

PHENOMENES DE TRANSPORT DANS LES PLASMAS

1.1 Généralités sur les plasmas

On a pris l'habitude d'appeler plasma tous les gaz ionisés. Dans la nature, le plasma constitue le quatrième état de la matière et fait suite, dans l'ordre croissant des températures, aux états solides, liquides et gazeux. La phase plasma correspond, à l'équilibre thermodynamique, à l'ionisation totale d'un gaz par collision entre les particules neutres [3] [4]. On distingue trois familles de plasmas:

- **Les plasmas fortement ionisés :**

Les espèces ont une température identique dont la valeur atteint quelques millions de degrés, il est alors totalement ionisé (étoiles, fusion).

- **Les plasmas faiblement ionisés :**

Les plasmas froids, ou les ions et les neutres restent à des températures inférieures à 1000 °K, alors que les électrons sont à des températures élevées (applications au traitement de surface, à l'élaboration des matériaux nouveaux, à la dépollution, à la génération d'ozone, à la chimie assistée par plasma,...).

Les plasmas thermiques, sont caractérisés par des températures de fonctionnement supérieures à 3000 °K (utilisations des décharges d'arc pour la soudure, la découpe, la projection de matière, la dépollution, ...).

L'état d'équilibre thermodynamique est vérifié lorsque le nombre de collisions est assez important et aussi lorsque chaque processus qui se produit dans le plasma est équilibré par son processus inverse. Les plasmas thermiques sont donc produits dans des hautes températures de l'ordre de quelques milliers de kelvin.

Lors d'une décharge électrique, la température des électrons peut rester très supérieure à celle des particules lourdes. En effet, à cause de leur mobilité les électrons sont très accélérés dans les champs électriques, leur température monte rapidement. .

1.2 Le gaz classique dilué

Le système auquel on s'intéresse dans la théorie cinétique classique des gaz, est un gaz dilué de N molécules identiques de masse m à l'intérieur d'une boîte de volume V . Le gaz dite dilué (considéré comme parfait): la distance moyenne entre molécules $d \sim n^{-1/3}$ (n est la densité du gaz) est grande devant le porté des forces intermoléculaires r_0 , de sorte que les molécules sont libres et indépendantes. Il faut analyser l'influence des collisions, qui redistribuent l'énergie entre les molécules, jouant un rôle essentiel dans l'évolution vers l'équilibre d'un gaz initialement hors équilibre. Seules seront prises en compte les collisions binaires: celles qui font intervenir plus de deux molécules à la fois seront négligées, ce qui est tout à fait légitime dans un gaz dilué. Chaque molécule peut alors être considérée comme une particule classique sans structure interne avec une position et une impulsion bien définies, la température est supposée suffisamment élevée et la densité suffisamment faible [5].

1.3 Décharges électriques dans les gaz

Le terme décharge désigne plus généralement, tout mécanisme d'ionisation d'un gaz sous l'effet d'un champ électrique ou électromagnétique externe. Pour ioniser un gaz, on l'injecte 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 l'énergie à ce gaz pour l'exciter et l'ioniser. A cause de leur faible masse, les électrons libres récupèrent la quasi-totalité de cette énergie et provoquent, par collisions avec les particules lourdes du gaz (atome), leur excitation et ionisation et donc l'entretien du plasma. On distingue plusieurs types de décharges électriques:

1.3.1 Décharges en courant continu a basse pression

Les premières études sur les mécanismes d'initiation de décharge ont été menées par Townsend au début des années 1930. Le dispositif étudié, représenté schématiquement sur la Figure 1, est composé de deux électrodes métalliques planes soumises à une tension continue V et séparées par une distance d . Le dispositif est placé dans une enceinte de verre fermée, contenant un gaz dont la pression P est de l'ordre du torr ($1 \text{ torr} \simeq 1,3 \times 10^{-3} \text{ atm}$).

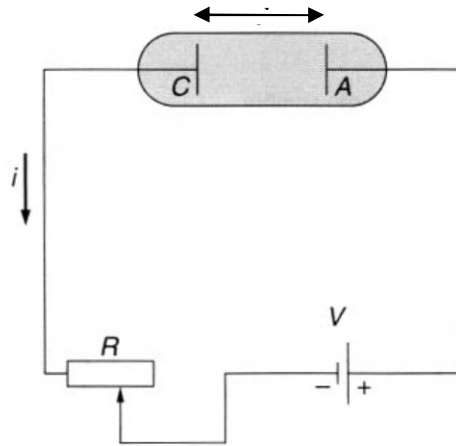


Figure 1. 1: Circuit d'alimentation d'un tube à décharge en courant continu.

Décharges non autonomes

Caractérisés par de faibles courants, la décharge ne se produit que s'il existe une source extérieure produisant des charges électriques dans le gaz. Si l'ionisation extérieure est constitué par les rayons cosmiques (partie A de la Figure 2), Si la cathode est éclairée par la lumière contenant des rayons ultraviolets, les courants obtenus sont plus intenses (partie B de la figure 2) [3].

Zone de collection avec multiplication

Lorsqu'on continue à faire croître la tension, un nouveau phénomène apparaît. Les électrons accélèrent 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 (partie C de la figure 2).

Décharge de Townsend

Il s'agit du premier régime de décharge dit auto-entretenu ou autonome. Suffisamment d'électrons sont alors produits par le bombardement ionique à la cathode pour que la décharge ne repose plus sur aucune autre source que le champ extérieur. Les densités électroniques sont faibles et les effets résultants de la charge d'espace sont négligeables. (Partie D de la figure 2).

Décharge luminescente

Ce type de décharge fonctionne selon les mêmes mécanismes que la décharge de Townsend mais, il est caractérisé par de forts effets de charge d'espace. Sous l'effet du champ électrique, les électrons se déplacent très rapidement et laissent les ions derrière eux. La décharge n'est plus alors dirigée par le champ extérieur mais par le champ généré par le

déséquilibre de charge d'espace et la tension appliquée nécessaire à l'entretien de la décharge diminue.

1.3.2 Décharge à haute pression (Régime d'arc)

Ce régime présente une très faible tension de maintien et de grandes intensités de courant. La décharge se présente alors sous la forme d'un filament incandescent dégageant une forte puissance thermique. 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 des phénomènes thermiques. Lorsque l'émission de courant devient très intense, la température s'élève localement, et contrairement au cas de la décharge luminescente l'émission s'effectue ici à partir du spot cathodique [2].

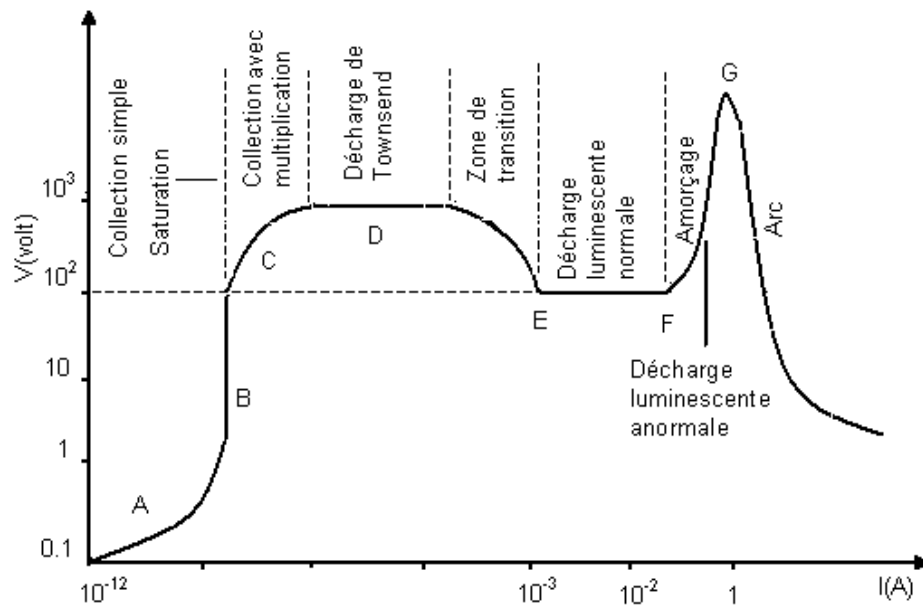


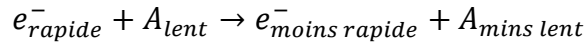
Figure 1. 2: Régimes de décharge en courant continu.

1.4 Les termes de collisions d'électron dans un gaz dilué

Les phénomènes de collisions atomiques jouent un rôle dans la physique des décharges électriques. On dit qu'il y a collision lorsque deux ou plusieurs particules se rapprochent accidentellement à des distances assez faibles pour que les énergies d'interaction deviennent comparables aux énergies cinétiques. Il y'a deux types de collisions:

1.4.1 Collision élastique électron-molécule (e-M)

Dans une collision élastique la quantité de mouvement est redistribuée entre les particules et l'énergie cinétique totale et l'énergie interne reste inchangée par exemple:



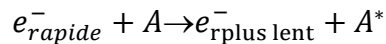
On définit Q_m , qui est la section efficace de transfert de la quantité de mouvement de collision:

$$Q_m(\varepsilon) = \frac{1}{n\lambda} \quad (1.1)$$

Tel que n est la densité de nombre des atomes d'un gaz, et λ est le libre parcours moyen. Dans la pratique les sections efficaces ne sont pas réellement indépendantes de l'énergie.

1.4.2 Collision inélastique électron-molécule (e-M)

Les collisions inélastiques qui sont au contraire celles dans lesquelles il y a changement d'état interne d'au moins une des particules (excitation, désexcitation) et même éventuellement création ou destruction de particules (ionisation, dissociation, recombinaison, ...). Dans les collisions inélastiques (qui s'apparentent aux réactions chimiques), il y a non seulement échange de quantité de mouvement et d'énergie cinétique, mais aussi transformation d'énergie cinétique en énergie chimique et vice versa. [3] par exemple :



Excitation/ désexcitation

Lorsqu'un atome (ou une molécule) a absorbé suffisamment d'énergie pour qu'un de ces électrons (en général, le plus éloigné du noyau) passe à niveau d'énergie supérieur, on dit que cet atome (ou cette molécule) est excité. Les molécules d'un gaz peuvent être excités par différentes interactions par: La température, L'absorption d'un photon, La diffusion.

De la même manière, on peut écrire la section efficace d'une collision excitante sous la forme suivante :

$$Q_{exc}(\varepsilon) = \frac{1}{n\lambda_{exc}(\varepsilon)} \quad (1.2)$$

Où λ_{exc} est le libre parcours moyen d'excitation (la distance en moyenne pour qu'un électron participe à une collision excitante).

Ionisation

Lorsqu'un atome (ou une molécule) a absorbé suffisamment d'énergie pour qu'un de ces électrons s'échappe à l'infini, on dit que cet atome a été ionisé, son énergie interne s'est accrue

de l'énergie d'ionisation $\Delta U = eV_i$. La section efficace d'une collision ionisante sous la forme suivante:

$$Q_{\text{ion}}(\varepsilon) = \frac{1}{n\lambda_{\text{ion}}(\varepsilon)} \quad (1.3)$$

Où λ_{ion} est libre parcours moyen d'ionisation (la distance en moyen pour qu'un électron participe à une collision excitante).

Attachement d'électron (formation d'ion négative)

Un électron libre peut être capturé par une particule neutre formant ainsi un ion négatif. Le phénomène observé est l'attachement. Les électrons peuvent perdre pratiquement toute leur énergie cinétique par ce type de collision avec les molécules du gaz.

1.5 Conclusion

Ce chapitre était consacré à un aperçu sur la décharge électrique et les plasmas dilués hors équilibre. Les processeurs fondamentaux dans une décharge électrique, comme les collisions, ont une nature aléatoire qui peut être traité par la technique de Monte Carlo.

CHAPITRE 1

PHENOMENES DE TRANSPORT DANS LES PLASMAS

CHAPITRE 2

MOUVEMENT D'UN ELECTRON DANS UN CHAMP ELECTRIQUE ET MAGNETIQUE

2.1 Introduction

La charge électrique est une source de champ électrique par laquelle chaque charge exerce des forces sur toutes les autres charges. En second lieu, les charges électriques sont soumises à des forces lorsqu'elles ont dans un champ électrique extérieurement imposé. Troisièmement, les charges qui se déplacent relativement aux champs magnétiques également exercent des forces. La force de Lorentz combine commodément les effets électriques et magnétiques pour une charge [2].

$$\vec{F} = q(\vec{E} + \vec{v} \times \vec{B}) \quad (2.1)$$

Où q est la charge en coulomb, $\vec{E}$ est le champ électrique en volt par mètre; $\vec{v}$ est la vitesse en mètre par seconde, $\vec{B}$ est la densité de flux en teslas.

2.2 Equations du mouvement

La connaissance de la trajectoire de l'électron entre deux collisions successives sous les forces extérieures est nécessaire. Dans le cas d'un électron, de charge $-e$ et de masse m , en mouvement dans un champ électrique $\vec{E}$ et magnétique $\vec{B}$, la force de Lorentz s'écrit:

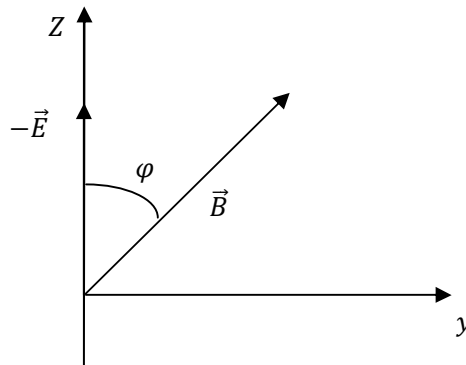


Figure 2. 1: les composantes de champ électrique et magnétique.

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

Le champ magnétique $\vec{B}$ existe dans le plan XOY , et un champ électrique $-\vec{E} // OZ$ Figure (2.1). Les composantes de la force sont données par:

$$\begin{cases} F_x = m \frac{dv_x}{dt} = -e(v_y B_z - v_z B_y) \\ F_y = m \frac{dv_y}{dt} = -e(-v_x B_z) \\ F_z = m \frac{dv_z}{dt} = -e((-E) + v_x B_y) \end{cases}$$

Ou bien:

$$\begin{cases} \frac{dv_x}{dt} = -\frac{e}{m} v_y B \cos \varphi + \frac{e}{m} v_z B \sin \varphi & (2.2a) \\ \frac{dv_y}{dt} = \frac{e}{m} v_x B \cos \varphi & (2.2b) \\ \frac{dv_z}{dt} = \frac{e}{m} E - \frac{e}{m} v_x B \sin \varphi & (2.2c) \end{cases}$$

La variation de la vitesse au cours du mouvement libre de l'électron et sa trajectoire se détermine à partir de la résolution des équations de mouvements (2.2).

La dérivation de l'équation (2.2a) est:

$$\frac{d^2 v_x}{dt^2} = -\frac{eB}{m} \left(\frac{dv_y}{dt} \cos \varphi - \frac{dv_z}{dt} \sin \varphi \right) \quad (2.3)$$

En reportant les équations (2.2b) et (2.2c) dans (2.3) on obtient:

$$\frac{d^2 v_x}{dt^2} + \omega_c^2 v_x = \omega_c^2 \frac{E}{B} \sin \varphi \quad (2.4)$$

Avec $\omega_c = \frac{e}{m} B$ est la fréquence de Larmor ou la fréquence de cyclotron.

La solution de l'équation différentielle du deuxième ordre (2.4) entre l'instant initiale t_0 (celui de la dernière collision) et une instant t (avant la collision suivante) s'écrit:

$$v_x(t) = A \cos \omega_c t + C \sin \omega_c t + \frac{E}{B} \sin \varphi \quad (2.5)$$

Les constantes A et C sont déterminées à partir de les conditions initiales:

$$t = t_0 \rightarrow v_x(t_0) = v_{x0}, v_y(t_0) = v_{y0}, v_z(t_0) = v_{z0}$$

et les équations (2.5) et (2.2a), on trouve deux équations linéaires avec les inconnues A et C . Les résolutions de ces équations sont :

$$A = \left[\frac{E}{B} \sin \varphi + v_{0x} \right] \cos \omega_c t_0 + (v_{0y} \cos \varphi - v_{0z} \sin \varphi) \sin \omega_c t_0$$

$$C = \left(v_{0x} + \frac{E}{B} \sin \varphi \right) \sin \omega_c t_0 + (v_{0y} \cos \varphi - v_{0z} \sin \varphi) \cos \omega_c t_0$$

La solution (2.3) s'écrit à l' instant t_1 de la collision:

$$v_{x1} = v_{0x} \cos \omega_c \Delta t - v_{0y} \cos \varphi \sin \omega_c \Delta t + v_{0z} \sin \varphi \sin \omega_c \Delta t - \frac{E}{B} \sin \varphi (\cos \omega_c \Delta t - 1) \quad (2.6)$$

Avec $\Delta t = t_1 - t_0$

En injectant l'équation (2.6) dans l'équation(2.2b), et en intégrant l'équation résultante par apport t , on obtient l'équation suivante:

$$v_{y1} = v_{0x} \cos \varphi \sin \omega_c \Delta t + v_{0y} (\cos \varphi)^2 \cos \omega_c \Delta t - v_{0z} \sin \varphi \cos \varphi \cos \omega_c \Delta t - \frac{E}{B} \sin \varphi \cos \varphi (\sin \omega_c \Delta t - \omega_c \Delta t) + C'$$

Où C' est une constante, la valeur de cette constante trouvée par la condition initiale $v_y(t_0) = v_{y0}$. L'équation de v_{y1} devient comme suite :

$$v_{y1} = v_{0x} \cos \varphi \sin \omega_c \Delta t + v_{0y} (\cos \varphi)^2 (\cos \omega_c \Delta t - 1) - v_{0z} \sin \varphi \cos \varphi (\cos \omega_c \Delta t + 1) - \frac{E}{B} \sin \varphi \cos \varphi (\sin \omega_c \Delta t - \omega_c \Delta t) + v_{0y} \quad (2.7)$$

En injectant l'expression de v_{x1} , donné par la relation (2.6), dans l'équation (2.2c) et en intégrant l'équation résultante par apport t , on obtient l'équation suivante:

$$v_{z1} = -v_{0x} \sin \varphi \sin \omega_c \Delta t - v_{0y} \sin \varphi \cos \varphi (\cos \omega_c \Delta t - 1) + v_{0z} (\sin \varphi)^2 (\cos \omega_c \Delta t - 1) + \frac{E}{B} (\sin \varphi)^2 (\sin \omega_c \Delta t - \omega_c \Delta t) + \omega_c \frac{E}{B} \Delta t + v_{0z} \quad (2.8)$$

Par intégration de les composantes v_{x1} , v_{y1} et v_{z1} entre t_0 et t_1 , on obtient les coordonnées x_1 , y_1 et z_1 de l'électron à l'instant de la collision t_1 , avec (x_0, y_0, z_0) étant les coordonnées a l'instant initial t_0 :

$$x_1 = \frac{v_{0x}}{\omega_c} \sin(\omega_c \Delta t) + \frac{v_{0y}}{\omega_c} \cos \varphi (\cos(\omega_c \Delta t) - 1) - \frac{v_{0z}}{\omega_c} \sin \varphi (\cos(\omega_c \Delta t) - 1) - \frac{E}{B\omega_c} \sin \varphi (\sin(\omega_c \Delta t) - \omega_c \Delta t) + x_0 \quad (2.9)$$

$$y_1 = -\frac{v_{0x}}{\omega_c} \cos \varphi (\cos(\omega_c \Delta t) - 1) + \frac{v_{0y}}{\omega_c} (\cos \varphi)^2 (\sin(\omega_c \Delta t) - \omega_c \Delta t) - \frac{v_{0z}}{\omega_c} \sin \varphi \cos \varphi (\sin(\omega_c \Delta t) - \omega_c \Delta t) + \frac{E}{B\omega_c} \sin \varphi \cos \varphi \left(\cos(\omega_c \Delta t) - 1 + \omega_c^2 \frac{(\Delta t)^2}{2} \right) + v_{0y} \Delta t + y_0 \quad (2.10)$$

$$z_1 = \frac{v_{0x}}{\omega_c} \sin \varphi (\cos(\omega_c \Delta t) - 1) - \frac{v_{0y}}{\omega_c} \sin \varphi \cos \varphi (\sin(\omega_c \Delta t) - \omega_c \Delta t) + \frac{v_{0z}}{\omega_c} (\sin \varphi)^2 (\sin(\omega_c \Delta t) - \omega_c \Delta t) - \frac{E}{B\omega_c} (\sin \varphi)^2 \left(\cos(\omega_c \Delta t) - 1 + \omega_c^2 \frac{(\Delta t)^2}{2} \right) + v_{0z} \Delta t + z_0 \quad (2.11)$$

2.3 Cas d'un champ magnétique nul ($\vec{B} = \vec{0}$)

Pour le cas $\vec{B} = \vec{0}$, et un champ électrique $-\vec{E}/Oz$, les composantes de la vitesse donné par les équations suivantes:

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

Et les composantes de la position :

$$\begin{cases} x_1 = x_0 + v_{x0} \Delta t \\ y_1 = y_0 + v_{y0} \Delta t \\ z_1 = z_0 + v_{z0} \Delta t + x_0 + \frac{1}{2} \frac{E}{B} \omega_c \Delta t \end{cases}$$

2.4 Cas d'un champ magnétique transversal $\vec{B} \perp \vec{E} \left(\varphi = \frac{\pi}{2} \right)$

Comme le champ électrique est supposé parallèle à l'axe Oz ($-\vec{E}/Oz$) et le champ magnétique est parallèle à l'axe Oy ($\vec{B}/Oy$):

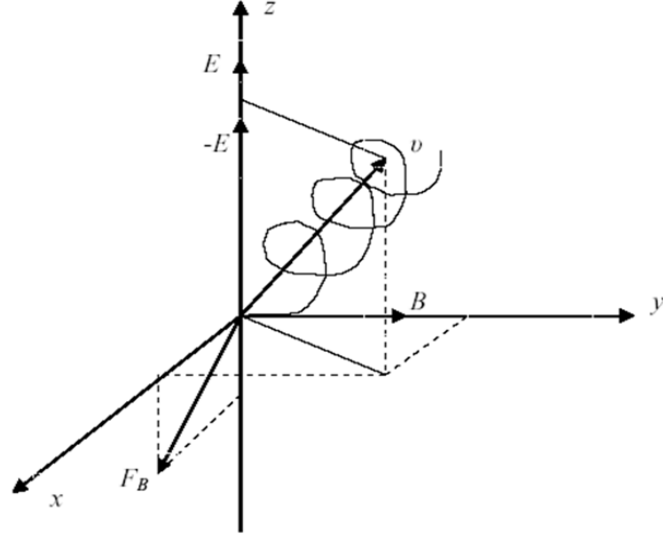


Figure 2. 2: Cas d'un champ magnétique transverse.

On obtient pour les composantes de $\vec{v}_1$:

$$\begin{cases} v_{x1} = v_{0x} \cos(\omega_c \Delta t) + v_{0z} \sin(\omega_c \Delta t) - \frac{E}{B} (1 - \cos(\omega_c \Delta t)) \\ v_{y1} = v_{0y} \\ v_{z1} = -v_{0x} \sin(\omega_c \Delta t) + v_{0z} \cos(\omega_c \Delta t) - \frac{E}{B} \sin(\omega_c \Delta t) \end{cases}$$

Et pour les composantes de $\vec{r}_1$:

$$\begin{cases} x_1 = \frac{v_{0x}}{\omega_c} \sin(\omega_c \Delta t) + \frac{v_{0z}}{\omega_c} (1 - \cos(\omega_c \Delta t)) - \frac{E}{B} \Delta t + \frac{E}{B \omega_c} \sin(\omega_c \Delta t) + x_0 \\ y_1 = v_{0y} \Delta t + y_0 \\ z_1 = \frac{v_{0x}}{\omega_c} (\cos(\omega_c \Delta t) - 1) + \frac{v_{0z}}{\omega_c} \sin(\omega_c \Delta t) + \frac{E}{B \omega_c} (\cos(\omega_c \Delta t) - 1) + z_0 \end{cases}$$

2.5 Cas d'un champ magnétique longitudinal ($\varphi = 0$)

Dans ce cas le champ électrique est supposé antiparallèle à l'axe ($-\vec{E}/Oz$) et le champ magnétique est parallèle à l'axe Oz ($\vec{B}/Oz$):

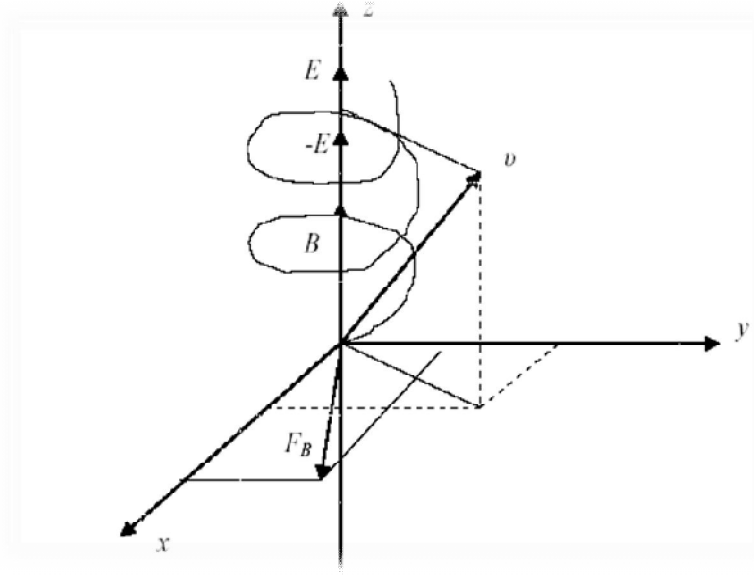


Figure 2. 3 : Cas d'un champ magnétique longitudinal

On obtient pour les composantes de $\vec{v}_1$:

$$\begin{cases} v_{x1} = v_{0x} \cos(\omega_c \Delta t) - v_{0y} \sin(\omega_c \Delta t) \\ v_{y1} = v_{0x} \sin(\omega_c \Delta t) + v_{0y} \cos(\omega_c \Delta t) \\ v_{z1} = v_{0z} + a_z \Delta t \end{cases}$$

Et pour les composantes de $\vec{r}_1$:

$$\begin{cases} x_1 = x_0 + \frac{1}{\omega_c} (v_{y0} (\cos(\omega_c \Delta t) - 1) + v_{0x} \sin(\omega_c \Delta t)) \\ y_1 = y_0 + \frac{1}{\omega_c} (-v_{x0} (\cos(\omega_c \Delta t) - 1) + v_{0y} \sin(\omega_c \Delta t)) \\ z_1 = z_0 + v_{0z} \Delta t + \frac{1}{2} a_z \Delta t^2 \end{cases}$$

- On remarque que le module de la vitesse n'est pas influencé par la présence d'un champ magnétique au cas d'un champ magnétique longitudinal,
- la composante longitudinale v_{z1} de $\vec{v}_1$ n'est pas également influencée par la présence d'un champ magnétique longitudinal. Par contre les coordonnées de l'électron à l'instant t_1 sont influencées par la présence d'un champ magnétique longitudinal, ce qui aura pour conséquence, une influence sur les coefficients de diffusion électronique [2].

2.6 Conclusion

La méthode de simulation utilisée dans notre travail est basée sur la connaissance de la trajectoire et la vitesse de chaque électron à tout instant et en tout point de l'espace des

positions, qui sont déterminées à partir de la résolution des équations du mouvement (Loi de Newton), le calcul a été également explicité dans ce chapitre.

CHAPITRE 3

LA METHODE DE SIMULATION MONTE CARLO

CHAPITRE 3

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 connait 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 π basée sur la réalisation d'expériences répétées¹ [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 elles 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 supérieure 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 θ et l'azimutal ϕ 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 ε_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 ε est l'énergie de l'électron en eV. Le libre parcours moyen λ 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 :