

REPUBLIQUE ALGERIENNE DEMOCRATIQUE ET POPULAIRE

MINISTERE DE L'ENSEIGNEMENT SUPERIEUR ET DE LA RECHERCHE SCIENTIFIQUE



UNIVERSITE ABOUBAKR BELKAID DE TLEMEN

FACULTE DES SCIENCES

DEPARTEMENT DE PHYSIQUE

LABORATOIRE DE PHYSIQUE THEORIQUE

---

**MEMOIRE**

Présenté pour obtenir le diplôme de

**MASTER en Physique des plasmas  
Et des gaz ionisés**

Par **Mr. BENBAIER KOUIDER**

THEME

---

**Effet du Champ électrique et magnétique sur les Coefficients de Transport  
d'un Gaz Faiblement Ionisé**

---

Soutenu le 25 juin 2018

Devant le jure compose de

Président	<b>Mr. Djilali Ameer.....Docteur</b>
Encadreur	<b>Mr. LIANI Bachir.....Professeur</b>
Examineur	<b>Mr. BOUSSAID Abdel hack..... Professeur</b>

Année Universitaire : 2017/2018

## **Remerciements**

*Au terme de ce travail, avant tout je remercie Dieu, le tout puissant, de m'avoir donné, la force, la patience, et la volonté.*

*Je remercie **Monsieur LIANI Bachir** Professeur à la faculté des sciences de l'Université de Tlemcen, en tant qu'encadreur de mémoire, qui s'est toujours montré, à l'écoute, et a été très disponible au tout long de la réalisation de ce présent mémoire ainsi que pour l'inspiration, l'aide qu'il a bien voulu nous consacré, et sans lui, ce mémoire n'aurait jamais vu le jour.*

*Je tiens à remercier profondément **Mr. DJILALI Ameur** Maître de conférence à l'Université de Tlemcen pour m'avoir fait l'honneur de présider le jury de mon mémoire.*

*Je remercie vivement **Mr. BOUSSAID Abdel hack** Professeur à l'Université de Tlemcen de m'avoir l'honneur d'être examinateur et de participer au jury de ce mémoire.*

*Je remercie ma très chère mère et mon très cher père, mon cher frère et, ma chère sœur et toutes mes familles.*

*Enfin, je remercie tous mes collègues du Laboratoire de Physique Théorique et a tous amis.*

<b>Table des matières</b>
---------------------------

---

<b>INTRODUCTION GÉNÉRALE .....</b>	<b>6</b>
<b><u>CHAPITRE 1 : GENERALITES SUR LES PLASMAS HORS D'EQUILIBRE.....</u></b>	<b>9</b>
1-Qu'est-ce que c'est un plasma .....	10
• Les plasmas froids .....	10
• Les plasmas chauds.....	10
2-Méthodes de production .....	11
2.1- Les decharges électriques .....	12
2.1. a- Les decharges luminescentes.....	12
2.1. b- La décharge couronne.....	13
2.1. c- Les decharges à barrière diélectrique (DBD).....	13
2.2- Les décharges à courant radio fréquences (RF).....	14
2.3- Les decharges micro-ondes.....	15
<b><u>CHAPITRE 2 : LES PROCESSUS COLLISIONNELS .....</u></b>	<b>16</b>
1-Introduction.....	17
2-Types de collisions.....	17
2.1- Les collisions élastiques.....	17
2. 2- Les collisions inélastiques.....	18
2.2.1- Excitation atomique.....	18
2. 2.2- Ionisation .....	18
2. 2.3- Attachement.....	19
2. 2.4- Recombinaison.....	20
2. 2.5- La dissociation.....	21
3-Mecanisme de collision et la section efficace.....	21
3.1-Mecanisme de collision .....	21

3.2-La section efficace .....	21
• Section efficace différentielle.....	22
• Section efficace transfert d'impulsion.....	23
<b>CHAPITRE 3 : MOUVEMENT D'UN ELECTRON DANS UN CHAMP ELECTROMAGNETIQUE .....</b>	<b>25</b>
1-Introduction.....	26
2-Electron soumise uniquement à un champ électrique ( $\vec{B} = \vec{0}$ ).....	26
3-Equations du mouvement d'un électron dans le cas où le champ électrique et magnétique existent .....	28
• Cas d'un champ magnétique longitudinal ( $\vec{E} // \vec{B}$ ).....	31
• Cas d'un champ magnétique transversal ( $\vec{E} \perp \vec{B}$ ).....	32
<b>CHAPITRE 4 : LA METHODE DE SIMULATION MONTE CARLO .....</b>	<b>34</b>
1-Introduction.....	35
2-Principe de la méthode de Monte Carlo.....	35
3-Le modèle simulation par la méthode de Monte Carlo.....	35
3.1- Génération de nombre aléatoire.....	36
3.2- Génération des électrons primaires .....	36
3.3- Calcul du temps de vol libre .....	37
3.4- Les équations du mouvement de l'électron.....	38
3.5- Les probabilités et la nature de collision.....	39
3.6- Traitement de collision.....	40
• Détermination de l'angle de déviation et l'angle azimutal.....	40
• Détermination de la vitesse après la collision.....	41
• Détermination de l'énergie après la collision .....	42
• Calcul des paramètres de transport.....	44
a- Energie moyenne.....	45
b-Vitesse de dérive.....	45

c-Coefficient de diffusion transversal.....	46
d-Coefficient de diffusion longitudinal.....	46
e-Coefficient d'ionisation.....	47
f-Coefficient d'attachement.....	47
4-Organigramme de Monte Carlo.....	48
<b>CHAPITRE 5 : RESULTATS ET DISCUSSIONS .....</b>	<b>50</b>
1-Introduction.....	51
2-Conditions expérimentales.....	51
3-Résultats obtenus .....	53
3.1- Energie moyenne.....	53
3.2- Vitesse de dérive.....	54
3.3- Fréquence d'ionisation.....	56
3.4- Fréquence d'attachement.....	57
3-5- Coefficient d'ionisation.....	59
3.6- Coefficient d'attachement.....	60
3.7- Coefficient de diffusion transversal.....	61
3.8- Coefficient de diffusion longitudinal.....	63
<b>CONCLUSION GENERALE.....</b>	<b>65</b>
<b>Références bibliographiques.....</b>	<b>67</b>
<b>Résumé .....</b>	<b>69</b>

# **INTRODUCTION**

## **GENERALE**

## INTRODUCTION GENERALE

---

Le terme « plasma » a été introduit par I. Langmuir en 1929 afin de décrire un gaz ionisé électriquement neutre (observé dans les tubes à décharges). Par la suite, ce terme a été utilisé en astrophysique pour désigner un état dilué de la matière, analogue à celui d'un gaz mais principalement constitué de particules chargées (électrons + ions) en proportions égales. Par ordre croissant sur l'échelle des températures, les plasmas représentent le quatrième état de la matière après les états solide, liquide et gazeux.

Un plasma ressemble à la première vue à un gaz, mais le fait que les particules de ce gaz soient ionisées change en fait radicalement la physique qui gouverne la dynamique de ces particules. D'une part les particules chargées ont un mouvement qui est déterminé par les champs électrique et magnétique, et d'autre part les champs sont créés par les densités de charge et de courant dus à ces champs qui rétro-agissent sur les particules, ce couplage entre champs et particules qui rend la physique des plasmas si riches et aussi intéressante à étudier [1].

Notre travail est consacré au calcul des paramètres de transport des électrons soumis à l'action d'un champ électrique et un champ magnétique uniforme, dans un gaz faiblement ionisé. Il existe beaucoup de travaux consacrés à l'étude de l'influence de champ électrique sur la décharge, par contre il y a moins de travaux lorsqu'il y a un champ électrique et un champ magnétique. Les calculs qu'on a fait dans ce mémoire permettent de mieux comprendre la cinétique des électrons dans une décharge électrique.

Les connaissances détaillées des paramètres de transport des électrons dans le gaz sont nécessaires, puisque les domaines d'application des décharges sont nombreux et on peut citer : l'isolation gazeuse, traitement de surface, dépôt de couches minces et gravure pour la microélectronique, lampes à décharge pour l'éclairage, écrans à plasma et les lasers à gaz.

Les paramètres de transport peuvent être calculés par deux méthodes la première est celle qui se base sur la résolution de l'équation de Boltzmann, dans cette méthode les paramètres de transport sont déterminés une fois connue la fonction de distribution. La deuxième méthode est celle la méthode de Monte Carlo qui permet de suivre les électrons l'un après l'autre le long de leur déplacement dans le gaz depuis leurs émissions jusqu'à leurs disparitions. A tout instant et en tout point de la décharge [2].

Ce travail de recherche est consacré pour l'étude et la simulation des paramètres de transport électronique dans l'oxygène ( $O_2$ ) et le dioxyde de carbone ( $CO_2$ ) sous l'effet d'un champ électrique et/ou magnétique uniforme.

## INTRODUCTION GÉNÉRALE

---

Ce mémoire est composé de cinq chapitres qui sont organisés de la manière suivante :

- Dans le premier chapitre on donne une présentation générale sur les plasmas, notamment les plasmas froids hors équilibre thermodynamique, leurs grandeurs caractéristiques (le degré d'ionisation, longueur de Debye, fréquence plasma) et leurs techniques de génération (décharges électriques, décharges radiofréquence, décharges micro-onde).
- Le deuxième chapitre concerne la description des processus de collisions dans le plasma hors équilibre thermodynamique. Dans ce chapitre on traite également la relation entre la fréquence de collision et les sections efficaces de collision. À la fin de ce chapitre on donne l'évolution d'un gaz au voisinage d'un point donné à une instante donnée.
- Dans le troisième chapitre on fait une résolution analytique de l'équation de mouvement d'un électron sous l'effet d'un champ électrique et un champ magnétique transversal ou longitudinal uniforme.
- Dans le quatrième chapitre on donne une description générale de la méthode de simulation numérique utilisée pour calculer les paramètres de transport. Dans un premier temps, nous avons décrit les principes de la méthode de Monte-Carlo ensuite nous avons posé les équations de mouvement des électrons dans le cas d'un champ électrique et magnétique transversal ou longitudinal. Ainsi nous avons montré l'influence du champ électrique et magnétique sur les paramètres de transport.
- Dans le cinquième chapitre on décrit et on interprète les résultats obtenus en présence de champ électrique et magnétique d'abord perpendiculaire puis parallèle, dans le cas particulier d'une décharge dans l'oxygène ( $O_2$ ) et dans le dioxyde de carbone ( $CO_2$ ).
- Enfin, nous terminons ce mémoire par une conclusion générale.

# **CHAPITRE 1**

## **GERALITES SUR LES PLASMAS HORS D'EQUILIBRES**

## 1. Qu'est-ce que c'est un plasma :

Le plasma est un gaz partiellement ou totalement ionisé, suffisamment dense mais globalement considéré comme une zone électriquement neutre (le bilan global de charges reste nul). Un plasma est constitué de particules chargées (d'ions positifs ou négatifs), des particules neutres (atomes, molécules, radicaux libres) et électrons. Le plasma constitue plus de 99% de la matière visible. D'une façon générale, on peut ainsi distinguer les plasmas naturels (les étoiles, le vent solaire, la foudre, les flammes et l'ionosphère), en plus des plasmas artificiels créés dans les laboratoires (décharges dans un gaz, les arcs électriques, les plasmas produits par lasers, par les ondes de choc, et les plasmas de fusion thermonucléaire). Voir figure 1-1 qui représente la Classification de différents plasmas selon leur densité et leur température électronique.

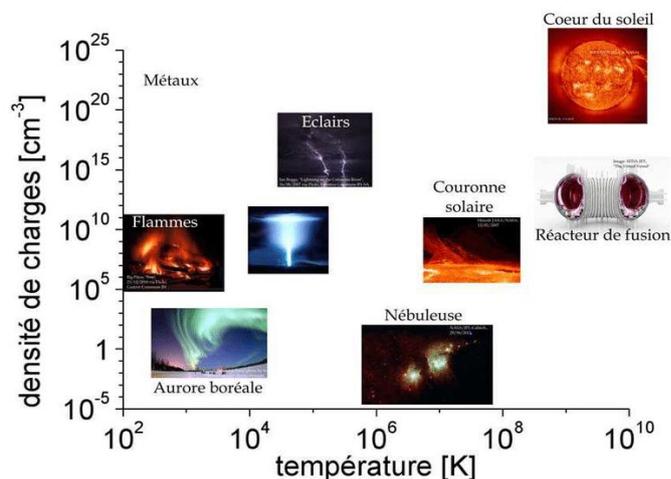


Figure 1-1 : Diagramme température électronique-densité électronique  
Pour quelques plasmas [3]

Le terme plasma recouvre un vaste domaine que l'on peut en première approximation distinguer deux types classifiés par leur température électronique, et leur densité.

**-Les plasmas chauds :** qui sont des plasmas en équilibre thermodynamique complet, et leur température est supérieure à 10 millions de degrés (les plasmas de fusion nucléaire créés par les Etoiles).

**-Les plasmas froids :** Les plasmas froids sont caractérisés par des températures ne dépassant pas quelques dizaines de milliers de degrés. A l'échelle du laboratoire, on distingue deux catégories de plasmas froids : plasma thermique et non thermique

**-Les Plasmas thermique (en l'ETL : équilibre thermodynamique local) :** En générale ces milieux sont fortement ionisés. Les électrons, les ions et les neutres procèdent approximativement la même énergie cinétique moyenne, c'est-à-dire que

la température de ces espèces sont voisines  $T_e \sim T_i \sim T_g$  (avec  $T_e$  température électronique,  $T_i$  température ionique,  $T_g$  température de gaz).

**-Les plasmas froids hors équilibre thermodynamique** : l'énergie des électrons est très élevé, de l'ordre de plusieurs électronvolts ( $1\text{eV} = 11600\text{ K}$ ), tandis que la température cinétique des espèces lourdes (neutres, ions) reste relativement basse (température ambiante à quelques centaines de kelvins), pour cette raison ces plasmas sont considérés comme des plasmas non-thermique.

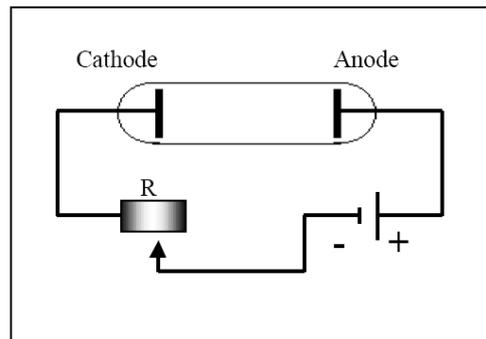
Généralement ces milieux sont faiblement ionisés, et leur fonction de distribution électronique en non Maxwellienne, ce qui impose résoudre l'équation de Boltzmann à chaque instant. Les plasmas hors équilibre sont beaucoup moins consommateurs d'énergie que les plasmas thermiques, et beaucoup plus facilement<< maniables>>. La raison qui nous intéresse dans le cadre de cette étude. Les plasmas hors équilibre thermodynamiques sont des milieux réactifs par ce que la micro-réversibilité naturellement n'est pas vérifiée.

### 2. Méthodes de production :

A la différence des gaz neutres, les plasmas non thermiques (hors-équilibre) sont des milieux réactifs dans lequel on trouve des espèces chargées (les ions, les électrons ...) et des particules neutres. L'application d'un champ électrique et/ou magnétique influe directement sur les espèces chargées. L'énergie injectée est transportée spécialement aux particules dont la masse est plus faible telle que les électrons qui contribuent à la création d'espèces actives par processus, d'excitation, d'ionisation, de recombinaison ou de la dissociation du gaz. Généralement les plasmas hors équilibre thermique peuvent être générés par différentes techniques : les décharges électriques, le rayonnement micro-onde et radiofréquence, les décharges à résonance cyclotron électronique(RCE), l'irradiation par faisceaux d'électrons.

### 2.1) Les décharges électriques :

Le terme décharge électrique s'applique à tout mécanisme de passage de courant dans un gaz. L'application d'une tension continue à faible pression entre deux électrodes d'un tube à gaz qui reste la méthode la plus classique et simple pour réaliser une décharge (voir la figure 1-2)



**La figure 1-2** : schéma électrique de la production d'une décharge

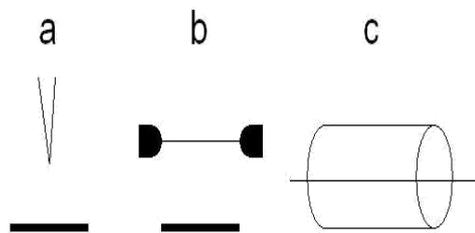
Suivant la puissance dissipée dans un milieu, on peut distinguer plusieurs décharges électriques à basse pression qui permettent de créer un plasma froid hors équilibre thermique, car la température des électrons est bien supérieure à celle des particules lourdes (ions, neutres). Le plasma hors équilibre est un milieu réactif dans lequel, on trouve des espèces neutres excitées ou non excitées, dissociées ou non dissociées, d'ions (positifs, négatifs) et d'électrons. En générale les plasmas hors équilibre se présentent sous différentes formes : telles que la décharge luminescente, couronne ou encore les décharges a barrière diélectrique.

#### **2.1.a) Les décharges luminescentes :**

La décharge luminescente (la décharge *glow*) est une décharge générée par une tension continue à faible pression (moins de mbar), et un courant faible, cette tension est appliquée entre deux électrodes planes. Les électrons produits dans ce type de décharge sont fortement énergétiques. Les atomes neutres excités, ainsi que les molécules, génèrent une luminescence typique (comme dans les tubes fluorescents). Pour maintenir la décharge luminescente il faut : un mécanisme de multiplication d'électrons (la génération d'électrons secondaires), ce processus est obtenu par bombardement ionique de cathode. Les décharges luminescentes jouent un rôle important dans l'industrie. Elles sont utilisées comme sources de lumière (les lampes néon pour l'éclairage, les lampes à vapeur de sodium...), dans les réacteurs de dépôt des couches minces, et le traitement de surface en micro et nanoélectronique.

### 2.1.b) La décharge couronne :

On appelle **décharge de couronne**, l'ensemble des phénomènes de décharge autonome qui précède le claquage, générée à la pression atmosphérique, dans un champ électrique non-uniforme, ce type de décharge est caractérisé par la dissymétrie des électrodes, l'une au moins, des deux électrodes présentant un petit rayon de courbure (fil ou point) soumise à haute tension est le siège d'un fort champ électrique, l'autre électrode a un rayon de courbure beaucoup plus grand (cylindre ou plaque). Dans la décharge couronne, le champ électrique contrôle le processus d'ionisation des particules neutres (l'accélération des électrons). Différents types de géométries sont utilisés dans les décharges couronnes : pointe-plan, fil-fil et fil-cylindre (voir la figure 1.2). La haute-tension appliquée à l'électrode à forte courbure peut être positive ou négative.

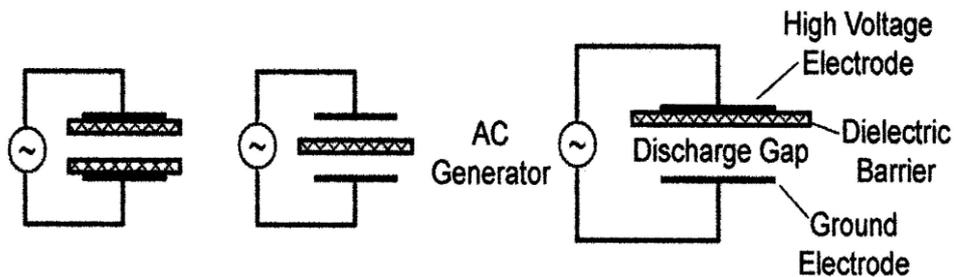


**La figure 1-3** : Configurations de décharges couronne (a) point-plan  
, (b) fil-plan et (c) fil-cylindre

Les décharges couronnes sont d'une grande importance pratiquées dans les applications (électrostatique, synthèse d'ozone, traitement de surface) mais présentent quelques inconvénients (pertes d'énergie et bruits dans les transmissions par câble).

### 2.1.c) Les décharges à barrière diélectrique (DBD) :

Les décharges à barrière diélectrique (DBD), ou décharges silencieuses, sont un moyen très efficace pour la génération d'un plasma hors équilibre thermodynamique, à des pressions proches des pressions atmosphériques. Dans ce type de décharges, un plasma est généré entre deux électrodes, dont l'une au moins est recouverte d'une couche de matériau isolant (diélectrique) qui a pour rôle de limiter la valeur du courant à travers le gaz, et ainsi de supprimer la possibilité de création d'arcs électriques. Des configurations typiques de DBD (électrodes cylindriques ou coplanaires) sont décrites dans la figure 1-4.

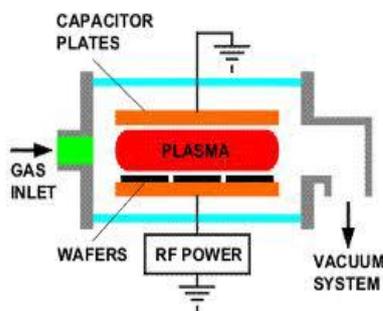


La figure 1-4 : Possibles configurations d'une décharge à barrière diélectrique (DBD)

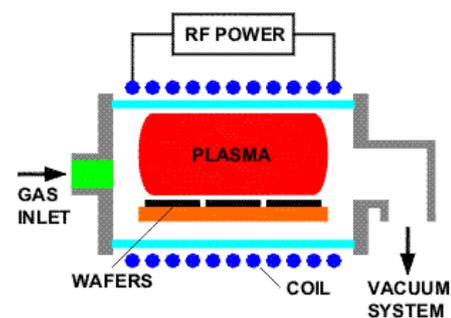
Généralement les décharges à barrière diélectrique sont alimentées par des tensions alternatives (AC) comprise entre 1 et 100 kilo volte (kV), à une fréquence comprise entre une centaine d'hertz (Hz), et quelques centaine de milliers d'hertz (kHz). Les DBD sont très utilisées dans de nombreuses applications industrielles en particulier dans le traitement des surfaces, la génération de l'ozone, la dépollution et aussi pour la production des rayonnements ultra-violet (UV).

## 2.1) Les décharges à courant radiofréquences (RF) :

Les réacteurs à plasmas industriels peuvent être alimentés en courant continu, ou en courant alternatif à basse fréquence, et haute fréquence (radiofréquence) ou très haute fréquence (micro-onde). L'application d'une tension radiofréquence (RF) entre deux plaques parallèles métalliques produit des champs électromagnétiques qui permet de créer un plasma réactif constituant des ions et des radicaux, qui sont produits par les collisions des électrons avec le gaz. Ces champs transfèrent leur énergie aux électrons par mécanismes de chauffage qui peuvent être collisionnels ou non-collisionnels. La forme et l'intensité des champs, et l'efficacité du chauffage, vont dépendre de la structure utilisée.



La figure 1-5 : Vue schématisée d'un réacteur à couplage capacitif (CCP)



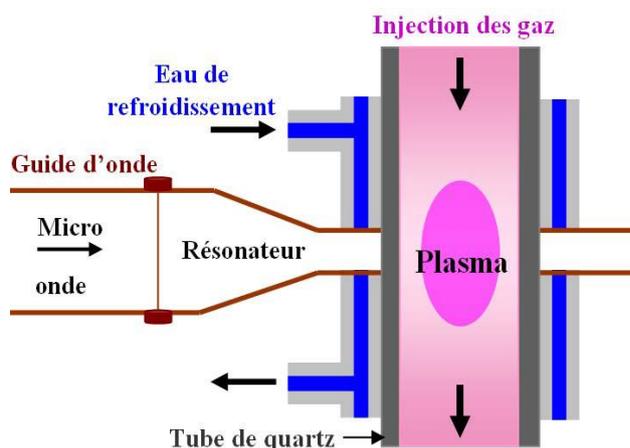
la figure 2-5 : Vue schématisée d'un réacteur à couplage inductif (ICP)

Les deux types de réacteurs radiofréquence utilisés sont : les réacteurs à couplage inductif (ICP pour Inductively Coupled Plasmas) et les réacteurs à couplage capacitif (CCP pour Capacitively Coupled Plasmas). A ces deux types de réacteurs (ICP et CCP), sont généralement associés deux modes de couplage de l'énergie, le régime inductif, pour des puissances plus élevées, appelé mode H, et le régime capacitif, à basse puissance, appelé mode E.

Les plasmas couplés capacitivement (CCP) et inductivement (ICP) sont créés à l'aide d'une alimentation radiofréquence dont la fréquence de l'excitation électromagnétique  $f$  (ou la pulsation  $\omega=2\pi f$ ) est typiquement entre 1 et 200 MHz et ils fonctionnent généralement à basse pression. Ces plasmas jouent un rôle important en micro et nanotechnologies, pour la fabrication de circuits intégrés ainsi que dans le domaine de la dépollution et la stérilisation.

### 2.3) les décharges micro-ondes :

Les plasmas micro-ondes ou hyperfréquences, sont des gaz par injection d'une puissance micro-onde. A l'inverse des décharges électriques classiques, ces plasmas ne nécessitent pas d'électrodes (aucune partie métallique n'est en contact avec le plasma), mais en utilisant des cavités micro-onde. Ces cavités permettent de transférer l'énergie du champ électromagnétique au gaz ionisé, qui se comporte comme un élément dissipatif. L'adaptation entre la structure véhiculant l'énergie et la cavité est réalisée par transition, qui permet d'optimiser la puissance transmise (voir la figure 1-7)



La figure 1-7 : schéma d'un plasma micro-onde ou hyper fréquence

Les plasmas micro-onde sont des milieux isotropes, ce qui est un avantage pour la fabrication de composants microélectroniques, qui sont très sensibles aux défauts de surfaces induites par un bombardement ionique. Ils sont très utilisés pour la production d'espèces actives, et les procédés de nettoyage des surfaces.

# CHAPITRE 2

## LES PROSSECUS COLLISIONNELS

## 1) Introduction :

La théorie cinétique des gaz est un modèle très simple dans lequel, on assimile un gaz à un ensemble dilué de petites boules de billard. Ces particules (boules) se déplacent généralement en ligne droite, lorsque ces particules se rencontrent, on constate une collision (interaction) qui modifie la trajectoire initiale de chaque particule. Dans la théorie actuelle des gaz et des plasmas, on généralise ce modèle en considérant que toutes les particules du gaz interagissent entre elles par des forces d'interaction auto-cohérentes, dont l'origine extérieure au plasma ou interne, est dépendant du mouvement des particules elles-mêmes. Dans un gaz neutre, ce sont les collisions qui régissent la dynamique globale des particules de gaz. Dans les conditions normales de température, et de pression ces collisions sont tellement nombreuses qu'on ne s'écarte pratiquement pas de l'équilibre. Ce sont aussi ces collisions qui assurent le phénomène de transport (thermique, électrique, ...), lorsque le système est hors équilibre. Les collisions dont on parle dans ce cas sont des collisions entre des particules neutres, elles régissent par des forces de courte portée (la force de Van der Waals).

## 2) Types de collisions:

Compte tenu de la nature complexe des particules qu'on rencontre dans un gaz (molécules, atomes, éventuellement ionisés), on est amené à observer plusieurs types de collisions.

### 2.1) Les collisions élastiques :

Lorsque le nombre de particules reste constant, et que l'énergie interne de chaque particule reste inchangée avant et après le choc. Dans ce type de collision, l'énergie cinétique et la quantité de mouvement total sont conservées.



Dans un choc élastique l'électron de masse  $m$  garde pratiquement toute son énergie et n'en cède qu'une très faible part par collision avec les particules lourdes de masse  $M$ , au lieu d'une fraction  $\Gamma$  néanmoins, cette énergie dépend de de l'angle de déviation et de la vitesse des particules mises en jeux. Un électron devra donc subir des milliers de collisions élastiques pour perdre son énergie.

Qui s'écrit :

$$\Gamma = \frac{2mM}{(m+M)^2} = \frac{2m}{M} \quad (\text{si } m \ll M)$$

## 2.2) Les collisions inélastiques :

Ce sont les collisions où une partie de l'énergie cinétique initiale du système qui est transformée en d'autres formes d'énergie. Ces collisions s'associent, avec un changement d'état interne et/ou d'une modification du nombre de particules (excitation, désexcitation). Contrairement à des collisions élastiques, les collisions inélastiques ne se produisent que si l'énergie mise en jeu est supérieure à une courte valeur minimale appelée seuil  $W_s$ .

### 2.2.1) Excitation atomique :

Un atome (ou molécule) peut être excité soit par collision avec électron, soit par l'absorption d'un photon.

#### ➤ Excitation par électron :

Sous l'effet de choc entre un électron et un atome, une partie ou la totalité de l'énergie cinétique de l'électron se transforme à un 'atome sous forme d'énergie interne, un électron de cortège électronique de cette atome peut passer d'un niveau inférieur à un vers niveau supérieur, ç'est le processus d'excitation.



Cette réaction n'est possible que si l'énergie cinétique de l'électron incident  $W_c$  soit au moins égale à l'énergie d'excitation  $W_{ext}$ .

$$W_c \geq W_{ext} \quad \text{Avec} \quad W_c = \frac{1}{2}mV^2 \quad \text{et} \quad W_{ext} = eV_{ext}$$

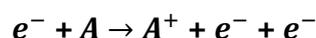
Où  $m$  la masse de la particule,  $V$  la vitesse de la particule,  $e$  la charge élémentaire de la particule et  $V_{ext}$  le potentiel d'excitation.

### 2.2.2) Ionisation :

Lorsqu' un atome (ou une molécule) absorbe une énergie assez suffisante, il perd un électron et devient une particule chargée positivement. On dit qu'il est ionisé.

#### ➤ Ionisation par chocs:

Sous l'effet d'un champ électrique suffisamment intense sur un gaz isolé. Les électrons sont accélérés, ce qui leur permet de gagner de l'énergie. Ils rencontrent sur leur trajet des atomes et des molécules qui s'ionisent, il en résulte des ions et des électrons secondaires. Ce phénomène est appelé ionisation par chocs des électrons.



L'ionisation d'un atome par un choc électronique ou ionique n'est possible que si l'électron ou ion incident, possède une énergie cinétique  $W_c$  supérieure ou égale à l'énergie d'ionisation  $W_i$ .

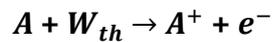
$$W_c \geq W_i \quad \text{Avec} \quad W_c = \frac{1}{2}mV^2 \quad \text{et} \quad W_i = eV_i$$

Où  $m$  la masse de la particule,  $V$  la vitesse de la particule,  $e$  la charge élémentaire de la particule et  $V_i$  le potentiel d'ionisation.

➤ **Ionisation thermique :**

Lorsqu'un gaz est chauffé à une température élevée ( $> 1500$  K), l'atome est ionisé grâce à l'énergie thermique absorbée  $W_{th}$ .

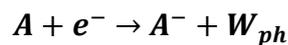
La réaction s'écrit :



Cette réaction n'est possible que si l'énergie thermique  $W_{th}$  soit au moins égale à l'énergie d'ionisation  $W_i$ . L'ionisation thermique est rencontrée surtout dans les gaz à haute pression.

**2.2.3) Attachement :**

Ce sont des gaz atomiques ou moléculaires ayant cette tendance qui possèdent 1 ou 2 électrons dans leur couche externe, ils sont appelés : gaz électronégatifs ( $O_2$ , Cl, F.....). Le processus d'attachement se crée lorsqu'un atome neutre capture un électron, ce qui donne naissance à un ion négatif et l'émission d'un photon. Le phénomène de la capture d'électron (l'attachement) est accompagné par libération de l'énergie  $E_a$  appelé : affinité électronique. La réaction s'écrit :



Si la particule formée est dans son état fondamental, l'équation de la conservation de l'énergie s'écrit sous la forme suivante :

$$E_a = W_{ph} - W_c$$

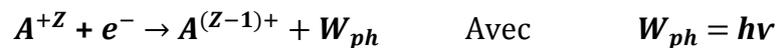
**2.2.4) Recombinaison :**

Dans un gaz faiblement ionisé, la recombinaison des charges positives et négatives apparaît sous différentes formes dont les principales sont :

➤ **La recombinaison radiative :**

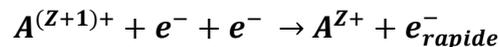
La recombinaison radiative est une réaction à deux corps, où l'électron libre peut être capturé par un ion ( $A^{+Z}$ ), en donnant naissance d'un atome ou un ion de charge ( $A^{(Z-1)+}$ ) et l'émission d'un photon ( $W_{ph}$ ).

La réaction s'écrit :

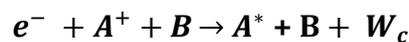
➤ **Recombinaison à 3 corps :**

Ce processus est l'inverse de l'ionisation par choc, de ce fait deux électrons libres entrent en collision avec un ion. L'un des deux électrons est capturé par un ion de charge ( $A^{(Z+1)+}$ ), tandis que l'autre est emporté par l'énergie supplémentaire. La recombinaison à trois-corps n'est importante que dans le cas des plasmas denses (la densité des électrons  $n_e > 10^{19} \text{ cm}^{-3}$ ). La probabilité pour deux électrons s'approchent en même temps d'un ion ne peut être significative seulement que si la densité des électrons soit grande.

D'où la réaction s'écrit :



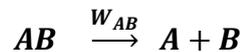
La recombinaison se produit non seulement à partir de la collision des deux électrons, mais aussi à partir d'un électron et un atome neutre, ce processus très utilisable dans les gaz faiblement ionisés (la densité des particules neutres est très supérieure à celle des électrons). Dans ce cas la conservation de l'énergie et de la quantité de mouvement est assurée par la présence d'un troisième corps (B). Donc on écrit :



Ou  $W_c$  : l'énergie cinétique

### 2.2.5) La dissociation :

C'est le processus de décomposition d'une molécule en plus petites par rupture de certaines des liaisons entre ses atomes. La dissociation d'une molécule nécessite un apport d'énergie (la chaleur) qui peut être cédé à la molécule par une autre particule, lors d'une collision inélastique. On s'écrit donc :

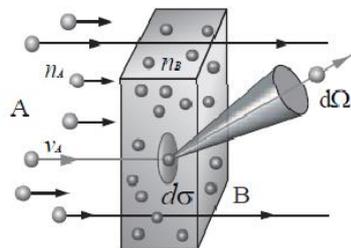


Avec  $W_{AB}$  : est l'énergie de dissociation.

## 3) Mécanisme de collision et la section efficace :

### 3.1) Le mécanisme d'une collision :

Considérons des particules (électrons dans notre étude) incidents se forment d'un faisceau envoyant vers des particules neutres (cible), si les électrons continuent leur trajectoire rectiligne sans aucune déviation, on dit qu'il n'y a aucune collision, dans le cas contraire où une collision se produit, les électrons sont diffusés dans diverses directions définies par l'angle solide  $d\Omega$  (voir le figure 2.1).



La figure 2.1 : les électrons diffusés dans diverses directions

Cette interaction entre un électron et une particule neutre prend la forme d'une collision peut être élastique ou inélastique. Dans notre étude on traite les collisions élastiques, les collisions inélastiques (l'excitation, l'ionisation et l'attachement) et les collisions fictives.

### 3.2) La section efficace :

Chaque collision élastique ou inélastique entre les particules représente un mécanisme d'interaction, qui modifie les trajectoires initiales des particules. Les déviations de trajectoires s'accompagnent d'un transfert d'impulsion et d'énergie cinétique d'une des particules vers l'autre. Dans les plasmas, tous les processus collisionnels en phase gazeuse sont caractérisés par *une section efficace*  $\sigma$ , ce paramètre

dépend de la densité des particules (électrons, ions, molécules, atomes...) et le potentiel d'interaction (de contact, de polarisation, coulombienne...).

➤ **Section efficace différentielle :**

Pendant une collision (élastique ou inélastique), les particules sont diffusées dans diverses directions. La notion de *section efficace différentielle* va permettre de déterminer exactement leur distribution.

En général, la section efficace différentielle  $\sigma$  décrit la probabilité, pour une particule incidente se déplaçant à la vitesse  $V$ , de voir sa direction défléchie dans l'angle solide  $d\Omega$  autour de la direction liée aux angles  $\theta$  et  $\varphi$ . On peut donc écrire :

$$\frac{dN}{dt} = \Phi \sigma(\theta, \varphi, V) d\Omega \quad (2.3) \quad \text{avec} \quad d\Omega = \sin \theta \, d\theta d\varphi$$

Où  $\frac{dN}{dt}$  : représente le nombre des particules diffusées par unité de temps

$\Phi$  : représente le flux de particules

Dans le centre de masse le nombre des particules diffusées par unité de temps s'exprime :

$$\frac{dN}{dt} = 2\pi \Phi \sigma(\theta, \mathcal{V}_r) \sin \theta \, d\theta$$

Où  $\mathcal{V}_r$  représente la vitesse relative des particules entrant en interaction.

De plus la section efficace différentielle peut s'exprimer également à l'aide du paramètre d'impact. Le nombre des particules envoyées avec un paramètre fixe compris entre  $b$ , et  $b + db$ , et qui sont diffusées avec une déviation comprise entre  $\theta$  et  $\theta + d\theta$  et s'écrit par :

$$\frac{dN}{dt} = 2\pi b db \Phi = 2\pi \sigma(\theta, \mathcal{V}_r) \sin \theta d\theta$$

On obtient finalement l'expression de la section efficace différentielle en fonction du paramètre d'impact et l'angle de déviation :

$$\sigma_{diff}(\theta, \mathcal{V}_r) = \left| \frac{b}{\sin \theta} \frac{db}{d\theta} \right| \quad \text{Avec} \quad \theta = \pi - 2 \int_{r_m}^{\infty} \frac{dr}{r^2} \mathbf{b} \left( 1 - \frac{b^2}{r^2} - \frac{V(r)}{\frac{1}{2} \mu_{AB} \mathcal{V}_r^2} \right)^{1/2}$$

Où  $V(r)$  : représente le potentiel d'interaction, et  $r_m$  : la distance minimale entre deux particules.

➤ **Section efficace de transfert d'impulsion :**

On peut définir une section efficace de transfert d'impulsion  $\sigma_{ti}$  comme étant le rapport entre la quantité de mouvement transférée par seconde divisée par le flux total incident.

Après interaction, une particule a été déviée dans la déviation donnée par l'angle  $\theta$  si bien que la quantité de mouvement projetée le long de la direction incidente n'est plus égale qu'à  $p \cos \theta$ . En utilisant la conservation de la quantité de mouvement avant et après le choc, l'impulsion transférée à la cible (perdue par la particule) est donnée par la relation suivante :

$$\begin{aligned} \Phi_{cible} &= \int (1 - \cos \theta) P dN \\ &= \Phi P \int (1 - \cos \theta) 2\pi b db = 2\pi \Phi P \int_0^\pi \sigma(\theta, \mathcal{V}_r) (1 - \cos \theta) \sin \theta d\theta \end{aligned}$$

La section efficace s'écrit donc par la relation suivante :

$$\sigma_{ti}(\mathcal{V}_r) = \frac{\Phi_{cible}}{\Phi_t} = 2\pi \int_0^\pi \sigma(\theta, \mathcal{V}_r) (1 - \cos \theta) \sin \theta d\theta \quad (2.1)$$

Où  $\Phi_t$  : représente le flux d'impulsion total ( $\Phi_t = \Phi P$ ), et  $P$  : est l'impulsion d'une particule.

La section efficace de transfert de quantité de mouvement s'exprime en fonction de l'énergie, par l'expression suivante :

$$\sigma_{ti}(\mathcal{E}) = 2\pi \int_0^\pi \sigma(\theta, \mathcal{E}) (1 - \cos \theta) \sin \theta d\theta \quad (2.2)$$

Où  $\mathcal{E}$  représente l'énergie cinétique d'une particule.

Les intégrales (2.1) et (2.2) convergent pour les collisions électron-neutre, ion-neutre (cas d'un gaz faiblement ionisé) mais divergent toujours pour les interactions coulombienne.

Pour les collisions élastique et inélastique la relation (2.2) devient :

**Collision élastique :**

$$\sigma_{et}(\mathcal{E}) = 2\pi \int_0^\pi \sigma(\theta, \mathcal{E}) \sin \theta d\theta$$

Où  $\sigma_{et}$  : représente la section efficace élastique total.

*Collision inélastique :*

$$\sigma_i(\mathcal{E}) = 2\pi \int_0^\pi \left(1 - \sqrt{1 - \frac{\mathcal{E}_s}{\mathcal{E}} \cos \theta}\right) \sigma(\theta, \mathcal{E}) \sin \theta d\theta$$

Où  $\sigma_i$  : représente la section efficace inélastique, et  $\mathcal{E}_s$  : représente l'énergie seuil.

# CHAPITRE 3

## MOUVEMENT D'UN ELECTRON DANS UN CHAMP ÉLECTROMAGNETIQUE

### 1) Introduction :

Les particules chargées (les électrons ou les ions) dans le plasma soumises souvent à un champ magnétique  $\vec{B}$ , statique ou lentement variable. Ce champ est produit par les sources extérieures de plasma ou par les courants électriques associés aux mouvements des particules du plasma. Les systèmes de confinement magnétique avec de forts champs imposés, les magnétosphères planétaires, et les couches externes des étoiles sont des exemples de cette situation. Le plasma peut être soumis à un champ électrique  $\vec{E}$  dont l'origine extérieure ou intérieure. Afin de mieux comprendre le comportement et l'évolution d'un plasma au niveau macroscopique, il est important d'étudier la dynamique des particules chargées, et de déterminer leur trajectoire dans un champ électromagnétique  $(\vec{E}, \vec{B})$ . La difficulté d'une telle étude repose essentiellement sur le caractère non-linéaire de la relation fondamentale de la dynamique, lorsque l'on tient compte de la force de Lorentz. On a en effet :

$$\vec{F} = q(\vec{E} + \vec{U} \wedge \vec{B})$$

Dans lequel :  $\vec{F}$  est la force de Lorentz,  $q$  est la charge élémentaire de la particule et  $U$  est la vitesse de la particule.

Dans notre simulation on va étudier le transport des électrons dans un gaz faiblement ionisé, sous l'effet d'un champ électromagnétique, donc la connaissance de la trajectoire de l'électron entre deux collisions successives, sous l'effet d'une force extérieure est nécessaire.

Ensuite, on va traiter trois différents cas particuliers, de champ électrique et magnétique uniformes.

- Electron soumis uniquement à un champ électrique ( $\vec{B} = \vec{0}$ ).
- Electron soumis à un champ magnétique perpendiculaire au champ électrique ( $\vec{B} \perp \vec{E}$ ).
- Electron soumis à un champ magnétique parallèle au champ électrique.

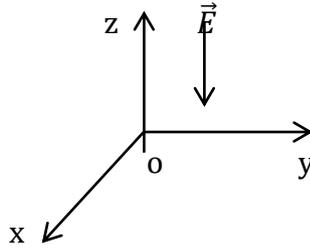
### 2) Electron soumis uniquement à un champ électrique ( $\vec{B} = \vec{0}$ ) :

Dans un gaz faiblement ionisé, le mouvement de l'électron entre deux collisions successives, est déterminé par la résolution de l'équation fondamentale de la dynamique s'écrit [6] :

$$\vec{F} = m_e \frac{d\vec{U}}{dt} = -e\vec{E} \quad (3-1)$$

Où  $m_e$  : représente la masse de l'électron,  $U$  : représente la vitesse de l'électron et  $(-e)$ : représente la charge de l'électron.

Dans le cas d'un champ électrique  $\vec{E}$  anti-parallèle à l'axe ( $OZ$ ) dans le repère ( $o, x, y, z$ ).



**Figure 3.1** : les composantes de champ électrique

Les composantes de la force électrique  $F$  s'écrivent par les relations suivantes :

$$\begin{cases} F_x = m_e \frac{dU_x}{dt} = 0 \\ F_y = m_e \frac{dU_y}{dt} = 0 \\ F_z = m_e \frac{dU_z}{dt} = eE \end{cases} \quad (3-2)$$

Ou bien :

$$\begin{cases} \frac{dU_x}{dt} = 0 \\ \frac{dU_y}{dt} = 0 \\ \frac{dU_z}{dt} = a_z \end{cases} \quad (3-4)$$

Ou  $a_z$  est l'accélération de l'électron suivant l'axe ( $OZ$ ), définie par :  $a_z = \frac{e}{m_e} E$

SI ( $U_{x0}, U_{y0}, U_{z0}$ ) et ( $x_0, y_0, z_0$ ) sont les trois composantes de la vitesse et la position à l'instant  $t_0$ . Alors les vitesses et les positions à l'instant  $t_1$  sont données par les relations suivantes :

$$\begin{cases} U_{x1} = U_{x0} \\ U_{y1} = U_{y0} \\ U_{z1} = U_{z0} + a_z \cdot \Delta t \end{cases} \quad (3-5)$$

En fin :

$$\begin{cases} x_1 = x_0 + U_{x0} \cdot \Delta t \\ y_1 = y_0 + U_{y0} \cdot \Delta t \\ z_1 = z_0 + U_{z0} \cdot \Delta t + \frac{1}{2} a_z \cdot \Delta t^2 \end{cases} \quad (3-6)$$

Avec  $\Delta t = t_1 - t_0$  : représente le temps de vol libre entre deux instants. Ce que nous verrons dans les prochains chapitres.

### 3) Equations du mouvement d'un électron dans le cas où le champ électrique, et magnétique existent ( $\vec{B} \neq \vec{0}$ ) :

Nous supposons maintenant que le gaz faiblement ionise soit soumis à un champ électrique et magnétique uniformes (ne dépendent pas de la position dans l'espace), l'équation du mouvement d'un électron peut s'écrire :

$$\vec{F} = -e(\vec{E} + \vec{U} \wedge \vec{B}) = m_e \frac{d\vec{U}}{dt} \quad (3-1)$$

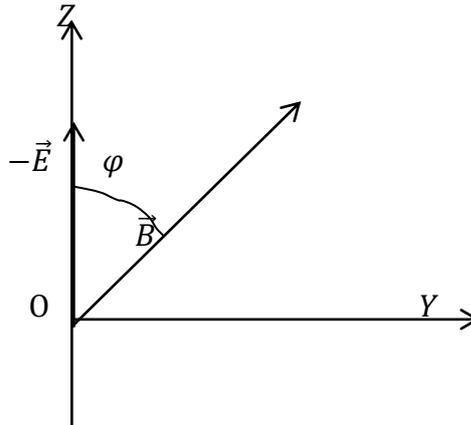


Figure 3.2 : les composantes de champ électrique et magnétique

On prend le cas où le champ électrique  $\vec{E}$  anti-parallèle à l'axe (  $OZ$  ), et un champ magnétique  $\vec{B}$  est situé dans le plan (  $YOZ$  ), c'est-à-dire  $B_x = 0$  voir la figure (3.2).

Les composantes de la force sont données par :

$$\begin{cases} F_x = m_e \frac{dU_x}{dt} = -e(U_y B_z - U_z B_y) \\ F_y = m_e \frac{dU_y}{dt} = -e(-U_x B_z) \\ F_z = m_e \frac{dU_z}{dt} = -e((-E) + U_x B_y) \end{cases}$$

A partir de la projection des composantes du champ (  $E, B$  ) sur les axes, on trouve :

$$\frac{dU_x}{dt} = -\frac{e}{m_e} U_y B \cos \varphi + \frac{e}{m_e} U_z B \sin \varphi \quad (3.2a)$$

$$\frac{dU_y}{dt} = \frac{e}{m_e} U_x B \cos \varphi \quad (3.2b)$$

$$\frac{dU_z}{dt} = \frac{e}{m_e} E - \frac{e}{m_e} U_x \sin \varphi \quad (3.2c)$$

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 du mouvement (3.2).

La dérivation de l'équation (3.2) par rapport du temps est :

$$\frac{d^2 U_x}{dt^2} = -\frac{eB}{m_e} \left( \frac{dU_y}{dt} \cos \varphi - \frac{dU_z}{dt} \sin \varphi \right) \quad (3.3)$$

En remplaçant les équations (3.2b) et (3.2c) dans l'équation (3.3) on obtient :

$$\frac{d^2 U_x}{dt^2} + \omega_c^2 U_x = \omega_c^2 \frac{E}{B} \sin \varphi \quad (3.4)$$

Avec  $\omega_c = \frac{e}{m_e} B$  est la fréquence cyclotronique ou la fréquence de Larmor. La solution de l'équation différentielle du deuxième ordre (3.4) entre  $t_0$  (celui de la dernière collision) et une instante  $t$  (avant la collision suivante) s'écrit :

$$U_x(t) = C_1 \cos \omega_c t + C_2 \sin \omega_c t + \frac{E}{B} \sin \varphi \quad (3.5)$$

Les constantes  $C_1$  et  $C_2$  sont déterminées à partir des équations (3.5), (3.2a) et les conditions initiales, à un instant  $t = t_0$  on a  $U_x(t_0) = U_{x0}$ ,  $U_y(t_0) = U_{y0}$ ,  $U_z(t_0) = U_{z0}$ .

On trouve deux équations linéaires. Les résolutions de ces équations sont :

$$C_1 = (U_{x0} - \frac{E}{B} \sin \varphi) \quad \text{et} \quad C_2 = (U_{z0} \sin \varphi - U_{y0} \cos \varphi)$$

La solution (3.5) s'écrit à l'instant  $t_1$  de la collision l'équation:

$$U_{x1} = U_{x0} \cos(\omega_c \Delta t) - U_{y0} \cos \varphi \sin(\omega_c \Delta t) + U_{z0} \sin \varphi \sin(\omega_c \Delta t) + \frac{E}{B} \sin \varphi (1 - \cos(\omega_c \Delta t)) \quad (3.6)$$

Avec  $\Delta t = t_1 - t_0$  : représente le temps de vol libre entre deux instants.

En insérant l'équation (3.6) dans l'équation (3.2b), et en appliquant (l'intégrale) sur l'équation résultante par rapport au temps. On obtient la relation suivante :

$$U_{y1} = U_{x0} \cos \varphi \sin(\omega_c \Delta t) + U_{y0} (\cos \varphi)^2 \cos(\omega_c \Delta t) - U_{z0} \sin \varphi \cos \varphi \cos(\omega_c \Delta t) + \frac{E}{B} \sin \varphi \cos \varphi (\omega_c \Delta t - \sin(\omega_c \Delta t)) + K \quad (3.7)$$

Ou  $K$  : représente la constante d'intégration, à partir de la condition initiale on trouve que  $K = U_{y0} + U_{z0} \sin \varphi \cos \varphi - U_{y0} (\cos \varphi)^2$ .

L'équation (3.7) devient :

$$U_{y1} = U_{x0} \cos \varphi \sin(\omega_c \Delta t) + U_{y0} (\cos \varphi)^2 (\cos(\omega_c \Delta t) - 1) + U_{z0} \sin \varphi \cos \varphi (1 - \cos(\omega_c \Delta t)) + \frac{E}{B} \sin \varphi \cos \varphi (\omega_c \Delta t - \sin(\omega_c \Delta t)) + U_{y0}$$

En insérant l'équation (3.6) dans l'équation (3.2c), et en appliquant (l'intégrale) sur l'équation résultante par rapport au temps.

On obtient la relation suivante :

$$U_{z1} = -U_{z0} \sin \varphi \sin(\omega_c \Delta t) - U_{y0} \sin \varphi \cos \varphi \cos(\omega_c \Delta t) + U_{z0} (\sin \varphi)^2 \cos(\omega_c \Delta t) + \frac{E}{B} (\sin \varphi)^2 (\sin(\omega_c \Delta t) - \omega_c \Delta t) + \omega_c \frac{E}{B} \Delta t + K'$$

Ou  $K'$  : est une constante d'intégration, à partir de la condition initiale on trouve que  $K' = U_{z0} - U_{z0} (\sin \varphi)^2 + U_{y0} \sin \varphi \cos \varphi$ . Finalement on trouve l'équation suivante:

$$U_{z1} = -U_{z0} \sin \varphi \sin(\omega_c \Delta t) + U_{y0} \sin \varphi \cos \varphi (1 - \cos(\omega_c \Delta t)) + U_{z0} (\sin \varphi)^2 (\cos(\omega_c \Delta t) - 1) + \frac{E}{B} (\sin \varphi)^2 (\sin(\omega_c \Delta t) - \omega_c \Delta t) + \omega_c \frac{E}{B} \Delta t + U_{z0} \quad (3.8)$$

En appliquant (l'intégrale) sur les vitesses ( $U_{x1}$ ,  $U_{y1}$  et  $U_{z1}$ ), on obtient les coordonnées de la position d'un électron ( $x_1$ ,  $y_1$  et  $z_1$ ). On écrit :

$$x_1 = \frac{U_{x0}}{\omega_c} \sin(\omega_c \Delta t) + \frac{U_{y0}}{\omega_c} \cos \varphi (\cos(\omega_c \Delta t) - 1) + \frac{U_{z0}}{\omega_c} \sin \varphi (1 - \cos(\omega_c \Delta t)) + \frac{E}{B \omega_c} \sin \varphi (\omega_c \Delta t - \sin(\omega_c \Delta t)) + x_0 \quad (3.9)$$

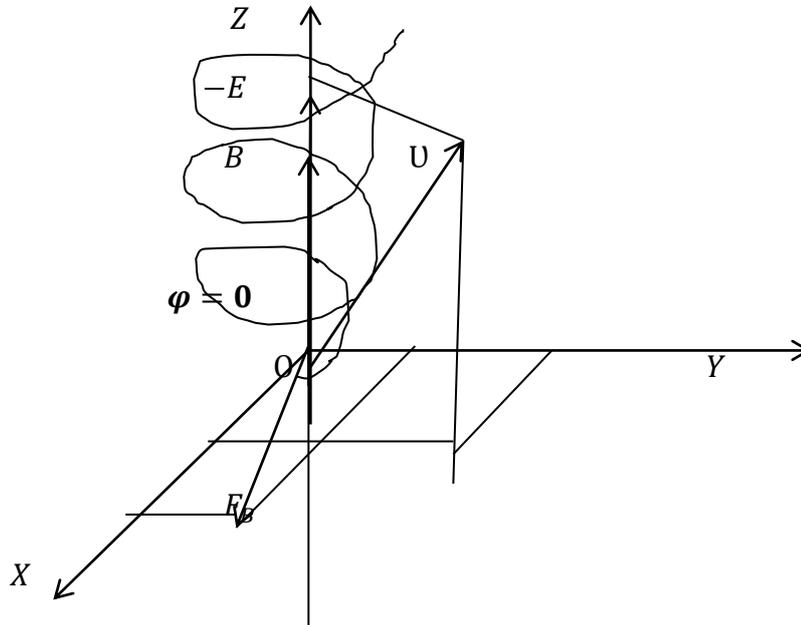
$$y_1 = \frac{U_{x0}}{\omega_c} \cos \varphi (1 - \cos(\omega_c \Delta t)) + \frac{U_{y0}}{\omega_c} (\cos \varphi)^2 (\sin(\omega_c \Delta t) - \omega_c \Delta t) - \frac{U_{z0}}{\omega_c} \sin \varphi \cos \varphi (\omega_c \Delta t \sin(\omega_c \Delta t)) + \frac{E}{B \omega_c} \sin \varphi \cos \varphi (\cos(\omega_c \Delta t) - 1) + U_{y0} \Delta t + y_0 \quad (3.10)$$

$$z_1 = \frac{U_{x0}}{\omega_c} \sin \varphi (\cos(\omega_c \Delta t) - 1) + \frac{U_{y0}}{\omega_c} \sin \varphi \cos \varphi (\omega_c \Delta t - \sin(\omega_c \Delta t)) + \frac{U_{z0}}{\omega_c} (\sin \varphi)^2 (\sin(\omega_c \Delta t) - \omega_c \Delta t) + \frac{E}{B \omega_c} (\sin \varphi)^2 (1 - \cos(\omega_c \Delta t)) - \omega_c^2 \frac{(\Delta t)^2}{2} + \omega_c \frac{E}{B} \frac{(\Delta t)^2}{2} + U_{z0} \Delta t + z_0 \quad (3.11)$$

Ou ( $x_0$ ,  $y_0$ ,  $z_0$ ) sont les coordonnées de la position à l' instant initial de la collision  $t_0$  .

➤ **Cas d'un champ magnétique longitudinal ( $\vec{E} // \vec{B}$ ) :**

Dans ce cas le champ magnétique, est parallèle à l'axe ( $Oz$ ), ça veut dire que l'angle ( $\varphi$ ) entre le champ électrique et le champ magnétique est nul ( $\varphi = 0$ ).



**Figure 3.3 :** Cas d'un champ magnétique longitudinal

On remplace l'angle ( $\varphi = 0$ ) dans les équations de la vitesse (3.6), (3.7) et (3.8), et dans les équations de la position (3.9), (3.10) et (3.11) d'un électron.

Les composantes de la vitesse  $U_1$  :

$$\begin{cases} U_{x1} = U_{x0} \cos(\omega_c \Delta t) - U_{y0} \sin(\omega_c \Delta t) \\ U_{y1} = U_{x0} \sin(\omega_c \Delta t) + U_{y0} \cos(\omega_c \Delta t) \\ U_{z1} = U_{z0} + a_z \Delta t \end{cases} \quad (3.12)$$

Ou  $a_z = \omega_c \frac{E}{B}$  est l'accélération de l'électron suivant l'axe ( $OZ$ ).

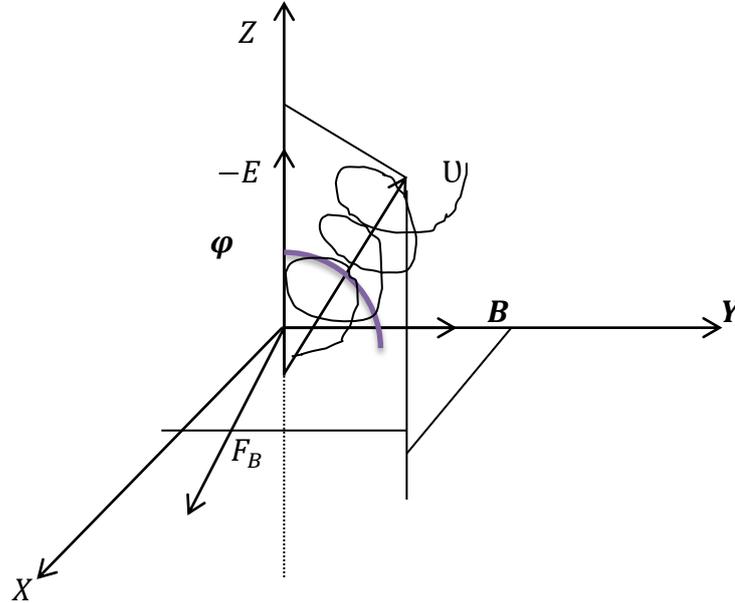
Les composantes de la position  $r_1$  :

$$\begin{cases} x_1 = x_0 + \frac{1}{\omega_c} (U_{x0} \sin(\omega_c \Delta t) + U_{y0} (\cos(\omega_c \Delta t) - 1)) \\ y_1 = y_0 + \frac{1}{\omega_c} (-U_{x0} (\cos(\omega_c \Delta t) - 1) + U_{y0} \sin(\omega_c \Delta t)) \\ z_1 = z_0 + U_{z0} \Delta t + \frac{1}{2} a_z \Delta t^2 \end{cases} \quad (3.13)$$

Si le champ électrique est nul ( $E = 0$ ), le module de la vitesse devient constant. Dans ce cas, le mouvement de l'électron est uniforme (car la force magnétique est négligeable).

➤ **Cas d'un champ magnétique transversal ( $\vec{E} \perp \vec{B}$ ) :**

Comme le champ magnétique est parallèle à l'axe ( $Oy$ ), l'angle entre le champ électrique et le champ magnétique  $\varphi = \frac{\pi}{2}$ .



**Figure 3.4 :** Cas d'un champ magnétique transversal

De même façon, on remplace l'angle ( $\varphi = \frac{\pi}{2}$ ) dans les équations de la vitesse (3.6), (3.7) et (3.8), et dans les équations de la position (3.9), (3.10) et (3.11) d'un électron.

Les composantes de la vitesse  $U_1$  :

$$\begin{cases} U_{x1} = U_{x0} \cos(\omega_c \Delta t) + U_{z0} \sin(\omega_c \Delta t) + \frac{E}{B} (1 - \cos(\omega_c \Delta t)) \\ U_{y1} = U_{y0} \\ U_{z1} = -U_{x0} \sin(\omega_c \Delta t) + U_{z0} \cos(\omega_c \Delta t) + \frac{E}{B} \sin(\omega_c \Delta t) \end{cases} \quad (3.14)$$

Les composantes de la position  $r_1$  :

$$\begin{cases} x_1 = x_0 + \frac{U_{x0}}{\omega_c} \sin(\omega_c \Delta t) + \frac{U_{z0}}{\omega_c} (1 - \cos(\omega_c \Delta t)) - \frac{E}{B\omega_c} \sin(\omega_c \Delta t) + \frac{E}{B} \Delta t \\ y_1 = y_0 + U_{y0} \Delta t \\ z_1 = z_0 + \frac{U_{x0}}{\omega_c} (\cos(\omega_c \Delta t) - 1) + \frac{U_{z0}}{\omega_c} \sin(\omega_c \Delta t) - \frac{E}{B\omega_c} (\cos(\omega_c \Delta t) - 1) \end{cases} \quad (3.15)$$

On remarque, que le module de la vitesse  $U_1$  à l'instant  $t_1$  de la collision influencée par la présence d'un champ magnétique. Dans le cas d'un champ magnétique longitudinal seulement les composantes de la position  $r_1$  sont influencées par la présence d'un champ magnétique, ce qui aura pour conséquence, un effet sur les coefficients de diffusion électronique. La méthode de monte Carlo utilisée dans notre étude (simulation), est basée sur la connaissance de la vitesse et la trajectoire de chaque électron à tout instant et en tout point de l'espace des positions, qui sont déterminées à partir de la résolution des équations du mouvement (la loi fondamentale de dynamique), le calcul a été explicite dans ce chapitre.

# CHAPITRE 4

## LA METHODE DE SIMULATION MONTE CARLO

## 1) Introduction :

La simulation de Monte Carlo (SMC) peut être décrite globalement comme une méthode numérique, qui utilise le tirage de nombres aléatoires et les distributions de probabilités. Elle est très utilisée dans de nombreux domaines, en particulier en physique statistique, physique nucléaire et physique médicale. Par ailleurs, elle connait des variantes en traitement du signal sous l'appellation d'algorithmes d'approximation stochastique, et en optimisant la célèbre méthode du « recuit simulé ».

Dans les plasmas non-thermique (hors équilibre thermodynamique) la résolution de l'équation de Boltzmann est très difficile analytiquement, ou numériquement, cela justifie l'utilisation de la méthode Monte Carlo à cause de sa simplicité et sa précision. L'objectif de ce chapitre est de présenter la simulation de Monte Carlo pour calculer les coefficients de transports d'électrons soumis à un champ électrique et/ou magnétique uniforme, dans un gaz faiblement ionisé.

## 2) Principe de la méthode de Monte Carlo :

La mise en œuvre de la méthode de Monte Carlo : c'est l'étude du transport électronique, dans un gaz faiblement ionisé sous l'action de forces extérieures électriques et magnétiques, qui nécessite à déterminer la trajectoire de chaque électron (ainsi que celle de l'électron issu d'ionisation).

Les équations classiques du mouvement sont utilisées pendant la période de vol libre  $t_{vol}$ , entre deux collisions, tandis que la position  $r$  (ou l'instant), la nature des collisions (élastique, d'ionisation, d'excitation et d'attachement dans notre cas), ainsi que la variation de vitesse au cours de la collision, ou la répartition d'énergie entre les deux électrons issus d'une ionisation, sont choisies par des méthodes stochastiques, tenant compte des sections efficaces de collision totales et différentielles. Ainsi les positions successives des collisions sont déterminées à l'aide des nombres aléatoires générés par un ordinateur, et dont la loi de probabilité est liée à la section efficace totale de collision électron-molécule.

## 3) Le modèle simulation de Monte Carlo :

Dans le cas de notre simulation, les électrons sont accélérés par le champ électrique, et/ou magnétique uniforme, ce qui permet de gagner l'énergie, ces électrons vont rentrer en collision avec les molécules de gaz, y compris des collisions élastiques, et inélastiques (l'ionisation, l'excitation et l'attachement) pour produire d'autres électrons et particules. Ces processus (les collisions) sont aléatoires, et la méthode de Monte Carlo est utilisée pour décrire ces processus, elle permet ainsi de suivre l'évolution temporelle d'un certain nombre (par exemple 1000) des électrons dans l'espace des phases.

Cet état de mouvement d'électrons est simulé, et enregistré dans une statistique précise jusqu'à ce que toute son énergie sera cédée aux molécules du gaz. La simulation est faite comme suite :

### 3.1) Génération des nombres aléatoires :

La méthode de simulation du processus stochastiques ((Monte Carlo), utilise des nombres aléatoires pour simuler des événements, dont la distribution de probabilité est connue. Ces nombres aléatoires sont obtenus à partir d'un algorithme mathématique bien précis, qui permet de créer une séquence de nombres réels compris entre 0 et 1. Cette séquence est simulée à une suite  $\{R_i\}$  de nombres pseudo-aléatoires qui sont uniformément dans l'intervalle  $[0,1]$ . A partir de cette suite, on peut déduire des suites de nombres aléatoires de distribution quelconque sur l'intervalle  $[a, b]$ . On peut générer le nombre pseudo-aléatoires par plusieurs algorithmes. A partir de ce travail, nous avons utilisé la fonction *Fortran Rand* (random-number) basée sur la technique de congruences multiplicatives. Il est à noter que cette technique nécessite la fixation arbitraire d'un nombre entier, appelé *germe*, et qu'à ce *germe* correspond une séquence de nombres aléatoires. Tout changement de cette séquence nécessite un changement de *germe* initial.

### 3.2) Génération des électrons primaires :

A un instant  $t = 0$ , un faisceau initial de  $n_0$  électrons primaires de distribution dans l'espace des phases  $(r, U)$  connue, ces électrons sont envoyés à un gaz faiblement ionisé. Les composantes de la vitesse et la position avant la collision sont données, pour chaque électron, par les relations suivantes [4] :

$$\begin{cases} U_{x0} = U_0 \sin \theta_0 \cos \varphi_0 \\ U_{y0} = U_0 \cos \theta_0 \sin \varphi_0 \\ U_{z0} = U_0 \cos \theta_0 \end{cases} \quad \text{et} \quad \begin{cases} x_0 = 0 \\ y_0 = 0 \\ z_0 = 0 \end{cases} \quad (4.1)$$

La quantité physique  $U_0$  est donnée par l'expression suivante :

$$U_0 = \sqrt{2\varepsilon_0 \frac{e}{m_e}} \quad (4.2)$$

Où  $\varepsilon_0$  représente l'énergie de l'électron avant la collision (l'énergie initial),  $e$  et  $m_e$  sont respectivement la charge et la masse d'électron.

L'angle de déviation  $\theta_0$  et l'angle d'azimutal  $\varphi_0$  sont choisis aléatoirement, pour chaque électron suivant une distribution sinusoidale. On écrit :

$$\cos(\theta_0) = 1 - 2R_\theta \quad \text{et} \quad \varphi_0 = 2\pi R_\varphi \quad (4.3)$$

Dans notre programme Fortran on prend :  $\theta_0 = \frac{\pi}{2} R_\theta$

Ou  $R_\theta$  et  $R_\varphi$  sont des nombres aléatoires choisis uniformément entre 0 et 1.

### 3.3) Calcul du temps de vol libre :

Nous venons de voir qu'à un instant initial  $t_0$ ,  $n_0$  les électrons primaires sont libres dans un gaz faiblement ionisé, puis évoluent en effectuant des collisions avec les particules du gaz sous l'action des forces électriques et /ou magnétiques extérieures. Chaque électron suit une trajectoire déterministe entre deux collisions successives à l'instant  $t_{vol}$  (ou le temps de vol libre  $t_{vol} = t_1 - t_0$ ). Pour déterminer le temps du vol libre, il faut introduire la fréquence de collision totale. Cette fréquence est une fonction généralement compliquée de l'énergie cinétique, on ne peut pas être résolue analytiquement dans la plupart des cas. Cela nécessite un calcul numérique, pour cette raison on utilise la méthode des collisions nulles (ou collisions fictives). On introduit un nouveau type de collision tel que l'électron ne change ni de direction, ni du module de la vitesse, dont la section efficace est choisie de manière telle que la fréquence totale de collision soit constante.

Cette nouvelle fréquence totale de collision  $\mathcal{V}_{tot}$  est alors définie par :

$$\mathcal{V}_{tot}(\mathcal{E}) = \max \left( \left( \frac{2\mathcal{E}}{m_e} \right)^{1/2} \sum_{i=1}^m N_i(r) \sigma_i(\mathcal{E}) \right) \quad (4.4)$$

D'où la somme est faite autour chaque processus de collision  $i$ ,  $\sigma_i(\mathcal{E})$  représente la section efficace  $N_i(r)$  la densité du gaz  $G_i$  et  $\mathcal{E}$  : l'énergie de la particule projectile

A partir de l'équation (4.2), la probabilité de la collision, après un temps du vol  $t_{vol}$ , est exprimée par la relation suivante [8] :

$$1 - P(t_{vol}) = 1 - \exp \left( - \int_0^{t_{vol}} \mathcal{V}_{tot}(\mathcal{E}) dt \right) \quad (4.5)$$

Pour déterminer le temps du vol, il faut introduire la notion de collision nulle (la fréquence totale de collision est toujours constante quel que soit l'énergie). On applique l'intégration de l'équation (4.9), d'où on conclut l'expression finale du temps entre deux collisions successives (le temps du vol libre) [10]. On écrit :

$$t_{vol} = - \frac{\ln(1-R_{vol})}{\mathcal{V}_{tot}} \quad (4.6)$$

Ou  $R_{vol}$  est un élément d'un ensemble de nombres aléatoires uniformément distribués entre 0 et 1. On a le nombre aléatoire  $R_{vol} \in [0,1]$ , donc on déduit que  $(1 - R_{vol}) \in [1,0]$ . Dans ce cas la formule est la suivante :

$$t_{vol} = - \frac{1}{\mathcal{V}_{tot}} \ln R_{vol} \quad (4.7)$$

### 3.4) Les équations du mouvement de l'électron :

Les mouvements de l'électron entre deux collisions successives, sont influencés par des forces d'origine extérieure électrique et/ou magnétique (les champs électrique et magnétique sont uniformes). Et sont Appliqués sur le gaz faiblement ionisé (voir le chapitre 3). Dans notre simulation on prend trois cas de ces forces :

- Cas d'un champ électrique anti-parallèle à l'axe  $Oz$  et un champ magnétique nul après un temps de vol initial ( $\Delta t = t_{vol}$ ). Les nouvelles composantes de la vitesse sont données par :

$$\begin{cases} U_{x1} = U_{x0} \\ U_{y1} = U_{y0} \\ U_{z1} = U_{z0} + a_z \cdot \Delta t \end{cases} \quad (4.8)$$

Les nouvelles positions s'écrivent comme suite :

$$\begin{cases} x_1 = x_0 + U_{x0} \cdot \Delta t \\ y_1 = y_0 + U_{y0} \cdot \Delta t \\ z_1 = z_0 + U_{z0} \cdot \Delta t + \frac{1}{2} a_z \cdot \Delta t^2 \end{cases} \quad (4.9)$$

Avec  $a_z = \frac{e}{m_e} E$ , et  $\Delta t = t_1 - t_0$  dans notre cas

- 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 vitesses comme suit :

$$\begin{cases} U_{x1} = U_{x0} \cos(\omega_c \Delta t) - U_{y0} \sin(\omega_c \Delta t) \\ U_{y1} = U_{x0} \sin(\omega_c \Delta t) + U_{y0} \cos(\omega_c \Delta t) \\ U_{z1} = U_{z0} + a_z \Delta t \end{cases} \quad (4.10)$$

Les nouvelles positions sont tel que :

$$\begin{cases} x_1 = x_0 + \frac{1}{\omega_c} (U_{x0} \sin(\omega_c \Delta t) + U_{y0} (\cos(\omega_c \Delta t) - 1)) \\ y_1 = y_0 + \frac{1}{\omega_c} (-U_{x0} (\cos(\omega_c \Delta t) - 1) + U_{y0} \sin(\omega_c \Delta t)) \\ z_1 = z_0 + U_{z0} \Delta t + \frac{1}{2} a_z \Delta t^2 \end{cases} \quad (4.11)$$

Ou  $a_z = \omega_c \frac{E}{B}$  est l'accélération de l'électron suivant l'axe ( $OZ$ ).

- Cas d'un champ électrique anti-parallèle à l'axe  $Oz$  et un champ magnétique transversal (parallèle a  $Oy$ ), les composantes de la vitesse sont données par :

$$\begin{cases} U_{x1} = U_{x0} \cos(\omega_c \Delta t) + U_{z0} \sin(\omega_c \Delta t) + \frac{E}{B} (1 - \cos(\omega_c \Delta t)) \\ U_{y1} = U_{y0} \\ U_{z1} = -U_{x0} \sin(\omega_c \Delta t) + U_{z0} \cos(\omega_c \Delta t) + \frac{E}{B} \sin(\omega_c \Delta t) \end{cases} \quad (4.12)$$

Les nouvelles positions sont comme suit (4.17) :

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

### 3.5) Les probabilités et la nature de collision :

Dans un gaz faiblement ionisé soumis à un champ électrique et/ou magnétique uniformes, les électrons en mouvement entrent en collision avec les atomes et les ions. Le processus de chaque collision, est proportionnel à la distribution de fréquence totale de collision  $\mathcal{V}_{tot}$ . Pour cela on écrit [14] :

$$\mathcal{V}_{tot} = \mathcal{V}_{el}(\mathcal{E}_c) + \mathcal{V}_{ex}(\mathcal{E}_c) + \mathcal{V}_{ion}(\mathcal{E}_c) + \mathcal{V}_{att}(\mathcal{E}_c) + \mathcal{V}_{fic}(\mathcal{E}_c) \quad (4.13)$$

Avec:

$\mathcal{V}_{el}(\mathcal{E}_c)$ : La fréquence de collision élastique,  $\mathcal{V}_{ex}(\mathcal{E}_c)$ : la fréquence d'excitation,  $\mathcal{V}_{ion}(\mathcal{E}_c)$ : la fréquence d'ionisation,  $\mathcal{V}_{att}(\mathcal{E}_c)$ : la fréquence d'attachement,  $\mathcal{V}_{fic}(\mathcal{E}_c)$ : la fréquence de la collision fictive (nulle), et  $\mathcal{E}_c$ : l'énergie cinétique de la particule avant la collision.

On suppose que les collisions électron-molécule possibles sont : les collisions élastiques, l'excitation, l'ionisation et l'attachement, les probabilités de collision correspondantes s'écrivent :

$$p_{el} = \frac{\mathcal{V}_{el}(\mathcal{E}_c)}{\mathcal{V}_{tot}}, p_{ex} = \frac{\mathcal{V}_{ex}(\mathcal{E}_c)}{\mathcal{V}_{tot}}, p_{ion} = \frac{\mathcal{V}_{ion}(\mathcal{E}_c)}{\mathcal{V}_{tot}}, p_{att} = \frac{\mathcal{V}_{att}(\mathcal{E}_c)}{\mathcal{V}_{tot}} \text{ et } p_{fic} = 1 - \sum p_{reel}$$

Pour déterminer la nature de collision, il faut d'abord tirer un nombre aléatoire  $R_{col}$  uniformément distribuée sur  $[0,1]$ , et en le comparant aux différentes probabilités de collision. Donc la fraction de probabilité de chaque type de collision  $p_j$  est donnée par :

$$p_j = \frac{\mathcal{V}_j(\mathcal{E}_c)}{\mathcal{V}_{tot}} \quad (4.14)$$

Avec :

$$\begin{cases} 0 \leq R_{col} < \frac{\mathcal{V}_1}{\mathcal{V}_{tot}} & \text{collision de type 1} \\ \frac{\mathcal{V}_1}{\mathcal{V}_{tot}} \leq R_{col} < \frac{\mathcal{V}_1 + \mathcal{V}_2}{\mathcal{V}_{tot}} & \text{collision de type 2} \\ \frac{\sum_j^N \mathcal{V}_j}{\mathcal{V}_{tot}} & \text{collision nulle} \end{cases} \quad (4.15)$$

### 3.6) Traitement de collision :

On connaît l'énergie, et les composantes du vecteur vitesse juste avant la collision, et on connaît également l'instant de la collision et la nature de la collision. Le problème maintenant est de déterminer l'énergie et la vitesse (le module et la direction) de l'électron juste après la collision.

➤ **Détermination de l'angle déviation et l'angle azimutal :**

Dans le cas où une collision se produira, l'électron sera diffusé par un angle  $(\chi, \psi)$ . Dans notre simulation, on suppose que l'angle azimutal  $\psi$  suive une distribution uniforme entre 0 et  $2\pi$ , ainsi l'angle de déviation  $\chi$  (l'angle polaire) entre 0 et  $\pi$ . On suppose que la direction de l'électron après la collision suit une distribution isotrope, c'est-à-dire que la probabilité de la diffusion de l'électron est uniformément distribuée dans tous les directions. La probabilité de la diffusion de l'électron après la collision est  $P(\chi, \psi)d\chi d\psi$  [17].

$$P(\chi, \psi)d\chi d\psi = \frac{d\Omega}{4\pi} \quad (4.16)$$

Avec  $d\Omega$  : l'angle solide élémentaire  $d\Omega = \sin \chi d\chi d\psi$

On trouve :

$$P(\chi, \psi) = \frac{\sin \chi}{4\pi} \quad (4.17)$$

Les densités de probabilité pour  $\chi$  et  $\psi$  sont obtenues par :

$$P(\chi) = \int_0^{2\pi} P(\chi, \psi) d\psi = \frac{\sin \chi}{2} \quad (4.18)$$

$$P(\psi) \rho = \int_0^{\pi} P(\chi, \psi) d\chi = \frac{1}{2\pi} \quad (4.19)$$

Pour trouver l'angle de déviation  $\chi$  et l'angle azimutal  $\psi$ , on va introduire deux nombre aléatoires  $R_\chi$  et  $R_\psi$  uniformément distribués dans l'intervalle  $[0,1]$ .

L'angle déviation  $\chi$  est donné par :

$$R_\chi = \int_0^\chi P(\chi) d\chi \quad (4.20)$$

Après intégration on trouve :

$$\cos \chi = 1 - 2R_\chi \quad (4.21)$$

L'angle azimutale  $\psi$  est donné par :

$$R_\psi = \int_0^\psi P(\psi) d\psi \quad (4.22)$$

Après l'intégration on déduit :

$$\psi = 2\pi R_\psi \quad (4.23)$$

Une fois on détermine l'angle de déviation, et l'angle azimutal  $\psi$  de l'électron après collision. On est amené à trouver le module de la vitesse de l'électron après la collision.

➤ **Détermination de la Vitesse après la collision :**

Avant le choc, la vitesse de l'électron (le projectile) est obtenue à partir de l'équation de la mécanique classique, tenant compte de l'accélération de l'électron par le champ électrique et magnétique.

Juste après le choc, dans le cas de collision fictive, les vitesses des électrons et des molécules seront inchangées, ils continuent leur mouvement dans la même trajectoire. En revanche, dans le cas d'une collision réelle, les vitesses des électrons, et de la molécule après le choc dépendent du type de collision effectuée. Pour déterminer cette vitesse on commence par écrire l'équation de la conservation de la quantité de mouvement dans le repère de laboratoire [8].

$$m_e \vec{V}_e + M \vec{V}_M = m_e \vec{V}'_e + M \vec{V}'_M \quad (4.24)$$

Ou  $m_e, V_e$  : sont la masse et la vitesse de l'électron (le projectile).  $M, V_M$  : Sont la masse et la vitesse de la molécule (la cible). et  $V'_e, V'_M$  : sont respectivement la vitesse de l'électron et de la molécule juste après la collision [10].

La vitesse de chaque électron et de chaque molécule après la collision (voir la figure 4-1), dans le cas où il y a un choc élastique peuvent s'écrire comme suite :

$$\vec{V}'_e = \frac{m_e}{m_e+M} \vec{V}_e + \frac{M}{m_e+M} \vec{V}_M + \frac{M}{m_e+M} \vec{V}'_r \quad (4.25)$$

$$\vec{V}'_M = \frac{m_e}{m_e+M} \vec{V}_e + \frac{M}{m_e+M} \vec{V}_M - \frac{m_e}{m_e+M} \vec{V}'_r \quad (4.26)$$

Ou  $V'_r$  est la vitesse relative après la collision (voir le chapitre 2). Avant la collision s'écrit  $\vec{V}'_r = \vec{V}_e - \vec{V}_M$ .

Les angles de déviation et azimutal ( $\chi, \psi$ ) reperent le vecteur vitesse relative  $V'_r$  dans le centre de masse. Ils sont donnés par les relations suivantes [9] :

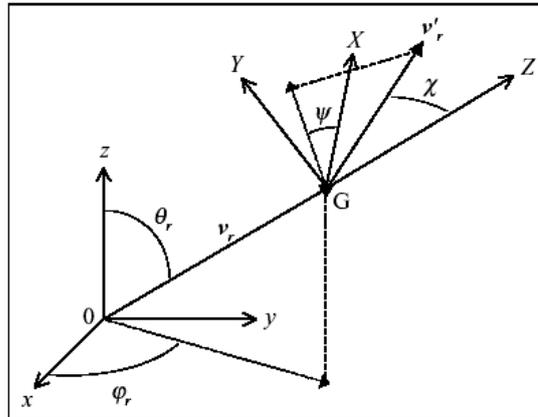
$$\chi = \arccos[1 - 2R_\chi] \quad (4.27)$$

$$\psi = 2\pi R_\psi \quad (4.28)$$

De plus, on définit  $\theta_r$  et  $\varphi_r$  comme étant les angles de déviation et azimutal reperant le vecteur vitesse relative  $V_r$  dans le référentiel du laboratoire :

$$\theta_r = \arccos \left[ \frac{V_{zr}}{V_r} \right] \quad (4.29)$$

$$\varphi_r = \arccos \left[ \frac{V_{xr}}{V_r \sin \theta_r} \right] \quad (4.30)$$



**Figure 4-1** : Représentation schématique de la vitesse relative avant et après la collision dans les référentiels du laboratoire (x, y, z) et du centre de masse (x', y', z')

Sachant que, pour une collision élastique, le module de la vitesse relative se conserve, Ses composantes cartésiennes après la collision [9]. On écrit (4.36) :

$$\begin{cases} V'_{xr} = V_r (\sin \chi \cos \psi \sin \varphi_r + \sin \chi \sin \psi \cos \theta_r \cos \varphi_r + \cos \chi \sin \theta_r \cos \varphi_r) \\ V'_{yr} = V_r (-\sin \chi \cos \psi \cos \varphi_r + \sin \chi \sin \psi \cos \theta_r \sin \varphi_r + \cos \chi \sin \theta_r \sin \varphi_r) \\ V'_{zr} = V_r (-\sin \chi \sin \psi \sin \theta_r + \cos \chi \cos \theta_r) \end{cases}$$

Dans le cas où la collision est inélastique, la perte d'énergie de l'électron est supposée uniformément répartie sur les trois composantes de vitesse. Si  $\eta$  représente le facteur de perte en vitesse, et si  $\Delta \mathcal{E}$  est l'énergie perdue durant la collision, alors la nouvelle vitesse avant la déviation [10], s'écrit comme suit :

$$\vec{V}_{ee} = \eta \vec{V}_e \quad (4.31)$$

$V_{ee}$  La nouvelle vitesse de l'électron avant la déviation dans le repère du centre de masse avec :

$$\eta = \sqrt{1 - \frac{2\Delta \mathcal{E}}{m_e V_e^2}} \quad (4.32)$$

➤ **Détermination de l'énergie après la collision :**

• **Collision élastique :**

Par définition lors d'une collision élastique, les particules qui entrent en collision ne changent pas de l'état interne, les particules vont subir uniquement une déviation avec un échange d'une quantité de mouvement, et de l'énergie cinétique.

Dans le cas où la molécule ciblée est supposée être en repos avant la collision, il est possible de relier la fraction d'énergie conservée par l'électron incidente lors du choc, à l'angle de déviation. Alors la relation est la suivante [8] :

$$\frac{\mathcal{E}'_e}{\mathcal{E}_e} = 1 + \frac{2m_e M}{(m_e + M)^2} (\cos \chi - 1) \quad (4.33)$$

Car la masse de l'électron est très petite devant la masse de la molécule ( $\frac{m_e}{M} \ll 1$ ), ce rapport s'écrit alors :

$$\frac{\mathcal{E}'_e}{\mathcal{E}_e} = 1 + 2 \frac{m_e}{M} (\cos \chi - 1) \quad (4.34)$$

Avec :

$\mathcal{E}_e$  : L'énergie de l'électron juste avant la collision

$\mathcal{E}'_e$  : L'énergie de l'électron juste après la collision

- **collision inélastique :**

C'est une collision au cours de laquelle l'énergie cinétique de l'un des deux particules (électron ou ion), est transformée totalement ou partiellement en énergie interne. Donc la structure interne de la particule se modifie. Contrairement aux collisions élastiques, les collisions inélastiques nécessitent un seuil d'énergie. Dans notre programme on prend trois cas de collisions inélastiques.

- **L'excitation :**

Sous l'impact d'un électron, la molécule est excitée, c'est-à-dire un électron de cortège électronique de la molécule passe d'un niveau inférieur à un niveau supérieur. L'électron cède donc une partie ou la totalité de son énergie à la molécule. Cette énergie perdue correspond au seuil d'excitation  $\mathcal{E}_{pert}$ . L'énergie de l'électron juste après le choc se calcule par la relation suivante :

$$\mathcal{E}'_e = \mathcal{E}_e - \mathcal{E}_{pert}$$

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

$$V'_e = \left[ V_e^2 - \frac{2\mathcal{E}_{pert}}{m_e} \right]^{1/2} \quad (4.35)$$

- **L'ionisation :**

L'ionisation est un processus majeur pour le maintien de la décharge électrique. Lorsqu'un électron incident possède une énergie cinétique  $\mathcal{E}_e$  supérieure ou égale à l'énergie de liaison de l'électron de la molécule  $\mathcal{E}_{ion}$  (seuil d'ionisation), on dit que cette molécule a été ionisée. L'énergie résiduelle  $\mathcal{E}_e - \mathcal{E}_{ion}$  est supposée équirépartie entre

l'électron primaire (de la vitesse  $V_{primaire}$  et d'énergie  $\mathcal{E}_{primaire}$ ), et l'électron éjecté (de la vitesse  $V_{éjecté}$  d'énergie  $\mathcal{E}_{éjecté}$ ). Ces deux électrons sont indéfendables.

Pour déterminer  $V_{primaire}$  ou  $\mathcal{E}_{primaire}$  et  $V_{éjecté}$  ou  $\mathcal{E}_{éjecté}$ , on suppose que la section efficace différentielle d'ionisation est isotrope (constante). Dans ce cas, les énergies  $\mathcal{E}_{primaire}$  et  $\mathcal{E}_{éjecté}$ , sont calculées à partir d'un tirage d'un nombre aléatoire  $R_{ion}$  distribuées uniformément sur  $[0,1]$ . On s'écrit [5] :

$$\mathcal{E}_{primaire} = R_{ion}(\mathcal{E}'_e - \mathcal{E}_{ion}) \quad (4.36)$$

$$\mathcal{E}_{éjecté} = (1 - R_{ion}) \times (\mathcal{E}'_e - \mathcal{E}_{ion}) \quad (4.37)$$

Avec :

$$R_{ion} = \frac{\int_0^{\mathcal{E}'_e} \sigma(\mathcal{E}_e, \mathcal{E}) d\mathcal{E}}{\sigma_{ion}(\mathcal{E}_e)}$$

Où  $\sigma_{ion}(\mathcal{E}_e)$  représente la section efficace totale d'ionisation, et  $\sigma(\mathcal{E}_e, \mathcal{E})$  : la section efficace différentielle d'ionisation.

○ **L'attachement :**

Ce sont les gaz moléculaires ayant cette tendance, sont ceux qui possèdent un ou deux électrons dans leur couche externe, et ils sont appelés gaz électronégatifs ( $O^-$ ,  $Cl^-$ ,  $F^-$  ...). Dans ce cas, l'électron s'attache à la molécule, celui-ci mène l'électron à perdre toute son énergie, par conséquent sa disparition ( $\mathcal{E}'_e = 0$ ). La simulation continue avec un nouveau électron d'essai, les électrons secondaires sont aussi prisent en compte.

➤ **Calcul des paramètres de transport :**

Connaissant la nature de la collision et le mouvement d'électron après le choc, il ne reste plus qu'à échantillonner un certain nombre de grandeurs physiques, permettant de calculer les fonctions de distribution, et les paramètres de transport.

La simulation par la méthode de Monte Carlo utilise seulement les lois de probabilités, et les formules physiques des paramètres de transport (les lois de la mécanique classique). Le champ électrique et/ou magnétique influe directement sur le mouvement des particules (les électrons et les molécules), alors ils influencent sur les composantes du vecteur de la vitesse et de la position.

Pour la fonction de distribution d'un essaim d'électrons, on utilise la fonction de distribution d'énergie d'électron  $f_{e0}$ , elle est définie par la fraction locale des électrons dans l'espace de phase d'énergie  $\mathcal{E}$  et du temps  $t$  [12] :

$$f(t, \mathcal{E}) \mathcal{E}^{1/2} d\mathcal{E} \quad (4.38)$$

Cette équation est utilisé pour calcule les fréquences d'ionisation moyenne, et la fréquence d'attachement moyenne. La fréquence d'ionisation, et la fréquence d'attachement données par les relations suivantes :

$$\mathcal{V}_{ion} = N_{gaz}\sigma_{ion} \langle U \rangle \quad (4.39)$$

Ou  $\mathcal{V}_{ion}$  la fréquence d'ionisation,  $N_{gaz}$  la densité du gaz,  $\sigma_{ion}$  la section efficace d'ionisation, et  $\langle U \rangle$  représente la vitesse moyenne des particules.

$$\mathcal{V}_{att} = N_{gaz}\sigma_{att} \langle U \rangle \quad (4.40)$$

Ou  $\mathcal{V}_{att}$  la fréquence d'attachement, et la section efficace d'attachement.

A partir de la moyenne des positions  $\langle z \rangle$ , on peut déterminer les différents paramètres de transport : l'énergie moyenne des électrons la vitesse de dérive, les coefficients de diffusion, les coefficients et les fréquences d'ionisation et d'attachement

**a) Energie moyenne :**

$$\langle \mathcal{E} \rangle = \frac{1}{N_e N_{coll}} \sum_{i=1}^{N_e} \sum_{j=1}^{N_{coll}} \mathcal{E}_{ij} \quad (4.41)$$

Ou  $N_e$  : le nombre totale d'électrons

$N_{coll}$ : Le nombre total de collisions.

**b) Vitesse de dérive :** La vitesse de dérive est calculée tel que la vitesse moyenne des vitesses de chaque électron, lorsque l'avalanche électronique se produit [13] :

$$W = \frac{d\langle z \rangle}{dt} \quad (4.42)$$

On peut écrire  $\langle z \rangle$  comme suit :

$$d \langle z \rangle = \frac{1}{n_e} \sum_{i=1}^{n_e} z_i \quad (4.43)$$

Ou  $n_e$  est le nombre d'électrons parcouru les distances  $z_i$ .

La vitesse de dérive s'écrit alors :

$$W = \frac{1}{dt} \left( \frac{1}{n_e} \sum_{i=1}^{n_e} z_i \right) \quad (4.44)$$

On peut écrire la vitesse de dérive dans une autre forme :

$$\langle V_z \rangle = \frac{\langle z \rangle}{t_{max}} \quad (4.45)$$

Ou  $t_{max}$  représente le temps maximum de la collision.

Donc :

$$\langle V_z \rangle = \frac{1}{t_{max}} \left( \frac{1}{n_e} \sum_{i=1}^{n_e} z_i \right) \quad (4.46)$$

**c)-coefficient de diffusion transversal :**

Les coefficients de diffusion transversal s'écrivent sous la forme [13] :

$$D_T = \frac{d\langle x^2 \rangle}{2dt} = \frac{d\langle y^2 \rangle}{2dt} \quad (4.47)$$

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

$$D_T = \frac{d\langle x^2 \rangle + d\langle y^2 \rangle}{4dt} \quad (4.49)$$

Les moyennes des positions  $x^2$  et  $y^2$  sont données par :

$$d\langle x^2 \rangle = \frac{1}{n_e} \sum_{i=1}^{n_e} x_i^2 \quad (4.50)$$

$$d\langle y^2 \rangle = \frac{1}{n_e} \sum_{i=1}^{n_e} y_i^2 \quad (4.51)$$

Donc, on peut écrire le coefficient de diffusion transversal par la forme suivante :

$$D_T = \frac{1}{4dt} \left( \frac{1}{n_e} \sum_{i=1}^{n_e} x_i^2 + \frac{1}{n_e} \sum_{i=1}^{n_e} y_i^2 \right) \quad (4.53)$$

Finalement le coefficient de diffusion transversal est obtenu tel que :

$$D_T = \frac{1}{4dt} \left( \frac{1}{n_e} \sum_{i=1}^{n_e} (x_i^2 + y_i^2) \right) \quad (4.54)$$

**d)-coefficient de diffusion longitudinal :**

D'après l'équation (4.43) le coefficient de diffusion longitudinal s'écrit comme suit :

$$D_L = \frac{d\langle z'^2 \rangle}{2dt} \quad (4.55)$$

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

Donc on trouve :

$$D_L = \frac{d\langle z^2 - \langle z \rangle^2 \rangle}{2dt} \quad (4.56)$$

Avec :

$$\langle z \rangle^2 = \left( \frac{1}{n_e} \sum_{i=1}^{n_e} z_i \right)^2 \quad (4.57)$$

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

$$D_T = \frac{1}{2dt} \left( \frac{1}{n_e} \sum_{i=1}^{n_e} (z_i^2 - \langle z \rangle^2) \right) \quad (4.58)$$

**e)-coefficient d'ionisation :**

Le coefficient d'ionisation s'écrit par la relation suivante [15] :

$$\alpha = \frac{\langle \mathcal{V}_{ion} \rangle}{W} \quad (4.59)$$

Où  $\langle \mathcal{V}_{ion} \rangle$  est la fréquence moyenne d'ionisation, et  $W$  est la vitesse de dérive donnée par l'équation (4.43) ou (4.44).

Pour le calcul de la fréquence d'ionisation moyenne, on va utiliser la fonction de distribution des électrons donnée ci-dessus :

$$\langle \mathcal{V}_{ion} \rangle = \int \mathcal{V}_{ion} f(t, \mathcal{E}) \mathcal{E}^{1/2} d\mathcal{E} \quad (4.60)$$

Donc :

$$\alpha = \frac{\int \mathcal{V}_{ion} f(t, \mathcal{E}) \mathcal{E}^{1/2} d\mathcal{E}}{W} \quad (4.61)$$

A partir de l'équation de Townsend  $n = n_0 \exp(\alpha z - 1)$ . On peut écrire Le coefficient d'ionisation par une autre forme [5] :

$$\alpha = \frac{\ln[(n/n_0)+1]}{\langle z \rangle} \quad (4.62)$$

Où  $n_0$ : représente le nombre d'électrons initiaux, et  $n$ : représente le nombre d'électrons après une distance  $z$ .

**f)-Coefficient d'attachement :**

Le coefficient d'attachement est donne par [15] :

$$\eta = \frac{\langle \mathcal{V}_{att} \rangle}{W} \quad (4.63)$$

Où  $\langle \mathcal{V}_{att} \rangle$  est la fréquence moyenne d'attachement.

De la même manière que la détermination du coefficient d'ionisation, on obtient le coefficient d'attachement :

$$\eta = \frac{\int v_{att} f(t, \varepsilon) \varepsilon^{1/2} d\varepsilon}{W} \quad (4.64)$$

On peut écrire Le coefficient d'attachement par une autre forme [5] :

Sans ionisation :

$$\eta = \frac{n^-}{n_0} \cdot \frac{1}{\langle z \rangle} \quad (4.65)$$

Avec ionisation :

$$\eta = \frac{n^-}{n^+} \alpha \quad (4.66)$$

#### 4) L'Organigramme de Monte Carlo :

Dans ce qui suit, on va décrire en détail les différentes étapes du déroulement de l'organigramme de la méthode de Monte-Carlo Figure 4.2, et ceci dans le cas des collisions électron-molécule.

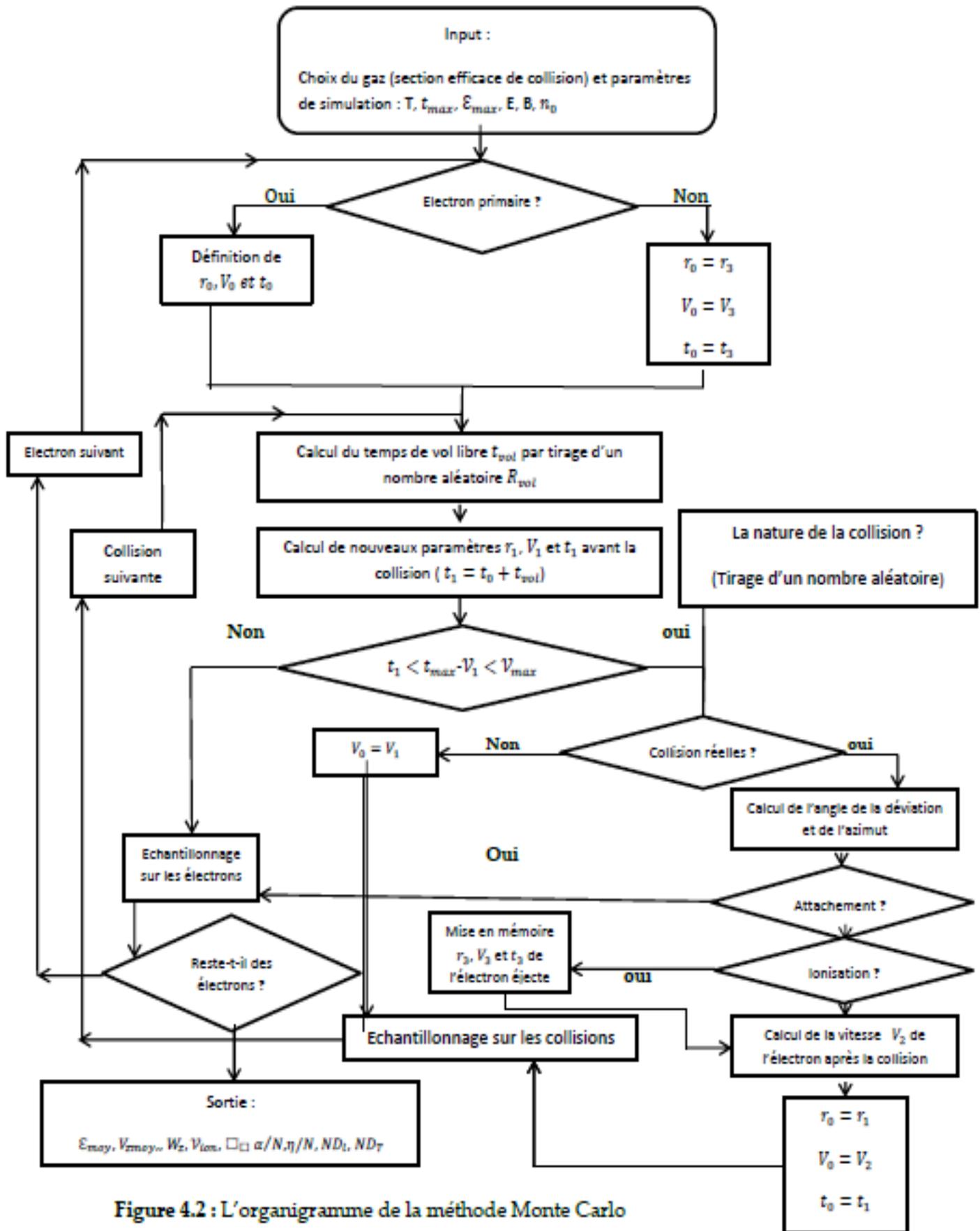


Figure 4.2 : L'organigramme de la méthode Monte Carlo

# CHAPITRE 5

## RESULTATS ET DISCUSSIONS

## 1) Introduction :

Dans les chapitres précédents, nous nous sommes intéressés à l'estimation des paramètres de transport dans un gaz faiblement ionisé, sous l'action d'un champ électrique et/ou magnétique uniformes, à partir la méthode de Monte Carlo. Dans ce qui suit on va présenter les différents résultats obtenus par notre programme Fortran. On va traiter dans ce programme tous les processus de collision électron-molécule réels (élastique, inélastique, excitation, ionisation et attachement), et fictives qui se présentent dans un plasma de décharge (ou gaz faiblement ionisé), et on va stocker la vitesse, et l'énergie de chaque électron à un instant donné, pour calculer les paramètres de transport électronique (énergie moyenne  $E_{moy}$ , la vitesse de dérive  $V_z moy(W)$ , le coefficient de diffusion transversal  $ND_T$ , le coefficient de diffusion longitudinal  $ND_L$ , le coefficient d'ionisation  $\alpha/N$  et le coefficient d'attachement  $\eta$ ). Maintenant on va lancer le programme pour un faisceau d'électron  $n_0 = 15000$  (le nombre d'électron primaire), est libre avec une énergie maximum assez grande pour traiter tous les situations qui vont suivre  $\mathcal{E}_{max} = 120eV$ , une densité du gaz  $N_{gaz}$  à la température  $T = 293 K$  étant égale à  $3.295 \times 10^{22} m^{-3}$ , et un temps de simulation maximal  $t_{max} = 8 ns$  (a été choisi toujours plus grand que le temps de relaxation), dans ce qui suit tous les paramètres de transport sont calculés dans les mêmes conditions. Les paramètres de transport ont été calculés pour deux gaz, l'oxygène, et le dioxyde de carbone, dans les trois cas suivants :

- Sous la seule action d'un champ électrique anti-parallèle à l'axe  $Oz$
- Cas d'un champ magnétique parallèle au champ électrique, c'est-à-dire  $B // Oz$ .
- Cas d'un champ magnétique perpendiculaire au champ électrique c'est-à-dire  $B // Oy$ .

## 2) Conditions expérimentales :

Initialement les électrons sont dirigés parallèlement à l'axe  $Oz$ , mais après la première interaction avec la molécule du gaz, les électrons sont dispersés dans l'espace tridimensionnel. Les gammes d'énergie et les processus de collisions des gaz utilisés dans notre programme Fortran, sont donnés par les tableaux (5.1) et (5.2).

Dans le cas, de l'oxygène  $O_2$  les réactions considérées sont : transfert de moment, 14 excitation, ionisation total, attachement dissociative, et attachement avec trois corps.

**Tableau 5.1** : Réaction considérées pour l'oxygène avec les niveaux des gammes de l'énergie [18].

Réactions	Gamme d'énergie (eV )
Transfert du moment	0-100
Excitation de la molécule	0.07-100
Excitation de la molécule	4-100
Excitation de la molécule	0.19-100
Excitation de la molécule	0.56-100
Excitation de la molécule	4.100
Excitation de la molécule	0.68-100
Excitation de la molécule	0.79-100
Excitation de la molécule	0.977-100
Excitation de la 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
Ionisation total	12.06-100
Attachement dissociative	4.9-100
Attachement avec trois corps	0.058-100

Dans le cas dioxyde de carbone  $CO_2$  les réactions considérées sont : transfert de moment, 13 excitations de la molécule, ionisation totale, et attachement,

**Tableau 5.2** : Réaction considérées pour dioxyde de carbone avec les niveaux des gammes de l'énergie [1].

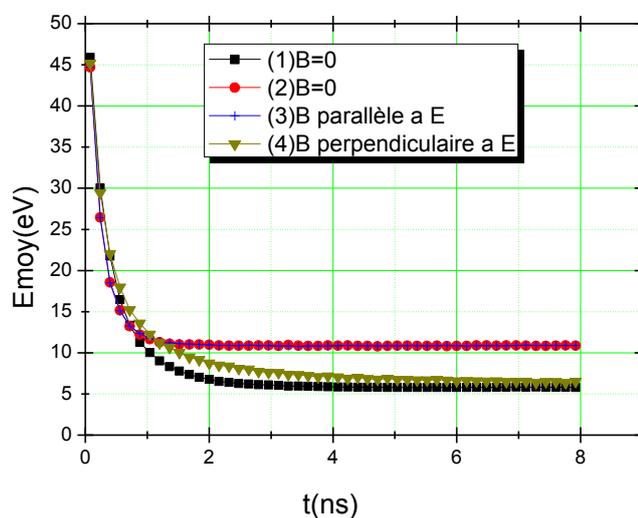
Réactions	Gamme d'énergie (eV )
Transfert du moment	0-500
Excitation de la molécule	0.067-20
Excitation de la molécule	0.151-20
Excitation de la molécule	0.286-100
Excitation de la molécule	1.394-5.06
Excitation de la molécule	2.5-6
Excitation de la molécule	2.402-6
Excitation de la molécule	2.402-4.5
Excitation de la molécule	2.402-4.5
Excitation de la molécule	2.402-4.5
Excitation de la molécule	3.696-9.7
Excitation de la molécule	6.905-11
Excitation de la molécule	10.399-507.4
Excitation de la molécule	11.5_505
Ionisation total	13.3-1000
Attachement	3.3-7

### 3) Résultats obtenus :

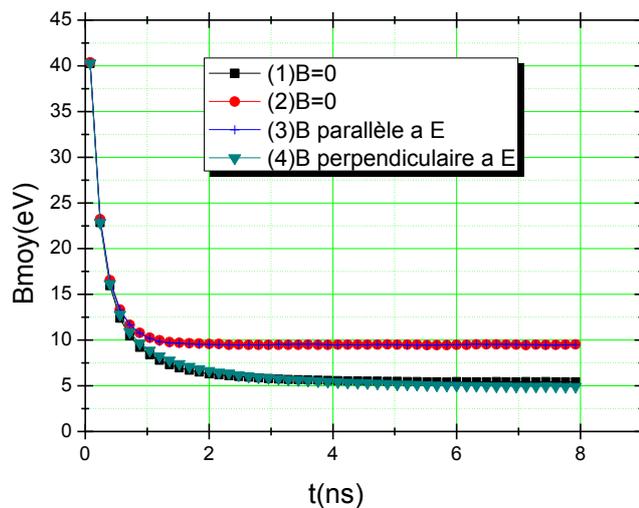
Sous l'effet d'un champ électrique et/ou magnétique uniforme, les électrons sont animés entre deux collisions, d'un mouvement uniformément accéléré suivant la direction des champs. En général, l'ensemble des paramètres de transport (énergie moyenne, vitesse de dérive, coefficient de diffusion transversal, coefficient de diffusion longitudinal, coefficient d'ionisation, coefficient d'attachement....) croît avec le champ (électrique et/ou magnétique), et la nature du gaz ( $O_2$  et  $CO_2$ ), on va le constater par la suite. Ces paramètres sont calculés pour deux cas: la présence uniquement d'un champ électrique (donne en Townsend Td, avec  $1Td=10^{-21}V.m^2$ ), et la présence d'un champ électrique-magnétique parallèle ou perpendiculaire (donne en Gauss/ $m^3$ ). Dans notre étude, on a pris deux valeurs pour le champ électrique réduit ( $E/N = 100Td$  et  $E/N = 600Td$ ), et une seule valeur pour le champ magnétique ( $B = 0.082354tesla$  ou bien  $B/N = 2.5 \times 10^{-20}Gauss/m^3$ ). Tous les paramètres de transport sont calculés par le même programme en *Fortran 90*.

#### 3.1) Énergie moyenne :

La figure 5.1 et la figure 5.2 montrent les variations temporelles de l'énergie moyenne des gaz ( $O_2$  et  $CO_2$ ), nous remarquons que ce paramètre passe par un régime transitoire, puis un régime permanent (l'état de l'équilibre). On remarque que lorsqu'on augmente le champ électrique, on réalise un état d'équilibre plus rapide.



**Figure 5.1** : variation de l'énergie moyenne en fonction du temps dans l'oxygène  
 (1):  $E/N = 200Td$  (2):  $E/N = 600Td$   
 (3), (4):  $E/N = 600Td$  et  $B/N = 2.5 \times 10^{-20}Gauss/m^3$



**Figure 5.2 :** variation de l'énergie en fonction du temps dans dioxyde de carbone  
 (1):  $E/N = 200\text{Td}$  (2):  $E/N = 600\text{Td}$   
 (3), (4):  $E/N = 600\text{Td}$  et  $B/N = 2.5 \times 10^{-20} \text{Gauss}/\text{m}^3$

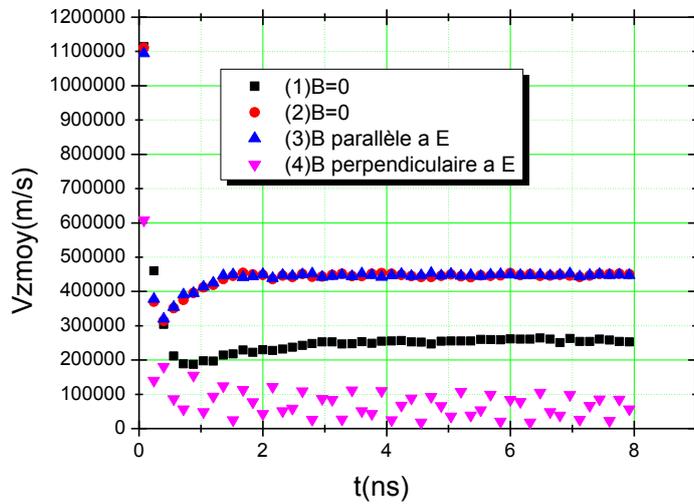
Lorsque le champ électrique augmente l'énergie moyenne devient plus grande, à cause de l'accélération des électrons suivant la direction de champ. Si en plus on applique un champ magnétique le mouvement des électrons change. Le champ magnétique longitudinal (c'est-à-dire  $B // -E_z$ ) n'a aucune influence sur l'énergie moyenne des électrons, contrairement au cas où le champ magnétique transversal (c'est-à-dire  $B \perp -E_z$ ), transmet un mouvement circulaire à l'électron autour d'une direction à celui-ci (champ magnétique transversal). L'énergie moyenne après quelques collisions, diminue très rapidement, et devient négligeable par rapport à l'énergie initiale par ce que les électrons cèdent leur énergie interne après une collision.

### 3.2) Vitesse de dérive :

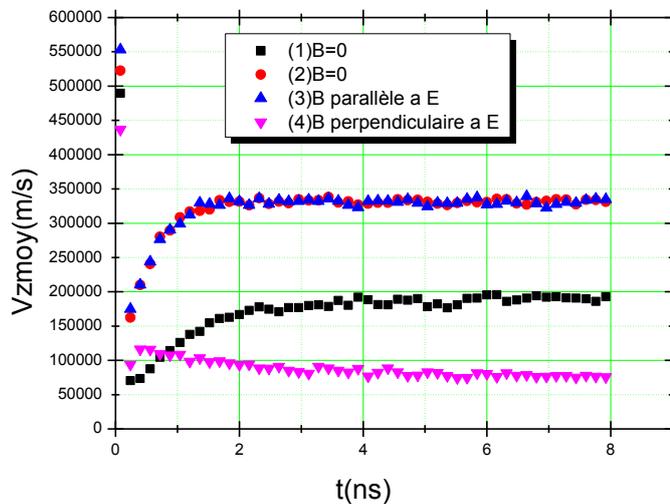
Nous avons calculé à partir de notre programme en Fortran, la vitesse de dérive  $V_{z\text{moy}}$  en fonction du temps pour différentes valeurs de champ électrique réduit  $E/N$  et/ou magnétique  $B/N$ , les différentes variations sont reportées sur Les figures (5.3) et (5.4). Ces courbes représentent les variations temporelles de la vitesse de dérive pour l'oxygène  $O_2$  et dioxyde de carbone  $CO_2$ .

Nous remarquons que ce paramètre (la vitesse de dérive) croît avec l'augmentation du champ électrique (l'accélération des électrons), on ne remarque aucune influence de champ magnétique longitudinal sur la vitesse de dérive des électrons, contrairement au cas où le champ magnétique transversal, la vitesse dérive diminue, à cause du mouvement cycloïde des électrons, dans le plan normal  $\vec{B}$  (elle va écarter les électrons de leurs directions). On voit bien dans les deux figures, et pour les trois cas, les vitesses de dérive après un certain nombre de collisions décroissent très

rapidement et deviennent négligeables par rapport à la vitesse initiale, par ce que les électrons se désaccélèrent sous l'effet du choc avec les molécules du gaz.



**Figure 5.3 :** la vitesse de dérive des électrons dans l'oxygène en fonction du temps  
 (1):  $E/N = 200Td$  (2):  $E/N = 600Td$   
 (3), (4):  $E/N = 600Td$  et  $B/N = 2.5 \times 10^{-20} Gauss/m^3$

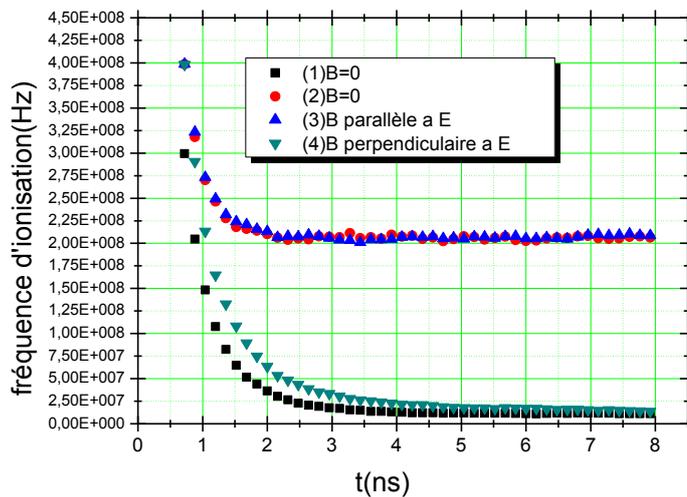


**Figure 5.4:** la vitesse de dérive des électrons dans le dioxyde de carbone en fonction du temps  
 (1):  $E/N = 200Td$  (2):  $E/N = 600Td$   
 (3), (4):  $E/N = 600Td$  et  $B/N = 2.5 \times 10^{-20} Gauss/m^3$

En générale, on peut dire que l'effet du champ électrique est accélère, les électrons contrairement au champ magnétique transversal diminuent leur vitesse, et l'énergie moyenne (à cause de la force de Lorentz qui à une composante anti-parallèle à l'axe Oz).

### 3.3) Fréquence d'ionisation :

Les figures 5.5 et 5.6 donnent l'évolution des fréquences d'ionisation dans le temps, la première figure pour le cas de l'oxygène, et la deuxième pour le dioxyde de carbone. On remarque dans les trois cas (champ magnétique nul, champ magnétique longitudinal ou transversal) que la fréquence d'ionisation diminue au cours du temps jusqu'à atteindre l'état de l'équilibre, c'est probablement à cause de la diminution de la vitesse des électrons. On voit aussi que la fréquence d'ionisation augmente lorsque le champ électrique augmente. Les électrons sont accélérés par la force électrique, on remarque que la fréquence d'ionisation de l'oxygène est supérieure à celle du dioxyde de carbone, par ce que le potentiel d'ionisation de l'oxygène étant inférieur à celui du dioxyde de carbone. On remarque également que le champ magnétique longitudinal (c'est-à-dire  $B // -E_z$ ) n'a aucune influence sur la fréquence d'ionisation, par contre le champ magnétique transversal (c'est-à-dire  $B \perp -E_z$ ) diminue légèrement la fréquence d'ionisation du gaz.

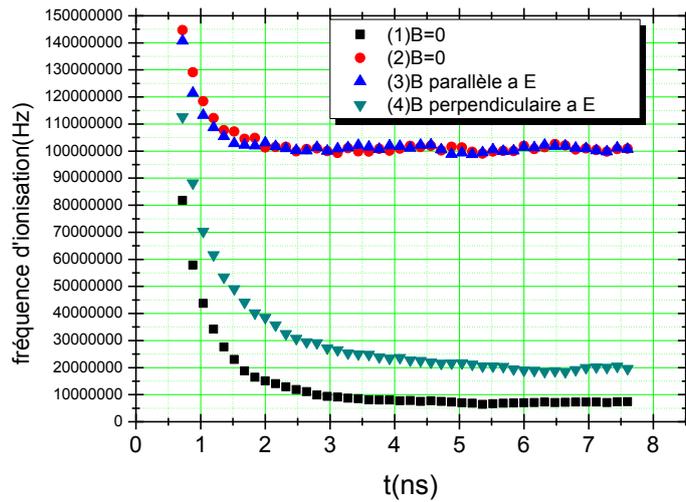


**Figure 5.5:** la fréquence d'ionisation de l'oxygène en fonction du temps

(1):  $E/N = 200\text{Td}$

(2):  $E/N = 600\text{Td}$

(3), (4):  $E/N = 600\text{Td}$  et  $B/N = 2,5 \times 10^{-20} \text{Gauss}/\text{m}^3$



**Figure 5.6:** la fréquence d’ionisation de dioxyde de carbone en fonction du temps  
 (1):  $E/N = 200\text{Td}$  (2):  $E/N = 600\text{Td}$   
 (3), (4):  $E/N = 600\text{Td}$  et  $B/N = 2.5 \times 10^{-20} \text{ Gauss}/\text{m}^3$

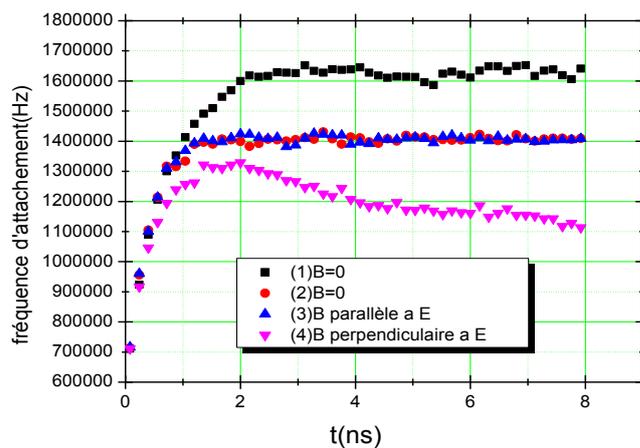
La fréquence d’ionisation diminue dans le champ magnétique transversal. Ceci est dû à la déviation des électrons, ce qui va réduire l’efficacité du champ électrique. En générale, les électrons dans un champ électrique et un champ magnétique transversal se comportent, comme s’ils sont soumis à la seule action d’un champ électrique équivalent donné par la relation suivante :

$$E_1 = E \cos \theta \quad \text{Avec} \quad \theta = \tan^{-1}\left(\frac{\omega C}{\nu}\right)$$

Ou  $\theta$  représente l’angle de déflexion, la relation précédente n’est pas valable lorsque  $B$  est fort, dans notre cas :  $B/N = 2.5 \times 10^{-20} \text{ Gauss}/\text{m}^3$ .

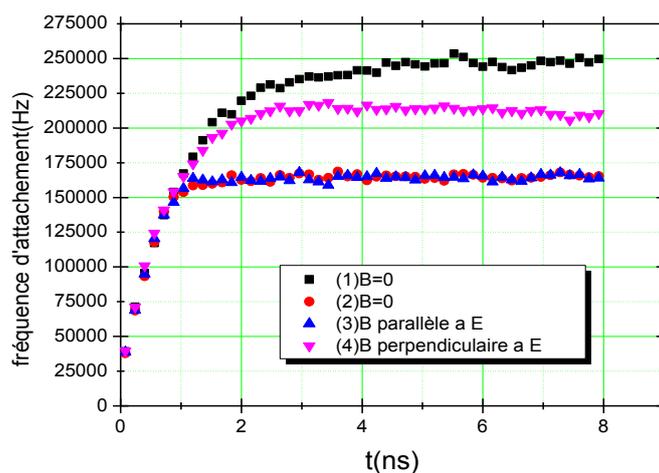
### 3.4) Fréquence d’attachement :

Les figures 5.5 et 5.6 montrent les variations temporelles de fréquences d’ionisation, dans les trois cas des champs, électrique et magnétique (parallèle ou perpendiculaire), la première figure pour le cas de l’oxygène et la deuxième pour le dioxyde de carbone.



**Figure 5.7:** la fréquence d'attachement de l'oxygène en fonction du temps  
 (1):  $E/N = 200Td$  (2):  $E/N = 600Td$   
 (3), (4):  $E/N = 600Td$  et  $B/N = 2.5 \times 10^{-20} Gauss/m^3$

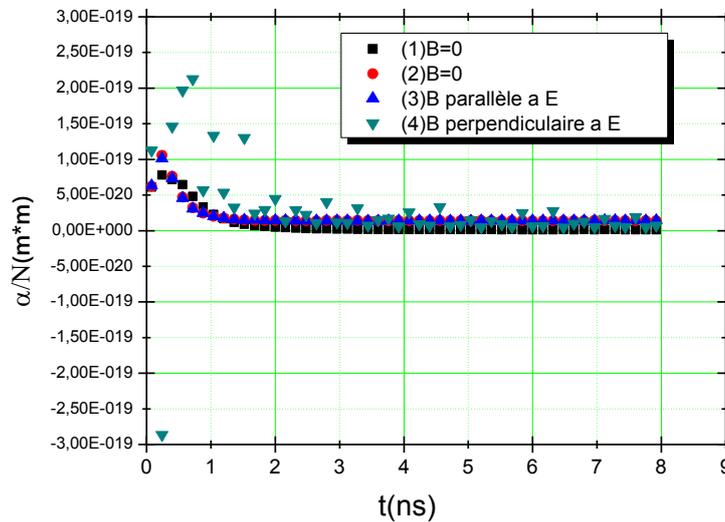
On remarque bien l'augmentation de la fréquence d'attachement au cours du temps, pour les trois cas du champ électrique et magnétique à cause de la diminution de la vitesse des électrons. Ces électrons deviennent faciles à attacher par les atomes du gaz. On voit aussi que le champ magnétique transversal diminue légèrement la fréquence d'ionisation dans le cas d'oxygène, au contraire dans le cas du dioxyde de carbone la fréquence d'attachement augmente parce que les électrons sont déviés sous l'effet de la collision avec les molécules du gaz, et cette collision dépend aux propriétés physique et chimique du gaz. Également, on remarque aussi qu'on attend l'état de l'équilibre plus rapidement lorsque le champ électrique augmente.



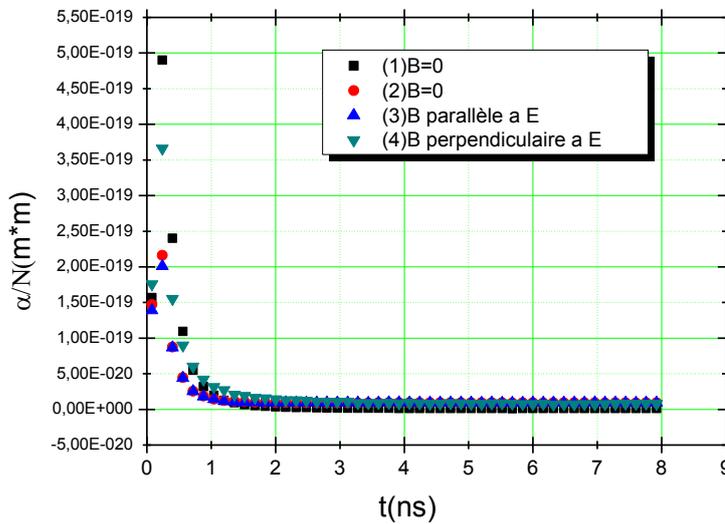
**Figure 5.8:** la fréquence d'attachement de dioxyde de carbone en fonction du temps  
 (1):  $E/N = 200Td$  (2):  $E/N = 600Td$   
 (3), (4):  $E/N = 600Td$  et  $B/N = 2.5 \times 10^{-20} Gauss/m^3$

3.5) Coefficient d'ionisation :

Les figures 5.9 et 5.10 montrent comment varient les coefficients d'ionisation pour l'oxygène et le dioxyde de carbone, sous l'effet des champs, électrique et magnétique (longitudinal ou transversal).



**Figure 5.9:** le coefficient d'ionisation de l'oxygène en fonction du temps  
 (1):  $E/N = 200Td$  (2):  $E/N = 600Td$   
 (3), (4):  $E/N = 600Td$  et  $B/N = 2,5 \times 10^{-20} Gauss/m^3$



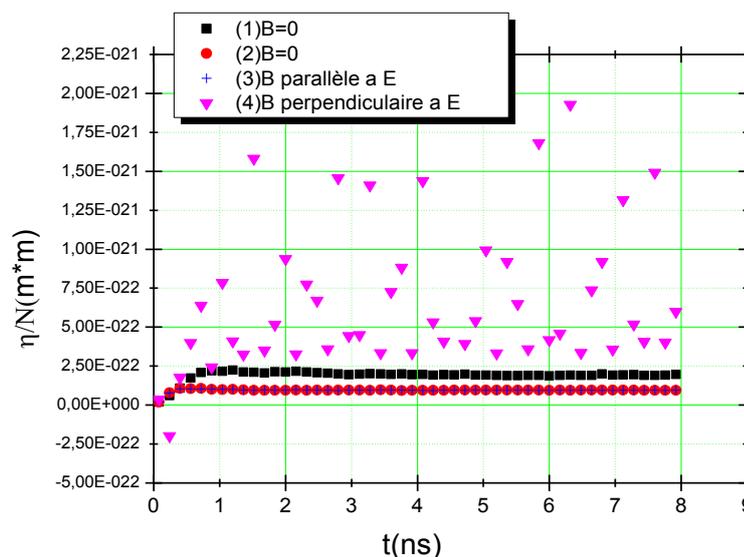
**Figure 5.10:** le coefficient d'ionisation de dioxyde de carbone en fonction du temps  
 (1):  $E/N = 200Td$  (2):  $E/N = 600Td$   
 (3), (4):  $E/N = 600Td$  et  $B/N = 2,5 \times 10^{-20} Gauss/m^3$

On remarque pour les deux gaz dans les deux cas des champs électrique et/ou magnétique longitudinal que le coefficient d'ionisation augmente très rapidement jusqu'à atteindre le maximum à l'instant 0.24 ns, en suite il décroît jusqu'à atteindre l'état d'équilibre.

Le coefficient d'ionisation est inversement proportionnel à la vitesse de dérive et le nombre des électrons entrent en collision (les électrons se multiplient, leur densité donc augmente d'une manière exponentielle), ce qui explique son augmentation et sa diminution. On remarque que le champ magnétique longitudinal n'a aucune influence sur le coefficient d'ionisation, par contre dans le cas où le champ magnétique transversal, on peut dire dans le cas d'un champ magnétique transversal les électrons sont confinés longitudinalement. On peut dire que l'oxygène à l'état d'équilibre n'est pas réalisé dans le cas d'un champ magnétique transversal, probablement à cause de la nature électronégative du gaz, et le mouvement cyclique des électrons. On a un besoin plus de temps pour le réaliser.

### 3.6) Coefficient d'attachement :

Les figures 5.11 et 5.12 représentent respectivement, la variation temporelle de coefficient d'attachement, pour l'oxygène et le dioxyde de carbone, sous l'effet des champs électrique et magnétique (longitudinal ou transversal). On remarque bien l'augmentation de la fréquence d'attachement, lorsque le champ électrique devient faible, à cause de la diminution de la vitesse des électrons qui deviennent faciles à attacher par molécules. On remarque aussi que le champ magnétique longitudinal n'a aucune influence sur le coefficient d'attachement, par contre on voit l'augmentation de ce coefficient dans le cas d'un champ magnétique transversal. On remarque aussi que le coefficient d'attachement de l'oxygène est supérieur à celle du dioxyde de carbone.

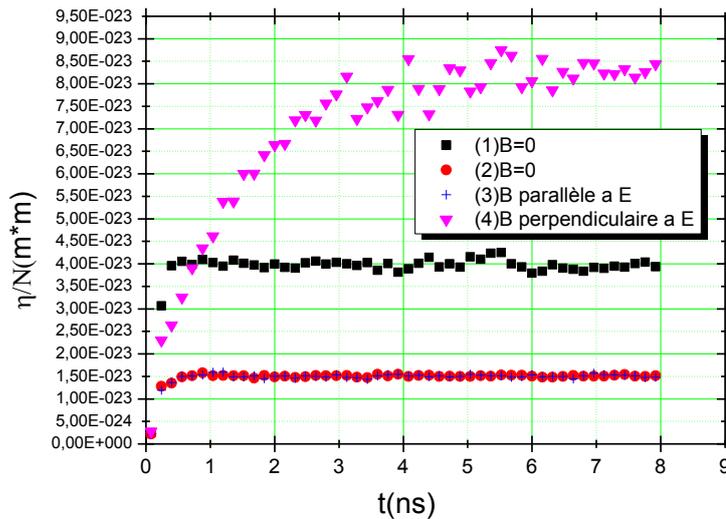


**Figure 5.11:** le coefficient d'attachement de l'oxygène en fonction du temps

(1):  $E/N = 200Td$

(2):  $E/N = 600Td$

(3), (4):  $E/N = 600Td$  et  $B/N = 2.5 \times 10^{-20} Gauss/m^3$

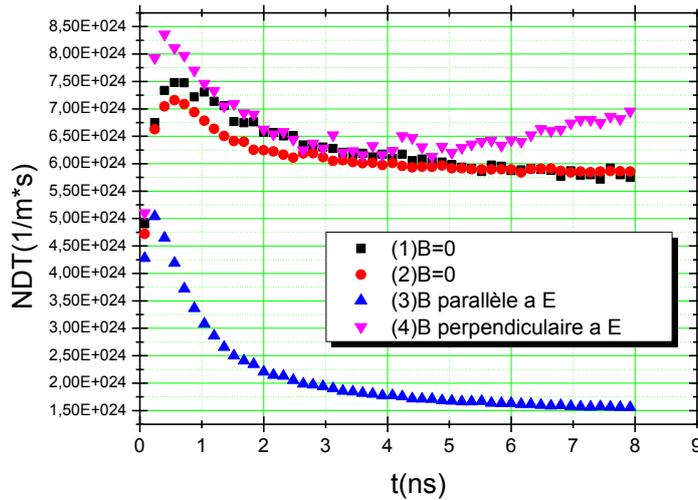


**Figure 5.12:** le coefficient d’attachement de dioxyde de carbone en fonction du temps  
 (1):  $E/N = 200Td$  (2):  $E/N = 600Td$   
 (3), (4):  $E/N = 600Td$  et  $B/N = 2.5 \times 10^{-20} Gauss/m^3$

On remarque que l’état d’équilibre réalisé pour les deux cas (champ électrique unique, champ électrique et magnétique longitudinal), dans le cas d’un champ magnétique transversal l’état de l’équilibre n’est pas réalisé, car les trajectoires suivies par les électrons s’enroulent autour des lignes de champs. On a besoin donc plus de temps, ou on augmente la densité du gaz pour la réaliser.

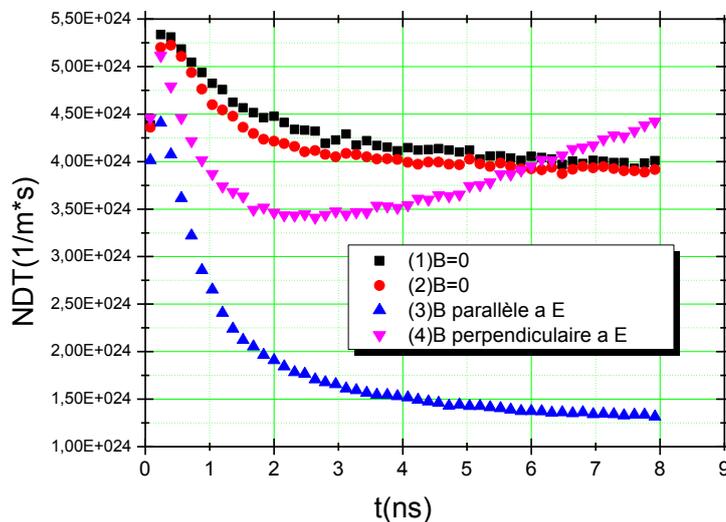
### 3.7) Coefficient de diffusion transversal :

Les figures 5.13 et 5.14 représentent respectivement, la variation temporelle de coefficient diffusion transversal, pour l’oxygène et le dioxyde de carbone sous l’effet des champs électrique et magnétique (longitudinal ou transversal). Contrairement aux paramètres précédents on remarque que le champ magnétique longitudinal ou transversal a un effet sur le coefficient de diffusion transversal. On remarque pour les deux gaz, le coefficient de diffusion transversal augmente très rapidement jusqu’à atteindre le maximum à l’instant 0.3 ns. Probablement à cause la diminution la vitesse des électrons, ce qui facilite le suivi des lignes de champ magnétique par ces électrons. La diminution de ce coefficient dans les deux cas du champ magnétique signifie que les électrons sont confinés autour de l’axe Oz. On remarque aussi que le coefficient de diffusion transversal dans le cas d’un champ magnétique longitudinal, est inférieur à celui dans le cas d’un champ magnétique transversal. C’est à cause de la force magnétique qui se compose deux composantes dans le premier cas. Par contre dans le deuxième cas elle (force magnétique) est composée d’une seule composante perpendiculaire à la direction de  $E$  (perpendiculaire à l’axe Oz).



**Figure 5.13:** le coefficient de diffusion transversal de l'oxygène en fonction du temps  
 (1):  $E/N = 200Td$  (2):  $E/N = 600Td$   
 (3), (4):  $E/N = 600Td$  et  $B/N = 2.5 \times 10^{-20} Gauss/m^3$

Dans le cas d'un champ magnétique nul et longitudinal ont à besoin plus de temps pour réaliser l'état de l'équilibre, par contre dans le cas d'un champ magnétique transversal l'état d'équilibre n'est pas réalisé quel que soit la valeur du temps.



**Figure 5.14:** le coefficient de diffusion transversal de dioxyde de carbone en fonction du temps

(1):  $E/N = 200Td$  (2):  $E/N = 600Td$   
 (3), (4):  $E/N = 600Td$  et  $B/N = 2.5 \times 10^{-20} Gauss/m^3$

3.8) Coefficient de diffusion longitudinal :

Les figures 5.15 et 15.16 montrent comment varient les coefficients d'ionisation pour l'oxygène et le dioxyde de carbone, sous l'effet des champs électrique et magnétique (transversal et longitudinal) : On remarque que le coefficient de diffusion longitudinal pour les trois cas des champs électrique et magnétique pour les deux gaz augment rapidement jusqu'à le maximum à l'instant 0.29ns ensuite, il décroît jusqu'à atteindre l'état de l'équilibre (on a besoin plus du temps pour réaliser l'état d'équilibre). On remarque aussi que le champ magnétique longitudinal n'a pas d'influence sur le coefficient de diffusion longitudinal, par contre on voit la diminution de ce coefficient dans le cas d'un champ magnétique transversal. On peut dire dans le cas d'un champ magnétique transversal que les électrons sont confines longitudinalement.

Le coefficient de diffusion longitudinal de l'oxygène est supérieure à celle du dioxyde de carbone, probablement à cause des propriétés physique et chimique de chaque gaz (masse atomique, polarité, rétivité, énergie de liaison,...).

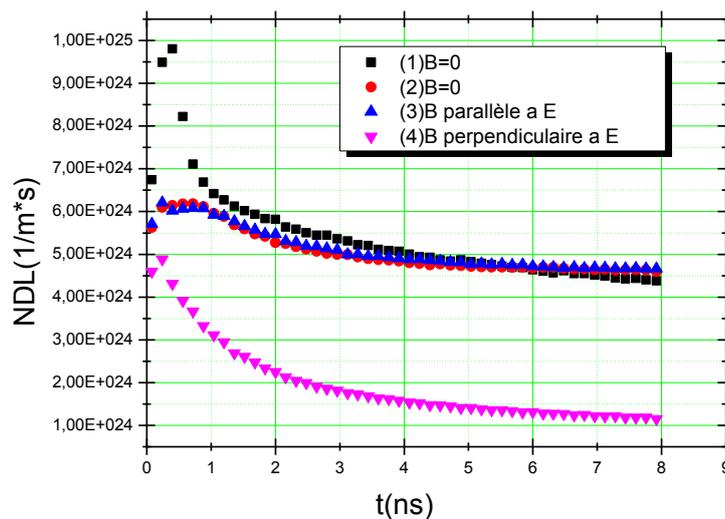
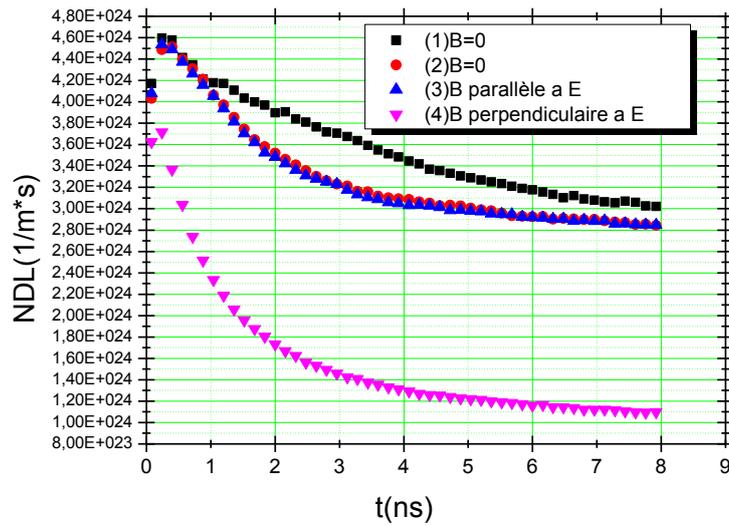


Figure 5.15: le coefficient de diffusion longitudinal de l'oxygène en fonction du temps  
 (1):  $E/N = 200Td$  (2):  $E/N = 600Td$   
 (3), (4):  $E/N = 600Td$  et  $B/N = 2.5 \times 10^{-20} Gauss/m^3$



**Figure 5.16:** le coefficient de diffusion longitudinal de de dioxyde de carbone en fonction du temps

(1):  $E/N = 200Td$

(2):  $E/N = 600Td$

(3), (4):  $E/N = 600Td$  et  $B/N = 2.5 \times 10^{-20} Gauss/m^3$

# CONCLUSION GÉNÉRALE

## CONCLUSION GÉNÉRALE

---

Le travail que nous avons présenté dans ce mémoire, consiste à élaborer un modèle numérique de Monte-Carlo, qui apporte une contribution à une meilleure connaissance de cinétique électronique rencontrée dans les décharges électriques à faible courant (hors équilibre thermodynamique local). Il se base sur des modélisations microscopiques du mouvement électronique sous l'effet des champs électriques et/ou magnétiques extérieurs, et des collisions électron -molécule (résolution de l'équation de Boltzmann).

La simulation par la méthode de Monte Carlo est un moyen puissant d'investigation des phénomènes physiques, parallèle et complémentaire aux proches théoriques et expérimentales, car elle permet d'obtenir des informations détaillées sur des systèmes complexes devant lesquels les méthodes de calcul analytiques sont impuissantes, et d'accéder à des grandeurs souvent inaccessibles à l'expérience.

Mon travail consiste plus particulièrement à calculer les paramètres de transport des électrons soumis à l'action simultanée d'un champ électrique et un champ magnétique uniformes, qui forment un angle quelconque, entre eux dans un gaz faiblement ionisé ( $O_2$  et  $CO_2$ ). On a étudié l'influence d'un champ électrique et magnétique transversal ou longitudinal sur les paramètres de transport :

- Dans le cas où le champ électrique devient plus grand, la plupart des paramètres de transport telle que l'énergie moyenne, la vitesse de dérive, la fréquence d'ionisation, le coefficient d'ionisation... augmentent sauf la fréquence d'attachement et le coefficient d'attachement qui diminuent.
- Dans le cas des champs électrique et magnétique transversaux, la plupart des paramètres de transport telle que l'énergie moyenne, la vitesse de dérive, la fréquence d'ionisation, le coefficient de diffusion longitudinal diminuent sauf le coefficient d'ionisation, la fréquence d'attachement, le coefficient d'attachement et le coefficient de diffusion longitudinal qui augmentent.
- Dans le cas d'un champ électrique et magnétique longitudinal, tous les paramètres de transport ne sont pas influencés par la présence de ce type de champ magnétique, sauf le coefficient de diffusion transversal qui diminue, et cela veut dire que les électrons sont confinés autour l'axe  $Oz$ .

Ainsi, nous nous sommes intéressés, dans ce travail à déterminer les différents paramètres pouvant déplacer ou modifier l'état de l'équilibre (le temps d'évolution, le champ électrique et le champ magnétique longitudinal et transversal). On peut dire que l'équation de Boltzmann ne peut se résoudre, que si et seulement si les paramètres de transport sont en état d'équilibre. Dans le futur il me paraît utile d'élargir ce travail aux cas des champs électrique et magnétique sinusoïdales, qui jouent un rôle très important surtout dans les décharges à barrière diélectrique(DBD), et les décharges radiofréquences(RF). Comme nous allons utiliser la méthode de Monte Carlo pour calculer le coefficient de détachement pour le dioxyde de carbone sous l'effet d'un champ électromagnétique, qui jouent un rôle important pour la production de l'ozone et la dépollution.

# Références bibliographiques

## **Introduction et Conclusion générale :**

- 1-Introduction à la physique des plasmas, Auteur : Philippe Savoini 2011-2012.
- 2-Ardjani, mémoire de Magistère en physique des plasmas et des gaz ionisés, Université Aboubakr Belkaid Tlemcen (2006).
- 3- Modélisation de la cinétique électronique dans un gaz faiblement ionisé : Jean-Pierre Bœuf.

## **Chapitre 1 :**

- 1-Prepared by PlasTEP partner #8, Lithuanian Energy Institute, Lithuania Kaunas 2012 les auteurs: Dr. Vitas Valinčius- Dr. Viktorija Grigaitienė- Ph.D. Andrius Tamošiūnas
- 2-Palmas froids radionfréquence Article propose par: Pascal Chabert et Jean-Luc Raimbault - Laboratoire de Physique des Plasmas, UMR 7648, CNRS/Ecole Polytechnique/Univ. Paris-Sud/UPMC

[3] : <https://www.researchgate.net>

- 4-Introduction à la physique des plasmas : Jean-Luc Raimbault Laboratoire de physique des Plasmas
- 5-Plasmas froids radiofréquences différents régimes de fonctionnement  
-Auteur : J.P. Booth - P. Chabert.
- 6- BAHOUH Hanane, mémoire de Doctorat en Sciences Electronique, Université CONSTABTINE (2014).
- 7-Plasma Micro-onde Sources et couplage Auteur : F. Silva<sup>1</sup>, K. Hassouni<sup>1</sup>, S. Béchu<sup>2</sup>

## **Chapitre 2 :**

- 1-QUELQUES PROPRIETES DES PLASMAS Auteurs : *L. Rezeau et G. Belmont 5 janvier 2007*
- 2- Jean-Loup DELCROIX-Abraham BERS physique des plasmas tome 1
- 3--introduction à la physique des plasmas Auteur : Philippe Savoini.
- 4- Phénomène d'ionisation dans les gaz auteur : Cours de A.Tilmatine
- 5-PHYSIQUE DES PLASMAS COLLISIONNELS : Michel MOISAN et Jacques PELLETIER.
- 6-Jean-Loup DELCROIX-Abraham BERS : Physique des plasmas tome 2

## **Chapitre3 :**

- 1-Physique des plasmas collisionnels –Application aux décharges haute fréquence, Auteur : 2- Michel MOISAN et Jacques PELLETIER.
- 2-Physique des plasmas tome 1 : Jean-Loup DELCROIX et Abraham BERS.
- 3-Ardjani, mémoire de Magistère en physique des plasmas et des gaz ionisés, Université Aboubakr Belkaid Tlemcen (2006).

## **Chapitre4 :**

- 1-Modélisation de la cinétique électronique dans un gaz faiblement ionisé : Jean-Pierre BŒUF
- 2-Méthodes de Monte-Carlo pour les équations de transport et de diffusion : Bernard Lapeyre  
Etienne Pardoux Remi Sentis.
- 3-G. Govinda Raju and J. Liu. (1995, October 5). Simulation of Electrical Discharges in 5-Gases Uniform Electric Fields. IEEE Transactions on Dielectrics and Electrical Insulation, 2(5), pp. 1004-1015.
- 4-L. Zeghichi, L. Mokhnache, and M. Djebabra. Application of the Monte Carlo Method for the Determination of Macroscopic Parameters of an Electrical Discharge in O<sub>2</sub>.
- 5-Dengming Xiao. Monte Carlo Simulation of Insulating Gas Avalanche Development. Dept. of E.E., Shanghai Jiaotong University, 200030 China.
- 6-Longo S, "Monte Carlo models of electron and ion transport in non-equilibrium Plasmas", Plasma Sources Sci. Technol., 9(4):468-476, 2000.
- 8-Djilali BENYOUCEF THESE En vue de l'obtention du DOCTORAT DE L'UNIVERSITE DE TOULOUSE Délivré par l'Université de Toulouse III – Paul Sabatier Discipline ou spécialité : Ingénierie et Physique des Plasmas de Décharge
- 9-Ivan REVEL, Simulation Monte Carlo des particules lourdes dans les décharges Luminescentes, thèse de Doctorat, Université Toulouse, 1999
- 10-MONTE CARLO METHODS FOR ELECTRON TRANSPORT Mark J. Kushner University of Illinois
- 11-Department of Electrical and Computer Engineering 1406 W. Green St. Urbana, IL 61801 USA
- 12-A. Benamar, Application de la Méthode de Monté Carlo dans le Calcul des Coefficients de Transport d'un Gaz Faiblement Ionisé, thèse de Magistère, 2006
- 13-Yousfi Mohamed, Thèse de doctorat d'état, n° 1244 Université Paul Sabatier, Toulouse (1986).
- 14- M. Yousfi, A. Himoudi and A. Gaouar, Boltzmann equation and Monte Carlo analysis of electron-electron interactions on electron distributions in non-thermal cold plasma, Centre de Physique Atomique, Laboratoire des décharges dans les gaz, Université Paul Sabatier, 1992.
- 15-Théodore VASSILIADIS Thèse de doctorat du 3° cycle, n° 3139 Université Paul Sabatier, Toulouse, 1985
- 16- 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.
- 17- MONTE CARLO SIMULATION FOR ELECTRON DYNAMICS IN SEMICONDUCTOR DEVICES Mustafa Akarsu, Ömer Özbaş Osmangazi University Physics Department, 26480, Eskişehir-TURKEY.

# ÉFFET DU CHAMP ÉLECTRIQUE ET MAGNÉTIQUE SUR LES COEFFICIENTS DE TRANSPORT D'UN GAZ FAIBLEMENT IONISÉ

## Résumé

Le présent travail est consacré à calculer les paramètres de transport électronique dans l'oxygène ( $O_2$ ) et le dioxyde de carbone ( $CO_2$ ), soumis à l'action simultanée des champs électrique et magnétique transversal ou longitudinal uniformes par la méthode de Monte Carlo, qui est un outil puissant dans le domaine de la physique des plasmas. La procédure de calcul prend en compte la marche aléatoire des électrons et l'influence des paramètres de transport exprimés en fonction du temps, en fonction du champ électrique réduit  $E/N$  ( $E$  : champ électrique appliqué,  $N$  : la densité du gaz), et en fonction du champ magnétique  $B/N$  ( $B$  : le champ magnétique appliqué).

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

**Mots clé :** Plasma ; Gaz faiblement ionisé ; Coefficients de transport ; Sections efficaces de collision ; Fréquence de collision ; Méthode de Monte-Carlo.

## Abstract

The present work is devoted to calculating the electronic transport parameters in oxygen and carbon dioxide. Subjected to the simultaneous action of uniform electric and transverse or longitudinal magnetic fields by the Monte Carlo method which is a powerful tool in the field of plasma physics.

The calculation procedure takes into account the random walk of the electrons and the influence of the transport parameters expressed as a function of time, as a function of the reduced electric field  $E/N$  ( $E$ : applied electric field,  $N$ : the density of the gas), and as a function of the magnetic field  $B/N$  ( $B$ : the magnetic field applies).

Monte Carlo simulation consists in simulating the movement of a large number of electrons one by one, thus followed from its emission until its disappearance. During the simulation, the flight position and speed are recorded for each flight time and for each electron. The knowledge of these magnitudes allows using the appropriate static averages and using the sampling methods to calculate the electronic transport parameters in the gas under consideration, taking into consideration the collision processes involved.

**Key words:** Plasmas, Gas weakly ionizes, Transport coefficients, Sections cleared of collision The Collision frequency, Monte Carlo method, Probability of collision. The Null-collision, Electric discharges. Transport Coefficient.

## تلخيص

يخصص هذا العمل لحساب معاملات النقل للإلكترونات في كل من غاز الأوكسجين و غاز ثاني أكسيد الكربون، تحت تأثير الحقل الكهربائي و الحقل المغناطيسي طولي أو العرضي باستخدام طريقة مونت كارلو التي هي أداة مهمة في مجال فزياء بلازما، لحساب هذه معاملات تأخذ بعين الإعتبار الحركة العشوائية للإلكترونات، تعطى هذه المعاملات بدلالة الزمن و مجالين كهربائي و مغناطيسي.

إن طريقة مونت كارلو يمكنها أن تحاكي عدد كبير من الإلكترونات واحد تلى آخر، حيث يتم تتبع الإلكترونات منذ لحظة إنبعائه حتى لحظة إختفائه، أثناء المحاكاة يتم تسجيل زمن تحليق كما يتم تسجيل سرعة و موقع الإلكترونات. يتم معرفة هذه مقادير الفزيائية باستخدام متوسطات خاصة و استخدام قوانين الإحتمالات لحساب معاملات النقل مع أخذ في عين الإعتبار عمليات التصادم بين الجزيئات.

## الكلمات المفتاحية

البلازما، غاز ضعيف التأين، التصادمات الصفريّة، تردد الإصدام، إحتمالت التصادم، التفريغ الكهربائي، معاملات النقل، طريقة مونت كارلو.