ligne avec cercles Phelps et Pitchford [71].

Une autre comparaison est montrée pour le cas de l'oxygène, dans le tableau VI-2 les processus de collisions électron-molécule sont présentés. Dans le cas de l'oxygène les réactions considérées sont : transfert de moment, 14 excitations, ionisation total, attachement dissociative et attachement avec trois corps.

Tableau VI-2 : Réactions considérées pour l'oxygène avec les niveaux de vibrations et les gammes d'énergies [70].

Réactions	niveaux	Gamme d'énergie (eV)
Transfert du moment		0 – 100
Rotation du molécule		0.07 – 100
Vibration du molécule	v = 1 9V résonance	4– 100
Vibration du molécule	v = 1	0.19 – 100
Vibration du molécule	v = 2	0.56 – 100
Vibration du molécule		4 – 100
Vibration du molécule		0.68 – 100
Vibration du molécule		0.79 – 100
Vibration du molécule		0.977 – 100
Vibration du molécule		1.627 – 100
Excitation de la molécule		4.5 – 100
Excitation de la molécule		6 – 100
Excitation de la molécule		8.4 – 100
Excitation de la molécule		10 – 100
Excitation de la molécule		14.7 – 100
Ionization total		12.06 – 100
Attachement dissociative		4.9 – 100
Attachement avec 3 corps		0.058 – 100

Pour la comparaison avec d'autres littératures dans le cas de l'oxygène, la figure VI-2 montre l'énergie moyenne et la vitesse de dérive en fonction du champ électrique réduit calculés par le code de Monte Carlo et les calculs par la méthode de résolution de l'équation de Boltzmann par Pheleps [72] et les résultats

expérimentaux déterminés par Al-Amin et *al* [73], une bonne concordance est obtenue.

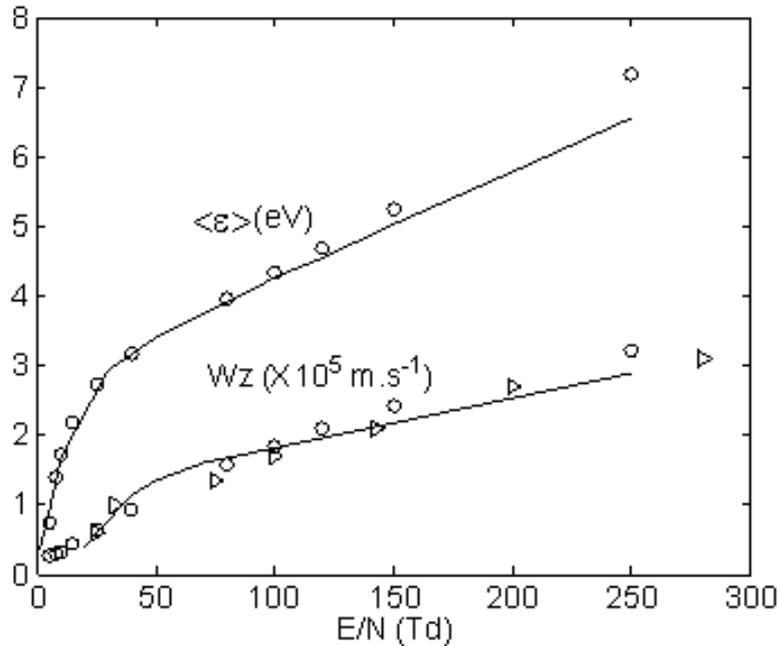


Figure VI-2 : L'énergie moyenne d'électron et la vitesse de dérive en fonction de E/N (Td) pour O_2 . ligne : ce travail, cercles : Phelps [72], triangles : Al-Amin et *al* [73].

VI-3. Etude de l'équilibre des décharges de courant continu (décharges DC) :

VI-3-1. L'effet de la densité du gaz :

La figure VI-3 montre l'énergie moyenne temporel des électrons dans le cas de l'azote avec différentes densités de gaz ($T = 300 \text{ °K}$, $P = 0.1, 0.2, 0.4, 2 \text{ Torr}$) à $E/N = 150 \text{ Td}$. Pour un temps fixé (100 ns) ou d'une autre façons pour une distance inter-électrodes fixé le choix de la densité du gaz à un effet directe sur l'état d'équilibre et sur la valeur de l'énergie, figure VI-3 montre que pour 0.1 et 0.2 Torr l'état d'équilibre n'est pas réalisé, mais on commence à obtenir l'état d'équilibre à partir de 0.4 Torr, le très bon cas d'équilibre est pour $P = 2 \text{ Torr}$, à partir de cette valeur de la pression du gaz ($P = 2 \text{ Torr}$) on obtient le même comportement de l'énergie temporel, à partir de cette valeur l'augmentation de pression n'a aucun effet. Le nombre de collisions augmente proportionnellement à la croissance de la densité du gaz. L'état d'équilibre est obtenu lorsque le nombre de collisions est suffisant pour faire une bonne distribution de l'énergie entre les électrons. Comme résultat à une

distance inter-électrodes fixe l'état d'équilibre est obtenu si on augmente la pression du gaz, ou d'une autre façon pour une pression fixe l'état d'équilibre est obtenu si on augmente la distance inter-électrodes.

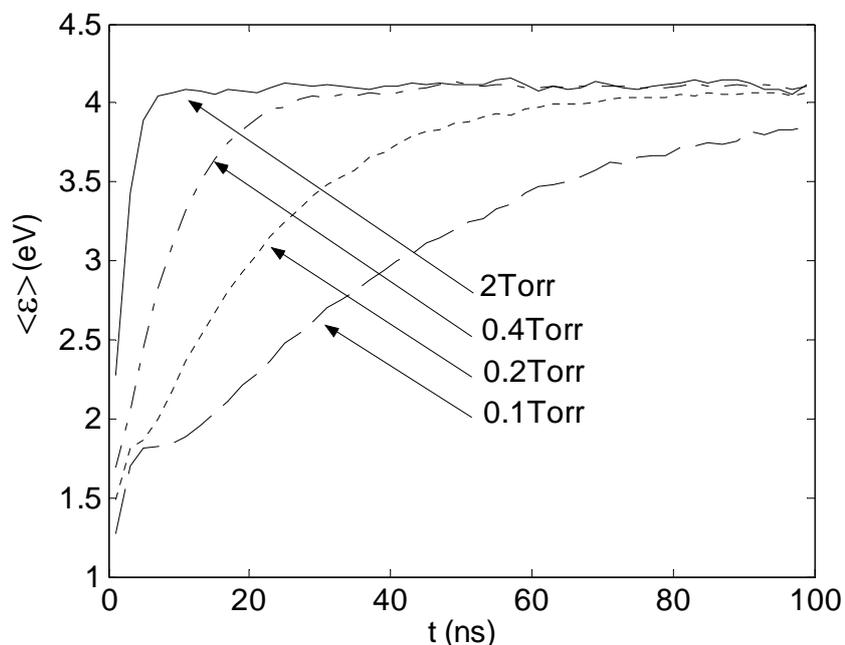


Figure VI-3 : L'énergie moyenne d'électron temporelle pour N_2 avec différentes densités de gaz ($T = 300 \text{ K}$, $P = 0.1, 0.2, 0.4, 2 \text{ Torr}$) à $E/N = 150 \text{ Td}$.

Remarque : Dans tout ce qui suit la simulation est faite dans le cas de la densité du gaz $N_g = 6.28 \times 10^{22} \text{ molecules.m}^{-3}$ qui correspond à la température du gaz $T = 300 \text{ K}$ et à la pression $P_g = 2 \text{ Torr}$.

VI-3-2. L'effet de l'énergie initiale des électrons primaires :

Généralement la décharge est commencée par l'émission des rayonnements vers la cathode, dans ce cas les électrons primaires gagnent une énergie initiale par rayonnement, en partant vers l'anode sous l'action du champ électrique, l'effet de cette énergie initiale est étudié dans ce qui suit.

La figure VI-4 montre la variation de l'énergie moyenne temporelle des électrons pour l'azote à $E/N = 20, 100, 150 \text{ Td}$ avec différentes énergies initiales.

Pour $E/N = 20 \text{ Td}$ l'état d'équilibre est réalisé pour $\varepsilon_0 = 1 \text{ eV}$ mais pour $\varepsilon_0 = 4 \text{ eV}$ l'énergie moyenne est loin de l'état d'équilibre, l'énergie initiale des électrons

primaire a un grand effet si la différence entre l'énergie moyenne et l'énergie initiale est grande. Généralement l'état d'équilibre n'est pas influencé par l'énergie initiale des électrons pour le champ électrique relativement élevé (dans le cas de l'azote si $E/N \geq 100$ Td), mais si l'énergie initial augmente l'état d'équilibre prend plus de temps pour être réalisé.

Aussi l'état d'équilibre parfait (l'état d'équilibre parfait signifie que l'énergie moyenne stationnaire est du le début jusqu'à la fin) peut être obtenu quand l'énergie initial égal l'énergie moyenne et $E/N \leq 100$ Td (par exemple voir les cas $E/N = 20$ Td, $\varepsilon_0 = 1$ eV et $E/N = 100$ Td, $\varepsilon_0 = 2.5$ eV), l'état d'équilibre parfait permet de l'utilisation parfaite de la méthode dite fluide model, la première région de non équilibre doit être réduit le maximum pour faire le meilleur utilisation de la méthode fluide model.

Comme résultats il est nécessaire de faire la meilleure combinaison entre la densité du gaz, la distance inter-électrodes et le champ électrique pour obtenir les meilleurs cas de l'état d'équilibre et les meilleures simulations des décharges électriques par la méthode fluide model.

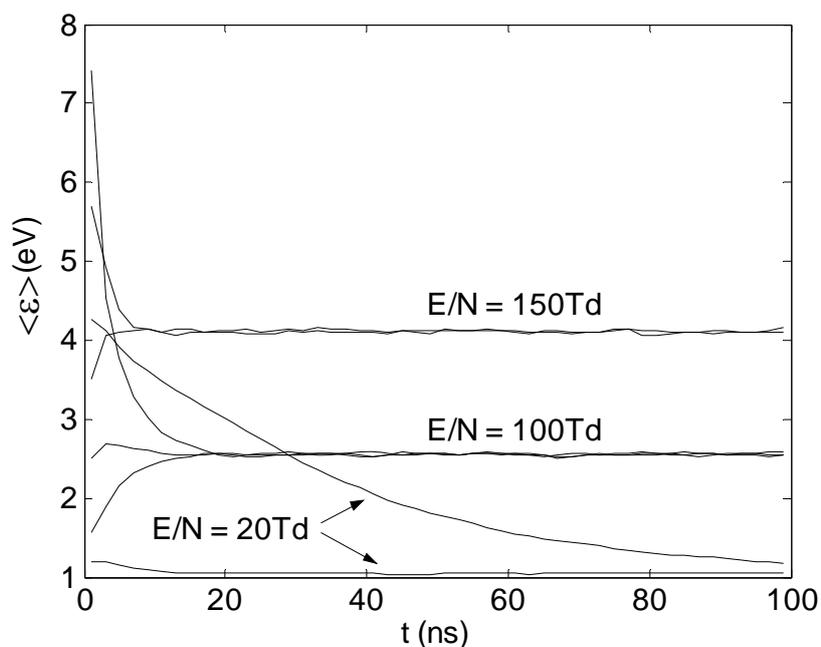


Figure VI-4: Energie moyenne temporel des électrons pour N_2 à $E/N = 20$ Td ($\varepsilon_0 = 1, 4$ eV), $E/N = 100$ Td ($\varepsilon_0 = 1, 2.5, 7$ eV), $EN = 150$ Td ($\varepsilon_0 = 2.5, 4$ eV).

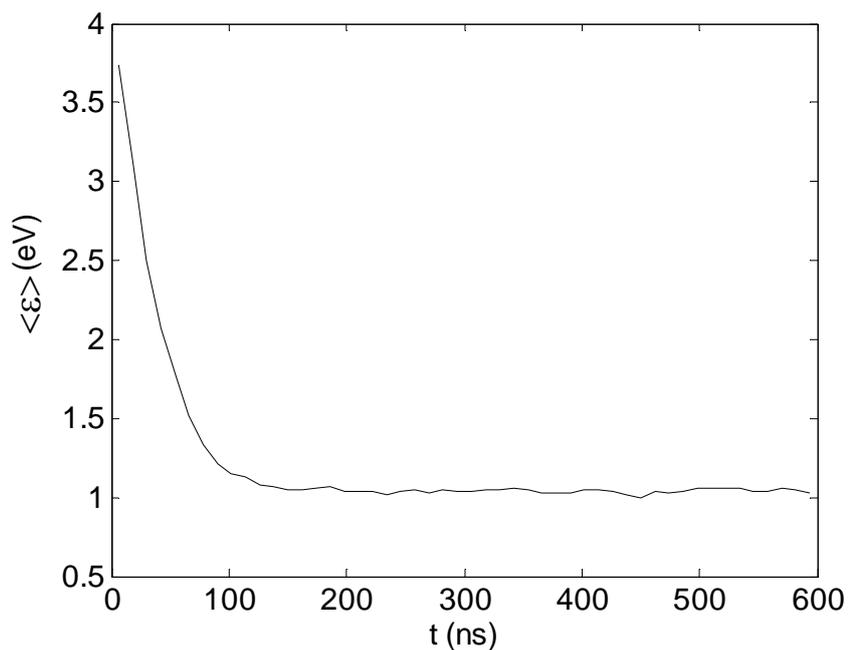


Figure VI-5: Energie moyenne temporel des électrons pour N_2 à $E/N = 20$ Td avec $\varepsilon_0 = 4$ eV, le temps est prolongé à 600 ns.

La figure VI-5 représente les variations temporelles de l'énergie moyenne des électrons pour l'azote à $E/N = 20$ Td et $\varepsilon_0 = 4$ eV, le temps est prolongé jusqu'à 600 ns. Ces résultats montrent que si l'état d'équilibre n'ai pas réalisé parce l'énergie initiale est élevé, on besoin plus de temps ou on augmente la densité du gaz pour la réalisé.

La fonction de distribution d'énergie d'électron EEDF en fonction de l'énergie d'électron est montrée dans la figure VI-6 pour l'azote à $E/N = 100$ Td avec différentes énergie initiales des électrons primaires. Dans le cas de l'azote l'EEDF commence à être Maxwellienne pour $E/N \geq 500$ Td [66]. Figure VI-6 montre que si l'état d'équilibre est réalisé pour un champ électrique relativement élevé ($E/N \geq 100$ Td) l'énergie initiale à un léger effet sur l'EEDF.

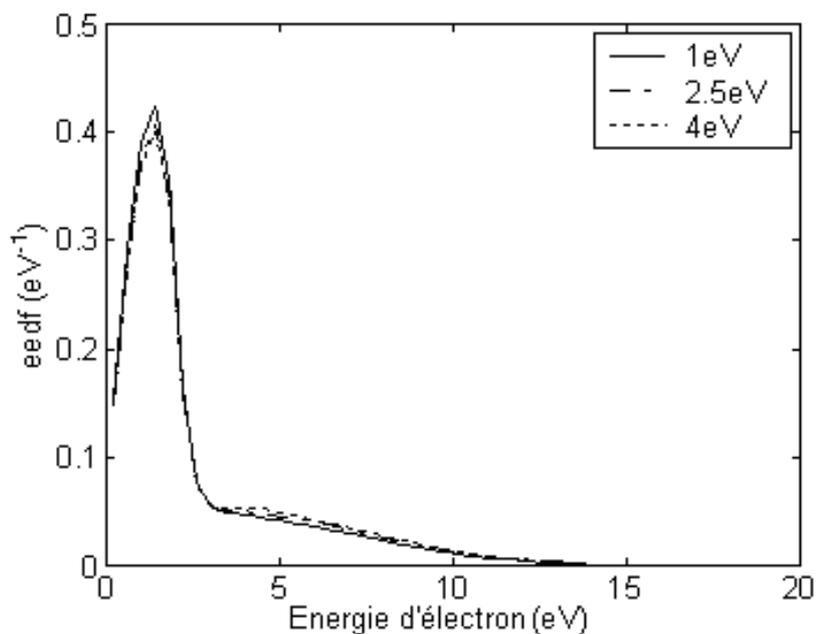


Figure VI-6: EEDF en fonction de l'énergie d'électron dans le cas de N₂ à E/N = 100 Td avec $\varepsilon_0 = 1, 2.5, 4$ eV.

Dans la figure VI-7 la fonction de distribution d'énergie d'électron EEDF en fonction de l'énergie d'électron est montrée dans le cas de l'azote à E/N = 20 Td avec différent énergie initiales des électrons primaires. Quand l'état d'équilibre est changé par le changement de l'énergie initiale, l'EEDF change aussi, mais si le temps est prolongé (jusqu'à 600 ns dans ce cas) l'EEDF de plus en plus tend vers l'EEDF de l'état d'équilibre.

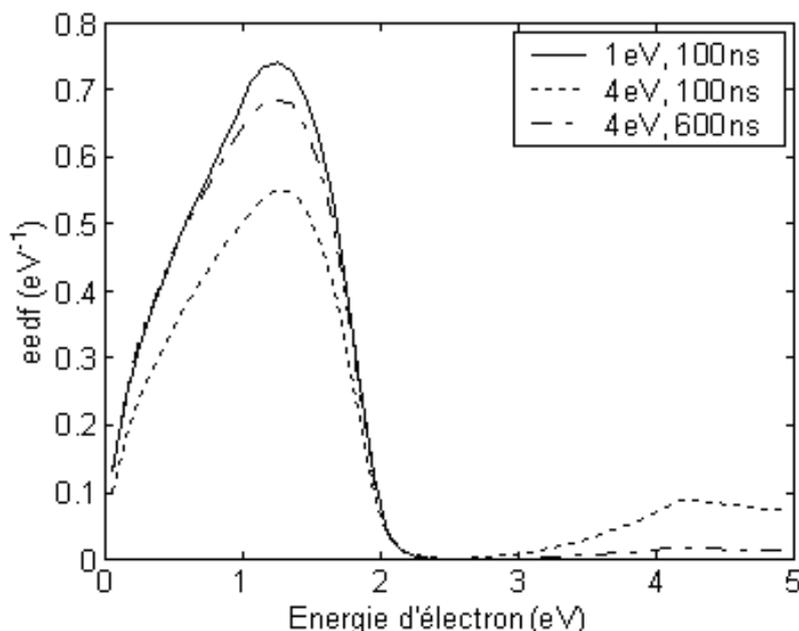


Figure VI-7: EEDF en fonction de l'énergie d'électron dans le cas de N_2 à $E/N = 20$ Td avec $\varepsilon_0 = 1, 4$ eV pour $t = 100$ ns et 600 ns.

VI-3-3. L'effet du champ électrique :

La figure VI-8 montre l'énergie moyenne temporelle des électrons dans le cas de l'azote à différentes valeurs du champ électrique. Figure VI-8 montre que le champ électrique a un rôle pour réaliser l'état d'équilibre, à $E/N = 150$ Td l'énergie d'électron n'est pas en état d'équilibre, mais si on augmente le champ électrique à $E/N = 300$ Td l'équilibre commence, et les meilleurs cas de l'état d'équilibre commence à $E/N = 500$ Td. Par conséquent si la densité de gaz ou la distance inter-électrodes ne sont pas suffisants l'état d'équilibre peut être réalisé en augmentant le champ électrique.

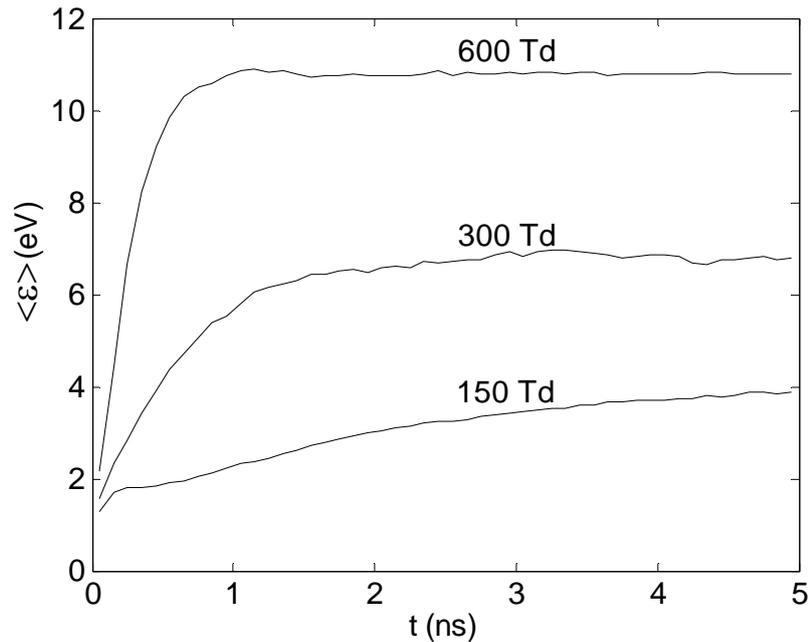


Figure VI-8: Energie moyenne temporel pour N_2 à $E/N = 150, 300$ et 600 Td .

VI-3-4. L'effet du champ magnétique :

Dans le cas du champ magnétique l'étude de différentes cas en utilisant $\omega_c \cdot \Delta t$ n'a aucun sens quand B est significative puisque le temps entre deux collisions successives Δt n'est pas constant, après chaque collision Δt change. Le seul cas particulier est quand B est relativement bas de sorte qu'il mène à $\omega_c \cdot \Delta t \approx 0$, ce cas est obtenu quand la fréquence de cyclotron est très inférieur à la fréquence de collision ν_{tot} . Quand le champ magnétique est bas tous les paramètres de transport tendent vers le cas de plasma non magnétisé (voir le chapitre 4).

VI-3-4-1. L'effet du champ magnétique transversal :

Dans le cas du champ magnétique transversal les vitesses des électrons sont influencées principalement par le rapport E/B , puisque B diminue l'effet du champ électrique qui donne l'énergie aux électrons (voir les équations (4.13) et (4.14)). Généralement il est préféré de faire l'étude en utilisant le champ électrique réduit E/N et le champ magnétique réduit B/N mais $(E/N)/(B/N)$ donne E/B , par conséquence le changement de la densité du gaz ne change pas les résultats, donc le meilleur étude est en utilisant les valeurs de E/B .

La figure VI-9 représente la variation de l'EEDF dans le cas de l'azote à différentes valeurs du champ magnétique transversale ($B_T = 0, 0.005, 0.05, 0.09, 0.2, 0.25, 0.4$ Tesla) à $E/N = 800$ Td. On voit dans la figure VI-9 que pour des valeurs relativement bas du champ magnétique (0.005 T) la fonction de distribution ne change pas ce qui est justifié théoriquement dans le chapitre 4, quand le champ magnétique sera important (0.05, 0.09 T) la fonction de distribution change mais elle reste Maxwellienne, mais pour un champ magnétique relativement élevé (0.2, 0.25, 0.4 T) la fonction de distribution est non Maxwellienne.

Comme résultat l'EEDF est non Maxwellienne quand le rapport $E/B \leq 251000$ Volt/Tesla dans le cas de l'azote (dans ce travail $E/B \leq 251000$ Volt/Tesla correspond à $E/N = 800$ Td et $B = 0.2$ T).

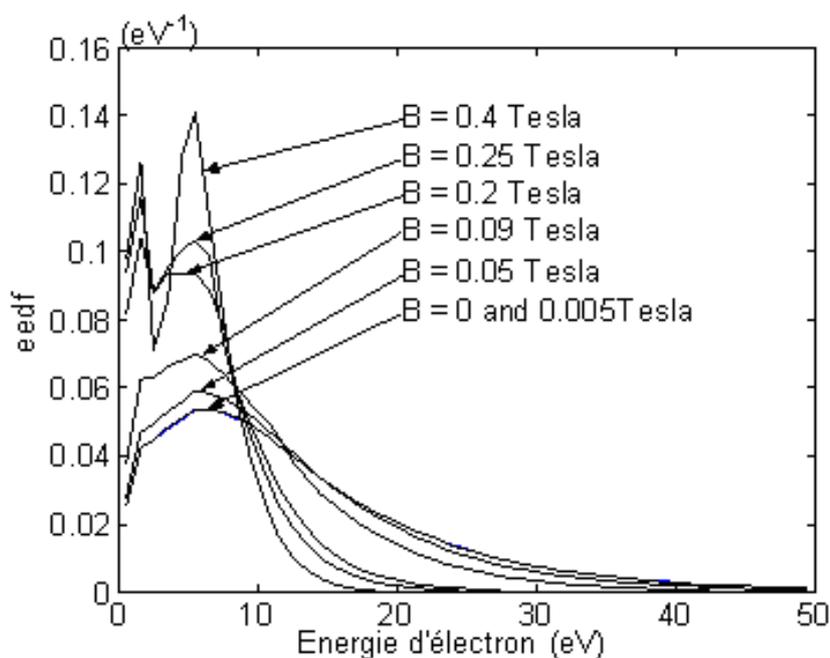
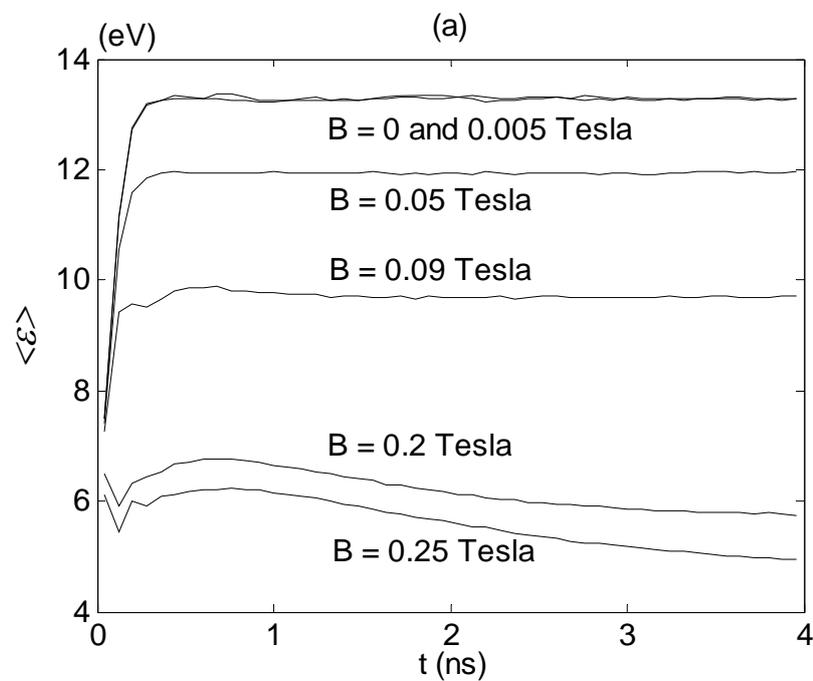
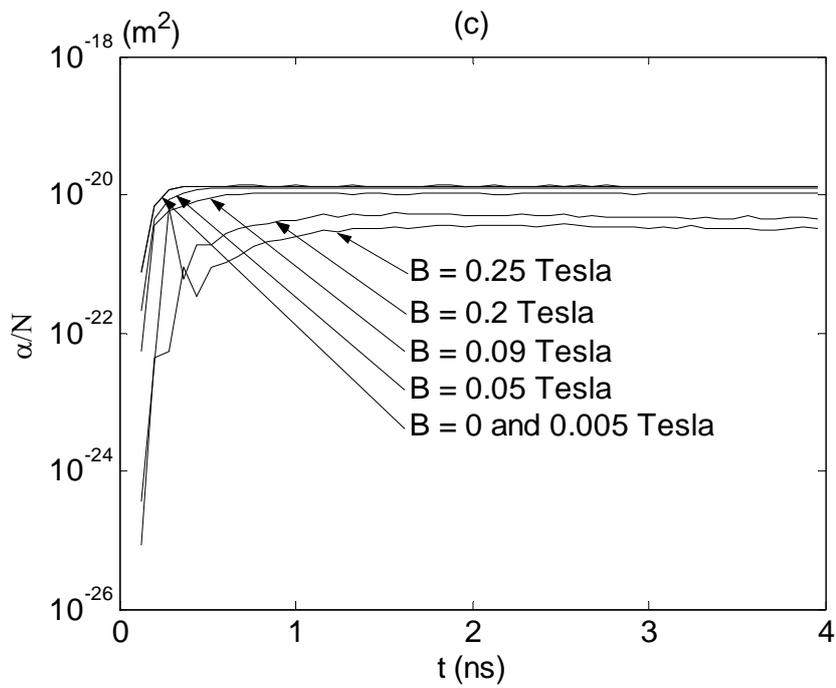
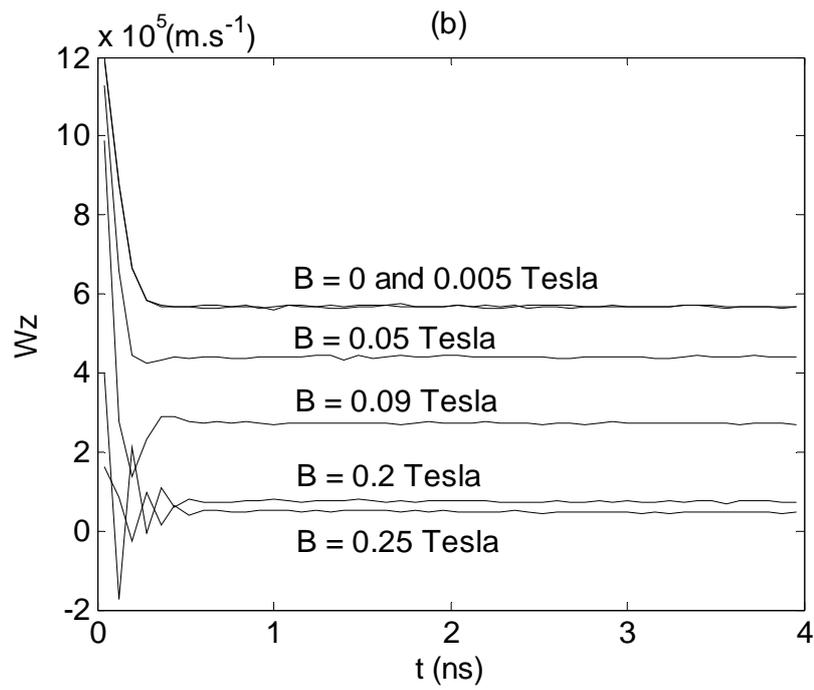


Figure VI-9: EEDF en fonction de l'énergie de l'électron à $B_T = 0, 0.005, 0.05, 0.09, 0.2, 0.25$ Tesla et $E/N = 800$ Td.

La figure VI-10 montre l'évolution temporel de : l'énergie moyenne, vitesse de dérive, coefficient d'ionisation, les coefficients de diffusion longitudinal et transversal dans le cas de l'azote pour différentes valeurs du champ magnétique transversal ($B_T = 0, 0.005, 0.05, 0.09, 0.2, 0.25$ Tesla) à $E/N = 800$ Td. Figure VI-10

montre que les paramètres de transport ne changent pas dans la présence du champ magnétique faible (0.005 T), si le champ magnétique est significatif (0.05, 0.09 T) les paramètres de transport diminuent mais ils restent en état d'équilibre sauf le coefficient de diffusion transversal il est croissant. En certaines valeurs de B_T le coefficient de diffusion transversal est grand que le cas de $B = 0$ et en d'autres valeurs il diminue. Troisièmement si le champ magnétique est relativement élevé (0.2, 0.25 T) l'énergie moyenne quitte aussi l'état d'équilibre (quand $E/B \leq 251000$ Volt/Tesla). En particulier la vitesse de dérive, le coefficient de diffusion longitudinal et le coefficient d'ionisation restent en état d'équilibre quelque soit la valeur du champ magnétique transversal.





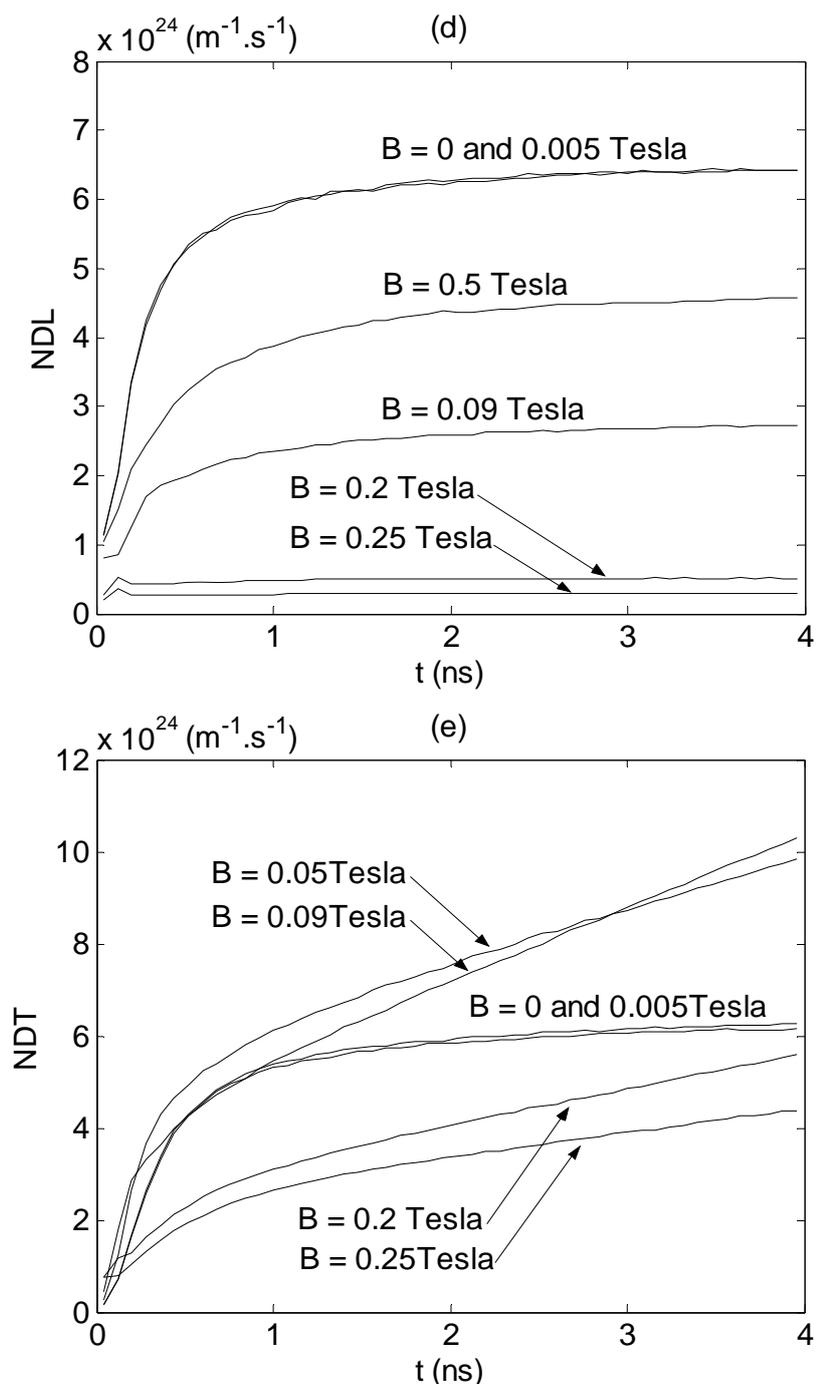


Figure VI-10: (a) Energie moyenne, (b) vitesse de d rive, (c) coefficient d'ionisation, (d) coefficient de diffusion longitudinal et (e) coefficient de diffusion transversal; en fonction du temps pour l'azote   $B_T = 0, 0.005, 0.05, 0.09, 0.2, 0.25$ Tesla et   $E/N = 800$ Td.

Maintenant le temps est prolong  jusqu'  100 ns pour r aliser l' tat d' quilibre de l' nergie d' lectron. Les figure VI-11 et VI-12 montrent l' nergie moyenne des  lectrons en fonction du temps et l'EEDF en fonction de l' nergie d' lectron

respectivement dans les mêmes conditions: $E/N = 800$ Td et $B_T = 0.2, 0.25, 0.4$ Tesla, où le temps est prolongé jusqu'à 100 ns. Figure VI-11 montre que l'énergie moyenne des électrons tend vers l'état d'équilibre si le temps est prolongé de 4 ns jusqu'à 100 ns, généralement l'énergie des électrons toujours atteint l'état d'équilibre sous l'action du champ magnétique si le temps est suffisant. Figure VI-12 montre que la fonction de distribution change largement en variant le champ magnétique transversal et elle est non Maxwellienne malgré la réalisation de l'état d'équilibre. La fonction de distribution dépend aussi des caractéristiques de la nature du gaz, la fonction de distribution est non Maxwellienne pour $E/N \leq 500$ Td dans le cas de l'azote [66], donc la fonction de distribution est Maxwellienne si $E/N \geq 500$ Td et le rapport $E/B \geq 251000$ Volt/Tesla.

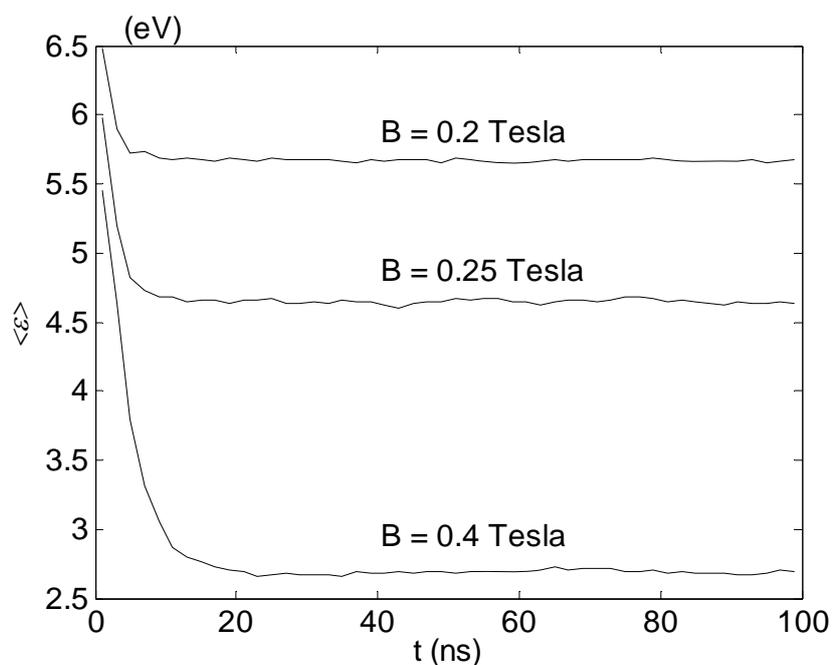


Figure VI-11: Energie moyenne d'électron en fonction du temps pour l'azote à $B_T = 0.2, 0.25, 0.4$ Tesla et $E/N = 800$ Td.

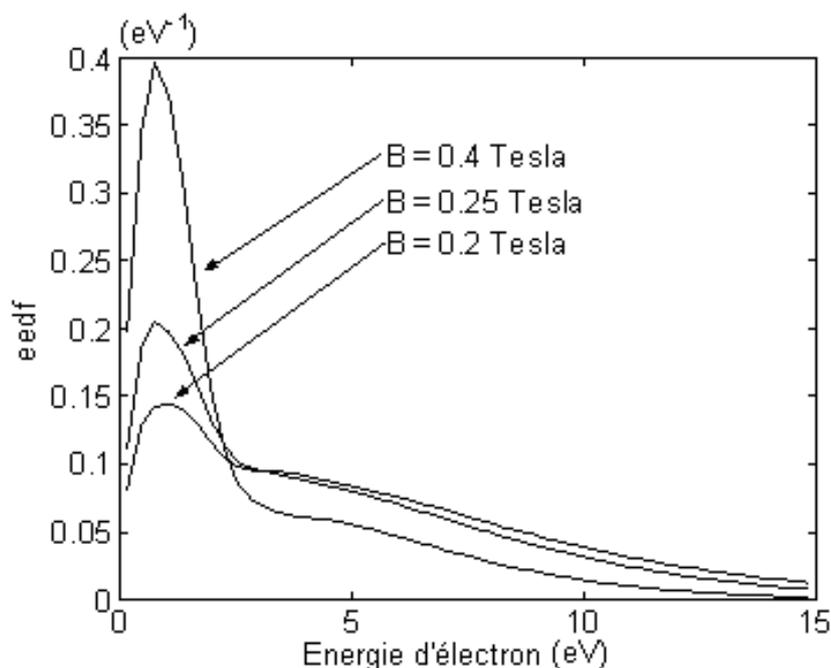


Figure VI-12: EEDF en fonction de l'énergie d'électron à $B_T = 0.2, 0.25, 0.4$ Tesla et $E/N = 800$ Td, $t = 100$ ns.

VI-3-4-2. L'effet du champ magnétique longitudinal :

Le champ magnétique longitudinal n'a aucun effet sur la plupart des paramètres de transport sauf le coefficient de diffusion transversal puisqu'il n'y a aucun effet du champ magnétique sur la direction longitudinal des électrons (voir les équations (4.23) et (4.24)). L'effet réel du champ magnétique longitudinal est transversalement ce qui mène à l'effet direct sur le coefficient de diffusion transversal.

Figure VI-13 montre la variation de l'EEDF dans le cas de l'azote pour différentes valeurs du champ magnétique longitudinal ($B_L = 0, 0.09, 0.25$ Tesla) à $E/N = 800$ Td. Figure VI-14 représente l'évolution temporelle de l'énergie moyenne, vitesse de dérive, coefficient d'ionisation et le coefficient de diffusion longitudinal dans le cas de l'azote pour différentes valeurs du champ magnétique longitudinal ($B_L = 0, 0.09, 0.25$ Tesla) à $E/N = 800$ Td. Le coefficient de diffusion transversal temporel est montré dans la figure VI-15 dans le cas de l'azote pour différentes valeurs du champ magnétique longitudinal ($B_L = 0, 0.005, 0.05, 0.09, 0.2, 0.25$ Tesla) à $E/N = 800$ Td.

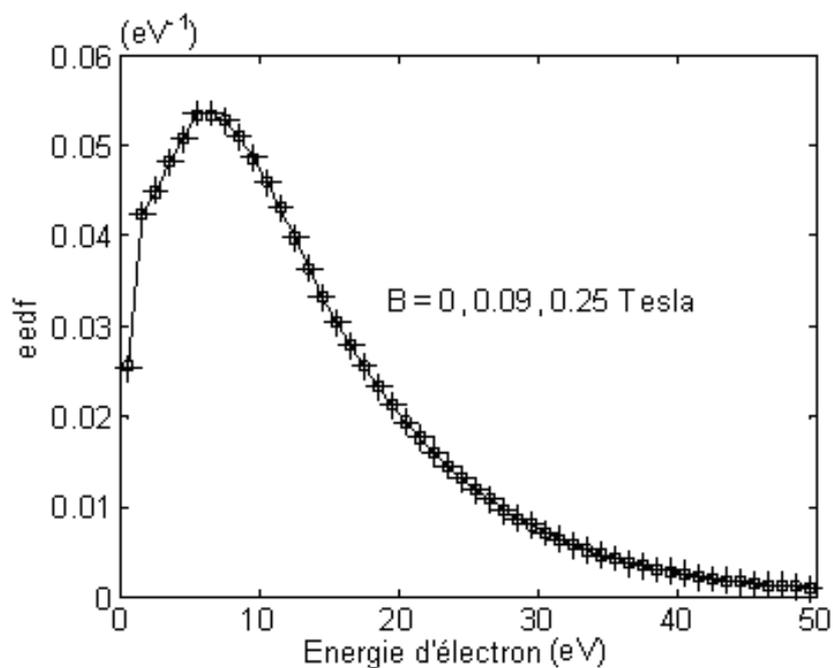


Figure VI-13: EEDF en fonction de l'énergie d'électron pour l'azote à $B_L = 0$ (ligne), 0.09 Tesla (signes plus), 0.25 Tesla (carrés); à $E/N = 800$ Td.

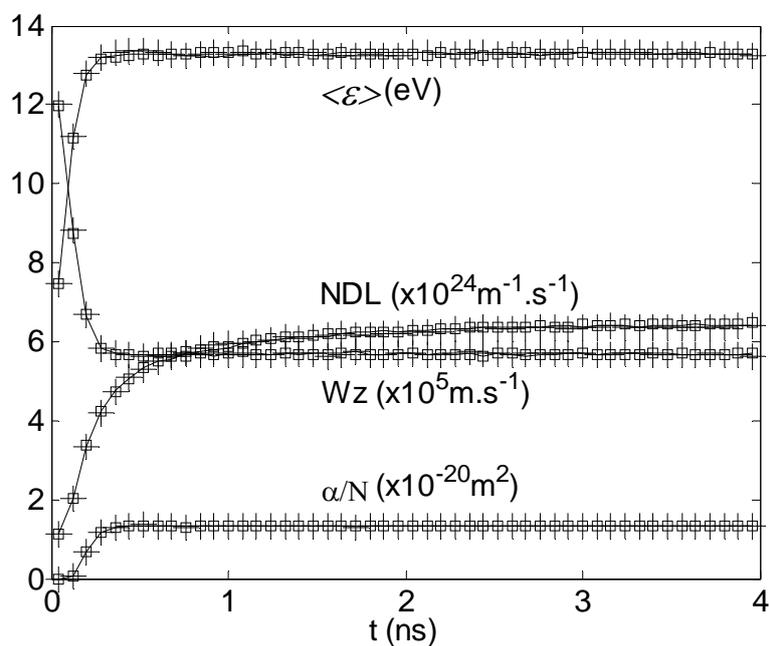


Figure VI-14: Energie moyenne, vitesse de dérive, coefficient d'ionisation et le coefficient de diffusion longitudinal pour l'azote à $B_L = 0$ (ligne), 0.09 Tesla (signes plus), 0.25 Tesla (carrés); à $E/N = 800$ Td.

Figure VI-13 et VI-14 montrent que la fonction de distribution et les paramètres de transport ne changent pas dans la présence du champ magnétique longitudinal, mais la figure VI-15 montre que le coefficient de diffusion transversal diminue si B_L augmente mais ce coefficient est toujours dans l'état d'équilibre. Encore les valeurs basses du champ magnétique longitudinal n'ont aucun effet sur le coefficient de diffusion transversal. Le coefficient de diffusion transversal diminue quand B_L augmente ce qui montre l'importance du champ magnétique longitudinal dans le confinement des électrons autour de l'axe z.

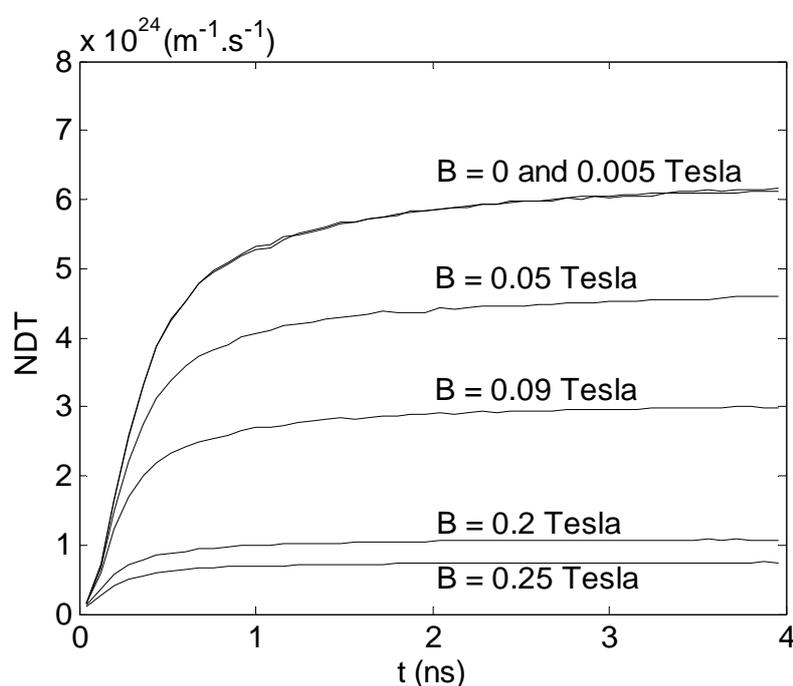


Figure VI-15: Coefficient de diffusion transversal pour l'azote à $B_L = 0, 0.005, 0.05, 0.09, 0.2, 0.25$ Tesla à $E/N = 800$ Td.

VI-4. Etude de l'équilibre des décharges de courant alternatif (décharge AC) :

Dans cette partie on va étudier l'effet de deux paramètres expérimentaux sur le comportement sinusoïdal des paramètres de transport des électrons dans le cas des décharges de courant alternatif (AC discharges), les paramètres expérimentaux sont la densité du gaz et l'amplitude du champ électrique. L'étude des paramètres de transport des électrons dans le cas des décharges AC donne une très bonne compréhension du comportement des électrons dans ces types de décharges. Les paramètres de transport sont généralement utilisés dans le calcul de la densité des

électrons en utilisant l'équation de continuité. Les paramètres de transport des électrons dans le cas du champ électrique AC déterminés par la méthode de Boltzmann sont présentés dans plusieurs travaux par exemple [74-75].

La figure VI-16 montre le champ électrique appliqué à la décharge dans 2 cycles.

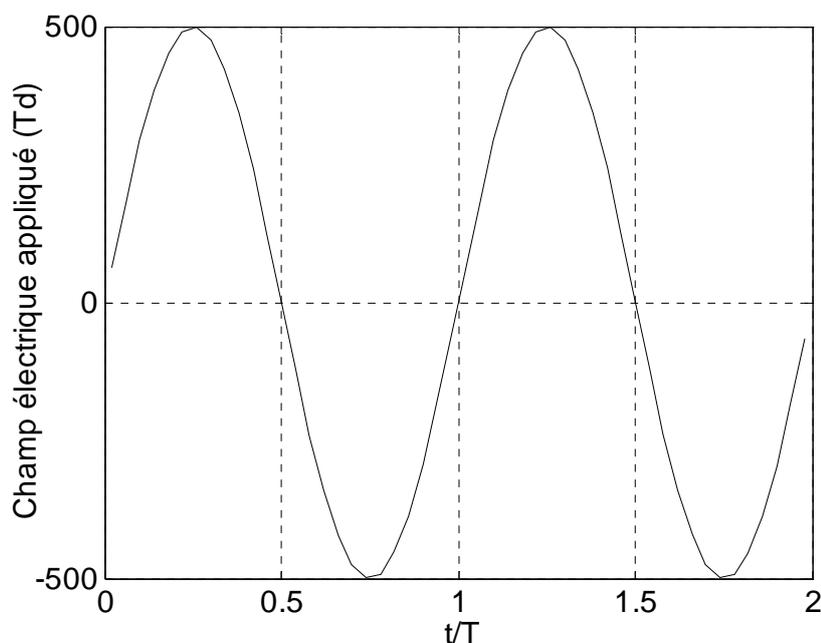


Figure VI-16: champ électrique sinusoïdal appliqué dans 2 cycles.

VI-4. 1. l'effet de la densité de gaz :

Dans cette cas l'amplitude du champ électrique est fixée à $E_0/N = 500$ Td, la fréquence du courant est aussi fixé à $f = 10$ MHz, concernant la densité du gaz la température du gaz est fixé à $T = 300^\circ\text{K}$ mais la pression du gaz est variée de 20mTorr jusqu'à 300 mTorr. Le gaz utilisé est l'azote.

Figure VI-17 montre la variation de l'énergie moyenne d'électron en 2 cycles dans le cas de l'azote pour l'amplitude du champ électrique $E_0/N = 500$ Td et la pression du gaz $P = 20, 60, 150$ et 300 mTorr. Si la densité du gaz augmente l'énergie moyenne d'électron tend vers le comportement sinusoïdal régulier et le déphasage entre le champ électrique et l'énergie moyenne décroît, c'est l'état d'équilibre. Aussi de l'état d'équilibre l'énergie moyenne ne change pas et a le même comportement même si la densité de gaz augmente plus.

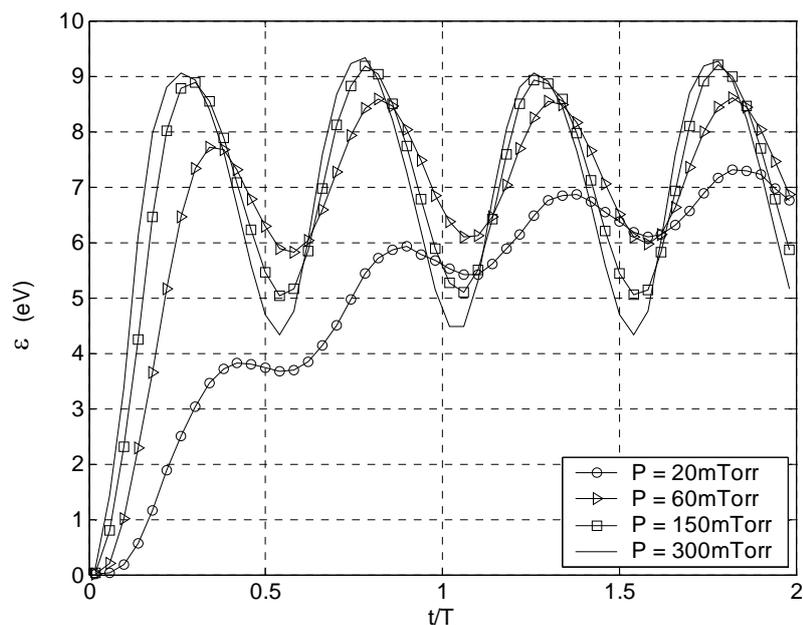


Figure VI-17: L'énergie moyenne d'électron dans 2 cycles à $E_0/N = 500$ Td et $P = 20$, 60, 150 et 300 mTorr.

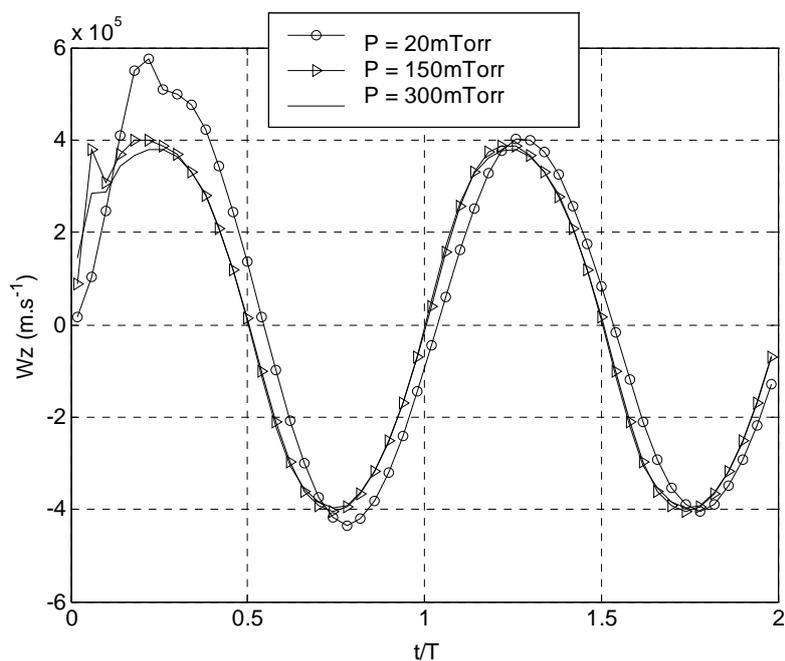


Figure VI-18: Vitesse de dérive dans 2 cycles à $E_0/N = 500$ Td et $P = 20$, 150 et 300 mTorr.

La figure VI-18 représente la variation de la vitesse de dérive en 2 cycles dans le cas de l'azote pour l'amplitude du champ électrique $E_0/N = 500$ Td et la pression du gaz P

= 20, 150 et 300 mTorr. Figure VI-18 montre que la vitesse de dérive a toujours le comportement sinusoïdal régulier si en ignore le comportement initial, mais si la densité de gaz augmente le comportement initial de la vitesse de dérive tend aussi vers le comportement sinusoïdal régulier et le petit déphasage entre le champ électrique et la vitesse de dérive sera nul.

Figure VI-19 montre la fréquence d'ionisation en 2 cycles dans le cas de l'azote pour l'amplitude du champ électrique $E_0/N = 500$ Td et la pression du gaz $P = 20, 60, 150$ et 300 mTorr. Figure VI-19 montre que si la densité de gaz augmente la fréquence d'ionisation tend vers le comportement sinusoïdal régulier positive et les amplitudes seront égaux et tends vers les valeurs finales, également le déphasage entre la fréquence d'ionisation et le champ électrique sera négligeable.

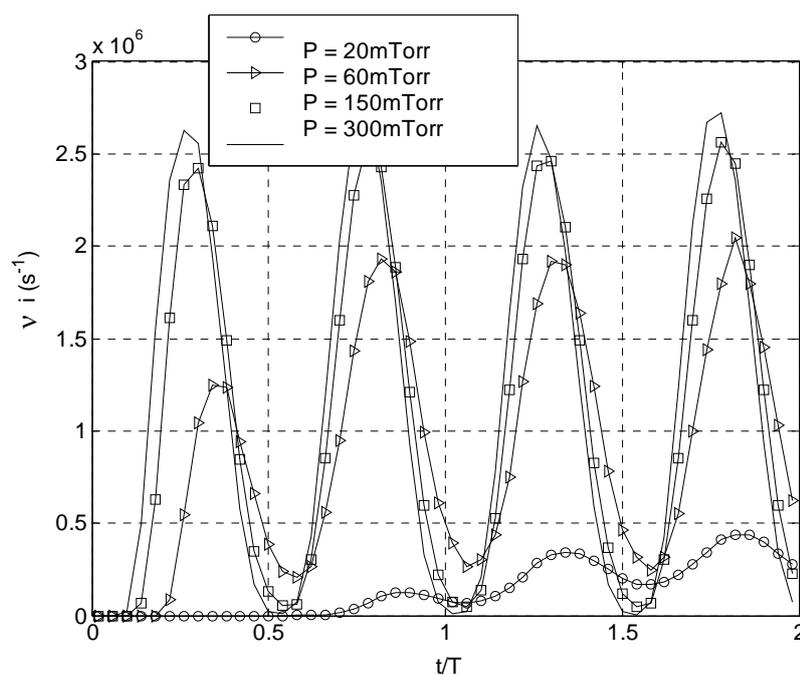


Figure VI-19: Fréquence d'ionisation dans 2 cycles à $E_0/N = 500$ Td et $P = 20, 60, 150$ et 300 mTorr.

Figure VI-20 montre l'évolution du coefficient d'ionisation en 2 cycles dans le cas de l'azote pour l'amplitude du champ électrique $E_0/N = 500$ Td et la pression du gaz $P = 60, 150$ et 300 mTorr. Pour des valeurs relativement basses de la densité de gaz le coefficient d'ionisation a un comportement sinusoïdal avec des grands pics, ces pics

sont dus au déphasage entre la fréquence d'ionisation et la vitesse de dérive. Si la densité de gaz augmente, à l'équilibre le coefficient d'ionisation atteint le comportement sinusoïdal régulier, les pics disparaissent et le déphasage entre le coefficient d'ionisation le champ électrique sera négligeable.

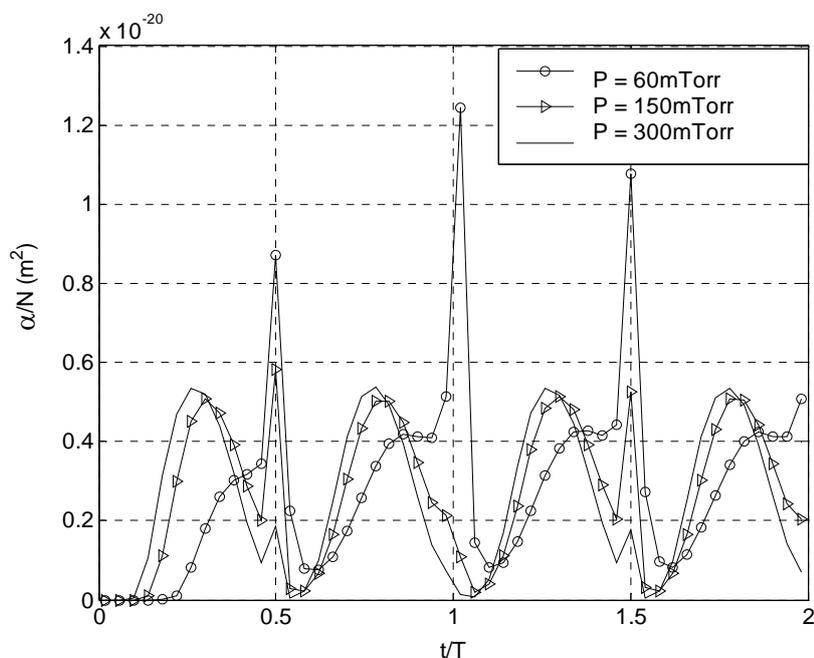


Figure VI-20: Coefficient d'ionisation dans 2 cycles à $E_0/N = 500 \text{ Td}$ et $P = 60, 150$ et 300 mTorr .

Figures VI-21 et VI-22 montrent le coefficient de diffusion longitudinal et le coefficient de diffusion transversal respectivement en 2 cycles dans le cas de l'azote pour l'amplitude du champ électrique $E_0/N = 500 \text{ Td}$ et la pression du gaz $P = 20, 60, 100$ et 300 mTorr . Les figures VI-21 et VI-22 montrent que les coefficients de diffusion augmentent si la densité de gaz augmente, mais à certaine valeur de la densité de gaz la forme finale des coefficients de diffusion est obtenue. En outre de l'état d'équilibre les coefficients de diffusion n'ont pas le comportement sinusoïdal mais tends approximativement vers des valeurs constantes.

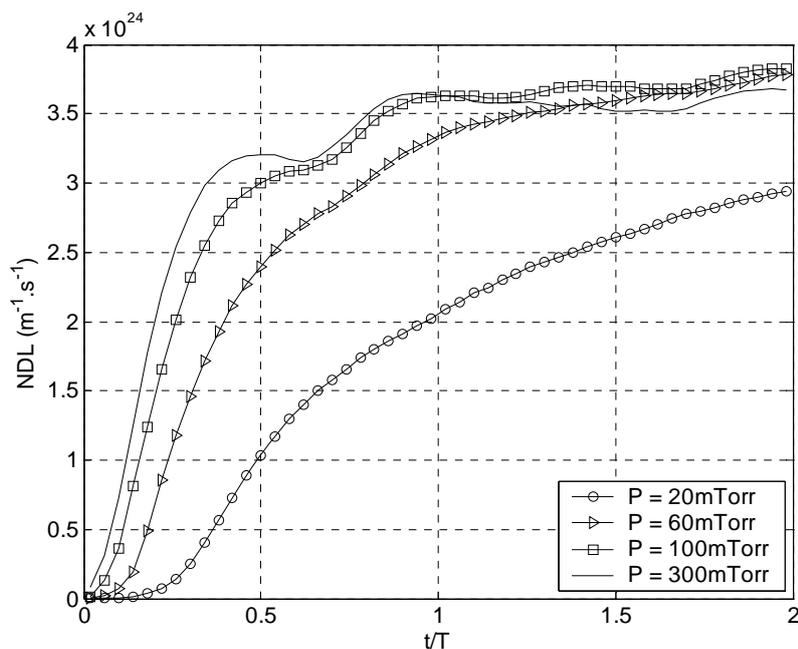


Figure VI-21: Coefficient de diffusion longitudinal dans 2 cycles à $E_0/N = 500 \text{ Td}$ et $P = 20, 60, 100$ et 300 mTorr .

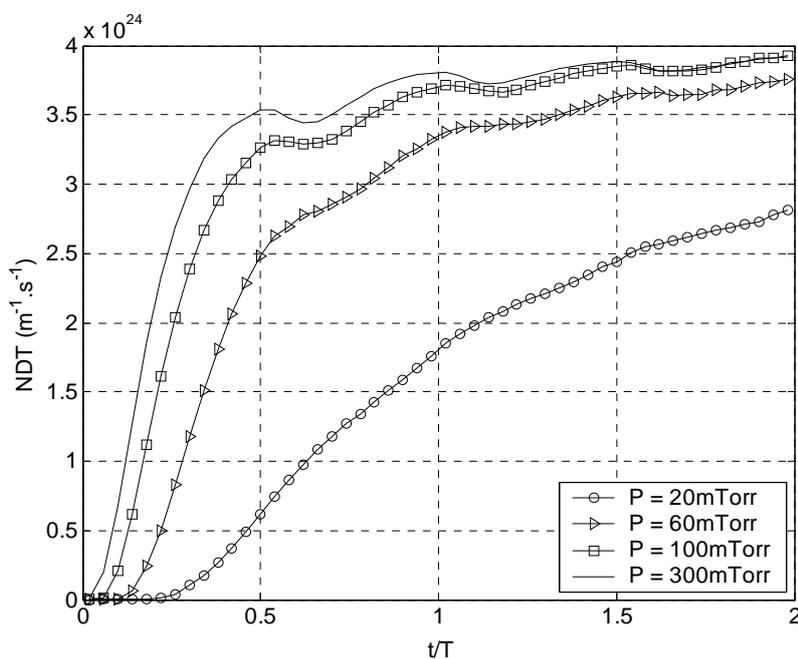


Figure VI-22: Coefficient de diffusion transversal dans 2 cycles à $E_0/N = 500 \text{ Td}$ et $P = 20, 60, 100$ et 300 mTorr .

VI-4. 2. L'effet de l'amplitude du champ électrique :

Précédemment on a bien vu le grand effet de la densité du gaz, maintenant on va prendre le cas de la densité de gaz $P = 20$ mTorr où les électrons ne sont pas en état d'équilibre et on va augmenter l'amplitude du champ électrique jusqu'à 1000Td, la fréquence du courant est toujours fixé à $f = 10$ MHz.

La figure VI-23 montre l'énergie moyenne d'électron en 2 cycles dans le cas de l'azote pour la pression du gaz $P = 20$ mTorr et l'amplitude du champ électrique $E_0/N = 500$ et 1000 Td. Figure VI-23 montre que le champ électrique à un rôle pour maintenir l'état d'équilibre des électrons, si la densité de gaz n'ai pas suffisante si la force du champ électrique est augmentée les paramètres de transport des électrons tend vers l'état d'équilibre.

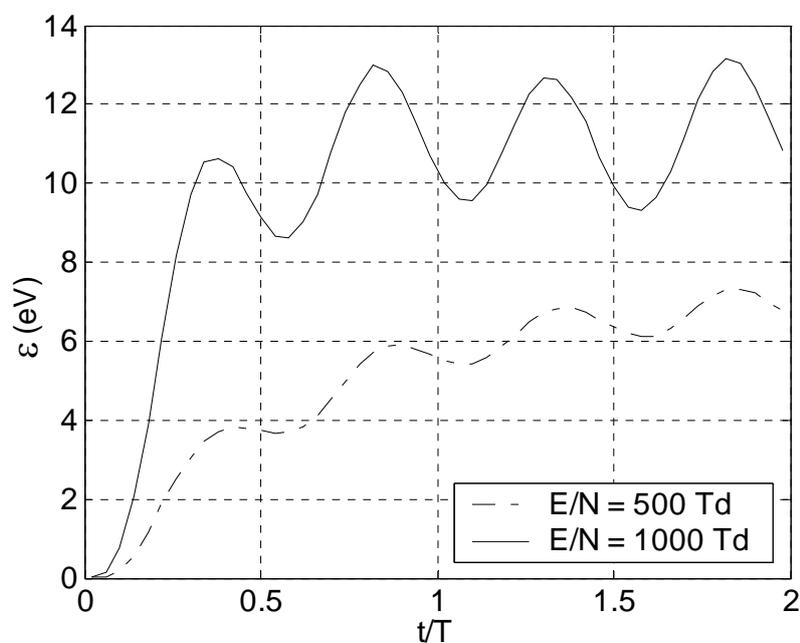


Figure VI-23: L'énergie moyenne d'électron dans 2 cycles à $P = 20$ mTorr, $E_0/N = 500$ et 1000 Td.

Conclusion et perspectives

Ce travail dégage l'importance de l'état d'équilibre des paramètres de transport des électrons, la méthode du modèle liquide (fluid model) ne peut être utilisée seulement si les paramètres de transport sont en état d'équilibre. Aussi l'équation de Boltzmann est résolue seulement en supposant que l'état d'équilibre est réalisé. En outre l'état d'équilibre est l'objectif de la plupart des décharges électriques.

L'effet de plusieurs paramètres qui influencent sur l'état d'équilibre des électrons a été mis en évidence. Dans le cas des décharges DC, les différents paramètres pouvant déplacer ou modifier l'état d'équilibre sont : la densité de gaz, l'énergie initiale des électrons primaires, le champ électrique et le champ magnétique longitudinal et transversal. Dans le cas des décharges AC on vient d'étudier l'effet de la densité de gaz et celui de l'amplitude du champ électrique.

Tout d'abord la validité du code utilisé de Monte Carlo est testée grâce à la comparaison de nos résultats avec ceux de la littérature valables. L'énergie moyenne et la vitesse de dérive ont été calculées dans le cas du champ électrique seul. La comparaison de ces valeurs avec les résultats obtenus par Phelps et Pitchford, a conduit à un très bon accord particulièrement la vitesse de dérive.

Dans le cas de la décharge DC, pour un temps fixe (100ns) et un champ électrique fixe ($E/N = 150 \text{ Td}$), l'énergie moyenne des électrons n'est pas en état d'équilibre et par conséquent les paramètres de transport pour des pressions de gaz basses (0.1, 0.2 Torr), mais en augmentant la pression du gaz et à partir de certaine valeur (2 Torr) l'état d'équilibre est soutenu et la forme finale du comportement de l'énergie est obtenue.

Pour un champ électrique faible $E/N < 50 \text{ Td}$, l'état d'équilibre n'a pas été réalisé si la différence entre l'énergie moyenne et l'énergie initiale est grande, l'état d'équilibre est retardé et nécessite plus de temps pour être réalisé. La fonction de distribution aussi change largement si la différence entre l'énergie moyenne et l'énergie initiale est grande, elle nécessite plus de temps pour prendre la forme finale.

En outre l'état d'équilibre n'est pas influencé par l'énergie initiale des électrons pour le champ électrique relativement élevé (dans le de l'azote si $E/N \geq 100$ Td) si on néglige le comportement initiale, mais si l'énergie initial augmente l'état d'équilibre est légèrement retardé. Encore la fonction de distribution n'est pas influencée par l'énergie initiale pour un champ électrique élevé. Lorsque la densité de gaz est constante et un temps de décharge constant si l'état d'équilibre n'est pas réalisé on peut obtenir l'état d'équilibre par l'augmentation du champ électrique.

Dans la présence d'un champ magnétique transversal, la fonction de distribution et les paramètres de transport ne sont pas changés par la présence d'un champ magnétique faible. Par contre si le champ magnétique est important la fonction de distribution et les paramètres de transport changent largement, les paramètres de transport diminuent mais ils restent en état d'équilibre sauf le coefficient de diffusion transversal il est croissant, pour certaines valeurs du champ magnétique est supérieur que le cas de $B = 0$ et pour d'autres valeurs il est inférieur.

Troisièmement si le champ magnétique est relativement élevé l'énergie moyenne quitte l'état d'équilibre (quand $E/B \leq 251000$ Volt/Tesla), elle nécessite un temps très long pour revient à l'état d'équilibre. En particulier la vitesse de dérive, le coefficient de diffusion longitudinal et le coefficient d'ionisation restent en état d'équilibre quelque soit la valeur du champ magnétique transversal.

Si le champ magnétique augmente et la fonction de distribution quitte la forme Maxwellienne, même si on prolonge le temps l'énergie moyenne revient à l'état d'équilibre mais la fonction de distribution ne revient pas à la forme Maxwellienne.

Dans la présence d'un champ magnétique longitudinal, la fonction de distribution et les paramètres de transport n'ont aucun changement sauf le coefficient de diffusion transversal. Le coefficient de diffusion transversal diminue si champ magnétique longitudinal augmente mais il reste toujours en état d'équilibre. Encore les valeurs basses du champ magnétique longitudinal n'ont aucun effet sur le coefficient de diffusion transversal. La diminution du coefficient de diffusion longitudinal par l'augmentation du champ magnétique longitudinal montre l'intérêt du champ magnétique longitudinal dans le confinement du plasma.

L'étude des paramètres de transport donnent une très bonne compréhension du comportement des espèces contenues dans le plasma tel que les électrons et les ions, les paramètres de transport de Townsend supposé en état d'équilibre sont utilisés dans la méthode de model fluide, cette méthode est utilisée largement dans la simulation de différents types de décharges tel que : le décharge luminescente, le décharge streamer, le décharge coron, les décharges radiofréquences et les décharges magnétisés tel le décharge radiofréquence inductivement couplé.

Dans le cas des décharges AC, on a vu que l'énergie moyenne des électrons, la vitesse de dérive, la fréquence d'ionisation et le coefficient d'ionisation ont un comportement sinusoïdal, les coefficients de diffusion ont approximativement des valeurs constants.

Si la densité de gaz augmente ou l'amplitude du champ électrique augmente l'énergie moyenne des électrons, la fréquence d'ionisation et le coefficient d'ionisation tendent vers le comportement sinusoïdal régulier et le déphasage entre le champ électrique et ces paramètres de transport décroît.

Généralement la vitesse de dérive a un comportement sinusoïdal mais l'augmentation de la densité de gaz décroît le déphasage entre la vitesse de dérive et le champ électrique et le comportement initial de la vitesse de dérive devient plus sinusoïdal.

Les coefficients de diffusion tendent vers des valeurs approximativement constantes si la densité de gaz augmente.

Ce travail peut être élargi par l'étude de l'équilibre des ions dans les décharges DC et les décharges AC, puisque les ions sont pris toujours en compte dans les décharges luminescentes et les décharges radiofréquences dans les travaux actuels.

Références

-
- [1] Braithwaite N St J, "Introduction to gas discharges", Plasma Sources Sci. Technol. **9**, 517 (2000).
- [2] Engelhardt A G, Phelps A V, "Elastic and Inelastic Collision Cross Sections in Hydrogen and Deuterium from Transport Coefficients", Phys. Rev. **131**, 2115 (1963).
- [3] Nighan W L, "Electron energy distributions and collision rates in electrically excited N₂, CO, CO₂", Phys. Rev. A **2**, 1989 (1970).
- [4] Sakai Y, Tagashira H et Sakamoto S, "The development of electron avalanches in argon at high E/N values : I. Monte Carlo simulation", J. Appl. Phys. **10**, 1035-1049 (1977).
- [5] Yachi S, Kitamura Y, Kitamori K et Tagashira H, "A multi-term Boltzmann equation analysis of electron swarms in gases", J. Phys. D: Appl. Phys. **21** 914-921 (1988).
- [6] Yoshida S, Phelps A V, Pitchford L C, "Effect of electron produced by ionization on calculated electron-energy distributions", Physical review A **27** 6. 2859 (1983).
- [7] Cecchi Joseph C, "in Handbook of Plasma Processing Technology" (eds Rosnagel Stephen, Cuomo Jerome, J. and Westwood William, W.), Noyes Publications, Park Ridge, NJ, 1990.
- [8] Conrads H, and Schmidt M, "Plasma generation and plasma sources", Plasma Sources Sci. Technol., 2000, 9, 441.
- [9] Lieberman Michael A, and Lichtenberg Allan J, "Principles of Plasma Discharges and Materials Processing", John Wiley, New York, 1994.
- [10] Chen Francis F, "The Sources of Plasma Physics", IEEE Trans. Plasma Sci., 1995, 23, 20.
- [11] Chen Francis F, "Experiments on new RF plasma sources for etching and deposition", J. Vac. Sci. Technol., 1992, A10, 1389.
- [12] Chen Francis F, "Plasma ionization by helicon waves", Plasma Phys. Controlled Fusion, 1991, 33, 339.
- [13] Broks B H P, Brok W J M, Remy J, van der Mullen J J A M, Benidar A, Biennier L, et Salama F, "Numerical investigation of the discharge characteristics of the pulsed discharge nozzle", Phys. Rev. E, 71:036409, 2005.
- [14] Druyvesteyn M J and Penning F M, "The mechanism of electrical discharges in gases of low pressure", Rev. Mod. Phys., 12(2):87-176, 1940.

- [15] Kortshagen U, Busch C, and Tsendid L D, "Review article: On simplifying approaches to the solution of the Boltzmann equation in spatially inhomogeneous plasmas", *Plasma Sources Sci. Technol.*, 5(1):1-17, 1996.
- [16] Ferreira C M, et Loureiro J, "Electron kinetics in atomic and molecular plasmas", *Plasma Sources Sci. Technol.*, 9(4):528-540, 2000.
- [17] Hockney R W, et Eastwood J W, "Computer Simulation using Particles", Adam Hilger, 1988.
- [18] Birdsall C K, et Langdon A B, "Plasma Physics via Computer Simulation". Adam Hilger, 1991.
- [19] Longo S, "Monte Carlo models of electron and ion transport in non-equilibrium plasmas", *Plasma Sources Sci. Technol.*, 9(4):468-476, 2000.
- [20] A A Kulikovskiy (Two-dimensional simulation of the positive streamer in N₂ between I parallel-plate electrodes) *J. Phys. D: Appl. Phys.* 28 (1995) 2483-2493.
- [21] Annemie Bogaerts (Comprehensive modelling network for dc glow discharges in argon) *Plasma Sources Sci. Technol.* 8 (1999) 210–229.
- [22] Bleecker, K, De. Herrebout, D. Bogaerts, A. Gijbels, R. and Descamps, P., (2003) One-dimensional modelling of a capacitively coupled rf plasma in silane/helium, including small concentrations of O₂ and N₂, *J. Phys. D: Appl. Phys.* 36 pp. 1826–1833.
- [23] Goedheer, W, J. Land, V. and Venema, J., (2009) Hydrodynamic and kinetic modelling of complex radio-frequency plasmas, *J. Phys. D: Appl. Phys.* 42 194015.
- [24] Xiaohui, Yuan. and Laxminarayan, L, Raja., (2003) Computational Study of Capacitively Coupled High-Pressure Glow Discharges in Helium, *IEEE TRANSACTIONS ON PLASMA SCIENCE.* 31 (4). pp. 495–503.
- [25] Dongsoo, Lee. Jin, Myung, Park. Sang, Hee, Hong. and Yongho, Kim., (2005) Numerical Simulation on Mode Transition of Atmospheric Dielectric Barrier Discharge in Helium–Oxygen Mixture, *IEEE TRANSACTIONS ON PLASMA SCIENCE,* 33 (2) pp. 949–957.
- [26] Tom Martens & Annemie Bogaerts & Wouter Brok & Jan van Dijk (Computer simulations of a dielectric barrier discharge used for analytical spectrometry) *Anal Bioanal Chem* (2007) 388:1583–1594.
- [27] Majeed T et Strickland D J, "New Survey of Electron Impact Cross Sections for Photoelectron and Auroral Electron Energy Loss Calculations", *J. Phys. Chem. Ref. Data* 26, 335 1997.

- [28] Zecca A, Karwasz G P, et Brusa R S, "One century of experiments on electron-atom and molecule scattering. A critical review of integral cross sections. I. Atoms and diatomic molecules", *Rivista Nuovo Cimento* 19 No.3 (1996) 1-146.
- [29] Brunger M J et Buckman S J, "Electron-molecule scattering cross-sections. I. Experimental techniques and data for diatomic molecules", *Phys. Rep.* 357, 215 2002.
- [30] Hayashi M, "Bibliography of Electron and Photon Cross Sections with Atoms and Molecules" Published in the 20th Century-Nitrogen Molecule-NIFS-DATA-77 National Institute for Fusion Science, 2003.
- [31] Karwasz G P, Brusa R S, et Zecca A, "in Photon and Electron Interactions with Atoms, Molecules and Ions", *Landolt-Boörnstein Vol.I/17, Subvolume C*, edited by Y. Itikawa (Springer, New York, 2003).
- [32] Elford M T, Buckman S J, and Brunger M, "in Photon and Electron Interactions with Atoms, Molecules and Ions", *Landolt-Boörnstein Vol.I/17, Subvolume C*, edited by Y. Itikawa (Springer, New York, 2003).
- [33] Haddad G N, "Cross sections for electron scattering in nitrogen", *Aust. J. Phys.* 37, 487 (1984).
- [34] Sun W, Morrison M A, Isaacs W A, Trail W K, Alle D T, Gulley R J, Brennan M J, et Buckman S J, "Detailed theoretical and experimental analysis of low-energy e-N₂ scattering", *Phys. Rev. A* 52, 1229 (1995).
- [35] Srivastava S K, Chutjian A, and Trajmar S, "Absolute elastic differential electron scattering cross sections in the intermediate energy region. II. e-N₂", *J. Chem. Phys.* 64, 1340 (1976).
- [36] Brunger M J, Buckman S J, and Elford M T, "in Photon and Electron Interactions with Atoms, Molecules and Ions", *Landolt-Boörnstein Vol.I/17, Subvolume C*, edited by Y. Itikawa (Springer, New York, 2003).
- [37] Morrison M A, Sun M, Isaacs W A, and Trail W K, "Ultra-simple calculation of very-low-energy momentum transfer and rotational excitation cross section", *Phys. Rev. A* 55, 2786 (1997).
- [38] Robertson A G, Elford M T, Crompton R W, Morrison M A, Sun W, and Trail W K, "Rotational and vibrational excitation of nitrogen by electron impact", *Aust. J. Phys.* 441-472 (1997).
- [39] Kutz H and Meyer H D, "Rotational excitation of N₂ and Cl₂ molecules by electron impact in the energy range 0.01-1000 eV: Investigation of excitation mechanisms", *Phys. Rev. A* 51, 3819-3830 (1995).

- [40] Sohn W, Kochem K H, Scheuerlein K M, Jung K, and Ehrhardt H, "Near-threshold vibrational excitation and elastic electron scattering from N₂", *J. Phys. B: At. Mol. Phys.* 19 4017-4024 (1986).
- [41] Brennan M J, Alle D T, Euripides P, Buckman S J, and Brunger M J, "Elastic electron scattering and rovibrational excitation of N₂ at low incident energies", *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* 25 2669 (1992).
- [42] Tanaka H, Yamamoto T, and Okada T, "Electron impact cross sections for v=0→1 vibrational excitation of N₂ at electron energies from 3 to 30 eV", *J. Phys. B: At. Mol. Phys.* 14, 2081 (1981).
- [43] Cartwright D C, Chutjian A, Trajmar S, and Williams W, "Electron impact excitation of the electronic states of N₂. I. Differential cross sections at incident energies from 10 to 50 eV", *Phys. Rev. A* 16, 1013–1040 (1977).
- [44] Cartwright D C, Trajmar S, Chutjian A, and Williams W, "Electron impact excitation of the electronic states of N₂. II. Integral cross sections at incident energies from 10 to 50 eV", *Phys. Rev. A* 16, 1041–1051 (1977).
- [45] Ohmori Y, Shimosuma M, and Tagashira H, " Boltzmann equation analysis of electron swarm behavior in nitrogen", *J. Phys. D: Appl. Phys.* 21 724 (1988).
- [46] Trajmar S, Register D F, and Chutjian A, "Electron scattering by molecules II. Experimental methods and data", *Phys. Rep.* 97, 219–356 (1983).
- [47] Campbell L, Brunger M J, Nolan A M, Kelly L J, Wedding A B, Harrison J, Teubner P J O, Cartwright D C, and McLaughlin B, " Integral cross sections for electron impact excitation of electronic states of N₂", *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* 34, 1185 (2001).
- [48] Gillan C J, Tennyson J, McLaughlin B M, and Burke P G, " Low-energy electron impact excitation of the nitrogen molecule: optically forbidden transitions", *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* 29, 1531 (1996).
- [49] Chutjian A, Cartwright D C, and Trajmar S, " Electron impact excitation of the electronic states of N₂. III. Transitions in the 12.5-14.2-eV energy-loss region at incident energies of 40 and 60 eV ", *Phys. Rev. A* 16, 1052–1060 (1977).
- [50] James G K, Ajello J M, Franklin B, and Shemansky D E, " Medium resolution studies of extreme ultraviolet emission from N₂ by electron impact: the effect of predissociation on the emission cross section of the b ¹Π_u state", *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* 23 2055 (1990).
- [51] Ratliff J M, James G K, Trajmar S, Ajello J M, and Shemansky D E, " Electron impact excitation and dissociation of N₂ via the b ¹[Pie]_u state ", *J. Geophys. Res.* 96, 17559 (1991).

- [52] Ajello J M, James G K, Franklin B O, and Shemansky D E, "Medium resolution studies of EUV emission from N₂ by electron impact: vibrational perturbations and cross sections of the c₄¹[Sigma]_u⁺ and b¹[Sigma]_u⁺ states ", Phys. Rev. A 40, 3524 (1989).
- [53] Lindsay B G and Mangan M A, "in Photon and Electron Interactions with Atoms, Molecules and Ions", Landolt-Börnstein Vol.I/17, Subvolume C, edited by Y. Itikawa (Springer, New York, 2003).
- [54] Straub H C, Renault P, Lindsay B G, Smith K A, and Stebbings R F, " Absolute partial cross sections for electron-impact ionization of H₂, N₂, and O₂ from threshold to 1000 eV ", Phys. Rev. A 54, 2146 (1996).
- [55] Rapp D and Englander-Golden P, "Total Cross Sections for Ionization and Attachment in Gases by Electron Impact. I. Positive Ionization", J. Chem. Phys. 43, 1464 (1965).
- [56] Hudson J E, Hamilton M L, Vallance C, and Harland P W, "Absolute electron impact ionization cross-sections for the C₁ to C₄ alcohols", Phys. Chem. Chem. Phys. 5, 3162 (2003).
- [57] H. Sugawara, T. Yahata, A. Oda and Y. Sakai, The drift velocity vector of electron swarms in crossed electric and magnetic fields, *J. Phys. D: Appl. Phys.* **33** 1191 (2000).
- [58] Sakai Y, Tagashira H et Sakamoto S, "The development of electron avalanches in argon at high E/N values : I. Monte Carlo simulation", J. Appl. Phys. 10, 1035-1049 (1977).
- [59] Bœuf J P, "Modélisation de la cinétique électronique dans un gaz faiblement ionisé", Thèse d'état de l'Université Paris Sud, 1985.
- [60] Birdsall C K, "Particle-in-cell charged-particles simulations, plus Monte Carlo collisions with neutral atoms, PIC-MCC", IEEE Trans. on Plasma Sci. 19 (2), 65-85 (1991).
- [61] Forsythe G E and Leibler R A 1950 Math. Tables Aids Comp. 4 127.
- [62] Von Neumann J 1951 US Natl Bur. Stand., Appl. Meth. Series 12 36.

- [63] Spanier J and Gelbard E M 1969, "Monte Carlo Principles and Neutron Transport Problems", (Reading, MA: Addison Wesley).
- [64] Skullerud H R, "The stochastic computer simulation of ion motion in a gas subjected to a constant electric field", 1968 J. Phys. D: Appl. Phys. 1 1567.
- [65] Ivan REVEL, "simulation Monte Carlo des particules lourds dans les décharges luminescents", Thèse de doctorat de l'université Toulouse III n° 3523, Université Paul Sabatier, Toulouse (1999).
- [66] Marnix A Tas, E M van Veldhuizen and W R Rutgers, Plasma excitation processes in flue gas simulated with Monte Carlo electron dynamics, J. Phys. D: Appl. Phys. 30 (1997) 1636–1645.
- [67] ARDJANI B and LIANI B, "The validity of using the transport parameters of the Townsend discharge in the simulation of the rf and DBD discharges by the fluid model", FIZIKA A (Zagreb) 18 (2009) 3, 107–120.
- [68] Ness K F and Nolan A M, "Flux and Reactive Contributions to Electron Transport in Methane", Aust. J. Phys., 2000, 53, 437–46.
- [69] Théodore VASSILIADIS Thèse de doctorat du 3^e cycle n° 3139, Université Paul Sabatier, Toulouse (1985).
- [70] Yousfi M, Azzi N, Gallimberti I et al, "Electron–molecule collision cross sections and electron swarm parameters in some atmospheric gases". Collection data n°1, Internal report. Toulouse Padova, 1988.
- [71] Phelps A V, Pitchford L C, "Anisotropic scattering of electrons by N₂ and its effect on electron transport", Phys. Rev. A **31** 2932 (1985).
- [72] Phelps A V, JILA Information Center, Report No. 28, 1985.

[73] Al-Amin S A J, Kucukarpaci H N and Lucas J J, "Electron swarm parameters in oxygen and met", 1985 J. Phys. D: Appl. Phys. 18 1781–94.

[74] White R D, Ness K F, and Robson R E, (2002) "Development of swarm transport theory in radio-frequency electric and crossed electric and magnetic fields", Applied Surface Science 192 pp. 26–49.

[75] Ping Jiang, and Demetre J Economou, (1993) "Temporal evolution of the electron energy distribution function in oxygen and chlorine gases under dc and ac fields", J. Appl. Phys. 73 (12) pp. 8151- 8160.

Résumé :

L'objet de ce travail c'est l'étude de l'équilibre thermique des électrons dans le plasma de décharge et les paramètres qui influencent cet état. L'état d'équilibre des électrons est étudié dans le cas des décharges DC et AC. Plusieurs paramètres qui influencent sur l'état d'équilibre des électrons ont été étudié. Dans le cas des décharges DC les paramètres étudiés sont : La densité du gaz, l'énergie initiale des électrons primaires, le champ électrique et les champs magnétiques transversal et longitudinal. Dans le cas des décharges AC les paramètres étudiés sont : La densité du gaz et l'amplitude du champ électrique. Comme outil de simulation la méthode de Monte Carlo est utilisée. Le gaz utilisé est l'azote. Les résultats obtenus montrent que :

Dans le cas des décharges DC : L'état d'équilibre peut être réalisé par l'augmentation de la densité du gaz ou la distance inter-électrodes ou par l'augmentation du champ électrique. L'énergie initiale des électrons primaires a un grand effet sur l'état d'équilibre si le champ électrique est faible et l'écart entre l'énergie initiale et l'énergie moyenne est important. Le champ magnétique transversal significatif a un grand effet sur l'équilibre et les valeurs des paramètres de transport et sur la fonction de distribution.

Dans le cas des décharges AC : Si la densité de gaz augmente ou l'amplitude du champ électrique augmente la plus part des paramètres de transport tendent vers le comportement sinusoïdal régulier, les coefficients de diffusion tendent vers des valeurs approximativement constant si la densité de gaz augment.

Mots clés : Paramètres de transport, Etat d'équilibre, Equation de Boltzmann, Fluide model, décharges DC et AC, champ magnétique.

Abstract:

The object of this work is to study the electron thermal equilibrium in the case of plasma of discharge and the parameters that influence on this state. Steady state is studied in the case of DC and AC discharges. Several parameters that influence on the steady state are studied. In the case DC discharges the parameters studied are: gas density, initial energy of the primary electrons, electric field and the transverse and longitudinal magnetic fields. In the case AC discharges the parameters studied are: gas density and the electric field amplitude. As tool of simulation the Monte Carlo method is used. The gas used is the nitrogen. The results obtained show that:

In the case of DC discharges: steady state can be achieved by increasing the gas density or the inter-electrode distance or the electric field. The initial energy of primary electrons has a great effect on steady state if the electric field is weak and the difference between the initial energy and the average energy is important. Significant transverse magnetic field has great effect on the values and the steady state of the transport parameters and on the distribution function.

In the case of AC discharges: if the gas density or the electric field amplitude increases the most of the transport parameters tend toward a regular sinusoidal behavior, the diffusion coefficients tend toward approximately constant values if the gas density increases.

Key words: Transport parameters, Steady state, Boltzmann equation, Fluid model, DC and AC discharges, magnetic field.

ملخص:

الهدف من هذا العمل هو دراسة التوازن الحراري للإلكترونات في بلازما التفريغ الكهربائي و العوامل التي تؤثر في هذا التوازن. الدراسة في حالة تفريغ مستمر و تفريغ متناوب. عدة عوامل مؤثرة في حالة التوازن الحراري للإلكترونات تم دراستها. في حالة تفريغ مستمر العوامل التي تم دراستها: كثافة الغاز، الطاقة الابتدائية للإلكترونات الأساسية، الحقل الكهربائي و الحقل المغناطيسي العمودي و الموازي. في حالة تفريغ متناوب العوامل التي تم دراستها: كثافة الغاز و سعة الحقل الكهربائي. كوسيلة للمحاكاة استعملت طريقة مونتيكارلو. الغاز المستعمل النيتروجين. النتائج بينت أنه:

في حالة تفريغ مستمر: حالة التوازن يمكن أن تتحقق بزيادة ضغط الغاز أو بزيادة المسافة بين الأقطاب أو بزيادة الحقل الكهربائي. الطاقة الابتدائية للإلكترونات الأساسية لها تأثير كبير على حالة التوازن إذا كان الحقل الكهربائي ضعيف و الفرق بين الطاقة المتوسطة و الطاقة الابتدائية مهم. الحقل مغناطيسي المؤثر له تأثير كبير على قيم و توازن عوامل النقل و على دالة التوزيع.

في حالة تفريغ متناوب: في حالة زيادة ضغط الغاز أو سعة الحقل الكهربائي المتناوب معظم عوامل النقل تذهب نحو سلوك جيبي منتظم، معاملات التشتت تذهب نحو قيم ثابتة تقريبا.

الكلمات المفاتيح: عوامل النقل، حالة التوازن، معادلة بولتزمان، طريقة المانع، التفريغ المستمر والمتناوب، الحقل المغناطيسي.

