

# CALCUL DES COEFFICIENTS DE TRANSPORT PAR LA METHODE DE MONTE CARLO

## 3.1 Introduction

Dans les plasmas 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. Il est utilisé dans de nombreux domaines, en particulier en physique nucléaire et en physique statistique. Par ailleurs, elle connaît des variantes en traitement du signal sous l'appellation d'algorithmes d'approximation stochastique

La Simulation de Monte Carlo SMC est une approche pour résoudre le problème de transport d'électron et d'ion basé sur la simulation numérique du mouvement pour un grand ensemble de particules (électrons dans notre cas), où les processus de collision sont présentes par tirage des nombres aléatoires distribués uniformément.

L'objectif de ce chapitre est de présenter la SMC pour calculer les coefficients de transports dans une décharge électrique (gaz faiblement ionisé), en prenant en considération les différents processus de collisions électron-atome.

## 3.2 Historique

On remonte la naissance de la *SMC* au comte de Buffon (Georges Louis Leclerc 1707-1788, admis à l'académie des sciences en 1734), qui peut être présenté comme le précurseur de la *SMC*. En 1777, il posa le problème resté célèbre, dit « des aiguilles » que Laplace (Pierre Simon ; 1749 -1827) reformula en 1812 pour en déduire une méthode de calcul de  $\pi$  basée sur la réalisation d'expériences répétées [9].

Le véritable développement de la *SMC* s'est produit lors de la seconde guerre mondiale (1940 - 1945), lors des recherches sur la fabrication de la bombe atomique. Ainsi, ces méthodes probabilistes ont été utilisées pour résoudre des équations aux dérivées partielles [10]. La *SMC* est utilisée pour simuler des systèmes déterministes avec des paramètres ou des entrées stochastiques. Le nom est proposé par des scientifiques du projet Manhattan (Stanislaw Ulam,

Enrico Fermi, John Von Neumann, et Nicholas Métropolies) en référence à un célèbre casino de Monaco lors de la deuxième guerre mondiale et fait allusion aux jeux de hasard pratiqué à Monaco.

En plus, la construction des ordinateurs électriques à partir de 1945 était un facteur qui a contribué de même au développement de cette méthode, un développement qui a permis l'expansion et son utilisation dans plusieurs domaines.

### 3.3 Principe de la méthode de Monte Carlo

Il est important d'établir la différence fondamentale entre les méthodes de Monte Carlo et la prétendue approche de la dynamique moléculaire. La dernière approche simule explicitement des particules d'essai et des particules cible, et si la distance entre elle est assez faible il se produit un phénomène de collision, ou les particules sont assimilées à des boules de billard, la détermination des équations de mouvement est assurée par la résolution des équations d'Hamilton.

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

Dans ce type de simulations, un grand nombre d'électrons est simulés. On peut suivre chaque électron dès son émission jusqu'à sa dispersion dans le gaz. La simulation des électrons secondaires peut se poursuivre jusqu'à ce que toute son énergie soit cédée aux molécules du gaz.

On va prendre comme données le temps maximal (choisie supérieur au temps de relaxation), la température, le champ électrique réduit en  $T_d$  ( $1 T_d = 10^{-21} \text{ Volt.m}^2$ ), Le champ magnétique en Tesla, le nombre d'électrons primaires et les sections efficaces des différents processus collisionnels électron-neutre (élastique, d'excitation, d'ionisation et d'attachement).

### 3.4 Le modèle SMC

#### 3.4.1 Génération des électrons initiaux

Les électrons initiaux sont émis à  $t=0$ . Les composantes de la vitesse et les positions avant la collision sont données, pour chaque électron  $i$ , par [13]:

$$\begin{aligned}v_{x0}(i) &= v_0 \sin \theta(i) \cos \phi(i) \\v_{y0}(i) &= v_0 \cos \theta(i) \sin \phi(i) \\v_{z0}(i) &= v_0 \cos \theta(i)\end{aligned}\tag{3.1}$$

L'angle de déviation  $\theta$  et l'azimutal  $\phi$  sont choisis aléatoirement, pour chaque électron, suivant une distribution sinusoïdale [12].

$$\cos \theta = 1 - 2r_1$$

$$\phi = 2\pi r_1$$

Où  $r_1$  est un nombre aléatoire choisi uniformément entre 0 et 1. Ces angles permettent de calculer la répartition des vitesses, après la collision, entre la particule incidente et la particule cible, avec :

$$\begin{aligned}x_0(i) &= 0 \\y_0(i) &= 0 \\z_0(i) &= 0\end{aligned}$$

$$v_0 = \sqrt{2\varepsilon_0 \frac{e}{m}}$$

Où  $\varepsilon_0$  est l'énergie initial de chaque électron  $i$  au début du pas du temps  $dt$ ,  $e$  et  $m$  sont respectivement la charge et la masse d'électron.

#### 3.4.2 Concepts physique de SMC

##### ✓ Le libre parcours moyen

Le libre parcours moyen d'une particule est défini comme la distance parcourue par cette particule test entre deux collisions ou réactions successives. Le libre parcours moyen est la valeur moyenne de cette quantité. Le libre parcours moyen est relié à la section efficace et à la densité de particules cibles à travers la relation [14]:

$$\lambda = \frac{1}{N \cdot Q(\varepsilon)}\tag{3.2}$$

Où  $Q(\varepsilon)$  est la section efficace en  $m^2$  et  $\varepsilon$  est l'énergie de l'électron en eV. Le libre parcours moyen  $\lambda$  dépend de la position et de l'énergie de l'électron.

Le libre parcours moyen est divisé en petites fractions:

$$ds = \frac{\lambda}{nbrpas} \quad (3.3)$$

Où  $nbrpas$  est généralement choisi entre 10 et 100. Et la probabilité qu'un électron rentre en collision avec la molécule, dans cette étape distance, est calculée suivant la relation:

$$P1 = \frac{ds}{\lambda}$$

Comme  $ds$  est choisi le plus petit, la probabilité reste constante dans ce segment.

### ✓ Le libre temps moyen de vol

Le libre temps moyen de vol d'un électron se déplaçant avec une vitesse  $v(\varepsilon)$  est donné par [11]:

$$Tm = \frac{1}{N \cdot Q(\varepsilon) \cdot v(\varepsilon)} \quad (3.4)$$

$v(\varepsilon)$ : la vitesse de dérive des électrons.

$Q(\varepsilon)$ : la section efficace totale de collision.

$N$ : la densité du gaz.

La probabilité de collision, qui doit être considérée comme une constante durant l'intervalle du temps  $dt$ , est donnée par [17]:

$$P1(t) = \frac{1}{Tm} \exp\left(-\frac{dt}{Tm}\right) \quad (3.5)$$

### 3.4.3 Résolution des équations du mouvement avant la collision

Entre deux collisions successives, les mouvements de l'électron sont conditionnés par la force extérieure d'origine électrique et magnétique (les champs sont uniformes). Les trajectoires des électrons sont déterminées par résolution de l'équation de Newton.

Après un temps de vol  $dt$  et sous l'effet du champ électrique  $\vec{E}$  et du champ magnétique  $\vec{B}$ , les nouvelles composantes de la vitesse sont données par :

$$v_{x1} = v_{0x} \cos \omega_c dt - v_{0y} \cos \varphi \sin \omega_c dt + v_{0z} \sin \varphi \sin \omega_c dt - \frac{E}{B} \sin \varphi (\cos \omega_c dt - 1) \quad (3.6)$$

$$v_{y1} = v_{0x} \cos \varphi \sin \omega_c dt + v_{0y} (\cos \varphi)^2 (\cos \omega_c dt - 1) - v_{0z} \sin \varphi \cos \varphi (\cos \omega_c dt + 1) - \frac{E}{B} \sin \varphi \cos \varphi (\sin \omega_c \Delta t - \omega_c \Delta t) + v_{0y} \quad (3.7)$$

$$v_{z1} = -v_{0x} \sin \varphi \sin \omega_c dt - v_{0y} \sin \varphi \cos \varphi (\cos \omega_c dt - 1) + v_{0z} (\sin \varphi)^2 (\cos \omega_c dt - 1) + \frac{E}{B} (\sin \varphi)^2 (\sin \omega_c dt - \omega_c \Delta t) + \omega_c \frac{E}{B} dt + v_{0z} \quad (3.8)$$

Et où l'on considère que le déplacement des électrons s'effectue sur l'axe X, Y et Z. Ainsi, les nouvelles positions s'écrivent comme suit :

$$x_1 = \frac{v_{0x}}{\omega_c} \sin(\omega_c dt) + \frac{v_{0y}}{\omega_c} \cos \varphi (\cos(\omega_c dt) - 1) - \frac{v_{0z}}{\omega_c} \sin \varphi (\cos(\omega_c dt) - 1) - \frac{E}{B \omega_c} \sin \varphi (\sin(\omega_c dt) - \omega_c dt) + x_0 \quad (3.9)$$

$$y_1 = -\frac{v_{0x}}{\omega_c} \cos \varphi (\cos(\omega_c dt) - 1) + \frac{v_{0y}}{\omega_c} (\cos \varphi)^2 (\sin(\omega_c dt) - \omega_c dt) - \frac{v_{0z}}{\omega_c} \sin \varphi \cos \varphi (\sin(\omega_c \Delta t) - \omega_c dt) + \frac{E}{B \omega_c} \sin \varphi \cos \varphi \left( \cos(\omega_c dt) - 1 + \omega_c^2 \frac{(dt)^2}{2} \right) + v_{0y} dt + y_0 \quad (3.10)$$

$$z_1 = \frac{v_{0x}}{\omega_c} \sin \varphi (\cos(\omega_c dt) - 1) - \frac{v_{0y}}{\omega_c} \sin \varphi \cos \varphi (\sin(\omega_c dt) - \omega_c dt) + \frac{v_{0z}}{\omega_c} (\sin \varphi)^2 (\sin(\omega_c dt) - \omega_c dt) - \frac{E}{B \omega_c} (\sin \varphi)^2 \left( \cos(\omega_c dt) - 1 + \omega_c^2 \frac{(dt)^2}{2} \right) + v_{0z} dt + z_0 \quad (3.11)$$

Le gain d'énergie est gouverné par l'équation du mouvement et l'expression de l'énergie est donc la suivante :

$$\varepsilon(i) = \varepsilon_0(i) + (+eE - ev_x(i)B \sin \varphi) dz - (ev_{0y}(i)B \cos \varphi - ev_z(i)B \sin \varphi) dx + ev_x(i)B \cos \varphi dy \quad (3.12)$$

Où  $\varepsilon_0$  et  $\varepsilon_1$  sont, respectivement, les énergies avant et après la collision, et  $dx, dy, dz$  sont:

$$x_1 - x_0 = \frac{v_{0x}}{\omega_c} \sin(\omega_c dt) + \frac{v_{0y}}{\omega_c} \cos \varphi (\cos(\omega_c dt) - 1) - \frac{v_{0z}}{\omega_c} \sin \varphi (\cos(\omega_c dt) - 1) - \frac{E}{B\omega_c} \sin \varphi (\sin(\omega_c dt) - \omega_c dt)$$

$$y_1 - y_0 = -\frac{v_{0x}}{\omega_c} \cos \varphi (\cos(\omega_c dt) - 1) + \frac{v_{0y}}{\omega_c} (\cos \varphi)^2 (\sin(\omega_c dt) - \omega_c dt) - \frac{v_{0z}}{\omega_c} \sin \varphi \cos \varphi (\sin(\omega_c dt) - \omega_c dt) + \frac{E}{B\omega_c} \sin \varphi \cos \varphi \left( \cos(\omega_c dt) - 1 + \omega_c^2 \frac{(dt)^2}{2} \right) + v_{0y} dt$$

$$z_1 - z_0 = \frac{v_{0x}}{\omega_c} \sin \varphi (\cos(\omega_c dt) - 1) - \frac{v_{0y}}{\omega_c} \sin \varphi \cos \varphi (\sin(\omega_c dt) - \omega_c dt) + \frac{v_{0z}}{\omega_c} (\sin \varphi)^2 (\sin(\omega_c dt) - \omega_c dt) - \frac{E}{B\omega_c} (\sin \varphi)^2 \left( \cos(\omega_c dt) - 1 + \omega_c^2 \frac{(dt)^2}{2} \right) + v_{0z} dt$$

### 3.4.4 Traitement des collisions

La section efficace totale est donnée par [15]:

$$Q_{tot} = Q_{el} + Q_{at} + Q_{rot} + Q_{vib} + Q_{exc} + Q_{ion}$$

Où  $Q_{el}, Q_{at}, Q_{rot}, Q_{vib}, Q_{exc}$  et  $Q_{ion}$  sont, respectivement, les sections efficaces des différents types : de collision élastique, d'attachement, de rotation, de vibration, d'excitation et d'ionisation.

Pour déterminer le type de la collision, nous calculons les probabilités partielles en divisant les sections efficaces des différents types de collision sur la section efficace totale [17]:

$$P_{el} = \frac{Q_{el}}{Q_{tot}}$$

$$P_{at} = \frac{Q_{at}}{Q_{tot}}$$

$$P_{rot} = \frac{Q_{rot}}{Q_{tot}}$$

$$P_{vib} = \frac{Q_{vib}}{Q_{tot}}$$

$$P_{exc} = \frac{Q_{exc}}{Q_{tot}}$$

$$P_{ion} = \frac{Q_{ion}}{Q_{tot}}$$

Où  $P_{el}, P_{at}, P_{rot}, P_{vib}, P_{exc}$  et  $P_{ion}$  sont, respectivement, les probabilités partielles de collision élastique, d'attachement, de rotation, de vibration, d'excitation et d'ionisation. A une énergie  $\varepsilon$  quelconque la somme des probabilités est égale à l'unité (respect de l'axiome des probabilités totales).

L'intervalle  $[0, P_1]$  est divisé en segments de longueurs qui correspondent aux probabilités des différents types de collision après ordonnancement croissant de ces probabilités. Le reste une portion d'intervalle dans le cas où aucune collision n'est possible.

### 3.4.5 L'énergie correspondante aux différents types de collision

Quand le type de la collision est déterminé, nous pouvons calculer l'énergie selon les cas:

✓ Après un processus de collision élastique, l'énergie cinétique de l'électron est donnée par la relation suivante:

$$\varepsilon_1 = \left(1 - 2 \frac{M}{m} \cos(\delta)\right) \varepsilon_0 \quad (3.13)$$

Où :  $M/m$  est le rapport de la masse de l'électron à la masse de la molécule qui est égal pour l'oxygène  $O_2$  à  $0.170E-04$ . Et  $\delta$  est l'angle de diffusion axial dans le repère de collision. Il est donné par la relation suivante :

$$\cos(\delta) = w_0 w_1 + s_0 s_1 + u_0 u_1 \square$$

$$w = \sin(\theta) \cos(\phi)$$

$$s = \cos(\theta) \sin(\phi)$$

$$u = \cos(\theta)$$

Les indices 0 et 1 indiquent avant et après la collision

✓ L'excitation d'une molécule à un état supérieur défini (différentes rotations, vibrations et états électroniquement excités) l'énergie de l'électron instantanément moins l'énergie *los* exigée pour exciter la molécule.

$$\varepsilon_1(i) = \varepsilon_0(i) - los \quad (3.14)$$

$los$  est l'énergie perdue lors d'une collision d'excitation.

✓ En cas d'ionisation, l'énergie restante est partagée entre l'électron père et l'électron éjecté de la molécule ionisée suivant les équations:

$$\varepsilon_{primère}(m) = r_1(\varepsilon_0(m) - los) \quad (3.15)$$

$$\varepsilon_{ejecté}(m) = (r_1 - 1) \times (\varepsilon_0(m) - los) \quad (3.16)$$

Où  $r_1$  est un nombre aléatoire issu d'une distribution uniforme entre 0 et 1.

✓ L'attachement de l'électron mène à la perte de toute son énergie. Et par conséquent sa disparition ( $\varepsilon_1 = 0$ ).

### 3.4.6 Calcul des paramètres de transport

Dans la simulation de Monte Carlo on utilise seulement les formules physiques des paramètres de transport (les lois de la mécanique classique). Le champ électrique et le champ magnétique influencent particulièrement sur les composantes du vecteur vitesse (influence sur l'énergie cinétique) et les composantes du vecteur position. Les coefficients de transport sont calculés à partir des composantes de vitesse et de position.

#### ✓ Vitesse de dérive

La vitesse de dérive est donnée par [17]:

$$v_d = \frac{\bar{z}}{T_{max}} \quad (3.17)$$

On peut écrire  $\bar{z}$  comme suit:

$$\bar{z} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N z(i) \quad (3.18)$$

La vitesse de dérive s'écrit alors:

$$v_d = \frac{1}{t} \left( \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N z(i) \right) \quad (3.19)$$

#### ✓ Coefficient de diffusion transversal

Le coefficient de diffusion transversal s'écrit sous la forme [17]:

$$D_T = \frac{\overline{x^2}}{2t} = \frac{\overline{y^2}}{2t} \quad (3.20)$$



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

$$D_T = \frac{\overline{x^2} + \overline{y^2}}{4t} \quad (3.21)$$

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

$$\overline{x^2} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N x_i^2 \quad (3.22)$$

$$\overline{y^2} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N y_i^2 \quad (3.23)$$

Donc le coefficient de diffusion transversal est écrit comme suit:

$$D_T = \frac{1}{4t} \left( \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N x_i^2 + \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N y_i^2 \right) \quad (3.24)$$

### ✓ Coefficient de diffusion longitudinal

Le coefficient de diffusion longitudinal est défini comme suit [16]:

$$D_L = \frac{z^{*2}}{2t} \quad (3.25)$$

$$\text{Avec } z^* = z - \bar{z}$$

Donc :

$$D_L = \frac{\overline{z^2 - \bar{z}^2}}{2t} \quad (3.26)$$

Avec :

$$\bar{z}^2 = \left( \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N z(i) \right)^2 \quad (3.27)$$

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

$$D_L = \frac{1}{2t} \left( \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (z^2 - \bar{z}^2) \right)$$

Enfin  $D_L$  est obtenu sous la forme:

$$D_L = \frac{1}{2t} \left( \left( \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N z^2 \right) - \bar{z}^2 \right) \quad (3.28)$$

### ✓ Coefficient d'ionisation

On a le coefficient d'ionisation qui est donné par [13]:

$$\alpha = \frac{\ln[N_{pion}/N_0]}{\bar{z}} \quad (3.29)$$

Où  $N_0$  est le nombre d'électrons initiaux,  $N_{pion}$  est le nombre d'ions positifs.

### ✓ Coefficient d'attachement

Le coefficient d'attachement est donné par [13]:

$$\begin{cases} \eta = \frac{N_{nion}}{n_0} \frac{1}{\bar{z}} (\text{si } \alpha = 0) \\ \eta = \frac{N_{pion}}{N_{nion}} \alpha \end{cases} \quad (3.30)$$

Où  $N_{pion}$  le nombre d'ions positifs.

## 3.5 L'algorithme [7]

1. Calcul du libre temps moyen de vol  $Tm \square \square \square \square$
2. Réalisation d'une boucle de  $10^3$  pour refaire N fois le temps max (30 ns).
3. Calcul du pas du temps .Le temps de vol actuel est calculé pour tous les électrons de l'échantillon.
4. Génération des électrons initiaux ( $N_e = 10^3$ ).
5. Simulation de la vitesse et la position de chaque électron. Les composantes de la vitesse et les positions initiales sont données, pour chaque électron, par l'équation (3.1).
6. Accélération d'1 électron par le champ électrique  $E$  Après un temps de vol  $dt$  et sous l'effet du champ électrique  $E$  et le champ magnétique  $B$ , les nouvelles composantes de la vitesse sont fournées par les équations (3.6), (3.7) et (3.8)
7. Détermination du gain d'énergie donnée équation (3.12).
8. Détermination du type de la collision: calcul de la probabilité de collision  $P1$  (équation (3.5)) et comparaison du nombre aléatoire avec les probabilités des différents types de collision:

- 8.1. Attachement :  $N_{nion} = N_{nion} + 1, N_e = N_e - 1$ .
- 8.2. Ionisation :  $N_{pion} = N_{pion} + 1, N_e = N_e - 1$ .
- 8.3. Collision élastique excitation : aucune particule n'est produite ni disparue.
- 8.4. Pas de collision, aller à (10. → électron suivant).
9. Détermination des paramètres de l'électron après la collision (énergie et vitesse)
10. (électron suivant)
11. Calcul des paramètres macroscopique de la décharge
12. Si  $T < T_{max}$ , incrémenter le temps  $T = T + dt$  réinitialiser le générateur et aller à (4).

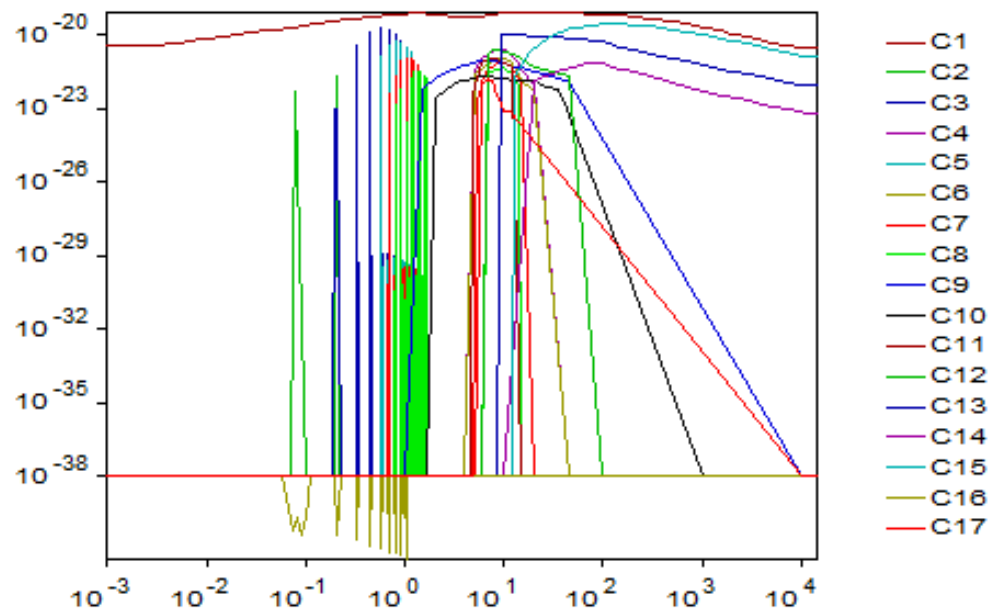
### 3.6 Résultats et discussion

On a lancé le programme pour un Nombre d'électrons primaires égale à 2000, un champ magnétique  $B = 6.59 \times 10^{-2}$  Tesla, un champ électrique  $E = 13185$  V/m, la densité du gaz a la température  $T = 293$  °K étant égale à  $3.29 \times 10^{22} \text{m}^{-3}$ , dans ce qui suit tous les paramètres de transport sont calculés dans les mêmes conditions.

On a utilisé les sections efficaces trouvées dans le Code BOLSIG+ (version 1.2 le 23/09/2010[1]) pour le gaz d'oxygène  $O_2$ , elle est présentée sur la Figure 3.1.

Les paramètres de transport ont été calculés dans les cas suivants:

- ✓ Sous la seule action d'un champ électrique parallèle à l'axe Oz.
- ✓ Cas d'un champ magnétique et champ électrique qui font un angle  $\varphi = 0, \frac{\pi}{2}, \frac{\pi}{3}$  et  $\frac{\pi}{6}$ .



**Figure 3. 1:** Les sections efficaces de collision électron-molécule d'oxygéné  $O_2$  .

C1 : Section efficace de transfert du moment

C2 -C14 les Sections efficaces d'excitation

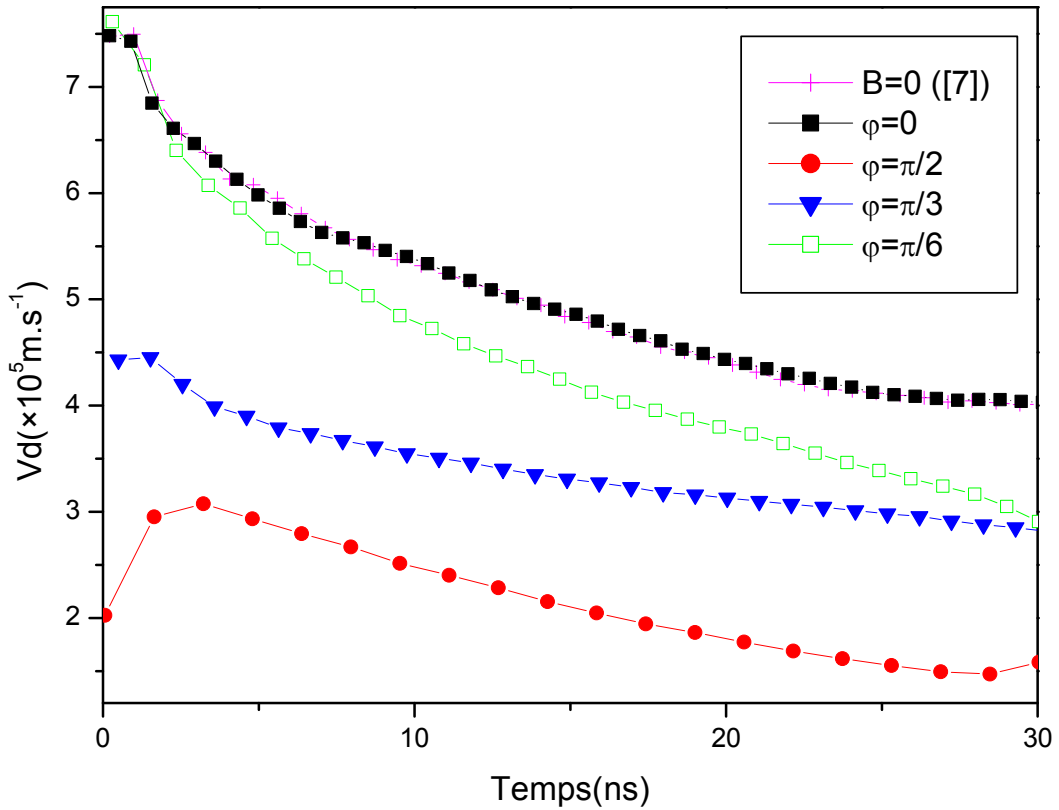
C15 le Section efficace d'ionisation.

C16 et C17 les Sections efficaces d'attachement.

### 3.6.1 Vitesse de dérive

La Figure 3.2 montre comment varie les vitesses de dérive dans le temps lorsque le gaz d'oxygène  $O_2$  est soumis sous à l'action simultanée d'un champ électrique et un champ magnétique. On remarque que pour tous les cas des champs électrique et magnétique que la vitesse de dérive décroît avec l'augmentation de temps. Ceci est normal parce que les électrons cèdent leur énergie cinétique après quelques collisions.

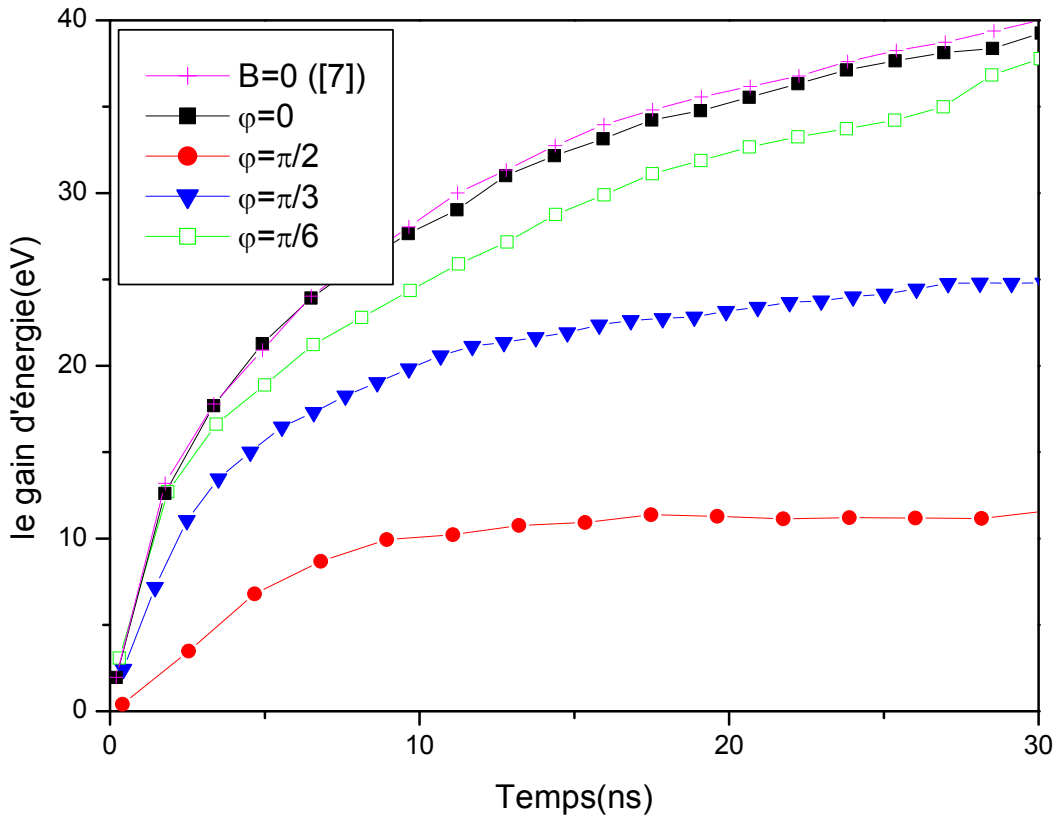
Le champ magnétique dans le cas  $\varphi = 0$  (c a d  $B // -Ez$ ) n'a aucune influence sur la vitesse de dérive des électrons, contrairement dans le cas du champ magnétique pour les autres différentes valeurs de  $\varphi$ . Dans ces dernier cas la vitesse de dérive reste toujours inférieure au le cas où  $\varphi = 0$  pour les raisons citer plus haut.



**Figure 3. 2:** Variation temporelle de la vitesse dérive de l'oxygène pour différentes valeurs de  $\varphi$ .

On peut dire, comme conclusion, que l'effet du champ magnétique pour tous les cas de  $\varphi$  est diminuée la vitesse à cause de la force de Lorentz qui a une composante antiparallèle a l'axe Oz contrairement au champ électrique qui accélère les électrons.

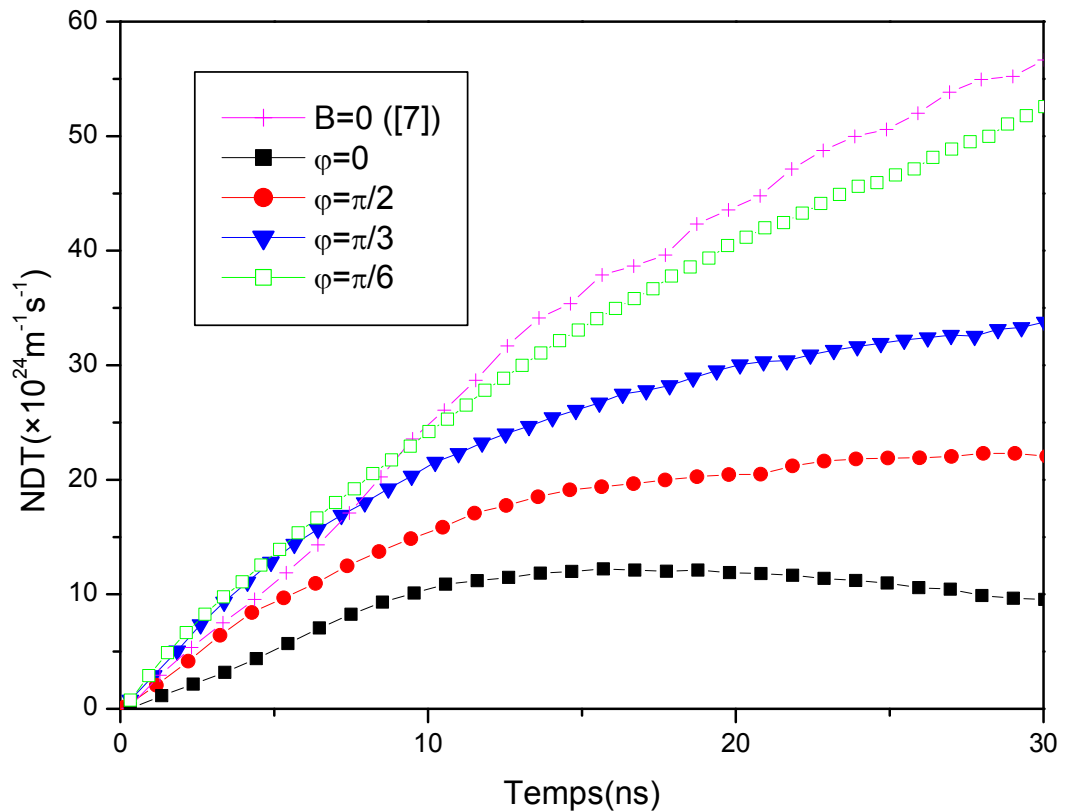
Nous présentons dans la Figure 3.4 la variation temporelle du gain d'énergie cinétique pour différentes valeurs de  $\varphi$ . On remarque que le gain croit avec le temps à cause de la collision inélastique et le gradient de champ électrique.



**Figure 3.3:** Variation temporelle du gain d'énergie de l'oxygène pour différentes valeurs de  $\varphi$ .

### 3.6.2 Coefficient de diffusion transversal

La Figure 3.4 montre la variation temporelle du coefficient de diffusion transversal pour le gaz d'oxygène sous les champs électrique et magnétique. Contrairement à la vitesse de dérive le coefficient de diffusion transversal est influencé par le champ magnétique pour  $\varphi = 0$ . La diminution du coefficient de diffusion transversal pour tous les cas du champ magnétique signifié que les électrons sont confinés autour de l'axe Oz.



**Figure 3. 4** : Variation temporelle du Coefficient de diffusion transversal.

On remarque aussi que le coefficient de diffusion transversal dans le cas d'un champ magnétique pour  $\varphi = 0$  est inférieur à celui dans les autres cas de  $\varphi$ , c'est à cause de la force de Lorenz qui admet une seule composante perpendiculaire à l'axe Oz dans le premier cas par contre admet deux composantes au les autre cas.

### 3.6.3 Coefficient de diffusion longitudinal

Le Figure3.5 montre la variation temporelle du coefficient de diffusion longitudinal sous les champs électrique et magnétique dans le gaz d'oxygène  $O_2$  pour On remarque dans cette Figure que le champ magnétique pour  $\varphi = 0$  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 confinés longitudinalement pour les différentes valeurs de  $\varphi$ .

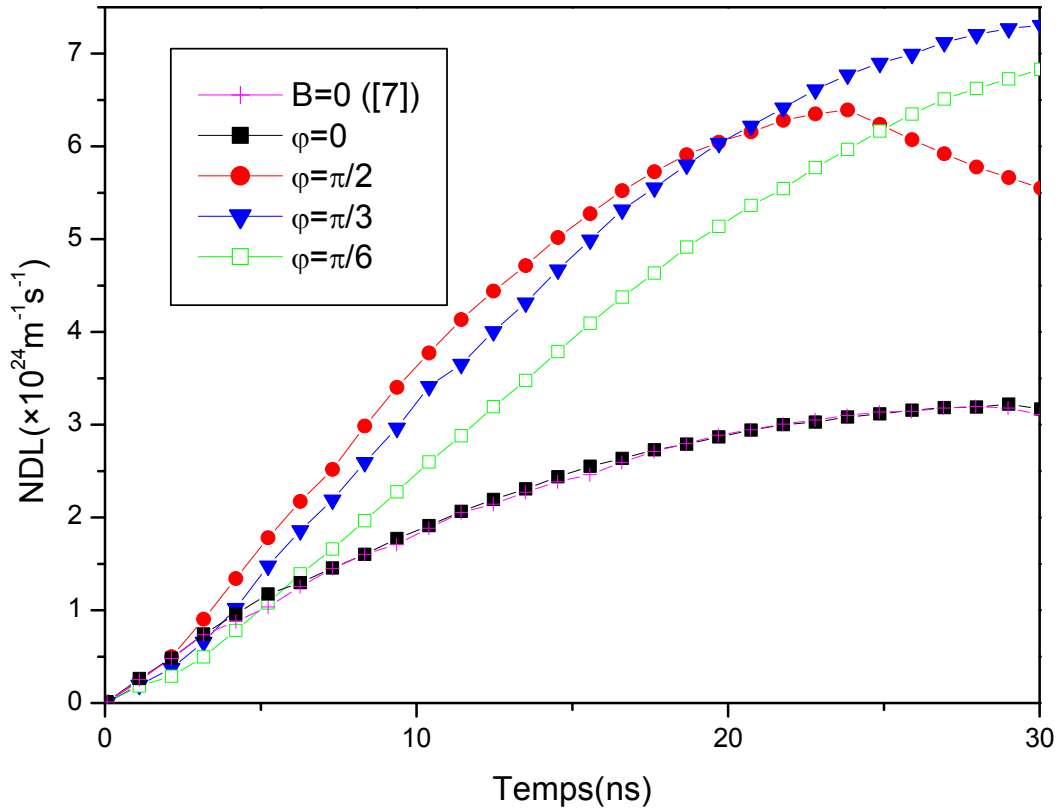


Figure 3. 5: Variation temporelle de coefficient de diffusion longitudinal.

### 3.6.4 Coefficient d'attachement

Nous représentons la variation temporelle du coefficient d'attachement dans le Figure3.6. On remarque que le champ magnétique pour  $\varphi = 0$  n'a aussi aucun influence sur ce coefficient pour le cas où  $B = 0$ , pour les autres cas du champ magnétique, le coefficient d'attachement diminue lorsque le temps augmente. La diminution de l'attachement est due à l'augmentation de la vitesse des électrons qui deviennent difficile à attacher par les atomes. Nous remarquons aussi qu'il y a un fort attachement pour un champ magnétique  $B = 0$ . Les électrons dans le début de la décharge sont attachées parce qu'ils ont initialement des énergies faibles et le coefficient d'attachement augmente puis se stabilise à une certaine valeur.



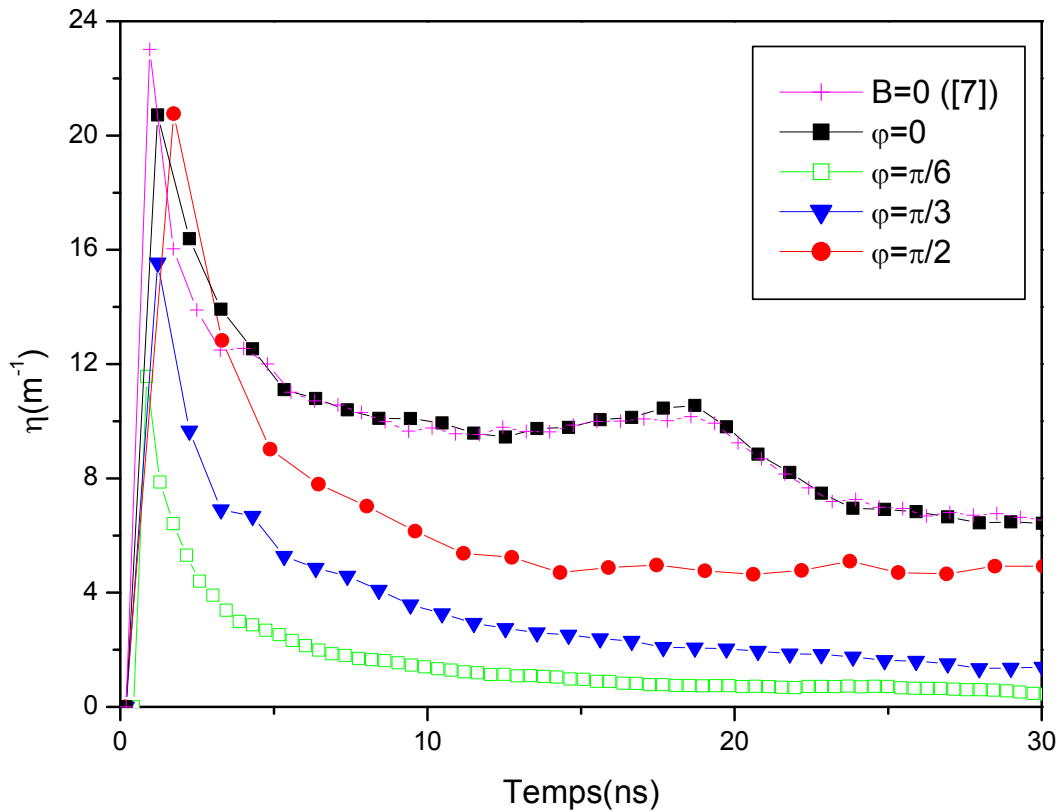
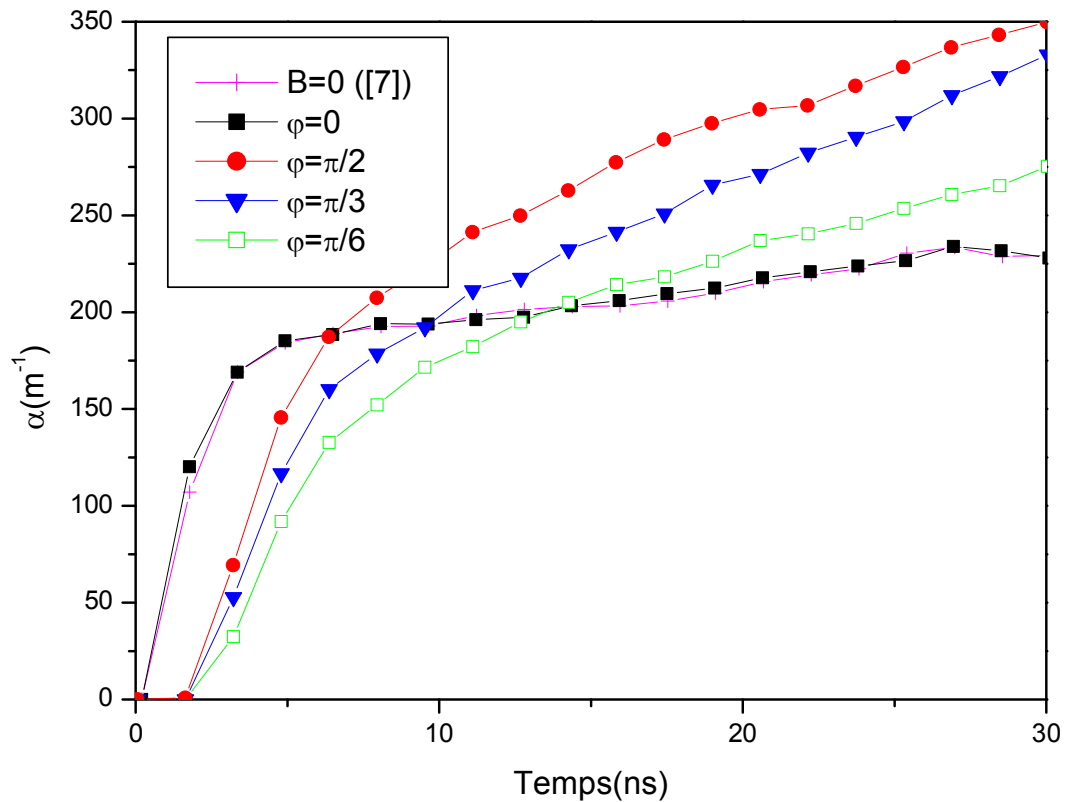


Figure 3. 6 : variation temporelle de coefficient d'attachement.

### 3.6.5 Coefficient d'ionisation

La Figure 3.7 montre la variation temporelle de coefficient d'ionisation pour le gaz d'oxygène sous le champ électrique et le champ magnétique. On remarque que le coefficient d'ionisation dans tous les cas des champs électrique et magnétique augment très rapidement. Le coefficient d'ionisation est inversement proportionnel à la vitesse de dérive, ce qui explique son augmentation.

On peut remarquer aussi que le champ magnétique pour le cas  $\varphi = 0$  n'a pas d'influence sur le coefficient d'ionisation comparais avec le cas  $B = 0$ , contrairement au cas du champ magnétique pour d'autre valeurs de  $\varphi$ , le coefficient d'ionisation est supérieur.



**Figure 3. 7:** montre la variation temporelle de coefficient d'ionisation.

### 3.7 Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons présenté les éléments de base de la Méthode de Simulation de Monte Carlo SMC. Les résultats que nous avons obtenus sont en bon accord avec les résultats trouvés dans la plupart des thèses pour les électrons d'un gaz faiblement ionisé (décharge électrique) soumis à l'action simultanée d'un champ électrique et un champ magnétique. Les résultats trouvés dans ce travail permettent de comprendre le comportement des électrons dans les décharges électriques.

## Conclusion et perspectives

Nous avons présenté dans ce mémoire un travail, qui consiste à calculer les coefficients de transport des électrons soumis à l'action d'un champ électrique et un champ magnétique uniforme dans un gaz faiblement ionisé.

Nous avons vu que les processus fondamentaux dans un gaz faiblement ionisé ont une nature aléatoire qui peut être décrite par la Simulation Monte Carlo. Le déroulement de la simulation a été décrit en détaillant les étapes principales qui sont:

- ✓ la description probabiliste qui consiste à créer un modèle statistique représentant un système complexe ou supportant un phénomène,
- ✓ la génération des variables aléatoires uniformément distribuées sur  $[0,1]$  moyennant un générateur de variables aléatoire, l'exploitation des tirages de nombres aléatoires en fonction de description probabilistes pour élaboration des lois d'échantillonnage.

Cette méthodologie a été appliquée, pour calculer quelques paramètres physiques tels que les coefficients d'ionisation et d'attachement, la vitesse de dérive et l'énergie moyenne, les Coefficients de diffusion longitudinal et transversal. Parmi les résultats obtenus de cette application, nous citons l'augmentation du coefficient d'ionisation et le gain d'énergie cinétique moyenne et les Coefficients de diffusion longitudinale et transversale. Par contre, le Coefficient d'attachement et la vitesse de dérives ont connu des diminutions.

Dans le cas  $\varphi = 0$ , nous avons montré pratiquement que tous les paramètres de transport ne sont pas affectés par la variation du champ magnétique. Seul le coefficient de diffusion transverse augmente lorsque le temps augmente. Cela veut dire que les électrons sont confinés autour de l'axe Oz (direction du champ électrique) lors de leur déplacement dans le gaz.

Le traitement du modèle fluide d'un plasma obtenu par une décharge électrique d'un gaz nécessite la connaissance des coefficients de transport. Ces derniers sont fonctions de la distribution d'énergie et sont généralement calculés lorsqu'on connaît les sections efficaces de collisions.

La connaissance des coefficients de transport sont utiles pour améliorer les modèles de simulations de fluide de plasma et pour déterminer l'évolution temporelle des densités pour les radicaux, et les particules chargés. On a besoin de résoudre l'équation de continuité pour les électrons ce qui inclut la dérive, la diffusion, et les processus de multiplication d'électron.

On peut améliorer ce modèle numérique avec l'ajout du nombre d'histoires parce qu'il influe beaucoup sur les résultats de la simulation: la précision est d'autant meilleure que le nombre d'histoires est important.

Dans le futur, il me paraît souhaitable d'étendre un travail pour :

- ✓ validité ce modèle de simulation par la comparaison avec d'autre modèle (théorie, expérimentale ou d'autre méthode de simulation).
- ✓ tenir compte l'interaction électron—ion et électron—électron.
- ✓ Les champs électrique et magnétique non uniformes.

## Références

- [1] G. J. M. Hagelaar and L. C. Pitchford, *Plasma Sources Sci. Techn.* **14** (2005) 722-733.
- [2] B. Ardjani, mémoire de Magistère en physique des plasmas et des gaz ionisés, Université Aboubakr Belkaid Tlemcen (2006).
- [3] J. L. Delcroix, '*Physique des plasmas*', inter Editions et CNRS Editions 1994.
- [4] Bernard Held, '*Physique des plasmas froids*', Masson 1994.
- [5] H. Zamoum, mémoire de Master en physique : Rayonnement et spectroscopie et optoélectronique, Université Kasdi Merbah Ouargla (2011).
- [6] Z. Ben Atallah, mémoire de Master en physique : Rayonnement et spectroscopie et optoélectronique, Université Kasdi Merbah Ouargla (2012).
- [7] L. ZEGHICHI, mémoire de Magister en Physique des rayonnements, université de Batna (2010).
- [8] Holstein T 1946 phys. Rev. 70 367.
- [9] C.GUILPIN, (1999). *Manuel de calcul numérique appliqué*. EDP sciences.
- [10] Sentis, Bernard Lapeyre Etienne Pardoux Rémi. (1998). *Méthodes de Monte- Carlo pour les équations de transport et de diffusion*. Berlin, Heidelberg, New York: Springer-Verlag.
- [11] L. Settaouti and A. Settaouti (2003) .A Monte Carlo Method for Low Pressure Radio Frequency Discharges. *Science and Technology*, 8. (2003) 47-54.
- [12] Dengming Xiao. Monte Carlo Simulation of Insulating Gas Avalanche Development . Dept. of E.E., Shanghai Jiaotong University, 200030 China.
- [13] G. Govinda Raju and J. Liu. (1995, October 5). *Simulation of Electrical Discharges in Gases Uniform Electric Fields*. *IEEE Transactions on Dielectrics and Electrical Insulation*, 2(5), pp. 1004-1015.
- [14] Gorur G. Raju 'Dielectrics in Electric Fields' University of Windsor Windsor, Ontario, Canada (2003).

- [15] A. Settaouti and L. Settaouti. (2007). *Monte Carlo simulation of electron swarm parameters in O<sub>2</sub>*. Eur. Phys. J. Appl. Phys. 37, 335–341.
- [16] A. Settaouti, L. Settaouti. (2007). *Numerical simulation of corona discharge in N<sub>2</sub>*. Journal of Electrostatics (65), 625–630.
- [17] Yousfi Mohamed Thèse de doctorat d'état, n° 1244 Université Paul Sabatier, Toulouse (1986).