



République Algérienne Démocratique et Populaire
Université Abou Bakr Belkaid– Tlemcen
Faculté des Sciences
Département de Physique



Laboratoire de physique théorique

Mémoire de fin d'études

Pour l'obtention du diplôme de Master en Physique

Option: Physique des gaz et des Plasmas

Thème

Résolution numérique de l'équation de
Boltzmann

Présentée par :

Melle KACEMI Wafaa

Le mercredi 3 Juillet 2013

Devant le jury composé de MM.

- Pr BOUHAFS Bénamar..... (Président)
- Pr LIANI Bachir..... (Encadreur)
- Pr BEDRANE Zeyneb..... (Examineur)

Année universitaire : 2012-2013

Remerciements

Louange à Dieu, Seigneur tout puissant qui nous a comblé de sa miséricorde jusqu'à la réalisation de ce modeste travail.

Je tiens à exprimer ma reconnaissance à Mr. Liani Bachir d'avoir accepté la direction de ce travail, malgré ses multiples occupations, et veiller par une contribution active à son bon déroulement.

Je le remercie pour son dévouement, ses encouragements, ses conseils qui m'ont aidée à réaliser ce mémoire.

J'exprime ma profonde gratitude à tous les membres de jury pour l'honneur qu'ils m'ont fait d'accepter juger mon travail.

A tous les Enseignants du Département physique, Faculté des Sciences, Université de Tlemcen ainsi qu'à toute personne ayant contribué de près ou de loin pour la réalisation de ce mémoire.

Dédicaces

Je dédie ce mémoire :

A Ma mère qui me sont la plus chère du monde, avec toute ma tendresse en signe d'affection de reconnaissance pour son dévouement exemplaire.

A mon frère

A toute ma famille

A mes amies : Hanane, Naima, Ibtissam, Khadîdja, Sabrina, Nedjwa.

A ma promotion

Wafaà

TABLE DES MATIERES

Introduction générale.....	1
Chapitre I : Généralités sur les plasmas.....	2
I-1 Plasma et gaz ionisé	3
I-2 Caractéristiques générales des plasmas	4
Degrés d'ionisation	4
Longueur de Debye	4
Fréquence du plasma.....	5
I-3 Décharges électriques dans les gaz	5
I-3-1 Définition général.....	5
I-3-2 Décharge non autonome.....	6
I-3-3 Décharge autonome (Zone de collection avec multiplication).....	7
I-3-4 Décharge de Townsend.....	7
I-3-5 Décharge luminescente.....	7
I-3-6 Décharge à haute pression (décharge d'arc).....	8
Les plasmas thermiques	8
Applications des plasmas.....	9
Chapitre II : Equations cinétiques.....	10
II-1 La description cinétique.....	11
II-2 Fonction de distribution à une seule particule.....	11
II-3 Equation de Boltzmann sans collisions.....	12
II-4 Interprétation de l'équation de Boltzmann.....	14
II-5 Fonction de distribution et moyennes locales.....	14
II-6 La distribution de Maxwell-Boltzmann.....	15
Paramètres utiles de la distribution de Maxwell-Boltzmann.....	18
II-7 Etablissement des équations de transport.....	18
II-7-1 Définitions des grandeurs hydrodynamiques.....	18
II-7-2 Equations de transport.....	19
L'équation de conservation des particules.....	20
L'équation de conservation de la quantité de mouvement.....	20
L'équation de conservation d'énergie.....	20

II-8 Le terme de collision.....	21
Chapitre III : Modélisation.....	23
III-1 Introduction	25
III-2 But de la modélisation	25
III-3 Méthodes de modélisation	26
III-3-1 Hypothèse généraux	26
III-3-2 Hiérarchie des modèles	26
III-3-2-1 Modèles cinétiques.....	26
III-3-2-2 Modèles microscopiques ou particuliers	28
III-3-2-3 Modèles fluides (hydrodynamiques).....	29
Approximation de dérive – diffusion.....	29
III-4 Codes BOLSIG.....	30
III-5 Résultats et Discussions.....	30
Conclusion générale	36
Référence.....	37

Introduction générale

Les plasmas sont des milieux réactifs dans les quels on trouve des espèces chimiques neutres (atomes et molécules) et chargées (ions et électrons). L'étude de ces milieux requiert la connaissance d'un grand nombre de domaines de la Physique : aérodynamique des écoulements, transferts thermiques et radiatifs, électromagnétisme, électricité, chimie

Depuis les lampes à arc au carbone de la fin du XIX^e siècle et les lampes à décharges lumineuses, les applications industrielles des plasmas froids se sont considérablement diversifiées, et cette diversité est due à la variété des configurations géométriques, des paramètres physiques (densité, température, fréquence et intensité des potentiels électriques appliqués) et de la nature du gaz ambiant (inerte ou réactif) ou des parois solides constituant les électrodes ou se trouvant en contact avec le plasma.

La maîtrise et le contrôle des procédés basés sur l'utilisation des plasmas, exige la connaissance et la compréhension de tous les phénomènes et les processus dont le plasma est le siège. L'étude des milieux nécessite des efforts importants dans le domaine de la simulation numérique et l'élaboration des méthodes numériques robustes, précises et les moins coûteux possibles pour simuler les différents phénomènes mis en jeu. Grâce à leur caractère de reproductibilité, les simulations peuvent permettre par exemple, de vérifier une théorie à un coût moins important que l'expérience, mais aussi de compléter, voire de guider, des études expérimentales

La simulation numérique des plasmas est un moyen puissant d'investigation des phénomènes physiques, parallèle et complémentaire aux approches théoriques et expérimentales. Elle permet d'obtenir des informations détaillées sur des systèmes complexes, devant lesquels les méthodes de calcul analytiques sont impuissantes, et permet aussi d'accéder à des grandeurs souvent inaccessibles à l'expérience. Elle repose en premier lieu sur la description auto-cohérente du couplage entre phénomènes de transport des particules chargées et champ électrique. Cette première étape du modèle est nécessaire si non suffisante et constitue le modèle électrique. Du modèle électrique peuvent être déduits les taux de production des espèces actives qui constituent les termes sources d'un modèle de la chimie du plasma, décrivant l'interaction de ces espèces et l'évolution de leur concentration. Ce modèle cinétique doit inclure une représentation des écoulements du gaz. La chimie du plasma et les écoulements peuvent donc être regroupés dans un modèle cinétique et hydrodynamique.

Chapitre I
Généralités sur
les plasmas

I-1 plasma et gaz ionisé :

C'est vers 1923, que Langmuir à donner le nom plasma, à un milieu gazeux globalement neutre composé d'ion et d'électron (à cause de la similarité avec le sang). Plus généralement, il est employé pour décrire un milieu gazeux ionisé pouvant contenir une forte proportion de particules électriquement neutre (atomes, molécules). Le plasma est l'état de la matière la plus répandu dans l'univers. Il entre dans la composition des étoiles, des ionosphères et des magnétosphères, ainsi que dans la composition des décharges électriques naturelles (foudre) ou créées par l'homme (lasers, lampes, arcs, etc.).

On peut dire que le plasma est une collection de particules chargées, localisées dans l'espace, avec la densité des charges positives à peu près égale à la densité des charges négatives. Les charges positives sont généralement des ions, des atomes ou des molécules d'où on a enlevé un ou plusieurs électrons. Les Charges négatives sont généralement des électrons, mais dans certains milieux, on peut rencontrer des espèces électronégatives.

On distingue deux types de plasmas :

- Les plasmas chauds (dit aussi plasmas de fusion) où la température peut dépasser 10^6 K, il peut être complètement ionisé. Les plasmas de fusion sont l'objet du pari ambitieux des hommes de réaliser un réacteur nucléaire utilisant l'énergie de fusion entre des noyaux légers de deutérium et de tritium. La température de ces plasmas se chiffre en millions de degrés.
- Les plasmas froids hors équilibre sont des milieux faiblement ionisés dont les quelles la température des particules ne dépasse pas quelque dizaines de degrés. Dans les plasmas froids, les plasmas thermiques où toutes les espèces de particules (électrons, ions, atomes et molécules) ont des températures voisines, et les plasmas hors d'équilibre où les électrons ont des températures beaucoup plus élevées que celles des particules lourdes, à cause de leur grande mobilité, les électrons sont beaucoup accélérés dans le champ électrique et acquièrent une énergie cinétique importante, alors que les particules lourdes gardent une température ambiante. Les électrons peuvent céder une partie de leur énergie cinétique aux particules lourdes par l'intermédiaire des collisions élastiques, Le milieu atteint un état d'équilibre thermodynamique lorsque la température de l'ensemble est la même.

I-2 caractéristiques générales des plasmas

➤ Degrés d'ionisation :

Les gaz qui sont normalement des isolants électriques, peuvent devenir conducteurs lorsqu'ils sont soumis par exemple à un champ électrique intense le gaz ainsi ionisé contient par unité de volume, n_e : électron libre, n_i : ions et n_0 : neutres. En général, le gaz reste neutre à l'échelle macroscopique ($n_e = n_i$)

En raison de la forte intensité des forces électrostatiques induites par un écart entre n_e et n_i . On définit le degré d'ionisation d'un plasma par le rapport [1] :

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

On distingue généralement les plasmas faiblement ionisés, pour les quels la dynamique des particules chargées est essentiellement pilotée par les collisions binaires élastiques électron-neutre et ion-neutre et les plasmas fortement ionisés : dont le comportement dépend de la densité : lorsqu'ils sont très dilués (ex : le vent solaire), les particules chargées suivent leurs trajectoires essentiellement déterminées par le champ gravitationnel et les champs électromagnétiques. Par contre à haute densité (ex : les plasmas de fusion) chaque particule se trouvant à chaque instant en interaction avec d'autres particules chargées ce sont les interactions coulombiennes collectives qui déterminent la dynamique de plasma.

Nous verrons, en donnant les ordres de grandeur des fréquences de collision élastiques des électrons que la limite entre les deux catégories peut être fixée à la valeur : $\alpha_{ion} \sim 10^{-4}$.

➤ Longueur de Debye :

On a vu qu'un plasma est un par définition un milieu dans lequel les densités d'électrons et d'ions sont suffisamment grandes pour que les forces électrique associées à ces charges maintiennent une neutralité macroscopique du milieu. Plus précisément un milieu plasma peut supporter une non-neutralité mais uniquement sur des dimensions dont l'ordre de grandeur est fixé par la longueur de Debye. On comprend intuitivement que la longueur de Debye est d'autant plus faible que la densité de plasma est grande, et croît avec la température des particules chargées.

La longueur de Debye électronique est donnée par [1] :

$$\lambda_D = \sqrt{\frac{\varepsilon_0 k_B T_e}{n_e q_e^2}}$$

$\varepsilon_0 = 8,84.10^{-12} F.m^{-1}$ Avec $k_B = 1,385.10^{-23} J.K^{-1}$, $T_e =$ température des électrons.

$$q_e = -1,609.10^{-19} C .$$

En dessous de cette longueur, on peut observer des écarts à la neutralité.

➤ Fréquence du plasma :

Le comportement collectif des plasmas se manifeste lorsqu'on écarte le plasma de l'équilibre pour lequel les densités des particules chargées sont spatialement homogènes. Le milieu retourne alors à l'équilibre en oscillant à la fréquence plasma électronique.

La pulsation plasma électronique s'écrit, si l'on ne considère pas les collisions, avec (n_e) densité électronique et (m_e) masse de l'électron [1]:

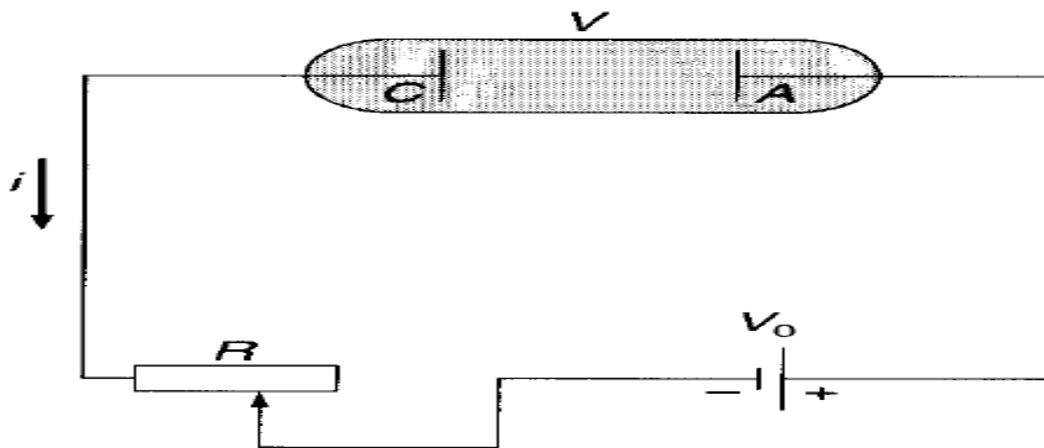
$$\omega_e = \sqrt{\frac{n_e q_e^2}{\varepsilon_0 m_e}}$$

I-3 Décharges électriques dans les gaz

I-3-1 Définition général :

On sait que les gaz sont généralement des bons isolants néanmoins, sous certaines conditions, il est possible de les faire traverser par un courant de particules chargées, on dit alors que le gaz est le siège d'une décharge. On entend alors par décharge électrique l'ensemble des phénomènes qui accompagnent le passage d'un courant électrique dans un milieu gazeux. Les premières études sur les décharges effectuées par le physicien Britannique Michael Faraday. Le mot « plasma » apparaît lui-même dans les années 1920, sous la plume de l'Américain I Langmuir, qui étudie la décharge dans les gaz. Le gaz que nous désirons ioniser, est injecté dans une enceinte confinée sous vide partiel ou à pression atmosphérique. Le plasma est ensuite généré par l'action d'une décharge électrique dans le gaz, qui a pour rôle de transférer de l'énergie à ce gaz pour l'exciter et l'ioniser (Figure I.1). En effet,

du fait de leur faible masse, les électrons libres récupèrent l'essentiel de cette énergie et provoquent, par collisions avec les particules lourdes du gaz, leur excitation et ionisation et donc l'entretien du plasma [2].



Figure

I-1 :

Circuit d'alimentation d'un tube à décharge en courant continu.

On distingue plusieurs types de décharges électriques [2] :

I-3-2 Décharge non autonome :

Aux courants très faibles, la décharge ne se produit que s'il existe une source extérieure produisant des charges électriques dans le gaz. Si la cathode est dans l'obscurité, l'agent de ionisation extérieur est constitué par les rayons cosmiques (Figure I-2, Branche A.B). Si la cathode est éclairée par la lumière contenant des rayons ultraviolets, les courants obtenus sont plus intenses (Figure I-2, partie A'.B) et croissent avec l'éclairement de la cathode ils sont dus à l'émission photoélectrique de la cathode. Dans les deux cas, si l'en supprime l'action. De l'agent extérieur (arrêt de l'éclairement), on constate que le courant disparaît, la décharge ne s'entretient pas par elle-même ou dit quelle est non autonome [2].

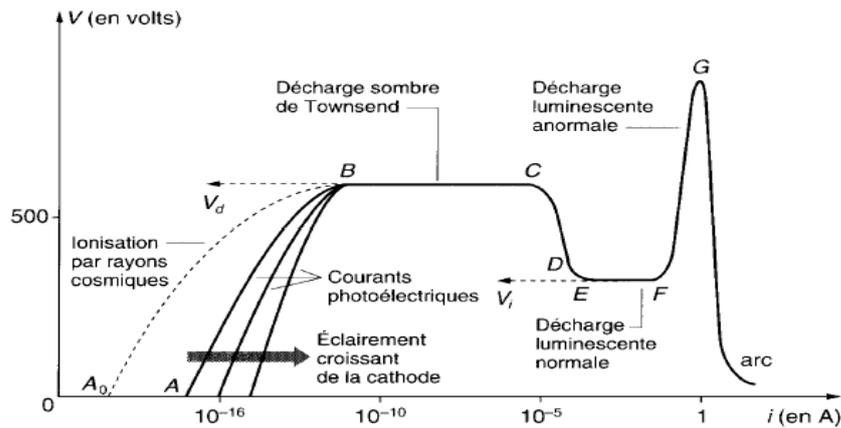


Figure I-2: Régimes de décharge en courant continu.

I-3-3 Décharge Autonome (Zone de collection avec multiplication) :

Lorsqu'on continue à faire croître la tension, un nouveau phénomène apparaît. Les électrons accélérés dans le champ inter électrodes acquièrent une énergie suffisante pour ioniser les atomes ou les molécules du gaz. Ils créent ainsi de nouveaux électrons qui sont aussi accélérés et peuvent ioniser d'autres atomes ou molécules. C'est une avalanche qui entraîne une augmentation extrêmement rapide de courant (partie c de la figure I-2).

Il peut atteindre la valeur de 1 A si la pression est suffisante, le courant électrique n'est plus conditionné par existence d'un agent ionisant extérieure et n'est limité que par les résistances internes de la source, ou pense ainsi en régime de la décharge de Townsend (partie D de la figure I-2), qui est une décharge autonome ou autonome.

I-3-4 Décharge de Townsend :

Comme on peut le voir sur la figure 2, cette décharge est caractérisée par une résistance interne dynamique $dV/dI = 0$. Quelque soit la force électromotrice de la source la différence de potentiel aux bornes de la décharge est fixe et constant. Elle est appelée tension d'amorçage statistique V_s . La courbe de la figure I-2 ne peut être décrite que si on fait varier le courant.

I-3-5 Décharge luminescente :

Lorsque le courant de la décharge augmente la tension commence de décroître, cette partie constitue une zone de transition entre la décharge de Townsend et la décharge luminescente [2]. ,

dans cette zone on a $\frac{dV}{dI} < 0$. La décharge luminescente est dite normale lorsque $\frac{dV}{dI} = 0$, et

anormale lorsque $\frac{dV}{dI} > 0$.la décharge luminescente normale se caractérise par l'apparition de plusieurs zones luminescentes diffusées et par une différence de potentiel constante entre les électrodes.

En repérant la position par un axe OX dirigé de la cathode vers l'anode, on observe successivement :

- L'espace sombre cathodique (dit de grooks).
- La lueur négative : c'est une zone d'ionisation intense ou sont produites les espèces de l'émission secondaire.
- L'espace sombre de Faraday.
- La colonne positive, repérée par sa forte luminosité : c'est la zone de loin la plus étendue. Elle est constituée d'un plasma neutre d'électrons et d'ions positifs dans laquelle le champ électrique reste constant.

I-3-6 Décharge à haute pression (décharge d'arc) :

L'augmentation de courant de la décharge s'accompagne d'une augmentation d'une part de la densité du courant j et d'autre part de la gaine cathodique, les ions perdent leurs énergies par collision ils en fournissent d'avantage à la cathode dont la température s'élève localement. L'émission thermoionique de la cathode s'effectue à partir d'une région très localisées appelée spot cathodique

.lorsque cette émission devienne stable la partie de la courbe $V = f(I)$ devient décroissante. On est donc en régime d'arc. La différence essentielle entre la décharge d'arc et la décharge luminescente se situe au niveau de l'émission cathodique l'apparition de l'arc est conditionnée par celle des phénomènes thermiques. Lorsque l'émission de courant devient très intense, la température s'élève localement, et contrairement au cas de la décharge luminescente (ou la totalité de la cathode est émissive), l'émission s'effectue ici à partir du spot cathodique.

➤ Les plasmas thermiques :

Les plasmas thermiques sont des milieux gazeux partiellement ionisés ou fortement ionisés, dans lesquels toutes les particules (molécules, atomes, ions, électrons) ont à peu près la même énergie cinétique moyenne[3]. Pour cette raison, on peut considérer qu'il existe un équilibre thermique ce qui permet de définir une température unique, dont la valeur dans les régions les plus chaudes peut atteindre 30000K et pour des pressions de l'ordre de celle de l'atmosphère, dont la densité électronique peut dépasser 10^{16}cm^{-3} , et elle est environ 1000 fois plus élevée que celle des plasmas bas pression.

L'état de ces plasmas est très proche de l'équilibre thermodynamique local (ETL) pour lequel les lois de l'équilibre statistique sont valables, à l'exception des lois sur le rayonnement. Dans des cas pratiques, le plasma peut présenter des écarts à l'équilibre (plasma à deux températures par exemple), mais ce qui caractérise ces milieux par rapport aux plasmas hors d'équilibre, c'est que l'on suppose toujours que les fonctions de distribution de toutes les espèces sont maxwelliennes ou, lorsqu'on veut calculer certains coefficients de transport, que les écarts à la distribution maxwellienne sont très faibles.

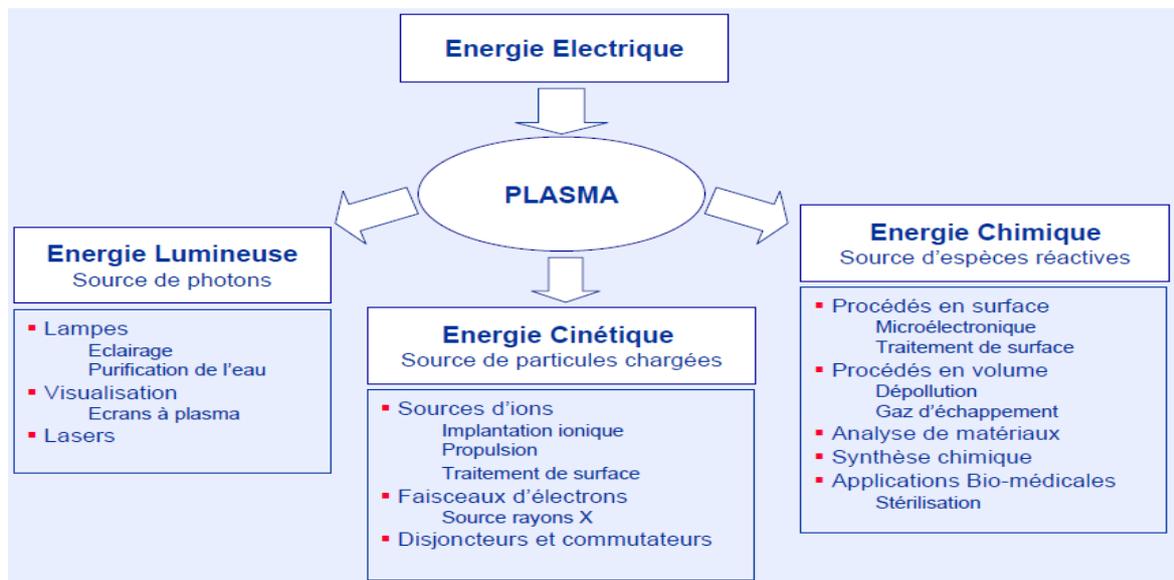
➤ Applications des plasmas :

La principale application des plasmas chauds, encore en développement, consiste en la production d'énergie par fusion thermonucléaire contrôlée d'éléments légers. Compte tenu des températures d'amorçages nécessaires aux réactions de fusion, l'utilisation de réacteurs à parois matérielles n'est pas envisageable, de sorte que le confinement par champs magnétiques (Tokamaks) ou par laser (fusion inertielle) semble une des seules voies possibles de production d'énergie par fusion. En outre, les éléments impliqués, essentiellement le deutérium et le tritium, sont disponibles en quantité abondante et ne produisent que des déchets faiblement radioactifs et pas de CO_2 .

Les autres applications des plasmas peuvent être classifiées [4], en considérant le plasma comme un convertisseur de l'énergie électromagnétique reçue en diverses autres formes d'énergie. Citons en particulier :

– la conversion de l'énergie électromagnétique en énergie lumineuse où l'on tente d'optimiser un processus d'excitation électronique particulier qui conduira à l'émission de photons (éclairage, écrans à plasmas, lasers X à plasma ...)

- la conversion de l'énergie électromagnétique en énergie cinétique où le plasma est utilisé en tant que source de particules chargées (sources d'ions, faisceaux d'électrons, propulsion ionique ...)
- la conversion de l'énergie électromagnétique en énergie chimique où l'on exploite le fait qu'un plasma peut être la source d'espèces chimiquement actives (traitement des matériaux, stérilisation, dépollution ...)



Chapitre II

Equations cinétiques

II-1 La description cinétique :

La théorie cinétique intervient dans de nombreuses applications de la physique statistique. Elle sert à décrire les phénomènes de transport et d'interaction dans un système de particules à une échelle microscopique. Ainsi, on rencontre des équations cinétiques dans la modélisation de la dynamique des gaz raréfiés [5], [6], le mouvement des particules chargées dans les semi-conducteurs, le transport neutronique, et même récemment le trafic routier, ainsi que d'autres applications en aérodynamique et micro-électronique. Chacune des diverses équations cinétiques existantes décrit un système physique particulier, et leurs formes spécifiques dépendent de la nature du système considéré (gaz, solide, liquide, plasma, ...).

Typiquement, l'équation de Boltzmann est l'équation cinétique de base pour la description des gaz monoatomiques parfaits. Cette équation décrit l'évolution du gaz à l'échelle microscopique, où le libre parcours moyen (distance typique parcourue par une particule entre deux collisions successives) est du même ordre de grandeur qu'une longueur macroscopique caractéristique du domaine physique considéré. Lorsque le libre parcours moyen devient petit par rapport à cette longueur caractéristique, une description macroscopique du système de particules est mieux adaptée. Dans ce régime fluide, la modélisation de l'état du gaz se fait alors en utilisant les quantités moyennes locales qui le caractérisent, telles que la densité de masse, la température (ou l'énergie) et la vitesse moyenne.

II-2 Fonction de distribution à une seule particule :

Lorsque les particules sont indépendantes il suffit, pour décrire complètement le système au niveau classique ou pour déduire ses propriétés macroscopiques, de connaître la fonction de distribution à une particule $f(\vec{r}, \vec{p}, t)$ dans l'espace de phases associé à la particule.

La distribution $f(\vec{r}, \vec{p}, t)$ ainsi définie peut être interprétée de la manière suivante :

$f(\vec{r}, \vec{p}, t) d^3r d^3p$ Représente à l'instant t , le nombre moyen de particules contenues dans l'élément de volume dans l'espace de phases $d\tau = d^3r d^3p$ Centré en \vec{r} et \vec{p}

Ce nombre peut être déterminé en intégrant la densité r par rapport à toutes les 6 variables :

$$d^6N = f(\vec{r}, \vec{p}, t) d^3r d^3p \quad (\text{II-1})$$

$$d^6N = N d^3r d^3p \int_{q_i} \int_{p_i} \rho(q_i, p_i, t) \prod_{i=4}^{3N} dq_i dp_i \quad (\text{II-2})$$

$$\text{Donc : } f(\vec{r}, \vec{p}, t) = N \int \dots \int_{q_i, p_i} \rho(q_i, p_i, t) \prod_{i=1}^{3N} dq_i dp_i \quad (\text{II-3})$$

II-3 Equation de Boltzmann sans collisions :

Considérons au temps t l'élément de volume $d\tau = d^3r d^3p$ Centré en \vec{r} et \vec{p}

De l'espace de phases à 6 dimensions, ils contiennent en moyenne $f(\vec{r}, \vec{p}, t) d^3r d^3p$ particules. A l'instant $t+dt$, ces particules se sont déplacées sous l'influence du potentiel moyen $U(r)$ créé par les autres particules. En effet chaque particule est soumise à une à une force : $F = -\frac{dU}{dr}$. L'élément de volume $d^3r d^3p$ devient $d\tau' = d^3r' d^3p'$ outil centré en \vec{r}' et \vec{p}' .

Nous allons montrer que le volume de l'espace des phases à 6 dimensions se conserve ($d\tau = d\tau'$), pour cela nous devons écrire les équations de mouvement et exprimer $d^3r d^3p$ en fonction de $d^3r' d^3p'$:

$$\begin{cases} \frac{d\vec{r}}{dt} = \vec{v} = \frac{\vec{p}}{m} \\ \frac{d\vec{p}}{dt} = \vec{F} \end{cases} \Leftrightarrow \begin{cases} \vec{r}' = \vec{r} + \frac{\vec{p}}{m} dt \\ \vec{p}' = \vec{p} + \vec{F} dt \end{cases} \quad (\text{II-4})$$

L'élément de volume $d^3r' d^3p' = |J| d^3r d^3p$

J : C'est le Jacobien qui permet de faire la transformation et passer de $d\tau$ à $d\tau'$

La projection des équations (II-4) sur les différents axes de l'espace de phases à 6 dimensions donne :

$$\begin{cases} x' = x + \frac{p_x}{m} dt; & y' = y + \frac{p_y}{m} dt; & z' = z + \frac{p_z}{m} dt \\ p'_x = p_x + F_x dt; & p'_y = p_y + F_y dt; & p'_z = p_z + F_z dt \end{cases} \quad (\text{II-5})$$

Donc J vaut:

$$|J| = \begin{vmatrix} 1, & 0, & 0, & \frac{dt}{m}, & 0, & 0 \\ 0, & 1, & 0, & 0, & \frac{dt}{m}, & 0 \\ 0, & 0, & 1, & 0, & 0, & \frac{dt}{m} \\ \frac{\partial F_x}{\partial x} dt, & 0, & 0, & 1, & 0, & 0 \\ 0, & \frac{\partial F_y}{\partial y} dt, & 0, & 0, & 1, & 0 \\ 0, & 0, & \frac{\partial F_z}{\partial z} dt, & 0, & 0, & 1 \end{vmatrix} \quad (\text{II-6})$$

$$|J| = 1 + 0 dt + at^2$$

On se limite au premier ordre puisque dt est très faible : $|J| = 1$

$$\text{Et on a : } d^3 r' d^3 p' = d^3 r d^3 p \quad (\text{II-7})$$

D'autre part si on néglige les collisions le nombre de particules se conserve :

$$f(\vec{r}, \vec{p}, t) d^3 r d^3 p = f(\vec{r}', \vec{p}', t') d^3 r' d^3 p' \quad (\text{II-8})$$

Ce qui conduit à :

$$f(\vec{r}, \vec{p}, t) = f(\vec{r}', \vec{p}', t') \quad (\text{II-9})$$

On vient de démontrer que cette relation est équivalente au théorème de Liouville, mais à 6 dimensions. On peut aussi cette relation sous la forme :

$$f(\vec{r}, \vec{p}, t) - f(\vec{r} + d\vec{r}, \vec{p} + d\vec{p}, t + dt) = 0 \quad (\text{II-10})$$

Ou $df = 0$

Qui peut aussi se mettre sous sa forme développée :

$$df = \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right) dt + \left(\frac{\partial f}{\partial x} dx + \frac{\partial f}{\partial y} dy + \frac{\partial f}{\partial z} dz \right) + \left(\frac{\partial f}{\partial p_x} dp_x + \frac{\partial f}{\partial p_y} dp_y + \frac{\partial f}{\partial p_z} dp_z \right) = 0 \quad (\text{II-11})$$

Soit en divisant par dt :

$$\frac{df}{dt} = \frac{\partial f}{\partial t} + \left(\frac{\partial f}{\partial x} \frac{\partial x}{\partial t} + \frac{\partial f}{\partial y} \frac{\partial y}{\partial t} + \frac{\partial f}{\partial z} \frac{\partial z}{\partial t} \right) + \left(\frac{\partial f}{\partial p_x} \frac{\partial p_x}{\partial t} + \frac{\partial f}{\partial p_y} \frac{\partial p_y}{\partial t} + \frac{\partial f}{\partial p_z} \frac{\partial p_z}{\partial t} \right) = 0$$

Qui peut s'écrire sous la forme :

$$\frac{df}{dt} = \frac{\partial f}{\partial t} + \frac{\vec{p}}{m} \cdot \vec{\nabla}_r f + \vec{F} \cdot \vec{\nabla}_p f = 0 \quad (\text{II-12})$$

C'est l'équation de Boltzmann sans collision, c'est une équation linéaire aux dérivées partielles.

on peut prendre comme variables indépendantes la position \vec{r} et la vitesse \vec{v} plutôt que la position \vec{r} et l'impulsion \vec{p} . La relation entre \vec{p} et \vec{v} est très simple dans notre cas ($\vec{p} = m\vec{v}$).

L'espace associé (vitesse-position) est aussi de dimension 6, nous désignerons par $f(\vec{r}, \vec{v}, t)$ la fonction de distribution correspondante.

Le passage de l'une à l'autre formulation ne présente pas de difficulté particulière, avec ces nouvelles variables, l'équation de Boltzmann sans terme de collisions s'écrit :

$$\frac{df}{dt} = \frac{\partial f}{\partial t} + \vec{v} \cdot \vec{\nabla}_r f + \frac{\vec{F}}{m} \cdot \vec{\nabla}_v f = 0 \quad (\text{II-13})$$

II-4 Interprétation de l'équation de Boltzmann :

L'équation de Boltzmann, sous sa forme générale est obtenue lorsqu'on tient en compte des collisions, elle est donnée par :

$$\frac{df}{dt} = \frac{\partial f}{\partial t} + \frac{\vec{p}}{m} \cdot \vec{\nabla}_r f + \vec{F} \cdot \vec{\nabla}_p f = \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{coll} \quad (\text{II-14})$$

Ou le second membre de cette équation est dû aux collisions

Le nombre de particules localisées dans élément de volume change au cours du temps :

-1 A cause des déplacements des particules : terme $\left(\frac{\vec{p}}{m} \cdot \vec{\nabla}_r f \right)$

-2 sous l'effet des forces extérieures : terme $\left(\vec{F} \cdot \vec{\nabla}_p f \right)$

-3 lorsque les particules se déplacent elles subissent des collisions qui modifient leur répartition spatiales et leurs vitesses. Leurs fonctions de distribution s'en trouvent affectées (2ème membre de l'équation de Boltzmann)

II-5 Fonction de distribution et moyennes locales :

La connaissance de la fonction distribution $f(\vec{r}, \vec{p}, t)$ permet de calculer les probabilités afin de décrire l'état du système. Elle conduit aussi à la détermination de certaines grandeurs

macroscopique caractérisant le système telles que la viscosité, la pression, la conductivité thermique et beaucoup d'autre.

La valeur moyenne au point r et au temps t de toute propriété $A(\vec{r}, \vec{p}, t)$ liée à une particule peut être calculée à partir de la fonction de distribution $f(\vec{r}, \vec{p}, t)$ par [7] :

$$A(\vec{r}, t) = \frac{\int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} A(\vec{r}, \vec{p}, t) f(\vec{r}, \vec{p}, t) dp_x dp_y dp_z}{\int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} f(\vec{r}, \vec{p}, t) dp_x dp_y dp_z} \quad (\text{II-15})$$

$$\text{Avec } n(\vec{r}, t) = \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} f(\vec{r}, \vec{p}, t) dp_x dp_y dp_z \quad (\text{II-16})$$

Qui représente la densité locale autour de \vec{r} (un nombre par unité de volume),

On peut alors écrire :

$$A(\vec{r}, t) = \frac{1}{n(\vec{r}, t)} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} A(\vec{r}, \vec{p}, t) f(\vec{r}, \vec{p}, t) dp_x dp_y dp_z \quad (\text{II-17})$$

La quantité $A(\vec{r}, \vec{p}, t)$ peut être l'énergie cinétique, la quantité de mouvement, ou toute autre propriété caractéristique d'une particule. Ce peut être un scalaire, un vecteur, ou une quantité plus complexe. La notation $A(\vec{r}, t)$ signifie que la valeur moyenne dépend de la position r et du temps t .

Appliquons cette définition à la vitesse v d'une particule. On a:

$$u(\vec{r}, t) = \frac{1}{n(\vec{r}, t)} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \vec{v} f(\vec{r}, \vec{p}, t) dp_x dp_y dp_z \quad (\text{II-18})$$

La quantité $u(\vec{r}, t)$ est la vitesse moyenne du gaz au point r et au temps t . On l'appelle aussi vitesse hydrodynamique car c'est cette quantité qui entre dans les équations hydrodynamiques du gaz ou d'un fluide.

II-6 La distribution de Maxwell-Boltzmann :

Un exemple important est la fonction de distribution d'une population de particules qui sont à l'équilibre thermique entre elles. Ceci résulterait d'un confinement suffisant de l'ensemble des particules dans une région de l'espace de telle sorte qu'elles échangent de l'énergie de façon aléatoire et atteignent une distribution stationnaire. Il en résulte une distribution de leurs vitesses qui peut être décrite par une distribution normale qui a la forme d'une Gaussienne [8]:

$$f(\vec{r}, \vec{v}, t) = A(\vec{r}, t) \exp(-\beta^2 v^2) \quad (\text{II-19})$$

Ici, nous permettons la variation spatiale de la densité. Il est évident, de par la forme de l'équation (II-19), que la distribution de vitesse est isotrope. En utilisant cette forme de la distribution, la densité devient :

$$n(\vec{r}, t) = \int A(\vec{r}, t) \exp(-\beta^2 v^2) d\vec{V} \quad (\text{II-20})$$

En utilisant l'élément de volume $d\vec{V} = 4\pi v^2 dv$ dans l'espace des vitesses pour une distribution isotrope en vitesse on obtient :

$$\begin{aligned} n(\vec{r}, t) &= A(\vec{r}, t) \int_0^\infty 4\pi v^2 \exp(-\beta^2 v^2) dv \\ &= 4\pi A(\vec{r}, t) \frac{\sqrt{\pi}}{4\beta^3} \end{aligned} \quad (\text{II-21})$$

Ceci permet d'écrire la fonction de distribution sous la forme :

$$f(\vec{r}, \vec{v}, t) = \frac{\beta^3}{\pi^2} n(\vec{r}, t) \exp(-\beta^2 v^2) \quad (\text{II-22})$$

De l'équation (II.3), l'énergie cinétique moyenne dans la direction x est donnée par :

$$\varepsilon_x = \frac{1}{2} m \langle v_x^2 \rangle \quad (\text{II-23})$$

L'intégrale sur les vitesses en utilisant la forme (II.12) de la fonction de distribution donne :

$$\varepsilon_x = \frac{m}{4\beta^2}$$

Dans un système à l'équilibre thermodynamique, l'énergie $\frac{1}{2} K_B T$ est associée à chaque degré de liberté (K_B est la constante de Boltzmann et T la température en degré absolu). Donc :

$$\varepsilon_x = \frac{m}{4\beta^2} = \frac{1}{2} K_B T \Rightarrow \beta = \sqrt{\frac{m}{2K_B T}} \quad (\text{II-24})$$

Cette dernière relation nous donne la forme finale de la fonction de distribution de Boltzmann:

$$f(\vec{r}, \vec{v}, t) = \left(\frac{m}{2\pi K_B} \right)^{3/2} n(\vec{r}, t) \exp\left(-\frac{mv^2}{2K_B T}\right) \quad (\text{II-26})$$

Nous pouvons aussi définir une fonction de distribution en termes de l'énergie

$F(\varepsilon)d\varepsilon = 4\pi v^2 f(\vec{r}, \vec{v}, t) dV$ Comme étant le nombre de particules dans l'intervalle ε et $\varepsilon + d\varepsilon$
Comme $\varepsilon = \frac{1}{2} mv^2$, nous avons pour obtenir:

$$F(\varepsilon) = \frac{1}{(K_B T)^{3/2}} \left[\frac{4\varepsilon}{\pi} \right]^{1/2} n(\vec{r}, t) \exp\left(-\frac{\varepsilon}{K_B T}\right) \quad (\text{II-27})$$

Nous écrivons la distribution en énergie avec $\mathbf{F}(\epsilon)$ à cause de sa forme fonctionnelle différente de la distribution en vitesse.

➤ **Paramètres utiles de la distribution de maxwell Boltzmann :**

La valeur moyenne du module de la vecteur vitesse \vec{v} ($\equiv \langle v \rangle$) est donné par :

$$\begin{aligned} \langle v \rangle &= \int_0^{\infty} v f(v) dv \\ &= \int_0^{\infty} 4\pi v^3 \left(\frac{m}{2\pi k_B T} \right)^{\frac{3}{2}} \exp\left(-\frac{mv^2}{2k_B T}\right) dv \\ &= \left(\frac{8k_B T}{\pi m} \right)^{1/2} \end{aligned} \quad (\text{II-28})$$

La vitesse quadratique moyenne est donnée par :

$$v_* = \sqrt{\langle v^2 \rangle} = \left(\frac{3k_B T}{m} \right)^{1/2} \quad (\text{II-29})$$

La définition de vitesse thermique est quelque peu arbitraire et varie avec les auteurs. Nous utiliserons la définition suivante :

$$v_{\text{th}} = \left(\frac{k_B T}{m} \right)^{1/2} \quad (\text{II-30})$$

II -7 Etablissement des équations de transport :

L'examen de l'équation cinétique révèle qu'il faut évaluer la fonction de distribution, fonction de la vitesse, ce qui est difficile à évaluer. Souvent, nous sommes intéressés de savoir des paramètres macroscopiques tels la densité ou la vitesse moyenne. Dans ce cas, nous préférons utiliser un modèle fluide du plasma dans lequel celui-ci est traité comme un fluide conducteur du point de vue électrique. Cette approche est particulièrement appropriée pour la description des ondes dans le plasma à condition que ces ondes aient des vitesses de phase plus grandes que les vitesses thermiques des particules.

II-7-1 Définitions des grandeurs hydrodynamiques :

Commençons avec la fonction de distribution $\mathbf{f}_\alpha(\vec{\mathbf{r}}, \vec{\mathbf{v}}, \mathbf{t})$. Pour chaque espèce a nous définissons les quantités moyennes [9] :

- La densité :

$$n_\alpha(\mathbf{r}, t) = \int d\vec{V} f_\alpha(\vec{r}, \vec{v}, t) \quad (\text{II-31})$$

- La vitesse de dérive :

$$\vec{u}_\alpha \equiv \langle \vec{v}_\alpha \rangle = \frac{1}{n_\alpha} \int d\vec{V} \vec{v} f_\alpha(\vec{r}, \vec{v}, t) \quad (\text{II-32})$$

- La vitesse thermique :

$$\vec{w}_\alpha \equiv \vec{v}_\alpha - \vec{u}_\alpha \quad (\text{II-33})$$

- Le tenseur de pression :

$$\vec{P}_\alpha = m_\alpha \int d\vec{V} \vec{w}_\alpha \otimes \vec{w}_\alpha f_\alpha(\vec{r}, \vec{v}, t) \quad (\text{II-34})$$

Où :

$$\begin{aligned} P_{ij} &= m \int w_{ij} f d\vec{V} \\ &= m \int (v_i - u_i) (v_j - u_j) f d\vec{V} \\ &= mn \langle (v_i - u_i) (v_j - u_j) \rangle \end{aligned} \quad (\text{II-35})$$

- L'énergie par unité de volume :

$$\varepsilon_\alpha = \frac{1}{2} m_\alpha \int d\vec{V} w_\alpha^2 f_\alpha(\vec{r}, \vec{v}, t) \quad (\text{II-36})$$

- Le flux de chaleur :

$$\vec{Q}_\alpha = \frac{1}{2} m_\alpha \int d\vec{V} w_\alpha^2 \vec{w}_\alpha f_\alpha(\vec{r}, \vec{v}, t) \quad (\text{II-37})$$

II-7-2 Equations de transport :

Soit $f(\vec{r}, \vec{v}, t)$ la fonction de distribution qui obéit à l'équation de Boltzmann.

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \vec{v} \cdot \vec{\nabla}_r \cdot f + \frac{\vec{F}}{m} \cdot \vec{\nabla}_v \cdot f = \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{coll} \quad (\text{II-38})$$

qui s'écrit aussi

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \sum_i v_i \cdot \frac{\partial f}{\partial x_i} + \sum_i \frac{F_i}{m} \frac{\partial f}{\partial v_i} = \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{coll} \quad (\text{II-39})$$

Soit, de façon générale, $A(\vec{r}, \vec{v}, t)$ une fonction du vecteur vitesse, du vecteur position et du temps, dont la valeur moyenne de la grandeur $A(\vec{r}, t)$ est définie par l'équation :

$$\langle A(\vec{r}, t) \rangle = \frac{1}{n} \int_{\vec{v}} A(\vec{r}, \vec{v}, t) f d^3 v$$

Pour obtenir les équations de transport, on intègre sur la vitesse v l'équation de Boltzmann multipliée par une fonction $A(\vec{r}, \vec{v}, t)$. Le système d'équations de transport électronique comprend [9] :

➤ **L'équation de conservation des particules :**

L'équation de continuité ($A=1$) qui décrit le transport des électrons de densité n_e :

$$\frac{\partial n_e}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot (n_e \vec{u}_e) = S_e \quad (\text{II-40})$$

Avec \vec{u}_e la vitesse moyenne des électrons

Se le terme source qui vaut : $S_e = (\nu_i - \nu_a)n_e - r_e n_e n_p$

Où

ν_i : La fréquence moyenne d'ionisation

ν_a : La fréquence moyenne d'attachement

r_e : Le coefficient de recombinaison

Les collisions élastiques ne changent pas le nombre de particules de telle sorte que si nous négligeons les sources comme l'ionisation ou les pertes telle la recombinaison nous obtenons :

$$\frac{\partial n_e}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot (n_e \vec{u}_e) = 0 \quad (\text{II-41})$$

➤ **L'équation de conservation de la quantité de mouvement :**

L'équation de transfert de la quantité de mouvement ($\vec{A} = m\vec{v}$) pour les électrons on peut écrire :

$$n_e m_e \left[\frac{\partial \vec{u}_e}{\partial t} + (\vec{u}_e \cdot \vec{\nabla}) \vec{u}_e \right] + \vec{\nabla} P_e = -q \vec{E}_e n_e - n_e m_e \vec{u}_e \nu_m \quad (\text{II-42})$$

Avec $P_e = n_e k_B T_e$, la pression électronique et ν_m la fréquence de collision avec les neutres

➤ **L'équation de conservation d'énergie :**

De la même façon que nous avons dérivés les équations de conservation de particules ou de quantité de mouvement, nous pouvons déduire l'équation de la conservation d'énergie. Bien que cette équation soit importante pour certains aspects de la physique des plasmas, elle est d'intérêt limité pour le traitement des ondes, qui est un point important ici.

Cette équation représente le troisième moment de l'équation de Boltzmann :

$$\frac{\partial w_e}{\partial t} + \vec{\nabla}(\vec{u}_e w_e) + \vec{\nabla}(P_e \vec{u}_e) + \vec{\nabla} Q_e = -q \vec{E}_e n_e \vec{u}_e - n_e \sum_k \varepsilon_k \nu_k \quad (\text{II-43})$$

Où
$$w_e = +n_e \left(\frac{1}{2} m_e u_e^2 + \frac{3}{2} k_B T_e \right)$$

(II-44)

Avec Q_e : flux de chaleur

ε_k : l'énergie mise en jeux lors d'une collision avec une particule k

ν_k : La fréquence moyenne des différents processus de collisions élastiques

Notons que les équations que nous avons développé donne une description multi-fluide parce qu'il existe un jeu d'équations pour chaque espèce dans le plasma, électrons, ions et atomes neutre.

Comme ces équations fluides décrivent des espèces chargées, elles doivent être complétées par l'équation de Poisson qui donne le champ électrique en fonction de la densité de charge:

$$\vec{\nabla} \vec{E} = \frac{1}{\varepsilon_0} \sum n_k q_k \quad (\text{II-45})$$

II-8 Le terme de collision :

Le terme de collision dans le modèle fluide décrit les interactions entre les espèces dans le plasma, généralement entre les électrons et les neutres. En général, ce terme peut décrire des collisions élastiques ou inélastiques.

- les collisions élastiques, sont responsables de la conduction et de la diffusion de la chaleur. Elles conduisent essentiellement à un changement de trajectoire des particules et des transferts d'énergie cinétique, sans modification des énergies internes.

- les collisions inélastiques, sont responsables de changements au niveau de l'énergie interne des molécules, de la nature des particules (ionisation, dissociation, attachement électronique, etc..).

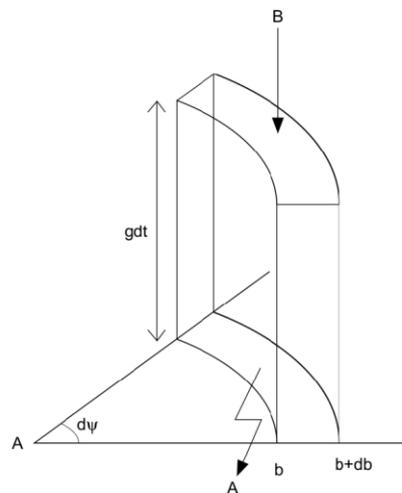


Figure II-1 : Schématisation de l'élément de volume de la collision où b est le paramètre d'impact et g la vitesse relative avant la collision

Considérons les molécules de type A. Dans l'intervalle de vitesse dv_A autour de la vitesse v_A avant la collision on a un nombre $f_A(v_A) dv_A$ de particules par unité de volume. On suppose que la particule A subit une collision avec une particule B, et qu'après la collision elle a une vitesse v_A' . (Plus exactement elle se trouve dans un élément de volume dv_A' autour de v_A' .) Entre temps, la particule B est aussi déviée du volume dv_B autour de v_B à dv_B' autour de v_B' .

- **Collisions où la particule A sort de dv_A :**

Le nombre de collisions avec une particule A dans l'intervalle $dest$ le dt nombre de particules B dans le volume $(db) (b d\psi)(gdt)$ [10] :

$$dN_B = \left(\int f_B(\vec{v}_B) dv_B \right) b db d\psi g dt \quad (\text{II-46})$$

Le nombre total de collisions entre les particules B et les particules A dans dv_A est $f_A(v_A) dv_A N_B$:

$$f_A(\vec{v}_A) dv_A dN_B = \left(\int f_B(\vec{v}_B) f_A(\vec{v}_A) dv_A dv_B \right) b db d\psi g dt \quad (\text{II-47})$$

Ce qui nous intéresse est le nombre de collisions, indépendamment de la vitesse v_B , du paramètre d'impact b et de l'angle ψ :

$$dN_{c,out} = dv_A dt \iiint f_A f_B b g db d\psi dv_B \quad (\text{II-48})$$

- **Collisions où la particule entre dans dv_A :**

Une particule qui était dans dv_A' est frappée dans dv_A par la collision; la particule B est changée de dv_B' à dv_B . Ce nombre vaut [10] :

$$dN_B' = \left(\int f_B(\vec{v}_B') dv_B' \right) b db d\psi g' dt \quad (\text{II-49})$$

Où $g' = g$ pour les collisions inverses. On a que le nombre de collisions avec les particules dans dv_A' est :

$$f_A(\vec{v}_A') dv_A' dN_B = \left(\int f_B(\vec{v}_B') f_A(\vec{v}_A') dv_A' dv_B' \right) b db d\psi g dt \quad (\text{II-50})$$

De telle sorte que le nombre de collision devient :

$$dN_{c,in} = dv_A' dt \iiint f_A' f_B' b g db d\psi dv_B' \quad (\text{II-51})$$

On a aussi $dv_A' dv_B' = dv_A dv_B$ donc le changement net est donné par :

$$dN_{c,in} - dN_{c,out} = \left. \frac{\partial f_A}{\partial t} \right|_{coll} dv_A dt = dv_A dt \iiint [f_A' f_B' - f_A f_B] g b db d\psi dv_B \quad (\text{II-52})$$

Normalement, on note $v_A \rightarrow v$ et $f_A \rightarrow f$:

$$\left. \frac{\partial f}{\partial t} \right|_{coll} = \iiint [f' f_B' - f f_B] g b db d\psi dv_B \quad (\text{II-53})$$

Connaissant la relation entre le paramètre d'impact b , l'angle de déviation χ et σ .

$$\int b db d\psi = d\chi \int \sigma(\chi, \psi) \sin \chi d\psi = 2\pi \sigma(\chi) \sin \chi d\chi \quad (\text{II-54})$$

$$\text{On obtient finalement} \quad \left. \frac{\partial f}{\partial t} \right|_{coll} = \iiint [f' f_B' - f f_B] g 2\pi \sigma(\chi) \sin \chi d\chi dv_B \quad (\text{II-55})$$

Chapitre III

Modélisation

d'un Plasma froid

III-1 Introduction :

Les plasmas froids jouent un rôle majeur en micro-électronique, dans la fabrication des circuits intégrés. Ils sont utilisés comme technique de gravure anisotrope due aux impacts ioniques sur le substrat. Le plasma est responsable des processus de Synthèse des radicaux réactifs activée par les impacts électroniques dans le plasma. La conception des réacteurs à plasma a permis l'utilisation des procédés plasma dans le traitement des déchets, la réduction des gaz toxique qui pollue l'atmosphère et aussi la purification des eaux.

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

III-2 But de la modélisation :

L'expérimentation sur les plasmas coutant cher, et du fait de la complexité des problèmes rencontrés dans la physique des plasmas, il est indispensable de développer des modèles numériques de simulation des mécanismes rencontrés lors d'une décharge. En effet, la modélisation joue un rôle assez important dans le développement de la théorie des plasmas par la pertinence des résultats numériques prédits par ces simulations.

L'étude des plasmas peut être abordée suivant deux angles distincts qui sont la description sous forme de fluide ou l'aspect cinétique. De façon générale, ces modèles permettent la détermination :

- Des paramètres électriques de la décharge, c'est-à-dire les variations spatio-temporelles du champ électrique, du courant et du déphasage tension-courant.
- Des profils de densités et des fonctions de distribution en énergie des espèces chargées
- Des taux (ou fréquences) des divers processus de collision tels l'ionisation, l'attachement, l'excitation ou la dissociation.

L'équation de base de la théorie des plasmas fait intervenir la fonction de distribution des vitesses ou fonctions de distribution en énergie des espèces.

III-3 Méthodes de modélisation :

III-3-1 Hypothèse généraux :

- Les plasmas concernés sont faiblement ionisés (fraction $< 10^{-2}$ des atomes sont ionisés). Les électrons et les ions entrent en collision surtout avec les neutres et très peu entre eux tant que leur densité ne dépasse pas typiquement 10^{12} cm^{-3} .
- Le libre parcours moyen, $\lambda \approx \frac{1}{(n_0 \sigma_s)}$ où n_0 est la densité de neutres et σ_s est la Section efficace, est comparable pour les électrons et les ions ($\sigma_s \approx 10^{-15} \text{ cm}^2$). A 1 m Torr (pression typique des réacteurs à plasma), il est donc de l'ordre de la dizaine de centimètres, i.e. comparable aux dimensions du système.
- La fréquence de collision des électrons ou des ions sur les neutres est donnée par $\nu_{xn} = \frac{u_{xT}}{\lambda}$ (x = électron ou ion) et $u_{xT} = \left(\frac{kT}{m_x}\right)^{1/2}$ est la vitesse thermique.
- Le champ électromagnétique (source externe) transfère de l'énergie principalement aux électrons par le mécanisme d'absorption collisionnelle (les ions gagnent moins en raison de leur masse élevée):

$$\frac{dE_e}{dt} \approx \frac{e^2 \bar{\varepsilon}^2}{m_e \omega^2} \nu_{en} \quad (\text{III-1})$$

E_e = énergie d'un électron;

ω = fréquence du champ électrique appliqué;

$\bar{\varepsilon}^2$ = moyenne du carré du champ électrique appliqué;

ν_{en} = fréquence de collision élastique électron-neutre.

- Les particules lourdes sont à une température égale à celle du gaz (300 K ou 0.03 eV) en raison de leur bonne conductivité thermique et du contact thermique avec le milieu extérieur. Elle est généralement moins élevée que celle des électrons.

III-3-2 Hiérarchie des modèles :

On considère ici 3 types de modèles allant du plus précis au plus approximatif, i.e. les modèles cinétiques, les modèles fluides (hydrodynamiques) et le modèle particulaire.

III-3-2-1 Modèles cinétiques :

C'est l'approche la plus précise mais la moins utilisée en raison de sa mise en place dans le cas des géométries multidimensionnelles. C'est basé sur la résolution directe de l'équation de Boltzmann qui s'écrit [11] :

$$\frac{\partial f_a}{\partial t} + \frac{q_a}{m} \left(E + \frac{v \times B}{c} \right) \nabla_v f_a + v \nabla_r f_a = \sum_b C_{ab} \quad (\text{III-2})$$

$f_a(r, v, t)$ = fonction de distribution pour l'espèce a;

r et v sont respectivement la position et la vitesse des particules

$E(r; t)$, $B(r; t)$ = champ électromagnétique (sources externes)

q_a = charge de l'espèce a.

$C_{ab} = C_{ab}(f_a, f_b)$ = intégrale de collision.

Cette équation est valide pour les plasmas faiblement ionisés, gouvernés par les collisions entre particules chargées et espèces neutres et donne des distributions de vitesse des électrons et des ions. Elle peut être résolue par intégration directe : c'est la méthode la plus précise mais la plus difficile à mettre en place.

Dans le cas particulier où les champs externes sont négligeables, alors la fonction de distribution maxwellienne est une solution de l'équation de Boltzmann,

$$f_a = n_a \left(\frac{m_a}{2\pi kT_a} \right)^{3/2} \exp \left(- \frac{E_a}{k_B T_a} \right) \quad (\text{III-3})$$

Où $E_a = \frac{m_a v^2}{2}$ (énergie cinétique)

Il est toujours nécessaire de simplifier l'équation générale et de chercher des solutions approximatives. Ces simplifications peuvent porter sur les points suivants:

- **Nombre de dimensions:**

Dans le cas général, la fonction de distribution f_a est décrite dans l'espace de phase (r, v) comportant 6 dimensions, ce qui est en général impossible à résoudre à l'aide de méthodes analytiques et encore très exigeant pour les ordinateurs d'aujourd'hui. Il est nécessaire de réduire le nombre de dimensions en imposant des symétries dans le problème.

- **Termes de collisions:**

Les intégrales de collision “exactes” sont souvent très complexes. On peut les simplifier de diverses façons:

a) Approximation de diffusion ou équation de Fokker-Planck qui est valide lorsque les collisions à faible transfert d'impulsion dominant comme par exemple dans les plasmas où les collisions coulombiennes élastiques dominant (ce qui n'est pas le cas dans les réacteurs à plasmas en général).

b) Modèles du type B-G-K (Bhatnagar -Gross-Krook) où l'on fait intervenir des Fréquences de collisions. Par exemple, pour les collisions élastiques électron-neutre, on pose

$$C_{en} = \nu_{en} (F_e - f_e) \quad (\text{III-4})$$

Où ν_{en} est la fréquence de collision électron-neutre, f_e est la fonction de distribution des électrons :

$$f_e(v) = n_e \left(\frac{m_e}{2\pi k T_n} \right)^{3/2} \exp \left(-\frac{m_e (v - u_n)^2}{2k T_n} \right) \quad (\text{III-5})$$

Où u_n est la vitesse moyenne des neutres et T_n leur température.

- Développement en polynômes de Legendre:

Une autre simplification souvent employée est de faire un développement limité de la fonction de distribution dans l'espace des vitesses en polynômes de Legendre P_n , i.e.

$$f(v, \theta) = \sum_{n=0}^N f_n(v) P_n(\cos \theta) \quad (\text{III-6})$$

Où θ est l'angle par rapport à une direction privilégiée du problème (par exemple la direction du champ électrique), et de résoudre le système d'équations couplées pour les différents termes du développement. Le plus souvent on pose $N = 1$, i.e. que

$$f = f_0 + f_1 \cos \theta, \text{ et on espère que } f_2 \ll f_1.$$

III-3-2-2 Modèles microscopiques ou particuliers :

Dans un modèle microscopique, les phénomènes de transport électronique et ionique sont décrits de façon beaucoup plus détaillée que dans un modèle fluide.

Le modèle particuliers appelé aussi méthode PIC [12, 13] consiste à faire évoluer les particules sous l'action des champs électrique et/ou magnétique. Elle détermine les valeurs des champs en tout point. En intégrant les équations de mouvement des particules sous l'action des champs et en absence de collisions, elle détermine leurs trajectoires. En présence de collisions, il faut compléter la méthode PIC avec la méthode MC (pour Monte-Carlo),

basée sur les probabilités [14]. Les collisions sont initiées en tirant aléatoirement des nombres compris entre 0 et 1. La méthode PIC-MCC permet d'établir un bilan statistique des particules et d'obtenir les grandeurs macroscopiques caractérisant le système étudié. Ce type de modèles est le plus précis, mais aussi le plus coûteux en temps de calcul.

III-3-2-3 Modèles fluides (hydrodynamiques):

Les codes fluides ont largement été utilisés dans l'étude des plasmas froids pour leur adaptabilité et la rapidité de leurs calculs. Les électrons sont caractérisés par une température T_e . Les particules lourdes sont supposées être en équilibre thermique avec la température du gaz, très inférieure à la température électronique. Les modèles fluides résolvent les 3 premiers moments de l'équation de Boltzmann dans le temps et l'espace. Ils décrivent le plasma en fonction des quantités macroscopiques (la densité, la vitesse moyenne, la pression, le flux de chaleur). La température s'obtient par l'équation d'état : $T = p / K_B N_g$. La fonction de distribution en énergie des électrons est calculée séparément et couplée au modèle fluide, elle fournit les coefficients de transport des électrons [1]. Ces moments correspondent à une série en théorie illimitée d'équations hydrodynamiques.

Il y a en fait une infinité de ces moments de la fonction de distribution et ils conduisent à une infinité d'équations fluides couplées.

En prenant les moments de l'équation de Boltzmann, on obtient les 5 équations exactes suivantes (somme sur les indices répétés):

➤ Approximation de dérive-diffusion:

- La représentation dérive-diffusion du flux de particules chargées :

Dans les équations de continuité, les flux de particules chargées sont supposés être la somme d'un terme de dérive et d'un terme de diffusion, dépendant respectivement du champ électrique et des densités des particules chargées telle que [15] :

$$\Gamma_K = n_K v_K = z (n_K \mu_K E - \nabla \cdot n_K D_K) \quad (\text{III} - 7)$$

$K = e, n, p$ (e, n et p désignant respectivement les électrons, les ions négatifs et positifs).

Z égal à 1 pour les ions positifs et -1 pour les particules chargées négativement.

- L'approximation du champ électrique local :

Dans ce cas, les coefficients de transport (μ_K, D_K) et les fréquences moyennes de collision

Ne dépendent que de l'intensité du champ électrique réduit local (\mathbf{E}/\mathbf{P}) [16].

- L'approximation de l'énergie moyenne :

La fonction de distribution ne dépend que de la densité de l'espèce et de son énergie Moyenne. Une telle approximation oblige à poser des hypothèses supplémentaires sur la forme de cette distribution.

III-4 Code BOLSIG :

L'équation de Boltzmann est souvent résolue afin de déterminer les coefficients de transport et les taux de réaction utilisés dans les simulations fluides. BOLSIG+ [17] est l'un des codes Boltzmann. Le solveur est suffisamment général pour simuler des conditions différentes de décharge. Les entrées incluent :

- le champ électrique réduit,
- le degré d'ionisation,
- le mélange de gaz,
- la fréquence du champ appliqué.

Plusieurs hypothèses sont faites pour rendre la solution de l'équation de Boltzmann rapide et auto-consistante :

- le champ électrique et les probabilités de collision sont supposés être spatialement uniformes,
- la fonction de distribution est approchée par un polynôme de Legendre à deux termes :

$$F(v, \theta) = f_0(v) + f_1(v) \cos\theta$$

- un modèle de croissance exponentielle est utilisé pour modéliser les changements dans la densité du nombre d'électrons dus à l'ionisation ou à l'attachement.
- Il faut noter que code BOLSIG+ qui est fondé sur représentation dérive-diffusion du flux de particules chargées.

Les données de l'entrée principale pour BOLSIG+ sont des tables des sections efficaces pour les différents types de collisions de l'électron en fonction de l'énergie de l'électron [18] [19]. Les autres paramètres de l'entrée telle que le champ électrique, composition du gaz, etc.

III-5 Résultats et discussions :

Grace au code BOLSIG On a obtenu des résultats relatifs à la fonction de distribution d'énergie d'électron (eedf). Nous avons examiné l'évolution avec ces deux contributions : f_0 la partie isotrope et aussi f_1 la partie anisotrope

$$f_0(eV^{-3/2})$$

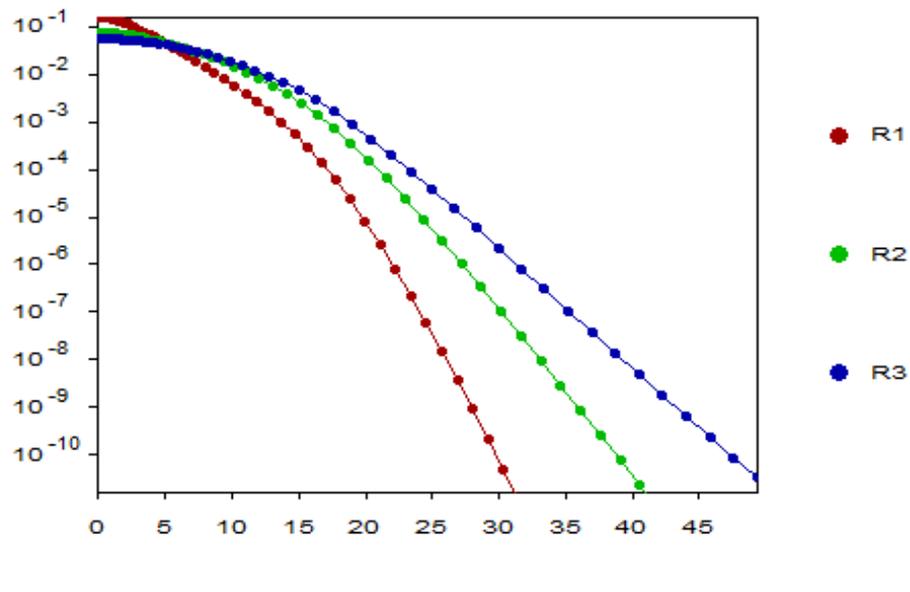


Figure III.1 : variation de f_0 en fonction de l'énergie moyenne pour plusieurs valeurs du champ électrique réduit : R_1 : $E/N = 50$ TD ; R_2 : $E/N = 100$ TD ; R_3 : $E/N = 150$ TD

$$f_1(eV^{-3/2})$$

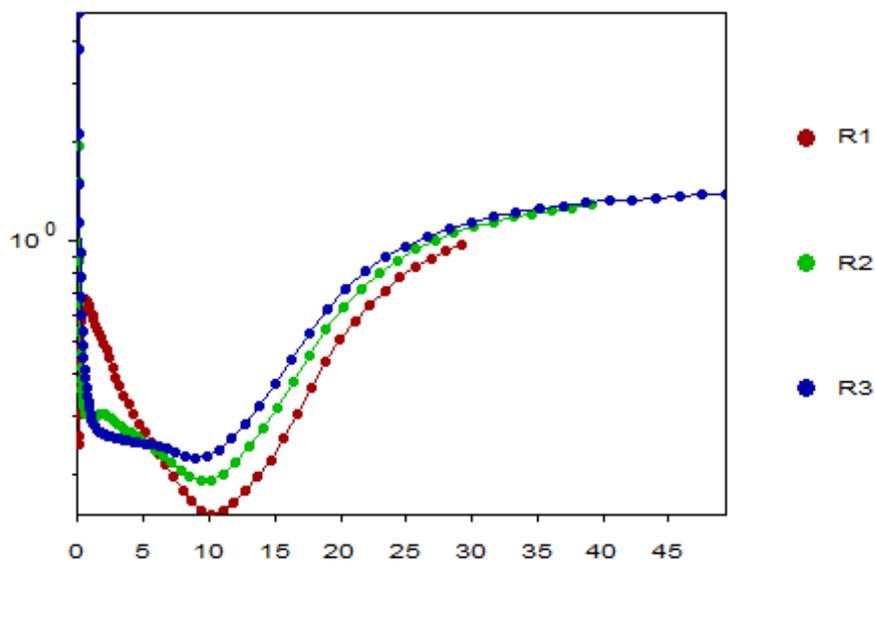
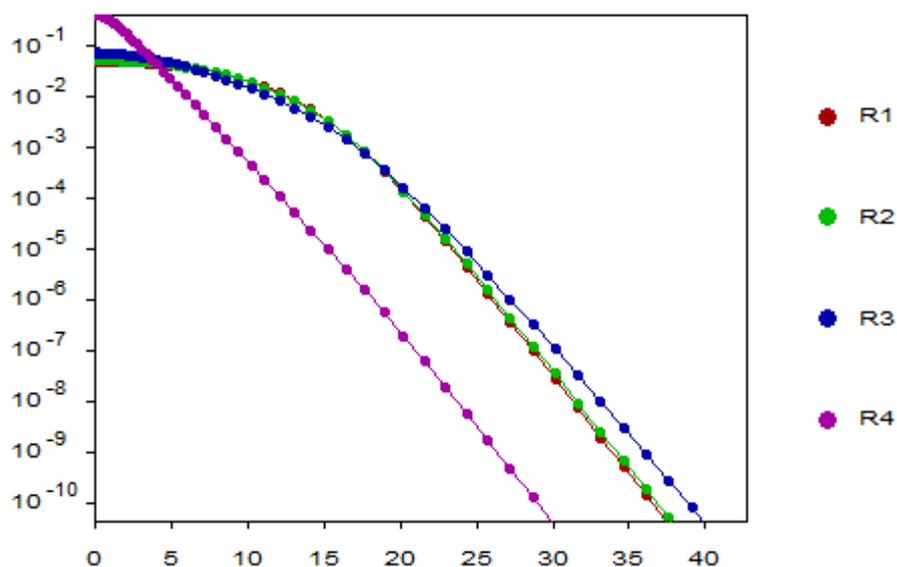


Figure III.2 : variation de f_1 en fonction de l'énergie moyenne pour plusieurs valeurs du champ électrique réduit : \mathbf{R}_1 : $E/N= 50$ TD ; \mathbf{R}_2 : $E/N = 100$ TD ; \mathbf{R}_3 : $E/N = 150$ TD

Sur les figures III.1 et III.2, nous avons présenté respectivement l'évolution des fonctions f_0 et f_1 (exprimées en $eV^{-3/2}$) en fonction de l'énergie moyenne des électrons (en eV), pour plusieurs valeurs du champ électrique réduit. La température étant fixée à 300K, Par contre la densité électronique est de $10^{18} m^{-3}$. On remarque que la fonction f_0 a une allure Gaussienne, puisque celle-ci correspond à la distribution à l'équilibre. Ce calcul a été réalisé dans le cas d'un gaz d'argon faiblement ionisé (le degré d'ionisation vaut 10^{-3})

On peut voir l'effet du champ appliqué sur f_0 , l'augmentation de E conduit à un abaissement du maximum et un élargissement de cette fonction, par ailleurs les effets d'anisotropie se font ressentis surtout lorsque le champ électrique réduit augmente.

f_0 ($eV^{-3/2}$)



E (eV)

Figure III.3 : variation de f_0 en fonction de l'énergie moyenne pour plusieurs valeurs du degré d'ionisation : \mathbf{R}_1 : $\alpha= 10^{-5}$; \mathbf{R}_2 : $\alpha= 10^{-4}$; \mathbf{R}_3 : $\alpha= 10^{-3}$; \mathbf{R}_4 : $\alpha= 10^{-2}$

f_1 ($eV^{-3/2}$)

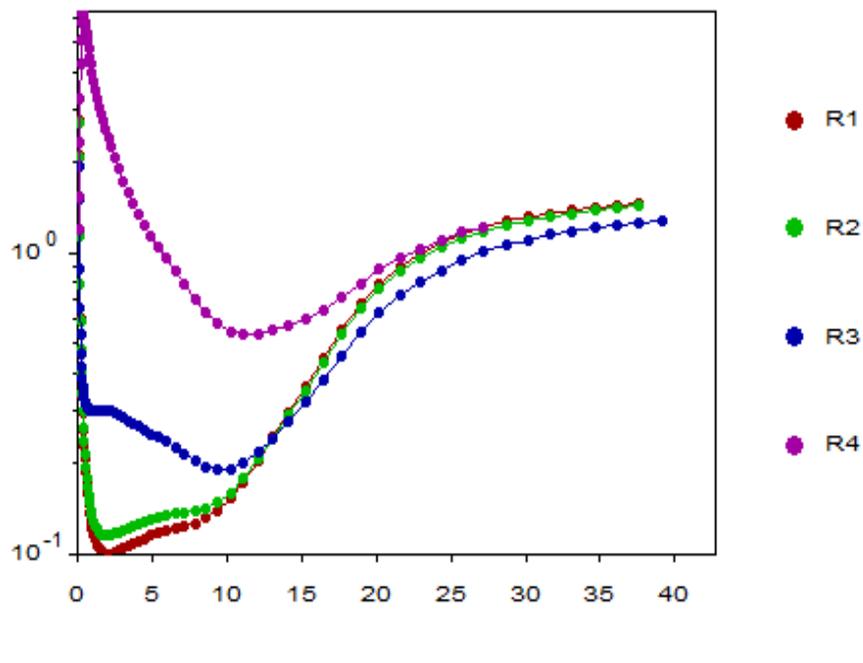


Figure III. 4 : variation de f_1 en fonction de l'énergie moyenne pour plusieurs valeurs du degré d'ionisation : \mathbf{R}_1 : $\alpha= 10^{-5}$; \mathbf{R}_2 : $\alpha= 10^{-4}$; \mathbf{R}_3 : $\alpha= 10^{-3}$; \mathbf{R}_4 : $\alpha= 10^{-2}$

Les figures III.3 et III.4, illustrent les variations des fonctions f_0 et f_1 en fonction de l'énergie moyenne des électrons (dans le cas l'argon), pour plusieurs valeurs du degré d'ionisation α . La température étant fixée à 300K, Par contre le champ électrique réduit est de 100 TD et la densité électronique est de 10^{18} m^{-3} . On remarque que la fonction f_0 garde toujours la même allure Gaussienne, l'influence du degré d'ionisation sur la fonction f_0 est importante lorsque α passe de 10^{-3} à 10^{-2} d'autre part, l'augmentation de α conduit à réduire une amplification des effets d'anisotropie.

$$f_0 (\text{eV}^{-3/2})$$

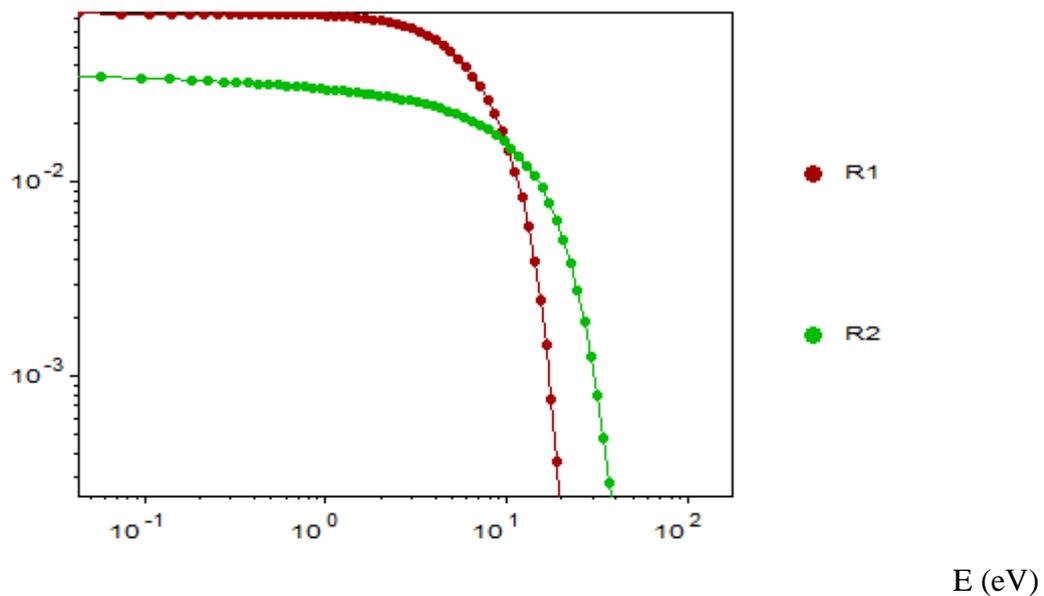


Figure III.5 : variation de f_0 en fonction de l'énergie moyenne pour différents gaz :

\mathbf{R}_1 : Argon ($E_i = 15.80$ eV) ; \mathbf{R}_2 : Néon ($E_i = 21.56$ eV)

Nous avons également montré que la fonction f_0 dépend de la nature de gaz. En effet les variations de f_0 , en fonction de l'énergie moyenne des électrons sont présentées sur la figure III.5, dans le cas l'argon et le néon. La température étant fixée à 300K, la densité électronique est de 10^{18} m^{-3} , Par contre le champ électrique réduit est de 100 TD et le coefficient α vaut 10^{-3} .

On remarque qu'à basse énergie c'est la fonction de distribution est plus élevée pour l'argon. Ce comportement est justifié : A cause de son faible potentiel d'ionisation, l'argon libère plus d'électrons dès les bases valeurs de l'énergie

Conclusion générale

La physique statistique hors d'équilibre représente un des enjeux majeurs parmi les grands thèmes qui dominent la recherche scientifique actuelle. Née pour expliquer le comportement d'objets macroscopiques en partant d'une description microscopique, la physique statistique a trouvé ses premiers grands succès en reliant les lois de la thermodynamique avec lois qui gouvernent la dynamique microscopique des systèmes à l'équilibre.

L'équation de Boltzmann (1872) est une équation intégral-différentielle de la théorie cinétique qui décrit l'évolution d'un gaz *peu dense* hors d'équilibre. Elle permet notamment de démontrer le théorème H, et d'étudier la relaxation du gaz d'un état d'équilibre *local*¹ vers l'équilibre *global* caractérisé par la distribution de Maxwell des vitesses

La première solution analytique complète a été obtenue dans le cas des interactions de type « sphères dures » par Ukai dans les années 1970, mais seulement pour des solutions proches de l'équilibre.

La résolution analytique de l'équation de Boltzmann est en général impossible. Le problème est donc traité numériquement dans le but de construire une solution approchée. Le coût numérique est élevé notamment lorsque la dimension de l'espace de vitesse considéré est supérieure ou égale à 2. La seconde est la raideur qui se développe dans l'équation cinétique au niveau de l'opérateur de collision

L'objectif principal de cette thèse est la détermination de la fonction de distribution des vitesses, à partir de la résolution directe de l'équation de Boltzmann, ou en appliquant le modèle hydrodynamique dont les équations de bases sont les différents moments de l'équation de Boltzmann couplés à l'équation de poisson. La modélisation fluide des plasmas froids hors-équilibre permet non seulement de déterminer la fonction de distribution mais aussi le calcul des coefficients de transport. Les données de base nécessaire pour toute modélisation sont les sections efficaces de collision.

Référence

- [1]: “Physique des plasmas ” Tome 1, dirigé par Abraham Bers- Jean Loup Delcrox Editions EDP Sciences
- [2]: “Arc électrique et ses applications ” Ouvrage dirigé par Serge Vacquié Editions Eyrolles
- [3]: “Thermal Plasmas” M.I. Boulos, P. Fauchais, Emil Pfender Springer, 30 avr. 1994
- [4]: “Physique des plasmas collisionnels : application aux décharges hautes fréquences” Michel Moisan / Jacques Pelletier EDP sciences
- [5]: Carlo Cercignani. “The Boltzmann equation and its applications”, volume 67 of Applied Mathematical Sciences. Springer-Verlag, New York, 1988.
- [6]: Shi Jin, Lorenzo Pareschi, and Giuseppe Toscani. “Uniformly accurate diffusive relaxation Schemes for multiscale transport equations”. SIAM J. Numer. Anal., 38(3) :913_936 (Électronique), 2000.
- [7]: “ physique statistique hors d’équilibre », Noëlle Pottier, Editions EDP Sciences
- [8]: « Théorie Cinétique : Gaz et plasmas », Bruno Chéron, Editions ellipes
- [9]: Physique des plasmas froids Bernard HELD, [8]: Editions Masson, 1994
- [10]: “Physique statistique - Introduction” Cours et exercices corrigés - Ecoles d’ingénieurs, masters, Christian Ngô , Hélène Ngô, Editeur : Dunod
- [11]: D. Benyoucef, M. Yousfi, B. Belmadani, A. Settaouti, ‘PIC MC Using Free Path for the Simulation of Low Pressure RF Discharge in Argon’, IEEE Trans.on Plasma Science, 38, 4, 902, 2010.
- [12]: C. K. Birdsall, “*Particle-in-cell charged-particles simulations, plus Monte Carlo Collisions with neutral atoms, PIC-MCC*”, IEEE Trans. Plas. Sci., 19, 65, 1991.
- [13]: E.Neyts, M.Yan, A.Bogaerts, R.Gijbels, ‘ ‘ PIC-MC simulation of an RF capacitively Coupled Ar/H2 discharge’’, Nucl. Instr. and Meth. In Phys. Res. B 202, 300, 2003.
- [14]: “ Application de la Méthode de Monté Carlo dans le Calcul des Coefficients de Transport d’un Gaz Faiblement Ionisé », thèse de Magister en Physique des plasmas et des gaz ionisés, UAB 2006.

[15]: Seung Min Lee, Yong Jun Hong, Young Sik Seo, Felipe Iza, Gyoo Cheon Kim, Jae Koo Lee “Simulations of biomedical atmospheric-pressure discharges”, Computer physics communications, pp (1-6) 2009.

[16]: J.P. Boeuf, Th. Callegari, C. Punset, R. Ganter “Modeling as a Tool for Plasma Display Cell Optimization”, Workshop Digest of the 18th, International Display Research Conference, Asia Display’98, pp (209-220), 1998.

[17] : G.J.M. Hagelaar and L.C. Pitchford. Solving the Boltzmann equation to obtain electron Transport coefficients and rate coefficients for fluid models. PLASMA SOURCES SCIENCE & TECHNOLOGY, 14(4):722–733, NOV 2005.

[18]: From compilation of A.V. Phelps

http://jila.colorado.edu/~avp/collision_data/electronneutral/ELECTRON.TXT

[19] : J. Meunier, Ph. Belenguer and J.P. Boeuf, J. Appl. Phys. 78, 731 (1995), extrapolation of allowed cross sections to 1kV using log (energy)/energy scaling.

Résumé

Le travail que nous présentons dans ce mémoire porte sur une contribution à la modélisation d'une décharge continue d'un gaz. Cette modélisation permet la détermination des coefficients de transport et la résolution de l'équation de Boltzmann. La première partie concerne l'établissement de l'équation de Boltzmann et aussi des équations cinétiques qui représentent la base du régime hydrodynamique. Dans la seconde, nous avons proposé plusieurs modèles et méthodes de simulation numérique tels que le modèle cinétique, particulaire et le modèle fluide. Ce dernier prend en compte la cinétique de formation des espèces chargées du plasma (électrons, ions positifs et ions négatifs) ainsi que leurs transports couplés à l'équation de Poisson pour le champ électrique.

Grace au code BOLSIG, nous avons calculé la fonction de distribution d'énergie d'électron EEDF, nous avons montré que cette fonction dépend de plusieurs paramètres (champ électrique réduit, degré d'ionisation, nature du gaz, . .)

Mots clés : Equation de Boltzmann, fonction de distribution, Plasmas hors d'équilibre, modèle fluide, théorie cinétique, coefficient de transport.

Summary

The work presented in this thesis is a contribution to the modeling of a continuous discharge of gas. This model allows the determination of the transport coefficients and solving the Boltzmann equation. The first part concerns the establishment of the Boltzmann equation and also kinetic equations that are the basis of the hydrodynamic regime. In the second, we have proposed several models and numerical simulation methods such as the kinetic model, particle and fluid model. The latter takes into account the kinetics of formation of the charged species of the plasma (electrons, positive ions and negative ions) and their coupled to the Poisson equation for the electric field transport. Thanks to BOLSIG code, we have calculated the distribution function of electron energy EEDF, we have shown that this function depends on several parameters (reduced electric field, ionization degree, nature gas...)

Keywords: Boltzmann equation, distribution function, Plasmas out of balance, fluid model, kinetic theory, transport coefficient.