



REPUBLIQUE ALGERIENNE DEMOCRATIQUE ET POPULAIRE

**MINISTERE DE L ENSEIGNEMENT SUPERIEUR
ET DE LA RECHERCHE SCIENTIFIQUE**

UNIVERSITE HASSIBA BEN BOUALI CHLEF

DEPARTEMENT D'ELECTROTECHNIQUE

MEMOIRE

Présenté par

MOSTEFAOUI MOHAMED

En vue de l'obtention du diplôme de MAGISTER en ELECTROTECHNIQUE

Option

MATERIAUX ISOLANTS

THEME

**MODELISATION D'UNE DECHARGE ELECTRIQUE DANS
UN MELANGE (MERCURE- ARGON) BASSE PRESSION
APPLICATION AUX LAMPES A DECHARGE
FLUORESCENTE**

Soutenu-le 14 Octobre 2001

Devant le jury composé de MM:

Président:	A.BETT AHAR	Maître de Conférence UHBB ChIef
Rapporteur	B. BELMADANI	Maître de conférence UHBB ChIef
Examineur:	A. ALI BENAMARA	Maître de conférence UHBB ChIef
Examineur:	M. BENAROUS	Maître de conférence UHBB ChIef
Examineur:	MA T ALLAH	Chargé de Cours C U Laghouat

REPUBLIQUE ALGERIENNE DEMOCRATIQUE ET POPULAIRE

MINISTERE DE L ENSEIGNEMENT SUPERIEUR
ET DE LA RECHERCHE SCIENTIFIQUE

UNIVERSITE HASSIBA BEN BOUALI CHLEF

DEPARTEMENT D'ELECTROTECHNIQUE

MEMOIRE

Présenté par

MOSTEFAOUI MOHAMED

En vue de l'obtention du diplôme de MAGISTER en ELECTROTECHNIQUE

Option

MATERIAUX ISOLANTS

THEME

**MODELISATION D'UNE DECHARGE ELECTRIQUE DANS
UN MELANGE (MERCURE- ARGON) BASSE PRESSION
APPLICATION AUX LAMPES A DECHARGE
FLUORESCENTE**

Soutenu-le 14 Octobre 2001

Devant le jury composé de MM :

Président : A.BETTAHAR
Rapporteur : B. BELMADANI
Examineur : A. ALI BENAMARA
M. Examineur : M. BENAROUS
Examineur : MATALLAH

Maître de Conférence UHBB Chlef
Maître de conférence UHBB Chlef
Maître de conférence UHBBChlef
Maître de conférence UHBB Chlef
Chargé de Cours C U Laghouat

742.4130

Université Hassiba Ben Bouali Chlef
Institut d'Electrotechnique
Option Matériaux isolant
Présenté par : Mostefaoui Mohamed

Titre : Modélisation d'une décharge électrique dans un mélange (Mercure- Argon) basse pression – Application aux lampes à décharge fluorescente

Résumé

Dans cette étude, nous nous sommes intéressé à la modélisation d'une décharge luminescente basse pression dans un état thermodynamique complètement hors de l'équilibre (application aux lampes à décharge Mercure – Argon). Pour ce faire, nous avons commencé par une présentation d'un résumé sur les différents processus qui régissent la colonne positive qui nous intéresse. Par la suite nous avons entamé une étude bibliographique dans le but de déterminer les différents paramètres de transport et les sections efficaces nécessaires à la modélisation.

Comme la fonction de distribution d'énergie électronique est un paramètre incontournable dans la modélisation, nous avons présenté deux méthodes numériques de résolution pour la déterminer (FDEE) à savoir la méthode à deux termes et la simulation statistique de Monte-Carlo.

Pour des raisons techniques, nous avons opté pour l'équation de Lagushenko et Maya comme FDEE dans notre travail. Enfin, une mise en équations des phénomènes qui gère la colonne positive dans le cas des décharges électriques (Appliqué à des lampes à décharge basse pression dans notre cas) dans le cas général. Pour résoudre un tel problème nous avons été contraints d'appliquer le modèle Collisionnel-Radiatif (C-R), modèle très puissant, pour résoudre l'ensemble des systèmes dont les états thermodynamiques sont totalement hors équilibre. Enfin après résolution de nos systèmes d'équations sous certaines conditions les résultats sont présentés, commentés et comparés aux résultats théorique et expérimentaux trouvés dans la littérature.

Mots Clés :

- Décharge basse pression
- Colonne positive
- Mercure
- Fonction de distribution.
- Hors équilibre thermodynamique.
- Section efficace.

Sommaire

INTRODUCTION

3

CHAPITRE I

Notion d'équilibre thermodynamique, différent mécanisme et bilan de puissance dans la décharge.

I.1. Définition du plasma	4
I.2. Processus collisionnels et transferts d'énergie dans la colonne positive.	4
I.2.1. Collision élastique.	5
I.2.1.1. Collisions électron-neutre.	5
I.2.1.2. Collisions électron-électron	8
I.2.2. Collision inélastique	9
I.2.3. Collision optique	13
I.3. Equilibre thermodynamique complet (E.T.C.)	14
I.4. Impossibilité de l'E.T.C., phase	16
I.4.1. phase l'E.T.L.	17
I.4.2. phase l'E.T.L.P.	18
I.4.3. phase T.H.E.T	18
I.5. Les Inhomogénéités du plasma	19
I.5.1. Les phénomènes de transports de matière	19
I.5.2. Transfert d'énergie par rayonnement	22
I.6. Transformation de l'énergie électrique et propriétés des différents types de décharges.	24
I.7. Répartition du plasma dans le tube.	26

CHAPITRE II

-Différents paramètres nécessaires à la modélisation.

II.1. Principales interactions collisionnelles étudiées	27
II.2. Sections efficaces.	28
II.2.1. Sections efficaces de collisions élastique de transfert de la quantité de mouvement.	29
II.2.1.1. Cas des collisions électron /Hg	29
II.2.1.2. Cas des collisions électron /gaz rare	30
II.2.1.3. Cas des collisions atome/atome	31
II.2.1.4. Cas des collisions chargée/ chargée	32
II.2.2. Sections efficaces de collisions inélastiques.	32
II.2.2.1. Cas des collisions électron /Hg	33
II.2.2.2. Cas des collisions électron /Ar	34
II.2.2.3. Cas des collisions atome/atome.	36
II.2.3. Sections efficaces de collisions super-élastiques	38
II.2.4. Taux de réaction	38
II.3. Phénomènes de transport et coefficients de transport	40
II.3.1. Coefficient de transport du nuage électronique	41
II.3.1.1. Mobilité électronique	41
II.3.1.2. Coefficient de diffusion libre des électrons	45
II.3.1.3. Conductivité électrique du nuage électronique	45
II.3.1.4. Conductivité thermique du nuage électronique	46

II.3.1.5. Viscosité du nuage électronique	46
II.3.2. Coefficients de transfert des particules lourds	46
II.3.2.1. Mobilité ionique	48
II.3.2.2. Coefficient de diffusion de l'état fondamental du mercure	49
II.3.2.3. Coefficients de diffusion des excités 6^3P_2 et 6^3P_0	50
II.3.2.4. Coefficient de diffusion libre des ions	50
II.3.2.5. Conductivité électrique due aux ions	51
II.3.2.6. Conductivité thermique du gaz	51
II.3.2.7. Viscosité du gaz	52
II.4. Transfert du rayonnement et emprisonnement	53
II.4.1. Traitement asymptotique de Holstein	54
II.4.2. Hypothèses fondamentales faites par Hostein	54
II.4.3. Emprisonnement des raies de résonance du mercure	55
CHAPITRE III	
III-Méthode de calcul de la fonction de distribution des électrons:	
III-1. Résolution de l'équation de Boltzmann méthode directe	58
III.1.1. Introduction.	58
III.1.2. Généralités.	60
III.1.3. Interaction coulombiennes.	61
III.1.4. Opérateur de collision.	61
III.1.4.1. Expression du terme de dépeuplement	62
III.1.4.2. Expression du termes de peuplement	66
III.1.5. Théorie cinétique.	67
III.1.5.1. Développement de $f(z,v,t)$ en série de gradients spatiaux	68
III.1.5.2. Développement de $f(z,v, t)$ en série de gradient temporels	69
III.1.5.3. Développement en série de polynomes de Legendre des fonctions d'ordre zéro $F^{(0)}(v,t)$ et $G^{(0)}(v,z)$.	71
III.1.6. Méthode de résolution numérique.	74
III.1.7. Equation de continuité des espèces participants à l'ionisation et couplage avec l'équation de Boltzmann.	
III-2. Simulation par la méthode de Monte-Carlo.	78
III.2.1. Introduction.	78
III.2.2. Généralités sur la méthode de Monte-Carlo.	79
III.2.3. Simulation du mouvement des électrons dans un gaz.	79
III.2.3.1. Traitement des collisions électron-atome	92
III.2.3.2. Traitement des collisions électron - électron.	93
III.2.4. Relations utilisées pour le calcul des fonctions de distribution et des paramètres de transport.	94
III.2.5. Fonctions de distribution.	96
III.2.6. Paramètres de transport.	
III-3. Critères de validité de la fonction de Maxwell.	98
III.3.1. Théorie de Druvestevn.	100
III.3.2. Modèle à deux groupes d'électrons.	101
III.3.3. Solution de Lagushenko.	102
III.3.4. Détermination expérimentale de la FDEE.	104
III.3.5. Considération générales.	105
III.3.6. Résultats.	106
III.3.7. Influence des processus collisionnels .	108
III.3.8. Conclusion.	114

CHAPITRE IV

IV. Cinétique des électrons dans la colonne positive d'une décharge basse pression dans les mélanges mercure-gaz rares. Application aux lampes fluorescentes:	115
IV.1. Principe de fonctionnement	116
IV.2. Influence des paramètres	117
IV.3. Influence de la pression de vapeur du mercure et du rayon du tube	118
IV.4. Pression et nature du gaz tampon	119
IV.5. Courant électrique	119
IV.6. Modélisation	119
IV.7. Difficultés	120
IV.8. Equations de base	121
IV.8.1. Conservation population des états atomiques	123
IV.8.2. Conservation des électrons	125
IV.8.3. Conservation de l'énergie du gaz atomique	125
IV.8.4. Conservation de l'énergie électronique	126
IV.8.5. Conditions aux limites	128
IV.8.6. Hypothèses générales	129
IV.9. Modèle de Waymouth	130
IV.10. Le modèle collisionnel-radiatif	131
IV.10.1. Les données nécessaires pour le calcul	134
IV.10.2. Conditions aux limites	134
IV.10.3. Solution initiale	134
IV.11. Mode de calcul	135
IV.12. Résultats et discussion	139
CONCLUSION	145
REFERENCE BIBLIOGRAPHIQUE	
Annexe.	

INTRODUCTION

Ce travail est consacré à l'étude théorique des décharges électriques luminescentes dans un mélange de vapeur de mercure saturée et de gaz rare (Argon principalement). Nous nous sommes intéressé aux décharges "basse pression" (BP) et leur application à des lampes à décharges fluorescentes, établies dans des mélanges (quelques 10^2 Pa de gaz rare et quelques 10^{-1} Pa de mercure) pour une puissance électrique de 50W.

Il paraît utile de rappeler tout d'abord qu'un plasma froid non-thermique peut être formé soit par le bombardement d'un milieu gazeux par des faisceaux d'électrons ou d'ions énergétiques, soit par décharges électrique à faible courant (décharge de Townsend, décharge couronne, décharge luminescente, etc...) établies dans un milieu gazeux sous des pressions variant du torr à l'atmosphère. Généralement, ces plasmas se caractérisent par :

Un faible degré d'ionisation ($n_e/N < 10^{-4}$ où n_e représente la densité des électrons et N celle du gaz neutre). Des libres parcours entre les collisions relativement élevés par rapport aux dimensions de l'enceinte contenant le gaz, lorsque la pression du gaz est basse. Une température des particules chargées beaucoup plus grande que celle des particules neutres qui se trouvent généralement à la température ambiante.

C'est surtout cette dernière caractéristique qui est à l'origine de la production par impact électronique d'un grand nombre d'espèces excitées, ionisées ou dissociées dont les propriétés électro-optiques peuvent être exploitées dans de nombreuses applications industrielles faisant appel à la technologie plasma (lasers à gaz, lampe à décharge, panneaux de visualisation, traitement des surfaces, dépôt de couches minces, isolation gazeuse, etc...). L'étude et l'amélioration des caractéristiques des plasmas froids non-thermiques en vue de telle ou telle application peuvent être envisagées, de façon tout à fait complémentaire à l'aspect expérimental, d'un point de vue théorique en effectuant la modélisation de la décharge. Les objectifs de cette modélisation sont, d'abord une meilleure compréhension, à l'aide d'une étude paramétrique de certains phénomènes physiques ayant lieu au sein du plasma étudié, ensuite une prédiction des propriétés du plasma sous des conditions nouvelles (pression, courant électrique, type de mélange gazeux, etc...) et enfin l'optimisation des conditions de fonctionnement des dispositifs utilisant la technologie plasma.

D'un point de vue mathématique, la modélisation peut être basée soit sur des formalismes dit macroscopiques soit microscopiques. Le formalisme macroscopique permet notamment le calcul de la densité, de la quantité de mouvement, de l'énergie, etc.... des électrons ou des espèces excitées ou ionisées présents dans le plasma. Ces calculs consistent en des résolutions des équations de

conservation classiques nécessitant la connaissance des paramètres de transport et des taux de production et de disparition de ces espèces.

Le formalisme microscopique permet le calcul des fonctions de distribution par la résolution de l'équation de Boltzmann ou par simulation statistique de Monte Carlo à partir de la connaissance des sections efficaces de collision. Ceci permet le calcul des paramètres de transport et des taux de productions et de disparitions des électrons et des espèces excitées ou ionisées. En réalité, avec chacun de ces formalismes il est possible d'obtenir les résultats recherchés. Cependant, l'avantage du formalisme microscopique est de pouvoir traiter les phénomènes hors-équilibre qui se traduisent par une dépendance spatio-temporelle de la fonction de distribution des électrons en raison de la longueur des libres parcours par rapport aux dimensions de l'enceinte. En revanche l'avantage du formalisme macroscopique réside dans la relative simplicité des équations de conservation à résoudre par rapport aux équations utilisées dans le formalisme microscopique (équation de Boltzmann) qui nécessitent des temps de mise au point et de calcul beaucoup plus longs.

En pratique, dans le but de bénéficier des avantages de ces deux formalismes, un couplage peut être envisagé. Le but de ce couplage est d'utiliser le formalisme microscopique pour la détermination des paramètres de transport et des taux de réaction qui sont des données de base nécessaires au formalisme macroscopique.

L'analyse théorique, à pression élevée comme à basse pression, des phénomènes qui régissent le comportement d'un plasma de décharge électrique, nécessite la connaissance des interactions entre les divers constituants du mélange. Ces interactions ou collisions peuvent être décrites à partir de la connaissance des sections efficaces qui les caractérisent. Ce sont encore les collisions qui gouvernent les mécanismes de transport de matière ou de rayonnement dans le milieu et fixent la composition du plasma.

La présence de gradients de températures, les modifications de la composition, la présence de différences de potentiel électrique sont à l'origine des transports de matière ou d'énergie. Ces différences sont inhérentes au fonctionnement de la décharge.

La prise en compte simultanée de ces différents mécanismes est quelque fois difficile voire impossible à réaliser. Il faudra alors évaluer séparément leurs effets pour ne conserver dans un même modèle que les mécanismes qui sont prépondérants dans les conditions expérimentales traitées.

Dans le premier chapitre , on a étudié les différents processus collisionnels qui gèrent la colonne positive et présenté certaines caractéristiques du plasma étudié. De plus, une étude thermodynamique a été faite pour déterminer l'état de notre système (T.H.E.T).

Le second chapitre présente des différents paramètres nécessaires à la modélisation à savoir l'étude des sections efficaces et des coefficients de transport.

Le chapitre suivant a été consacré à l'étude de la fonction de distribution électronique. Deux méthodes de calcul sont présentées :

- Résolution directe par la méthode à deux termes .
- Simulation par la méthode de Monte-Carlo .

Dans le dernier chapitre, on a mis en équation notre système et présenté deux modèles :

- Le modèle classique de Waymouth
- Le modèle collisionnel –radiatif.

Enfin, on a présenté les résultats de ces différents calculs que l'on a discutés et comparés à ceux donnés dans la littérature.

Chapitre I :

**Notion d'équilibre thermodynamique,
différents mécanismes et bilan de puissance
dans la décharge.**

I.1. Définition du plasma.

C'est Langmuir qui, observant la propriété que possédait la décharge de se mouler dans un volume à peu près quelconque, proposa en 1929 de nommer "PLASMA", l'état de la matière dans la colonne positive.

J.L.Delcroix [16] en donne une définition plus précise: la matière est considérée à l'état de plasma lorsqu'elle constitue un milieu neutre, totalement ionisé où se manifestent des effets collectifs. En pratique [16], on conserve le terme plasma pour des états non complètement ionisés, mais électriquement neutre, de la matière. Ces oscillations de plasma sont analogues à celles qui apparaissent dans un milieu gélatineux.

Trois longueurs caractéristiques peuvent nous permettre d'effectuer une classification des plasma et de situer parmi eux les plasmas expérimentaux qui nous intéressent:

la longueur de Landau (λ_L), caractérise les distances en deça desquelles les corrélations deviennent très importantes et pour lesquelles les théories linéaires ne sont plus valables. On en obtient une valeur approchée à partir de l'expression:

$$\lambda_L = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 k_B T} \quad \text{I-1}$$

-La longueur (ou longueur d'atténuation de Debye) de Debye (λ_D), donne l'ordre de grandeur du "rayon" du nuage électronique entourant l'ion. Elle est donnée par:

$$\lambda_D = \sqrt{\frac{\epsilon_0 k_B T}{e^2 n_e}} \quad \text{I-2}$$

-La distance inter-particulaire des électrons (d_e), s'obtient par :

$$d_e = \frac{1}{(n_e)^{1/3}} \quad \text{I-3}$$

Les plasmas cinétiques classiques correspondent à la double inégalité forte :

$$\lambda_L \ll d_e \ll \lambda_D \quad \text{I-4}$$

$\lambda_L \ll d_e$ indique que les corrélations sont négligeables et $d_e \ll \lambda_D$ montre que l'on trouve un grand nombre d'électrons dans la sphère de Debye.

I.2. Processus collisionnels et transferts d'énergie dans la colonne positive.

Dans les décharges électriques que nous étudions, le processus principal qui aboutit à la transformation de la puissance électrique fournie par le générateur extérieur en rayonnement électromagnétique se déroule, pour l'essentiel, dans la colonne positive. Ce processus se déroule selon trois étapes :

- ❖ Les électrons libres sont accélérés dans de potentiel appliquée aux électrodes par le circuit d'alimentation externe. Dans la colonne positive le déplacement des électrons sous l'action du champ électrique E constitue alors la partie majoritaire du courant électrique I dans le milieu gazeux. La puissance électrique par unité de longueur apportée par le champ, en régime stationnaire, est :

$$P_F = E I$$

I-5

- ❖ Les électrons dans l'espaces inter-électrodes vont rencontrer (si leur temps de vie dans la décharge est suffisant) des particules lourdes neutres (atomes ou molécules). Ainsi, une partie de l'énergie cinétique des électrons rapides peut augmenter l'énergie interne du cortège électronique de l'atome, il s'agit alors d'une collision inélastique qui, dans des cas extrême, conduira à l'ionisation de l'atome. Cependant il peut aussi arriver que, pendant la collision, l'énergie interne de la particule lourde reste inaltérée alors que son énergie cinétique augmente légèrement d'une faible fraction. Ainsi, il s'agit d'une collision dite élastique et la température moyenne du gaz augmentera.

Enfin un électron lent (ou un électron rapide) peut modifier l'état interne d'une particule excitée en provoquant sa désexcitation collisionnelle, c'est le cas des collisions super-élastiques, l'excès d'énergie de ce processus est emporté, sous forme d'énergie cinétique, par l'électron qui l'a provoquée.

- ❖ Parmi les atomes excités sur un niveau j un certain nombre va se désexciter spontanément vers l'état $k < j$ au bout d'un temps caractéristique du niveau et de l'environnement de l'atome émetteur, sa durée de vie. Le photon issu de ce processus emporte la différence d'énergie. Pendant son parcours vers l'extérieur de la décharge, il peut rencontrer d'autre atomes capables de l'absorber et de s'exciter sur l'état j . Un photon va être à nouveau émis, à une fréquence très voisine de la fréquence initiale, selon les lois de la redistribution du rayonnement propres à la situation de la décharge. Ce processus peut se répéter plusieurs fois avant la sortie de la décharge d'un photon issu de cette chaîne émission-absorption ou avant

la rupture de la chaîne par une désexcitation collisionnelle du dernier atome excité. On parle d'emprisonnement du rayonnement.

1.2.1. Collisions élastiques

Une collision élastique, par définition, ne modifie pas l'énergie interne des particules qui y participent. Nous traiterons ici les cas particuliers des collisions élastiques électron-neutre et électron-électron qui présentent une grande importance du fait que les électrons sont les intermédiaires du transfert de puissance vers les neutres.

1.2.1.1. Collision électron-neutre

Une collision de ce type entre un électron de masse m_e et de vitesse v_e et un atome A de masse M, supposé immobile dans le système de laboratoire, est représentée schématiquement par la figure(1.3). Après la collision, l'atome de masse M a acquis de l'énergie cinétique et une (vitesse V).

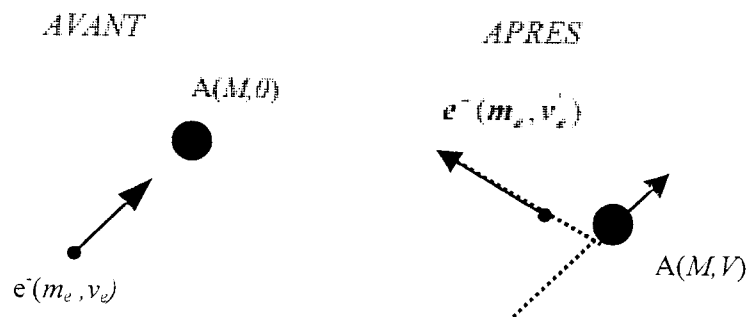


Figure 1.1 Représentation d'une collision élastique e^-/A dans le système du laboratoire.

Essayons d'évaluer l'importance des collisions élastiques dans nos décharges. En tenant compte du rapport des masses $m_e/M \ll 1$, les équations de conservation de l'énergie et de la quantité de mouvement conduisent pour un choc frontal à la relation suivante pour les vitesses :

$$V \approx 2 \frac{m_e}{M} v_e \quad \text{I-6}$$

La fraction d'énergie cinétique emportée par l'atome est donc de l'ordre de :

$$\frac{\frac{1}{2} M V^2}{\frac{1}{2} m_e v_e^2} \approx \frac{4 m_e}{M} \quad \text{I-7}$$

En réalité, compte tenu du nombre de collisions dans le plasma et des énergies propres des deux types de particules, il faut raisonner sur le bilan moyen des transferts d'énergie entre les deux nuages. On montre que la puissance moyenne perdue, par unité de volume, par le nuage

$$P_{el} \equiv \frac{dE_{ea}}{dt} = -2 \frac{m_e}{M} \left(1 - \frac{T_g}{T_e} \right) n_e \int_0^{\infty} V_{el}(v_e) \frac{1}{2} m v_e^2 4\pi v_e^2 \phi_0 dv_e \quad \text{I-8}$$

ϕ_0 est la partie isotrope de la fonction de distribution.

On peut approximer la relation (I.8) par la forme:

$$P_{el} \equiv -2 \frac{m_e}{M} \left(1 - \frac{T_g}{T_e} \right) n_e \langle V_{el} \rangle \langle E_e \rangle \quad \text{I-9}$$

Nous constatons que la fraction d'énergie échangée par collisions élastiques dépend des énergies cinétiques (caractérisées par leurs températures respectives) des deux nuages de particules et de l'énergie cinétique moyenne des électrons. Il faut estimer le nombre de collisions élastiques qui peuvent se produire dans le plasma par unité de temps. En faisant appel à la notion de libre parcours moyen des électrons dans le plasma.

Le libre parcours moyen des électrons dans un gaz qui contient n particules par unité de volume s'exprime par:

$$\lambda_e^m = \frac{1}{Qn} \quad \text{I-10}$$

où Q est la section efficace de la collision élastique.

En assimilant les atomes à des sphères rigides de diamètre dont la section efficace de collision est donnée par[78]:

$$Q = \frac{1}{4} \pi d^2 \quad \text{I-11}$$

Cela revient à dire que le libre parcours moyen est indépendant de la vitesse électronique, ce qui est en réalité, qu'une assez grossière approximation. Pour les gaz rares en particulier, Ramsauer a montré que dans le cas des collisions électron/gaz rares, ce modèle simple est à utiliser avec prudence. Pour des énergies électroniques moyennes de l'ordre de l'électron-volt, la section efficace dans le cas de l'argon est de l'ordre de 10^{-20} m^2 (alors que la relation (I.11) conduit à une section efficace de l'ordre de 10^{-19} m^2).

Les fréquences de collision peuvent être calculées à partir de[78] :

$$\langle V_{el} \rangle = \frac{\langle v_e \rangle}{\lambda_e^m} = \frac{1}{\tau_{el}} \quad \text{I-12}$$

Où les vitesses moyennes sont voisines de $7 \times 10^5 \text{ m/s}$ pour la décharge basse pression et de $5 \times 10^5 \text{ m/s}$ à $2 \times 10^5 \text{ m/s}$ pour les décharges haute pression.

Pour les fréquences de collision on obtient 7×10^8 Hz pour la décharge BP et entre 3×10^{12} et 6×10^{12} Hz pour la décharge (HP2), soit environ 6000 fois plus de collisions élastiques pour cette dernière.

Compte tenu des fréquences de collision, entre électron et atome, on peut s'attendre, dans une décharge haute pression à rencontrer des températures de gaz beaucoup plus proches de la température électronique que dans le cas d'une décharge basse pression.

Nous pouvons maintenant estimer la puissance par électron qui va se transformer en chaleur. Dans le cas de la décharge mercure-argon basse pression, l'argon est le gaz majoritaire ($P_{Hg}/P_{Ar} \approx 10^{-3}$) et la température électronique est très supérieure à la température des neutres. Dans ces conditions d'après la relation (I.9), on obtient :

$$P_{el} = -\frac{2m_e}{M} n_e \langle V_{el} \rangle \langle E_e \rangle \quad \text{I-13}$$

et $P_{el}(BP) \approx 2.7 \times 10^{-5} \times 1.6 \times 10^{19} \approx 4.3 \times 10^{-24}$ W par électron et par collision. Soit 1.5×10^3 W/m³ de décharge ou 1.5×10^{-3} W/cm³.

La chaleur produite ne représentera qu'une petite fraction de la puissance électrique, le gaz neutre reste à une température proche de celle du milieu ambiant avec un faible gradient de température de gaz entre le centre de la décharge et la paroi.

Dans le cas de la décharge mercure (HP2), où l'énergie électronique moyenne est de l'ordre de 0.5 eV, la mesure de la puissance thermique dissipée conduit à des valeurs de l'ordre de 4 à 6 W/cm³.

La génération de chaleur est donc beaucoup plus importante dans le cas des décharges haute pression. C'est une des conséquences et un des inconvénients de l'équilibre thermodynamique local. Pour dissiper cette chaleur vers l'extérieur et pour assurer la transition entre la région qui doit assurer le passage du courant et le milieu ambiant, un fort gradient de température va apparaître.

1.2.1.2 Collisions électron-électron

Leur importance apparaîtra surtout dans la détermination de la fonction de distribution car ce type de collision est un moyen puissant de redistribution de l'énergie dans le nuage électronique et contribue de ce fait à ramener la fonction de distribution des électrons vers une forme Maxwellienne.

Tableau 1.1 Ordres de grandeur HP et BP

	Haute Pression	Basse Pression
Energie échangée (eV)	1.5	3.0
Densité électronique (m^{-3})	1×10^{22}	5×10^{17}
Section efficace e^-/e^- (m^2)	2.0×10^{-17}	3.5×10^{-18}
Libre parcours moyen (m)	5×10^{-4}	6×10^{-1}
Fréquence de collisions (Hz)	1×10^9	1.2×10^6
Nombre de collisions ($m^{-3} s^{-1}$)	1×10^{31}	6×10^{23}

Le tableau (1.1) résume les ordres de grandeur rattachés à ces collisions pour une énergie électronique correspondant à l'énergie moyenne des électrons dans la décharge (0.75 eV et 1.5 eV en haute pression et basse pression respectivement). L'énergie échangée est égale au double de l'énergie moyenne car les particules possédant la même masse.

On constate que ces collisions sont plus efficaces pour la décharge haute pression non seulement parce que la fréquence de choc y est très supérieure mais encore du fait de facteur qui jouera pour la réalisation d'une fonction de distribution Maxwellienne dans le cas des décharges haute pression.

1.2.2. Collision inélastique, excitation, désexcitation et ionisation des particules neutres

Les électrons ayant une énergie cinétique supérieure au premier seuil d'excitation de l'atome cible sont capables de l'exciter ou de l'ioniser, le processus est schématisé dans la figure 1.2.

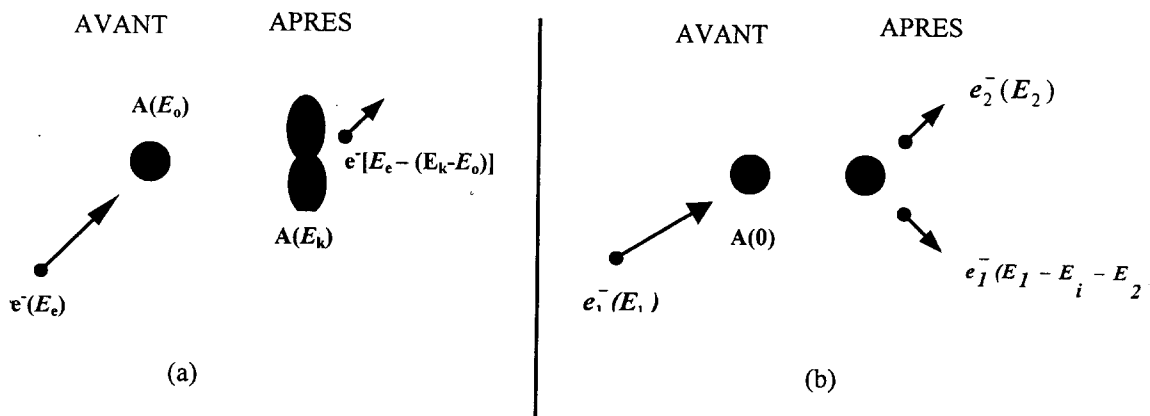


Figure 1.2 : excitation (a) et ionisation (b) collisions de l'atome A

Ainsi quand l'énergie cinétique E_e de l'électron dépasse la valeur de seuil E_k entre le fondamental et l'état excité k , il y a une certaine probabilité pour que, dans le choc, l'atome soit excité sur le niveau k en prenant l'énergie nécessaire à l'électron incident. Celui-ci continuera alors son parcours avec une énergie $E_e - E_k$. Si l'électron possède suffisamment d'énergie, il peut provoquer l'ionisation de l'atome qui libère alors un électron supplémentaire. Les transitions entre les niveaux excités de l'atome sont souvent représentées par le diagramme de Grotrian. La figure I.3 donne aussi la structure atomique du mercure qui nous intéresse tout au long de cette étude.

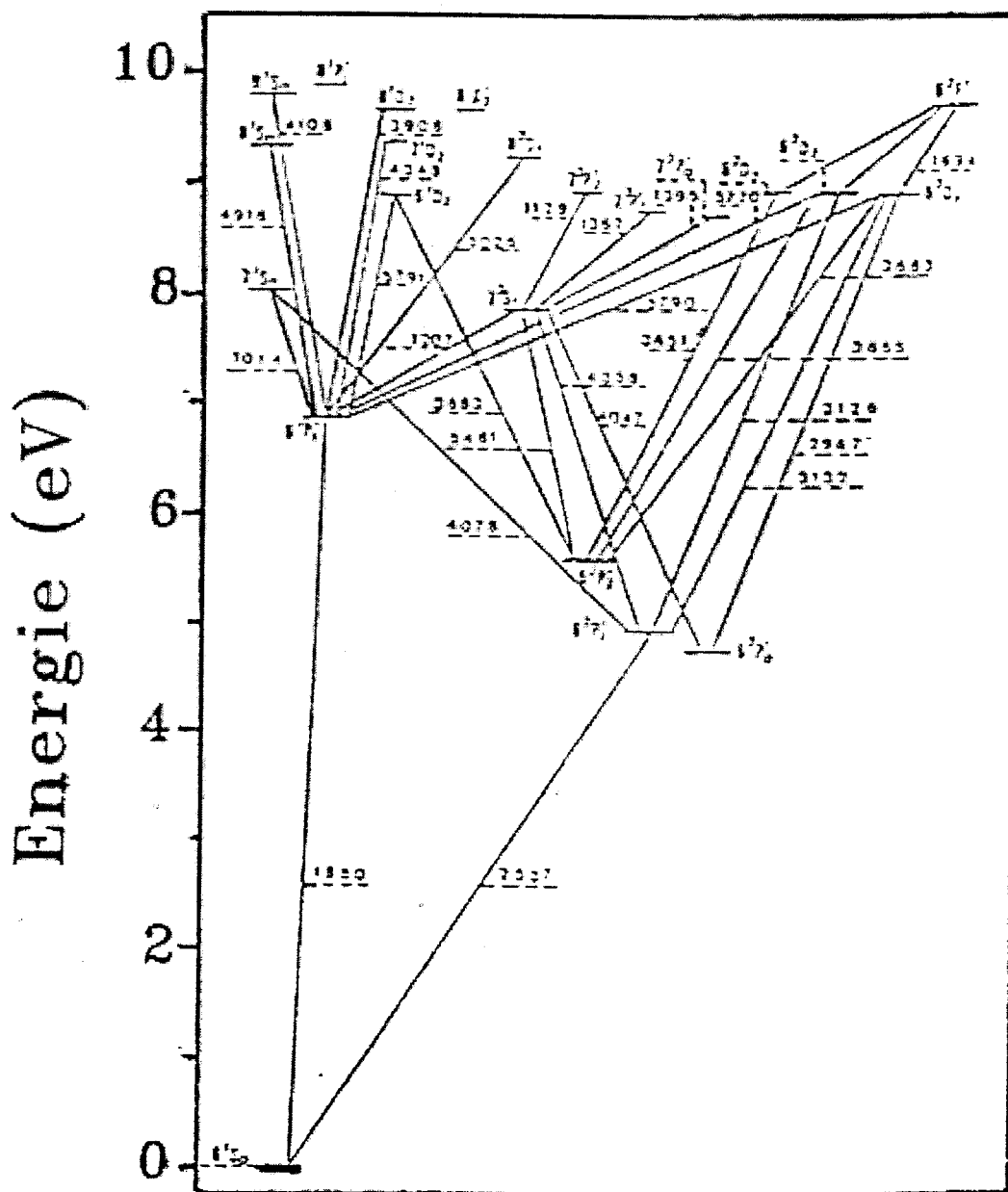


Figure : I.3 Diagramme de Grotrian des transitions entre les états atomique du mercure.

En augmentant la vitesse de l'électron incident, la probabilité d'excitation du niveau k augmente rapidement, mais si on continue à augmenter la vitesse, la probabilité d'excitation décroît à nouveau. Cette décroissance peut être rapide pour certains niveaux et lente pour d'autres. Cette forme de la section efficace est en général mal connue et, malheureusement, pèse considérablement sur le calcul des taux des transitions par l'intermédiaire du plus ou moins peuplement de la fonction de distribution.

Les tableaux I.2 (a : basse pression et b : haute pression) rassemblent les ordres de grandeur attachés à deux transitions importantes pour le fonctionnement de la décharge.

L'examen de la transition $6^1S_0 \rightarrow 6^3P_1$ est intéressant. En haute pression, le niveau 6^3P_1 est peuplé de façon plus efficace qu'en basse pression. En basse pression, hors équilibre, le nombre de photons à 254 nm émis en définitive est directement lié aux nombres de transitions directes $6^1S_0 \rightarrow 6^3P_1$.

En haute pression, près de l'équilibre thermodynamique local, la transition directe est contrebalancée par la transition inverse et la puissance émise n'est plus directement liée à la puissance transitée de 6^1S_0 vers 6^3P_1 par collisions de première espèce. C'est l'emprisonnement des différentes radiations qui va, pour une large part, fixer la répartition spectrale du rayonnement.

Tableau I.2a Ordres de grandeur pour les transitions en Basse Pression

Transition	$6^1S_0 \rightarrow 6^3P_1$	$6^1S_0 \rightarrow 7^3P_1$
Energie échangée (eV)	4.87	7.7
Energie échangée (J)	7.8×10^{-19}	12.3×10^{-19}
Section efficace moyenne (m^2)	3×10^{-20}	0.4×10^{-20}
Densité du mercure (m^{-3})	2.1×10^{20}	
Libre parcours moyen (m)	0.16	1.2
Fréquence de collision (Hz)	1.2×10^5	6.0×10^5
Densité électronique avec $E_e > E_s$ (m^{-3})	6.8×10^{15}	8.2×10^{13}
Nombre de collisions ($m^{-3}s^{-1}$)	8.2×10^{22}	4.9×10^{19}
Puissance (W/m^3)	6.4×10^4	6.0×10^1

Tableau I.2b Ordres de grandeur pour les transitions en Haute Pression

Transition	$6^1S_0 \longrightarrow 6^1P_1$	$6^1S_0 \longrightarrow 7^3P_1$
Energie échangée (eV)	4.87	7.7
Energie échangée (J)	7.8×10^{-19}	12.3×10^{-19}
Section efficace moyenne (m^2)	3×10^{-20}	0.4×10^{-20}
Densité du mercure (m^{-3})	1.5×10^{24}	
Libre parcours moyen (m)	3.2×10^{-5}	1.7×10^{-4}
Fréquence de collision (Hz)	2.2×10^{10}	3.0×10^9
Densité électronique avec $E_e > E_s$ (m^{-3})	4.6×10^{11}	2.3×10^{14}
Nombre de collisions ($m^{-3}s^{-1}$)	1.0×10^{28}	2.3×10^{23}
Puissance (W/m^3)	7.8×10^9	2.8×10^6

La création et la destruction des états excités ou ionisés peut s'effectuer selon plusieurs schémas. Rassemblons ces types d'excitations :

- ❖ Collisions entre des électrons rapides et les atomes à l'état fondamental.

Il s'agit d'un processus très probable car les valeurs de sections efficaces sont assez élevées et dans la décharge il existe un nombre non négligeable d'électrons rapides capables d'induire une telle transition. L'énergie du nuage électronique qui est cédée au gaz, sous forme d'excitation à partir du fondamental, peut être rigoureusement calculée par la relation :

$$P_{ex} = -n_e \sum_{j>0} n_0 \langle v_e E_j Q_{0j}(v_e) \rangle \quad \text{I-14}$$

- ❖ Collisions entre des électrons et des atomes déjà excités :

Ce processus connu sous le nom d'excitation ou d'ionisation par paliers conduit à des niveaux excités supérieurs ou à l'ionisation. L'ionisation par paliers est très fréquente dans les décharges qui nous intéressent cas des électrons ultra-rapides capables de causer une ionisation directe, sont peu nombreux dans la colonne positive.

- ❖ Absorption et émission d'un photon :

L'atome s'excite après avoir absorbé un photon, sur un niveau supérieur et il revient à son état initial (excité ou fondamental) après émission d'un photon.

- ❖ Collisions entre des atomes appartenant à la même espèce chimique :

Compte tenu de leur forte inertie, l'existence des particules lourdes rapides est pratiquement

échanges d'excitation ou d'ionisation qui sont des processus résonnants. Cependant, dans une décharge haute pression, les collisions entre les atomes métastables semblent être favorisées par la forte densité du milieu.

❖ Collisions entre des atomes d'espèces chimiques différentes :

Un atome d'espèce 1 sur un état métastable peut avoir une collision avec un atome de l'espèce 2 à l'état fondamental. Il peut en résulter un transfert d'excitation. Ou si les configurations atomiques le permettent, l'ionisation de l'atome 2, c'est l'ionisation Penning dont on cherche à en tirer parti, par le choix des mélanges, surtout pendant la phase d'amorçage de la décharge.

❖ Collisions de 2^{ème} espèce (super-élastiques) entre les électrons et les atomes excités : Elles provoquent une désexcitation de l'atome vers son état fondamental ou vers un état excité inférieur, l'électron incident récupère l'excès d'énergie. Ces collisions représentent donc un terme de gain d'énergie pour le nuage électronique (car l'énergie apportée par les électrons rapides et stockée sous forme potentielle peut être récupérée par des électrons lents après chaque collision super-élastique). La relation suivante donne le «gain» d'énergie du nuage électronique.

$$P_{\text{sup}} = n_e \sum_{j>k} n_j \langle v_e E_{kj} Q_{jk}(v_e) \rangle \quad \text{I-15}$$

❖ Enfin n'oublions pas la recombinaison d'un ion positif avec un électron (recombinaison radiative) et la recombinaison à trois corps (un ion et deux électrons). Toutefois, ces processus sont moins probables dans une décharge basse pression, ce qui n'est pas le cas dans les décharges haute pression à cause de la forte densité des particules chargées.

I.2.3. collisions optiques

Considérons un milieu gazeux où existent des atomes excités sur les états h et b (de densités n_h et n_b et d'énergie E_h et E_b) auxquels correspond la transition de fréquence V_{hb} . Si ce milieu est illuminé avec un faisceau de luminance $L_{\nu;hb}$ et de fréquence V_{hb} , il existe une probabilité pour que le photon d'énergie hV_{hb} entre en collision avec les atomes excités sur l'état b pour provoquer une transition $b \rightarrow h$. La probabilité attachée au processus $b \rightarrow h$ n'est pas la seule qui mette en cause le photon d'énergie hV_{hb} et les états d'énergie E_h et E_b . Deux autres mécanismes doivent être pris en compte : la transition spontanée de $h \rightarrow b$ avec émission d'un photon d'énergie hV_{hb} , l'émission induite (ou stimulée) d'un photon d'énergie hV_{hb} par l'onde électromagnétique attachée à un photon incident de même nature.

Si l'on fait intervenir la densité de rayonnement $u_{\nu;hb}$ liée à la luminance $L_{\nu;hb}$,

$$u_{v;hb} = \frac{4\pi}{c} L_{v;hb} \quad \text{I-16}$$

Ces trois processus sont liés par la relation :

$$n_b B_{bh} u_{v;hb} = n_h (B_{hb} u_{v;hb} - A_{hb}) \quad \text{I-17}$$

Où B_{hb} est la probabilité d'absorption, B_{hb} la probabilité d'émission stimulée et A_{hb} la probabilité d'émission spontanée. Einstein, en admettant que cette relation restait valable lorsque $u_{v;hb}$ était la densité de rayonnement qui existe à l'équilibre pour la même fréquence, a montré que ces probabilité devaient être liées par les relations :

$$B = B_{bh} = B_{hb} \quad \text{et} \quad \frac{A_{hb}}{B} = \frac{8\pi h V^3}{c^3} \quad \text{I-18}$$

Dans le cas où les états de h et b ont des multiplicités g_h et g_b , les relations de probabilité attachées à ces états deviennent[78] :

$$B_{hb} = \frac{g_h}{g_b} B_{hb} \quad \text{et} \quad \frac{A_{hb}}{B_{bh}} = \frac{8\pi h V^3}{c^3} \frac{g_b}{g_h} \quad \text{I-19}$$

Nous examinerons au paragraphe suivant comment ces grandeurs interviennent dans le transfert du rayonnement.

I.3. Equilibre thermodynamique complet (E.T.C)

A partir de l'analyse que l'on vient de présenter, il est évident que l'étude du comportement d'une décharge, qui prendrait en compte toutes les particules et toutes les interactions possibles, serait une tâche inextricable tant de point de vue du nombre d'équations à traiter que de la quantité de données indispensables. Fort heureusement, en raison du grand nombre de particules mises en cause, le comportement du système est de nature statistique. C'est à dire que la connaissance détaillée du comportement individuel des différentes particules n'est pas nécessaire pour connaître les propriétés macroscopiques du plasma accessibles par une approche statistique. Dans une telle approche, on associe à chaque degré de liberté du système une fonction de distribution qui permet de déterminer la densité moyenne des différents états du système.

Il existe une situation particulièrement intéressante que l'on rencontre dans le cas des systèmes isolés : les fonctions de distribution ne dépendent ni du temps ni de la position dans l'espace mais seulement d'un paramètre unique caractérisant le milieu qui est sa température thermodynamique T. on dit qu'un tel système est dans l'état d'équilibre thermodynamique complet (E.T.C). La description d'un plasma à l'E.T.C. est particulièrement simple puisque

toutes ses propriétés macroscopiques dépendent uniquement de la température et de la composition initiale du système. Ainsi, la distribution des vitesses des particules obéit à la loi de Maxwell, la population des états excités des atomes à la loi de Boltzmann, les densités d'électrons et d'ions à la loi de Saha, la distribution spectrale du rayonnement à la loi de Planck. La température T est le paramètre unique qui contrôle ces différentes lois. Le tableau (I.3) rassemble les lois de l'E.T.C. qui nous intéressent en les associant aux réactions dont la balance contrôle leur validité.

- ◆ Cela implique donc l'absence de gradient de T et la réabsorption totale du rayonnement. On voit donc qu'en toute rigueur cet équilibre ne pourrait jamais être atteint que dans les plasmas de laboratoire (dans un arc).

Tableau 1.3 Résumes les lois de l'équilibre thermodynamique complet.

Collisions Elastiques	$\pi_1(E_1^i) + \pi_2(E_2^i) \overset{\leftarrow}{\rightarrow} \pi_1(E_1^f) + \pi_2(E_2^f)$ $E_1^i + E_2^i = E_1^f + E_2^f$	LOI DE MAXWELL [8]
Collisions Inélastiques et Super-élastiques	$Ag + \pi(E_{gu} + E) \overset{\leftarrow}{\rightarrow} A_u(E_{gu}) + \pi(E)$	LOI DE BOLTZMANN [8]
Ionisation Et Recombinaison	$A + \pi(E^{ion} + E) \overset{\leftarrow}{\rightarrow} A^+ + \pi(E_1) + e^-(E_2)$ $E = E_1 + E_2$	LOI DE SAHA [8]
Interaction Matière-rayonnement	$A_u(E_{gu}) \overset{\leftarrow}{\rightarrow} A_g + h\nu$ $A_u(E_{gu}) + h\nu \rightarrow A_g + 2h\nu$ $E_{gu} = h\nu$	LOI DE PLANCK [8]

(π Symbolise une particule quelconque; l'indice g représente l'état fondamental d'atome
 A et u un état excité)

- ◆ Si les constantes caractéristiques du (ou des) gaz sont connues, la seule valeur de T permet de définir parfaitement le milieu qui sera caractérisé par les lois suivantes.

❖ LOI DE MAXWELL

$$\frac{dn}{n} = f(v)dv = \left(\frac{M}{2\pi kT}\right)^{3/2} \exp\left(-\frac{Mv^2}{2kT}\right) 4\pi v^2 dv \quad \text{I-20}$$

M : masse de la particule

k : constante de Boltzmann

Cette loi permet de déterminer le nombre dn des particules d'une espèce donnée pour une certaine vitesse et une température T .

❖ LOI DE BOLTZMANN

Pour une température T , la densité numérique d'atomes excités sur les divers niveaux d'énergie est constante. Si n représente la densité numérique totale de l'espèce:

$$n_m = \frac{n}{U(T)} g_m \exp\left(-\frac{E_m}{kT}\right) \quad \text{I-21}$$

E_m : énergie d'excitation, m : représente le niveau excité, g : le poids statistique.

$U(T)$: fonction de partition de l'espèce considérée.

$$U(T) = \sum_i g_i \exp\left(-\frac{E_i}{kT}\right)$$

E_i : représente les divers états d'énergies d'excitation possibles de l'atome.

❖ LOI DE SAHA

Elle permet de déterminer le degré d'ionisation du milieu.

$$\frac{n_e n_i}{n_o} = \frac{2U_i}{U_o} \frac{(2\pi m_e kT)^{3/2}}{h^3} \exp\left(-\frac{E_i - \Delta E}{kT}\right) \quad \text{I-22}$$

n_e, n_i, n_o sont respectivement les densités numériques des électrons, ions positifs et des atomes.

E_i : potentiel d'ionisation de l'espèce considérée, ΔE : abaissement du potentiel d'ionisation.

❖ LOI DE PLANCK

Tous les processus se font avec émission et absorption de rayonnement. β_γ est la puissance émise par unité de surface pour une radiation de fréquence γ , dans un milieu où l'indice de réfraction est n .

$$\beta_\gamma = n^2 \frac{2h\gamma^3}{c^2} [\exp(h\gamma/kT) - 1]^{-1} \quad \text{I-23}$$

c : vitesse de la lumière dans le vide.

I.4. Impossibilité d'équilibre thermodynamique complet.

Les plasmas de laboratoire sont de dimensions limitées et la plupart d'entre eux présentent une géométrie cylindrique. Dans un plasma de décharge électrique, la température sur l'axe de la décharge est généralement plus élevée que sur la périphérie, des gradients de pression (partielle pour les diverses espèces) peuvent apparaître et provoquer l'apparition de flux de matière. Par

ailleurs, les champs électriques créent une dérive des particules chargées. Ces déplacements seront une des causes de l'anisotropie de la fonction de distribution des vitesses. On a vu que les électrons acquièrent de l'énergie dans le champ électrique et la communiquent aux particules lourdes dans des collisions. Si la fréquence des collisions n'est pas suffisante, la température des électrons peut être beaucoup plus élevée que celle des neutres. Enfin, le rayonnement peut sortir de la décharge et le système n'est plus isolé. Tout compte fait, un système à l'état d'E.T.C est irréaliste.

I.4.1 Phase de l'équilibre thermodynamique local .

Etant donné que les photons peuvent sortir de la décharge plus facilement que les particules matérielles, il est fort probable que la loi de Planck sera la première mise en cause. Cependant dans un premier temps si la densité électronique n'est pas trop faible l'échange de l'énergie entre les électrons et les atomes ne sera pas affecté. Ainsi les lois de Maxwell, Boltzmann et Saha resteront une approximation très acceptable, il s'agit là de la phase d'équilibre Thermodynamique Local (E.T.L) . Les températures et les pressions partielles peuvent toujours être simultanément déterminées localement. Le fait que la loi de Planck ne soit plus globalement valable sur tout le domaine de longueurs d'ondes ne signifie pas qu'elle n'est pas approximativement valable pour certains domaines. La phase de l'E.T.L est très importante car elle permet de décrire, au moins approximativement de nombreux plasmas industriels : arcs des disjoncteurs, arcs de soudure, torches, flash, lampes, etc. La détermination des conditions sous lesquelles l'E.T.L peut être considéré comme une bonne approximation a donc une grande importance pratique pour la modélisation et l'exploitation des résultats expérimentaux de ces plasmas, plusieurs auteurs [69][70][73] ont donc donné des critères permettant de prédire l'E.T.L ou le non-E.T.L d'une décharge.

Griem [26] a étudié le cas d'un plasma optiquement mince où les radiations émises ne sont pas piégées dans le volume de la décharge. Ces radiations sont dues principalement à l'émission spontanée et à la recombinaison radiative. Son critère est simple : l'E.T.L est réalisé lorsque le taux de transitions radiatives entre le fondamental et le premier niveau excité est au moins 10 fois plus grand que le taux de transitions collisionnelles. La densité électronique critique est donc donnée par la relation :

$$n_e^c \geq 9 \times 10^{17} E_1^3 (eV) T_e \quad \text{I-24}$$

Par exemple, pour un plasma mercure haute pression où la température électronique est de l'ordre de 6000 K, la densité électronique critique est de l'ordre de $5 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$. Ce qui

correspond à une densité 5 à 6 fois plus grande que les valeurs expérimentales. Par contre, pour un plasma mercure-argon basse pression où l'espèce active est toujours le mercure. La température est de l'ordre de 12000 K, on calcule une densité critique de l'ordre de 10^{17}cm^{-3} . Cette valeur est de 5 à 6 ordres de grandeur supérieure à la densité électronique mesurée.

I.4.2. Phase d'équilibre thermodynamique local partiel.

Si la densité électronique est inférieure aux limites précédentes, la déviation à l'E.T.L devient trop importante pour que l'on puisse considérer être encore dans la même phase. Etant donné le faible rapport de masses entre électrons et particules lourdes, le chauffage des électrons par le champ est plus rapide que le transfert d'énergie par collisions aux particules lourdes. La température du gaz sera inférieure à la température électronique. Un autre effet du faible rapport de masse est que les électrons peuvent encore maintenir la validité de la loi de Saha pour les niveaux supérieurs de l'atome. Ainsi, les électrons imposent leur température à la distribution entre les niveaux atomiques élevés, par conséquent leur température d'excitation est la même que la température électronique et le spectre issu de ces niveaux reflète la propriété du nuage électronique. La loi de Boltzmann n'est plus valable entre les niveaux supérieurs et inférieurs. Cette phase est désignée sous le terme d'Equilibre Thermodynamique Local Partiel E.T.L.P. Pour les niveaux inférieurs, il faut remarquer que, le plus souvent, la différence d'énergie entre ces niveaux est assez grande devant la différence d'énergie entre les niveaux excités supérieurs. La loi de Saha n'est plus applicable à l'ionisation à partir de ces niveaux. Par contre, on admet que le principe de la balance détaillée reste justifié et que la loi de Boltzmann reste applicable entre les niveaux inférieurs. Mais la température d'excitation n'est plus la même que la température électronique. Pour ces niveaux, on parle de phase de Solution Quasi Stationnaire.

I.4.3. Phase totalement hors d'équilibre thermodynamique .

Lorsque la densité électronique devient trop faible, les collisions électron-électron responsables de la redistribution de l'énergie dans le nuage électronique et maintenant sa forme maxwellienne, deviennent de plus en plus inefficaces. La conséquence directe est que la loi de Maxwell ne restera valable que pour les électrons du «corps». La partie haute énergie de la fonction de distribution (à partir du premier seuil d'excitation du gaz) présente des déviations souvent importantes par rapport à la distribution d'équilibre du corps.

Dans ce cas, aucune des quatre lois de l'E.T.C ne reste valable, les températures sont toutes différentes (exception faite, dans la limite des champs électriques faibles, de la température ionique qui est presque égale à la température atomique). La description du système demande

alors la mise en œuvre d'un modèle collisionnel-radiatif, on peut dire que l'on est en phase «totalemt Hors Equilibre Thermodynamique ».

En conclusion, nous pouvons dire 'qu'en poussant un système hors de l'état d'E.T.L , la difficulté de la modélisation ou de l'exploitation des résultats expérimentaux augmente rapidement et que le volume des données nécessaires devient de plus en plus grand.

I.5. Les inhomogénéités du plasma.

Le plasma que nous étudions est toujours limité par une paroi isolante dans le cas qui nous intéresse. au moins transparente à la fraction du rayonnement que l'on cherche à utiliser et d'un autre point de vue celui de la transition conduction métallique-conduction gazeuse par des électrons. Ces limites, dont les propriétés sont différentes de celles du plasma, entraînent l'apparition de gradients de densités (de matière ou de rayonnement), de température et de potentiel. Il en résulte des déplacements de matière (ou de rayonnement) qui tendront à rétablir l'homogénéité du milieu. A ces déplacements vont correspondre des transferts de puissance qui, globalement, iront de la source d'énergie vers le nuage électronique puis du nuage électronique vers les limites du plasma.

I.5.1. Les phénomènes de transport de la matière.

I.5.1.1 Diffusion ordinaire

Les relations concernant la diffusion seront rappelées dans le cas particulier des électrons, mais en première approximation elles restent valables pour la diffusion binaire d'un type de particules minoritaires dans un gaz homogène.

L'étude macroscopique conduit à l'expression suivante du courant de diffusion[78] :

$$n_e V_{eD} = -\frac{1}{m_e V_{el}} \nabla [n_e k_B T_e] \quad \text{I-25}$$

Où V_{el} est la fréquence de collision effective.

Si T_e varie peu, on retrouve la formule usuelle du flux de diffusion :

$$n_e V_{eD} = -\frac{k_B T_e}{m_e V_{el}} \nabla n_e = -D_e \nabla n_e \quad \text{avec} \quad D_e = \frac{k_B T_e}{m_e V_{el}} \quad \text{I-26}$$

Au niveau microscopique, en l'absence de champ électrique, si l'on cherche à étudier à partir de l'équation de Boltzmann l'évolution d'un nuage électronique de densité non uniforme dans un gaz neutre homogène, on montre qu'il s'établit un courant de diffusion tel que

$$n_e V_{eD} = -\frac{1}{3} \nabla \int_0^\infty \frac{v_e^2}{V_{el}} 4\pi v_e^2 \phi_0 dv_e = \frac{1}{3} \nabla \left[n_e \left\langle \frac{v_e^2}{V_{el}} \right\rangle \right] \quad \text{I-27}$$

Où V_{el} est la fréquence de collision pour le transfert de la quantité de mouvement.

Si la fonction de distribution est homogène, $\langle v_e^2 / V_{el} \rangle$ peut sortir de l'opérateur et

$$n_e V_{eD} = -D_e \nabla n_e \quad \text{avec} \quad D_e = \frac{1}{3} \left\langle \frac{v_e^2}{V_{el}} \right\rangle \quad \text{I-28}$$

La comparaison des relations (I.26) et (I.28) conduit à l'expression de la fréquence de collision effective

$$V_{el} = \frac{\nabla [n_e \langle v_e^2 \rangle]}{\nabla \left[n_e \left\langle \frac{v_e^2}{V_{el}} \right\rangle \right]} \quad \text{I-29}$$

Si V_{el} est constante alors $V_{el} = V_{el}$ et par suite :

$$D_e = \frac{k_B T_e}{m_e V_{el}} \quad \text{I-30}$$

1.5. 1.2 Diffusion ambipolaire

Nous avons supposé dans le rappel concernant la diffusion des électrons et des ions que ceux-ci étaient libres et indépendants les uns des autres. Il n'en est jamais ainsi dans un plasma puisque la neutralité électrique doit être vérifiée (à petite échelle). Ces deux espèces diffuseraient, si elles étaient indépendantes l'une de l'autre, à des vitesses très différentes. On montre en effet que :

$$\frac{D_e}{D_i} \sim \sqrt{\frac{m_i}{m_e}} = 600 \text{ dans le cas de mercure, } 270 \text{ dans le cas de l'argon.}$$

Compte tenu de l'importance des forces électrostatiques, toute dissociation entre le nuage d'ions et le nuage d'électrons va faire apparaître une force de rappel intense qui tendra à rétablir la neutralité. Cette force est liée au champ de diffusion ambipolaire E_a . Dans ces conditions, sous la double influence des gradients de densités et du champ de diffusion ambipolaire E_a , l'ensemble des charges diffusera à une vitesse V_{Da} supérieure à celle des ions mais inférieure à celle des électrons supposés seuls.

Pour résoudre complètement le problème, il faut tenir compte des équilibres de création et de disparition des ions et des électrons (animés de vitesses V_i et V_e), du déplacement de ces

particules sous la double influence du champ E_a et des gradients de densités des ions et des électrons et enfin de l'équation de Poisson qui lie E_a aux charges. En général, on simplifie cette résolution en admettant que $n_i = \varepsilon n_e$ et que $n_e V_e = n_i V_i$. Avec cette simplification l'équation de Poisson n'est plus nécessaire et l'on obtient :

$$n_e V_e = n_i V_i = -D_s \nabla n_e = -D_s \nabla n_i \quad \text{avec} \quad D_s = \varepsilon \frac{\mu_i D_e - \mu_e D_i}{\varepsilon \mu_i - \mu_e} \quad \text{I-31}$$

Pour $\varepsilon = 1$, on est dans le cas de la diffusion ambipolaire parfaite et $D_s = D_a$. En tenant compte de la relation d'Einstein la mobilité et le coefficient de diffusion on obtient :

$$\text{Pour } T_e \gg T_g : \quad D_a = \mu_i \frac{k_B T_e}{e} \quad \text{et pour } T_e = T_g : \quad D_a = \mu_i \frac{2k_B T_e}{e} \quad \text{I-32}$$

Cette approximation de la diffusion ambipolaire n'est vérifiée que si la distance de diffusion est très grande devant la longueur de Debye. Elle n'est jamais vérifiée au voisinage des parois [16]. La longueur de diffusion est liée à la géométrie de l'enceinte (R et L). Pour une décharge cylindrique la longueur de diffusion Λ_a pour le mode principal est donnée par :

$$\frac{1}{\Lambda_a^2} = \left\{ \frac{2.4}{R} \right\}^2 + \left\{ \frac{1}{L} \right\}^2 \quad \text{I-33}$$

On peut lui faire correspondre un temps de diffusion $\tau_a = \Lambda_a^2 / D_a \equiv 1 / \nu_a$

Cette dernière grandeur est intéressante. Car elle correspond, en basse pression (diffusion ambipolaire prédominante), à l'ordre de grandeur de la fréquence à partir de laquelle la modulation de la densité électronique ne sera plus perturbée par ce mécanisme. Le tableau (I.4) donne les valeurs de la longueur de Debye λ_D , de Λ_a et de ν_a .

Tableau I-4 Valeurs de la longueur de Debye λ_D , de Λ_a et de ν_a .

Décharge	BP36	HP1	HP2
λ_D (m)	10^{-5}	7.6×10^{-8}	4.9×10^{-7}
Λ_a (m)	7.5×10^{-3}	4.2×10^{-3}	4.2×10^{-3}
ν_a (kHz)	0.84	0.012	0.30

I.5.2. Transfert du rayonnement

Si l'on s'intéresse à un accroissement de luminance d'un pinceau lumineux dans une direction \mathbf{XX}' , et si l'on néglige la contribution de l'émission induite, on peut écrire en tenant compte des relations (I.18) et (I.19).

$$\begin{aligned} \frac{dL(\nu)}{dx} &= \left\{ \frac{h\nu}{4\pi} A_{hb} n_h P(\nu) \right\} - \left\{ \frac{h\nu}{c} B_{hb} n_h P(\nu) \right\} L(\nu) \\ &= \left\{ \frac{h\nu}{4\pi} A_{hb} n_h P(\nu) \right\} - \left\{ \frac{h\nu}{c} \frac{c^3}{8\pi h \nu^3} \frac{g_b}{g_h} A_{hb} n_h P(\nu) \right\} L(\nu) \\ &= \{ \varepsilon(\nu) \} - \{ k(\nu) \} L(\nu) \end{aligned} \quad \text{I-34}$$

où $P(\nu)$ est le profil d'émission ou d'absorption (supposés identiques) pour la raie considérée.

La solution de l'équation (I.34) pour un milieu homogène d'épaisseur d est bien connue, elle s'écrit en fonction de la longueur d'onde :

$$L(\lambda) = \frac{\varepsilon(\lambda)}{k(\lambda)} \{ 1 - \exp[-k(\lambda)d] \} = \frac{\varepsilon(\lambda)}{k(\lambda)} \{ 1 - \exp[-\tau_0(\lambda)] \} \quad \text{I-35}$$

On sait que cette expression présente deux limites intéressantes. Pour des épaisseurs optiques $\tau_0(\lambda)$ faibles (inférieure à 0.1mm) le plasma est optiquement mince et $L(\lambda)$ tend vers $\varepsilon(\lambda)d$ qui est la luminance de plasma en l'absence d'absorption. Au contraire, quand $\tau_0(\lambda)$ augmente, $L(\lambda)$ tend vers la luminance du corps noir.

Pour certaines raies, l'épaisseur optique peut varier beaucoup : très importante au voisinage de la longueur d'onde centrale du profil, elle diminuera au fur et à mesure que l'on s'éloignera dans l'aile. Par ailleurs, puisqu'un plasma n'est jamais homogène. Le profil de la raie présentera une inversion au centre. Ce phénomène a été bien décrit par le formalisme de Bartels [6]. En utilisant ce formalisme, on montre facilement que le maximum d'une raie auto-inversée approche l'émission du corps noir dans une proportion (50 à 85% pour une décharge mercure haute pression) qui dépend de la transition considérée et des distributions des niveaux émetteurs et absorbants.

Il est commode de décrire l'emprisonnement de la radiation à l'aide du facteur de fuite qui représente le rapport entre le nombre de photons réellement émis et le nombre de ceux qui sortiraient du plasma en l'absence d'absorption.

Le facteur de fuite est donc une grandeur qui rend compte globalement de l'émission de la décharge. Il a fait l'objet de nombreuses études[32].

Pour des décharges dans lesquelles l'E.T.L. peut être supposé, Drakakis [19] a montré que, dans le cas d'un profil de Lorentz, ce rapport peut s'écrire pour des raies fortement absorbées ($\tau_0 \gg 1$) et pour des raies peu absorbées ($\tau_0 \ll 1$) :

$$\Theta_A = \frac{0.874 \langle g_A \rangle \sigma(\tau_{\max}(0))}{\pi \sqrt{\tau_{\max}(0)}} \quad \text{et} \quad \Theta_a = \langle g_A \rangle \left[1 - \frac{\pi \tau_{\max}(0)}{8} + \frac{3.8 \tau_{\max}^2(0)}{16} \right] \quad \text{I-36}$$

$\langle g_A \rangle$ et $\langle g_a \rangle$ sont les valeurs moyennes des distributions d'atomes émetteurs, $\tau_{\max}(0)$ l'épaisseur optique au centre de la raie et $\sigma(\tau_{\max}(0))$ est définie par la théorie de Bartels et son expression est donnée par Drakakis [19]. Dans le cas des décharges basse pression (raie à profil Doppler prépondérant), on utilise le plus fréquemment les résultats de Holstien [31] qui restent, en dehors des études basées sur des méthodes type Monte Carlo[79]. Toutefois on est en général amené à introduire un facteur correctif pour des raisons qui tiennent en particulier :

- ❖ Aux différences entre les distributions réelles des niveaux émettant et absorbant et celles adoptées pour ces modèles.
- ❖ Au chevauchement plus ou moins important des structures isotopiques.
- ❖ A l'influence de la pression (de mercure ou de gaz neutre) qui modifie le profil des raies émises.
- ❖ A la valeur de l'épaisseur optique la théorie de Holstien [32] n'est considérée comme valable que pour $\tau_0 > 6$.
- ❖ Dans le cas de raies 185nm du mercure on cite aussi la différence des profils d'émission et d'absorption [69].

Le tableau (I.5) donne quelques valeurs du facteur de fuite en basse pression et en haute pression pour la raie de résonance à 254 nm[32].

Tableau I.5 Valeurs du facteur de fuite

Rayon (cm) →	1.1	2.5	1.0
Pression (hPa) ↓			
1.68	2.2×10^{-1}	8×10^{-2}	
8.44	2.8×10^{-2}	1×10^{-2}	
48.0	7.7×10^{-3}	3×10^{-3}	
3×10^8			$10^{-2} - 10^{-3}$

On constate qu'en haute pression, l'emprisonnement de la raie augmente mais pas autant que l'on aurait pu s'y attendre. Cela est dû au fait que les raies sont alors fortement élargies par effet de pression. Il faut d'ailleurs noter que pour les raies des triplets visibles et ultra violet, en haute pression, le facteur de fuite est de l'ordre de 0.1 ce qui explique l'émission très importante de ces raies dans le cas des décharges mercure haute pression.

I.6. Transformation de l'énergie électrique et propriétés de différents types de décharges

Il est possible de rassembler les ordres de grandeur donnés dans les précédents paragraphes pour se faire une idée générale des mécanismes prépondérants dans la colonne positive et des propriétés des sources de rayonnement haute et basse pression. Fondamentalement, si l'on admet que les conditions du plasma sont toujours optimisées pour transformer en rayonnement un maximum de la puissance électrique fournie par le générateur, ce qui tout d'abord va différencier ces deux types de sources ce sera la densité d'énergie émise directement liée à la densité du milieu émettant. Ainsi lorsque l'on passe de quelque 10^2 Pa de pression totale (lampe fluorescente) à quelque 10^5 Pa (mercure HP) la densité de puissance rayonnée passe de 4×10^4

Les augmentations de densité (d'espèce ou de puissance) vont également intervenir de façon prépondérante dans le fonctionnement et sur l'état de la décharge. La figure I.4 [15] résume les principaux phénomènes qui interviennent dans la dissipation de l'énergie électrique en allant du générateur vers les limites de la décharge. L'organisation générale comprend :

- ❖ Une boucle de chauffage (BCh) qui assure, essentiellement par le canal des chocs électroniques, le transfert de l'énergie électrique vers les neutres.
- ❖ Une boucle excitation/désexcitation des particules neutres (BRF ou boucle de refroidissement) qui assure pour l'essentiel, la dissipation de l'énergie vers le milieu extérieur.

❖ Deux boucles internes collisionnelle (BCI) et radiative (BRI), sont principalement responsables de l'établissement plus ou moins exact de l'équilibre thermodynamique. La première parce qu'elle thermalise localement le plasma (transfert d'énergie des électrons chauds vers des électrons plus froids). La seconde qui agit à la plus longue distance, parce qu'elle transfère de l'énergie du cœur chaud de la décharge vers la périphérie (il faut noter qu'elle refroidit le plasma en dépeuplant préférentiellement certains niveaux ce qui, localement, tend à éloigner la décharge de l'équilibre).

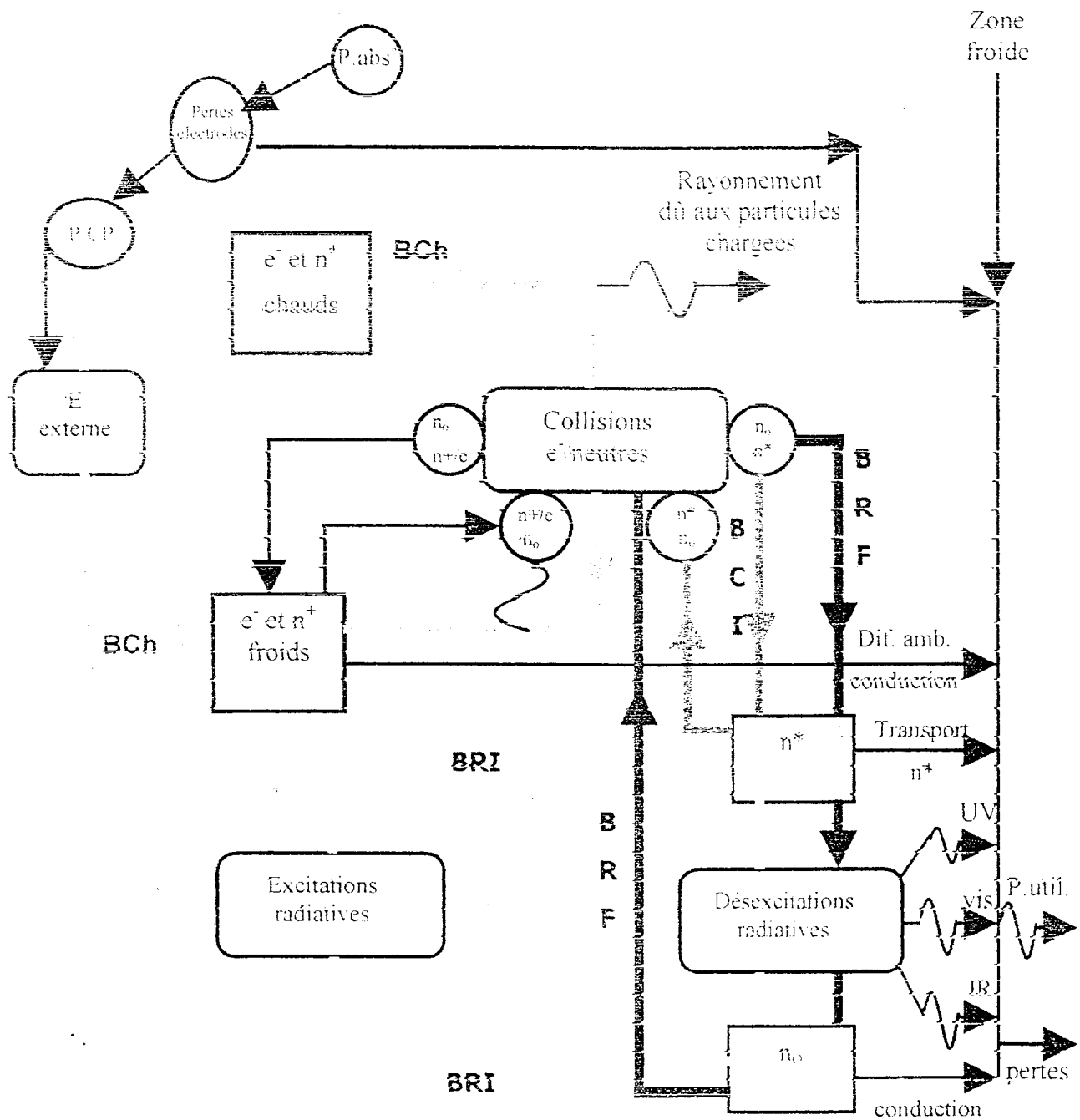


Figure 1.4 : Processus de transfert d'énergie dans la colonne positive

I-7. Répartition du plasma dans le tube.

L'espace d'Aston : couche mince et complètement sombre.

La lueur cathodique : couche mince faiblement lumineuse et diffuse vers l'anode .

L'espace sombre cathodique : cette région émet une quantité très petite de lumière

Lueur négative : partie la plus brillante de la décharge l'éclat atteint son maximum approximativement au milieu de cette région.

Espace de Faraday : sa couleur est caractéristique pour chaque gaz.

L'espace sombre de Faraday : région de luminosité très faible la longueur de cette espace augmente avec le rayon du tube de décharge il est supérieur à la longueur de la lueur négative.

La colonne positive : constitué le plasma de la décharge et se présente sous forme d'une longue colonne lumineuse, s'étendant jusqu'au voisinage immédiat de l'anode.

L'espace sombre anodique : d'épaisseur très faible.

Lueur anodique : augmente avec la diminution de la pression en présentant des formes et des couleurs spécifiques, fonction du matériau et la géométrie de l'anode.

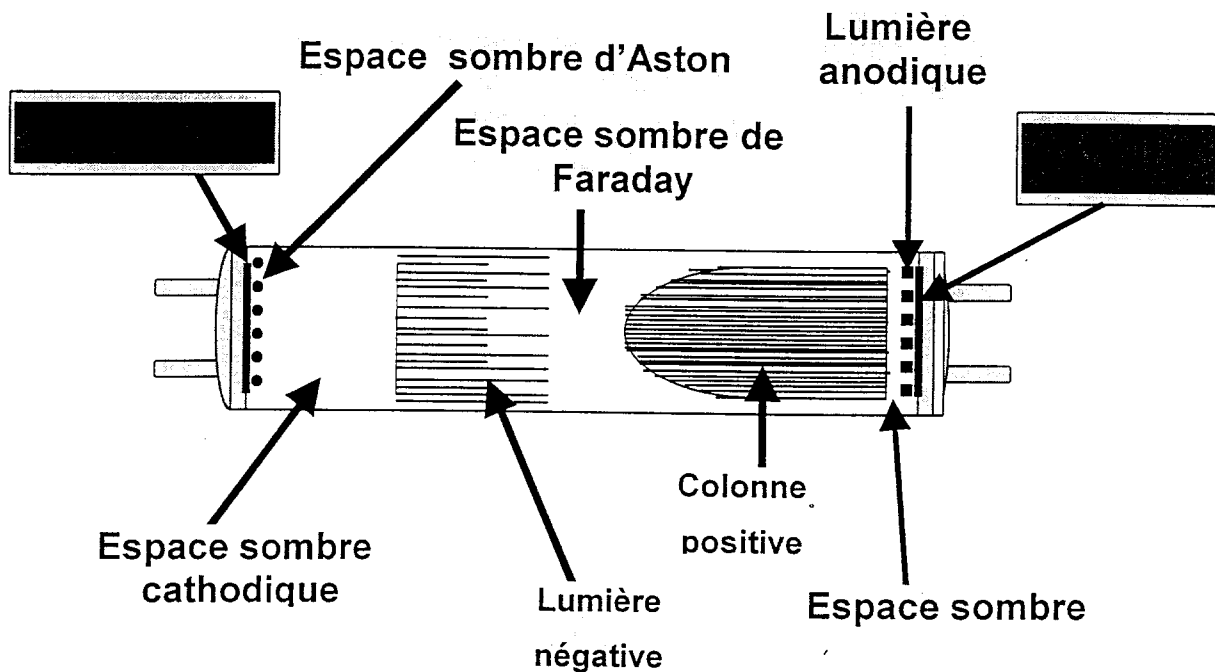


Figure I.5 Répartition du plasma dans le tube.

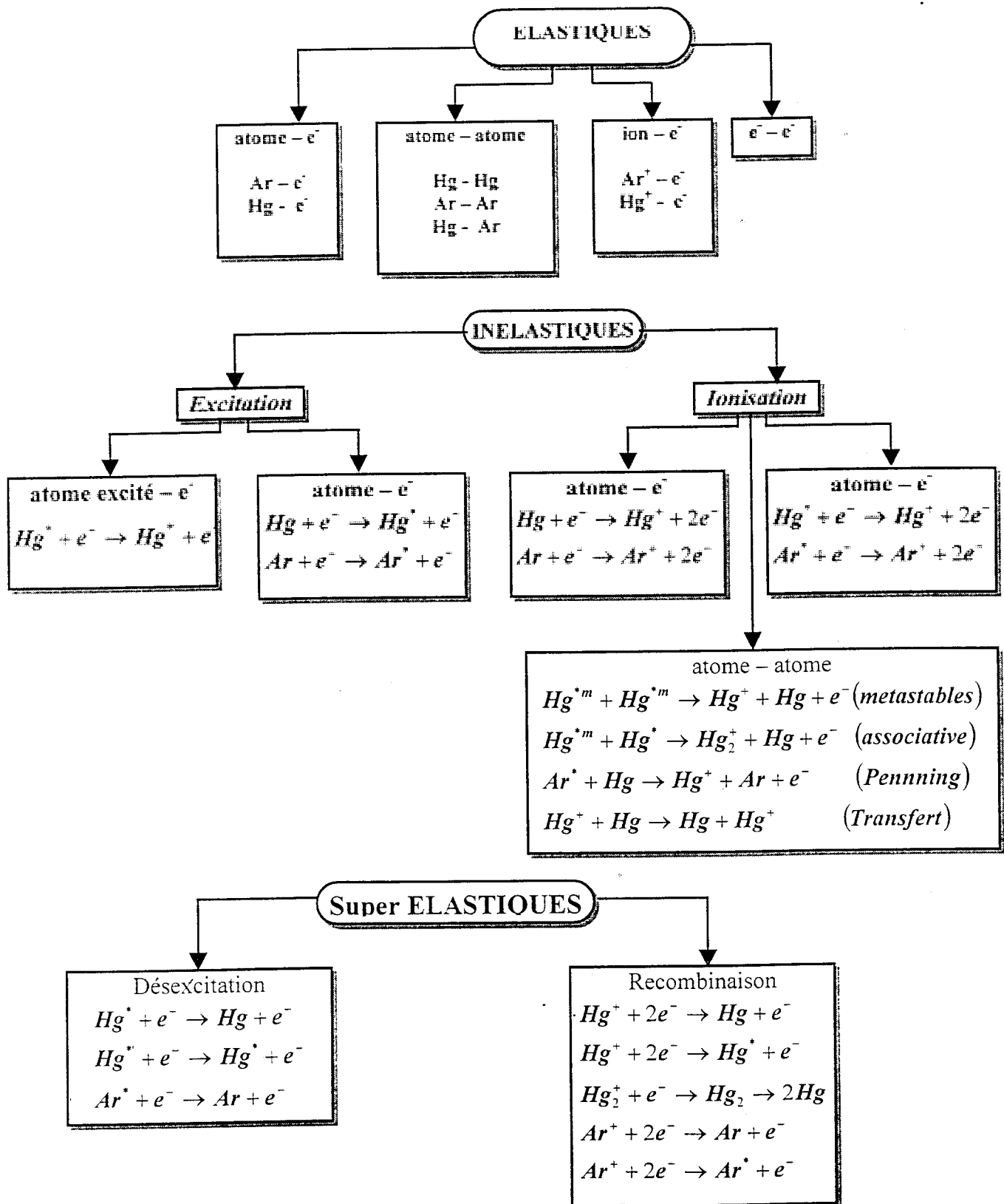
Chapitre II :

**Différents paramètres nécessaires
à la modélisation.**

Dans ce chapitre nous nous sommes intéressés à l'étude et la présentation des différentes réactions, sections efficaces et coefficients de transport.

II.1. Principales interactions collisionnelles étudiées.

Les principales interactions collisionnelles prises en compte sont :



Bien entendu, dans les décharges qui nous intéressent, vu la faible température électronique moyenne (de l'ordre de **0.5 eV** pour une décharge haute pression et de **1 à 3 eV** maximum pour une décharge basse pression), la probabilité de présence d'ions plusieurs fois chargés est pratiquement nulle.

II.2. Sections efficaces

Il faut malheureusement signaler que les sections efficaces de ces interactions sont, contrairement à ce que l'on pourrait penser pour un corps aussi utilisé que le mercure parfois très mal connues. L'erreur quadratique moyenne peut quelque fois atteindre 40% ou plus [53]. Cette incertitude est à la base des écarts importants que l'on observe entre les résultats théoriques des différents auteurs. La figure (II.1) donne un exemple des valeurs utilisées pour la section efficace de la réaction $Hg(6^1S_0) + e^- \rightarrow Hg(6^3P_2) + e^-$

On constate que l'accord entre elles est, c'est le moins que l'on puisse en dire, peu satisfaisant ! Comme Waymouth [69] l'a souligné dans le cas spécial des lampes, tant que les valeurs des sections efficaces ne seront pas connues avec une bonne précision, les déviations entre les résultats expérimentaux et théoriques seront inévitables et l'utilisation de paramètres d'ajustement afin d'obtenir une meilleure concordance restera légitime.

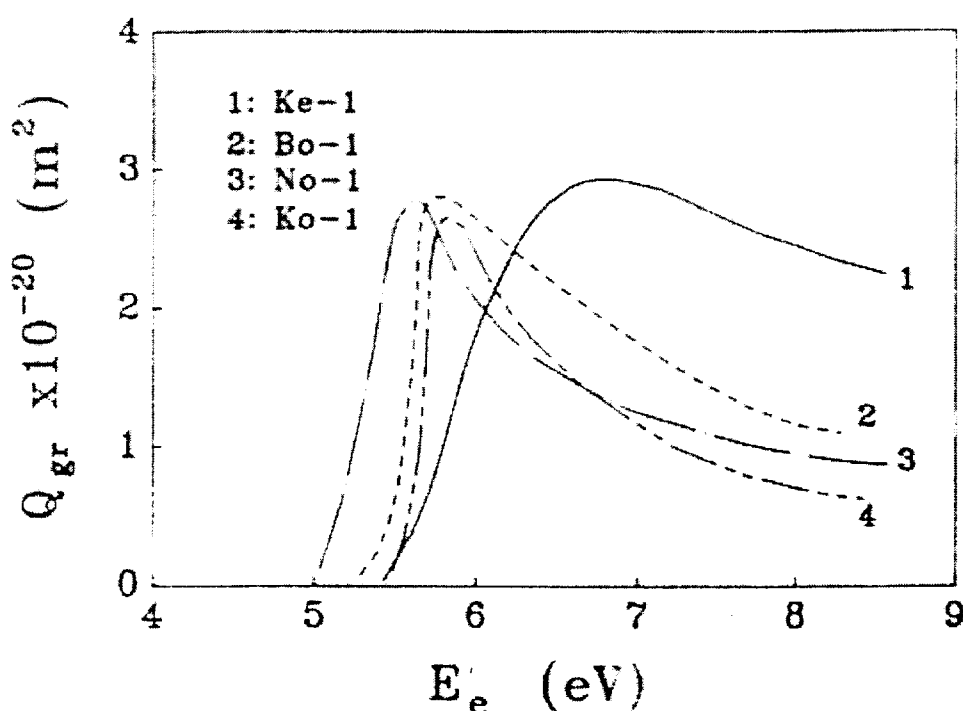


Figure. II.1 : Diverses approximations pour la section efficace de la transition $Hg(6^1S_0) \rightarrow Hg(6^3P_2)$

Dans les paragraphes qui vont suivre, nous donnerons les valeurs des sections efficaces utilisées dans ce travail tout en essayant de justifier leur choix à partir de critères plus ou moins généralement acceptés dans des travaux similaires.

II.2.1. Sections efficaces de collisions élastiques:

Cette quantité intervient dans le calcul de la fonction de distribution des énergies électroniques comme dans le calcul des coefficients de transport ou dans celui des pertes d'énergie par collisions élastiques. La section efficace pour le transfert de la quantité de mouvement est en général assez bien connue. De plus et afin d'améliorer la cohérence des données, il est possible de l'ajuster afin de reproduire les valeurs expérimentales des coefficients de transport tels que la vitesse de dérive, les coefficients de diffusion dans la direction du champ électrique, la conductance, etc... Mieux seront connus expérimentalement les coefficients de transport, mieux nous pourrons affiner notre ajustement.

II.2.1.1 Cas des collisions électron/mercure

Nous avons retenu pour notre étude les valeurs de transfert de la quantité de mouvement données par Rockwood [58] qui a ajusté les valeurs obtenues par Mc Cutchen [46]. La figure II.2a présente les résultats obtenus pour les collisions élastiques e/Hg . La section efficace de transfert de la quantité de mouvement est donnée en fonction de l'énergie électronique.

Les raisons qui nous ont conduit à ce choix sont les suivantes : en basse pression, leur introduction dans le calcul de la vitesse de dérive à partir de la résolution de l'équation de Boltzmann conduit à un bon accord avec les valeurs expérimentales (figure II.2b) de Mc Cutchen [46] pour les faibles valeurs de E/N et avec celles de Ovcharenko [51] pour les fortes valeurs de E/N . En outre, la qualité des résultats de Rockwood [58] est également reconnue par Itikawa [35] dans son ouvrage « Atomic Data Nuclear Data Tables ». La valeur moyenne de la section efficace de Rockwood est proche de 85 \AA^2 , Salon [60] avait proposé une valeur constante de 100 \AA^2 , Adler [1] de 45 \AA^2 , Moris et Walker [48] de 98 \AA^2 , Brode [5] de 117 \AA^2 , et Elenbaas [24] de 126 \AA^2 . Dans le cas des décharges basse pression, cette section efficace intervient peu puisque le gaz rare est l'élément dominant dans la régulation des phénomènes de transport. Par contre, pour des pressions partielles de vapeur de mercure plus importantes les incertitudes liées à cette section efficace prennent plus d'importance [8].

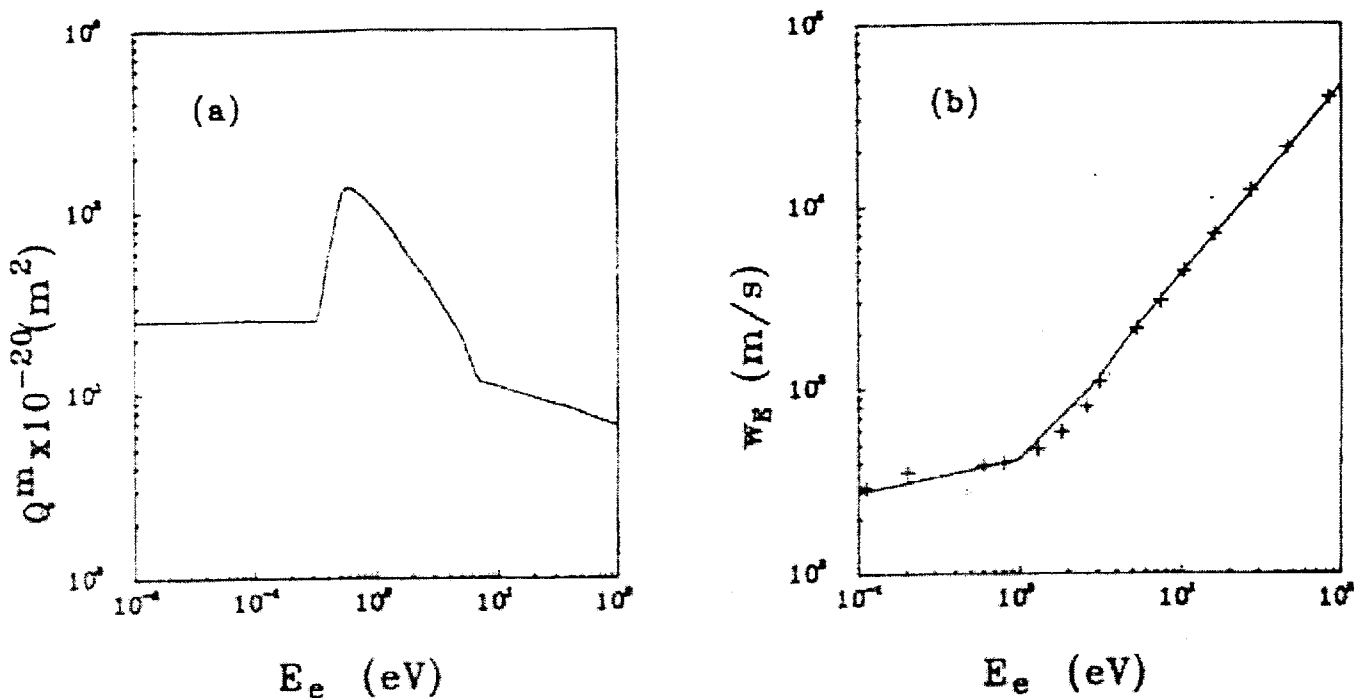


Figure II.2 : Section efficace de transfert de la quantité de mouvement pour les interactions e^-/Hg (a) et vitesse de dérive calculée et expérimentale (+) (b).

Debbagh-Zriouil [22] a proposé une forme analytique pour cette section efficace afin de chiffrer l'influence de divers paramètres sur la conductance d'une décharge mercure haute pression.

$$Q^m(u) = Q_m \exp(-b\sqrt{u - U_m}) \tag{II-1}$$

Q_m : la valeur maximale de cette section efficace

U_m : L'énergie qui correspond à Q

II.2.1.2 Cas des collisions électron/ Argon

Pour les collisions élastiques e^-/Ar plusieurs auteurs ont donné des valeurs de sections efficaces de transfert de la quantité de mouvement, à peu près similaires. Néanmoins, l'existence de quelques différences peut influencer notablement la valeur calculée de la mobilité électronique si la valeur du paramètre E/N est faible. C'est malheureusement le cas dans les décharges basse pression que nous étudions.

Pour les énergies électroniques $E_e < 5$ eV, nous avons choisi les valeurs données par Haddad et O'Malley [28] décrivent avec une bonne précision l'état de notre section.

Pour les énergies $E_e > 5$ eV, nous adoptons les valeurs données par Frost et Phelps qui sont les plus couramment utilisées, en outre la section efficace donnée par Frost et Phelps peut très bien être approximée par une relation analytique simple :

$$Q^m(E_e) = 400 \times 10^{-20} E_e^{1.05} \quad (m^2) \quad \text{II-2}$$

La figure II.3a donne, en fonction de l'énergie la section efficace obtenue Christophorou [12], dans son travail de synthèse, a proposé la même combinaison de valeurs.

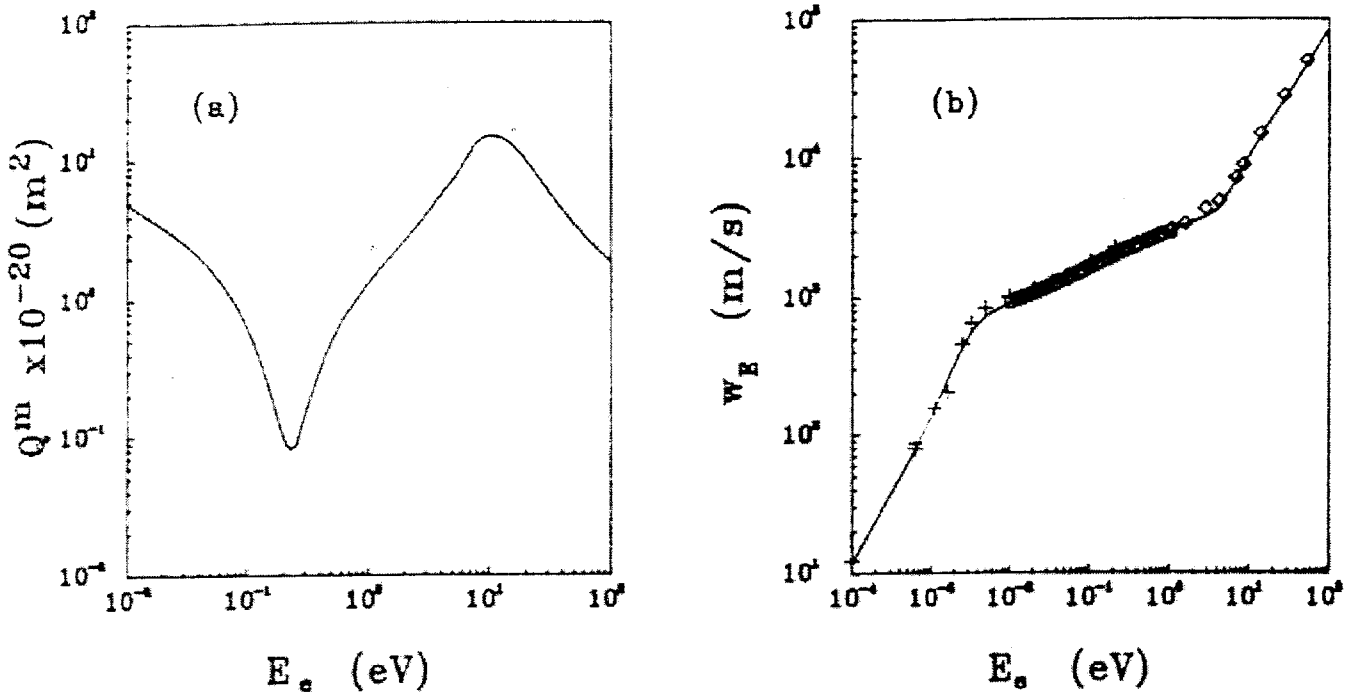


Figure II.3 : Section efficace de transfert de la quantité de mouvement pour les interactions e^-/Ar
 (a) vitesse de dérive (b) calculée (ligne) et expérimentale à partir de (o) : [33], (+) : [17], (∅) : [37]

Sur la figure II.3b, nous pouvons constater que les valeurs retenues reproduisent fidèlement les valeurs expérimentales de la vitesse de dérive dans l'argon.

II.2.1.3 Cas des collisions atome / atome

Ces interactions sont très importantes pour le calcul des coefficients de transport dans le gaz atomique. Les valeurs moyennes des sections efficaces de transfert de la quantité de mouvement des collisions élastiques Hg/Hg , Ar/Ar et Ar/Hg peuvent être calculées, en première approximation, en utilisant un potentiel d'interaction inter-particulaire de Lennard-Jones.

La méthode, qui utilise aussi les intégrales de collision donne, en fonction de la température du gaz, les valeurs des sections efficaces pour les trois interactions qui nous intéressent.

Pour les valeurs de température supérieures à 500 K, on constate que les sections efficaces Ar/Ar et Ar/Hg tendent vers une valeur constante. La même tendance est observée pour l'interaction Hg/Hg mais pour des valeurs de température supérieures à 1000 K. Ainsi, il nous paraît judicieux dans le cas des décharges haute pression, où la température est de l'ordre de

5000 K, de considérer une valeur constante. Pour les décharges basse pression où la température du gaz est proche de la température ambiante nous ne pourrions plus négliger la variation de la section efficace.

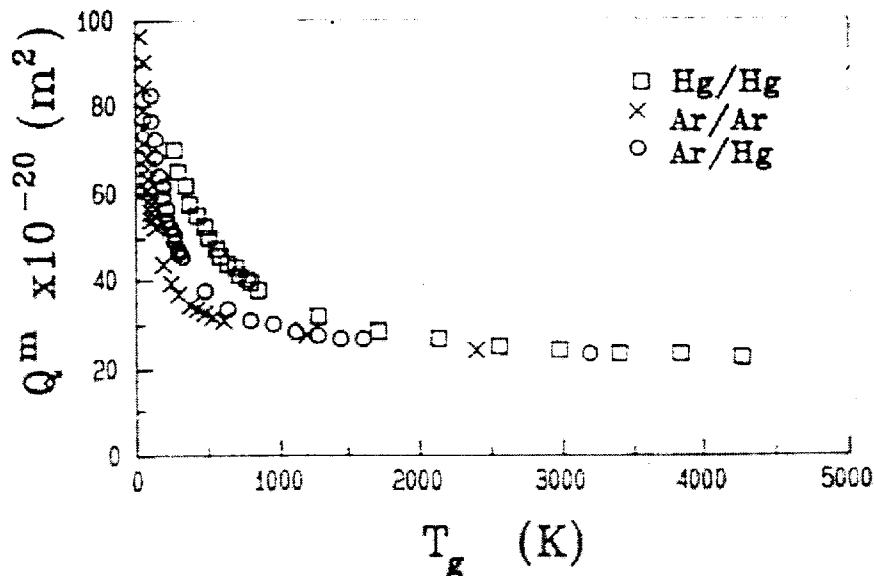


Figure II.4 : Sections efficaces de transfert de la quantité de mouvement pour les collisions élastique atome / atome en fonction de la température.

II.2.1.4 cas des collision chargée / chargée

Chen suppose que : [9].

- Le potentiel d'ionisation est coulombien.
- Les collisions coulombiennes sont négligeables au-delà de la sphère de Debye.
- Les angles de déviation sont faibles.

$$Q_{e-e} = \frac{e^4 \text{Ln}(\Lambda)}{4\pi\epsilon_0^2 (m_e V^2)^2} \tag{II-3}$$

avec
$$\Lambda = \frac{12\pi(\epsilon_0 k T_e / e^2)^{3/2}}{n_e^{1/2}}$$

k : Constante de Boltzmann. ϵ_0 : Permittivité du vide.

II.2.2 Sections efficaces de collisions inélastiques

Les collisions inélastiques jouent un rôle prépondérant dans les décharges qui nous occupent. Ce sont elles qui peuplent les niveaux excités des atomes, niveaux qui peuvent ensuite se désexciter en produisant les photons qui constitueront le rayonnement utile du plasma. Ce sont aussi elles qui provoquent une déplétion de la partie haute énergie de la fonction de distribution et qui poussent donc le système hors de l'état d'E.T.L.

II.2.2.1 Cas de collisions e⁻/Hg

Pour les collisions entre les atomes de mercure à l'état fondamental et les électrons, nous avons choisi les valeurs des sections efficaces données par Rockwood [54] parce qu'elles

assurent une bonne description cinétique des grandeurs macroscopiques du plasma, grandeurs qu'il est possible de mesurer. Cependant, pour la transition $Hg(6^1S_0) \rightarrow Hg(7^3S_1)$, nous avons dû adopter la section efficace de Kenty [37] car c'est la seule disponible dans la littérature. Pour la transition $Hg(6^1S_0) \rightarrow Hg(6^3P_1)$ nous avons aussi adopté la section efficace de Kenty [37] car elle donne les meilleurs résultats concernant le flux à 254 nm. Waymouth et Bitter [76] donnent une valeur moyenne pour la section efficace de la transition $Hg(6^1S_0) \rightarrow Hg(6^3D)$.

Les sections efficaces pour les transitions entre les états excités ont été calculées par Kenty[37]. En prenant comme test la concordance avec l'expérience, il a ajusté les valeurs théoriques de Javorski [36] pour les transitions $Hg(6^3P_1) \rightarrow Hg(6^3P_2)$ et $Hg(6^3P_0) \rightarrow Hg(7^3S_1)$. Il a ensuite calculé les autres sections efficaces en utilisant des formules empiriques [37] qui relient les valeurs cherchées avec celles connues.

$$6^3P_0 \rightarrow 6^1P_1 : Q_{mr}(E_e) = 0.75Q_{rs}(E_e + 0.35) \quad (a)$$

$$6^3P_0 \rightarrow 6^1P_2 : Q_{ms}(E_e) = Q_{rs}(E_e - 0.21) \quad (b)$$

$$6^3P_1 \rightarrow 7^3S_1 : Q_{ru}(E_e) = Q_{mu}(E_e + 0.21) \quad (c)$$

$$6^3P_2 \rightarrow 7^3S_1 : Q_{su}(E_e) = Q_{mu}(E_e + 0.77) \quad (d)$$

$$6^3P_0 \rightarrow 6^3D : Q_{mi}(E_e) = 1.1Q_{mu}(E_e - 1.15) \quad (e)$$

II - 4

$$6^3P_1 \rightarrow 6^3D : Q_{ri}(E_e) = 1.1Q_{mu}(E_e - 0.94) \quad (f)$$

$$6^3P_2 \rightarrow 6^3D : Q_{si}(E_e) = 1.1Q_{mu}(E_e - 0.38) \quad (g)$$

Nous constatons que ces valeurs ont été déduites des sections efficaces Q_{rs} et Q_{mu} en les décalant de la différence d'énergie des seuils et en multipliant, si nécessaire, les valeurs résultantes par un facteur correctif. Il faut noter que certaines de ces sections efficaces ont été mesurées ultérieurement par Korotkov [38] et qui a trouvé des valeurs en assez bon accord avec celles proposées par Kenty [37].

En ce qui concerne la transition $Hg(6^1P_{1,2}) \rightarrow Hg(6^1P)$, nous utiliserons les formules semi-empiriques données par Winkler [72] :

$$6^3P_0 \rightarrow 6^1P_1 : Q_{mp}(E_e) = Q_{mu}(E_e - 1.02) \quad (a)$$

$$6^3P_1 \rightarrow 6^1P_1 : Q_{rp}(E_e) = Q_{mu}(E_e - 1.23) \quad (b)$$

$$6^3P_2 \rightarrow 6^1P_1 : Q_{sp}(E_e) = Q_{mu}(E_e - 1.79) \quad (c)$$

II - 5

Pour la transition $Hg(6^1P_1) \rightarrow Hg(7^3S_1)$ Zissis [78] a calculé cette section efficace en utilisant la méthode de Drawin [20] pour une transition non-radiative avec changement de la multiplicité :

$$Q_{pu}(E_e) = \sigma_o \frac{\left[\frac{E_e}{E_{pu}} \right]^2 - 1}{\left[\frac{E_e}{E_{pu}} \right]^b} \quad \text{II-6}$$

Dans cette expression, les constantes $\sigma_o = 4\pi\alpha_o^2 Q^*$ et b peuvent être déterminées, à partir d'une section efficace correspondant à une transition qui obéit aux mêmes règles et en fixant Q^* à une valeur qui correspond à l'expérience ou à une valeur effective inspirée des autres transitions. Zissis [78] trouve pour. $\sigma_o = 10^{-20} m^2$ et $b = 5.75$.

Pour l'ionisation directe à partir du fondamental, nous avons utilisé les valeurs de la section efficace proposées par Rockwood [57].

Dans le cas des sections efficaces pour l'ionisation à partir des états excités nous avons appliqué la formule théorique de Vriens [67] qui permet une estimation directe :

$$Q_{ji}(E_e) = \frac{\pi \left[\frac{e^2}{4\pi\epsilon_o} \right]^2}{E_e + 3.25E_{ji}} \left\{ \frac{5}{3E_{ji}} - \frac{1}{E_e} - \frac{2E_{ji}}{3E_e^2} \right\} \quad j \in \{m, r, s, p, u, t\} \quad \text{II-7}$$

II.2.2.2 Cas de collisions e⁻/Ar

En présence de mercure qui peut s'ioniser facilement et du fait de la valeur élevée du premier seuil d'excitation de l'argon (11.5 eV), le degré d'excitation et d'ionisation de l'argon reste dans la plupart des cas négligeable (il n'y a pas beaucoup d'électrons ultra-rapides capables d'induire de telles transitions). L'influence de l'argon dans la décharge se limite pratiquement aux collisions élastiques.

Pendant la mise en régime de la lampe, phase pendant laquelle la pression partielle de mercure est très réduite pour les décharges basse pression. Comme pour les lampes haute pression, l'argon joue au contraire un rôle très important.

Par ailleurs, pour les conditions très particulières de certaines décharges basse pression, et pour les faibles températures du point froid ($T_{pf} < 5^\circ C$) l'expérience et des études ont montré que

l'excitation et l'ionisation de l'argon ne sont pas tout à fait négligeables [78]. Nous avons ainsi, inclus dans nos calculs les collisions inélastiques e^+/Ar , mais en prenant un schéma atomique très simple donné par la figure II.5.

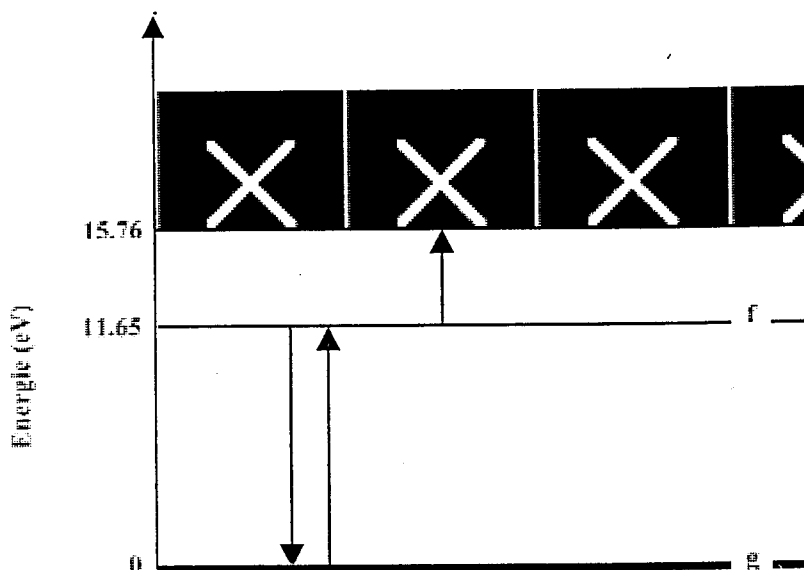


Figure II.5: Schéma atomique simplifié de l'argon utilisé dans ce travail.

Le schéma réduit à un seul niveau excité d'argon $Ar(f)$ à 11.65 eV. Ces niveaux fictifs regroupent les quatre niveaux $1s_2, 1s_4, 1s_3,$ et $1s_5$ de l'argon et la valeur 11.65 eV est la valeur moyenne des seuils des niveaux réels pondérés par leurs multiplicités.

La section efficace pour la transition $Ar(g) \rightarrow Ar(f)$ a été calculée en pondérant les sections efficaces pour les transitions fondamentales et les niveaux réels, données par Gleizes [25]. Le seul mécanisme probable d'ionisation pour l'argon est l'ionisation à partir du niveau fictif. Car l'ionisation directe nécessite au moins 15.76 eV, des électrons ayant ces énergies n'existent pratiquement pas même dans les cas extrêmes de certaines décharges. La section efficace pour cette transition a été calculée en utilisant la théorie de Gryzinski :

$$Q_{fi}(u) = \frac{\sigma_0}{E_{fi}^2} \frac{1}{x} \left[\frac{x}{x+1} \right]^{3/2} \left\{ 1 + \frac{1}{3x} (2x-1) \ln(2.7 + \sqrt{x-1}) \right\} \left[\frac{x-1}{x} \right]^{3/2} \quad \text{II-8}$$

Où $x = E_e/E_{fi}$ et où $E_{fi} = 4.02$ eV est l'énergie d'ionisation du niveau f ; σ_0 est une constante déterminée par Gleizes [25], sa valeur vaut $6.56 \times 10^{-18} \text{ m}^2$.

II.2.2.3 Cas de collisions atome / atome.

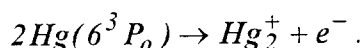
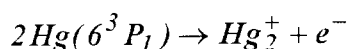
Les collisions inélastiques entre les particules lourdes sont moins probables dans le cas des décharges basse pression, où la température des particules lourdes ne dépasse pas les 150°C.

Cependant, les interactions entre atomes neutres rentrent sérieusement en jeu dans le cas de la haute pression. Et pendant l'allumage des lampes où il y a transfert d'excitation entre l'argon et le mercure.

Dans le cas des décharges mercure-gaz rare basse pression et au moins pour les pressions de mercure les plus élevées, des travaux effectués au laboratoire [75] ont montré que l'effet des collisions mercure / mercure et mercure/argon n'est plus négligeable

Nous avons trouvé dans la littérature des valeurs moyennes pour les sections efficaces de quelques collisions Hg/Hg et Hg/Ar , que nous avons regroupées dans le tableau II.1. Il faut noter que l'incertitude sur ces valeurs étant très grande, il est alors difficile de tirer des conclusions sur l'importance de ces interactions.

Parmi ces interactions, d'après certains auteurs ([64], [67], [61]) une paraît plus importante, il s'agit de l'ionisation associative $Hg(6^3P_0) + Hg(6^3P_1) \rightarrow Hg_2^+ + e^-$. En 1925, Rouse et Giddings [59] ont observé l'apparition d'un courant ionique quand ils irradiaient avec un rayonnement à 253.7 nm une cellule contenant de la vapeur de mercure. Ce courant fut attribué plus tard par Houtermans [30] à l'ion moléculaire issu de l'ionisation associative précédemment décrite. Tan et von Engel [64] ont montré expérimentalement que pour des pressions de vapeur de mercure comprises entre 10 et 400 Pa, la production de l'ion moléculaire augmentait comme le carré de l'intensité d'irradiation ultra violette, ceci semble prouver, comme Von Engel [23] l'avait déjà signalé, que la probabilité de l'ionisation associative est importante. Deux autres réactions semblent être capables de produire l'ion moléculaire :



Cependant la première réaction n'a jamais été observée [59] et la deuxième dépend fortement de la pression du gaz tampon.

La production de l'ion moléculaire semble donc pouvoir se réaliser dans les décharges basse pression. Ainsi, Mrozowski [49] et Winans [73] ont observé dans le spectre des tubes fluorescents des bandes moléculaires à 247.6 nm et 248.2 nm dont l'attribution reste incertaine [58].

La formation de la molécule Hg_2 par recombinaison $Hg_2^+ + e^- \rightarrow Hg_2$ est, quant à elle, surtout probable dans les décharges haute pression. Mrozowski [49] a observé ses bandes d'émission à 254 nm et Winans à 234.5 nm (bandes de Wood).

Au total, ces interactions sont capables de provoquer un appauvrissement de la partie haute énergie de la fonction de distribution en l'éloignant ainsi de la forme maxwellienne, elle

constitue donc également un mécanisme qui pousse le système hors de l'E.T.L et ceci est sans doute important pour les décharges haute pression.

Les collisions ion/atome peuvent se produire dans les décharges, entre les atomes et les ions du mercure, puisque l'atome et l'ion appartiennent à la même espèce chimique. Le transfert de charge $Hg^+ + Hg \rightarrow Hg + Hg^+$ est un processus résonnant et sa probabilité est importante. Mason [45] a montré que la section efficace de collision ion/atome est alors déterminée par la contribution du transfert de charge :

$$Q_{res} = Q_{ii^+}^{ech} \quad \text{II-9}$$

où $Q_{ii^+}^{ech}$ est la section efficace totale correspondant au processus de transfert de charge.

Celle-ci dépend de la vitesse relative $V_{ii^+}^2$ des particules et peut se mettre sous la forme :

$$Q_{ii^+}^{ech} = \frac{1}{2} [A_i - B_i \ln V_{ii^+}] \quad \text{II-10}$$

Les coefficients A_i et B_i sont caractéristiques de l'espèce chimique i . Rapp [55] donne pour plusieurs espèces la section efficace de transfert en fonction de la vitesse relative sous forme de courbes. Debbagh-Zriouil [22] ont déterminé à partir de ces courbes les valeurs $A_{Hg} = 28.73$ et $B_{Hg} = 1.31$. La valeur Q_{res} ne dépend pratiquement pas de l'énergie cinétique des particules. Ainsi à 5000 K on trouve la valeur $500 \times 10^{-20} m^2$ alors que l'on obtient $470 \times 10^{-20} m^2$ à 100°C. Cependant, selon Capitelli [11], ces valeurs semblent être trop élevées. Smirnov, propose une valeur de $150 \times 10^{-20} m^2$ à 1200 K et $100 \times 10^{-20} m^2$ à 1.2×10^5 K, ces valeurs semblent être plus réalistes. Dans la gamme des températures qui nous intéressent, cette section efficace reste pratiquement constante, le tableau II.1 donne la valeur retenue.

La réaction $Ar^{*m} + Hg \rightarrow Hg^+ + Ar + e^-$ représente l'effet Penning, ce phénomène joue un rôle très important pendant la phase de mise en régime de la décharge car le nombre d'électrons ultra-rapides est grand et l'excitation des atomes d'argon devient importante. La section efficace de ce processus donnée par Wren et Setser [74] et utilisée aussi par Sawada et al [63] vaut $58 \times 10^{-20} m^2$. Cette valeur entre bien dans le domaine de $6 \times 10^{-20} m^2$ à $74 \times 10^{-20} m^2$ délimité par Hotop et Neihaus [32].

II.2.3 Sections efficaces de collisions super-élastiques

Les sections efficaces des interactions de 2^{ème} espèce sont calculées à partir des sections efficaces des transitions directes en appliquant le principe de micro-réversibilité qu'exprime la formule de Klein-Roseland :

$$Q_{kj}(E_e) = \frac{g_j}{g_k} \frac{E_e + E_{jk}}{E_e} Q_{kj}(E_e + E_{jk}) \quad \text{II-11}$$

La recombinaison dissociative de l'ion moléculaire Hg_2^+ a été inclus dans nos calculs pour le cas de la basse pression. Zissis [78] a calculé la section efficace pour cette interaction et a trouvé une valeur moyenne égale à $18 \times 10^{-20} \text{ m}^2$.

Le tableau II.1 contient les valeurs maximales des sections efficaces pour toutes les interactions décrites dans les paragraphes précédents.

II.2.4. Taux de réaction

Physiquement, les taux de réaction représentent le nombre moyen de chocs inélastiques, par électron et par unité de temps, capables de conduire un atome d'un état interne j à un autre état k . Cette définition s'exprime sous la forme :

$$z_{jk} = \int_{\mathbf{v}} \mathbf{v} \phi_o(\mathbf{v}) Q_{jk}(\mathbf{v}) d^3 \mathbf{v} \quad \text{II-12}$$

où ϕ_o est la partie isotrope de la fonction de distribution des vitesses électroniques.

Le rôle des taux de réaction est prépondérant dans le bilan de population des espèces ainsi que dans le bilan d'énergie du nuage électronique. Les taux de réaction peuvent être obtenus à partir de l'expérience.

Réaction		Q ($\times 10^{-20}$ m ²)	Réf.	remarques	Réaction		Q ($\times 10^{-20}$ m ²)	Réf.	Remarque
1	$\text{Hg}(6^1\text{S}_0)+e^- \rightarrow \text{Hg}(6^3\text{P}_0)+e^-$	0.29	[57]	max	28	$\text{Hg}(6^3\text{P}_2)+e^- \rightarrow \text{Hg}^++2e^-$	5.23	[67]	max
2	$\text{Hg}(6^1\text{S}_0)+e^- \rightarrow \text{Hg}(6^3\text{P}_1)+e^-$	1.77	[37]	max	29	$\text{Hg}(6^1\text{P}_1)+e^- \rightarrow \text{Hg}(6^1\text{S}_0)+e^-$	3.18	[78]	max
3	$\text{Hg}(6^1\text{S}_0)+e^- \rightarrow \text{Hg}(6^3\text{P}_2)+e^-$	3.37	[57]	max	30	$\text{Hg}(6^1\text{P}_1)+e^- \rightarrow \text{Hg}(6^3\text{P}_0)+e^-$	1.62	[72]	max
4	$\text{Hg}(6^1\text{S}_0)+e^- \rightarrow \text{Hg}(6^1\text{P}_1)+e^-$	3.04	[57]	max	31	$\text{Hg}(6^1\text{P}_1)+e^- \rightarrow \text{Hg}(6^3\text{P}_2)+e^-$	4.88	[72]	max
5	$\text{Hg}(6^1\text{S}_0)+e^- \rightarrow \text{Hg}(7^3\text{S}_1)+e^-$	0.43	[37]	max	32	$\text{Hg}(6^1\text{P}_1)+e^- \rightarrow \text{Hg}(6^3\text{P}_1)+e^-$	7.53	[72]	max
6	$\text{Hg}(6^1\text{S}_0)+e^- \rightarrow \text{Hg}(6^3\text{D})+e^-$	0.33	[69]	effective	33	$\text{Hg}(6^1\text{P}_1)+e^- \rightarrow \text{Hg}(7^3\text{S}_1)+e^-$	0.10	[78]	max
7	$\text{Hg}(6^1\text{S}_0)+e^- \rightarrow \text{Hg}^++2e^-$	6.99	[57]	max	34	$\text{Hg}(6^1\text{P}_1)+e^- \rightarrow \text{Hg}^++2e^-$	9.33	[67]	max
8	$\text{Hg}(6^3\text{P}_0)+e^- \rightarrow \text{Hg}(6^1\text{S}_0)+e^-$	1.66	[72]	max,	35	$\text{Hg}(7^3\text{S}_1)+e^- \rightarrow \text{Hg}(6^1\text{S}_0)+e^-$	2.34	[78]	max
9	$\text{Hg}(6^3\text{P}_0)+e^- \rightarrow \text{Hg}(6^3\text{P}_1)+e^-$	14.48	[37]	max	36	$\text{Hg}(7^3\text{S}_1)+e^- \rightarrow \text{Hg}(6^3\text{P}_0)+e^-$	1.78	[78]	max
10	$\text{Hg}(6^3\text{P}_0)+e^- \rightarrow \text{Hg}(6^3\text{P}_2)+e^-$	19.25	[37]	max	37	$\text{Hg}(7^3\text{S}_1)+e^- \rightarrow \text{Hg}(6^3\text{P}_1)+e^-$	4.93	[78]	max
11	$\text{Hg}(6^3\text{P}_0)+e^- \rightarrow \text{Hg}(6^1\text{P}_1)+e^-$	2.91	[72]	max	38	$\text{Hg}(7^3\text{S}_1)+e^- \rightarrow \text{Hg}(6^3\text{P}_2)+e^-$	7.50	[78]	max
12	$\text{Hg}(6^3\text{P}_0)+e^- \rightarrow \text{Hg}(7^3\text{S}_1)+e^-$	3.93	[37]	max	39	$\text{Hg}(7^3\text{S}_1)+e^- \rightarrow \text{Hg}(6^1\text{P}_1)+e^-$	0.84	[78]	max
13	$\text{Hg}(6^3\text{P}_0)+e^- \rightarrow \text{Hg}(6^3\text{D})+e^-$	2.30	[37]	max	40	$\text{Hg}(7^3\text{S}_1)+e^- \rightarrow \text{Hg}^++2e^-$	166.88	[67]	max
14	$\text{Hg}(6^3\text{P}_0)+e^- \rightarrow \text{Hg}^++2e^-$	3.94	[67]	max	41	$\text{Hg}^++\text{Hg} \rightarrow \text{Hg}+\text{Hg}^+$	150	[11]	Effective
15	$\text{Hg}(6^3\text{P}_1)+e^- \rightarrow \text{Hg}(6^1\text{S}_0)+e^-$	8.52	[72]	max	42	$\text{Hg}(6^3\text{P}_0)+\text{Hg}(6^3\text{P}_1) \rightarrow \text{Hg}_2^++e^-$	4.6	[65]	Effective
16	$\text{Hg}(6^3\text{P}_1)+e^- \rightarrow \text{Hg}(6^3\text{P}_0)+e^-$	8.59	[72]	max	43	$\text{Hg}(6^3\text{P}_2)+\text{Hg}(6^3\text{P}_2) \rightarrow \text{Hg}^++\text{Hg}(6^1\text{S}_0)+e^-$	1.0	[67]	Effective
17	$\text{Hg}(6^3\text{P}_1)+e^- \rightarrow \text{Hg}(6^3\text{P}_2)+e^-$	19.01	[37]	max	44	$\text{Hg}(6^3\text{P}_0)+\text{Hg}(6^3\text{P}_2) \rightarrow \text{Hg}^++\text{Hg}(6^1\text{S}_0)+e^-$	0.1	[14]	Effective
18	$\text{Hg}(6^3\text{P}_1)+e^- \rightarrow \text{Hg}(6^1\text{P}_1)+e^-$	3.10	[72]	max	45	$\text{Hg}(6^3\text{P}_1)+\text{Hg}(6^1\text{S}_0) \rightarrow \text{Hg}(6^3\text{P}_0)+\text{Hg}(6^1\text{S}_0)$	17	[28]	Effective
19	$\text{Hg}(6^3\text{P}_1)+e^- \rightarrow \text{Hg}(7^3\text{S}_1)+e^-$	2.74	[37]	max	46	$\text{Hg}(6^3\text{P}_2)+\text{Hg}(6^1\text{S}_0) \rightarrow \text{Hg}(6^3\text{P}_1)+\text{Hg}(6^1\text{S}_0)$	0.01	[28]	Effective
20	$\text{Hg}(6^3\text{P}_1)+e^- \rightarrow \text{Hg}(6^3\text{D})+e^-$	2.60	[37]	max	47	$\text{Hg}_2^++e^- \rightarrow \text{Hg}(6^1\text{S}_0)+\text{Hg}(7^3\text{S}_1)$	18	[78]	eff., sphères rig
21	$\text{Hg}(6^3\text{P}_1)+e^- \rightarrow \text{Hg}^++2e^-$	4.25	[67]	max	48	$\text{Hg}(6^3\text{P}_1)+\text{Ar} \rightarrow \text{Hg}(6^1\text{S}_0)+\text{Ar}$	0.22	[51]	Effective
22	$\text{Hg}(6^3\text{P}_2)+e^- \rightarrow \text{Hg}(6^1\text{S}_0)+e^-$	7.86	[72]	max	49	$\text{Hg}(6^3\text{P}_2)+\text{Ar} \rightarrow \text{Hg}(6^3\text{P}_1)+\text{Ar}$	0.30	[40]	Effective
23	$\text{Hg}(6^3\text{P}_2)+e^- \rightarrow \text{Hg}(6^3\text{P}_0)+e^-$	17.67	[72]	max	50	$\text{Hg}(6^1\text{S}_0)+\text{Ar}(f) \rightarrow \text{Hg}^++\text{Ar}(g)+e^-$	58	[64]	Effective
24	$\text{Hg}(6^3\text{P}_2)+e^- \rightarrow \text{Hg}(6^3\text{P}_1)+e^-$	41.48	[72]	max	51	$\text{Ar}(g)+e^- \rightarrow \text{Ar}(f)+e^-$	2.2	[26]	Max
25	$\text{Hg}(6^3\text{P}_2)+e^- \rightarrow \text{Hg}(6^1\text{P}_1)+e^-$	3.31	[72]	max	52	$\text{Ar}(f)+e^- \rightarrow \text{Ar}(g)+e^-$	1.6	[78]	max,
26	$\text{Hg}(6^3\text{P}_2)+e^- \rightarrow \text{Hg}(7^3\text{S}_1)+e^-$	2.88	[37]	max	53	$\text{Ar}(f)+e^- \rightarrow \text{Ar}^++2e^-$	8.0	[78]	max,
27	$\text{Hg}(6^3\text{P}_2)+e^- \rightarrow \text{Hg}(6^3\text{D})+e^-$	2.30	[37]	max					

Tableau II-1 Valeurs maximales des sections efficaces

II.3 Phénomènes de transport et coefficients de transport

L'approche théorique du problème du transport s'effectue à l'aide de l'équation de Boltzmann qui donne une description microscopique de la variation temporelle de l'état du système. Il est possible de transformer cette équation de façon à obtenir les équations habituelles de la mécanique des fluides qui nous donneront une description macroscopique du plasma. Les quantités macroscopiques recherchées sont reliées aux moments de la fonction de distribution de la vitesse des particules et par conséquent les équations de transport peuvent être déduites directement des moments de l'équation de Boltzmann.

Afin d'obtenir une équation de transfert généralisée, Bittencourt [3] a défini une quantité physique $\chi(v)$ dont la valeur moyenne est donnée par la relation :

$$\langle \chi \rangle = \frac{1}{3} \int_{\mathbf{v}} \chi(\mathbf{v}) f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) d^3 \mathbf{v} \quad \text{II-13}$$

Si l'on considère maintenant l'équation de Boltzmann pour les particules du type α (électrons, atomes, ions...), et si on l'intègre dans l'espace des vitesses après l'avoir multipliée par la quantité $\chi(v)$, on aboutit, en faisant appel à la définition de la valeur moyenne (II-13), à une équation du type :

$$\frac{\partial}{\partial t} [n_{\alpha} \langle \chi \rangle] + \frac{\partial}{\partial r_{\alpha}} [n_{\alpha} \langle \chi v \rangle] - n_{\alpha} \langle a_{\alpha} \frac{\partial}{\partial v_{\alpha}} \chi \rangle = J [n_{\alpha} \langle \chi \rangle] \quad \text{II-14}$$

C'est l'équation cherchée, où a_{α} est l'accélération due aux forces extérieures et J rend compte des collisions inter-particulaires. En prenant pour χ la masse m , la quantité de mouvement mv et l'énergie cinétique $1/2mv^2$, on obtient respectivement les équations de conservation pour la masse, de transfert de quantité de mouvement (Navier-Stockes) et d'énergie. Pour les particules du type α . En écrivant les équations similaires pour tous les types de particules qui existent dans le plasma, on obtient une description macroscopique des phénomènes de transport qui apparaissent dans le milieu.

Dans l'approche de Chapman-Enskog, le gaz est considéré comme faiblement perturbé, les fonctions de distribution s'écartent peu de distribution d'équilibre. Elles expriment par :

$$f_{\alpha} = F_{\alpha}^M (1 + \phi_{\alpha}) \quad \text{II-15}$$

où F_{α}^M est la fonction de Maxwell et ϕ_{α} la perturbation.

En introduisant cette formule dans les équations de continuité, de transfert de la quantité mouvement et d'énergie précédemment établies. Nous pouvons en déduire une équation pour la fonction de perturbation en faisant un développement en série de polynômes de Sonine des divers coefficients qui interviennent :

$$\phi_{\alpha} = \sqrt{E_e} \frac{2k_B T_{\alpha}}{m_{\alpha}} \sum_r q_r S_r^{3/2} (E_e) \quad \text{II-16}$$

Cette méthode est souvent utilisée dans la littérature et une discussion détaillée est donnée par Debbagh-Zriouil [22]. Cependant cette méthode, conçue pour des systèmes proches de l'état de l'E.T.L., ne peut pas s'appliquer aux décharges mercure-gaz rare basse pression ou les écarts à l'équilibre sont considérables. Dans les décharges basse pression, existent des particules lourdes (atome et ions) et des électrons. Du point de vue des phénomènes de transport, ces deux groupes peuvent être caractérisés localement par des températures cinétiques différentes (systèmes hors de l'état d'E.T.L.) ou par une température unique (E.T.L.).

II.3.1 Coefficient de transport du nuage électronique :

II.3.1.1 Mobilité électronique :

La mobilité électronique est définie comme le rapport de la vitesse de dérive des électrons (w_E) au champ électrique appliqué:

$$\mu_e = \frac{w_E}{E} \quad \text{II-17}$$

En faisant appel à la définition cinétique de la vitesse de dérive [3] nous obtenons la formule générale suivante :

$$\mu_e = -\frac{1}{3} \sqrt{\frac{2e}{m_e}} \frac{k_B T_g}{p_g} \int_0^{\infty} \frac{\sqrt{u}}{Q^m(u)} \frac{\partial \phi_0}{\partial u} du \quad \text{II-18}$$

Plusieurs travaux ont été consacrés au calcul théorique de la mobilité électronique. En 1905, L'angevin [44], en introduisant une fréquence ν_c de collision fictive constante pour le transfert de la quantité de mouvement, ne considère que les collisions élastiques entre les électrons et les particules lourdes et obtient sous cette approximation la relation :

$$\mu_e \approx \frac{3\sqrt{3}\pi}{8\sqrt{2}} \frac{e\lambda_e^m}{m_e V_{rms}} \quad \text{II-19}$$

V_{rms} est la racine de la valeur quadratique moyenne de la vitesse des électrons.

Langevin a supposé une distribution des vitesses maxwellienne qui correspond $V_{rms} = 1.086 \langle V \rangle$ et la formule II-22 se transforme pour donner [44] :

$$\mu_e = \frac{3}{4} \frac{e \lambda_e^m}{m_e \langle V \rangle} = \frac{3e}{4m_e V_c} \quad \text{II-20}$$

Shkarofsky [62], en se basant sur l'équation de Boltzmann et en introduisant des termes de type Fokker-Planck pour les collisions entre des particules chargées, a calculé la mobilité électronique. Dans le cas spécial d'une FDEE maxwellienne, il propose la relation suivante :

$$\mu_{e0} = \frac{4}{3} \sqrt{\frac{I}{\pi}} \frac{e^2}{N_0 P_g [k_B T_e]^{5/2}} \int_0^\infty \frac{u^{3/2}}{Q^m(u)} \exp\left\{-\frac{u}{k_B T_e}\right\} du \quad \text{II-21}$$

p_g est en P_a , N_0 la densité numérique du gaz par P_a et Q^m la section efficace de transfert de la quantité de mouvement totale.

Il existe aussi une expression classique qui découle directement de la première approximation du formalisme de Chapman-Enskog :

$$\mu_e = \frac{2.40 \times 10^{12}}{e T_e^{1/2}} \frac{I}{\sum_k n_k \langle Q_k^m \rangle} \quad \text{II-22}$$

Waymouth [68] dans son modèle de décharge mercure – argon basse pression a supposé que la mobilité électronique dans le mélange est uniquement celle dans l'argon et a obtenu une courbe qui a été approximée par la relation analytique suivante :

$$\mu_{e0}^{Ar} = a \left[\frac{T_e}{1000} \right]^b \quad a = 1479 \text{ et } b = -0,493. \quad \text{II-23}$$

Chen [8] a calculé la mobilité électronique dans l'argon et dans des mélanges mercure – argon basse pression. En utilisant la formule de Shkarofsky (II.21) et l'expression analytique de la section efficace de quantité de mouvement des collisions e/Ar donnée par Phelps (II.2) il a abouti à une relation simple pour la mobilité électronique dans l'argon pur :

$$\mu_{e0}^{Ar} = 1.148 \times 10^9 \frac{I}{T_e^{1.55} p_0^{Ar}} \quad \text{II-24}$$

Chen a également calculé la mobilité électronique dans le mercure pur en utilisant la procédure de Verbeek et Drop [65] qui est basée sur l'utilisation de la section efficace de Mc Cutchen [46], et a abouti à une formule analytique :

$$\mu_{e0}^{Hg} = \frac{12.304}{p_0^{Hg}} \left[\frac{k_B T_e}{e} \right]^2 \quad \text{II-25}$$

La figure (II.6) compare les résultats obtenus avec la formule de Shkarofsky aux résultats expérimentaux de Verweij [64] et de Aisenberg [2], aux calculs de Chen, de Verweij et Dimitriadis [17] et en fin aux formules (II.20 et II.22).

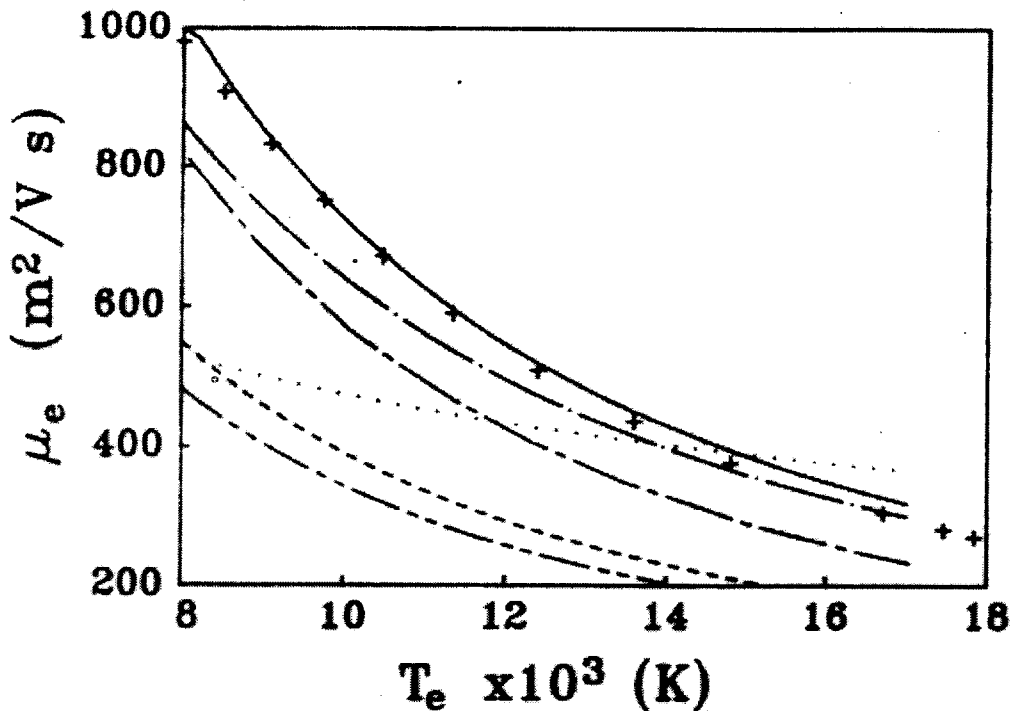


Figure. II.7 : Mobilité électronique dans 133.3 Pa (0°C) d'argon pur, (+) mesures de Verweij, (-) Zissis, (...) Langevin, (- - -) éq. II.25, (___) Chen, (...) Waymouth, (- - -) Polman.

La mobilité électronique dans des mélanges mercure – argon basse pression où le mercure est l'espèce minoritaire, peut donc être calculée en utilisant des mobilités dans l'argon et dans le mercure et en appliquant la loi de Blanc. Cependant Chen a remarqué que cette méthode surestime la mobilité électronique d'un facteur qui atteint 1.5, ainsi il a développé une méthode qui donne comme résultat final l'expression :

$$\mu_{eo} = \mu_{eo}^{Ar}(T_e)[1 - A] \quad \text{II-26}$$

où A et un termes correctif qui a la forme suivante :

$$A = 1.7612 \times 10^9 \frac{p_0^{Hg}}{p_0^{Ar}} \int_0^\infty \frac{x^{0.9} \exp\{-x^2\}}{x^3 T_e^{1.75} + 90828 \times 10^8 \left[\frac{p_0^{Hg}}{p_0^{Ar}} \right]} dx \quad \text{II-27}$$

où $x = \sqrt{E_e^2 / 2k_B T_e}$

La figure II.7 donne le terme A en fonction de la température du point froid pour une décharge qui contient 400 Pa d'argon (0°C).

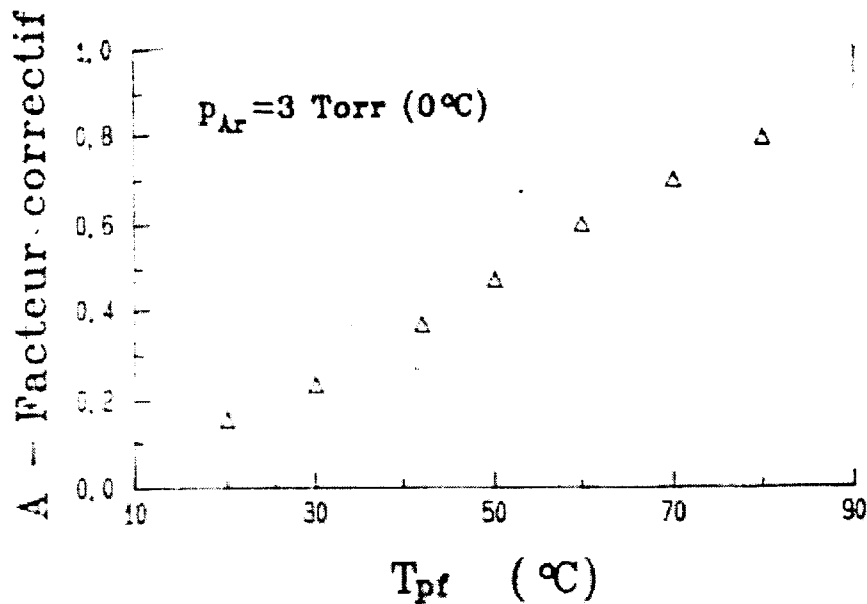


Figure. II.7 : Facteur correctif de Chen (éq.II.27) en fonction de la température du point froid de la décharge.

La figure (II.8) donne des valeurs expérimentales de Verweij [66] en comparaison avec les valeurs obtenues par Chen en utilisant la loi de Planc et la formule (II.26) avec le terme correctif (II.27). Sur la même figure, nous avons aussi tracé les valeurs théoriques calculées par Verweij. Nous constatons sur la figure II.8 que pour des fortes températures du point froid, la mobilité est dominée par la vapeur de mercure du fait de la valeur importante de la section efficace de transfert de quantité de mouvement pour les collisions e^-/Hg . Ceci limite la validité du modèle classique de Waymouth qui ne tient pas compte de l'influence du mercure.

Dans les modèles théoriques existant dans la littérature, les calculs sont conduits à partir d'une distribution maxwellienne alors que, dans les décharges mercure – argon basse pression, les écarts à l'E.T.L. sont très importants. L'utilisation d'une FDEE maxwellienne n'est pas justifiée dans ces conditions et ceci explique en partie les déviations entre ces modèles et l'expérience. Dinitriadis et Damelincourt [17] ont aussi montré l'influence de la FDEE sur la mobilité électronique. On a choisi d'utiliser dans cette étude, la définition cinétique de la mobilité (éq.II.18).

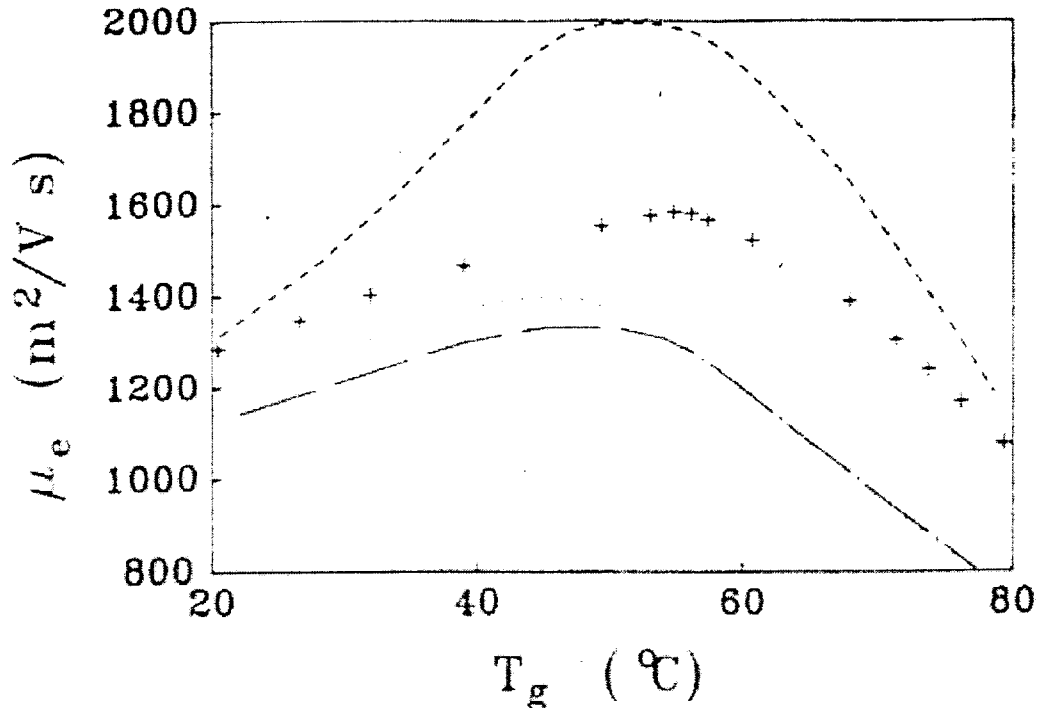


Figure. II.8 : Mobilité électronique dans une décharge Hg-Ar (400Pa d'argon à 0°C). (+) mesures de Verweij, (...) Chen (---) Loi de Blanc, (.....) calculs de Verweij.

II.3.1.2 Coefficient de diffusion libre des électrons :

Le coefficient de diffusion libre des électrons dans le gaz tampon peut être déterminé à partir de la valeur de la mobilité électronique en appliquant la relation d'Einstein :

$$D_e = \mu_e \frac{k_B T_e}{e} \quad \text{II-28}$$

II.3.1.3 conductivité électrique du nuage électronique :

la conductivité électrique du nuage électronique est directement proportionnelle à la mobilité électronique :

$$\sigma_e = e n_e \mu_e \quad \text{II-29}$$

Les électrons assurent à la fois, du fait de leur plus faible inertie, l'essentiel de la conductivité électrique de la décharge et la plupart du transfert de l'énergie apporté à la décharge par le champ électrique. Nous pouvons calculer facilement la conductance de la colonne positive à partir de sa conductivité électrique. Ainsi, pour le cas d'une décharge cylindrique de rayon R, nous obtenons :

$$G = 2\pi \int_0^R \sigma_e(r) r dr \quad \text{II-30}$$

La conductance est une grandeur accessible expérimentalement et avec une bonne précision, elle nous offre un moyen de tester les diverses approximations de la mobilité électronique ou

bien d'en tirer des conclusions concernant les sections efficaces pour le transfert de quantité de mouvement.

II.3.1.4 Conductivité thermique du nuage électronique

La conductivité thermique du nuage électronique est reliée à sa conductivité électrique par la loi de Wiedemann-Franz

$$\mathcal{K}_e = \frac{\pi^2 k_B T_e}{3e} \sigma_e \quad \text{II-31}$$

Bien que cette loi ait été établie pour la première fois, dans le cas des métaux, pour le calcul de la conductivité thermique, elle constitue une loi universelle dans les plasmas et sa validité est facilement démontrable en utilisant les définitions cinétiques de σ et \mathcal{K} [16].

Dans le cas de la basse pression, la connaissance de la conductivité thermique du nuage électronique est nécessaire si l'on veut évaluer la variation radiale de la température électronique, au moins si l'on admet que cette variation est due uniquement au transfert de chaleur par le nuage électronique.

II.3.1.5 Viscosité du nuage électronique

La viscosité du nuage électronique est inversement proportionnelle à la conductivité électrique [43].

$$\eta_e = \sqrt{\frac{m_e k_B T_e}{e}} \frac{1}{\sigma_e} \quad \text{II-32}$$

II.3.2 Coefficients de transport des particules lourdes

Pour le calcul des coefficients de transport du gaz atomique, nous devons connaître la fonction de distribution des vitesses des particules lourdes. Nous considérerons que c'est une distribution maxwellienne à la température du gaz (T_g), car d'une part les collisions inélastiques entre les particules lourdes (qui appauvrissent la partie haute énergie de la FDEE) sont peu probables et, d'autre part, le champ électrique n'a aucune action sur les particules neutres. Par ailleurs, les ions qui sont soumis à l'action du champ électrique ont trop d'inertie pour que le champ puisse les accélérer beaucoup. Nous considérerons donc, que la température des ions est sensiblement égale à celle du gaz neutre. La température des particules lourdes peut être très différente de la température électronique si le système est loin de l'E.T.L. Ainsi pour les décharges mercure-argon basse pression $T_e \gg T_g$ alors que pour les décharges mercure-argon haute pression $T_e \approx T_g$. Le passage de la basse pression à la haute pression est donc accompagné par un phénomène de thermalisation progressive où le rôle des particules neutres est très important.

Pour le calcul des coefficients de transport relatifs au gaz et sous la condition d'une fonction de distribution maxwellienne, nous devons connaître les potentiels d'interaction entre les particules lourdes. En négligeant dans un premier temps l'influence des interactions chargée-chargée, qui sont d'ailleurs moins probables du fait de la faible fraction de particules chargées dans la décharge, nous pouvons considérer comme potentiel inter-atomique le potentiel de Lennard-Jones [78]:

$$\varphi(\rho) = 4\varepsilon \left\{ \left[\frac{\sigma}{\rho} \right]^{12} - \left[\frac{\sigma}{\rho} \right]^6 \right\} \quad \text{II-33}$$

ρ est la distance inter-atomique, ε et σ sont des constantes qui dépendent du type d'atomes qui interagissent. Le tableau (II-2) donne les valeurs de ces constantes pour le cas du mercure pur et de l'argon pur.

Tableau II-2 Valeurs des constantes

	Ar	Hg
$\varepsilon / k_B (K)$	119.8	851.0
$\sigma (\text{Å})$	3.405	2.898

Les constantes ε_{12} et σ_{12} pour des mélanges binaires peuvent être calculées en utilisant les relations :

$$\varepsilon_{12} = \sqrt{\varepsilon_1 \varepsilon_2} \quad \text{et} \quad \sigma_{12} = \frac{1}{2}(\sigma_1 + \sigma_2) \quad \text{II-34}$$

Dans notre étude, apparaît la température réduite T^* qui est définie comme :

$$T^* = \frac{T_g}{\varepsilon / k_B} \quad \text{II-35}$$

Les valeurs des intégrales de collisions $\Omega^{*(i,j)}$ qui interviennent dans les calculs sont données par Hirschfelder [30] et la figure II.9 indique les valeurs correspondantes pour quelque couples (i,j).

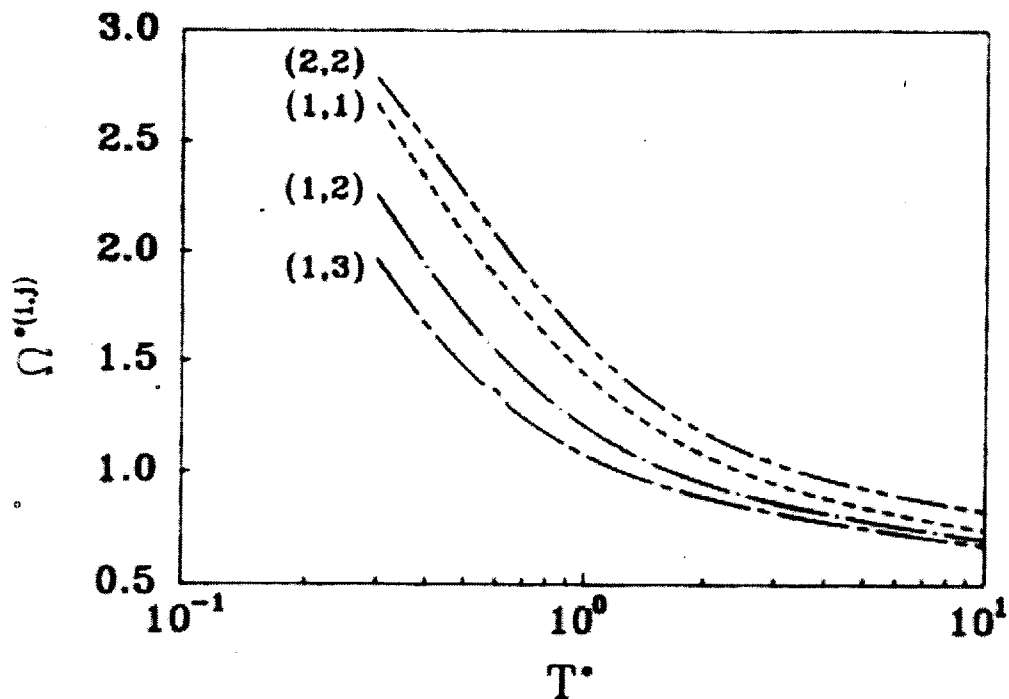


Figure II.9 : Intégrales de collisions pour quatre valeurs (i,j) .

II.3.2.1 Mobilité ionique

Dans les décharges qui nous intéressent (basse pression), il n'existe pratiquement que des ions de mercure. La fraction d'argon ionisé est souvent faible du fait de son fort potentiel d'ionisation (15.76 eV). L'ion moléculaire du mercure qui existe, dans certains cas aux basses pressions, se dissocie ou se recombine rapidement. Sa présence ne perturbe donc pas beaucoup le milieu du moins pour ce qui concerne le transport.

Les valeurs de la mobilité de l'ion Hg^+ dans la vapeur de mercure et dans l'argon sont données dans la littérature, le tableau (II.3) regroupe les valeurs obtenues pour 1 Torr et $0^{\circ}C$.

Tableau II-3 Valeurs de la mobilité obtenues pour 1 Torr et $0^{\circ}C$.

Gaz	μ_{i0} (Torr $m^2V^{-1}s^{-1}$)	Référence
Hg	2.19×10^{-2}	[30]
Ar	3.14×10^{-1}	[70]

Dans les mélanges mercure-argon utilisés pour les décharges basse pression, les ions du mercure diffusent essentiellement dans l'argon. Cependant, un transfert d'ionisation est possible selon la réaction $Hg^+ + Hg \rightarrow Hg + Hg^+$, la mobilité ionique peut alors être calculée, compte tenu de cette correction, en appliquant la loi de Blanc :

$$\frac{1}{\mu_{12}} = \frac{P_{Ar}}{\mu_{i0}^{Ar}} + \frac{P_{Hg}}{\mu_{i0}^{Hg}}$$

II.3.2.2 Coefficient de diffusion de l'état fondamental du mercure

Dans l'approximation binaire, le coefficient de diffusion a un sens uniquement dans le cas de la décharge mercure-argon où Hg est l'espèce minoritaire et par conséquent est susceptible de diffuser dans le gaz tampon. Ce coefficient peut être calculé en utilisant la formule suivante due à Hirschfelder [30] :

$$D_0 = 1.499 \times 10^{-16} \sqrt{\frac{T_g^3}{2m_{12}}} \frac{1}{p_g \sigma_{12}^2 \Omega_{12}^{*(2,2)}(T_{12}^*)} \quad (\text{m}^2 \text{s}^{-1}) \quad \text{II-37}$$

où p_g est en Pa.

La figure (II.10) donne le coefficient D_0 en fonction de la température du gaz pour plusieurs pressions du gaz tampon.

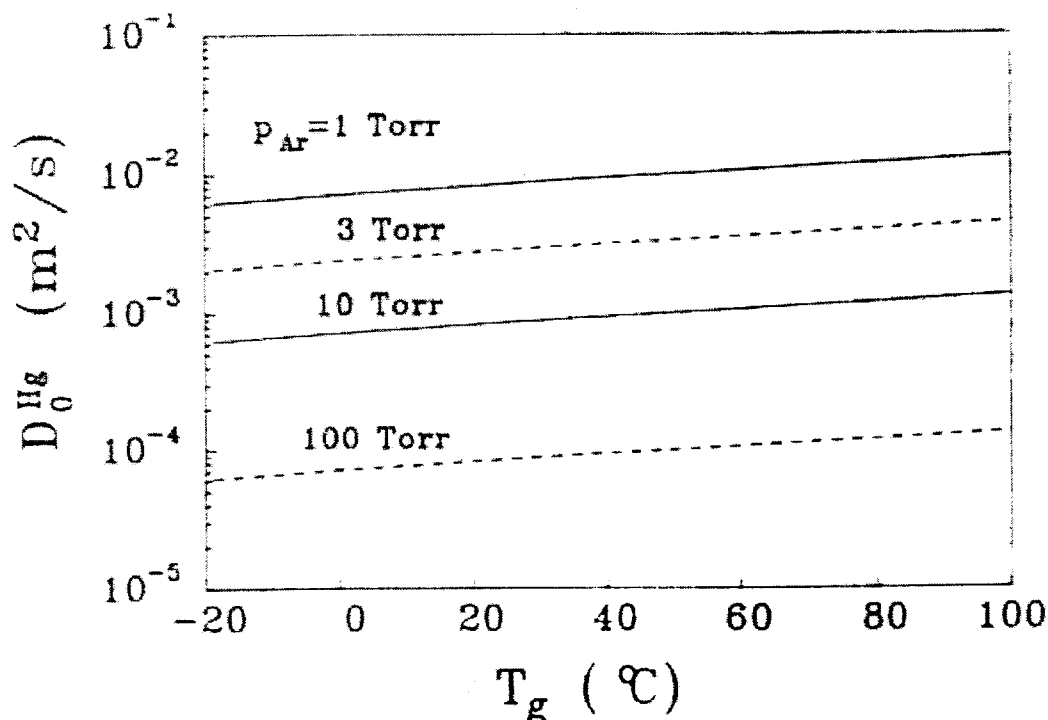


Figure II.10 : Coefficient de diffusion ordinaire du $Hg(6^1S_0)$ en fonction de la température et de la pression d'argon.

II.3.2.3 Coefficients de diffusion des états excités 6^3P_0 et 6^3P_2 du mercure

Etant donné que les niveaux 6^3P_0 et 6^3P_2 du mercure ne peuvent pas se désexciter radiativement ils ont la possibilité de diffuser vers les parois de la décharge (où ils se désexcitent). Les temps caractéristiques de désexcitation radiative sont de 1.45 s pour le niveau 6^3P_0 et de 6.5 s pour le niveau 6^3P_2 [56]. Ces valeurs sont nettement supérieures aux temps caractéristiques de diffusion. Les coefficients de la diffusion ordinaire dans l'argon pour ces deux niveaux métastables représentés sur la figure II.11 ont été mesurés par Kryukov [39] dans le cas d'une décharge mercure-argon basse pression.

Zissis [78] a approximé ces valeurs par des polynômes du 3^{ème} degré :

$$D_{om}(T_g) = \sum_{i=0}^3 a_i T_g^i \tag{II-38}$$

le tableau II.4 donne les valeurs des coefficients a_i à une pression de 0.1 MPa.

Tableau II-4 Valeurs des coefficients a_i d'après [78]

Niveau	a_0	a_1	a_2	a_3
6^3P_0	-2.44×10^{-5}	1.75×10^{-7}	-1.74×10^{-10}	7.72×10^{-12}
6^3P_2	-4.14×10^{-5}	2.66×10^{-7}	-3.76×10^{-10}	2.10×10^{-13}

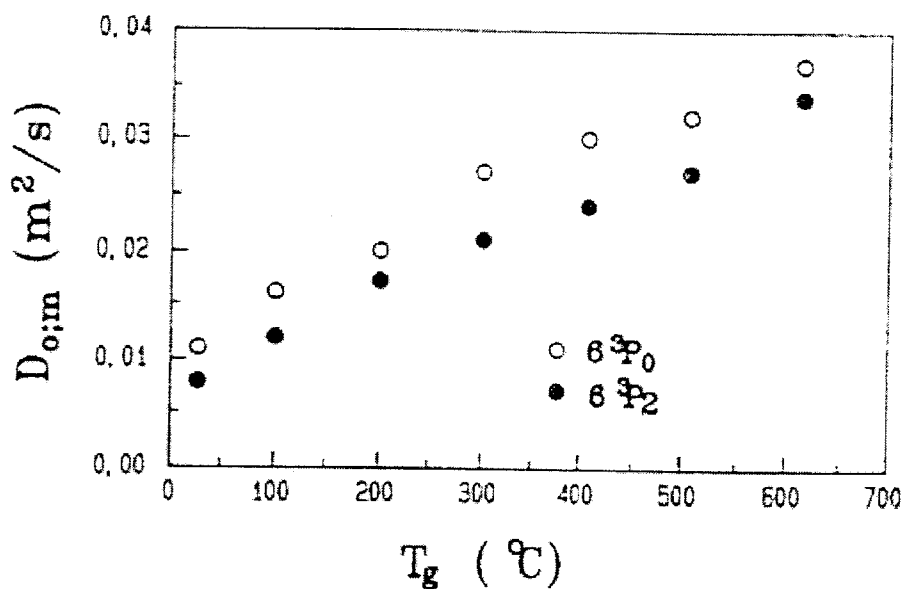


Figure II.11 : Coefficients de diffusion ordinaire des niveaux métastables du mercure dans l'argon à 133.3 (à 0°C) d'après [56].

II.3.2.4 Coefficient de diffusion libre des ions.

Le coefficient de diffusion libre des ions du mercure dans la décharge peut être calculé à partir de la mobilité ionique dans la décharge en appliquant la relation d'Einstein :

$$D_i = \mu_i \frac{k_B T_g}{e} \tag{II-39}$$

II.3.2.5 Conductivité électrique due aux ions

Etant donné que les ions sont des particules chargées positivement, ils seront accélérés par le champ électrique en sens inverse des électrons. Ainsi, dans la décharge apparaît également un courant ionique qui s'ajoute au courant électronique. La conductivité électrique due aux ions se calcule par:

$$\sigma_i = en_i \mu_i \tag{II-40}$$

Document téléchargé depuis www.pnst.cerist.dz CERIST

La conductivité ionique ne constitue dans la plupart des cas qu'une très faible correction sur la conductivité électrique de la décharge car $\mu_i \ll \mu_e$.

II.3.2.6 Conductivité thermique du gaz

Le calcul de la conductivité thermique du gaz nécessite le calcul séparé de trois composantes différentes :

- La conductivité thermique de translation : Elle correspond au flux de chaleur associé à un gradient de température, les vitesses de diffusion étant nulles. Dans un gaz pur, les collisions élastiques assurent le transfert de l'énergie cinétique. Dans un mélange non réactif, la chaleur est aussi transportée par la diffusion thermique, mais ce mode de transport ne représente en général qu'un faible pourcentage de celui assuré par les collisions [22].
- La conductivité thermique de réaction : Elle joue un très grand rôle dans le transfert d'énergie pour les décharges amorcées dans des gaz qui réagissent les uns avec les autres. Cette réaction peut être, par exemple, la dissociation d'une molécule. Pour briser une molécule en deux constituants, il faut de l'énergie. Ces deux éléments de la réaction diffusent et peuvent se recombiner dans une autre région dans la décharge. La dissociation est une réaction endothermique alors que la recombinaison est exothermique. Il y a bien eu transfert d'énergie.
- La conductivité thermique interne : Elle comptabilise les divers degrés internes de liberté des particules et traduit les échanges d'énergie entre ces degrés de liberté.

Dans les décharges qui nous intéressent, les mélanges sont chimiquement non réactifs et la fraction d'espèces moléculaires est négligeable et donc la composante interne l'est également. Ainsi, la conductivité thermique du mélange se réduit à deux composantes : celle due à la translation et celle due à la réaction d'ionisation du mercure $Hg + e^- \rightarrow Hg^+ + 2e^-$.

Pour un gaz pur la valeur du coefficient de conductivité thermique peut être calculée en utilisant la formule [30] :

$$K_{12} = 8.328 \times 10^{-2} \sqrt{\frac{T_g}{m_g}} \frac{1}{\sigma_g^2 \Omega^{*(2,2)}(T^*)} \quad \text{II-41}$$

Pour le mélange binaire mercure-argon, le calcul est un peu plus complexe. Nous avons besoin de connaître les coefficients de conductivité thermique de chaque gaz K_{Ar} et K_{Hg} pour ensuite, calculer le coefficient de conductivité thermique binaire :

$$K_{12} = 8.328 \times 10^{-2} \sqrt{\frac{T_g}{m_{12}}} \frac{1}{\sigma_{12}^2 \Omega_{12}^{*(2,2)}(T_{12}^*)} \quad \text{II-42}$$

La conductivité thermique du nuage électronique constitue une faible correction pour la conductivité thermique globale des décharges basse pression. En effet, cette conductivité thermique globale est due principalement à celle du gaz neutre.

La contribution due aux électrons a été calculée par Vukanovic [66] :

$$\kappa_e \approx \frac{1}{3} n_e \lambda_e^m \langle v_e \rangle k_B 2(1+x) \quad \text{II-43}$$

où λ_e^m est le libre parcours moyen des électrons dans le plasma et x son degré d'ionisation.

Dans le cas de la basse pression, le terme de conductivité thermique de réaction est de 2 à 3 ordres de grandeur inférieur à la conductivité thermique de translation et par conséquent négligeable.

II-3.2.7 Viscosité du gaz

Le coefficient de viscosité du gaz peut être calculé de façon similaire au coefficient de conductivité thermique. Ainsi, pour un gaz pur, on peut écrire [30] :

$$\eta_g = 266.93 \times 10^{-3} \frac{\sqrt{T_g m_g}}{\sigma_g^2 \Omega^{*(2,2)}(T^*)} \quad \text{II-44}$$

Pour la viscosité binaire, dans le cas des mélanges mercure-argon, on a :

$$\eta_{12} = 266.93 \times 10^{-8} \frac{\sqrt{T_g m_{12}}}{\sigma_{12}^2 \Omega_{12}^{*(2,2)}(T_{12}^*)} \quad \text{II-45}$$

La viscosité peut donc se calculer en fonction de Ar , Hg et 12 [30].

II.4. Transfert du rayonnement et emprisonnement

Lorsque des photons sont générés en un point de la décharge ils doivent, avant de sortir de la décharge, traverser le plasma et atteindre les parois. Pendant ce parcours, plusieurs atomes (ou molécules) peuvent successivement absorber ces photons puis les ré-émettre. C'est le phénomène d'emprisonnement. Cependant, si une de ces particules se désexcite par l'intermédiaire d'une collision super-élastique le photon est perdu et son énergie est emportée par la particule qui a causé la collision. Le phénomène d'emprisonnement joue un rôle important sur le rayonnement émis. Dans la modélisation de l'émission du rayonnement on le traite parfois en introduisant un facteur qui réduit l'émission spontanée par la durée de vie naturelle du niveau excité τ , à la valeur τ/Θ . On définit la durée de vie effective τ^* du niveau radiatif par :

$$\frac{1}{\tau^*} = \frac{\Theta}{\tau}$$

où Θ : est appelé facteur de fuite défini par Holstein.

Soit n le nombre d'atomes émetteurs ayant une probabilité d'émission spontanée A . Le produit nA est le nombre de photons générés qui peuvent, en l'absence d'absorption, traverser la surface de la source par unité de temps. Si un nombre F de ces photons est seul capable d'échapper au milieu excité, le rapport F/nA est la fraction des photons qui va s'échapper de la source.

Ce rapport, noté Θ est le facteur de fuite. Il représente la probabilité moyenne pour un photon parmi un nombre fini d'autres photons émis n'importe où dans la source, de traverser directement la surface et d'échapper. Le facteur de fuite ainsi défini ne dépend pas de l'état de la source (ionisation, recombinaison ou état stationnaire).

En utilisant la définition (II.46), le nombre de désexcitations apparentes du niveau excité k vers un niveau inférieur J , par unité de temps et de volume, au point r , est donné par la relation :

$$N_{kj}(r) = \frac{\Theta_{kj}}{\tau_k} n_k(r) \quad \text{II-47}$$

$n_k(r)$ est la densité numérique du niveau émetteur au point r .

La quantité importante à prendre en compte est la probabilité, $T(\rho)$ qu'un photon traverse la distance $\rho = |r-r'|$ dans la source sans être absorbé. La probabilité, moyenne sur tout le domaine des longueurs d'ondes, qu'un photon traverse l'épaisseur optique $\tau_0(\gamma)$ sans être absorbé, est le facteur de transmission défini par :

$$T(\rho) = \int_{-\infty}^{+\infty} P(\gamma) \exp(-\tau_0(\gamma)) d\gamma \quad \text{II-48}$$

Dans cette équation, nous supposons que $P(\gamma) \propto K(\gamma)$, où $K(\gamma)$ est le coefficient d'absorption et $P(\gamma)$ la probabilité d'émission d'un photon avec une fréquence comprise entre γ et $\gamma + d\gamma$.

II.4.1. Traitement asymptotique de Holstein

Le traitement complet de l'emprisonnement du rayonnement est très compliqué. Notons aussi que le traitement suppose que la longueur de la décharge soit infinie, ce qui peut être une source d'erreur systématique dans le cas des décharges de faible longueur.

Holstein [31] en faisant un certain nombre d'hypothèses, présentées plus loin, a proposé, dans le cas d'un profil de Doppler, une formule asymptotique pour le facteur de transmission :

$$T^{as}(\tau_0) = \frac{1}{\tau_0 \sqrt{\pi \ln \tau_0}} \quad \text{II-49}$$

Dans le cas d'une géométrie cylindrique (rayon de décharge R) le facteur de fuite est donné par la relation :

$$\Theta = \frac{1.6}{k_0 R \sqrt{\pi \ln k_0 R}} \quad \text{II-50}$$

Le facteur 1.6 dû à la géométrie a été confirmé par plusieurs auteurs tels que Payne et Cook [54] qui trouvent 1.575 et Van Trigt [64] 1.57560. Le coefficient d'absorption k_0 au centre du profil Doppler λ_0 est donné par la formule :

$$k_0 = \frac{\lambda_0^3}{8\pi^{3/2}} n_a \frac{g_r}{g_a} \frac{1/\tau_r}{\sqrt{2k_B T_g / M_g}} \quad \text{II-51}$$

n_a est la densité des atomes à l'état fondamental capables d'absorber un photon de résonance et M_g la masse de l'atome actif, enfin g_r et g_a sont les multiplicités respectives des niveaux émetteur et absorbant.

Dans plusieurs applications pratiques, la théorie de Holstein est utilisée même si ces situations ne correspondent pas strictement aux hypothèses pour lesquelles elle a été établie. Ceci peut s'expliquer par la grande difficulté que présente le traitement complet.

II.4.2 Hypothèses fondamentales faites par Holstein.

Il suppose que le temps de vol du photon (entre une émission et une absorption successives) est infiniment court devant le temps de vie radiatif du niveau excité. Cette hypothèse est a priori vérifiée à condition que la densité des atomes sur le niveau fondamental soit suffisamment élevée. En considérant que le temps effectif de vie du niveau excité est le même pour tous les éléments de volume du plasma. Holstein a effectué ses calculs dans un gaz idéal où le rapport n_r/n_g est fixe uniquement par les processus radiatifs ; les processus collisionnels l'excitation et la désexcitation n'y ont pas lieu. Cette hypothèse est contestable dans notre cas.

Remarque

Drawin et Eymard [20] ont montré que malgré ces hypothèses la théorie de Holstein peut être utilisée uniquement pour estimer l'ordre de grandeur du facteur de fuite, dans les cas (loin de l'E.T.L.) où le plasma est dominé par les processus inélastiques et super-élastiques, à condition que la fonction source soit indépendante de la position spatiale dans la décharge.

Notons également que la formule (II.50) n'est valable que pour des valeurs de $k_0 R > 6$.

En tout cas, la formule de Holstein, n'est plus applicable si $k_0 R \leq 1$. Drawin et Eymard [20] ont proposé une formule similaire mais capable de prévoir les valeurs de Θ si $k_0 R \leq 1$:

$$\Theta = \frac{1 + \frac{\tau_0}{2 + \tau_0^2}}{1 + \tau_0 \sqrt{\pi \ln\{1 + \tau_0\}}}$$

II-52

II.4.3 Emprisonnement des raies de résonance du mercure.

Le mercure émet deux raies de résonance de longueurs d'ondes :

- ❖ 253.7 nm correspondant à la transition $6^3P_1 \rightarrow 6^1S_0$.
- ❖ 184.9 nm correspondant à la transition $6^1P_1 \rightarrow 6^1S_0$.
- ❖ Ces deux raies sont fortement emprisonnées dans la décharge, dans le cas particulier d'une décharge mercure-gaz rare basse pression. L'hypothèse d'un profil de raie qui suit le profil Doppler souvent adopté dans la littérature est en bon accord avec les mesures. La théorie de Holstein [30] est fréquemment utilisée, cependant certaines difficultés peuvent apparaître selon le cas traité.

Pour la raie 253.7 nm, dans la décharge *Hg-Ar* classique ($\phi = 36$ mm, $I = 400$ mA et $p_{Ar} = 400$ Pa à 0 °C), la théorie de Holstein, comme l'indique la figure (II.12), semble être en bon accord avec l'expérience.

Pour le cas de $k_0R < 6$, cette théorie n'est pas valable dans ce domaine, nous pouvons faire appel à la théorie de Walsh [71] ou à celle de Drawin [21].

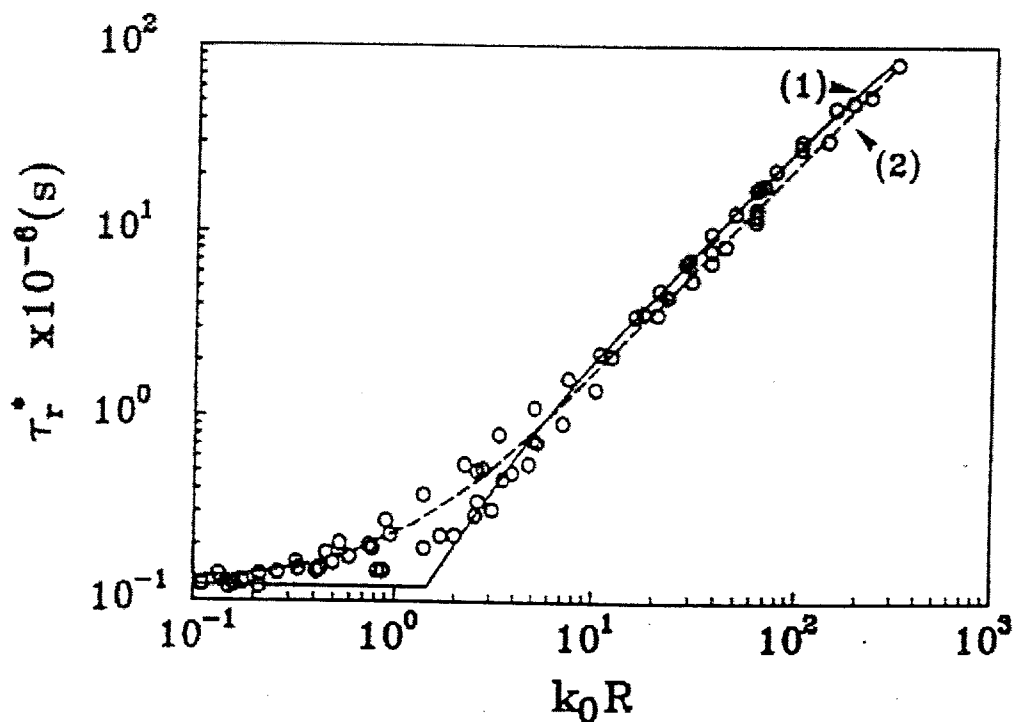


Figure II.12 : Temps de vie effectif du niveau 6^3P_1 en fonction de l'épaisseur optique. (o) : Expérience ; (1) : théorie de Holstein ; (2) : théorie de Walsh.

Walsh [71] a montré que dans les décharges Hg- Ar où la pression de mercure devient importante (pression de vapeur saturante correspondant à $T_{pf} \geq 85$ °C), une correction de la théorie de Holstein est nécessaire. En effet, dans ces conditions le profil de la raie suit plutôt un profil de Lorentz (élargissement de pression par collisions Hg^*/Hg) qu'un profil Doppler.

$$P_{Ar} \geq 85 \frac{\ln k_0 R}{k_0 R}$$

II-54

Nous constatons que pour une valeur de l'épaisseur optique égale à 250 mm (qui correspond à des décharges Hg-Ar classiques avec 400 Pa d'argon et $T_{pf} = 40$ °C), la théorie de Holstein est valable avec une bonne approximation. Si la pression d'argon passe de 400 Pa à 2000 Pa, l'écart à la théorie de Holstein atteint 40 %.

La composition isotopique du mercure naturel complique les calculs de l'emprisonnement car chaque isotope émet sa propre raie de résonance. Nous devons ainsi, calculer séparément le k_0^i correspondant à chaque isotope i , le pondérer avec l'abondance a_i de l'isotope et enfin tenir compte du recouvrement des raies isotopiques. Cependant, en examinant de plus près la structure fine de la raie 253.7 nm, on constate qu'on peut la rassembler à 5 raies isotopiques principales d'amplitudes voisines. Pour cette raison et au moins tant que le recouvrement des raies isotopiques reste faible, plusieurs auteurs ont considéré une valeur effective de k_0 égale à $k_0^n / 5$, où k_0^n correspond à la densité du mercure naturel.

Pour ce qui concerne l'emprisonnement de la raie 184.9 nm, la figure (II.13) est très claire. Ici, la densité du mercure joue un rôle plus important du fait de la valeur plus grande de la probabilité de transition de cette raie. La théorie de Holstein, avec un profil Doppler, n'est valable que pour les très faibles densités ($n_{Hg} \leq 10^{19} \text{ m}^{-3}$).

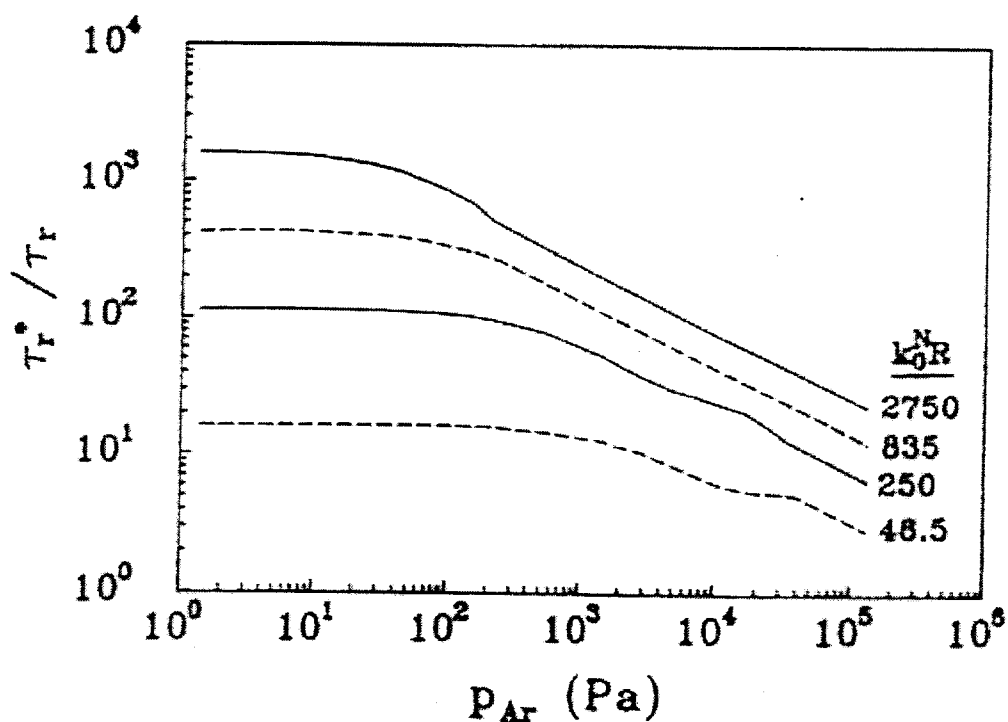


Figure. II.13 : Temps de vie effectif du niveau 6^1P_1 en fonction de la densité du mercure (0) : expérience ; (1) : théorie de Holstein ; (2) : théorie de Post avec l'hypothèse de la redistribution complète du spectre ; (3) : théorie de Post sans l'hypothèse de la redistribution complète du spectre

Notons que dans le cas des décharges *Hg-Ar* basse pression la puissance émise par la raie 184.9 nm reste notablement inférieure d'un facteur ≈ 5 à celle émise par la raie 253.7 nm . De ce fait, le traitement de l'emprisonnement de la raie 184.9 nm est moins critique pour la modélisation de la décharge.

Chapitre III :

Méthodes de calcul de la fonction de distribution des énergies électroniques

III.1. INTRODUCTION

Ce chapitre est consacré à la mise au point et au développement des méthodes de calcul des fonctions de distribution des électrons dans des plasmas froids non-thermiques. L'objectif est de contribuer à l'amélioration des modèles utilisés pour l'étude de ces plasmas car les électrons jouent un rôle tout à fait déterminant au niveau de la formation de ces plasmas.

Dans ce chapitre, on s'intéresse donc à l'aspect microscopique de la modélisation des décharges et des plasmas froids non-thermiques, plus particulièrement à la mise au point de méthodes de résolution directe et indirecte de l'équation de Boltzmann relatives aux électrons. L'originalité de ce travail réside essentiellement dans la prise en compte d'un certain nombre de processus collisionnels susceptibles de déformer de façon plus ou moins importante la fonction de distribution des électrons. Ces processus collisionnels sont, en plus des processus classiques électron-atome (collisions élastiques, inélastiques et super-élastiques), toute les interactions atome-atome entraînant la création de nouveaux électrons dans le plasma (réaction Penning ou métastable-métastable) ainsi que l'ionisation par impact électronique des atomes excités et les interactions coulombiennes. Ces processus collisionnels ont la particularité d'être présents de façon non négligeable dans les plasmas existants dans les lampes à décharges classiques à basse pression : le plasma est formé essentiellement de la colonne positive dans des mélanges de gaz rares-vapeurs métalliques (**Ar-Hg**) sous des pressions de quelques torr. Le mélange gazeux est surtout choisi pour son efficacité d'excitation optimale des raies de résonance de la vapeur métallique.

Ensuite, on décrit l'équation de Boltzmann utilisée pour l'étude et l'analyse du comportement des électrons dans les plasmas froids non-thermiques. Ces plasmas sont ceux formés dans les cellules élémentaires d'un panneau de visualisation, dans la colonne positive d'une lampe à décharge à basse pression et dans le milieu de pompage des lasers à excimère XeCl.

III.2. Résolution de l'équation de Boltzmann par la méthode à deux termes.

Par cette description, on essaie de mettre en évidence quelques considérations sur l'équation de Boltzmann et les difficultés rencontrées pour résoudre dans le cas général. Les hypothèses simplificatrices admises, concernant d'abord le terme de droite de cette équation (opérateur de collision), sont explicitées en même temps que les principaux types de collisions susceptibles de modifier directement ou indirectement la fonction de distribution électronique. Ensuite, les hypothèses simplificatrices concernant le terme de gauche de l'équation de Boltzmann sont discutées dans le cadre de la théorie cinétique classique. Il faut cependant souligner que dans ce travail, cette théorie cinétique est appliquée aussi bien dans le cas d'un milieu homogène et non-

stationnaire (cas relatif à la simulation des expériences de mesure des paramètres de transport ou temps de vol) que dans le cas d'un milieu non-homogène stationnaire (cas relatif à la simulation des expériences de mesures de paramètres de transport correspondant à l'expérience de Townsend en régime stationnaire dans laquelle un spectre d'arrivée à l'anode du nuage électronique est analysé).

III.2.1. Notions fondamentales :

Le milieu étudié est constitué de plusieurs espèces de particules, électriquement chargées ou non. Ces particules sont principalement des atomes neutres dans leurs états fondamentaux de densité N , mais aussi des électrons et des ions de densité n_e (avec $n_e/N < 10^{-4}$), et aussi des atomes excités de densité N^* (avec $N^*/N < 10^{-4}$).

Sous l'action d'une force extérieure d'accélération γ , les électrons se déplacent et effectuent des collisions avec toutes les espèces de particules. A l'instant "t", le nombre probable d'électrons " $dn(r,v,t)$ " se trouvant dans l'élément le volume dv situé autour du point r et animés d'une vitesse v variant dans l'élément de volume dv est défini par:

$$dn(r,v,t) = dr dv f(r,v,t) \quad \text{III-1}$$

avec en coordonnées cartésiennes : $dr = dx dy dz$ et $dv = dv_x dv_y dv_z$

et où $f(r,v,t)$ est la fonction de distribution des électrons dans l'espace des phases..

La fonction $f(r,v,t)$ n'est pas une quantité mesurable, seule son intégrale dans l'espace des vitesses peut l'être, il s'agit de la densité des électrons en un point de la décharge à un instant donné:

$$n(r,t) = \int f(r,v,t) dv \quad \text{III-2}$$

La définition de la fonction de distribution des électrons $f(r,v,t)$ repose sur des notions de probabilité, et toute expression dans laquelle elle figurera ultérieurement (expression des paramètres de transport et des taux de réaction par exemple) sera relative au comportement moyen des électrons. A chaque instant, cette fonction dépend du vecteur vitesse v et du vecteur position r qui sont des variables indépendantes de l'espace des phases (espace des positions et des vitesses). Cette fonction obéit à l'équation de Boltzmann suivante :

$$\frac{df}{dt} = \frac{\partial f}{\partial t} + v \frac{\partial f}{\partial r} + \gamma \frac{\partial f}{\partial v} = C(f)$$

avec $v = \frac{\partial r}{\partial t}$ et $\gamma = \frac{\partial v}{\partial t}$ III-3

L'équation (III-3) indique que la variation élémentaire "df" de la fonction $f(r,v,t)$ dans l'intervalle "t" et "t +dt" se fait de manière continue dans l'espace des phases, et que ce sont les collisions représentées par l'opérateur $C(f)$ qui sont à l'origine de la modification du nombre de particules dans le volume élémentaire dv sur l'espace des phases dr . "df/dt" est donc la somme des dérivées partielles de la fonction de distribution caractérisant, la variation temporelle de "f" $\partial f / \partial t$ au point (r,v), la variation spatiale due à la diffusion ($v \cdot \partial f / \partial r$) et la variation de "f" sous l'effet des forces extérieures ($\gamma \cdot \partial f / \partial v$).

La plus ou moins grande difficulté pour résoudre l'équation (III-3) dépend de l'écriture plus ou moins complexe de l'opérateur de collision $C(f)$, mais également de la plus ou moins grande complexité du terme de gauche de l'équation (III-3), c'est à dire du nombre de variables à considérer. Dans ce qui suit, nous allons d'abord décrire les hypothèses simplificatrices utilisées pour écrire l'opérateur de collision, ensuite la théorie cinétique permettant une écriture simplifiée de l'équation de Boltzmann, ainsi que la forme intégral-différentielle finale sous laquelle l'équation de Boltzmann (valable dans le cas des plasmas froids non-thermiques qui nous intéressent) sera numériquement résolue.

III.2.2. Interactions coulombiennes:

Ce genre d'interaction est totalement différent des autres types des collisions électron-atome ou atome-atome. La différence est essentiellement due à la longue portée du potentiel coulombien (potentiel en $1/r$ où r représente la distance inter-particules). En effet, dans le cas d'une collision électron-atome, le potentiel d'interaction est un potentiel dit à courte portée (potentiel du type Lennard-Jones par exemple), ce qui signifie que tant que l'électron se trouve loin de l'atome il n'y a aucune interaction. Mais dès que l'électron se trouve à proximité de l'atome, il y a interaction : c'est pourquoi l'interaction électron-atome peut être considérée comme une collision binaire avec toutes les implications de la mécanique classique qui en découlent. En revanche, dans le cas des interactions entre particules chargées (électron-électron ou électron-ion), les électrons dont on veut étudier la fonction de distribution interagissent en permanence avec un grand nombre d'électrons et d'ions du milieu. Nous reviendrons dans le paragraphe suivant sur les hypothèses admises pour l'écriture de l'opérateur de collision coulombienne. Cependant, il faut savoir d'ores et déjà que les interactions coulombiennes (surtout électron-électron) jouent un rôle important dans l'équilibre énergétique. En effet, elles permettent des échanges d'énergies directs entre les électrons du milieu. Ces échanges, qui peuvent être relativement importants ont pour effet, d'une part d'accélérer l'état d'équilibre énergétique des électrons partant d'un état initial éloigné du régime hydrodynamique, et d'autre part de faire

tendre la fonction de distribution des électrons vers une distribution de plus en plus maxwellienne.

III.2.3. Opérateur de collision

La prise en compte de ces divers types de collisions ne simplifie pas l'écriture de l'opérateur $C(f)$. Afin de linéariser cet opérateur, une première série d'hypothèses simplificatrices concernant la nature de ces collisions est nécessaire

- ❖ Le milieu gazeux est supposé assez dilué si bien que seules les collisions binaires sont prises en compte.
- ❖ Les collisions sont supposées instantanées et locales de sorte que l'opérateur de collision agisse sur la fonction de distribution des électrons par l'intermédiaire de la vitesse seulement.
- ❖ La fonction de distribution des atomes (ou molécules) neutres (excités ou non) est supposée maxwellienne à la température T_g du gaz.

Dans ces conditions, l'expression suivante :

$$C(f) = J(f) + V(v)f \quad \text{III-4}$$

peut être considérée comme une bonne approximation de l'opérateur de collisions. Le terme $J(f)dvd\mathbf{r}$ représente le nombre d'électrons peuplant l'élément de volume $d\mathbf{v},d\mathbf{r}$ de l'espace des phases à l'instant "t". Tandis que $(v)f d\mathbf{v},d\mathbf{r}$ représente le nombre d'électrons dépeuplant le volume $d\mathbf{v},d\mathbf{r}$ à ce même instant. C'est la raison pour laquelle le terme $J(f)$ est appelé le terme de peuplement et $(v)f$ terme de dépeuplement.

III.1.4.1 Expression du terme de dépeuplement $(v)f$:

$V(v)f$ est le produit de la fréquence de collision totale (v) qui dépend de la vitesse v et de la fonction de distribution $f(r,v,t)$. La fréquence de collision totale $V(v)$ représente l'ensemble des processus de collision électron-atome et d'interactions coulombiennes qui sont pris en compte. $V(v)$ peut s'écrire de la manière suivante:

$$V(v) = V_{e-at} + V_{e-e} + V_{e-ion} \quad \text{III-5}$$

où V_{e-e} et V_{e-ion} sont les fréquences des interactions électron-électron et électron-ion, V_{e-at} est la fréquence de collision électron-atome. Elle est la somme des fréquences V_{el} (collision élastique), V_{ex} (excitation), V_{sup} (super-élastique), V_{ion} (ionisation directe) et V_{cu} (ionisation cumulative). Ces fréquences s'écrivent [79]:

$$\begin{aligned}
 el &= \sum_{ig=1}^{ng} N_{ig} v Q_m^{ig} & ex &= \sum_{ig=1}^{ng} N_{ig} \sum_{j=1}^{n_{ex}^{ig}} v Q_{ex,j}^{ig} \\
 sup &= \sum_{ig=1}^{ng} \sum_{j=1}^{n_{ex}^{ig}} N_{ig}^j v Q_{sup,j}^{ig} & ion &= \sum_{ig=1}^{ng} N_{ig} v Q_{ion}^{ig} \\
 cu &= \sum_{ig=1}^{ng} \sum_{j=1}^{n_{ex}^{ig}} N_{ig}^j v Q_{cu,j}^{ig}
 \end{aligned}$$

III-6

N_{ig} Est la densité des atomes du gaz "ig" dans leur état fondamental tandis que N_{ig}^j est la densité des atomes du gaz "ig" dans leurs états excités "j".

n_{ex}^{ig} est le nombre de niveaux excités d'un atome du gaz "ig".

Les sections efficaces qui correspondent aux collisions électron-atome du gaz "ig" sont les suivantes :

Q_m^{ig} section efficace de transfert de quantité de mouvement par collision élastique avec l'atome dans son état fondamental.

$Q_{ex,j}^{ig}$ section efficace d'excitation du niveau fondamental au niveau excité "j".

$Q_{sup,j}^{ig}$ section efficace de destruction de l'état excité "j" par collision super-élastique.

Q_{ion}^{ig} section efficace d'ionisation à partir de l'état fondamental.

III.1.4.2 Expression du terme de peuplement J(f)

Contrairement au terme de dépeuplement où les collisions atome-atome ne jouent aucun rôle. le terme de peuplement inclut non seulement les collisions électron-atome, électron-électron et électron-ion mais aussi les collisions atome-atome entraînant l'apparition de nouveaux électrons dans le système:

$$J = J_{e-at} + J_{coul} + J_{at-at}$$

Les termes de peuplement qui vont suivre sont écrits dans le cas d'un mélange gazeux incluant **ng** gaz. Comme la diffusion des électrons après le choc électron-atome est supposé isotrope les différents termes de peuplement ci- dessous dépendent uniquement de la partie isotrope $\phi(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)$ de la fonction de distribution $\mathbf{f}(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)$ des électrons dans le mélange gazeux..

III.1.4.2.1 Terme de peuplement relatif aux collisions électron-atome J_{e-at}

Il s'écrit $J_{e-at} = J_{el} + J_{ex} + J_{sup} + J_{ion} + J_{cu}$

- ❖ le terme J_{el} représentant le peuplement par collisions élastiques se décompose en un premier terme exprimant la rotation du vecteur vitesse au cours du choc, un deuxième terme exprimant l'échange d'énergie et un troisième terme relatif à l'agitation thermique du gaz cible [79] :

$$NJ_{el}(\phi_o(r,v,t)) = \sum_{ig=1}^{ng} \left\{ N_{ig} v Q_m^{ig}(v) \phi_o(r,v,t) + \frac{m_e N_{ig} \partial}{M_{ig} v \partial v} \left\{ v Q_m^{ig}(v) \left[\phi_o(r,v,t) + \frac{kT}{m_e v} \frac{\partial}{\partial v} \phi_o(r,v,t) \right] \right\} \right\}$$

III-7

- ❖ le terme J_{ex} représente le peuplement par excitation électronique des atomes à partir du niveau fondamental [79]:

$$NJ_{ex}(\phi_o(r,v,t)) = \frac{1}{v} \sum_{ig=1}^{ng} \left\{ N_{ig} \sum_{j=1}^{n_{ex}^{ig}} v_{ex,j}^2 Q_{ex,j}^{ig}(v_{ex,j}) \phi_o(r,v_{ex,j},t) \right\}$$

avec $v_{ex,j}^2 = v^2 - \frac{2}{m_e} E_{ex,j}^{ig}$

III-8

- ❖ le terme J_{sup} représente le peuplement par collisions super-élastiques [79] :

$$NJ_{sup}(\phi_o(r,v,t)) = \frac{1}{v} \sum_{ig=1}^{ng} \left\{ \sum_{j=1}^{n_{ex}^{ig}} N_{ig} v_{sup,j}^2 Q_{sup,j}^{ig}(v_{sup,j}) \phi_o(r,v_{sup,j},t) \right\}$$

avec $v_{sup,j}^2 = v^2 - \frac{2}{m_e} E_{sup,j}^{ig}$

III-9

- ❖ le terme J_{ion} représente le peuplement par ionisation des atomes à partir de leurs niveaux fondamentaux [79] :

$$NJ_{ion}(\phi_o(r,v,t)) = \frac{1}{v} \sum_{ig=1}^{ng} N_{ig} \left\{ \frac{1}{\Delta} v_1^2 Q_{ion}^{ig}(v_1) \phi_o(r,v_1,t) + \frac{1}{1-\Delta} v_2^2 Q_{ion}^{ig}(v_2) \phi_o(r,v_2,t) \right\}$$

III-10

avec $v_1^2 = \frac{1}{\Delta} v^2 + \frac{2}{m_e} E_{ion,j}^{ig}$ et $v_2^2 = \frac{1}{1-\Delta} v^2 + \frac{2}{m_e} E_{ion,j}^{ig}$

❖ Le terme J_{cu} représente le peuplement par ionisation cumulative [79] :

$$NJ_{cu}(\phi_0(r, v, t)) = \frac{1}{v} \sum_{ig=1}^{ng} \sum_{j=1}^{n_{ex}^{ig}} N_{ig}^j \left\{ \frac{1}{\Delta} v_{1cuj}^2 Q_{cuj}^{ig}(v_{1cuj}) \phi_0(r, v_{1cuj}, t) + \frac{1}{1-\Delta} v_{2cuj}^2 Q_{cuj}^{ig}(v_{2cuj}) \phi_0(r, v_{2cuj}, t) \right\} \quad \text{III-11}$$

$$v_{1cuj}^2 = \frac{1}{\Delta} v^2 + \frac{2}{m_e} (E_{ion.j}^{ig} - E_{exj}^{ig}) \quad \text{et} \quad v_{2cuj}^2 = \frac{1}{1-\Delta} v^2 + \frac{2}{m_e} (E_{ion.j}^{ig} + E_{exj}^{ig})$$

Δ est un paramètre qui caractérise la répartition de l'énergie entre les deux électrons diffusés et éjectés :

$$\frac{\text{énergie de l'électron diffusé}}{\text{énergie de l'électron éjecté}} = \frac{\Delta}{1-\Delta}$$

III.1.4.2.2 Terme de peuplement relatif aux collisions atome-atome :

Le terme J_{at-at} correspond au peuplement par collisions Penning (J_{pen}) et par collisions entre deux atomes métastables (J_{mm}) qui entraînent la création de nouveaux électrons dans le milieu. Ce terme, contrairement aux termes précédents, ne dépend pas directement de la fonction de distribution, $\phi_0(r, v, t)$ il dépend uniquement, des pressions partielles des atomes mis en jeu dans les réactions atome-atome et des fréquences des collisions correspondantes. Il s'écrit [79] :

$$J_{at-at} = J_{pen} + J_{mm}$$

$$\text{avec} \quad NJ_{pen} = \sum_{ig=1}^{ng} \frac{N_{ig}^m}{n_e} \sum_{jg=1}^{ng} N_{ig}^j X_{ig-jg}^{pen} v_{ig-jg}^{pen}(t) \delta(v - v_{pen}) \quad \text{III-12}$$

$$v_{pen}^2 = \frac{2}{m_e} (E_{met}^{ig} - E_{ion}^{jg}) \quad \text{et} \quad v_{ig-jg}^{pen} = N_{jg} v_{ig-jg}^r Q_{ig-jg}^{pen}$$

E_{met} et E_{ion}^{jg} sont respectivement, l'énergie d'excitation du niveau métastable d'un atome du gaz « ig », et l'énergie d'ionisation d'un atome du gaz « jg ».

Q_{ig-jg}^{pen} est la section efficace de collision entre un atome du gaz ig dans un état métastable, et un atome du gaz jg dans son état fondamental.

v_{ig-jg}^r est la vitesse relative moyenne entre les atomes du gaz « ig » et ceux du gaz « jg ».

$X_{ig-jg}^{pen} = 1$ si $E_{met}^{ig} > E_{ion}^{jg}$ si non, il est égal à 0.

$$NJ_{mm} = \sum_{ig=1}^{ng} \frac{N_{ig}^m}{n_e} \sum_{jg=1}^{ng} X_{ig-jg}^{mm} v_{ig-jg}^{mm}(t) \delta(v - v_{mm}) \quad \text{III-13}$$

$$v_{mm}^2 = \frac{2}{m_e} (E_{met}^{ig} - E_{ion}^{ig} - E_{ion}^{jg}) \quad \text{et} \quad v_{ig-jg}^{mm} = N_{jg}^m(t) v_{ig-jg}^r Q_{ig-jg}^{mm}$$

Q_{ig-jg}^{mm} c'est la section efficace de collision entre deux atomes, dans des états métastables, de deux gaz ig et jg

$$X_{ig-jg}^{mm} = 1 \text{ si } E_{met}^{ig} + E_{ion}^{jg} > E_{ion}^{jg} \text{ si non, } X_{ig-jg}^{mm} = 0$$

Pour expliciter les rapports du nombre d'atomes métastables du gaz ig sur celui des électrons, $\frac{N_{ig}^m}{n_e}$ il est nécessaire de coupler, à l'équation de Boltzmann, les équations de conservation des différentes espèces participant à la création et à la disparition des électrons et des atomes métastables.

III.1.4.2.3 Terme de peuplement par interactions coulombiennes :

Le terme J_{coul} représente le peuplement par interactions coulombiennes électron - électron j_{e-e} et électron -ion (J_{e-ion}). L'écriture de ces deux termes nécessite quelques hypothèses simplificatrices compte tenu de la longue portée du potentiel d'interaction coulombien. En effet, le champ coulombien des électrons projectiles interagit simultanément avec le champ de l'ensemble des particules chargées se trouvant dans son rayon d'action. Cela implique une notion d'interaction multiple et simultanée qui n'apparaît pas dans le cas des interactions électron-électron. C'est pour cela que l'on suppose les interactions coulombiennes comme une succession d'interactions binaires entraînant de faibles déviations après le choc. Dans ces conditions, le terme de collisions coulombiennes peut être déduit de l'opérateur de Fokker - Plank écrit dans le cas de collision entre particules chargées.

L'opérateur coulombien se présente sous la forme suivante :

- ♦ Dans le cas des interactions électron-électron :

$$NJ_{e-e}(\phi_0(r, v, t)) = \frac{1}{2v^2} \frac{\partial}{\partial v} \left\{ v_{e-e} v^3 \left[A_1(v, t) + (A_2(v, t) + A_3(v, t)) v \frac{\partial}{\partial v} \right] \phi_0(r, v, t) \right\}$$

avec :

$$A_1(v, t) = \frac{4\pi}{n_e} \int_0^v \phi_0(r, v', t) v'^2 dv' \quad A_2(v, t) = \frac{4\pi}{3v^2 n_e} \int_0^v \phi_0(r, v', t) v'^4 dv' \quad III - 14$$

$$\text{et} \quad A_3(v, t) = \frac{4\pi v}{3n_e} \int_v^\infty \phi_0(r, v', t) v' dv'$$

- ◆ Dans le cas des interactions électron-ion, le terme J_{e-ion} représente les mêmes effets que l'opérateur de collision élastique entre électrons et atomes, d'où une expression analogue :

$$J_{e-ion}(\phi_0(r,v,t)) = \sum_{ig=1}^{ng} \left\{ N_{ig}^+ v Q_{e-ion}^{ig}(v) \phi_0(r,v,t) + \frac{m_e N_{ig}^+ \hat{c}}{M_{ig} v^2 \hat{c} v} \left\{ v^4 Q_{e-ion}^{ig}(v) \left[\phi_0(r,v,t) + \frac{kT}{m_e v \hat{c} v} \phi_0(r,v,t) \right] \right\} \right\}$$

III-15

Dans ce qui précède, c'est l'opérateur de collision de l'équation de Boltzmann (III-3) qui vient d'être explicité. Sa linéarisation moyennant un certain nombre d'hypothèses tout à fait valides pour le type de milieu gazeux étudié (gaz faiblement ionisé), a donc permis une écriture de cet opérateur $C(f)$ relativement simple et accessible du point de vue du calcul numérique.

III.2.4. Théorie cinétique :

Maintenant, il reste à transformer le terme de gauche de l'équation (III-3) («streaming term») car la solution numérique de l'équation (III-3) sous sa forme complète n'est pas envisageable même en ayant explicité $C(f)$.

Heureusement que dans les milieux gazeux étudiés dans ce travail, des conditions physiques assez particulières dans lesquelles se trouvent le plasma (régime stationnaire, milieu spatialement infini, régime hydrodynamique ou géométrie mono-dimensionnelle, géométrie de révolution, etc...) permettent un certain nombre de simplifications envisagées dans le cadre de la théorie cinétique classique du régime hydrodynamique. Il s'agit du développement de la fonction de distribution $f(r,v,t)$ en série de gradients spatiaux de la densité électronique $n(r,t)$ et aussi en série de gradients temporels de la densité électronique $n(r,t)$ (voir Kondo et Tagashira [41])

Dans ce qui suit et pour des raisons de simplicité d'écriture des équations, nous allons nous intéresser au cas d'une géométrie mono-dimensionnelle. L'axe Oz choisi correspond à la direction de l'accélération des forces extérieures γ . Donc la fonction de distribution $f(r,v,t)$ peut être développée :

- ◆ soit en série de gradients spatiaux de la densité $n(z,t)$:

$$f(z,v,t) = \sum_{i=0}^{\infty} F_{(i)}(v;t) \theta(-\hat{c}_z) n(z,t) \quad \text{III-16}$$

Les fonctions de distribution $F(i)(v,t)$ d'ordre « i » vérifient les conditions de normalisation suivantes :

$$\int F^{(i)}(\mathbf{v}, t) d\mathbf{v} = \delta_{0i} \quad \text{et} \quad F^{(0)}(\mathbf{v}, t) = \frac{1}{n(t)} \int_{-\infty}^{+\infty} \mathbf{f}(z, \mathbf{v}, t) dz$$

θ : représente le produit contracté d'ordre "i" (le résultat du produit est toujours un scalaire).

- ♦ soit en série de gradients temporels de la densité $\mathbf{n}(z, t)$:

$$f(z, \mathbf{v}, t) = \sum_{i=0}^{\infty} G^{(i)}(\mathbf{v}; t) \theta \left(-\frac{\partial}{\partial t} \right)^i n(z, t) \quad \text{III-17}$$

Les fonctions de distribution $G^{(i)}(\mathbf{v}, z)$ d'ordre "i" vérifient également les conditions de normalisation suivantes :

$$\int G^{(i)}(\mathbf{v}, z) d\mathbf{v} = \delta_{0i} \quad \text{et} \quad G^{(0)}(\mathbf{v}, z) = \frac{1}{n(z)} \int_0^{\infty} \mathbf{f}(z, \mathbf{v}, t) dt$$

Le développement (III-16) est valable lorsque les gradients spatiaux de la densité sont relativement faibles. Il permet la simulation des expériences de mesure des paramètres de transport dans lesquelles la résolution spatiale du spectre électronique en fonction du temps est observée.

Tandis que le développement (III-17) est valable lorsque les gradients temporels de la densité sont à leur tour relativement faibles. Il permet la simulation des expériences de mesure des paramètres de transport [41] dans lesquelles la résolution temporelle du spectre électronique en fonction de la position z est observée.

III.5.1.1 Développement de $\mathbf{f}(z, \mathbf{v}, t)$ en série de gradients spatiaux :

Tout d'abord, écrivons l'équation de continuité des électrons obtenue en intégrant l'équation de Boltzmann (III-3) dans l'espace des vitesses :

$$\frac{\partial n(z, t)}{\partial t} + \frac{\partial \phi(z, t)}{\partial z} = \int d\mathbf{v} C(\mathbf{f}) \quad \text{III-18}$$

$\phi(z, t)$ représente le flux d'électrons et $\int d\mathbf{v} C(\mathbf{f})$ le taux d'ionisation net :

$$\phi(z, t) = \int d\mathbf{v} v_z f(z, \mathbf{v}, t) \quad \text{et} \quad \int d\mathbf{v} C(\mathbf{f}) = n(z, t) \Omega^{(0)}(z, t)$$

v_z représente la projection du vecteur vitesse sur l'axe Oz .

En reportant le développement (III-16) dans l'équation de continuité (III-17), on obtient l'équation de conservation classique qui est appelée équation de diffusion généralisée si le développement est tronqué à l'ordre 2 :

$$\frac{\partial}{\partial t} n(z,t) - \Omega^{(0)}(t) \frac{\partial}{\partial z} n(z,t) - \Omega^{(2)}(t) \frac{\partial^2}{\partial z^2} n(z,t) = 0 \quad \text{III-19}$$

Les coefficients $\Omega^{(i)}(t)$ sont les paramètres de transport d'ordre i relatifs à l'analyse du spectre électronique à l'instant t :

$$\Omega^{(0)}(t) = \frac{1}{n(t)} \frac{dn(t)}{dt} \quad \text{fréquence d'ionisation nette}$$

$$\Omega_{(1)}(t) = \frac{d\langle z \rangle(t)}{dt} \quad \text{vitesse de dérive}$$

$$\Omega_{(2)}(t) = \frac{d\langle z^2 \rangle(t)}{dt} \quad \text{coefficient de diffusion longitudinal}$$

Le nombre total d'électrons $n(t)$ à l'instant « t » $n(t)$ s'écrit : $n(t) = \int_{-\infty}^{+\infty} dz n(z,t)$

$$\text{avec } \langle z^* \rangle = z - \langle z \rangle \quad \text{et} \quad \langle z \rangle = \frac{\int_{-\infty}^{+\infty} zn(z,t) dz}{n(t)}$$

Finalement, les équations cinétiques vérifiant les fonctions de distribution $F^{(i)}(v,t)$ s'obtiennent en multipliant l'équation de départ (III-3) par z^i et en l'intégrant dans l'espace des positions dz , il vient alors :

pour $i = 0$, on a :

$$\left\{ \partial_t + \gamma \nabla_v + \Omega^{(0)}(t) + V - J \right\} F^{(0)}(v,t) = 0 \quad \text{III-20(a)}$$

et pour $i > 1$ on a :

$$\left\{ \partial_t + \gamma \nabla_v + \Omega^{(i)}(t) + V - J \right\} F^{(i)}(v,t) = v F^{(i-1)}(v,t) - \sum_{j=1}^i \Omega^{(j)}(t) F^{(i-j)}(v,t) \quad \text{III-20(b)}$$

III.1.5.2 . Développement de $f(z,v,t)$ en série de gradients temporels :

Si le développement (III-17) est injecté dans l'équation de continuité (III-18), on obtient l'équation de conservation classique qui s'écrit lorsque le développement est tronqué à l'ordre 2 :

$$\frac{\partial}{\partial z} n(z,t) - \alpha^{(0)}(z) n(z,t) - \alpha^{(1)}(z) \frac{\partial}{\partial t} n(z,t) - \alpha^{(2)}(z) \frac{\partial^2}{\partial t^2} n(z,t) = 0 \quad \text{III-21}$$

Les coefficients $\alpha^{(i)}(z)$ sont les paramètres de transport d'ordre i relatif à l'analyse du spectre électronique sur le plan z :

$$\alpha^{(0)}(z) = \frac{1}{n(z)} \frac{dn(z)}{dz} \quad \text{coefficient d'ionisation net}$$

$$\alpha^{(1)}(z) = \frac{d \langle t \rangle (z)}{dz} \quad \text{inverse de la vitesse de dérive moyenne}$$

$$\alpha^{(2)}(z) = \frac{d \langle t^{*2} \rangle (z)}{2dz} \quad \text{quantité symétrique au coefficient de diffusion longitudinal par rapport à } t \text{ et } z.$$

avec $\langle t^* \rangle = t - \langle t \rangle$ et $\langle t \rangle = \frac{\int_{-\infty}^{+\infty} t n(z, t) dt}{n(z)}$
 $n(z)$ est le nombre total d'électrons qui traversent le plan « z » de $t = 0$ à $+\infty$

$$n(z) = \int_0^{\infty} dt n(z, t)$$

Finalement, les équations cinétiques vérifiées par les fonctions de distributions $G^{(i)}(v, z)$ s'obtiennent en multipliant l'équation de départ (III-3) par t^i et en l'intégrant dans l'espace des temps dt , il vient :

Pour $i = 0$:

$$\left\{ v_z \partial_z + \gamma \nabla_v + v_z \alpha^{(0)} + V - J \right\} G^{(0)}(v, z) = 0 \quad \text{III-22(a)}$$

pour $i > 0$:

$$\left\{ v_z \partial_z + \gamma \nabla_v + v_z \alpha^{(0)} + V - J \right\} G^{(i)}(v, z) = v F^{(i-1)}(v, t) - v_z \sum_{j=1}^i \alpha^{(j)} G^{(i-j)}(v, z)$$

III-22(b)

III.1.5.3 Développement en série de polynômes de Legendre des fonctions d'ordre zéro $F^{(0)}(v, t)$ et $G^{(0)}(v, z)$:

Dans ce qui va suivre, nous allons détailler uniquement les équations d'évolution des fonctions $F^{(0)}(v, t)$ et $G^{(0)}(v, z)$, c'est à dire les équations (III-20a) et (III-22a) correspondant au développement d'ordre zéro de la fonction de distribution $f(z, v, t)$. Les équations d'ordre supérieur à zéro peuvent être traitées de la même manière.

Les plasmas froids non-thermiques étudiés ici sont formés par des décharges dans lesquelles le champ électrique réduit E/N n'est pas très élevé d'une part et possèdent une symétrie de révolution autour de l'axe Oz. Dans ces conditions, les fonctions $F^{(0)}(v, t)$ et $G^{(0)}(v, z)$ peuvent être décomposés en série de polynômes de Legendre $P_i(\cos\theta)$ (θ angle entre v et \mathcal{Y}) d'ordre 1 :

$$F^{(0)}(v, t) = \phi_0^0(v, t) + \zeta \phi_1^0(v, t) \quad \text{avec } \zeta = \cos\theta$$

ζ : espace angulaire.

$$\text{avec } \phi_1^0(v,t) = \frac{1}{2} \int_{-1}^{+1} P_1(\mu) F^{(0)}(v,t) d\zeta \quad ; \quad \ell=0 \text{ et } 1 \quad \text{III-23}$$

$$\text{et } G^{(0)}(z,v) = g_0^0(z,v) + \zeta g_1^0(z,v)$$

$$\text{avec } g_1^0(z,v) = \frac{2}{2} \int_{-1}^{+1} P_1(\zeta) G^{(0)}(z,v) d\zeta \quad ; \quad \ell=0 \text{ et } 1$$

ϕ_1^0 resp. g_1^0 représente la première anisotropie de la fonction de distribution $F^{(0)}(v,t)$ (resp. $G^{(0)}(v,z)$).

L'intérêt de ce développement de la fonction de distribution en série de polynômes de Legendre, qui est suffisant à l'ordre 1 pour les plasmas étudiés, est de faciliter la résolution numérique de l'équation de départ (III-20). En effet, le nombre de variables à considérer est réduit car la fonction $F^{(0)}(v,t)$ qui s'écrit $F^{(0)}(v,\theta,\varphi,t)$ en coordonnées sphériques est remplacée par les fonctions $\phi_0^0(v,t)$ et $\phi_1^0(v,t)$

Les équations vérifiant les fonctions $\phi_0^0(v,t)$ et $\phi_1^0(v,t)$ sont obtenues en multipliant l'équation (III-20a) par d'abord $P(\zeta)$ et en intégrant tout par rapport à l'espace angulaire ζ :

$$\frac{\partial \phi_0^0(v,t)}{\partial t} + \frac{\gamma}{3v^2} \frac{\partial v^2 \phi_0^0(v,t)}{\partial v} + \phi_0^0(v,t) (\Omega_{(0)}(t) + V(v)) = NJ(\phi_0^0(v,t)) \quad \text{III-24(a)}$$

ensuite en multipliant la même équation (III-20a) par $P_1(\zeta)$ et en intégrant tout par rapport à μ :

$$\frac{\partial \phi_1^0(v,t)}{\partial t} + \gamma \frac{\partial \phi_1^0(v,t)}{\partial v} + \phi_1^0(v,t) (\Omega_{(0)}(t) + V(v)) = 0 \quad \text{III-24(b)}$$

Tandis que les équations vérifiées par les fonctions de distribution $g_0^0(z,v)$ et $g_1^0(z,v)$ sont obtenues en multipliant l'équation (III-22a) par $P_1 \zeta$ (avec $\ell=0$ puis 1) et ensuite en intégrant l'ensemble par rapport à ζ :

$$\frac{v}{3} \frac{\partial g_1^0(z,v)}{\partial z} + \frac{\gamma}{3v^2} \frac{\partial v^2 g_1^0(z,v)}{\partial v} + \frac{v}{3} \alpha^{(0)}(z) g_1^0(z,v) + V(v) g_0^0(z,v) = NJ(g_0^0(z,v)) \quad \text{III-25(a)}$$

$$v \frac{\partial g_0^0(z,v)}{\partial z} + \gamma \frac{\partial g_0^0(z,v)}{\partial v} + v \alpha^{(0)}(z) g_0^0(z,v) + V(v) g_1^0(z,v) = 0 \quad \text{III-25(b)}$$

Les équations (III-24a) et (III-24b) ainsi que les équations (III-25a) et (III-25b) forment un système de deux équations aux dérivées partielles du premier ordre en t (ou en z) et du second en v (à cause du terme de peuplement).

Dans le système (III-24) (ou III-25) à deux inconnues $\phi_0^0(\mathbf{v}, t)$ et $\phi_1^0(\mathbf{v}, t)$ ou $g_0^0(z, \mathbf{v})$ et $g_1^0(z, \mathbf{v})$ la fréquence d'ionisation effective ($\Omega^{(0)}(t)$) ou le coefficient d'ionisation effective $\mathcal{A}^{(0)}(z)$ est un terme non-linéaire parce qu'il dépend lui même de la partie isotrope de la fonction de distribution cherchée. Cependant, comme la méthode numérique utilisée est itérative ceci ne pose aucun problème pour obtenir la solution cherchée. Nous allons décrire dans ce qui suit la méthode utilisée pour résoudre numériquement ce système.

III.1.6 Méthode de résolution numérique :

Dans le cas des systèmes d'équations (III-24) et (III-25), les solutions $\phi_0^0(\mathbf{v}, t)$ et $\phi_1^0(\mathbf{v}, t)$ (resp $g_0^0(z, \mathbf{v})$ et $g_1^0(z, \mathbf{v})$) sont étroitement couplées. Ces systèmes sont résolus par une méthode numérique aux différences finies.

Dans le cas du système (III-24), la discrétisation des opérateurs $\frac{\partial}{\partial t}$ et $\frac{\partial}{\partial z}$ est effectuée en divisant les domaines de définition \mathbf{D}_t pour la variable « t » et \mathbf{D}_v pour la variable « v » en « nt » et « nv » intervalles :

$$\begin{aligned} \mathbf{D}_t &= [0, t_{\max}] = \{t_0, t_1, \dots, t_{k-1}, t_k, t_{k+1}, \dots, t_{nt} = t_{\max}\} \\ \mathbf{D}_v &= [0, v_{\max}] = \{v_0, v_1, \dots, v_{k-1}, v_k, v_{k+1}, \dots, v_{nv} = v_{\max}\} \end{aligned}$$

Ensuite sur un intervalle de temps donné ($t \in [t_k, t_{k+1}]$), l'équation (III-24b) peut aussi s'écrire sous la forme classique d'une équation du premier ordre en « t » avec second membre dépendant de « t » :

$$\frac{\partial \phi_1^0(\mathbf{v}, t)}{\partial t} + \phi_1^0(\mathbf{v}, t) (\Omega^{(0)}(t) + \mathcal{V}(\mathbf{v})) = -\gamma \frac{\partial \phi_0^0(\mathbf{v}, t)}{\partial v} \quad \text{III-26}$$

Si on suppose que le membre de droite de cette équation est constant dans l'intervalle de temps $[t_k, t_{k+1}]$, sa résolution permet d'avoir $\phi_1^0(\mathbf{v}, t)$ qui s'écrit à l'instant t_{k+1} :

$$\begin{aligned} \phi_1^0(\mathbf{v}, t_{k+1}) &= (\phi_1^0(\mathbf{v}, t_k) + X) Y - X \\ X &= \frac{i}{\Omega(\mathbf{v}, t_{k+1/2}) V_e} \left(\frac{\partial \phi_0^0(\mathbf{v}, t_k)}{\partial v} + \frac{\partial \phi_0^0(\mathbf{v}, t_{k+1})}{\partial v} \right) \\ \text{et} \quad Y &= \exp\left(-V_e E(t_{k+1/2}) \bar{\Omega}(\mathbf{v}; t_{k+1/2}) \Delta t\right) \end{aligned} \quad \text{III-27}$$

$V_e = \sqrt{\frac{2e}{m}}$ est la vitesse d'un électron qui à une énergie égale à un électron-Volt.

Ensuite, la relation ci-dessus est injectée dans l'équation (III-24a), il vient :

$$\begin{aligned} & \frac{4v_2}{V_e^2 E(t_{k+1})} \frac{\phi_0^0(v, t_{k+1})}{\Delta t} + \frac{1}{3} \frac{\partial}{\partial v} \left(\frac{v_2}{2\Omega(v, t_{k+1})} \frac{\partial \phi_0^0(v, t_{k+1})}{\partial v} (Y-1) \right) + \frac{4}{V_e^2} v_2 \phi_0^0(v, t_{k+1}) \bar{\Omega}(v, t_{k+1}) \\ & = \frac{4v_2}{V_e^3 E(t_{k+1})} NJ(\phi_0^0(v, t_{k+1})) + \frac{2\Omega(v, t_{k+1}) \phi_0^0(v, t_k)}{4v_2 \Delta t} \end{aligned} \quad \text{III-28}$$

C'est cette dernière équation valable dans l'intervalle $[t_k, t_{k+1}]$ qui va donc être résolue par une méthode numérique aux différences finies en faisant varier progressivement l'indice k de 0 à nt .

Comme l'équation (III-28) est du premier ordre dans le temps, elle est résolue dans ce travail à l'aide d'un schéma numérique explicite selon « t », autrement dit, la solution à l'instant t_{k+1} dépend uniquement de la solution à l'instant t_k . Par contre, elle est résolue suivant un schéma numérique implicite selon « v » puisque l'opérateur différentiel agit selon v au niveau du premier et du second ordre. Après avoir discrétisé l'équation (III-28) suivant « t » et « v », on obtient une fonction de la forme suivante :

$$a_i \phi_0^0(v_{i-1}, t_{k+1}) + b_i \phi_0^0(v_i, t_{k+1}) + c_i \phi_0^0(v_{i+1}, t_{k+1}) = d_i \quad \text{III-29}$$

Si $k = 1$ $\phi_0^0(v, t_1)$ est connue à partir des conditions initiales.

A l'instant t_{k+1} lorsque l'indice « i » varie de 0 à « nt », on obtient un système linéaire de « $nt+1$ » équations dont la matrice principale est tri diagonale. Un tel système est numériquement résolu à l'aide d'un schéma numérique classique (algorithme de Thomas[82]) déduit de la méthode d'élimination de Gauss[83]. Les conditions aux limites qui doivent être obligatoirement connues a priori sont données par :

$$\frac{\partial \phi_0^0(v, t)}{\partial v} = 0 \quad \text{si } v = 0 \quad \text{et} \quad \phi_0^0(v, t) = 0 \quad \text{si } v = v_{max} \quad \text{III-30}$$

En fait, la solution $\phi_0^0(v, t)$ de l'équation (III-28) est obtenue par itération à cause du terme de droite de cette équation qui dépend de $\phi_0^0(v, t)$ et aussi à cause du terme non-linéaire $\Omega^{(0)}(t)$. Pour un instant donné « t », la fonction de distribution $\phi_0^0(v, t)$ est supposée connue à

la première itération (distribution maxwellienne par exemple). Cela permet donc d'avoir une première approximation des termes non-linéaires de cette équation

($\Omega_{(0)}(t)$ Est une partie du terme de peuplement).

La solution obtenue de cette manière est ensuite utilisée pour une nouvelle approximation des termes non-linéaires. Cette procédure est répétée jusqu'à la convergence de la solution cherchée. Ensuite, on procède de la même manière à l'instant suivant. A la fin des calculs, la fonction $\phi_0^0(\mathbf{v}, t)$ et également la fonction $\phi_1^0(\mathbf{v}, t)$ seront connues dans tout le domaine de variation défini ci-dessus.

Pour le système (III-25), on ne s'intéresse qu'à la résolution numérique dans un cas homogène ($\partial/\partial z = 0$) (le cas non-homogène peut être traité à l'aide de la méthode de Monte Carlo [79] développée dans le chapitre suivant). Dans ces conditions, le système d'équations (III-25) donne une équation du type équation (III-28) mais qui ne dépend que de la vitesse \mathbf{v} col [76]

La méthode numérique utilisée est pratiquement la même que celle déjà décrite précédemment.

Comme on peut le voir sur les équations établies dans ce paragraphe, le calcul de la fréquence macroscopique d'ionisation effective $\Omega_{(0)}$ ou du coefficient d'ionisation effective $\alpha^{(0)}$ est nécessaire à cette résolution. La partie de $\Omega^{(\theta)}$ ou $\alpha^{(\theta)}$ qui caractérise les processus d'ionisation directe est calculée à partir de la partie isotrope de la fonction de distribution et des sections efficaces d'ionisation électron-atome. Par exemple :

$$\omega_{ig}^{ion}(t) = N_{ig} \int_0^{\infty} v Q_{ion}^{ig}(v) \phi_0^0(v, t) v^2 dv \quad \text{III-31}$$

$\omega_{ig}^{ion}(t)$ est la fréquence macroscopique d'ionisation directe des atomes du gaz « ig ».

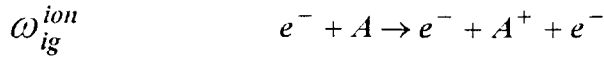
Par contre la partie de $\Omega^{(\theta)}$ ou $\alpha^{(\theta)}$, qui inclut les processus d'ionisation indirecte (effet Penning par exemple), nécessite la résolution des équations de continuité des particules qui participent à la création et à la disparition des électrons. Les particules concernées par ces processus sont les électrons et les atomes dans des états métastables.

III.1.7 Equations de continuité des espèces participant à l'ionisation et couplage avec l'équation de Boltzmann :

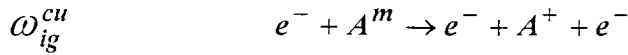
Les collisions qui contribuent directement ou indirectement à la création ou à la disparition d'électrons et d'atomes dans des états métastables sont représentées ci-dessous avec les fréquences macroscopiques de réaction qui leur correspondent :

A et B désignent respectivement un atome du gaz « ig » et un atome du gaz « jg ».

a- Ionisation directe :



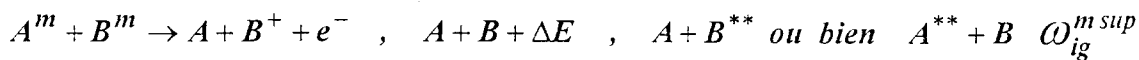
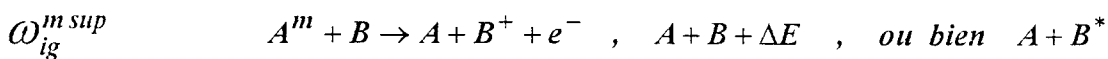
b - Ionisation par étape (ionisation cumulative) :



c- Apparition et disparition des atomes métastables :



d- Collisions atome-atome :



Les équations de continuité qui vont être résolues sont celles de $n_e(t)$ (nombre d'électrons) et ($N_{ig}^m(t)$) nombre d'atomes du gaz « ig » qui sont dans des états métastables).

Ces équations sont les suivantes :

$$\frac{dn_e(t)}{dt} = \omega_d(t)n_e(t) + \sum_{ig=1}^{ng} N_{ig}^m(t)\omega_{ig}^{sec}(t) \quad \text{III-32(a)}$$

$$\frac{dN_{ig}^m(t)}{dt} = \omega_{ig}^{mcs}(t)n_e(t) - \omega_{ig}^{dis}(t)N_{ig}^m(t) \quad \text{III-32(b)}$$

$\omega_d(t)$ est la fréquence totale d'ionisation effective électron-atome dans le mélange des « ng » gaz.

$$\omega_d(t) = \sum_{ig=1}^{ng} \left(\omega_{ig}^{ion}(t) + \omega_{ig}^{cu}(t) \right)$$

ω_{ig}^{sec} est la fréquence totale d'ionisation secondaire, par un atome du gaz « ig » dans un état métastable, des atomes des « ng » gaz dans leurs états fondamentaux et métastables.

$$\omega_{ig}^{sec}(t) = \sum_{jg=1}^{ng} \left(X_{ig-jg}^{mm} \omega_{ig-jg}^{mm}(t) + X_{ig-jg}^{pen} \omega_{ig-jg}^{pen}(t) \right)$$

X_{ig-jg}^{mm} et X_{ig-jg}^{pen} constantes qui prennent les valeurs 0 ou 1.

ω_{ig}^{mcs} est la fréquence de création et de destruction des états métastables d'un atome du gaz «ig» par collision électron-atome : Excitation vers un niveau métastable, ionisation cumulative et collision super-élastique. $\omega_{ig}^{mcs}(t) = \omega_{ig}^{met}(t) - \omega_{ig}^{cu}(t) - \omega_{ig}^{msup}(t)$

$\omega_{ig}^{dis}(t)$ Est la fréquence totale de destruction de l'état métastable d'un atome du gaz «ig» par collision avec les atomes des «ng» gaz, dans leurs états fondamentaux ou métastables.

$$\omega_{ig}^{dis}(t) = \sum_{jg=1}^{ng} (\omega_{ig-jg}^{mm}(t) + \omega_{ig-jg}^{pen}(t))$$

L'équation (III-32a) exprime la création et la disparition des électrons, dans un volume infini, par les divers processus collisionnels discutés.

L'équation (III-32b) exprime la création et la disparition, dans un volume infini, des états métastables des atomes de chaque gaz «ig», par divers types de collisions.

Comme on l'a vu dans le paragraphe (III.1.5), le but est le calcul des rapports $\frac{N_{ig}^m(t)}{n_e(t)}$ dont

la connaissance est indispensable à l'opérateur de collision atome-atome J_{at-at} de l'équation de Boltzmann. Pour cela, on divise d'abord l'équation (III-32a) par $n_e(t)$, ce qui donne l'expression de $\Omega^{(0)}(t)$:

$$\Omega^{(0)}(t) = \frac{1}{n_e(t)} \frac{dn_e(t)}{dt} = \omega_d(t) + \sum_{ig=1}^{ng} \frac{N_{ig}^m(t)}{n_e(t)} \omega_{ig}^{sec}(t) \quad \text{III-33}$$

Ensuite, on divise l'équation (III-32b) par $n_e(t)$:

$$\frac{1}{n_e(t)} \frac{dN_{ig}^m(t)}{dt} = \omega_{ig}^{mcs}(t) - \omega_{ig}^{dis}(t) \frac{N_{ig}^m(t)}{n_e(t)} \quad \text{III-34}$$

posons $R_{ig}^m(t) = \frac{N_{ig}^m(t)}{n_e(t)}$, il vient alors :

$$\frac{1}{n_e(t)} \frac{dN_{ig}^m(t)}{dt} = \frac{dR_{ig}^m(t)}{dt} + \frac{N_{ig}^m(t)}{n_e^2(t)} \frac{dn_e(t)}{dt} = \frac{dR_{ig}^m(t)}{dt} + R_{ig}^m(t) \Omega^{(0)}(t)$$

De cette transformation on obtient l'équation qui vérifie $R_{ig}^m(t)$:

$$\frac{dR_{ig}^m(t)}{dt} + R_{ig}^m(t) \Omega^{(0)}(t) = \omega_{ig}^{mcs}(t) - \omega_{ig}^{dis}(t) R_{ig}^m(t) \quad \text{III-35}$$

Ce qui donne finalement :

$$\frac{dR_{ig}^m(t)}{dt} + R_{ig}^m(t)\Omega^{(\theta)}(t) + \omega_{ig}^{dis}(t) = \omega_{ig}^{mcs}(t) \quad \text{III-36}$$

De la même manière que l'équation de Boltzmann (I-9b), la résolution de cette équation s'effectue en supposant que les coefficients de cette équation différentielle du premier ordre ($\Omega^{(\theta)}$, ω_{ig}^{dis} et ω_{ig}^{mcs}) sont constants dans chaque intervalle de temps $[t_k, t_{k+1}]$.

Cette hypothèse est justifiée, puisque cette résolution est faite en parallèle avec l'équation de Boltzmann, c'est à dire que ces équations de continuité sont couplées à cette dernière, et que la résolution numérique se fait entre deux instants t_k et t_{k+1} . Si $t \in [t_k, t_{k+1}]$, la solution de l'équation (III-36) s'écrit :

$$R_{ig}^m(t) = \frac{\omega_{ig}^{mcs}}{\Omega^{(\theta)} + \omega_{ig}^{dis}} + \left(R_{ig}^m(t_k) - \frac{\omega_{ig}^{mcs}}{\Omega^{(\theta)} + \omega_{ig}^{dis}} \right) \exp\left(-(\Omega^{(\theta)} + \omega_{ig}^{dis})(t - t_k)\right) \quad \text{III-37}$$

On voit que pour calculer $R_{ig}^m(t)$, il faut connaître les différentes fréquences de collisions électron-atome. Comme l'équation de Boltzmann est résolue par itération, le calcul des fréquences de collisions électron-atome qui dépendent de la fonction de distribution cherchée ne pose aucun problème de principe lors du couplage de l'équation ci-dessus avec l'équation de Boltzmann.

Il est intéressant de remarquer que si « t » tend vers l'infini, c'est à dire, si l'équilibre est définitivement atteint (régime hydrodynamique), alors l'expression du rapport $\frac{N_{ig}^m(t)}{n_e(t)}$ devient :

$$R_{ig}^m(t) = \frac{\omega_{ig}^{mcs}}{\Omega^{(\theta)} + \omega_{ig}^{dis}}$$

et évidemment $\Omega^{(\theta)}$ garde son expression qui est :

$$\Omega^{(\theta)} = \omega_d + \sum_{ig=1}^{ng} R_{ig}^m \omega_{ig}^{sec}$$

Avant de tester la méthode de résolution de l'équation de Boltzmann proposée dans ce chapitre, nous décrivons ce qui suit dans la résolution de cette même l'équation par la méthode de Monte Carlo[79].

III.2. Simulation par la méthode de Monte-Carlo

III.2.1 INTRODUCTION:

Dans le chapitre précédent, on a décrit la méthode de calcul des fonctions de distribution des électrons par résolution directe de l'équation de Boltzmann. Ceci nous a permis de prendre en compte les principaux processus collisionnels susceptibles de modifier de façon plus ou moins importante la fonction de distribution. D'un point de vue numérique, l'équation de Boltzmann a été résolue dans le cas d'un milieu homogène ($\partial/\partial r = 0$) et stationnaire ou non. Les informations apportées par les fonctions de distribution dans ces deux cas sont très utiles (simulation des expériences classiques de mesure des paramètres de transport, étude des régimes transitoires des décharges, etc...). Cependant les limites de ces informations sont atteintes dès que l'on s'intéresse à l'évolution spatiale ou, ce qui est encore plus complexe, à l'évolution spatio-temporelle des fonctions de distribution.

Or, il y a des décharges qui ne peuvent être décrites que si on tient compte du régime hors-équilibre dans l'espace temps et position. Par exemple, on peut citer le cas des régimes transitoires des plasmas proches des parois : gaines cathodiques de décharge FR utilisées pour la gravure et le dépôt de couches minces par plasma, lampes à décharge basse pression fonctionnant dans des tubes super-étroits, etc...

Il faut savoir que la prise en compte du non-équilibre spatio-temporel est beaucoup plus facile à l'aide de la méthode de Monte Carlo, que par la méthode de résolution directe de l'équation de Boltzmann. En effet, dès lors que la simulation par la méthode de Monte Carlo du mouvement des électrons est terminée, toutes les informations spatiales (suivant les directions x , y et z) et temporelles sont directement disponibles.

III.2.1. Résolution de l'équation de Boltzmann par la méthode de Monte Carlo

Cependant, dans le cas des méthodes de type Monte Carlo, certains processus collisionnels (interactions coulombiennes, par exemple) souvent négligé dans la littérature peuvent jouer un rôle important dans les plasmas qui nous intéressent.

L'objectif de ce chapitre est donc tout simplement de développer une méthode de simulation statistique de Monte Carlo capable d'inclure le traitement des processus électron-électron en même temps que les interactions classiques entre les électrons et les atomes sur le niveau fondamental ou excité (collisions inélastiques, super-élastiques, surexcitation et ionisation par étape). Il faut souligner que les processus d'agitation thermique dont l'influence augmente au fur et à mesure que le champ électrique diminue sont également pris en compte dans ce travail.

III.2.2 Généralités sur la méthode de MONTE CARLO :

Le développement systématique de la méthode de Monte Carlo et son usage intensif ne sont pas récents. En effet, c'est à partir de 1944, dans le domaine de la neutronique, que les méthodes de Monte Carlo ont connu un véritable essor et continuent jusqu'à présent à avoir une importance croissante. Cette importance est d'une part due à l'évolution de plus en plus rapide des calculateurs, et d'autre part à l'amélioration des techniques de Monte Carlo.

La méthode de Monte Carlo est basée sur les lois statistiques. En général, elle consiste à simuler un ensemble d'événements par un autre ensemble d'événements facilement réalisables, par exemple par des tirages de nombres aléatoires. Les nombres aléatoires sont en pratique générés sur ordinateur à l'aide de formules mathématiques simples. Ce sont en réalité des nombres pseudo-aléatoires, car la séquence de nombres générés est reproductible dès lors où elle est initialisée avec le même nombre «germe». Cette séquence est également périodique avec une période qui doit être la plus longue possible car pour une période donnée, la qualité du résultat recherché (avec peu de fluctuations statistiques par exemple) augmente en même temps que le nombre de tirages.

Les problèmes traités par la méthode de Monte Carlo sont nombreux et variés. Mais les deux principaux problèmes efficacement traités sont les calculs d'intégrales multiples et la simulation du mouvement de particules dans un fluide. La méthode de Monte Carlo, dans ces deux domaines d'application, est basée en fait sur une simple règle de simulation.

III.2.3 Simulation du mouvement des électrons dans un gaz.

III.2.3.1 Traitement des collisions électron-atome :

L'utilisation de la méthode de Monte Carlo pour l'étude du mouvement des électrons dans un gaz consiste à simuler, un par un, le mouvement d'un grand nombre d'électrons appelés «électrons tests». Dans son déplacement, un électron «test» suit une trajectoire entièrement déterminée par le champ de force appliqué, suivie d'un choc avec une particule du milieu. En fait, la simulation par la méthode de Monte Carlo nécessite tout simplement la connaissance de la trajectoire et de la vitesse de chaque électron à tout instant «t» et en tout point r de coordonnées x , y et z de l'espace des positions.

Par conséquent, partant d'un état initial r_0, v_0 à t_0 , ces électrons sont suivis dès leur émission jusqu'à leur disparition par collision ou par dépassement des limites spatiales ou temporelles fixées au début de la simulation en fonction des conditions de la décharge étudiée. Ces conditions peuvent correspondre, par exemple, à une distance inter-électrodes de longueur L ou un temps de relaxation t' . Au cours de cette simulation, on relève pour chaque électron les composantes de son vecteur position et de son vecteur vitesse en fonction du temps. La

connaissance de ces grandeurs permet ensuite, à l'aide de calculs des moyennes statistiques appropriées, de calculer la fonction de distribution et les paramètres de transport des électrons en fonction de la position et du temps.

Un électron donné est donc suivi depuis son émission (à partir de l'état initial ou par ionisation dans le gaz) jusqu'à sa disparition. Cet électron va effectuer toute une succession de mouvements «libres» ponctués par des collisions élastiques, inélastiques ou super-élastiques avec les atomes des gaz définis par les sections efficaces de collision.

Le temps de vol libre (durée du mouvement libre) est calculé par tirage d'un nombre aléatoire, tandis que la trajectoire de l'électron obéit aux lois de la mécanique classique. A l'expiration du temps de vol libre, l'électron effectue une collision qui modifie sa vitesse et sa direction. Les paramètres de collision (nature, angle de déviation, etc...) sont déterminés par des méthodes stochastiques tenant compte des sections efficaces de collision. Pour chaque électron, un certain nombre d'informations (composantes du vecteur vitesse, coordonnées de l'électron, etc) est stocké pour le calcul des fonctions de distribution et des paramètres de transport. La simulation cesse lorsque tous les électrons tests sont traités et lorsque les fluctuations statistiques deviennent acceptables. L'organigramme correspondant aux différentes étapes de la méthode de Monte Carlo telle qu'utilisée dans ce travail est représenté sur la figure III-1.

III.2.3. Calcul du temps de vol libre :

Pour établir une relation stochastique qui permet le calcul du temps de vol libre de l'électron, définissons d'abord les probabilités de vol libre et de collision. Soit $P(t)$ la probabilité pour qu'un électron partant d'un instant initial « t_0 » s'envole librement au moins jusqu'à l'instant « t ». Si $\nu_{tot}(t)$ représente la fréquence totale de collision, alors $\nu_{tot}(t)dt$ est la probabilité de collision dans l'intervalle de temps « dt ». Le complément à l'unité de cette probabilité de collision (c'est à dire $1 - \nu_{tot}(t)dt$) représente la probabilité de vol libre durant dt .

Dans ces conditions, la probabilité $P(t+dt)$ de vol libre entre t_0 et $t+dt$ peut être définie comme étant le produit des probabilités $P(t)$ (vol libre de t_0 à t) et $1 - \nu_{tot}(t)dt$ (vol libre de t à $t+dt$) :

$$P(t+dt) = P(t)(1 - \nu_{tot}(t)dt)$$

La différentielle $dP(t)$ est égale à $P(t+dt) - P(t)$, donc :

$$dP(t) = P(t+dt) - P(t) = -P(t)\nu_{tot}(t)dt$$

Ce qui donne : $\frac{dP(t)}{P(t)} = -V_{tot}(t)dt$

Si on intègre la relation ci-dessus entre t_0 , l'instant de la dernière collision, et l'instant t , la probabilité $P(t)$ s'écrit alors :

$$dP(t) = \exp\left(-\int_{t_0}^t V_{tot}(t')dt'\right) \tag{III-1'}$$

car $P(t_0)$ vaut 1 puisqu'une collision a déjà eu lieu à l'instant t_0 .

D'après la relation (III-1'), on remarque que la probabilité de vol libre $P(t)$ décroît lorsque le temps augmente à la limite si « t » tend vers l'infini, $P(t)$ tend vers zéro. Ce qui est logique car plus le temps s'écoule et plus la probabilité de collision de l'électron avec les particules du gaz augmente.

La relation (III-1') nous a permis d'établir une relation entre la fréquence totale de collision et la probabilité $P(t)$ de vol libre de l'instant de la dernière collision t_0 jusqu'à l'instant « t ». Le problème qui se pose est celui du calcul du temps de vol libre de l'électron, c'est à dire le temps qui s'écoulé entre deux collisions successives. Pour cela, on choisit un instant t_∞ beaucoup plus grand que t_0 de sorte qu'une collision puisse sûrement avoir lieu entre t_0 et t_∞ . Dans ces conditions, la probabilité p_{col} d'avoir la collision entre l'instant t et $t+dt$ ($t \in [t_0, t_\infty]$) est tout simplement égale au produit de la probabilité $P(t)$ déjà définie ci-dessus, par la probabilité d'avoir une collision durant l'intervalle de temps dt , c'est à dire $V_{tot}(t)dt$. Ce qui donne, en tenant compte des relations déjà établies :

$$p_{col} = P(t)V_{tot}(t)dt = P(t) - P(t + dt) \tag{III-2'}$$

Ensuite, pour déterminer p_{col} , on divise l'intervalle $[t_0, t_\infty]$ en un grand nombre de sous-intervalles de longueur dt :

A chaque sous intervalle « i » de durée « dt » nous associons une probabilité $p_{col,i}$.

D'après la relation (III-2'), les probabilités de collision $p_{col,i}$ peuvent s'exprimer de la manière suivante :

$$\begin{aligned} p_{col,0} &= P(t_0) - P(t_0 + dt) \\ p_{col,1} &= P(t_0 + dt) - P(t_0 + 2dt) \\ &\dots\dots\dots \\ p_{col,i} &= P(t_0 + idt) - P(t_0 + idt + dt) \\ &\dots\dots\dots \end{aligned}$$

Document téléchargé depuis www.pnst.cerist.dz CERIST

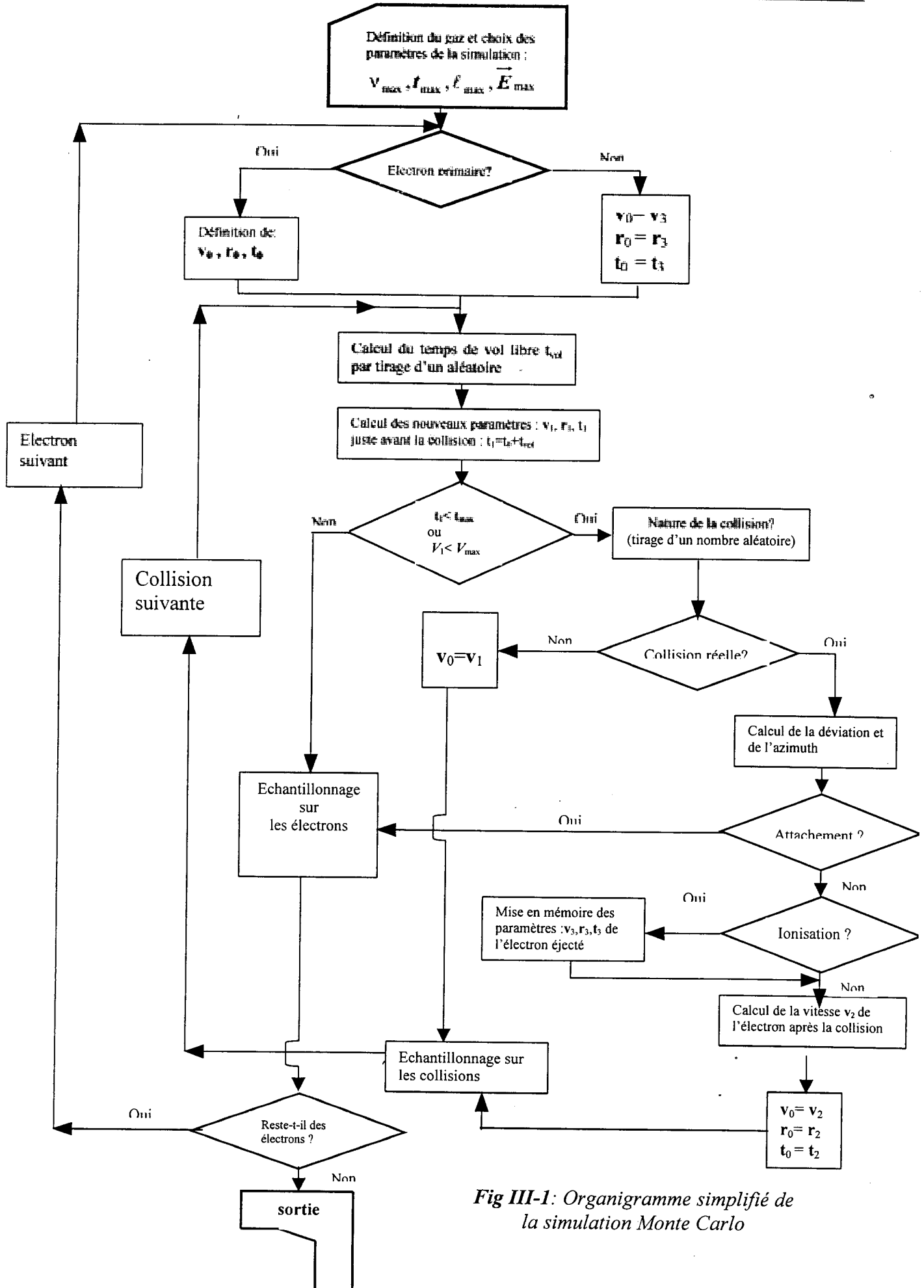


Fig III-1: Organigramme simplifié de la simulation Monte Carlo

Ainsi, le sous intervalle : $[P(t_0) - P(t_0 + idt), P(t_0) - P(t_0 + idt + dt)]$ devient, tout simplement, $[1 - P(t), 1 - P(t + dt)]$, puisque $t = t_0 + idt$ et $P(t_0) = 1$. Comme la collision a lieu entre «t » et «t+dt », alors la probabilité correspondante est comprise entre $1 - P(t)$ et $1 - P(t+dt)$.

Soit R_{vol} un nombre aléatoire qui suit une distribution uniforme entre 0 et 1. R_{vol} tombe dans le sous intervalle $[1 - P(t), 1 - P(t+dt)]$ [1], alors c'est l'événement qui correspond à l'instant «t » qui se produit, c'est à dire que la collision se produit entre l'instant t et $t+dt$. En plus, si on fait tendre dt vers zéro alors R_{vol} tend vers $1 - P(t)$. Ce qui nous permet de dire que la collision a lieu à l'instant t si R_{vol} est égal $1 - P(t)$.

On peut écrire en tenant compte de la relation (III-1') :

$$R_{vol} = 1 - P(t) = 1 - \exp\left(-\int_{t_0}^t V_{tot}(t) dt\right)$$

Ou encore :

$$1 - R_{vol} = \exp\left(-\int_{t_0}^t V_{tot}(t) dt\right)$$

puisque R_{vol} est une grandeur comprise entre 0 et 1, on peut écrire :

$$\text{Ln}(1 - R_{vol}) = -\int_{t_0}^t V_{tot}(t) dt$$

R_{vol} suit une distribution uniforme, il en est de même pour son complément à 1 (c'est à dire $1 - R_{vol}$). On peut remplacer $1 - R_{vol}$ par R_{vol} , et on obtient :

$$\boxed{-\text{Log}(R_{vol}) = \int_{t_0}^t V_{tot}(t) dt} \quad \text{III-3'}$$

Dans cette équation (III-3'), l'inconnue du problème est l'instant t de la collision. Ce dernier est donc déterminé à partir de la relation (III-3') qui établit un lien entre les instants de deux collisions successives (t_0 et t) et la fréquence totale de collision $V_{tot}(v(t))$. Une solution analytique de cette équation n'est envisageable que dans des cas bien particuliers de certains gaz modèles où la fréquence totale de collision a une expression analytique simple. Malheureusement dans les gaz réels, la fréquence totale de collisions électron-atome varie de façon complexe en fonction de la vitesse $v(t)$, et une solution analytique de l'équation (III-3') est à exclure.

Dans ces conditions, le temps de vol ($t-t_0$) peut être obtenu par la résolution numérique de l'équation (III-3'). L'utilisation de cette méthode directe est très compliquée. Pour contourner ce problème, une autre méthode a été proposée par Skullerud [62] en 1968 dans le cas des interactions ion-atome, c'est la méthode des collisions nulles. Cette méthode permettant de simplifier considérablement le calcul du temps de vol, a été appliquée depuis par de nombreux auteurs dans le cas des électrons. Elle consiste à supposer que la fréquence totale de collisions est constante (pour permettre une solution analytique à l'équation (III-3')) en introduisant un nouveau type de collisions dites «collisions nulles». Ces dernières sont des collisions fictives qui n'ont aucun effet sur la trajectoire de l'électron, ni sur sa vitesse. La fréquence de collisions $\nu_{fc}(v)$ associée à ces collisions fictives supplémentaires est choisie de telle sorte que la fréquence de l'ensemble des collisions considérées (collisions nulles incluses) soit toujours constante quelle que soit la vitesse v de l'électron, autrement dit :

$$\nu_{cte}(v) = \nu_{tot}(v) + \nu_{fc}(v) = \text{const}$$

Dans ce cas, l'équation (III-3') devient :

$$-\text{Log}(R_{vol}) = \nu_{cte} \times (t - t_0) = t_{vol} \nu_{cte} \quad \text{ou bien} \quad t_{vol} = -\frac{\text{Log}(R_{vol})}{\nu_{cte}} \quad \text{III-4'}$$

Le temps de vol libre t_{vol} se calcule à l'aide de la relation (III-4') après avoir tiré un nombre aléatoire R_{vol} .

III.2.4. Equation du mouvement libre de l'électron :

Une fois que l'on connaît l'instant de la collision qui suit à l'aide de la relation (III-4'), se pose alors le problème de la détermination de la trajectoire de l'électron au cours de son mouvement libre.

Entre deux collisions successives, l'électron test est soumis à l'action des forces extérieures. Dans ce travail, ce sont uniquement les forces dues au champ électrique E qui sont considérées (on suppose que E n'a que la composante E_z). Les lois de mouvement qui sont utilisées ici sont celles de la mécanique classique. Ainsi, la force F qui s'exerce sur un électron de masse m_e , de charge e et animé d'une vitesse v , s'écrit :

$$F = m_e \frac{dv}{dt} = -eE$$

avec $F_x = 0 = m_e \frac{dv_x}{dt}$ $F_y = 0 = m_e \frac{dv_y}{dt}$ $F_z = eE_z = m_e \frac{dv_z}{dt}$

La variation de la vitesse s'obtient par intégration entre t_0 et t_1 des équations ci-dessus. t_0 et t_1 sont les instants de deux collisions successives. Sachant qu'à l'instant initial t_0 , les composantes de la vitesse initiale \mathbf{v}_0 sont $v_{x,0}$, $v_{y,0}$ et $v_{z,0}$, les composantes de la vitesse \mathbf{v}_1 à l'instant t_1 de la collision s'écrivent :

$$v_{x,1} = v_{x,0} \quad v_{y,1} = v_{y,0} \quad v_{z,1} = v_{z,0} + \frac{eE_z}{m_e}(t_1 - t_0) = v_{z,0} + \frac{eE_z}{m_e}t_{vol}$$

A l'instant initial t_0 , l'électron test se trouve dans la position r_0 de composantes x_0 , y_0 et z_0 . Les coordonnées (x_1 , y_1 et z_1) de sa position à l'instant t_1 sont obtenues par intégration de la vitesse entre t_0 et t_1 puisque $\frac{dr}{dt} = v$:

$$x_1 = x_0 + (t_1 - t_0)v_{x,0}, \quad y_1 = y_0 + (t_1 - t_0)v_{y,0} \quad \text{et} \quad z_1 = z_0 + (t_1 - t_0)v_{z,0} + \frac{1}{2} \frac{eE_z}{m_e}(t_1 - t_0)^2$$

III.2.5. Détermination de la nature de la collision :

A l'instant t_1 , l'électron test va donc effectuer une collision. On connaît, d'après les équations du mouvement, la vitesse \mathbf{v}_1 et la position r_1 de cet électron juste avant la collision, c'est à dire à l'instant t_1 . Maintenant, le problème est de calculer la vitesse de l'électron juste après la collision. Pour cela, il est indispensable de connaître la nature de la collision.

Par hypothèse, on considère que la position de l'électron juste après la collision est la même que celle avant la collision, car la collision est locale et également quasi-instantanée puisque sa durée est de l'ordre de 10^{-4} seconde. Par conséquent, au cours du choc seule la vitesse peut changer en module et en direction (déviation de l'électron) selon le type de collision effectuée.

Dans le cas qui nous intéresse dans ce paragraphe, la collision électron-atome qui se produit peut être une collision élastique, inélastique, super-élastique ou fictive.

Chacun de ces types de collisions a une probabilité de se produire qui est proportionnelle à sa fréquence. Il est donc nécessaire de connaître les expressions des fréquences correspondantes, pour pouvoir ensuite calculer les probabilités associées à chaque type.

Nous avons vu que la fréquence totale de collisions est la somme de la fréquence totale des collisions réelles $\nu_{e-at}(\nu)$ et de la fréquence des collisions nulles $\nu_{fic}(\nu)$.

$$\nu_{te} = \nu_{e-at}(\nu) + \nu_{fic}(\nu) = \text{const}$$

Dans le cas d'un milieu gazeux composé par un mélange de «ng» gaz, la fréquence des collisions réelles $\nu_{e-at}(\nu)$ s'écrit :

$$v_{e-at}^{ig} = \sum_{ig=1}^{ng} v_{e-at}^{ig}$$

où v_{e-at}^{ig} est la fréquence totale de collision entre un électron et un atome du gaz «ig».

Cet atome peut être soit dans un état fondamental soit dans un état excité. Le calcul de cette fréquence de collisions nécessite la connaissance préalable de la densité partielle des atomes (à l'état fondamental N_{ig} et excité N_{ig}^j) et des sections efficaces correspondant à chaque processus collisionnel. Ces densités et sections efficaces font partie des données du problème.

$v_{e-at}^{ig}(v)$ s'écrit :

$$v_{e-at}^{ig}(v) = N_{ig} v_{e-at}^{ig} \left(Q_{el}^{ig}(v_{e-at}^{ig}(v)) + \sum_{j=1}^{nex} Q_j^{ig}(v_{e-at}^{ig}(v)) + Q_{ion}^{ig}(v_{e-at}^{ig}(v)) \right) \quad III-5'$$

$$+ \sum_{j=1}^{nex} N_{ig}^j v_{e-at_j}^{ig} \left(Q_{jsup}^{ig}(v_{e-at_j}^{ig}(v)) + Q_{jcu}^{ig}(v_{e-at_j}^{ig}(v)) \right)$$

$v_{e-at}^{ig}(t)$ est la vitesse relative entre l'électron incident (électron test), et l'atome du gaz «ig» dans son état fondamental.

$v_{e-at_j}^{ig}(t)$ est la vitesse relative entre cet électron et l'atome du gaz «ig» excité sur le niveau discret «j».

La vitesse relative entre un électron et un atome (excité ou non) est voisine de celle de l'électron. Puisque la vitesse de l'électron incident est généralement beaucoup plus grande que celle des atomes cibles on peut donc écrire :

$$v_{e-at}^{ig}(t) = v_{e-at_j}^{ig}(t) = v(t)$$

Une fois connues les fréquences de collisions réelles correspondant aux différents processus électron-atome considérés, la probabilité de collision avec l'atome du gaz «ig» de type «j» (l'indice j désigne maintenant le type de collision) est calculée à l'aide de la relation suivante :

$$P_j^{ig} = \frac{V_j^{ig}(v(t_1))}{V_{cte}} \quad III-6'$$

tandis que la probabilité de la collision nulle s'écrit :

$$P_{nulle} = \frac{V_{nulle}(v(t_1))}{V_{cte}} = \frac{V_{cte} - \sum_{ig} \sum_j V_j^{ig}(t_1)}{V_{cte}} = 1 - \sum_{ig} \sum_j P_j^{ig} \quad III-7'$$

$$R_\chi = \frac{\int_0^\chi Q(v, \chi) \sin \chi d\chi}{\int_0^\pi Q(v, \chi) \sin \chi d\chi} \quad \text{III-8'a}$$

χ est l'angle de déviation de l'électron après le choc ; suit une distribution suivant la section efficace différentielle.

$Q(x, \chi)$: section efficace différentielle.

$$\text{et } R_\psi = \frac{\int_0^\psi d\psi}{2\pi} \implies \psi = 2\pi R_\psi \quad \text{III-8'b}$$

ψ angle azimutal de l'électron après le choc suit une distribution uniforme.

Si on connaît la section efficace différentielle, alors on peut calculer l'angle de déviation χ à l'aide de la méthode numérique, mais le temps de calcul est beaucoup plus long. Cependant, dans le cas où la déviation serait supposée isotrope, on peut calculer χ à partir de :

$$R_\chi = \int_0^\chi \frac{1}{2} \sin \chi d\chi = \frac{1}{2} (-\cos \chi) \Big|_0^\chi \implies \cos \chi = 1 - 2R_\chi$$

R_χ, R_ψ : sont des nombres aléatoires.

a) Collision élastique :

La connaissance des deux angles χ et ψ , et l'utilisation des lois de conservation de la quantité de mouvement et de l'énergie, permettent de calculer les composantes du vecteur vitesse de l'électron après la collision.

Lors des collisions élastiques électron-atome, les échanges énergétiques sont généralement faibles par rapport aux énergies mises en jeu. Le traitement de ces collisions peut être effectué en négligeant la vitesse des atomes cibles. La relation classique permettant le calcul de l'énergie E_1 de l'électron après le choc s'obtient donc à partir de :

$$E_1 = E_i \left\{ 1 - 2 \frac{m_e}{M} (1 - \cos \chi) \right\} \quad \text{III-9'}$$

Cependant, dans le cas où l'énergie des électrons incidents est plus ou moins proche de l'énergie des atomes cibles, c'est à dire lorsque le champ électrique mis en jeu est relativement faible voire même nul (étude de la thermalisation des électrons dans un milieu gazeux), la relation ci-dessus donnant l'énergie de l'électron diffusé par un choc élastique n'est plus valable. Il est nécessaire de tenir compte de la vitesse des atomes cibles afin de rendre compte

correctement des phénomènes de thermalisation ou proches de la thermalisation des électrons. Par conséquent, les composantes de la vitesse v_1' dans le repère du laboratoire juste après la collision élastique, sont calculées à l'aide des relations [79].

$$v_1' = v_{x1}' i + v_{y1}' j + v_{z1}' k$$

b) Collisions inélastiques et super-élastiques conservatrices :

Il s'agit des collisions qui conduisent soit à l'excitation des atomes (perte d'énergie), soit à leur désexcitation (gain d'énergie). Lors de ces collisions, seules les énergies échangées par excitation ou par désexcitation (collisions super-élastiques) sont prises en compte, puisque généralement elles sont beaucoup plus grandes que les échanges d'énergie dus à la diffusion qui sont de l'ordre des rapports des masses m_e/M . Les pertes d'énergie par excitation ou les gains par désexcitation sont égaux aux énergies des niveaux excités considérés, le module du vecteur vitesse v_1' de l'électron juste après la collision se déduit de l'une des deux relations suivantes [2]:

$$\frac{1}{2} m_e v_1'^2 = \frac{1}{2} m_e v_1^2 - \Delta E_{ex} \quad \text{pour une excitation.} \quad \text{III-10}$$

$$\frac{1}{2} m_e v_1'^2 = \frac{1}{2} m_e v_1^2 + \Delta E_{ex} \quad \text{pour une collision super-élastique}$$

Connaissant le module v_1' de la vitesse de l'électron après la collision inélastique conservatrice ou la collision super-élastique, et connaissant également la direction de cette vitesse dans le repère de la collision (angles χ et ψ), les composantes de v_1' dans le repère du laboratoire sont ensuite obtenues à partir des relations des transformations classiques d'Euler :

$$\begin{aligned} v_{x1}' &= v_1' \{ \sin \chi \cos \psi \sin \varphi_1 + \sin \chi \sin \psi \cos \theta_1 \cos \varphi_1 + \cos \chi \sin \theta_1 \cos \varphi_1 \} \\ v_{y1}' &= v_1' \{ -\sin \chi \cos \psi \cos \varphi_1 + \sin \chi \sin \psi \cos \theta_1 \sin \varphi_1 + \cos \chi \sin \theta_1 \sin \varphi_1 \} \\ v_{z1}' &= v_1' \{ -\sin \chi \sin \psi \sin \theta_1 + \cos \chi \cos \theta_1 \} \end{aligned}$$

θ_1 et φ_1 sont les angles polaires et azimutaux du vecteur v_1 juste avant le choc dans le repère du laboratoire.

c) Collisions inélastiques non-conservatrices (ionisation) :

Dans le cas particulier d'une ionisation simple, l'électron incident d'énergie E_1 cède à l'atome cible une énergie égale au seuil d'ionisation E_{ion} . L'énergie résiduelle $E_1 - E_{ion}$ est répartie entre l'électron diffusé et l'électron éjecté. Cette répartition dépend de la section efficace différentielle d'ionisation $Q_{ion}(E_1, E)$. L'énergie de l'un des deux électrons s'obtient par simple tirage d'un électron aléatoire R_{ion} à partir de la relation ci-dessous où l'inconnue est l'énergie de

l'électron éjecté E_{ej} . Mais cette inconnue aurait pu très bien être l'énergie de l'électron diffusé E_1' car les deux électrons issus du choc ionisant sont indiscernables :

$$R_{ion} = \frac{\int_0^{E_{ej}} Q_{ion}(E_1, E) dE}{Q_{ion}(E_1)} \quad \text{III-11'}$$

$Q_{ion}(E_1)$ représente la section efficace intégrale d'ionisation :

$$Q_{ion}(E_1) = \frac{E_1 - E_{ion}}{2} \int_0^{E_1 - E_{ion}} Q_{ion}(E_1, E) dE \quad \text{III-12'}$$

L'énergie de l'autre électron issue de l'ionisation (E_1' l'énergie de l'électron diffusé) est le complément par rapport à l'énergie résiduelle $E_1 - E_{ion}$.

$$E_1' = E_1 - E_{ion} - E_{ej}$$

On suppose que :

$Q_{ion}(E_1, E) = C(E_1)$ où $C(E_1)$ est fonction uniquement de l'énergie incidente. La section efficace d'ionisation intégrale s'écrit :

$$Q_{ion}(E_1) = C(E_1) \frac{E_1 - E_{ion}}{2}$$

La relation (III-11') devient donc : $R_{ion} = 2 \frac{E_{ej}}{E_1 - E_{ion}}$

Les énergies de l'électron diffusé et de l'électron éjecté se calculent donc à l'aide des deux relations suivantes :

$$E_{ej} = R_{ion} \frac{E_1 - E_{ion}}{2} \quad \text{et} \quad E_1' = E_1 - E_{ion} - E_{ej} \quad \text{III-13'}$$

Connaissant donc le module et la direction des vitesses des deux électrons secondaires dans le repère de la collision, et en utilisant les relations classiques d'Euler les composantes des deux vecteurs \mathbf{v}_{ej} et \mathbf{v}_1' sont donc données par :

$$v_{x1}' = v_1' \{ \sin \chi \cos \psi \sin \phi_1 + \sin \chi \sin \psi \cos \theta_1 \cos \phi_1 + \cos \chi \sin \theta_1 \cos \phi_1 \}$$

$$v_{y1}' = v_1' \{ -\sin \chi \cos \psi \cos \phi_1 + \sin \chi \sin \psi \cos \theta_1 \sin \phi_1 + \cos \chi \sin \theta_1 \sin \phi_1 \}$$

$$v_{z1}' = v_1' \{ -\sin \chi \sin \psi \sin \theta_1 + \cos \chi \cos \theta_1 \}$$

et en posant $\chi_{ej} = \chi + \pi/2$:

$$v_{éjx1} = v_{éj} \{ \sin \chi_{éj} \cos \psi \sin \phi_1 + \sin \chi_{éj} \sin \psi \cos \theta_1 \cos \phi_1 + \cos \chi_{éj} \sin \theta_1 \cos \phi_1 \}$$

$$v_{éjy1} = v_{éj} \{ -\sin \chi_{éj} \cos \psi \cos \phi_1 + \sin \chi_{éj} \sin \psi \cos \theta_1 \sin \phi_1 + \cos \chi_{éj} \sin \theta_1 \sin \phi_1 \}$$

$$v_{éjz1} = v_{éj} \{ -\sin \chi_{éj} \sin \psi \sin \theta_1 + \cos \chi_{éj} \cos \theta_1 \}$$

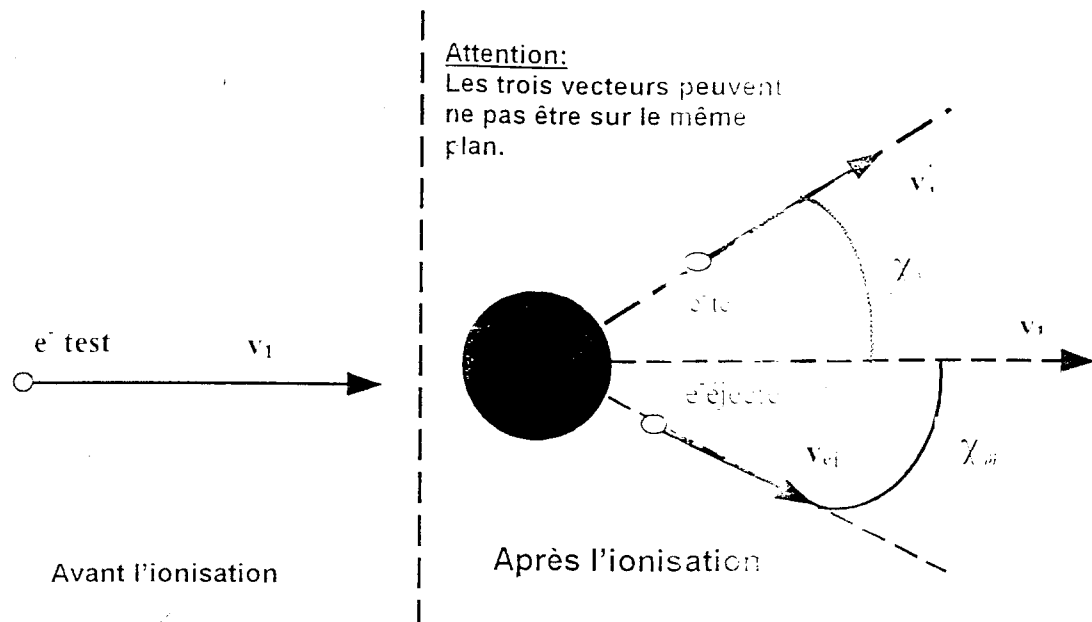


Figure III-2 : représentation schématique d'une ionisation par impact électronique.

Maintenant quelle que soit la nature de la collision survenue à l'instant t_1 , on connaît les composantes de la vitesse de l'électron test après la collision. Par conséquent, il est possible de traiter la collision suivante avec comme nouvelles conditions initiales les composantes de cette vitesse v'_1 . Il s'agit d'une ionisation, l'électron éjecté sera également traité à son tour en utilisant comme vitesse initiale v_{e_j} .

Dans le cas des collisions électron-atome, la distribution des atomes cibles qui est une distribution maxwellienne à la température des gaz, est donc connue avant de commencer la simulation. Tandis que dans le cas des interactions électron-électron, la distribution des électrons cibles est la même que la distribution des électrons projectiles. Cette distribution est inconnue puisque c'est précisément la distribution que l'on cherche à calculer.

On comprend donc mieux pourquoi les interactions électron-atome peuvent donc être approximées à des collisions binaires classiques. Tandis que pour les interactions électron-électron, compte tenu de la longue portée du potentiel correspondant, les électrons interagissent en principe non seulement avec les particules chargées situées à proximité des électrons projectiles mais aussi avec les particules chargées situées à des distances relativement éloignées des électrons projectiles. Il est cependant utile de faire la distinction entre le cas d'un gaz totalement ionisé et le cas d'un gaz partiellement ionisé.

Par contre dans un gaz partiellement ionisé (avec des degrés d'ionisation inférieurs à 10^{-4} comme c'est le cas du plasma considéré dans ce travail), le nombre de particules chargées est naturellement beaucoup moins important. Dans ces conditions, il n'est pas du tout aberrant de

nous intéressent. En revanche, il sera plus hasardeux de négliger les interactions multiples surtout lorsque le degré d'ionisation du plasma étudié devient de plus en plus proche de la limite 10^{-4} . Dans ce cas, on peut supposer comme cela est habituellement admis (approximation de Fokker Planck) que les interactions coulombiennes situées à l'intérieur de la sphère de Debye sont une succession d'interactions binaires à faible déviation. Une fois, ceci admis, il est normalement possible de traiter l'interaction électron-électron avec les lois de la mécanique classique. Mais la difficulté qui subsiste est due à la simultanéité ou à la multiplicité de ces interactions : autrement dit, un électron projectile particulier effectue au même instant un grand nombre de collisions binaires de faible déviation. Ceci ne peut être traité par la méthode de Monte Carlo dans des temps de calcul acceptables. Il faut souligner que ce problème ne se pose pas dans le cas de l'équation de Boltzmann car l'opérateur de Fokker Planck utilisé est valable dans le cas des faibles déviations et concerne tous les électrons du milieu puisque les bornes de l'intégrale dans l'espace des vitesses pour un électron projectile de vitesse « v » couvre l'espace entier des vitesses c'est à dire de $[0, v]$ puis de $[v, \infty]$. C'est pourquoi dans le cas de la méthode de Monte Carlo, il est nécessaire d'ajouter une hypothèse supplémentaire. Celle qui est admise dans le ce travail, pour surmonter la difficulté de traiter cette multiplicité de collisions binaires à faible déviation, consiste à regrouper en une seule collision toutes ces collisions binaires de faible déviation ayant lieu simultanément dans la sphère de Debye. Cela revient, en fin de compte, à supposer que l'électron projectile effectue une collision binaire avec un «électron cible fictif» regroupant donc tous les électrons projectiles situés à l'intérieur de sa sphère de Debye, et ayant une distribution en énergie qui est celle des électrons cibles. Cet «électron cible fictif» garde donc toute sa réalité sur le plan énergie puisqu'il a la même distribution que les électrons qu'il englobe. Par contre, sur le plan angulaire c'est une déviation isotrope qui est supposée se produire après le choc coulombien.

Dans les plasmas peu ionisés qui nous intéressent, les hypothèses admises pour pouvoir traiter les interactions électron-électron comme des collisions binaires sont résumées ci-dessous :

- ❖ Il n'y a pas d'effet collectif donc pas d'interactions à l'extérieur de la sphère de Debye.
- ❖ Les interactions multiples électron-électron ayant lieu à l'intérieur de la sphère de Debye sont assimilées à des collisions binaires de faible déviation.
- ❖ Chaque série de collisions binaires simultanées et de faible déviation est regroupée en une seule collision binaire ayant la même distribution en énergie que les électrons cibles et possédant une distribution angulaire isotrope après le choc.

- ❖ Maintenant il reste le problème de la connaissance à priori de la distribution en énergie des électrons cibles. Pour contourner ce délicat problème en supposant que cette distribution est maxwellienne lorsque le premier électron test est traité par la méthode Monte Carlo.

Une fois ces hypothèses admises, les interactions électron-électron sont donc considérées comme de simples collisions binaires et peuvent par conséquent être traitées avec le même algorithme Monte Carlo que les collisions classiques électron-atome. Les différentes étapes de cet algorithme (calcul de temps de vol, calcul de la trajectoire, détermination de la nature de la collision) sont reprises ci- dessous en ajoutant (par rapport à ce qui a déjà été décrit dans le paragraphe précédent relatif aux collisions électron-atome) la contribution des interactions électron-électron.

III.2.5.2 Traitement des collisions électron-électron :

III.2.5.1. Calcul du temps de vol :

La relation (III-4') donnant le temps de vol libre en fonction de la fréquence totale de collisions reste toujours valable mais la fréquence totale de collisions inclue également la fréquence V_{e-e} de collisions électron-électron :

$$t_{vol} = - \frac{\log(R_{vol})}{V_{cte}} \text{ avec } V_{cte} = V_{e-at} + V_{e-e} + V_{fic}$$

Avant de donner l'expression de la fréquence de collisions électron-électron V_{e-e} , il faut savoir que de manière générale, une fréquence microscopique $V(v)$ donnée d'un électron de vitesse v effectuant une collision avec une particule cible ayant une section efficace de collision Q s'écrit :

$$V(v) = \iint_{\Omega} v_r Q(\chi, v_r) d\Omega F_c(v_c) dv_c \text{ avec } d\Omega = \sin \chi d\chi d\psi \tag{III-14'}$$

Où χ et ψ représentent les angles polaire et azimutal dans le repère de la collision, $v_r = |\mathbf{v} - \mathbf{v}_c|$ la vitesse relative tandis que v_c et $F_c(v_c)$ la vitesse et la fonction de distribution de la particule cible

Dans le cas d'un processus électron-atome lorsque $\mathbf{v}_r \cong \mathbf{v}$, l'intégrale de l'équation III.14' :

$$V(v) = N v Q(v)$$

Sachant que : $N = \int F_c(v_c) dv_c$ et $Q(v) \cong Q(v_r) = \int v_r Q(\chi, v_r) d\Omega$

Cependant dans le cas d'un processus électron-électron, la fréquence microscopique de collisions électron-électron $V_{e-e}(\mathbf{v})$ s'écrit :

$$V_{e-e}(\mathbf{v}) = \int \mathbf{v}_r \mathbf{Q}_{e-e}(\mathbf{v}_r) F_c(\mathbf{v}_c) d\mathbf{v}_c$$

Lorsque la fréquence de distribution $F_c(\mathbf{v}_c)$ des électrons cibles est normée à l'unité c'est à dire si : $\int F_c(\mathbf{v}_c) d\mathbf{v}_c = 1$, la fréquence $V_{e-e}(\mathbf{v})$ devient :

$$V_{e-e}(\mathbf{v}) = n_e \int \mathbf{v}_r \mathbf{Q}_{e-e}(\mathbf{v}_r) F_c(\mathbf{v}_c) d\mathbf{v}_c = \frac{n_e}{N} N \int \mathbf{v}_r \mathbf{Q}_{e-e}(\mathbf{v}_r) F_c(\mathbf{v}_c) d\mathbf{v}_c \quad \text{III-15'}$$

Dans tous les cas, on peut inclure les types de collisions, en choisissant, dès le début du traitement des électrons, une fréquence V_{cte} qui est supérieure à la somme des fréquences de l'ensemble des collisions réelles.

III.2.5.2. Nature de la collision :

En ce qui concerne la détermination de la nature de la collision lorsque les interactions électron-électron sont considérées, il suffit de calculer la probabilité de collision électron-électron et de l'intercaler avec son poids relatif dans l'intervalle $[0,1]$ incluant déjà les collisions électron-atome.

Une fois que le traitement de tous les électrons est achevé, on passe au calcul des fonctions de distribution et des paramètres de transport associés. Le calcul des paramètres de transport peut être effectué soit par :

- ❖ Calcul direct, à partir de la connaissance de certaines grandeurs moyennes qui ont été échantillonnées au fur et à mesure du traitement des électrons,
- ❖ Calcul à partir de la fonction de distribution des électrons, comme c'est le cas dans le chapitre précédent.

III.2.6. Relations utilisées pour le calcul des fonctions de distribution et des paramètres de transport :

La simulation du mouvement des électrons par la méthode de Monte Carlo permet donc d'accéder aux fonctions de distribution et paramètres de transport des électrons à l'aide de méthodes d'échantillonnage appropriées.

III.2.7 Fonctions de distribution :

La fonction de distribution des électrons $f(z,v,t)$ déjà définie dans le chapitre précédent peut être décomposée en série de polynômes de Legendre dans le cas d'une symétrie de révolution autour de l'axe Oz :

$$f(z,v,t) = \sum_{\ell=0}^{\infty} f_{\ell}(z,v,t) P_{\ell}(\cos\theta) \quad \text{III-16'}$$

Ce sont la partie isotrope et les différentes anisotropies $f_{\ell}(z,v,t)$ de la fonction de distribution $f(z,v,t)$ qui sont directement calculées par la méthode de Monte Carlo. Dans ce but, l'espace des énergies $[0, E_{\max}]$ est discrétisée, pour des raisons de simplicité, en « nv » intervalles réguliers, c'est à dire :

$$[0, E_{\max}] = [E_0=0, E_1, \dots, E_{k-1}, E_k, E_{k+1}, \dots, E_{nv}=E_{\max}]$$

avec $E_{k+1} - E_k = \Delta E = \text{const}$

Puis, on définit E_{ij} et θ_{ij} qui sont respectivement l'énergie et l'angle entre le vecteur vitesse v (avec $E = 1/2mv^2$) et la direction du champ électrique de l'électron numéro « j » juste avant qu'il effectue la collision numéro « i ». Soit $\Phi_{\ell}(E_k, z, t)$ une fonction discrète défini par :

$$\Phi_{\ell}(E_k, z, t) = \sum_{j=1}^{n_e} \sum_{i=1}^{n_c} \delta(E_{ij}) P_{\ell}(\cos\theta_{ij}) \quad \text{III-17'}$$

avec $\delta(E_{ij}) = 1$ si $E_k < E_{ij} < E_{k+1}$ et $\delta(E_{ij}) = 0$ ailleurs

n_c représente le nombre de collision par électron à l'instant t et dans le plan z et n_e le nombre d'électrons correspondant.

Si la fonction cherchée est la fonction de distribution à l'équilibre (dans le cas où le système tendrait vers un état d'équilibre). Ou bien une fonction de distribution moyenne, alors n_e concerne le nombre total d'électrons traité et n_c le nombre total de collisions par électron ayant lieu dans tout le système étudié.

Ensuite la partie isotrope $f_0(z,v,t)$ et l'anisotropie d'ordre ℓ $f_{\ell}(z,v,t)$ sont tout simplement obtenues à partir de la relation donnée par Penetrante et Al [53] :

$$f(z, E_k, t) = \frac{2\ell + 1}{\sqrt{E}} \frac{\Phi_{\ell}(E_k, z, t)}{\int_0^{\infty} \Phi_0(E, z, t) dE} \quad \text{III-18'}$$

Si on définit en plus les deux domaines de variation suivants :

$$[0, t_{\max}] = [t_0=0, t_1, \dots, t_{m-1}, t_m, t_{m+1}, \dots, t_{nt}=t_{\max}]$$

$$[0, z_{\max}] = [z_0=0, z_1, \dots, z_{n-1}, z_n, z_{n+1}, \dots, z_{nz}=z_{\max}]$$

on obtient directement la variation spatio-temporelle de la partie isotrope et des différentes anisotropies de la fonction de distribution $f(z,v,t)$ à partir de la fonction discrète :

$$\phi_i(E_k, z_n, t_m) = \sum_{j=1}^{\Delta n_{e-mm}} \sum_{i=1}^{\Delta n_{c-mm}} \delta(E_{ij}) \delta(t_{ij}) \delta(z_{ij}) P_i(\cos \theta_{ij}) \quad \text{III-19'}$$

avec $\delta(t_{ij}) = 1$ si $t_m < t_{ij} < t_{m+1}$ et $\delta(t_{ij}) = 0$ ailleurs

et avec $\delta(z_{ij}) = 1$ si $z_n < z_{ij} < z_{n+1}$ et $\delta(z_{ij}) = 0$ ailleurs

Δn_{e-mm} Représente cette fois-ci le nombre d'électrons dans l'intervalle $[t_m, t_{m+1}]$ et entre les deux plans $[z_n, z_{n+1}]$ et Δn_{c-mm} le nombre de collisions par électron dans les mêmes intervalles d'espace et de temps.

En pratique et selon que les limites de la simulation sont des limites spatiales ou temporelles, ce sont la partie isotrope et les différentes anisotropies de la fonction de distribution $G^{(0)}(v,z)$ (cas d'une limite dans l'espace position) ou de la fonction $F^{(0)}(v,t)$ (cas d'une limite dans l'espace temps) déjà définies au chapitre précédent qui seront obtenues par notre méthode. En effet lorsque la simulation est limitée à un temps t_{\max} , les fonctions $F_i^{(0)}(v,t)$ sont obtenues à l'aide de la fonction suivante :

$$\phi_i(E_k, t_m) = \sum_{j=1}^{\Delta n_{e-m}} \sum_{i=1}^{\Delta n_{c-m}} \delta(E_{ij}) \delta(t_{ij}) P_i(\cos \theta_{ij}) \quad \text{III-20'}$$

Tandis que lorsque la simulation est limitée dans un espace position bien défini alors les fonctions $G_i^{(0)}(z,v)$ sont calculées à l'aide de la fonction discrète suivante :

$$\phi_i(E_k, z_n) = \sum_{j=1}^{\Delta n_{e-n}} \sum_{i=1}^{\Delta n_{c-n}} \delta(E_{ij}) \delta(z_{ij}) P_i(\cos \theta_{ij}) \quad \text{III-21'}$$

Il est important de remarquer que la fonction de normalisation $\int_0^{\infty} \phi_{\ell}(E, z, t) dE$ qui intervient dans la relation (III-18') n'intervient sous cette forme que lorsque la simulation concerne le cas d'un système spatialement infini. C'est à dire lorsque la simulation est limitée uniquement dans

l'espace temps (cas des fonctions $F_e^{(0)}(\mathbf{v}, t)$). La fonction de normalisation est remplacée par la densité des électrons $n_e(z_n)$ dans l'intervalle $[z_n, z_{n+1}]$.

$$G_e(z_n, E_k) = \frac{2\ell+1}{\sqrt{E}} \frac{\Phi_e(E_k, z_n)}{n_e(z_n)} \quad \text{III-22'}$$

III.2.8. Paramètres de transport :

Les paramètres de transport hydrodynamique (relatif à l'expérience de temps de vol) sont déterminés à partir des relations déjà données dans le chapitre précédent :

$$\begin{aligned} \Omega^{(0)}(t) &= \frac{1}{n(t)} \frac{dn(t)}{dt} && \text{Fréquence d'ionisation effective.} \\ V_d(t) &= \frac{d\langle z \rangle(t)}{dt} && \text{Vitesse de dérive des électrons.} \\ D_L(t) &= \frac{1}{2} \frac{d\langle z^* \rangle(t)^2}{dt} && \text{Coefficient de diffusion longitudinal.} \\ D_T(t) &= \frac{1}{4} \frac{(d\langle x^* \rangle(t)^2 + d\langle y^* \rangle(t)^2)}{dt} && \text{Coefficient de diffusion transversal.} \end{aligned}$$

avec $\langle x^* \rangle(t) = x(t) - \langle x \rangle(t)$, $\langle y^* \rangle(t) = y(t) - \langle y \rangle(t)$ et $\langle z^* \rangle(t) = z(t) - \langle z \rangle(t)$

Ces paramètres de transport sont obtenus à l'aide de la relation qui va être évoquée ci-après pour le calcul d'une moyenne statistique.

Soit X_{ij}^k une grandeur relative à l'électron numéro « j » et à la collision numéro « i » ayant lieu dans l'intervalle de temps $[t_k, t_{k+1}]$, alors sa moyenne $\langle X^k \rangle$ dans $[t_k, t_{k+1}]$ est calculée à l'aide de la relation :

$$\langle X \rangle^k = \frac{1}{n_e^k} \sum_{j=1}^{n_e^k} \frac{1}{n_{jc}^k} \sum_{i=1}^{n_{jc}^k} X_{ij}^k \quad \text{III-23'}$$

Où n_e^k représente le nombre d'électrons comptabilisés dans l'intervalle de temps $[t_k, t_{k+1}]$ et n_{jc}^k le nombre de collisions qu'a fait l'électron « j » dans le même intervalle de temps.

Pour le calcul des paramètres de transport hydrodynamique.

les grandeurs stockées au fur et à mesure du traitement des collisions sont les suivantes :

$$n_e^k, n_e^k, v_{x,ij}^k, v_{y,ij}^k, v_{z,ij}^k, v_x^2, v_y^2, v_z^2, x_{ij}^k, y_{ij}^k, z_{ij}^k, x_{ij}^2, y_{ij}^2, z_{ij}^2$$

Les paramètres de transport hydrodynamique ainsi que l'énergie moyenne des électrons sont ensuite calculés à l'aide des relations ci-dessous :

$$\begin{aligned}
 \langle E \rangle^k &= \frac{1}{n_e^k} \frac{1}{n_c^k} \sum_{j=1}^{n_e^k} \sum_{i=1}^{n_e^k} \frac{1}{2} m_e (v_x^2{}_{ij}{}^k + v_y^2{}_{ij}{}^k + v_z^2{}_{ij}{}^k) \\
 V_d^k &= \frac{1}{n_e^k} \frac{1}{n_c^k} \sum_{j=1}^{n_e^k} \sum_{i=1}^{n_e^k} v_{z,ij}{}^k \\
 \langle z \rangle^k &= \frac{1}{n_e^k} \frac{1}{n_c^k} \sum_{j=1}^{n_e^k} \sum_{i=1}^{n_e^k} z_{ij}{}^k \\
 D_L^k &= \frac{N_{\text{gaz}}}{2\Delta t} \frac{1}{n_e^k} \frac{1}{n_c^k} \sum_{j=1}^{n_e^k} \sum_{i=1}^{n_e^k} (z^2{}_{ij}{}^k - (\langle z \rangle^k)^2) \text{ avec } \Delta t = t_{k+1} - t_k \\
 D_T^k &= \frac{N_{\text{gaz}}}{4\Delta t} \frac{1}{n_e^k} \frac{1}{n_c^k} \sum_{j=1}^{n_e^k} \sum_{i=1}^{n_e^k} (x^2{}_{ij}{}^k + y^2{}_{ij}{}^k)
 \end{aligned}
 \tag{III-24}$$

Tandis que la fréquence d'ionisation $\Omega^{(0)}(t)$ peut être calculée à l'aide de la relation suivante (dans le cas où les collisions non-conservatives ayant lieu dans le milieu gazeux étudié sont due à l'ionisation).

$$\Omega^{(0)k} = V_{\text{cste}} \frac{1}{n_e^k} \frac{1}{n_c^k} \sum_{j=1}^{n_e^k} \sum_{i=1}^{n_e^k} (n_{\text{ion},ij}{}^k - n_{\text{att},ij}{}^k)
 \tag{III-25}$$

Où V_{cste} représente la fréquence de collision totale et $n_{\text{ion},ij}{}^k$ (resp. $n_{\text{att},ij}{}^k$) le nombre d'ionisation effectué par l'électron numéro « j ».

Les fluctuations statistiques de la fréquence d'ionisation nette calculée à l'aide de cette relation sont nettement plus faibles (à égal nombre de collisions totales) que celle de la fréquence calculée par la relation faisant intervenir la densité. (c'est à dire : $\Omega^{(0)}(t) = \frac{1}{n(t)} \frac{dn(t)}{dt}$).

III.3. Critères de validité de la fonction de Maxwell

La connaissance de la fonction de distribution des énergies électronique est vitale dans la modélisation des plasmas des décharges. Le cas de la haute pression (quelques 10^5 Pa) est plus facile à traiter car la FDEE est généralement maxwellienne. En revanche, le cas de la basse pression (quelques 10^2 Pa de pression totale) est plus difficile à traiter parce que les déviations par rapport à l'état de l'ETL sont beaucoup plus importantes que celles qui peuvent apparaître en haute pression [10]. La densité électronique peut donner une indication rapide concernant les déviations de la FDEE par rapport à la distribution de Maxwell. Ainsi pour $n_e > 10^{15} - 10^{16} \text{ cm}^{-3}$, les interactions coulombiennes entre les particules chargées deviennent importantes et la fonction de distribution tend vers une FDEE maxwellienne.

Concernant les forces électriques dans les décharges qui nous intéressent, le paramètre E/N est de l'ordre de 0.1 Td dans le cas des décharges haute pression et de quelques Td dans les décharges basse pression. Ces forces électriques relativement élevées (basse pression) sont l'une des raisons pour laquelle la FDEE s'éloigne de la maxwellienne. Dans ces conditions, la forme de la FDEE peut être donnée par la figure III.3.

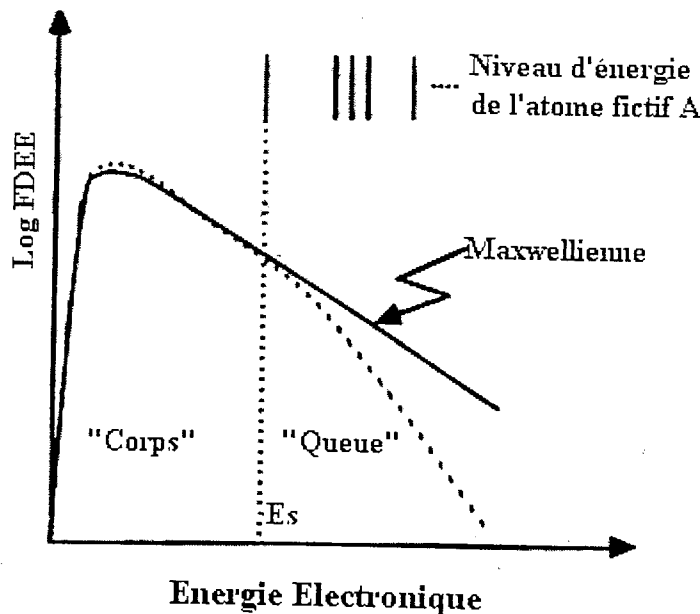


Figure III.3 : Fonction de distribution pour une décharge dans la vapeur de l'atome fictif A.

La FDEE est souvent séparée en deux parties : le «corps» pour les faibles énergies ($E_e \leq E_s$) et la «queue» pour les grandes énergies ($E_e > E_s$) et les déviations par rapport à la maxwellienne y sont souvent minimales. C'est cette partie de la FDEE qui gouverne pour l'essentiel les phénomènes de transport. Au contraire, la queue de la FDEE subit des changements importants dus aux collisions inélastiques entre les électrons et les particules neutres. Ces changements se

traduisent par des variations considérables des taux de transitions car c'est la queue de la FDEE qui gouverne la plupart des phénomènes de réaction.

On observe donc sur la figure III.3 que la FDEE cherchée doit être au moins proche de la distribution de Maxwell. Les critères de «maxwelliennisation» du gaz électronique peuvent être tirés directement de l'équation de Boltzmann.

- ◆ Il n'existe pas de molécules dans le plasma, donc nous n'avons pas à prendre en compte des transitions entre des niveaux vibrations et/ou rotations.
- ◆ On considère seulement la transition entre le fondamental (**g**) et le premier niveau excité (1) (différence d'énergie : E_s), toutes, les autres sections efficaces de transition (ionisation directe incluse) sont regroupées avec la transition $g \rightarrow 1$.
- ◆ La valeur de E_s est supérieure à l'énergie moyenne des électrons : $E_s > 2k_B T_e$.
- ◆ Dans ce traitement nous pouvons utiliser en première approximation des sections efficaces hydrogénoïdes.
- ◆ Nous divisons les électrons en deux groupes comme l'indique la figure III.3.

Dans ces conditions, un électron rapide ($E_e > E_s$) peut exciter un atome en lui transmettant une partie de son énergie et passer ainsi dans le corps de la FDEE ($E_e < E_s$). La partie haute énergie de la FDEE peut être peuplée par les collisions e^+e^- . Une déviation par rapport à la maxwellienne pour la partie haute énergie peut être attendue si le taux de processus inélastiques est supérieur au taux des interactions coulombiennes. A l'équilibre, le nombre d'électrons qui appartiennent à la queue de la FDEE est donné par la relation :

$$n_t = n_e \int_{E_s}^{\infty} F^M(E_e) dE_e \approx n_e \sqrt{\frac{E_s}{k_B T_e}} \exp\left\{-\frac{E_s}{k_B T_e}\right\} \quad \text{III-1''}$$

où $F^M(E_e)$ est la fonction de Maxwell.

Le taux d'excitation, toujours à l'équilibre, est donné par Drawin [Dw-2] :

$$n_e n_g z_{g1} = 4.4 \times 10^{-12} \frac{n_e n_1}{\sqrt{k_B T_e E_s}} \psi \quad \text{III-2''}$$

ψ est une fonction empirique tabulée par Drawin [20].

Ainsi la fréquence moyenne d'excitation par électron rapide pour le processus $g \rightarrow 1$ est donnée par la relation :

$$z_{g1} = n_e n_g \frac{z_{g1}}{n_t} \approx 4.4 \times 10^{-12} n_g E_e^{-3/2} \psi \quad \text{III-3''}$$

La fréquence avec laquelle la queue de la fonction de distribution est peuplée par des collisions coulombiennes est obtenue en inversant la relation III.10 .

La condition pour que la queue de la FDEE reste maxwellienne peut donc s'exprimer par la relation :

$$\frac{V_{eq}}{V_{gl}} \geq 10 \Rightarrow 6 \times 10^{-2} \psi = \left[\frac{n_e}{n_g} \right]^{cr, etc} \quad \text{III-4'' (a)}$$

Pour que le corps de la FDEE reste maxwellien, il faut que $\tau_{ee} \gg \tau_{ea}$, nous pouvons donc estimer une valeur critique de rapport n_e/n_g pour que cette condition reste valable [47].

$$\frac{n_e}{n_g} = 2.7 \times 10^{-6} \frac{Q_{ca}^n(A) E_c^2}{m_g} = \left[\frac{n_e}{n_g} \right]^{cr, et} \quad \text{III-4'' (b)}$$

En utilisant les conditions (III-4'' a et b) pour le rapport n_e/n_g qui correspond au degré d'ionisation du milieu, dans cette situation nous pouvons alors imaginer trois cas possibles :

- (1) : $\left[\frac{n_e}{n_g} \right]^{cr, etc} \leq \left[\frac{n_e}{n_g} \right]^{cr, et} \Rightarrow$ La FDEE est maxwellienne sur toute la gamme d'énergie.
- (2) : $\left[\frac{n_e}{n_g} \right]^{cr, et} \leq \frac{n_e}{n_g} \leq \left[\frac{n_e}{n_g} \right]^{cr, etc} \Rightarrow$ La partie haute énergie de la FDEE n'est plus maxwellienne, le corps reste inaltéré. III-5''
- (3) : $\left[\frac{n_e}{n_g} \right]^{cr, et} > \frac{n_e}{n_g} \Rightarrow$ La FDEE n'est plus maxwellienne.

Dans le cas de la basse pression où la densité électronique reste inférieure à $10^{12}-10^{13} \text{ cm}^{-3}$ et où l'énergie électronique moyenne est de l'ordre de 1 eV nous sommes dans le cas (2) et que les déviations sont fortes dans la plupart des cas. Ces déviations se manifestent comme un appauvrissement de la partie haute énergie de la FDEE.

En ce qui concerne la haute pression où n_e est de l'ordre de 10^{16} cm^{-3} et l'énergie moyenne est de l'ordre de 0.5 eV nous sommes à la limite entre les zones (1) et (2), ce cas nécessite donc une étude détaillée. Les cas (2) et (3) nécessitent la résolution de l'équation de Boltzmann.

III.3.1. Théorie de Druyvesteyn [19]

Parmi les théories classiques, la plus connue est celle de Druyvesteyn [19], développée en 1930. Il s'agit d'une théorie simplifiée dans laquelle les interactions entre les particules chargées sont négligées et la distribution supposée homogène et isotrope.

Druyvesteyn pose également l'hypothèse que le champ électromagnétique se réduit à un champ électrique continu de faible amplitude et aboutit ainsi à sa loi de distribution. Cette loi s'obtient à partir de deux équations exprimant que le gain d'énergie des électrons par diffusion et la dérive dans la direction du champ, sont compensés par les pertes dues aux chocs élastiques sur les particules neutres. Elle s'exprime par la relation :

$$F_0(u) = cu^{1/2} \exp\left\{-\frac{3m_e}{m_g u^2} \int_0^u \frac{u' du'}{\lambda_{m,e}^2(u')}\right\} \quad \text{III-6''}$$

où c est la constante de normalisation et $\lambda_{m,e}$ est le libre parcours moyen des électrons.

Cette loi diffère de celle de Maxwell par un appauvrissement en électrons rapides. Dans ses calculs, Druyvesteyn néglige complètement les collisions inélastiques, ce qui revient à supposer que les valeurs du paramètre E/N , mesurable dans le plasma, soient telles que tous les électrons ont des énergies inférieures au premier seuil d'excitation de l'atome qui subit les chocs électroniques. Cette dernière hypothèse interdit pratiquement l'utilisation de la distribution de Druyvesteyn dans le cas des décharges mercure-gaz rare basse pression.

III.3.2 Modèle à deux groupes d'électrons :

Ce modèle avait été proposé par Vriens en 1973 [66]. Il s'agit d'une méthode semi-empirique pour le traitement de forte déviation par rapport à la distribution de Maxwell.

Vriens introduit alors deux groupes d'électrons dans l'espace d'énergie, chaque groupe est représenté par une température. Le premier groupe correspond aux électrons lents (corps) et le deuxième aux électrons rapides (queue). La justification de son modèle est basée sur le transfert d'énergie entre les électrons (rapides et lents), les atomes (excité ou non) et les ions. La figure III.4 montre schématiquement ces flux. Les termes P (puissance par unité de volume) sont représentés par des traits solides (termes principaux) et des traits pointillés (termes secondaires). Les indices supérieurs b et t se réfèrent respectivement au corps et à la queue de la FDEE. Les gains d'énergies par le champ électrique et les collisions super-élastiques sont notés par les indices (F) et (sup), les pertes par collisions élastiques par (el), celles qui correspondent à des collisions inélastiques d'excitations par (ex) et d'ionisation par (ion). Enfin, les pertes par diffusion ambipolaire et par rayonnement sont respectivement notées (dif) et (rad).

En respectant cette séparation, la partie basse énergie peut toujours être représentée par une maxwellienne à la température électronique T_{eb} :

$$F_0^b(E_e) = \frac{2}{\pi^{1/2} (k_B T_{eb})^{3/2}} E_e^{1/2} \exp\left\{-\frac{E_e}{k_B T_{eb}}\right\}; E_e \leq E_s \quad \text{III-7''}$$

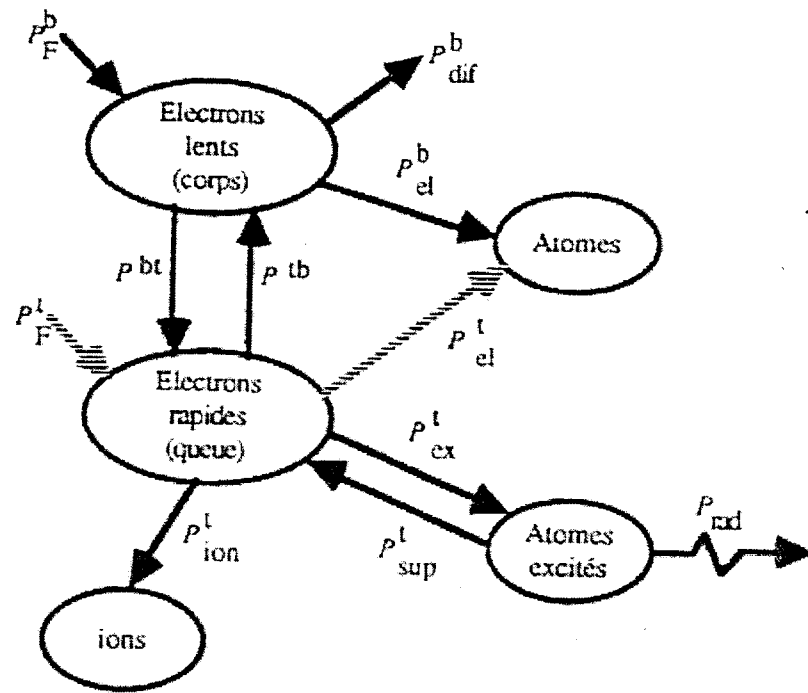


Figure. III.4 : Transfert d'énergie entre les électrons, les atomes et les ions dans l'hypothèse du modèle à 2 groupes d'électrons.

Vriens a supposé que la partie haute énergie puisse également être décrite par une maxwellienne mais à une température inférieure T_{et} :

$$F_0^t(E_e) = \frac{2}{\pi^{1/2} (k_B T_{et})^{3/2}} E_e^{1/2} \exp\left\{-\frac{E_e}{k_B T_{et}}\right\}; E_e > E_s \quad \text{III-8''}$$

S est un paramètre de normalisation qui permet de raccorder F_0^b et F_0^t au point $E_e = E_s$.

L'inconvénient que Viens donne de son modèle est que les processus inélastiques qui présentent un seuil supérieur à E_s sont décrits par une température unique (T_{et}) [66]. Ceci n'est plus valable si la contribution de l'ionisation au dépeuplement de la queue de la FDEE est importante. Vriens a donc essayé de généraliser son modèle en introduisant une troisième température pour les électrons ayant une énergie plus grande que le potentiel d'ionisation de l'atome. Ce qui aurait conduit à un modèle à trois groupes ne semble jamais avoir été appliqué à une décharge.

III.3.3 Solution de Lagushenko [42] :

L'étude des coefficients de transport, et plus précisément celle des premiers coefficients de Townsend et de la vitesse de dérive dans des mélanges gazeux, a amené Lagushenko et Maya

[42] à analyser l'équation de Boltzmann. Moyennant quelques hypothèses, cette analyse a conduit ces auteurs à proposer une expression analytique qui rend compte à la fois de l'influence des collisions, du champ électrique et des anisotropies sur la parti isotrope $F_0(u)$ de la FDEE.

$$G(u) = -\frac{d \ln F_0}{du} \quad F_0(u) = cu^{1/2} \exp\left\{-\int_0^u G(u') du'\right\}$$

$$G(u) = \frac{1}{2u_e} + \left\{ \frac{uQ_{tot}^m \delta(Hg) \left[1 - \frac{n(6^3P)}{n_B(6^3P)}\right]}{\left(\frac{E}{N}\right)^2 \frac{u}{3Q_{tot}(u)} + 2u_e Q_e^* \frac{n_e}{N}} + \frac{1}{4u_e^2} \right\}^{1/2} \quad \text{III-9''}$$

Q_{tot}^m est la section efficace totale pour le transfert de la quantité de mouvement et u_e correspond à l'énergie moyenne des électrons.

L'expression fait intervenir la somme des sections efficaces pour le transfert de la quantité de mouvement de chaque gaz neutre qui existe dans la décharge. Les termes de cette somme sont pondérés par la pression partielle $\delta(\text{gaz})$ de chaque gaz dans le mélange :

$$Q_{tot}^m = \sum_g \delta(g) Q_g^m(u) + \delta(Hg) Q_{Hg}^m(u) \quad \text{III-10''}$$

Q_{tot} est la section efficace inélastique totale.

Lagushenko et Maya tiennent seulement compte dans cette valeur des processus d'excitation à partir du fondamental. Ceci est une bonne approximation si la densité des états excités n'est pas trop forte. Les interactions coulombiennes entrent dans cette analyse par l'intermédiaire d'une valeur effective de la section efficace de Coulomb Q_e^* . Ils ont imposé une valeur effective égale à la valeur de la section efficace de Coulomb pour l'énergie 1 eV. Ce choix est raisonnable si on tient compte du fait que, dans les décharges mercure-gaz rare, l'énergie moyenne des électrons ne s'éloigne pas trop de cette valeur. En outre la section efficace de Coulomb dans sa représentation classique dépend de l'énergie électronique comme $1/E_e^2$.

On peut remarquer que le rapport $n(6^3P)/n_B(6^3P)$ donne directement une indication quantitative concernant les déviations à l'état de l'E.T.L. Il est évident que si le système est à l'E.T.L la population du niveau 6^3P du mercure suivra la loi de Boltzmann et le rapport $n(6^3P)/n_B(6^3P)$ deviendra égale à 1. Sous cette condition, la FDEE décrite par les relations (III-9'') se réduit à une maxwellienne. L'inconvénient principal de cette fonction est d'exiger une

connaissance préalable de la valeur moyenne de l'énergie électronique u_e , qui dépend elle-même de la connaissance de la FDEE.

Le terme $uQ_{tot}^m \delta(Hg)$ rend compte des collisions élastiques e^- /atome. Ce terme se trouve au numérateur de l'équation (III-9''), si ce terme tend vers zéro la fonction de Lagushenko tend vers la Maxwellienne. Plus le poids de ce terme augmente, plus la relation de Lagushenko s'éloigne de la Maxwellienne ce qui veut dire le système est gouverné par les collisions élastiques e^- /A.

Le deuxième terme est le rapport $n(^3P)/n_B(^3P)$. Il est très important car il est directement lié à la population du niveau de résonance. Il nous donne une indication directe sur les écarts à la loi de Boltzmann. L'augmentation du rapport $n(^3P)/n_B(^3P)$ tend vers 1 le numérateur tend vers zéro et la fonction s'approche de la Maxwellienne.

Le terme $(E/N)^2(u/3Q_{tot}(u))$ rend compte des effets de collisions inélastique et de l'existence du champ électrique. Ce terme se trouve au dénominateur de la relation, on augmentant son poids la fonction de Lagushenko tend vers la fonction de Maxwell.

Le dernier terme $2u_e Q_e^*(n_e/N)$ rend compte des collisions e^-/e^- . Si le poids de ce terme augmente (en augmentant la fraction des électrons dans le plasma) la fonction tend rapidement vers une Maxwellienne.

Nous constatons donc que la FDEE obtenue par la relation de Lagushenko dépend de plusieurs paramètres qui, si nous les ajustons, peuvent la transformer en une fonction paramétrique gardant un sens dynamique. Etant donné que le résultat de la pondération est parfaitement prévisible par les aspects physiques du problème, nous pouvons l'utiliser afin d'obtenir un meilleur accord entre les modèles et l'expérience lorsque les incertitudes sur les sections efficaces seront très grandes.

III.3.4 Détermination expérimentale de la FDEE :

Seule, la partie isotrope de la fonction de distribution est accessible par l'expérience [7]. La méthode utilisée due à Druyvesteyn [18] est basée sur une étude théorique du courant collecté par une sonde de Langmuir plongée dans le plasma est polarisée négativement par rapport au potentiel du plasma.

Druyvesteyn a montré que la FDEE peut être évaluée à partir de la dérivée seconde de la caractéristique Vs-Is de la sonde :

$$F_0(u) = \frac{2\sqrt{2}}{9} \sqrt{\frac{m_e}{e}} \frac{\sqrt{V_s}}{S} \frac{d^2 I_s}{dV_s^2} \quad \text{III-11''}$$

où S est la surface de la sonde.

Les figures (III.5a et III.5b) montrent une caractéristique de la sonde de Langmuir et la FDEE correspondante. Damelincourt [14] a montré que les valeurs expérimentales de la FDEE peuvent être assez bien approximées, du moins pour des énergies inférieures à 6 ou 7 eV, par la fonction semi-empirique proposée par Howe et Allis [34] :

$$F_0(u) = \begin{cases} c\sqrt{E_e} \left[\exp\left\{-\frac{E_0 - E_e}{k_B T_e}\right\} - 1 \right] & E_e \leq E_0 \\ 0 & E_e > E_0 \end{cases} \quad \text{III-12''}$$

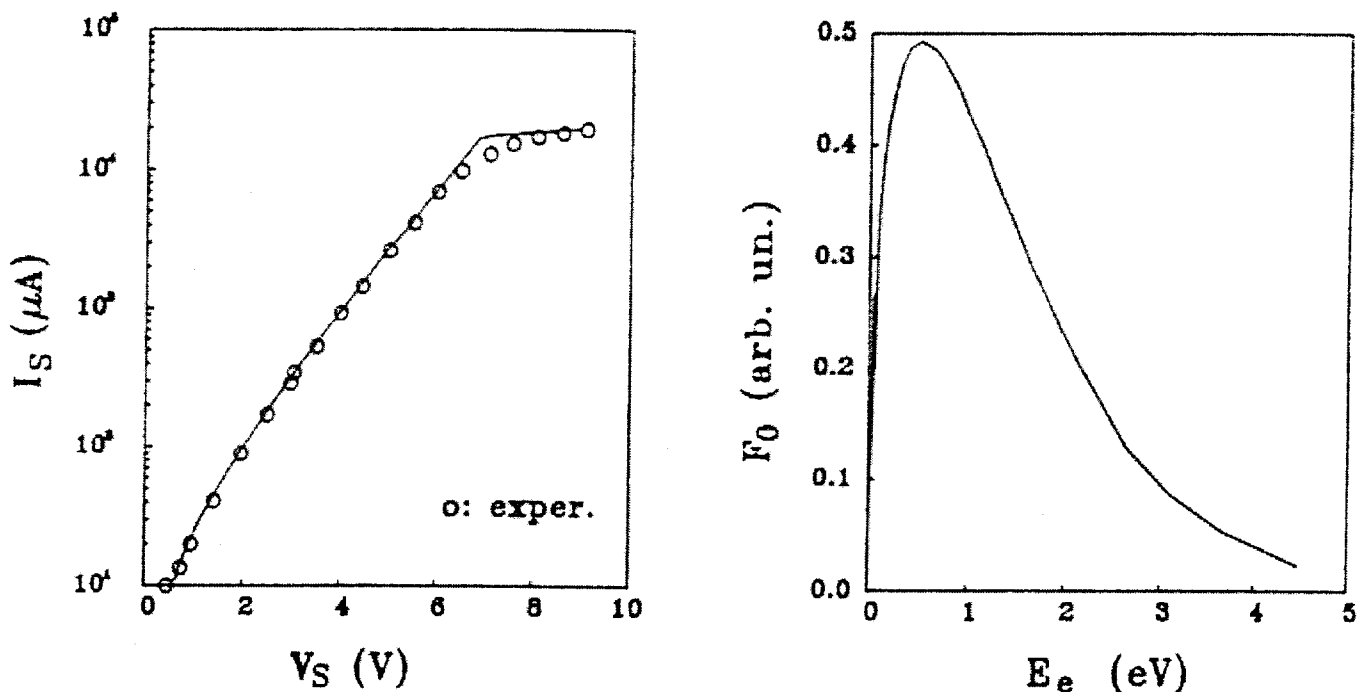


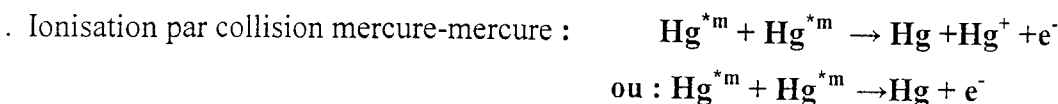
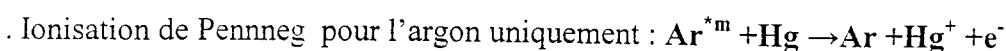
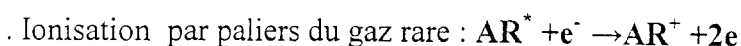
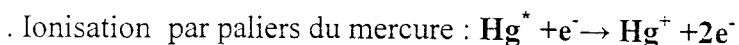
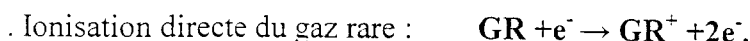
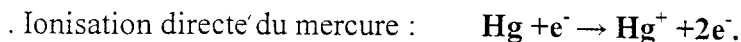
Figure.III.5 :Caractéristique de sonde de Langmuir (a) et FDEE (b) mesurées expérimentalement dans un tube fluorescent ($\varnothing 36mm$, $I=400mA$, $p_{AR}=400Pa$ et température du point froid $40^\circ C$).

III.3.5 Considérations générales.

La valeur du paramètre de coupure peut être déterminée expérimentalement à partir de la caractéristique de la sonde. Damelincourt a trouvé pour un tube fluorescent classique la valeur $E_0 \approx 7.5 eV$.

La FDEE déterminée expérimentalement dépend de la géométrie de la forme et de l'état de la sonde et du bruit qui est très important dans le cas des lampes mercure-gaz rare. Ces résultats sont peu fiables.

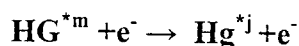
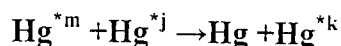
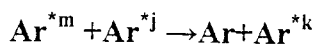
Dans notre étude, nous avons inclus les principaux processus collisionnels électron/atome ainsi que les processus atome/atome contribuant à l'apparition des électrons dans la décharge :



. Création des états excités (métastables ou non) du gaz rare et du mercure par collisions électroniques :

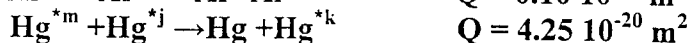
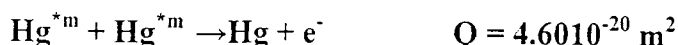
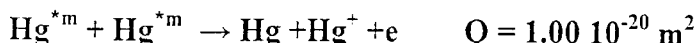
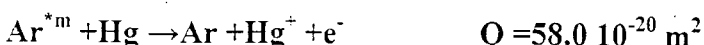
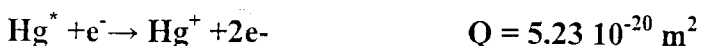


* .Disparition des états métastables du mercure et de l'argon sans émission d'électrons secondaires :



Les indices **j** et **k** symbolisent deux états excités radiatifs.

Données des section efficaces utilisée dans ce travail :



Les valeurs des sections efficaces utilisées dans cette étude sont données dans le **tableau II-1**. Le système d'équations qui a été résolu pour la détermination de la FDEE c'est III.24 et III.5 leur développements respectifs en fonction du temps et de la position donnent III.28 qui sera résolue une fois en fonction du temps et une autre fois en fonction de la vitesse.

La méthode numérique utilisée c'est l'algorithme de Thomas [82]. Le programme [83] La méthode numérique de Monte Carlo [84].

III.3.6 Résultats :

Les fonctions de distribution des électrons et les grandeurs macroscopiques associées sont calculées dans des mélanges gaz rares-vapeur métallique du mercure.

Les calculs sont effectués dans le cas des mélanges classiques Ar-Hg. Les conditions de décharge correspondent au cas d'une lampe classique caractérisée par :

- Rayon du tube égal à 18 mm.
- Courant électrique 400mA.
- Pression d'Argon 3 Torr à la température 0°C .
- Pression partielle de la vapeur métallique du mercure variant entre 1.26×10^{-3} Torr à 90.62×10^{-3} Torr, ce qui correspond à des valeurs de température du point froid variant de 20°C à 80°C .

Remarque : Les valeurs du champ électrique et de densité électronique n_e utilisées dans ce travail ont été calculées par Zissis[78]. La mobilité électronique a été calculée d'après (équ II-21). Les interactions coulombiennes (e^- -ion) ont leurs influences négligeables et ne seront donc pas prises en compte. Seules les interactions (e^- - e^-) jouent un rôle important dans les lampes fluorescentes.

Les collisions de Penning proprement dites ($\text{Ar}^m + \text{Hg} \rightarrow \text{Ar} + \text{Hg}^+ + e^-$) jouent un rôle tout à fait mineur sur le calcul de la fonction de distribution en régime stationnaire.

Les atomes métastables Ar^m (N_{Ar^m} / N de l'ordre de 10^{-7}) car les électrons d'énergie supérieure à 11.5 eV (seuil de Ar^m) sont vraiment minoritaires.

III.3.6.1 Fonction de distribution électronique.

Les fonctions de distribution et les paramètres de transport obtenus à l'aide de la méthode de Monte-Carlo basée sur les approximations déjà faites sont comparés à ceux obtenus à l'aide de la résolution de l'équation de Boltzmann. Ils sont représentés sur la figure (III.6) qui donne la partie isotrope et la première anisotropie de la fonction de distribution des électrons dans le plasma d'argon pour un champ électrique suffisamment faible pour que l'influence des interactions e^- - e^- soit significative. L'examen de cette figure montre que les fonctions de distribution obtenues par les deux méthodes sont tout à fait comparables. Même si nous élargissons notre calcul pour les paramètres de transport l'accord reste valable.

La méthode de Monte-Carlo nécessite un temps de calcul très long pour la résolution (système informatique puissant), il faut une formulation adéquate du problème parce qu'elle est basée sur les lois statistiques.

La méthode de résolution directe est plus facile lorsque l'on utilise une des méthodes de résolution de l'équation de Boltzmann proposées dans la littérature (méthode à deux termes utilisé dans ce travail), après simplification et les hypothèses considérées.

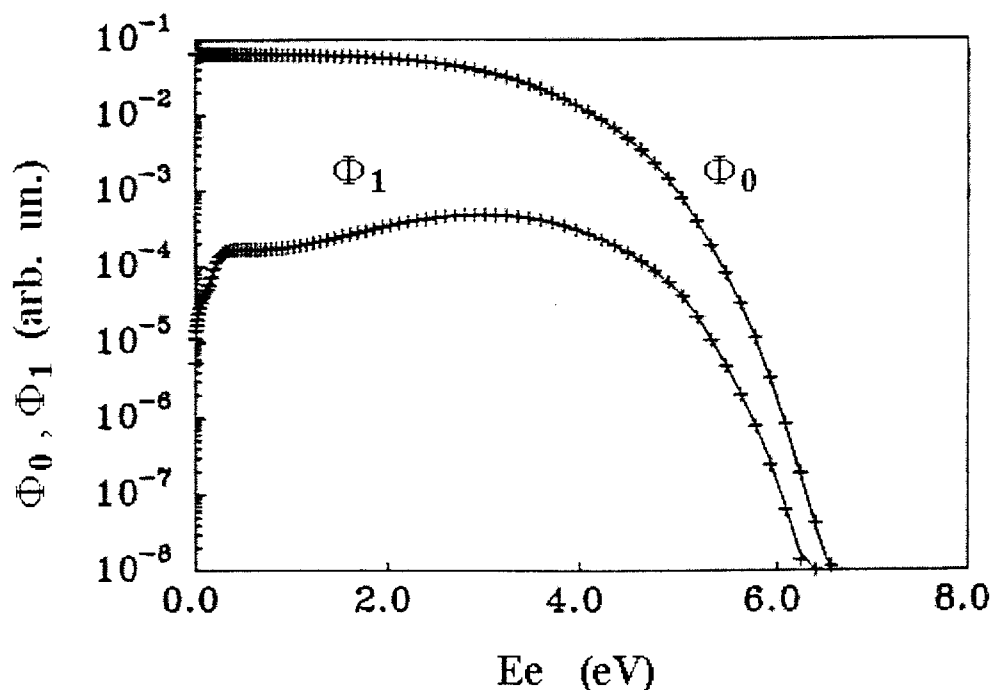


Figure. III.6 : Partie isotrope (0) et première anisotropie (1) de la fonction de distribution dans le cas d'une décharge Hg-Ar. Calculées par la méthode à deux termes (ligne continue) et par la méthode de Monte-Carlo(x).

III.3.6.2 Influence des interactions coulombiennes sur la FDEE.

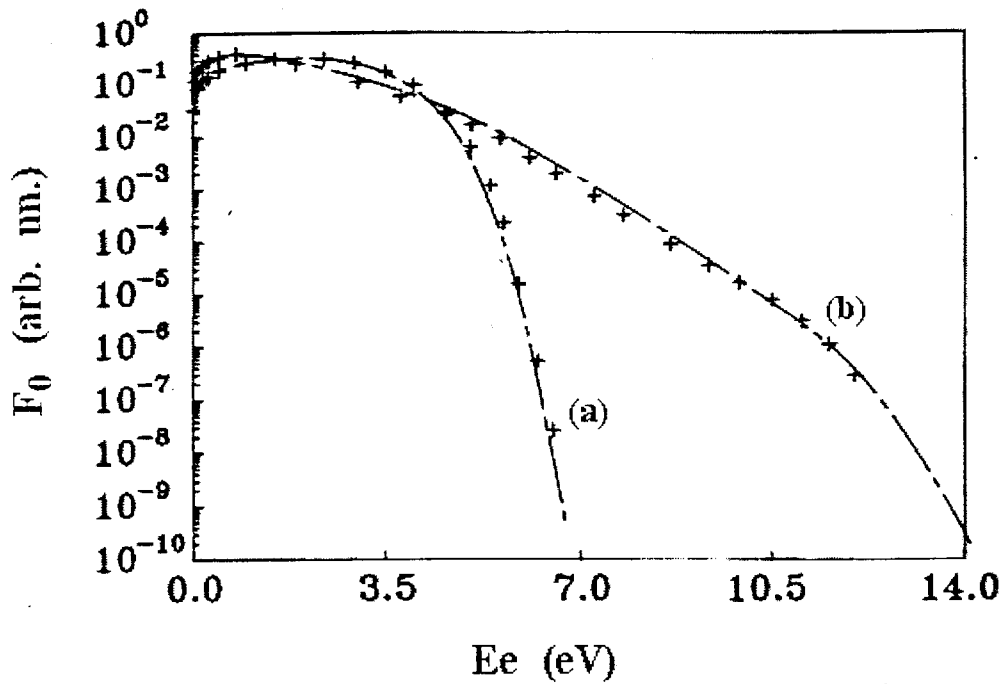


Figure III.7a : Fonction de distribution en énergie dans le cas des décharges Hg-Ar, sans les interactions e^-/e^- (courbe a), avec les interactions e^-/e^- (courbe b). Les croix représentent les valeurs de Winkler et al [72]

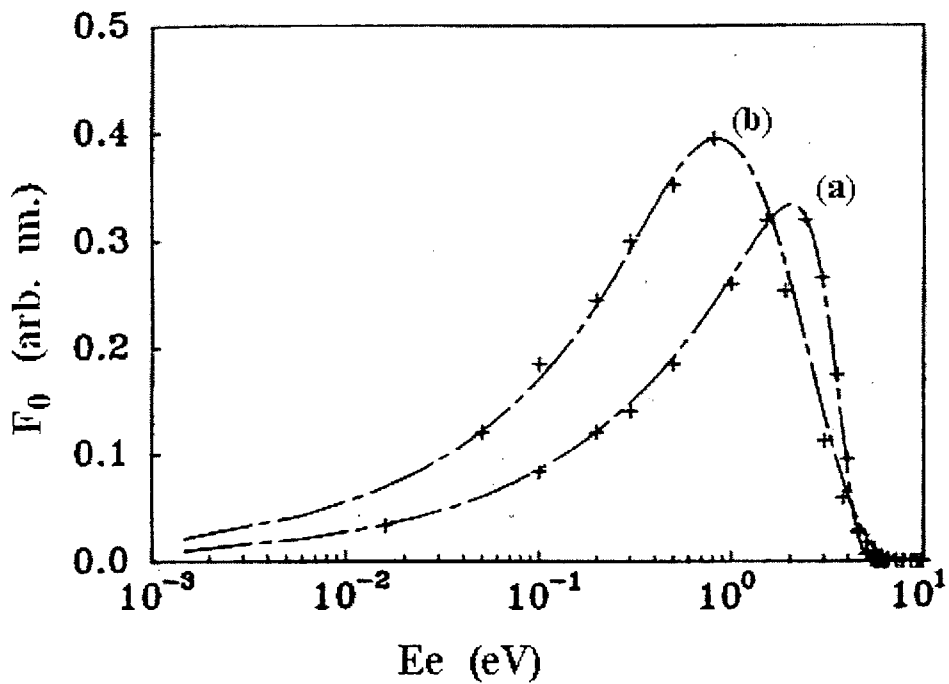


Figure III.7b : Partie basse énergie de F_0 sans interactions Hg^*/Hg^* dans le même contexte.

Les figures (III.7) représentent les résultats obtenus de la fonction de distribution avec (a) et sans (b) interaction e^-/e^- , comparés au résultat de Winkler (qui a négligé les collisions Hg^*/Hg^*). On remarque que l'accord est très acceptable.

L'examen de la figure (III.7) montre clairement qu'au fur et à mesure que le champ électrique augmente, l'influence des interactions coulombiennes sur la fonction de distribution diminue (la limite où l'influence de ces interactions devient négligeable dépend de la nature du gaz et du degré de l'ionisation du plasma) car les paramètres calculés avec et sans collisions coulombiennes se rapprochent au fur et à mesure que le champ électrique augmente, d'autre part plus que n_e/N augmente (c'est à dire plus les interactions coulombiennes sont importantes) plus ces courbes se rejoignent pour un champ électrique élevé. De la même façon la fréquence d'ionisation augmente ce qui entraîne une élévation de la queue de la fonction de distribution dans ce cas la proportion du processus inélastique augmente au détriment des processus élastiques. On remarque aussi que dans le cas sans interactions e^-/e^- , les collisions élastiques sont majoritaires surtout dans les gaz rares à champ électrique faible. Alors que dans le second cas pour les mêmes valeurs du champ électrique, chute très rapidement au détriment des collisions inélastiques. Tout ceci est une conséquence de l'augmentation du nombre d'électrons à forte énergie sous effet des interactions coulombiennes.

En résumé les interactions coulombiennes (qu'on peut considérer comme des collisions élastiques entre les électrons eux-mêmes) influencent directement les fonctions de distribution et les paramètres de transport. Cette influence se traduit de la même manière sur les fonctions de distribution : relèvement plus ou moins important d'une partie du corps et de la queue mais de manière différentes sur les différents paramètres de transport selon qu'il s'agisse des paramètres de transport dépendant du corps ou de la queue.

Conclusion : On vient de voir que l'influence des interactions coulombiennes sur les fonctions de distribution et les paramètres de transport associés dépend du gaz étudié, du degré d'ionisation et du champ électrique réduit. Lorsque le champ électrique E/N est suffisamment faible, la présence d'interactions électron-électron tend à «maxwellienniser» la fonction de distribution. On remarque d'une part l'augmentation des taux de réactions (fréquence d'ionisation, d'excitation...) d'une part et l'augmentation ou diminution de la vitesse de dérive selon que la majeure partie de la fonction de distribution se trouve dans la partie très basse énergie ou haute énergie d'autre part.

III.3.6.3 Comparaison des différentes FDEE.

Dans la littérature, on trouve plusieurs méthodes de détermination de la fonction de distribution des électrons [19] [79], dans la colonne positive de la décharge d'une lampe fluorescente. Ces méthodes ne sont pas toujours en accord entre elles, et présentent dans certains cas des divergences assez considérables dans les mêmes conditions de décharge. La figure III.8

représente les fonctions de distribution des électrons, aux parois dont la température est de 42°C.

On remarque que dans la région d'énergie inférieure à 4.66 eV (corps de la fonction de distribution) qui correspond au premier niveau excité de l'atome du mercure, toutes les méthodes semblent donner des résultats comparables entre eux. Et on constate plus précisément que dans ce domaine les résultats de Allis [15] et de Winkler [72] sont proches de notre étude.

Dans la région d'énergie supérieure à 4.66 eV (queue de la fonction de distribution), le désaccord entre les différentes méthodes est plus ou moins important selon la méthode de calcul utilisée. Nous rappelons que cette partie de la fonction de distribution est capitale pour le calcul des taux d'excitation, notamment ceux des deux niveaux de l'atome du mercure, qui sont responsables de l'émission des radiations UV 253.7 nm et 184.9 nm, d'où l'examen particulier

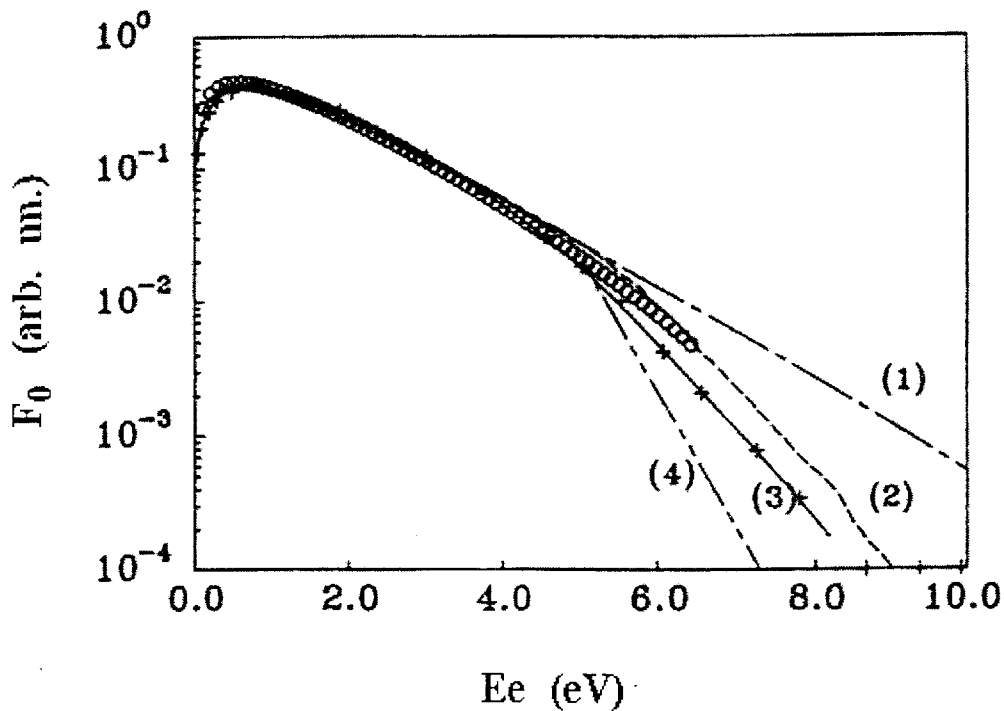


Figure. III.8 : FDEE calculée (1 :Maxwell, 2 :Lagushenko, 3 :Boltzmann, 4 :Deux groupes, (+) : Winkler) et expérimentale (o).

dont fait l'objet la queue de la fonction de distribution. Nous observons sur la figure III.8 que selon la méthode de calcul, les taux de productions qui découlent de ces fonctions de distribution seront sous ou sur- estimés selon les résultats trouvés, ce qui affecte directement l'estimation de la quantité de lumière émise par la décharge.

III.3.6.4 Comparaison de notre FDEE à celle de Lagushenko et Mava [42].

Concernant les autres méthodes de calcul, on voit que la distribution d'Allis [Da-1], qui est obtenue empiriquement, est très comparable jusqu'à 7 eV à la distribution de Lagushenko et Mava [42] (dans ce travail on a adopté cette méthode). La différence entre nos calculs et ceux de Lagushenko et Mava augmente quand la température aux parois diminue figure III.9. La conséquence de cette différence sur les taux d'excitation du mercure est loin d'être négligeable elle est de l'ordre de 75% à 20°C points froid.

La figure III-9 représente la comparaison de la fonction de Lagushenko à la solution de l'équation de Boltzmann pour plusieurs températures du point froid. On remarque, que les différences entre les deux courbes s'accroissent au fur et à mesure que la température du point froid diminue.

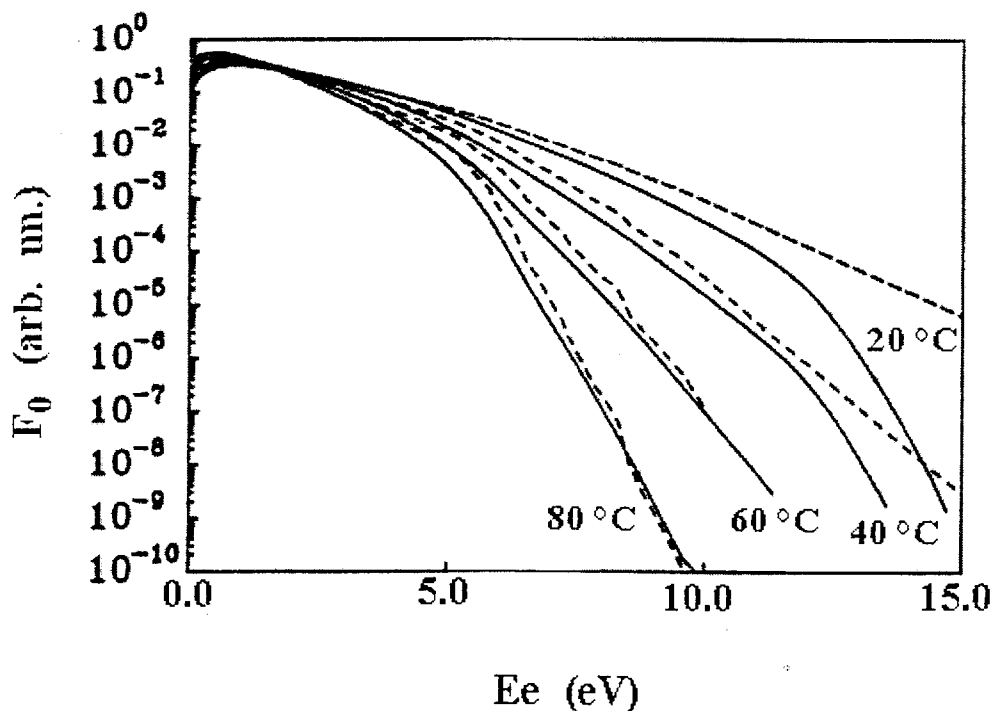
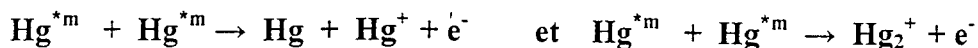


Figure. III.9 : Fonction de Langushenko (. . .) et le calcul de Boltzmann (-) pour plusieurs températures de point froid.

III.3.7 Influence des processus collisionnels

Tout d'abord, notre étude, montrent que les collisions électron-ion sont pratiquement négligeables car les densités des particules chargées restent faibles à cause du faible degré d'ionisation du plasma. Les interactions coulombiennes entre les électrons sont par contre loin d'être négligeables. Dans cette étude, on a pris en considération les réactions :



On remarque que nos résultats restent comparables à ceux de Winkler et présentent aussi des diviation difficiles à ignorer entre les courbes en dessous de 1 eV et au dessus de 8 eV. On voit la différence qu'entraîne la non prise en considération des collisions métastable / métastable entre atomes du mercure parce que l'ionisation est surtout due à ce genre d'interactions plutôt qu'à l'ionisation Penning qui est négligeable ($Ar^{*m} \ll Hg^{*m}$). Les différences observées entre les deux courbes au dessous de 1 eV sont dues à l'ionisation Hg^{*m} / Hg^{*m} , car ces collisions créent un surcroît d'électrons d'énergie moyenne de 0.13 eV, cette énergie est inférieure à l'énergie moyenne des électrons du plasma qui est de 1.6 eV, ce qui à pour conséquence de diminuer la température électronique moyenne et aussi le taux de formation des espèces excitées du Hg. Tout ceci dépend des conditions de fonctionnement de la lampe (plus T_{pf} diminue aux parois plus cet effet devient important). Pour la partie haute énergie, on constate un appauvrissement de la fonction de distribution due à ces interactions. Ces processus obligent donc le système à s'éloigner de l'état d'équilibre.

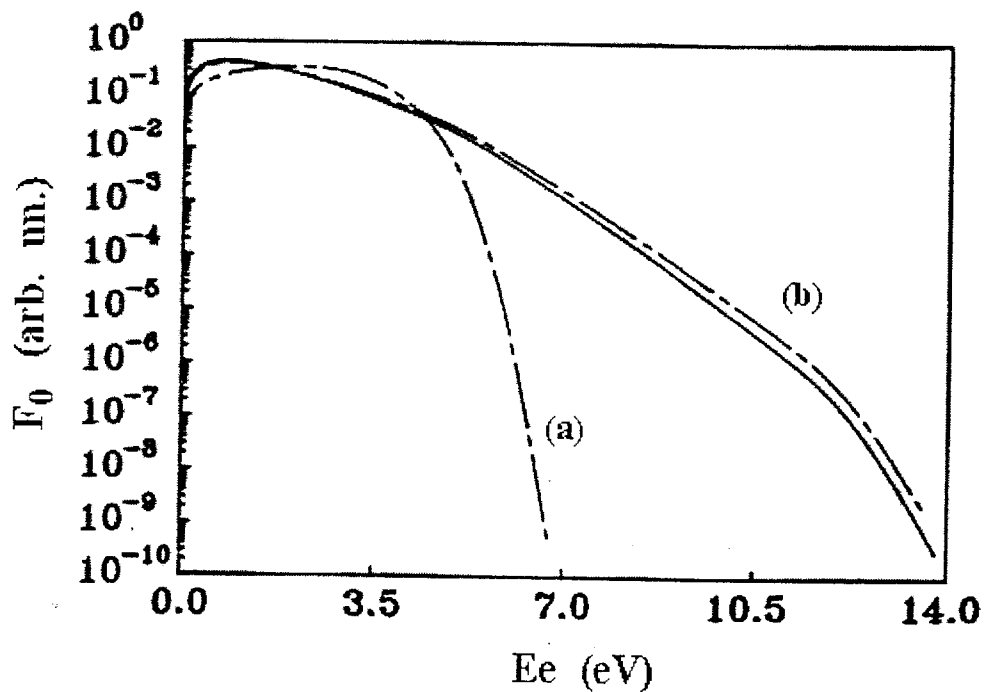


Figure.III.10 a: fonction de distribution en énergie sans les interactions $e^- - e^-$ (courbe a), avec les interactions $e^- - e^-$ (courbe b) et avec les collisions e^- / e^- plus les interactions Hg^{*m} / Hg^{*m} (—).

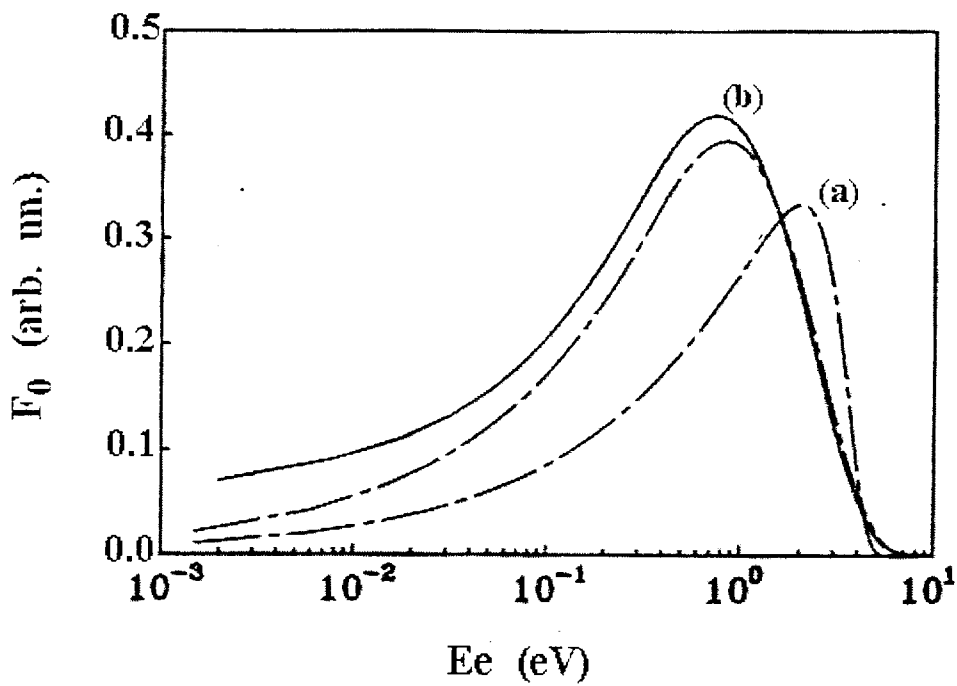


Figure III.10 b : partie basse énergie de F_0 dans le même contexte que III.10 a

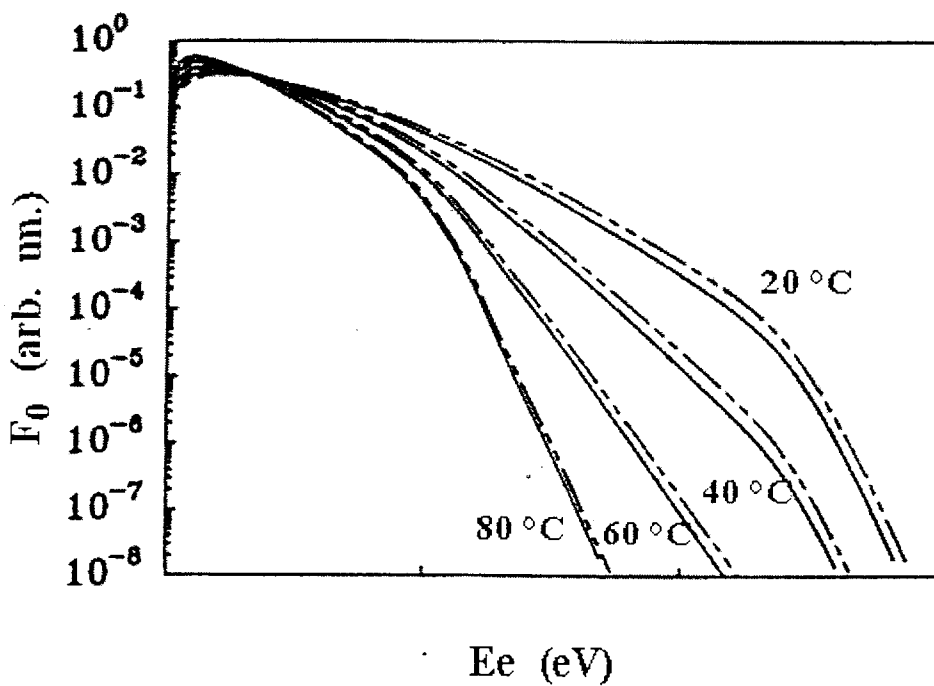


Figure III.11 : Fonction de distribution en énergie sans interactions Hg^*m / Hg^*m (courbe pointillés) et avec interactions (courbes continue), pour plusieurs températures du point froid.

La figure (III.11) montre l'effet des collisions de ce type qui diminue lorsque la température du point froid augmente, cette diminution peut s'expliquer par la déplétion considérable de la

partie haute énergie de la FDEE qui favorise à son tour la production de niveaux métastables. On remarque que l'ionisation Penning est négligeable devant l'ionisation du mercure. Cette ionisation augmente avec la diminution de la température électronique. Cet effet joue un rôle critique pendant la phase de mise en régime de la décharge car il est responsable du transfert d'excitation vers le mercure en l'ionisant.

III.3.8 Conclusion

Dans les conditions optimales de fonctionnement, environ 60% l'énergie électrique dissipée dans la décharge est convertie en radiation dont 85% en radiation 253.7nm, et le reste 15% en radiation 185 nm. La majeure partie de l'énergie résiduelle (c'est à dire 40% environ) est perdue par collisions élastiques électrons – atome du gaz rare. La conversion des 60% de l'énergie électrique en radiations passe d'abord par l'excitation des atomes de mercure, principalement, collisions électron-atome mais les deux niveaux de résonance 6^3P_1 et 6^1P_1 sont également peuplés par les niveaux supérieurs dont la contribution peut être connue par la résolution des équations de continuité des espèces excitées. Donc l'énergie électrique communiquée à la décharge et véhiculée par les électrons du milieu sert à l'excitation des atomes de mercure d'une part et à chauffer le mélange gazeux par collisions élastiques d'autre part.

Dans certains cas, pour augmenter les pertes d'énergie par collisions élastiques afin d'allonger le séjour des électrons dans le plasma (donc pour augmenter leur efficacité d'excitation des niveaux radiatifs du mercure), on ajoute 25% de néon dans l'argon. Mais il faut bien préciser que le but n'est pas d'augmenter indéfiniment les pertes par collisions élastiques car celles-ci peuvent trop réduire l'efficacité d'excitation des niveaux radiatifs du mercure par impact électronique. Le choix de la température du point froid doit lui aussi obéir à des critères d'optimisation de fonctionnement de la lampe.

Bien que la prise en compte des espèces lourdes dans la modélisation de ce type de plasma ne soit pas négligeable, le rôle essentiel joué par les électrons apparaît clairement à la lumière de cet aperçu sur les lampes fluorescentes. C'est pourquoi la fonction de distribution des électrons dont la connaissance est primordiale pour l'évaluation des taux des réactions divers niveaux d'excitation, doit être déterminée à l'aide de méthode les plus rigoureuses possibles.

Chapitre IV :

**Cinétique des électrons dans la colonne positive
d'une décharge basse pression
dans les mélanges mercure-gaz rares.
Application aux lampes fluorescentes**

INTRODUCTION.

Le but de la modélisation (complément indispensable à l'étude expérimentale) des lampes à décharges basse pression remplies de mélange gaz rare-vapeur métallique, est de prédire les conditions optimales de fonctionnement de ces lampes qui dépend de plusieurs paramètres tels que le diamètre de la lampe, le courant de décharge, la pression partielle de la vapeur métallique, et également la composition et la pression partielle du ou des gaz rares porteurs.

La décharge électrique, établie dans des enveloppes cylindriques dont le diamètre est de l'ordre de quelques cm et contenant un mélange de quelques 10^2 Pa de gaz rares avec quelques 10^{-1} Pa de vapeur de mercure présentent une très bonne efficacité de conversion de l'énergie électrique en rayonnement ultra violet. C'est cette propriété qui permet une seconde conversion, à l'aide des luminophores, de l'ultra violet en visible dans des conditions économiques.

L'efficacité de conversion est en particulier liée à la température très supérieure du nuage électronique par rapport à celle du gaz, cette valeur élevée de la température électronique permet d'obtenir une excitation sélective des trois niveaux 6^3P du mercure.

Grâce à leur longue durée de vie et à leur faible consommation d'énergie, on a cherché à utiliser les lampes fluorescentes pour l'éclairage domestique, ceci demande en pratique un "compactage" de la lampe pour obtenir une source plus ponctuelle.

Malheureusement, cette densification de l'énergie s'accompagne presque inévitablement d'une thermalisation plus grande qui détruit les avantages propres à ce type de lampe. Divers moyens ont été mis au point pour maintenir une température élevée. Un des moyens utilisés est d'augmenter les pertes des paires électron-ion pour obliger le milieu à produire plus d'électrons et, par ce biais, augmenter la température électronique.

IV.1 Principe de fonctionnement

La structure d'un tube fluorescent classique est donnée schématiquement par la figure IV.1. La lampe la plus courante (40 W puis 36 W) consiste initialement en un tube cylindrique en verre de diamètre 38 mm ou 26 mm (diamètre interne de 36 mm ou 24 mm) et de longueur 1.2 m, une poudre fluorescente ou luminophore recouvre la paroi cylindrique. Deux électrodes chaudes fixées aux extrémités du cylindre assurent le passage du courant électrique du conducteur métallique au conducteur gazeux.

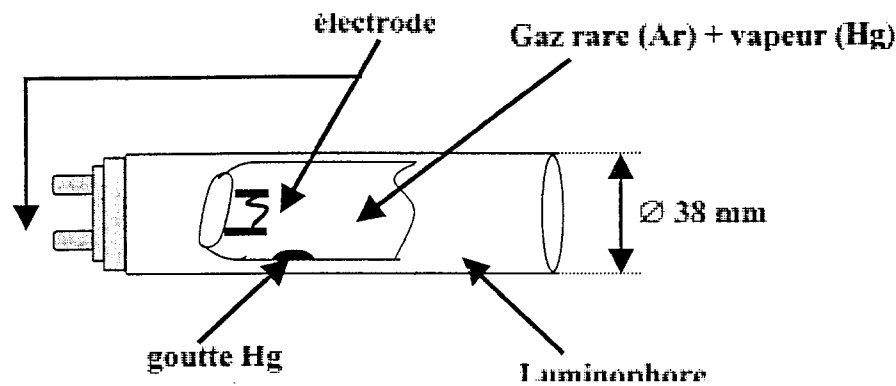


Figure. IV.1 :tube fluorescent classique.

La lampe est alimentée par le réseau 220 V 50 Hz sous un courant de 400 mA à l'aide d'un circuit électrique qui contient un ballast selfique nécessaire pour la limitation du courant et aussi pour l'amorçage de la décharge. Dans le tube on introduit une petite quantité de mercure (quelques mg) qui se condense sous forme d'une gouttelette sur la paroi à l'endroit le plus froid, appelé le point froid du tube. Le tube est rempli d'un gaz tampon, argon sous 400 Pa dans les lampes de 40 W, Krypton 73 % argon 27 % sous pression dans les lampes de 36 W. Le mercure en phase gazeuse est sous pression de vapeur saturante. La pression du mercure est donc fonction de la température du point froid. La figure IV.2 indique la pression de vapeur saturante en fonction de la température du point froid. Ainsi, dans le tube existe à tout moment un mélange gazeux de gaz rare sous quelque 10^4 Pa et du mercure la fraction est de l'ordre de 10^{-3} mg.

Le gaz tampon est choisi de façon à former avec le mercure un mélange de Penning. Ainsi, pendant la phase d'amorçage, les atomes de gaz rare qui se trouvent dans des états excités métastables peuvent communiquer (par collisions inélastiques) leurs énergies aux atomes du mercure. Le mercure s'ionise et, étant donné son potentiel d'ionisation nettement inférieur à celui du gaz tampon, c'est lui qui en définitive va assurer la production d'électrons dans la décharge. Par conséquent la température électronique, très élevée pendant la phase d'amorçage, va baisser autour de 12000 K ; elle ne sera plus alors suffisante pour exciter ou ioniser le gaz rare. La densité électronique est, en gros, fixée par le courant imposé par le circuit externe car la mobilité électronique dans le gaz tampon varie peu. Le nombre de collisions élastiques est insuffisant pour thermaliser le milieu et la température du gaz atomique restera inférieure à celle du nuage électronique ($T_g \ll T_e$).

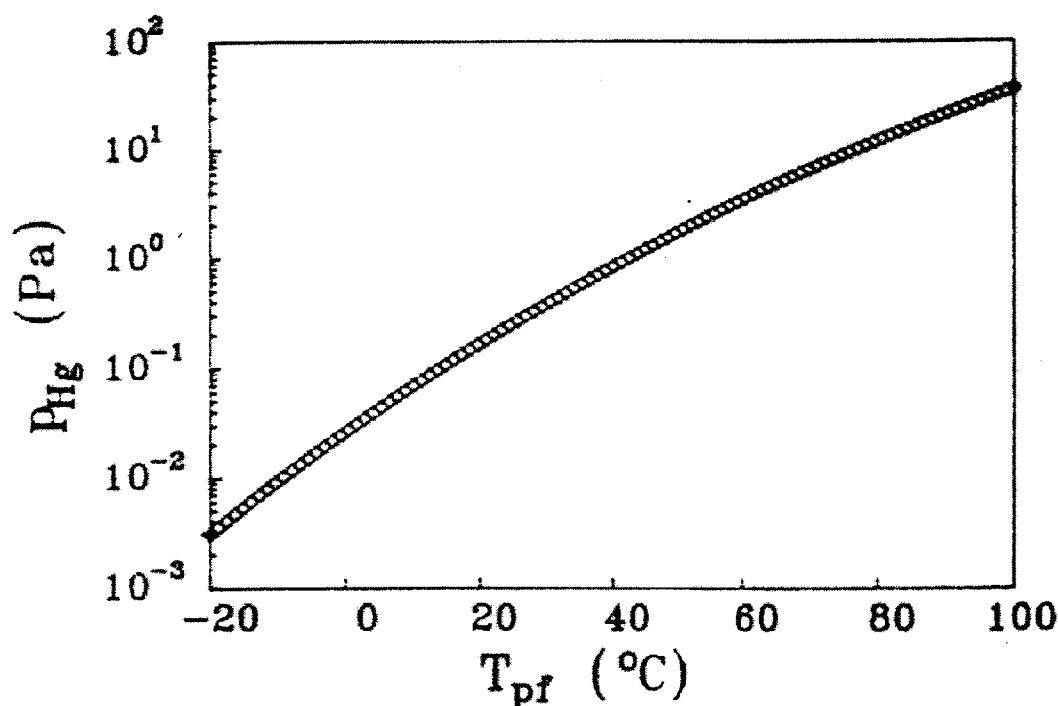


Figure. IV. 2 : Pression de vapeur saturante du mercure en fonction de la température du point froid, selon [50]

Une très grande partie de l'énergie électrique est canalisée vers l'excitation des trois niveaux 6^3P du mercure. Ces trois niveaux atomiques se situent à des énergies très voisines (4.46 eV, 4.87 eV et 5.41 eV) et ils sont fortement couplés. Le niveau 6^3P_1 est seul capable de se désexciter radiativement (la durée de vie des deux niveaux métastables supposés isolés est de l'ordre de la seconde). Donc l'énergie accumulée provisoirement sur ces niveaux aura de très fortes chances d'être libérée sous forme de rayonnement ultra violet correspondant à la raie à 253.7 nm. Etant donné que la raie à 253.7 nm est une raie de résonance, la probabilité d'emprisonnement de ces photons est assez grande. Les photons qui réussissent à sortir de la décharge excitent la poudre fluorescente qui émet alors dans le visible. L'efficacité de la production de photons à 253.7 nm pour un tube de 40 W est de l'ordre de 60 %, l'efficacité de production du rayonnement visible dépend beaucoup de l'efficacité de conversion du luminophore et de ses longueurs d'ondes d'émission. Pour les lampes linéaires actuelles on atteint 95 lm/W.

IV.2 Influence des paramètres

Nous considérons que les 3 niveaux d'énergie du mercure (fondamental (g), résonance (r), ionisation (I)). Nous réunissons donc dans (r) les trois niveaux 6^3P fortement couplés. Nous supposons que la décharge est alimentée en courant continu et qu'elle a atteint son régime

stationnaire. Les distributions radiales des électrons et de l'état r (résonance) sont supposées paraboliques avec des densités au centre respectivement égales à n_{e0} et n_{r0} .

Le seul processus susceptible de créer des électrons est l'ionisation à partir des niveaux 6^3P . La recombinaison volumique est supposée négligeable et le seul processus de perte pour les paires électron-ion est la diffusion ambipolaire suivie de la recombinaison aux parois. La condition de stationnarité impose que la production du pair électron-ion soit égale aux pertes :

$$D_a \nabla^2 n_e = \left(\frac{C_1}{R} \right)^2 n_{e0} = z_{ri}(T_e) n_{e0} n_{r0}(T_e) \quad \text{IV-1}$$

Dans la colonne positive existe un champ électrique axial E et la puissance électrique apportée par unité de longueur à la colonne positive est EI . Supposons que cette énergie est totalement convertie en rayonnement U.V. à 253.7 nm, l'équation de conservation d'énergie s'écrit alors :

$$EI = P_{254} = C_2 h\nu R_2 \frac{n_{r0}}{\tau_r^*} \quad \text{IV-2}$$

où le temps de vie effectif τ_r^* est en première approximation égal à $\tau_r / n_g R$; τ_r étant ici le temps de vie propre du niveau r .

En comparant les expressions précédentes on obtient :

$$\frac{D_a}{EI} = C_3 z_{ri}(T_e) \tau_r^* \quad \text{IV-3}$$

Le taux de transition $z_{ri}(T_e)$ est une fonction rapidement croissante de T_e qui, pour un intervalle de température limite, peut s'écrire $z_{ri}(T_e) = C_4 T_e^n$ avec $n \approx 7-8$; les C_1 représentent des constantes de proportionnalité [78].

En tenant compte de la relation qui lie D_a à μ_i , T_e , et à la pression p_{GR} de gaz rare :

$$D_a = \frac{\mu_{i0}^{Hg} p_0^{GR}}{k_B T_e p^{GR}} \quad \text{IV-4}$$

on obtient une estimation simple de T_e :

$$T_e = \left\{ C_5 \frac{\mu_{i0}^{Hg} - p_0^{GR}}{p^{GR} EI \tau_r^*} \right\}^{1/n-1} \quad \text{IV-5}$$

IV.3 Influence de la pression de vapeur du mercure et du rayon du tube

On observe qu'à puissance constante, T_e augmente si la pression de gaz rare diminue ou si l'emprisonnement du rayonnement diminue (c'est à dire si le produit $n_g R$ diminue). La pression du mercure dans la décharge est la pression de vapeur saturante fixée par la température du point froid du tube. Pour des températures basses la pression de vapeur et l'emprisonnement sont faibles mais le peuplement du niveau r est limité (n_g petit), par ailleurs la température électronique étant importante on augmente les pertes par collisions élastiques et on favorise le peuplement des niveaux. Les conditions d'obtention d'un rayonnement ultra-violet intense ne sont pas réalisées. De la même façon si la pression de mercure augmente trop, l'emprisonnement du rayonnement est tel que la température électronique diminue rapidement, ce qui limite l'augmentation du peuplement du niveau r . Par ailleurs la probabilité de désexcitation par collisions de seconde espèce est augmentée. Au total, il existe une valeur particulière de la pression (ou plus exactement du produit $n_g R$) telle que la production du rayonnement soit optimale.

IV.4 Influence de la pression et nature du gaz tampon

Etant donné que le gaz tampon règle les pertes des paires électron-ion et contrôle aussi la fraction de l'énergie perdue par collisions élastiques, il est évident que son rôle est très important dans la décharge.

Ainsi, pour un gaz tampon donné, l'augmentation de sa pression partielle provoquera une diminution des pertes des paires électron-ion par diffusion ambipolaire et donc une diminution de la température électronique. A noter que Verweij [66] a montré expérimentalement que ce raisonnement est valable dans une gamme limitée de pression, car comme le montre la figure IV.3 la température électronique reste pratiquement constante pour de très faibles et de très fortes valeurs de la pression du gaz rare. La nature du gaz tampon conditionne également la mobilité électronique dans la décharge ainsi que l'importance des pertes électroniques.

IV.5. Influence du courant électrique

La densité électronique dans le plasma est sensiblement proportionnelle au courant électrique. Donc en augmentant le courant, la croissance de la densité électronique provoquera tout d'abord une augmentation du nombre de collisions qui conduisent à l'état rayonnant. La population du niveau augmente et la production du rayonnement croît. Une augmentation supplémentaire de la densité électronique se traduira par une croissance des pertes par collisions élastiques. Le milieu va être chauffé et nous avançons vers une thermalisation, l'état du milieu se déplace vers l'état d'équilibre et l'efficacité de production du rayonnement décroît.

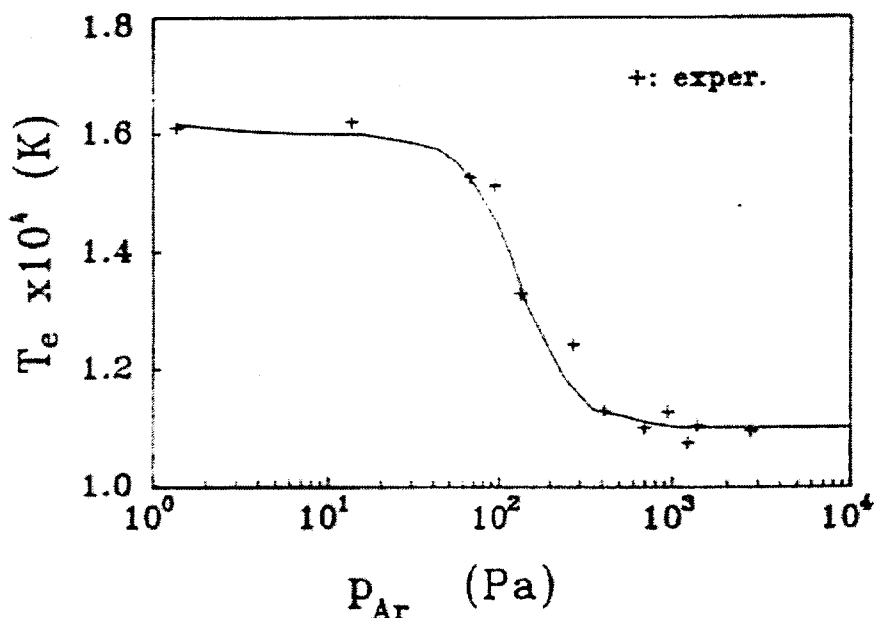


Figure IV. 3 : Dépendance de la température électronique en fonction de la pression du gaz tampon dans un tube de 36 mm de diamètre pour une température du point froid de 40°C , selon [66]

IV.6 MODELISATION

Par suite de leur intérêt commercial les tubes fluorescents classiques ont été beaucoup étudiés à la fois expérimentalement et théoriquement. Nous pouvons distinguer les travaux de Kenty [37], Verweij [66] sur le plan expérimental et les travaux de Waymouth et Bitter [68] puis Cayless [7].

Nous avons vu que les décharges mercure-gaz rare basse pression correspondent à des situations très éloignées de l'équilibre thermodynamique local, et que la fonction de distribution n'est plus Maxwellienne, surtout dans sa partie haute énergie.

Si on veut modéliser d'une façon générale la colonne positive d'une décharge électrique, on doit faire appel à un modèle qui tienne compte du bilan complet que nous venons d'évoquer précédemment. Le modèle, dit Collisionnel-Radiatif tient compte en effet, des paramètres externes de ce bilan tels que la nature et la pression du gaz tampon et celles du gaz actif, la géométrie de l'enceinte, la puissance électrique acheminée par le circuit externe, etc. La modification de ces paramètres va influencer directement sur les fréquences de collisions, modifier la densité et la distribution énergétique du nuage électronique. Deux conditions-supplémentaires nécessaires à l'existence du plasma entrent en jeu :

La première est la neutralité électrique locale dans la colonne positive. La deuxième doit être réalisée en régime stationnaire : quel que soit le(s) mécanisme(s) de pertes des paires électron-ion, le taux de disparition est toujours compensé par l'ionisation de telle sorte que :

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{pertes de} \\ \text{paires } e^- \text{ - ion} \end{array} \right\} = \left\{ \begin{array}{l} \text{production de} \\ \text{paires } e^- \text{ - ion} \end{array} \right\}$$

Ces deux lois principales qui régissent le fonctionnement de la décharge, couplées aux lois de conservation de la masse et de l'énergie du nuage électronique et des particules lourdes et enfin l'équation d'état du plasma, constituent un système d'équations auto-cohérent qui peut décrire le fonctionnement de la décharge.

Bien que la conception du modèle C.R. soit plutôt simple, sa réalisation est souvent difficile à cause du grand nombre de phénomènes qui interviennent. Ces nombreux phénomènes nécessitent un grand volume de données de base ainsi que des méthodes numériques efficaces pour le traitement du nombre important d'équations souvent fortement couplées entre elles. Nous nous verrons obligés de poser un certain nombre d'hypothèses pour pouvoir procéder à une résolution numérique de ces équations.

IV.7 Difficultés

La première difficulté provient de la structure atomique de l'élément actif (mercure) qui est assez compliquée. Par exemple, il existe deux niveaux résonants, dont l'un est «encadré» étroitement par deux états métastables qui agissent comme «réservoirs d'excitation» et dont le comportement varie en fonction du mode d'alimentation électrique [14].

On doit également tenir compte du fait que le potentiel d'ionisation du mercure est voisin du potentiel d'excitation des premiers niveaux métastables de l'argon. Cette situation qui permet de former un mélange de Penning, complique encore la tâche.

Chaque niveau excité est couplé avec le fondamental et avec les autres états excités, ainsi qu'avec le niveau d'ionisation, par des «voies» collisionnelles et/ou radiatives. Ainsi, en tenant compte de N niveaux atomiques ce qui implique la définition $N(N-1)$ transitions collisionnelles par impact électronique ce qui implique la détermination $N(N-1)$ taux de réactions et par conséquent on détermine les sections efficaces de $N(N-1)$ transitions ainsi que la fonction de distribution électronique.

L'équation de conservation de chaque niveau atomique est non linéaire et couplée avec celles des $N-2$ autres niveaux et celle de la densité électronique.

Les collisions inter-atomiques entre les états excités et le fondamental de même espèce chimique ou avec des atomes étrangers peuvent aboutir à une modification de l'état du plasma. Ainsi, nous sommes obligés d'ajouter des termes supplémentaires qui rendent compte des effets de quenching, d'ionisation Penning, d'ionisation associative, etc.. qui parfois, sont loin d'être négligeables.

Il est très difficile de compter de la même façon le nombre de termes représentant les transitions radiatives. Cependant, nous avons besoin de connaître les probabilités de transitions radiatives qui interviennent. La connaissance du profil des raies est également nécessaire pour le calcul du transfert du rayonnement. A ce niveau, la présence du gaz rare et des divers isotopes du mercure compliquent considérablement le calcul.

Il ne faut pas oublier que dans les décharges qui nous intéressent, le mercure est l'espèce minoritaire et c'est lui qui s'excite et qui s'ionise. Les phénomènes de transport tels la diffusion introduit des termes de type $\text{div}(D_j \text{grad} n_j)$, la Connaissance des coefficients de diffusion la mobilité électronique, ionique dans le milieu nous facilite considérablement le calcul du coefficient ambipolaire. Et dans le plasma existe une seule espèce ionique (Hg^+). La présence des ions (Ar^+ , Hg_2^+) complique considérablement le calcul.

En négligeant complètement des phénomènes comme la convection, la cataphorèse, la disparition du mercure par adsorption aux parois, nous aboutissons à un système de N équations différentielles non-linéaires pour chaque position radiale dans le tube. La résolution du système nous donnera les densités des espèces excitées et ioniques à chaque position radiale dans la colonne positive et à chaque instant du fonctionnement de la décharge.

D'autres difficultés proviennent du fait que la température électronique est complètement différente de la température des particules lourdes. Ceci nous oblige à avoir deux équations de balance d'énergie, une pour les particules neutres et une pour le gaz électronique. L'équation pour le nuage électronique a une forme compliquée car certains termes dépendent de la température électroniques il s'agit d'une équation intégral-différentielle à résoudre par rapport à la température électronique.

IV.8 Equations de base

Les équations principales qui régissent le fonctionnement de la colonne positive sont établies dans le cas général d'une décharge à géométrie cylindrique. La figure IV.4 montre le système de coordonnées et les surfaces et volumes élémentaires (selon Cayless[7]).

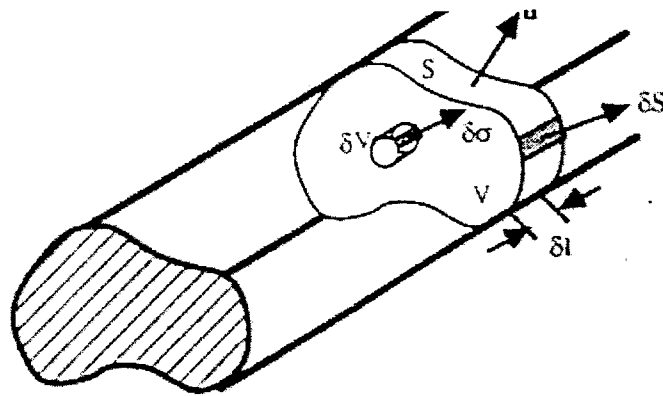


Figure IV. 4 : Section droite généralisée de la colonne positive

IV.8.1 Conservation population des états atomiques

La figure IV.5 résume les mécanismes de peuplement et de dépeuplement d'un niveau atomique excité j.

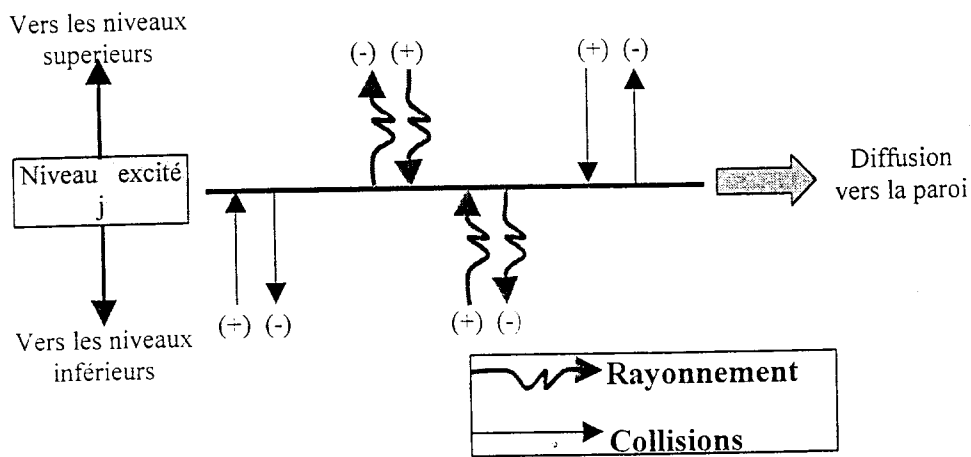


Figure.IV.5 : Mécanismes de peuplement (+) et dépeuplement (-) du niveau excité j.

Le nombre de transitions collisionnelles par impacts électroniques dans le volume élémentaire δV est égal à.

$$n_e \sum_{k \neq j} (n_k z_{kj} - n_j z_{jk}) \delta V \tag{IV-6}$$

Le premier terme représente le peuplement du niveau j et le deuxième son dépeuplement. De façon similaire le nombre de transitions par collisions inter-atomiques s'écrit :

$$\sum_m n_m \sum_{k \neq j} (n_k z_{kj;m} - n_j z_{jk;m}) \delta V \tag{IV-7}$$

Où $z_{kj;m}$ sont les taux de réaction pour la transition $k \rightarrow j$ et leurs inverses, par collisions avec l'espèce m .

En faisant appel au concept d'emprisonnement du rayonnement, le nombre de transitions radiatives dans l'élément de volume δV peut s'écrire, en regroupant l'émission et l'absorption de la raie, sous forme d'une émission effective avec une probabilité A^* . On tient compte, pour le niveau j , du fait que les termes de type $n_k A_{kj}^*$ concernent les raies qui arrivent à ce niveau à partir des niveaux supérieurs et les termes de type $n_j A_{jk}^*$ concernent les dépeuplement par émission vers les niveaux inférieurs. On aboutit ainsi à la relation:

$$\left\{ \sum_{K>J} n_K A_{KJ}^* - n_J \sum_{K<J} A_{JK}^* \right\} \delta V \tag{IV-8}$$

Le taux des pertes par diffusion de l'espèce atomique j dans le gaz tampon g s'écrit sous forme :

$$- \int_{\sigma} D_{jg} n_g \text{grad} \left[\frac{n_j}{n_g} \right] d\sigma \tag{IV-9}$$

D_{jg} est le coefficient de diffusion de l'espèce j dans le gaz g .

On sait que pour un vecteur a quelconque la relation suivante est vérifiée:

$$\lim_{\delta V \rightarrow 0} \frac{1}{\delta V} \int_S a dS \equiv \text{div} a \tag{IV-10}$$

Si bien qu'en combinant les relations IV.6 à IV.10 nous aboutissons à l'équation de conservation de la population du niveau j :

$$\begin{aligned} \frac{dn_j}{dt} = & n_e \sum_{K \neq j} (n_K z_{Kj} - n_j z_{jK}) + \sum_m n_m \sum_{K \neq j} (n_K z_{Kj;m} - n_j z_{jK;m}) \\ & + \left\{ \sum_{K>J} n_K A_{KJ}^* - n_J \sum_{K<J} A_{JK}^* \right\} + \text{div} \left\{ D_{jg} n_g \text{grad} \left[\frac{n_j}{n_g} \right] \right\} \end{aligned} \tag{IV-11}$$

Pour les niveaux radiatifs où le terme de diffusion n'existe plus, nous pouvons résoudre directement l'équation par rapport à la densité inconnue n_j [78]:

$$n_j = \frac{n_e \sum_{K \neq j} n_K z_{Kj} + B_j}{n_e \sum_{K \neq j} z_{jK} + A_j} \tag{IV-12}$$

A_j est le terme de déplétion du niveau par émission du rayonnement vers les autres niveaux inférieurs et B_j est le terme de peuplement par le rayonnement émis par les niveaux supérieurs qui aboutit au niveau considéré.

IV.8.2 conservation du nombre d'électrons

L'équation de conservation du nombre d'électrons est similaire à celle des états excités (équ IV.11) sauf qu'elle ne contient pas de termes de rayonnement. Si l'on regroupe les termes d'ionisation de Penning et d'ionisation associative sous un terme de génération d'électrons secondaires G_L , nous pouvons écrire:

$$\frac{dn_e}{dt} = n_e \sum_k (n_K z_{ki} - n_e z_{ik}) + G_L + \text{div} \left\{ D_a n_g \text{grad} \left[\frac{n_e}{n_g} \right] \right\} \quad IV - 13$$

Le terme $n_e^2 z_{ik}$ rend compte de l'association à trois corps dans le volume δV de la colonne positive

Nous pouvons remarquer que l'équation (IV.13) est homogène par rapport à n_e (le terme G_L dépend lui aussi de n_e à travers les densités des niveaux excités qui interviennent dans les processus inter-atomique).

$$G_L = \frac{n_m^{Ar}}{n_e} v_p^{Ar} \frac{\delta(v - v_{e1})}{v} + \frac{n_m^{Hg}}{n_e} v_{mm}^{Hg} \frac{\delta(v - \delta_{e2})}{v} \quad IV - 14$$

IV.8.3. Conservation de l'énergie du gaz atomique

La chaleur qui est générée dans le volume δV est due aux collisions élastiques entre les électrons et les atomes de gaz rare ou de mercure. Elle s'exprime sous la forme:

$$n_e n_g \left[\frac{2m_e}{M_g} \int_0^\infty v_e(u) E_e(u) Q_{ge}^m(u) F_0(u) du + \frac{2m_e n_{Hg}}{M_g n_g} \int_0^\infty v_e(u) E_e(u) Q_{Hge}^m(u) F_0(u) du \right] \delta V \quad IV - 15$$

Le premier terme représente les collisions élastiques gaz rare/électrons le deuxième les collisions élastiques Hg/e. Il faut noter que le deuxième terme est souvent négligeable devant le premier sauf dans le cas des fortes températures de point froid.

Les pertes par conduction de chaleur vers la paroi s'expriment par:

$$- \int_{\sigma} \kappa_g \text{grad} T_g d\sigma \quad IV - 16$$

κ_g est la conductivité thermique du mélange gaz rare-mercure.

En combinant les termes (IV.15 et IV.16) et en faisant appel à la relation (IV.10) nous obtenons l'équation de conservation de l'énergie pour le gaz atomique:

$$C_V^g \frac{dT_g}{dt} = n_e n_g \left[\frac{2m_e}{M_g} \int_0^\infty v_e(u) E_e(u) Q_{ge}^m(u) F_0(u) du + \frac{2m_e n_{Hg}}{M_g n_g} \int_0^\infty v_e(u) E_e(u) Q_{Hge}^m(u) F_0(u) du \right] + \text{div} \{ \kappa_g \text{grad} T_g \} \quad \text{IV-17}$$

IV.8.4 Conservation de l'énergie électronique

L'équation de conservation de l'énergie électronique contient plusieurs termes qui rendent compte des phénomènes suivants:

- Apport d'énergie dans la colonne positive par le champ électrique :

$$\sigma E_2 \delta V \quad \text{IV-18}$$

➤ Pertes d'énergie par collisions élastiques avec le gaz rare et avec le mercure, données par l'équation (IV.15)

- Pertes par ionisation et excitation du mercure et dans certains cas du gaz rare :

$$n_e \sum_{j < k} n_k \delta V \int_{u_{kj}}^\infty v_e(u) E_{kj} Q_{jk}(u) F_0(u) du \quad \text{IV-19}$$

Où u_{kj} est le seuil de réaction exprimé en eV.

- Gains lors des collisions de deuxième espèce :

$$n_e \sum_{j > k} n_j \delta V \int_{u_{jk}}^\infty v_e(u) E_{jk} Q_{kj}(u) F_0(u) du \quad \text{IV-20}$$

Pertes par association moléculaire $Hg_2^+ + e^- \rightarrow 2Hg$ que nous symboliserons par P_{ass} .

- Pertes par diffusion ambipolaire, elles s'expriment par:

$$- \int_{\sigma} D_a n_g \text{grad} \left[\frac{n_e}{n_g} \right] \left\{ \int_0^\infty E_e(u) F_0(u) du \right\} d\sigma \quad \text{IV-21}$$

Où la deuxième intégrale représente l'énergie moyenne qui est emportée par électron vers la paroi.

- Pertes par conduction thermique du nuage électronique, qui s'écrivent:

$$- \int_{\sigma} \kappa_e \text{grad} T_e d\sigma \quad \text{IV-22}$$

En combinant les équations (IV.18) à (IV.22) avec la relation (IV.15) et en utilisant la relation (IV.10), nous obtenons l'équation de conservation de l'énergie pour le nuage électronique:

$$\begin{aligned}
C_V^e \frac{dT_e}{dt} = & \sigma E^2 - n_e n_g \left[\frac{2m_e}{M_g} \int_0^\infty v_e(u) E_e(u) Q_{ge}^m(u) F_0(u) du + \frac{2m_e n_{Hg}}{M_g n_g} \int_0^\infty v_e(u) E_e(u) Q_{Hge}^m(u) F_0(u) du \right] \\
& - n_e \sum n_k \delta V \int v_e(u) E_{kj} Q_{jk}(u) F_0(u) du + n_e \sum n_j \delta V \int v_e(u) E_{jk} Q_{kj}(u) F_0(u) du \\
& - P_{ass} + \operatorname{div} \left\{ D_a n_g \operatorname{grad} \left[\frac{n_e}{n_g} \right] \right\} \left[\int_0^\infty E_e(u) F_0(u) du \right] + \operatorname{div} \{ \kappa_e \operatorname{grad} T_e \}
\end{aligned} \tag{IV-23}$$

En intégrant l'équation (IV.23) sur la section du tube nous pouvons déduire la valeur du champ électrique en connaissant le courant I :

$$E = \frac{\int_S P_{el}^{Ar}(r) + P_{el}^{Hg}(r) + P_{ex}^{Hg}(r) - P_{sel}^{Hg}(r) + P_{ex}^{Ar}(r) - P_{sel}^{Ar}(r) + P_{ion}^{Hg}(r) + P_{ion}^{Ar}(r) dS + 2\pi D_a(R) \frac{dn_e}{dr} \Big|_{r=R}}{I} \tag{IV-24}$$

➤ La neutralité électrique locale en tenant compte de la présence de plusieurs types d'ions une fois chargés :

$$n_e = \sum_{ion} n_i \tag{IV-25}$$

➤ La loi des gaz parfaits pour le gaz tampon :

$$p_g = n_g k_B T_g \tag{IV-26}$$

Si les réactions entre le gaz tampon et le mercure sont négligeables et si la pression totale restée constante, la pression totale du mercure restant également invariante dans le tube.

$$I = eE \int_S n_e \mu_e dS + I_+ \tag{IV-27}$$

I_+ courant ionique (en général négligeable).

➤ Le profil de la densité électronique peut être déduit en utilisant la neutralité électrique locale :

$$\beta_e(r) \equiv \frac{n_e(r)}{n_e(0)} = \frac{n_{Hg^+}(r) + n_{Ar^+}(r)}{n_{Hg^+}(0) + n_{Ar^+}(0)} \tag{IV-28}$$

➤ La densité électronique centrale peut être calculée par :

$$n_e(0) = \frac{I}{E \int_S \beta_e(r) \mu_e(r) dr} \tag{IV-29}$$

IV.8.5 Conditions aux limites

La résolution du système qui contient les équations (IV.11, IV.12, IV.17 et IV.23 à IV.27) nous donnera les densités des divers états atomiques, les densités ionique et électronique, la

température du gaz et la température électronique ainsi que le champ électrique, pour chaque position dans la colonne positive à condition que nous connaissions les conditions aux limites.

Cayless [7] a donné de façon assez rigoureuse les conditions aux limites à la paroi :

➤ L'état fondamental du mercure:

$$n_0(\text{paroi}) = \frac{p(T_{pf})}{K_B T_{pf}} \quad \text{IV-30}$$

$p(T_{pf})$ est la pression de vapeur saturante du mercure à la température T_{pf} du point froid.

➤ Les états excités et les électrons Cayless évalue la condition aux limites en égalisant le nombre de particules qui arrivent par diffusion avec le nombre de particules qui rebondissent à la paroi:

$$d\Gamma_j = -D_j n_g \text{grad} \left[\frac{n_j}{n_g} \right] dS \quad \text{IV.31}$$

➤ Les métastables, la théorie cinétique de Langevin montre que:

$$d\Gamma_j = \frac{3D_j n_j}{4\lambda_j^m} \quad \text{IV-32}$$

λ_j^m est le libre parcours moyen de l'état excité j .

➤ Les niveaux résonnants :

$$d\Gamma_j = \frac{n_j \lambda_j^m}{2\tau_j} dS \quad \text{IV-33}$$

τ_j est la durée de vie du niveau j . Le facteur 2 provient du fait que le photon qui est émis à la paroi a les mêmes chances de s'échapper du tube ou de rester dans le tube.

Nous pouvons regrouper les conditions aux limites pour les états excités sous la forme générale :

$$\left. \frac{n_j}{n_g} \right|_{\text{parois}} = k_j \text{grad} \left[\frac{n_j}{n_g} \right]_{\text{parois}} u \quad \text{IV-34}$$

k_j est donné par :

$$k_j = \begin{cases} 4\lambda_j^m/3 & \text{pour les métastables} \\ \lambda_j^m/2 & \text{pour les résonnants} \\ \lambda_j^m & \text{pour les électrons} \end{cases}$$

Pour simplifier les calculs, dans une première approximation nous pouvons considérer que les densités des états excités et des électrons sont nulles à la paroi.

➤ Pour la température du gaz atomique, nous imposons la condition suivante:

$$T_g(\text{paroi}) = T_{pf}$$

➤ Les conditions aux limites au centre de la colonne positive dans le cas de symétrie cylindrique se traduisent par :

$$\left. \frac{dn_j}{dr} \right|_{r=0} = 0 \quad \text{et} \quad \left. \frac{dT_g}{dr} \right|_{r=0} = 0 \quad \text{IV-35}$$

IV.8.6 Hypothèses générales

Nous considérerons une colonne positive axialement uniforme et stationnaire, ce qui se traduit par:

$$\frac{\partial}{\partial z} = 0 \quad \text{et} \quad \frac{\partial}{\partial t} = 0 \quad \text{IV-36}$$

Ces deux conditions excluent la présence de striations stationnaires, out non-stationnaires, dans la colonne positive.

➤ La colonne positive est cylindrique, ceci revient à dire que:

$$\frac{\partial}{\partial \theta} = 0 \quad \text{IV-37}$$

La décharge est alimentée par un courant continu. Ceci correspondrait en réalité à une alimentation en créneaux de courant alternatif à basse fréquence (hypothèse acceptée par tous les auteurs).

La colonne positive est électriquement neutre. La génération des paires électron-ion se fait dans le volume de la décharge surtout par impacts électroniques. Par contre, la disparition de ces paires électron-ion se fait quasi- uniquement par recombinaison à la paroi du tube, où elles arrivent par diffusion ambipolaire. Ceci signifie que, dans les équations précédentes, tous les termes de recombinaison s'annulent et sont remplacés par une condition aux limites:

$$n_e(R) = n_i(R) = 0 \quad \text{IV-38}$$

R est le rayon du tube. La "gaine" autour de la paroi est considérée comme infiniment mince.

La condition de stationnarité exige que la production de paires électron-ion soit égale à leur destruction. Compte tenu des hypothèses admises, on peut dire que la température électronique reste en première approximation constante dans la direction radiale :

$$\frac{dT_e}{dr} = 0 \quad \text{IV-39}$$

Pour des diamètres de l'ordre de quelques centimètres, cette hypothèse est vérifiée par les mesures de sonde de Verweij [66] comme l'illustre la figure IV.6 . A noter que dans tous les cas la température électronique n'est pas suffisante pour justifier la présence d'ions plusieurs fois chargé dans le plasma.

Le rayonnement de résonance, est supposé partiellement emprisonné dans la décharge.

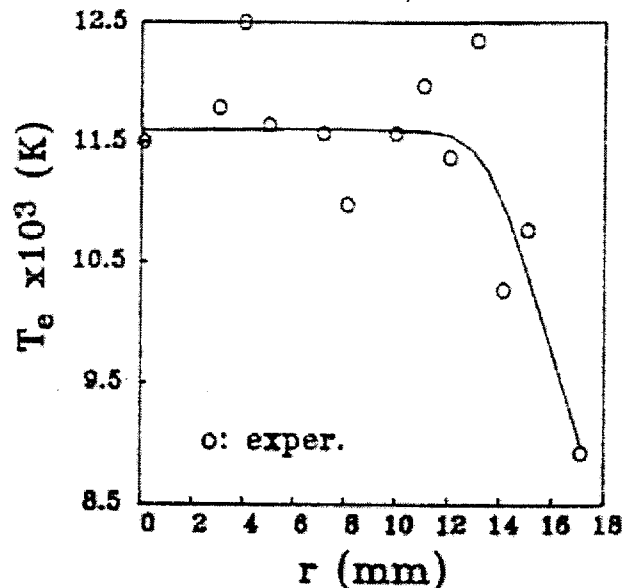


Figure IV. 6 : Température électronique en fonction de la position radiale dans le tube , mesurée par Verweij [66]

IV.9 Modèle de Waymouth

Waymouth [68], [69] a développé un modèle susceptible de décrire le plasma des tubes fluorescents classiques (diamètre de 24 mm à 40mm, courant de 200 mA à 800 mA, pression du gaz rare 267 Pa à 667 Pa). Ce modèle est très simple et se présente sous forme d'un programme simple ou sous forme graphique (abaques).

- ❖ Il prend en compte les niveaux 6^1S_0 , 6^3P_1 , 6^3P_2 , et les niveaux fictifs qui regroupent 6^1P_1 , 7^3S_1 et 6^3D .
- ❖ Le niveau 6^3P_0 est complètement négligé car ses populations sont souvent faibles devant les populations des deux autres niveaux 6^3P (pas toujours vrai)
- ❖ Seul le mercure est excité et ionisé (pas toujours vérifié).
- ❖ L'ionisation du mercure se fait par palier et uniquement par impact électronique, les collisions entre particules lourdes sont négligées. Cette hypothèse est valable si les densités du mercure et du gaz rare restent limitées.
- ❖ Les mobilités des ions et des électrons sont déterminées uniquement par le gaz tampon (pas vérifié si la température du point froid est grande).

- ❖ La fonction de distribution électronique est supposée maxwellienne (nous savons que la fonction de distribution ne l'est pas).
- ❖ Le rayonnement de résonance à 253.7nm est partiellement emprisonné par le plasma.
- ❖ La température du gaz rare est supposée constante le long du rayon du tube (valable uniquement pour les fortes valeurs de la température du point froid).

Conclusion.

Ce modèle donne des résultats acceptables dans certains cas classiques avec les simplifications imposées mais pose pas mal de problèmes qui montrent clairement ses limites. Il a surtout pour but de prévoir les résultats expérimentaux dans le domaine de production des tubes fluorescents.

VI.10 Le modèle collisionnel-radiatif

Dans ce modèle, nous résolvons à l'état stationnaire les équations suivantes:

- ❖ Conservation de la population (IV.11) pour les niveaux excités et le niveau fondamental du mercure, les états excités de l'argon et les ions Hg^+ et Ar^+ .
- ❖ Conservation de l'énergie des particules neutres (IV. 17) et conservation de l'énergie du nuage électronique (IV.23).

Pour ce qui concerne le mercure, le niveau fondamental $6^1\text{S}_0(\text{g})$ et les six niveaux excités $6^3\text{P}_0(\text{m})$, $6^3\text{P}_1(\text{r})$, $6^3\text{P}_2(\text{s})$, $6^1\text{P}_1(\text{p})$, et $7^3\text{S}_1(\text{u})$ ont été considérés, et aussi $\text{Hg}^+(\text{i})$. Hg_2^+ est négligé dans notre cas.

En tout, **36** transitions collisionnelles, **6** ionisations collisionnelles et **5** transitions radiatives ont été considérées.

Les deux raies de résonance à **253.7 nm** et **184.9 nm** sont partiellement emprisonnées dans le plasma. On suppose que la seule cause d'élargissement des raies est l'effet Doppler et que le rôle du gaz tampon est négligeable. L'influence de la composition isotopique du mercure est prise en compte d'une façon approximative et les raies visibles sont considérées comme non emprisonnées.

En ce qui concerne l'argon, l'observation expérimentale d'une lueur violette dans les cas où la température du point froid est inférieure à 0°C très faible concentration de mercure est que l'hypothèse commune le mercure est l'unique corps actif dans la décharge n'est pas valable dans le cas de faibles températures du point froid.

Nous avons donc introduit la possibilité d'excitation et d'ionisation de l'argon. A part l'ion Ar^+ , nous avons regroupé les deux premiers niveaux radiatifs et les deux premiers niveaux métastables, en un seul niveau fictif (f).

L'ionisation de l'argon se fait uniquement par palier à partir du niveau f. L'excitation du niveau f se fait par impact électronique à partir du fondamental. Sa destruction collisionnelle est prise en compte. Une raie de résonance à 104.8 nm est émise par le niveau f, et est partiellement emprisonnée par le plasma. Elle est traitée de façon similaire à celle des raies du mercure.

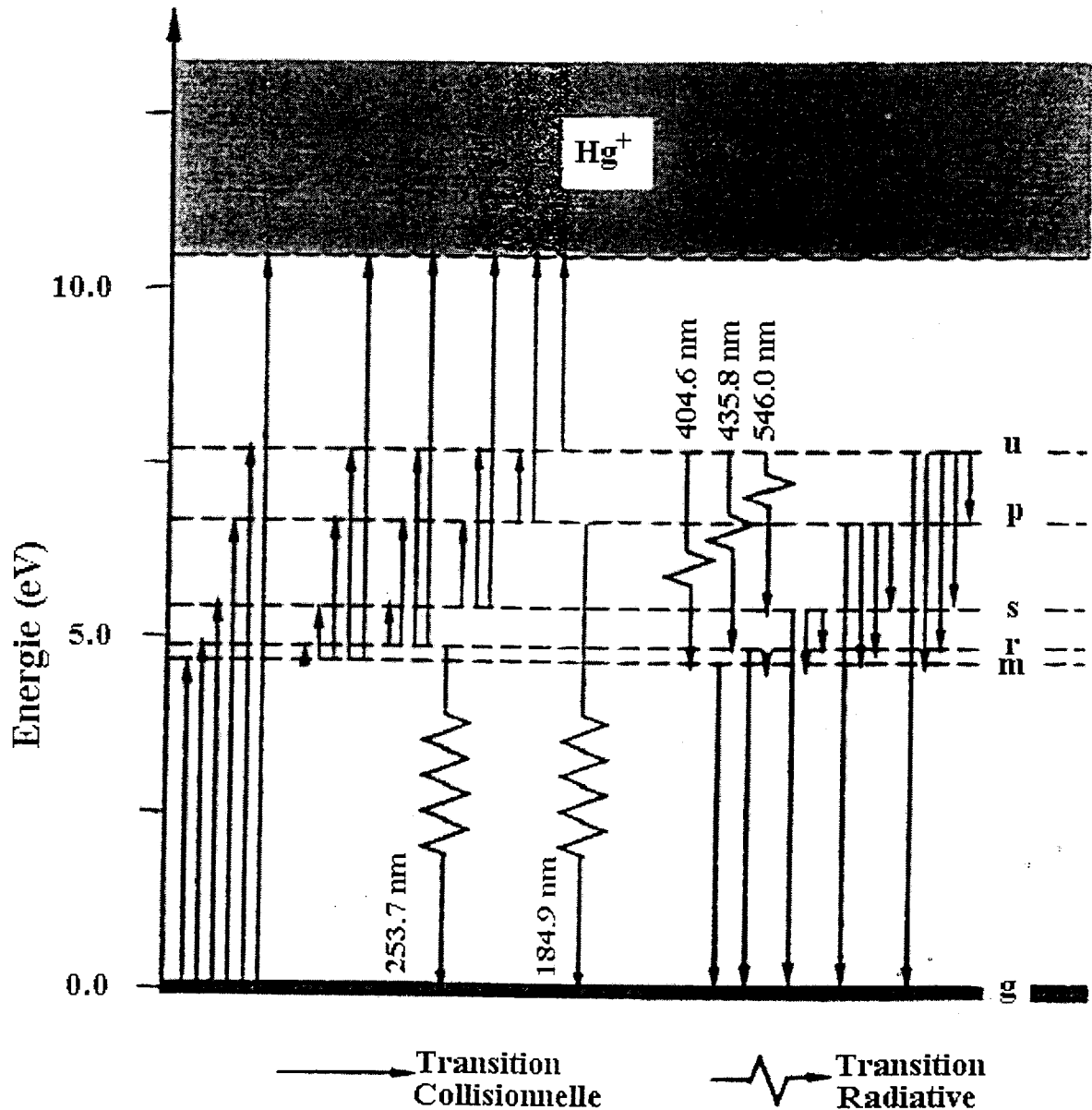


Figure. IV. 7 : Structure atomique du mercure et transitions collisionnelles et radiatives intervenant dans le modèle.

La F.D.E.E. n'étant pas maxwellienne, nous avons opté pour la relation de Lagushenko et Maya comme fonction de distribution (pour sa simplicité).

Nous supposons que la température électronique est uniforme sur la section du tube (supposition pas toujours valable) et que les coefficients de transport sont fixés uniquement à partir du gaz tampon et tout en tenant compte de l'influence du mercure qui risque de ne plus être négligeable à des températures de point froid supérieures à 50 °C.

Nous supposons que l'hypothèse de la diffusion ambipolaire simple reste valable bien que dans la décharge existent des ions de Hg. Cette hypothèse est justifiée par le fait que, à basse température du point froid ($T_{pf} < 5$ °C), la fraction d'ions de mercure est faible devant la fraction d'ions d'argon. Pour les fortes températures du point froid ($T_{pf} > 25$ °C) la fraction d'ions Ar^+ est pratiquement nulle par rapport à celle des ions Hg^+ . Nous avons donc une diffusion ambipolaire des paires Hg^+e^- dans un mélange Ar-Hg.

Dans notre travail, nous avons supposé que les niveaux radiatifs n'ont pas le temps de diffuser vers la paroi car leur durée de vie est inférieure au temps caractéristique de diffusion ordinaire. Par contre, les niveaux métastables (6^3P_0 et 6^3P_2) ayant des durées de vie radiatives de l'ordre de la seconde, ont le temps de diffuser vers la paroi où ils se dés excitent en communiquant leur énergie à la paroi du tube.

IV.10.1 Les données nécessaires pour le calcul :

- ❖ Paramètres de la décharge : rayon, pression et température de remplissage du tube en argon, température du point froid supposée constante le long du tube, courant électrique.
- ❖ Données atomiques : énergies et multiplicités des niveaux excités du mercure et de l'argon. Sections efficaces élastiques, inélastiques et super-élastiques. Mobilités ioniques à 0°C et 133.3 Pa. Coefficients de diffusion des états métastables du mercure.
- ❖ Coefficients du potentiel Lennard-Jones et intégrales de collision pour le calcul des coefficients de transport du mélange.
- ❖ Longueurs d'onde des transitions radiatives et durées de vie naturelles des niveaux émetteurs.

IV.10.2 Conditions aux limites

- ❖ Température du gaz à la paroi égale à la température du point froid.
- ❖ Densité du fondamental du mercure à la paroi égale à la densité donnée par la pression de vapeur saturante à la température du point froid.
- ❖ Densités nulles des états excités sur la paroi.

- ❖ Dérivées au centre nulles.

IV.10.3 Solution initiale complète

Cette solution doit obéir aux conditions et contraintes imposées :

Fonction de distribution électronique maxwellienne à une température T_e , (pris du modèle de Waymouth).

- ❖ Densités centrales des niveaux excités qui suivent la loi de Boltzmann.
- ❖ La distribution radiale du fondamental est prise constante et égale à la valeur aux parois, celles des niveaux métastables suivent un profil parabolique du type :

$$n_j(r) = n_j(0) \left\{ 1 - \left[\frac{r}{R} \right]^2 \right\} \quad \text{IV-340}$$

R étant le rayon du tube.

- ❖ électrique donné par le modèle de Waymouth, suit un profil radial du type :

$$n_e(r) = n_e(0) J_0 \left\{ 2.4 \frac{r}{R} \right\} \quad \text{IV-40}$$

$J_0(x)$ est la fonction de Bessel d'ordre zéro.

- ❖ La température du gaz atomique est considérée comme constante le long du rayon et égale à la température du point froid.

IV.11 Mode de calcul

Il s'agit d'une méthode itérative qui résout le système d'équations précédemment décrit tout en tenant compte des contraintes imposées par les hypothèses et les conditions aux limites. Le calcul des diverses quantités se fait en plusieurs points sur le rayon du tube, la distance entre ces points est prise égale mais elle peut être variable. On utilise des méthodes numériques pour les traitements du système d'équations, nous mentionnons ici la méthode TDMA (Tri-Diagonal Matrix Algorithm) qui effectue la résolution des systèmes d'équations représentés par des matrices tri-diagonales. Les méthodes d'intégration de Gauss-Laguerre et Gauss-Legendre qui permettent le calcul rapide des intégrales. La méthode de Regula-Falsi pour la détermination de la racine d'une équation dont on ne connaît que quelques points.

En premier lieu et après avoir initialisé les diverses variables, nous passons au calcul des sections efficaces totales d'excitation et des sections efficaces élastiques et le calcul de sections efficaces pour les interactions coulombiennes. La fonction de distribution des électrons est

fait avec la méthode de Gauss- Legendre et celui de la relation de normalisation par la méthode de Gauss-Laguerre.

Après, on passe au calcul des taux de réaction, celui de coefficients de transport et du facteur d'emprisonnement pour le rayonnement de résonance. Le calcul des coefficients de transport contient la détermination des mobilités électronique par la relation (II.18) et ionique (II.36), celle des coefficients de diffusion ordinaire du fondamental et des niveaux métastables (II.37 et II.38), celle des coefficient de diffusion ambipolaire pour les paires électron-ion (II.48), celle des coefficients de conductivité thermique du mélange **Ar-Hg** et enfin celle de la conductivité électrique de la colonne positive (II.29).

Ensuite nous déterminerons les densités des niveaux excités et fondamentaux du mercure en résolvant les équations de conservation de la population (IV.11). Le traitement des niveaux non radiatifs (fondamental et métastables) est plus complexe, la résolution du système des équations différentielles s'effectue à l'aide de la méthode de Patankar [52]. Il s'agit d'une méthode d'éléments finis où la discrétisation (qui aboutit à un système tri-diagonal) se fait d'une manière particulière qui assure une convergence rapide.

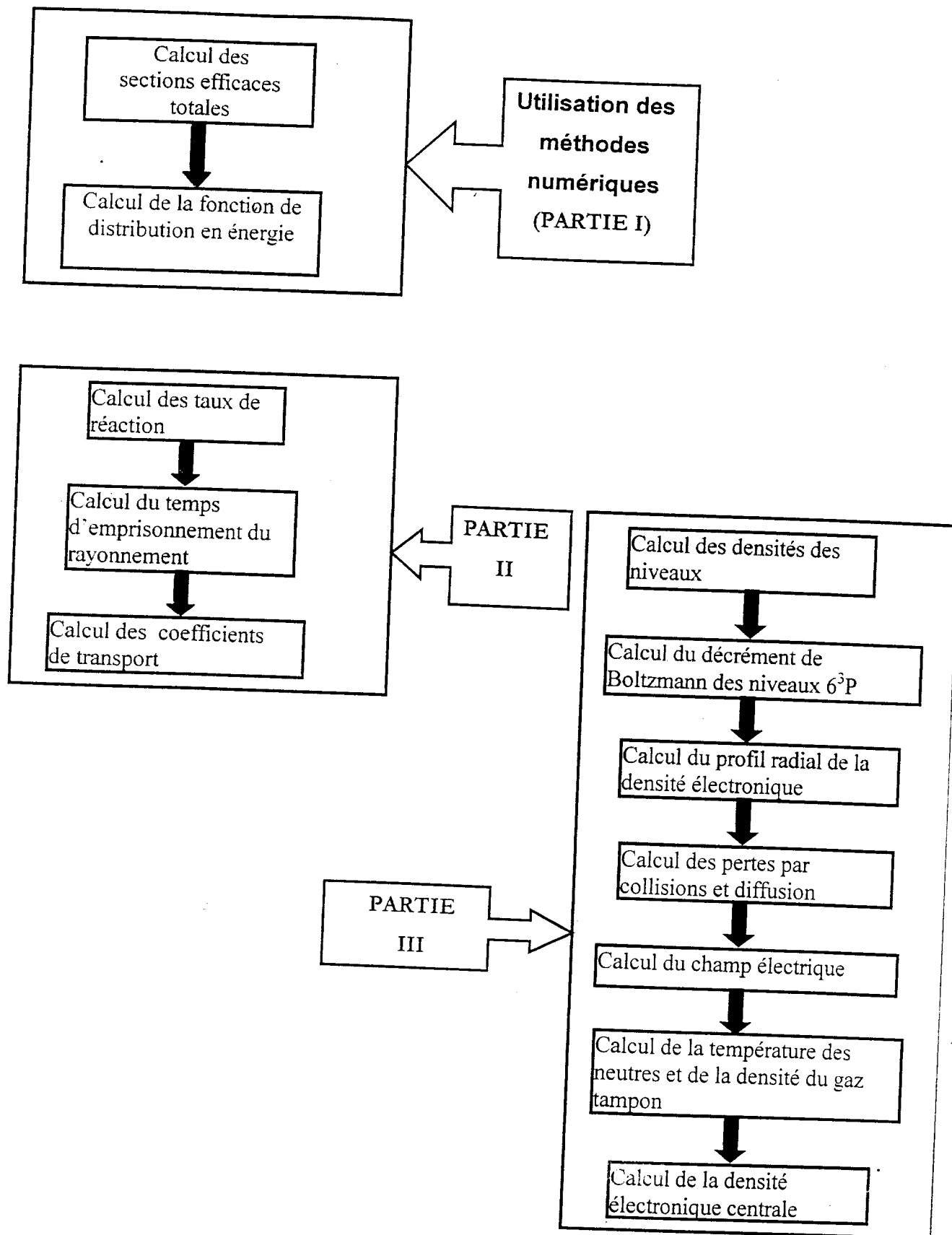
Disposant des nouvelles valeurs des densités des niveaux 6^3P nous pouvons calculer le décrétement par rapport à la population de Boltzmann qui intervient dans le calcul de la fonction de distribution. Ensuite, les équations de continuité pour les ions **Ar+** et **Hg+** sont traitées par la méthode de Patankar. Nous calculons ensuite les termes qui interviennent dans les équations de conservation de l'énergie pour le gaz atomique (IV.17) et pour les électrons (IV.23).

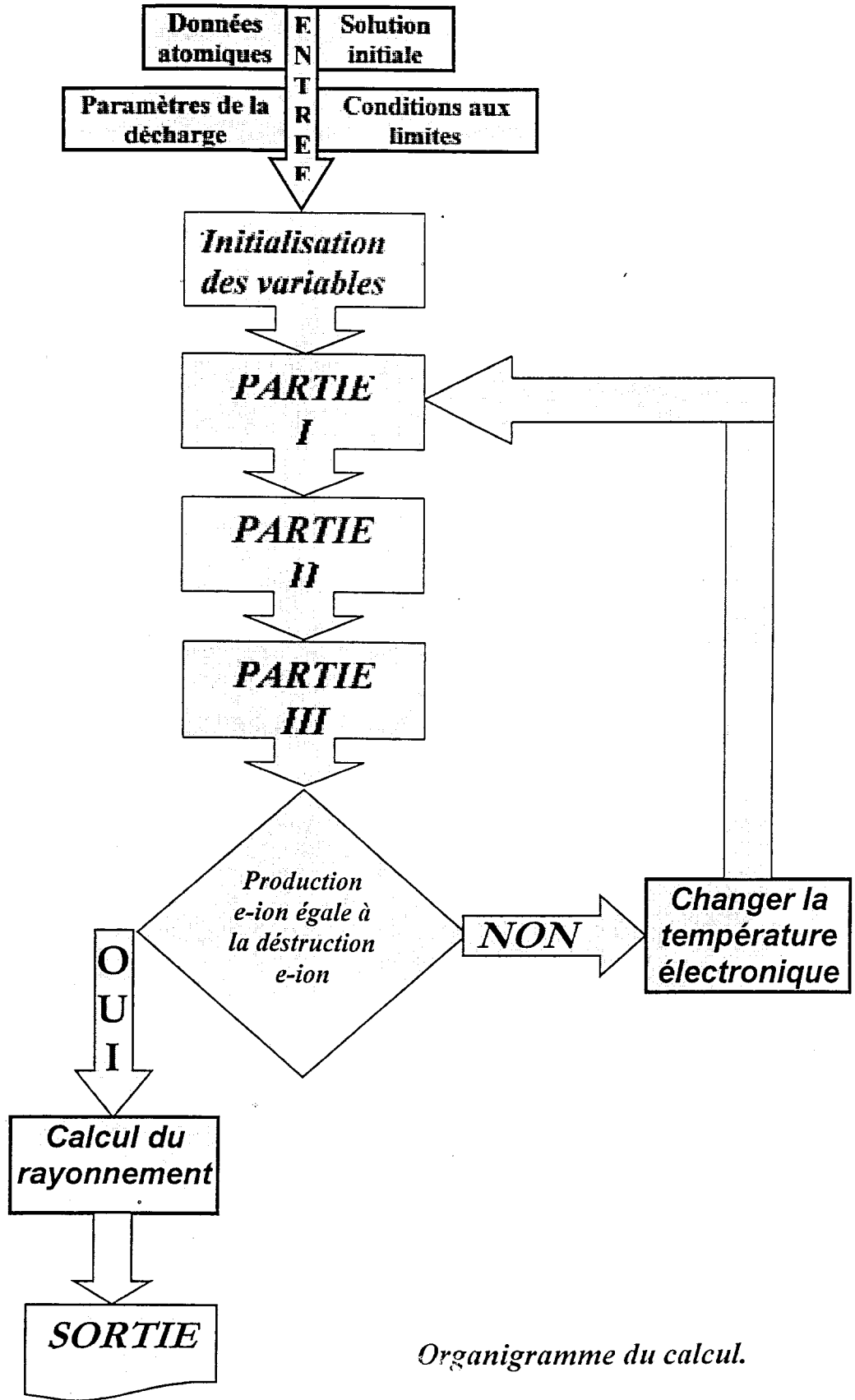
Enfin en appliquant la méthode de Patankar à l'équation (IV.17) nous pouvons déduire la température du gaz atomique le long du rayon du tube et la densité du gaz tampon en supposant que sa pression reste constante sur le rayon. La densité électronique centrale peut être calculée en connaissant le profil radial et en appliquant la loi d'Ohm (IV.27).

L'étape finale consiste à vérifier si la production de paire électron-ion est égale à la destruction par diffusion ambipolaire. Pour cette raison nous évaluons les deux termes de l'équation de conservation de la densité électronique (IV.13) et nous vérifions s'ils sont égaux.

Si la condition est vérifiée, le calcul s'arrête et on passe à la l'édition des résultats. Si la condition n'est pas vérifiée, nous déterminons une nouvelle température électronique utilisant la méthode de Regula-Falsi qui cherche les racines de l'équation(IV-41) et le calculer commence à partir de l'étape de l'évaluation des sections efficaces totales

$$\log \left\{ \frac{\text{production des paire électrons-ions sur la section droite}}{\text{destruction des paires électrons-ions sur la section droite}} \right\} = 0 \quad \text{IV-41}$$





Organigramme du calcul.

Document téléchargé depuis www.pnst.cerist.dz CERIST

IV.22 Résultats et discussion

Nous avons appliqué le modèle collisionnel-radiatif pour les décharges Hg-Ar basse pression. Pour pouvoir comparer nos résultats ceux de travaux antérieurs, nous avons examiné les deux cas suivants:

Tableau IV.1 Cas de décharge BP36 et BP24.

Décharge	R (x 10 ⁻³ m)	P _{Ar} (Pa à 0 °C)	I (mA)	S (A/m ²)
BP36	18	400	400	396
BP24	12	400	400	884

En ce qui concerne la température du point froid pour la décharge BP36, les valeurs sont comprises entre 30 °C et 65 °C. Dans le cas de la décharge BP24, une seule température du point froid a été considérée (42 °C et p_{Hg} ≈ 93 Pa) correspondant au maximum d'émissions U.V. à 254 nm.

a) Calcul du champ électrique en fonction T_{pf}.

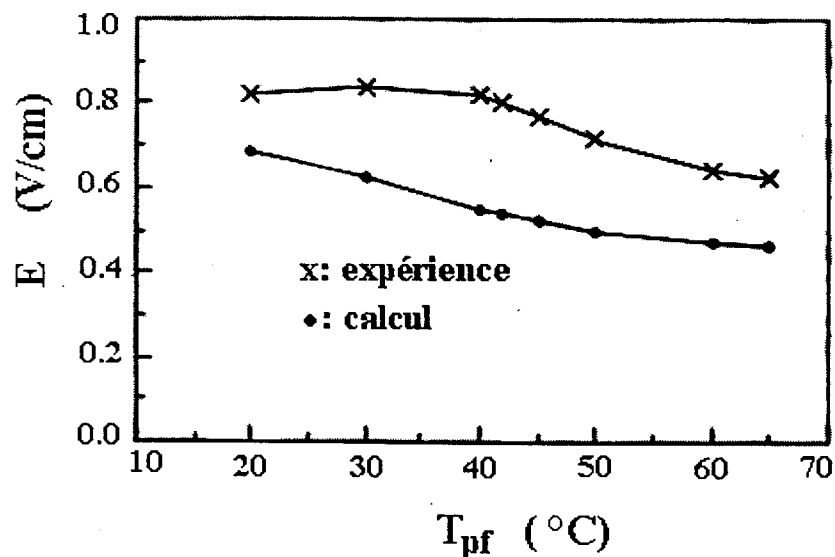


Figure IV. 8 : Champ électrique dans le tube, comparaison entre les valeurs expérimentales de Verweij [66] et nos calculs sans aucun facteur correctif.

Dans ce cas et contrairement à ce que l'on trouve dans la littérature, nous n'avons utilisé aucun facteur correctif sur la fonction de distribution. La figure IV.8 représente nos résultats pour le champ électrique et les compare aux mesures de Verweij [66]. Les valeurs du champ trouvé sont inférieures aux valeurs expérimentales. Ceci signifie que l'on injecte moins d'énergie dans la décharge, par suite elle doit émettre moins d'énergie. Le modèle conduit effectivement à

une énergie rayonnée plus faible que l'énergie mesurée et l'écart observé est le même que l'énergie électrique injectée.

** Deux facteurs peuvent jouer un rôle important dans la production du rayonnement :

-L'emprisonnement : La théorie de Holstein dans notre cas est valable avec une bonne approximation ($p_{Ar} = 400$ Pa) pas d'élargissement de pression. Elle surestime le rayonnement comme le montre Waymouth[69] et Dakin, ils ont augmenté le temps de vie effectif d'un facteur correctif de l'ordre de 3.6. Pour notre part, nous avons obtenu un facteur 2.3 pour BP36.

-Population des niveaux émetteurs :

La source de nos problèmes n'était pas dans l'emprisonnement mais dans la population des niveaux émetteurs et surtout du niveau 6^3P_1 . Les erreurs peuvent provenir soit des taux de réactions soit de la densité électronique. La densité étant pratiquement fixée par le courant électrique et la mobilité électronique dans le milieu donc seuls les taux de réaction sont mis en cause.

Les taux de réaction dépendent à leur tour des sections efficaces et de la FDEE. Donc il est fort probable que nos problèmes proviennent directement des choix des sections efficaces et le cumul d'erreurs dans le calcul de la FDEE et des taux de réactions. Effectivement, dans le travail de Kenty [38], il est écrit que "le calcul des sections efficaces a été fait en utilisant des valeurs théoriques provenant des calculs quantiques, et en ajustant de façon à obtenir des taux de réactions calculés avec une maxwellienne... ceux-ci reproduisent bien les résultats expérimentaux pour le flux de la raie 254 nm". Si les sections efficaces ont été ajustées en utilisant une maxwellienne comme fonction de distribution, il est clair qu'en calculant les taux de réactions avec une fonction de distribution où la partie haute énergie est dépeuplée les valeurs obtenues seront trop faibles. Aussi la population des niveaux sera-t-elle aussi sous estimée.

Damelincourt [14] a également effectué des mesures de la température électronique en utilisant des sondes doubles, l'avantage de cette méthode est qu'elle nous donne des informations concernant la partie de la fonction de distribution autour de la valeur du potentiel flottant du plasma, c'est à dire au voisinage de 7 à 8 eV. Damelincourt avait trouvé pour un tube BP36 une température voisine de 8000 K. En utilisant cette valeur on a modifié la fonction de distribution (agissant sur le terme de collision relation III.9''). Nous avons recalculé le champ électrique en utilisant cette FDEE. Les résultats sont représentés dans la figure IV.9 et comparés à ceux de Verweij [66] et de Waymouth [68]. Nous remarquons que l'accord est excellent, et que le modèle de Waymouth est peu fiable pour les $T_{pf} < 30$ °C car il ne tient pas compte de l'ionisation de l'Argon.

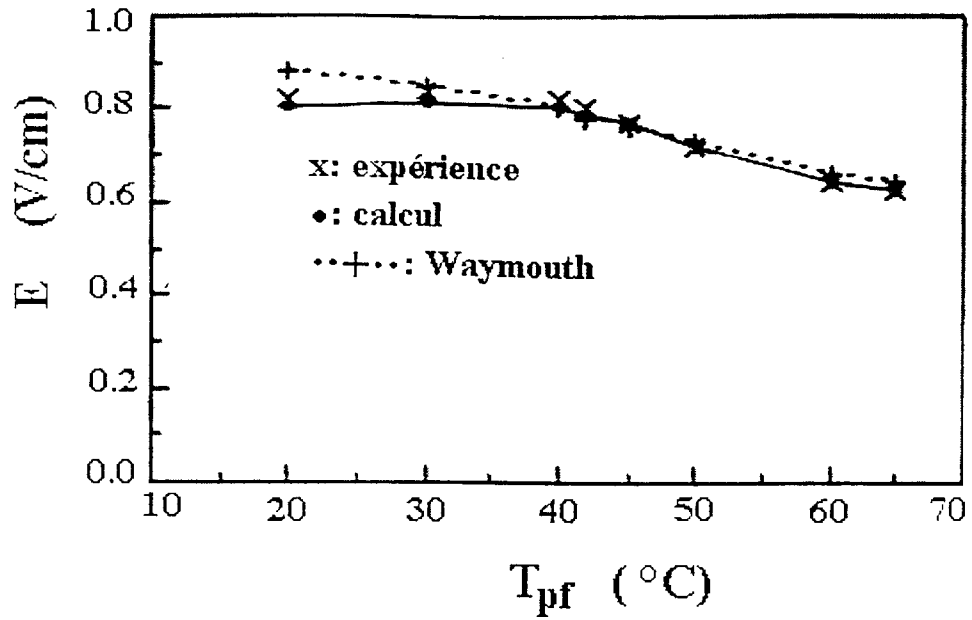


Figure. IV. 9 / Champ électrique dans le tube, comparaison entre les valeurs expérimentales de Verweij , nos calculs, et le modèle de Waymouth.

b) Flux émis rar Hg en fonction de T_{pf}

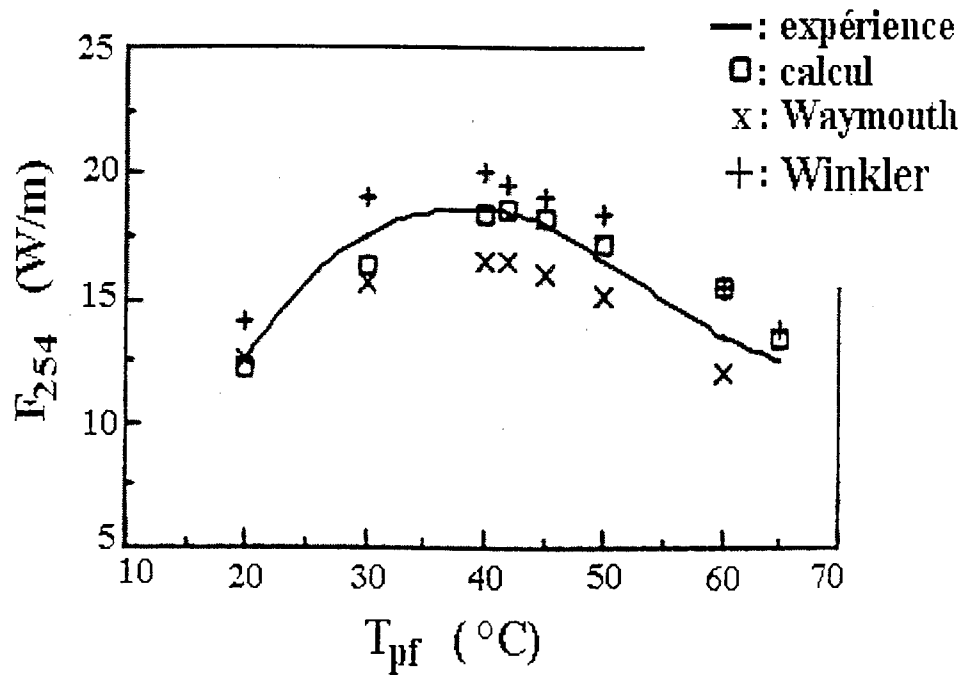


Figure IV. 10 Flux émis par la raie 254 nm du Hg .

La figure IV.10 résume les résultats concernant le flux de la raie à 254 nm , comparé aux valeurs expérimentales de Verweij [66] ,calculs de Waymouth [68] et de Winkler [70]

c) Densité électronique centrale en fonction de T_{pf} .

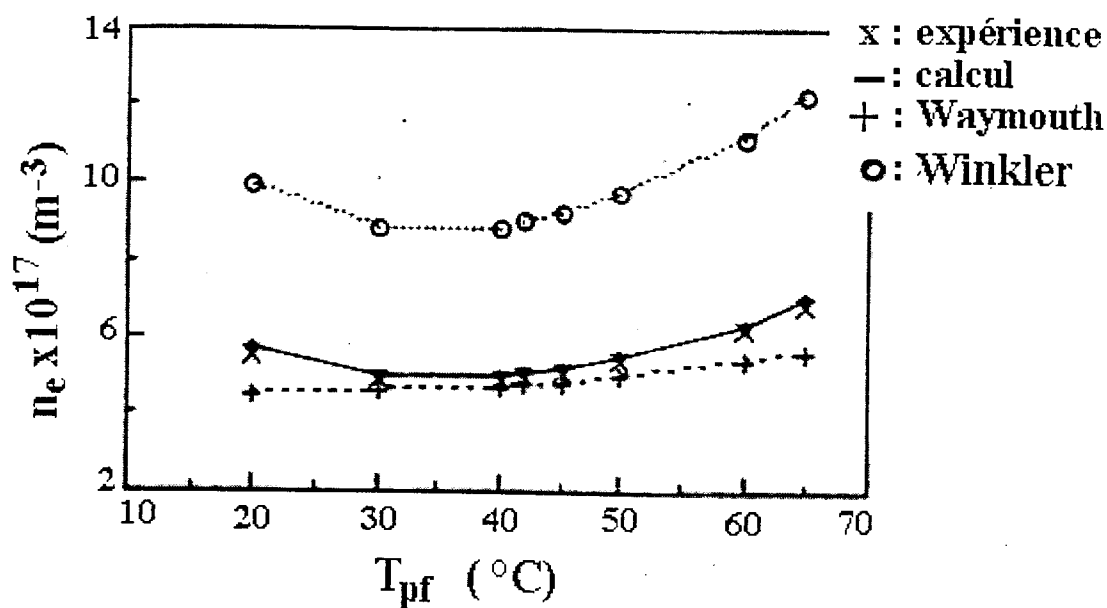


Figure. IV. 11 : Densité électronique centrale.

d) Température électronique en fonction de T_{pf} .

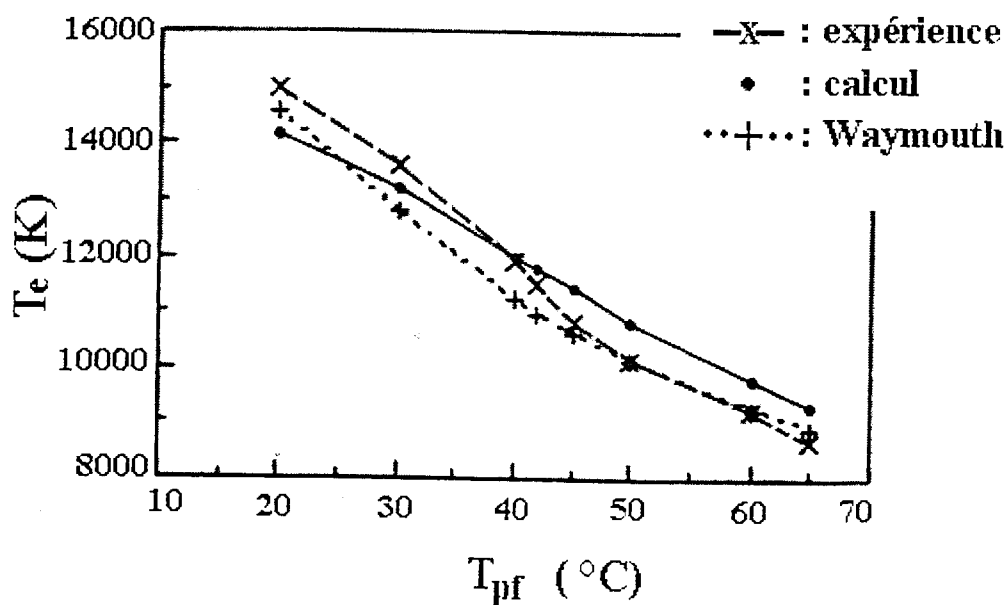


Figure. IV. 12 : Température électronique .

Les figures (IV.11 et IV.12) donnent nos résultats de densités électroniques centrales et de température électronique comparés au mesures de Verweij [67] et d'autres modèles [69].

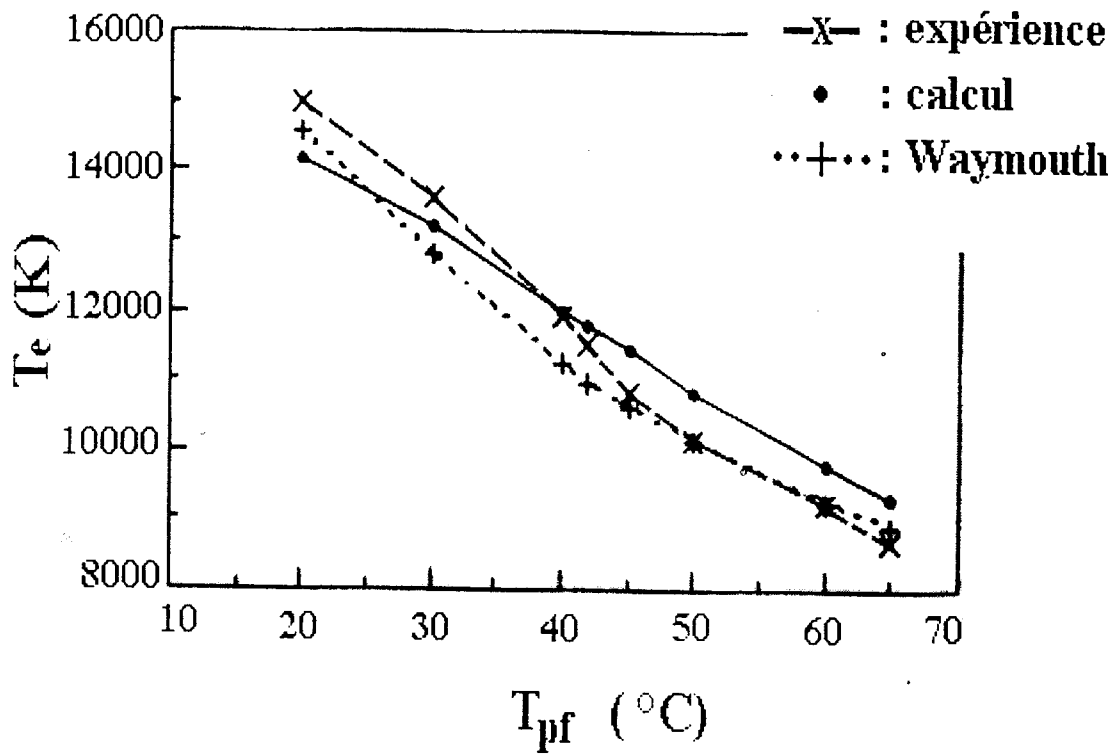


Figure. IV. 12 : Température électronique ; nos calculs comparés avec l'expérience et Waymouth.

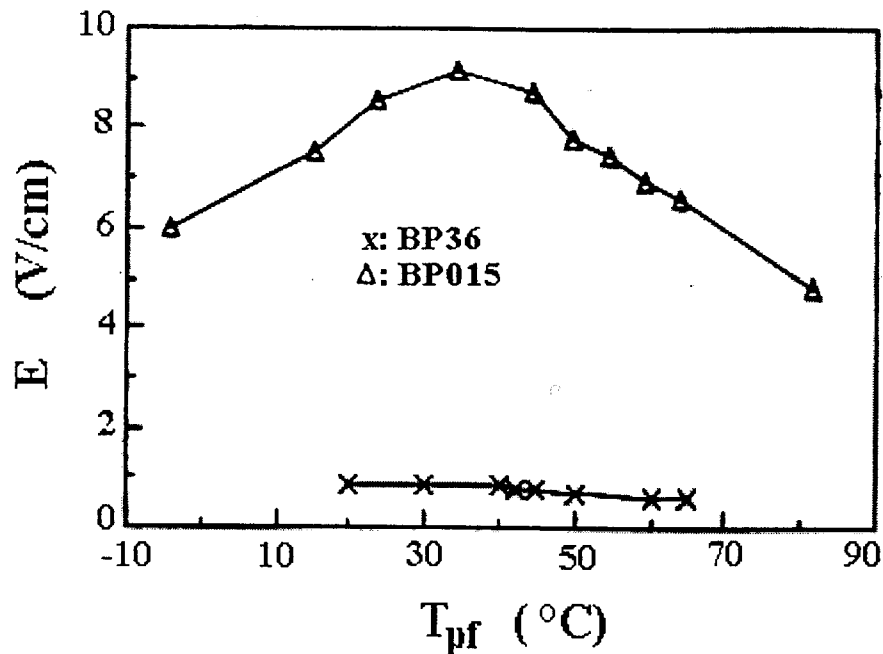
En ce qui concerne le tube BP24 (moins utilisé que le précédent) Denneman et ces collaborateurs [16] ont mesuré certains paramètres de la décharge à 42 °C, que l'on a comparé à nos calculs. Le tableau IV.2 résume ces résultats :

TABLEAU IV-2 présente certains paramètres de la décharge à 42 °C

	Mesure	Calcul de [Da-1]	Modèle	Zissis [Zi-1]
Champ électrique (V/cm)	0.94 ± 0.01	1.02	0.96	0.96
Température électronique (K)	13000 ± 500	13000	12700	12500
Densité électronique (cm ⁻³)	8 x 10 ¹¹	12.8 x 10 ¹¹	10.8 x 10 ¹¹	10.2 x 10 ¹¹
Flux à 254 nm (W/m)	22.2 ± 3.7	25	22.7	21.9
Flux à 185 nm (W/m)	4.2 ± 1.1	4.4	5.10	5
Flux visible (W/m)	1.12 ± 0.08	1.47	1.28	1.20

f) Influence du rayon du tube sur-le-champ électrique et sur la température électronique.

Dans ce paragraphe, nous allons montrer graphiquement l'influence du rayon du tube sur-le-champ électrique. On observe que le champ électrique augmente rapidement quand le rayon du



tube diminue.

FIG. IV. 13 : Champ électrique en fonction de la température du point froid.

La diminution du rayon entraîne une augmentation des niveaux 6^3P est directement liée avec le rayonnement à 254 nm car le niveau rayonnant 6^3P_1 est étroitement pertes de paires électron-ion par diffusion. Cette même figure donne les résultats de la variation de la température électronique en fonction de la température de point froid pour BP36 comparée au calcul de Zissis BP15. On remarque que pour les mêmes températures du point froid le champ est plus intense lorsque le rayon diminue. Et que la température électronique diminue considérablement quand la température du point froid augmente. On remarque aussi que $T_{fp} < 25$ °C l'étude change carrément (non étudié dans notre cas). Pour les faibles températures électroniques, c'est le gaz rare qui assure l'ionisation, les pertes par collisions (élastiques ou inélastiques) avec le mercure sont réduites, pour des températures fortes le mercure assure l'ionisation mais rayonne une énergie plus importante et la température électronique augmentent légèrement. Si on augmente la fraction de mercure dans la décharge, on augmente l'emprisonnement et les pertes radiatives diminuent (le champ électrique diminue).

g) Population des niveaux et rayonnement.

La population des lié avec les deux autres niveaux métastables 6^3P_0 et 6^3P_2 , avec 6^3P_2 source principale d'ionisation. On note que le d'écramant de Boltzmann passe d'une valeur de l'ordre $5 \cdot 10^{-2}$ (0°C) à 0.6 (65°C) cette augmentation montre clairement la tendance à s'approcher de ETL (décrément =1). Lorsque la pression du mercure augmente. Connaissant la densité des niveaux de résonance, leur distribution radiale et le facteur d'emprisonnement, il est possible de calculés le flux global des deux raies de résonance du mercure.

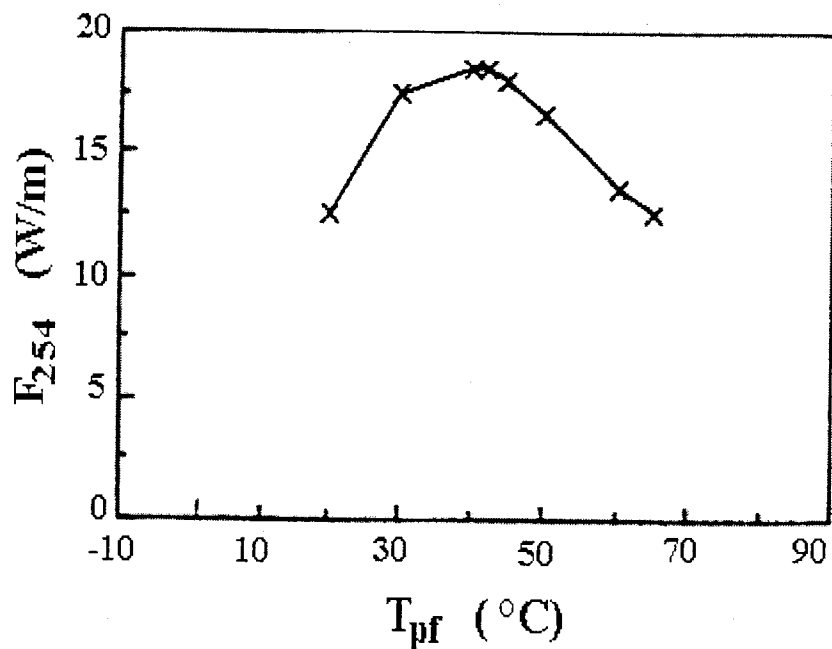


FIG. IV. 14 : Evolution du flux à 254 nm en fonction de la température du point froid.

La figure IV. 16 représente l'évolution du flux à 254 nm en fonction de la température du point froid. On remarque que le maximum d'émission se situe entre 35°C et 45°C , ce qui explique l'augmentation du facteur d'emprisonnement.

CONCLUSION

Dans ce travail, nous avons examiné les divers mécanismes de transfert d'énergie dans des plasmas de décharges électriques établies dans la vapeur de mercure basse pression.

L'état d'équilibre thermodynamique de la colonne positive nous a poussé à adopter un modèle C.R. et à partir des caractéristiques géométriques, de la composition du gaz de la décharge, nous avons remonté aux distributions radiales des densités des niveaux excités du mercure, à la température électronique dans la colonne positive et au profil radial de la température du gaz. Le champ électrique et le rayonnement émis par les principales raies du mercure ont été également évalués.

Une étude détaillée pour la détermination de la fonction de distribution d'énergie des électrons a été indispensable. Dans le chapitre consacré à l'étude de la FDEE, nous avons décrit la méthode de calcul des fonctions de distribution d'énergie électronique, par la résolution de l'équation de Boltzmann (méthode à deux termes). Cette description a été consacrée à l'analyse de l'opérateur de collision (terme de droite) et ensuite au développement du terme de gauche. Nous avons pris en considération l'ensemble des phénomènes classiques qui gèrent la colonne positive, plus les interactions coulombiennes, et les interactions métastables / métastables du mercure. Parce qu'elles ont une influence non négligeable sur la déformation de la FDEE. Des déviations sont apparues durant la comparaison de nos résultats aux résultats expérimentaux. Ceci est dû au choix de la méthode ou au choix des paramètres d'entrée (sections efficaces, par exemple...).

Pour résoudre ce problème, une autre méthode a été présentée à titre comparatif, et pour illustré l'importance de cette fonction dans les modélisations de ce genre de décharge, nous avons traité la même fonction avec les mêmes données par la méthode de simulation statistique de Monte Carlo. L'intérêt d'une telle méthode par rapport à la méthode de résolution directe, est de pouvoir prendre en compte facilement le non équilibre spatio temporel des fonctions de distribution, et d'éliminer toute erreur dû au le choix de la méthode.

Les difficultés essentielles sont centrées sur le choix des sections efficaces des réactions qui sont souvent corrigées par différents facteurs de correction et ceci en fonction de l'étude. Pour éviter un cumul d'erreurs, et après une étude approfondie, la meilleure approximation possible est l'équation de Lagushenko et Maya, parce que l'ensemble des termes constituant de cette équation peuvent être corrigés facilement pour s'approcher de l'expérience.

On a notamment montré que dans les plasmas froids dans lesquels ces méthodes sont appliquées, la méthode dite à deux termes est largement suffisante pour résoudre un tel

problème. Nous avons ensuite introduit les interactions coulombiennes, les collisions métastables / métastables, et montré leur influence sur la FDEE.

La modélisation approfondie des systèmes H.E.T.L., tels que les décharges mercure-gaz rare basse pression, nécessite la connaissance d'un grand nombre de données de base, et principalement les sections efficaces. La fiabilité de la modélisation est directement liée à la précision de ces données. Concernant le mercure il existe assez peu de données expérimentales fiables sur tout pour les collisions inélastiques, les valeurs disponibles dans la littérature ont été le plus souvent ajustées pour reproduire certaines données expérimentales particulières.

Le calcul du transfert du rayonnement de résonance pose de délicats problèmes. La théorie de Holstein (facteur de fuite) est souvent insuffisante. Mais, pour simplifier et économiser le temps de calcul, l'application de la théorie de Holstein couplée à des facteurs correctifs a donné des résultats acceptables.

La résolution de l'équation de Boltzmann (méthode à deux termes) ou la simulation par la méthode de Monte – Carlo pour la détermination de la FDEE, nous a montré qu'il est possible d'utiliser des formules approximatives pour l'évaluation de la FDEE. Cette étude nous a donné des informations quantitatives concernant l'influence de la nature du gaz rare sur les paramètres de la décharge.

Quant à l'application du modèle C.R. dans le cas des décharges mercure-argon établies dans des tubes classiques, nous avons constaté que l'accord entre les valeurs expérimentales du champ électrique, et nos calculs étaient bien plus satisfaisants que si l'on utilisait des modèles classiques. La comparaison de nos résultats avec les valeurs expérimentales, a montré l'incompatibilité de certaines hypothèses de base (FDEE non-Maxwellienne) avec les données des sections efficaces ajustées auparavant. En se plaçant sous les mêmes hypothèses nous avons pu approcher avec une très bonne précision les valeurs expérimentales du champ électrique, du flux des principales raies du mercure, la température électronique et les densités des niveaux 6^3P du mercure.

Nos calculs ont mis en évidence le rôle important de l'excitation et de l'ionisation de l'argon dans la colonne positive des décharges mercure-argon basse pression. Ces processus ont souvent été négligés dans la littérature et pourtant sont à l'origine d'importantes déviations entre les valeurs calculées et l'expérience (influence surtout dans le cas des faibles températures du point froid).

l'excitation et l'ionisation de l'argon tendent rapidement vers zéro en augmentant la température du point froid tandis que les pertes par excitation et ionisation du mercure augmentent pour devenir les termes principaux du bilan, le terme de perte par diffusion

Enfin l'ensemble des difficultés rencontrées dans cette étude sont essentiellement dues à :

- ❖ La structure atomique compliquée du mercure qui est le principal élément réactif.
- ❖ La température du point froid qui agit directement sur l'élément réactif (l'ionisation et l'émission des raies) dans le mélange ($T_{pf} < 5^{\circ}\text{C}$ Ar principal élément réactif $T_{pf} > 25^{\circ}\text{C}$ Hg principal élément réactif).
- ❖ Le non équilibre thermodynamique du système étudié renforce ces complications par la demande d'un grand nombre d'informations.
- ❖ Les sections efficaces disponibles dans la littérature sont souvent ajustées ce qui complique la modélisation.
- ❖ La **FDEE** est un paramètre incontournable dans la modélisation. Les difficultés sont concentrées sur la méthode de résolution, la complexité de l'équation de Boltzmann, les différentes températures qui gèrent le système (T_e , T_i , T_g).
- ❖ La modélisation nécessite l'utilisation de plusieurs méthodes numériques et ceci pour résoudre un système d'équations très couplées entre-elles.

Références BIBLIOGRAPHIQUES

- [1] : Adler, F.P., J. Appl. Phys. 20,1125 (1949).
[2] : Aisenberg, S., Ph.D. Thesis, Phys. Dept. M.I.T., Boston (1957).
[3] : Bittencourt, J.A., Fundamentals of plasma physics, Oxford(1986).
[4] : Borst, W.L., phys. Rev.,181, 257 (1969).
[5] : Brode, R.B., proc. R. Soc. A125,134 (1929).
[6] : Bartels, H., Teil. Zeit. Physik 125, 597),(126,108) (1949) et 127,243),
(128,546) (1950)
[7] : Cesari, C., Rapport CEA-R3165, Saclay (1967).
[8] : Chen, Z.F., H.G.Jones, J. Phys. D17, 337 (1984).
[9] : Chen, D.M., E.Pfender, IEEE Trans. Plasma Sci. PS9, 265 (1981).
[10] : Couris, S., G.Z., J.J.D.,, Conf. Phen. Ion. Gases, 726 Belg.(1989).
[13] : Christophorou, L.G., Electron - molecule interactions and their applications 2, (1984).
[14] : Christophorou, L.G., R.P.Blounstein, D.Pitman, Chem. Phys. Lett. 18, 509 (1973).
[15] : Damelin court, J.J., Yhèse d'état, UPST (1973).
[16] : Damelin court, J.J., L'arc électrique et ses applications 2, 226,Paris (1985)
[17] : Delcroix, J.L., Physique des plasmas 2, Dunod, Paris (1966).
[18] : Dimitriadis, A., J.J. Damelin court, Journées d'étude, Toulouse (1974)
[19] : Druyvesteyn, M.T., Zertz. Phys. 64, 781 (1930).
[20] : Drakakis, E., Thèse de UPST (1988).
[21] : Drawin, H.w., Z. fur Physik 228, 99 (1969).
[22] : Drawin, H.W., F.E., phys. 85C, 333 (1977).
[23] : Debbagh-Zriouil, B., Thèse, UPST (1987).
[24] : Von Engel, A., Ionized gases, Clarendon press, Oxford(1965).
[25] : Elenbaas, W., The high pressure mercury vapour discharge, (1951).
[26] : Gleizes, A., Thèse , UPST , (1980).
[27] : Griem, H.r., Phys. Rev. 131, 1170 (1963).
[28] : Gunther, K., M.S.Popovic, Phys. D9, 1139 (1976).
[29] : Haddad, G.N. T.F.O'Malley, Aust.J. Phys. 35, 95 (1982).
[30] : Hernquist, K.G., J.Appl. Phys. 27, 1231 (1956).
[31] : Hirschfelder, J.O., C.F.Courtis, Byron, Molecular theory of gases and liquids, NewYork (1954).
[32] : Holstein, T, phys. Rev. 72, 1212 (1947),83, 1159 (1951).
[33] : Hotop H., A. Niehaus, Z. Phys. 228,68 (1969).
[34] : Houtermans, F.G., Z. Phys. 41, 140 (1927).
[35] : Hoxe, R.M., J. Appl. Phys. 24, 881 (1953).
[36] : Itikawa, Y., Atomic data and nuclear data tables 21, 69 (1978).
[37] : Javorski, B., Bull. Acad. Sci. URSS 9, 233 (1945); 10, 76 (1950).
[38] : Kenty, C., M.A.Easley, B.T.Barnes, Phys. 22, 1006 (1951).
[39] : Korotkov, A.I., opt. Sectrosk. 28, 641 (1970); 2, 42 (1975); 43, 1050 (1977)
[40] : Kryukov, N.A., Penkin, T.P.Redko, Opt. Spectrosc. 42, (1977).
[41] : Kurochkin, Yu.V., L.S.Polak.....,High Temp. 16, 409 (1978).
[42] : Lagushenko, R., J.Maya, J. Appl. Phys. 55, 3293 (1984).
[43] : Landau, L.D., Quantum mechanics, 560-563, Oxford (1977).
[44] : Langevin, P., Ann. Chim. Phys. 5, 249 (1980).
[45] : Mason, E.A., R.J.Munn, Phys. Fluids 10, 1827 (1967), Fluids 2,698 (1959).
[46] : Mc Cutchen, C.W., Phys. Rev. 112, 1538 (1964).
[47] : Miller, M., Inductively coupled plasmas in analytical atomic spectroscopy, New York (1987).

- [48]: Moris, J.C., J.H.Walker, J. Appl. 44, 4558 (1973).
- [49]: Mrozowski, S., Phys.Rev. 76, 1714 (1949).
- [50]: Nakamura, Y., J.Lucas, J. Phys. D11,325,337 (1978).
- [51]: Ovcharenko, V.A., S.M.Chernyshev, High Temp. 8, 679 (1980).
- [52]: Patankar, S., Numerical heat transfer and fluid flow, New York (1980),
- [53]: Penkin, N.P., T.P.Redko, Opt. Spactrosc. 36, 258 (1974).
- [54]: Payne, M.G., J.D.Cook. Phys. Rev. A2, 1338 (1968).
- [55]: Rapp, D., W.E.Francis, J. Chem. "Phys. 37, 11 (1962).
- [57]: Radzig, A.A., Reference data on atoms, molecules and ions, 254 ,berlin (1985).
- [58]: Rockwood, S.D., Phys. Rev. A8, 2348 (1973).
- [59]: Rosen, B., Tables internationales des constantes selectionnées, 205.
- [60]: Rouse, G.F., Proc. Nat. Acad. Sci. USA 11, 514 (1925).
- [61]: Salon, J., Thèse, n° 629, UPST (1978).
- [62]: Sepman, P.Yu., V.A.Sheverev...,Opt. Spectrosc. 56, 361 (1984).
- [63]: Shkarosfky, I.P., The particle Konetics of plasma, Addison-Willey (1966).
- [64]: Sawada, S., Y.Sakai, H.Tagashira, J. Phys. D22, 382 (1989).
- [65]: Tan Trigt, C., Phys. Rev. 181,97 (1969), A13,726 (1976).
- [66]: Verbeek, T.G., P.C.Drop, J. Phys. D7 (1977).
- [67]: Vriens, L., J. Appl. Phys. 44, 3980 (1973), 45, 110 (1974).
- [68]: Vriens, l., R.A., F.A.S., Appl. Phys. 49, 3807 (1978).
- [69]: Waymouth, J.F., F.Bitter, J.Appl. Phys. 27, 122 (1956).
- [70]: Waymouth, J.F., Electric discharge lemps, Cambridge (1973).
- [71]: van de Weijer, P., ..., Radiative processes in discharge plasma, Newyork (1986).
- [72]: Walsh, P.J., Phys. 107, 338 (1957).
- [73]: Winkler, R.B.,....., Physik 7,90 (1983).
- [74]: Winans, J.G., Phys. Rev. 42, 800 (1932).
- [75]: Wren, D.J.,; Phys. 74, 2331 (1981).
- [76]: Weysenfeld, C.H., , IEEE Trans. Electr. Dev.ED-24, 1239 (1977).
- [77]: Yousfi, M., A.A., J. Phys. D (1993).
- [78]: Zisis, G., These. UPST (1990).
- [79]: Zoubida, H., These. UPST (1994).
- [80]: Aissaoui, A., Mémoire de magister. USTO (2000).
- [81]: Gaz ionises E. Badarev, I. Poperscu Edition Meriane Bucarest.
- [82]: A Zerrut. Mémoire de magister. Prévision numérique d'un jet Chlef 1997.
- [83]: M. Boumahrat. A. Gourdin .Méthodes numérique appliquées.
- [83]: Méthode à deux termes. Bolzique. Intrnet cite Yahoo. CPAT.
- [84]: Wiliam Press, Alai Tenkolsky.. Numerical recipes, Th art of scientific computing. Cambridge Academies press 1989.

Méthode de la sonde double.

L'avantage de la méthode de la sonde double par rapport à celle de la sonde simple consiste dans le fait que V_p n'est pas influencé par la différence de potentiel de référence (de l'anode ou de la cathode) comme dans le cas de la sonde simple.

Ceci fait que la méthode de la sonde double soit aussi applicable dans le cas où la décharge est interrompue et le plasma se dilue par diffusion ambipolaire (dans ce cas la sonde simple ne peut pas être utilisée, la sonde double n'affecte pratiquement pas les propriétés du plasma).

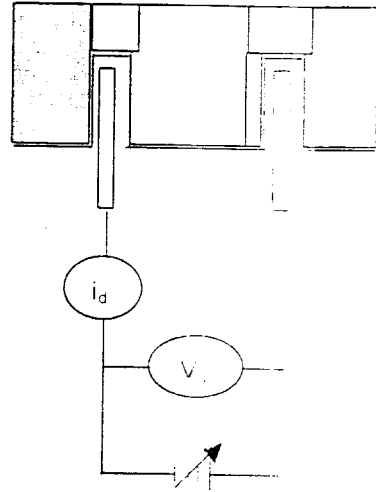


Figure. A3. Schéma de principe de la méthode de la sonde double.

Sonde magnétique.

Les méthodes expérimentales utilisées pour déterminer les paramètres du plasma pour une décharge en impulsion de grande puissance. Ainsi, une grandeur dont la détermination expérimentale offre un intérêt particulier dans le cas de la présence du champ magnétique à l'intérieur du plasma. On peut le déterminer à l'aide d'une sonde magnétique.

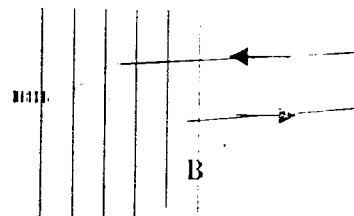


Figure. A4. Sonde magnétique

Ajouté chapitre IV.

Procédé de calcul :

La phase numérique qui traite le problème est constituée de phases indépendantes qui traitent différentes parties du problème.

Il faut imposer une structure de calcul en cascade de telle sorte que les calculs faits par la première phase sont communiqués à la suivante et utilisés comme données et ainsi de suite, ceci à cause de la complexité du problème.

Il s'agit d'une méthode itérative qui résout le système en tenant compte des contraintes exposées au paravent.

Ce calcul se fait en plusieurs points du rayon (30 points) à distance égale.

On introduit dans le sous-programme qui sont nécessaires à la résolution de certaines équations comme TDMA (Tri-Diagonal Matrice Algorithm) [A3] qui effectue la résolution du système d'équation représenté par une matrice tri-diagonale.

- Méthodes d'intégrations de Gauss-Legendre, Gauss-Laguerre [A6] qui permettent de calculer les intégrales.
- La méthode de Regula-Falsi [A3] pour la détermination de la racine de l'équation IV.42 dont on connaît que quelques points. Cette méthode est appelée aussi méthode de la corde ou de la fausse proposition. Considérons une racine $T_c =$

T_{c1} de $f(T_c) = 0$ dont on a borné le domaine par les limites de variation de T_c , T_{ca} minimum et T_{cb} maximum avec $T_{c1} \in (T_{ca}, T_{cb})$. La solution trouvée est utilisée comme nouveau paramètre d'entrée et ainsi de suite jusqu'à la convergence.

L'avantage de cette méthode est que l'on opère dans un intervalle qui entoure toujours la racine, cet intervalle étant réduit à chaque itération. La convergence est donc assurée. Le taux de convergence peut cependant s'avérer faible. Cette méthode est recommandée de l'employer éventuellement que dans les voisinages proches de la racine cherchée.

- En premier lieu et après initialisation des diverses variables ($T_c, T_g, n_i(r), n_j(r), n_a(0), n_i(0)$).
 - Paramètre d'entrée de la décharge :
Rayon du tube ($\phi = 36$ mm), pression de remplissage d'argon ($P = 400$ Pa), température du point froid ($T_{pf} = 42$ °C), courant électrique ($I = 40$ mA)
 - Données atomiques :
Energies et niveaux considérés :
Pour le mercure ($6^1S_0, 6^3P_0, 6^3P_1, 6^3P_2, 6^1P_1, 7^3S_1, 11L$) niveaux d'énergies figure IV.7.
Pour l'argon Ar (f) état excité 11.65 eV, Ar 15.76 eV figure II.3
 - Section efficaces élastique, inélastiques et super-élastiques tableau II.1
 - Mobilités ioniques à 0 °C et 133.3 Pa Hg ($2.19 \cdot 10^{17}$), Ar ($3.14 \cdot 10^{17}$) en ($\text{Pa m}^2 \text{V}^{-1} \text{s}^{-1}$) tableau II-3.
 - Coefficients de diffusion des états métastables du mercure à 0 °C et 133.3 Pa 6^3P_0 (0.017) et 6^3P_2 (0.02) en ($\text{m}^2 \text{s}^{-1}$) figure II.11
 - Coefficient du potentiel Lennard-Jones et intégrales de collision données par la formule II-33, tableau II-2 et figure II.9. Pour le calcul des coefficients de transport du mélange Hg-Ar.
 - Longueurs d'onde des transitions radiatives 6^3P_1 (252.7 nm) temps de vie figure II.12 et 6^1P_1 (184.9 nm) temps de vie figure II.13
- Pour le calcul, nous avons suivi l'organigramme du calcul chapitre IV.
- Méthode numérique des volumes finis [A7], [A8] et [A9].
Définition de pas de maillage.

On adopte le choix des coordonnées cylindriques ($z, r, \theta = 1$) pour obtenir une distribution satisfaisante des points de calcul à travers l'épaisseur du plasma. il convient de raffiner le maillage dans la direction r et on fixe pour z et r , une grille en progression géométrique de raison (q) comme cela est traité dans beaucoup d'application.

On fixe le nombre de pas j_m , et on prend :

$$r(j+1) / r(j) = 1 - q^j / 1 - q^{(j+1)} \quad \Rightarrow \quad r(j) = h \frac{(1 - q^{j+1})}{(1 - q^j)}$$

où h représente la hauteur de la partie à mailler.

Le choix du nombre de pas N_r et N_z se fait en fonction du temps de calcul.

Le maillage consiste à diviser le domaine de calcul en un ensemble de cellules appelées volumes de contrôle (V.C).

$$\begin{bmatrix} T_{r1} \\ T_{r2} \\ \vdots \\ T_{r30} \\ n_e^{j-1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} T_{r1}^j \\ T_{r2}^j \\ \vdots \\ T_{r30}^j \\ n_e^j \end{bmatrix}$$

Schéma explicite matrice généralement pleine (≈ 961 éléments), on la tri-diagonalise par la méthode de Thomas [A 3].

Discrétisation de IV-13
$$\frac{dn_e}{dt} = \frac{n_e^{j+1} - n_e^j}{\Delta t}$$

1) évaluer $T_{r1}^{j+1}, T_{r2}^{j+1}, \dots, T_{r30}^{j+1}$ pour $j = 0, \dots, j$
 et $n_e^{j1}, n_e^{j2}, \dots, n_e^{jn}$

2) évaluer $\frac{dn_e}{dt} = \frac{n_e^{j2} - n_e^{j1}}{\Delta t}, \frac{n_e^{j3} - n_e^{j2}}{\Delta t}, \dots$

et comparé avec le second terme de IV-13 si il y a égalité on passe au temps suivant si non on change les conditions initiales.

Linearisation du terme de collision J

Ce terme de point de vue physique contient :

- La production des particule et leurs mouvement dans le plasma.
- Les forces externes appliqués sur l'élément du plasma.
- Les termes de conversion ou de diffusion.

Méthode de linéarisation.

On donne un champs de pression initial dans le domaine du mouvement, les vitesses figurant dans le l'équation de continuité, intégrée sur le volume de contrôle associé à la pression, seront alors des vitesses approchées. Elles ne vérifieront pas l'équation de conversion de masse à cause du résidu de masse accumulé dans le volume de contrôle due à la distribution de pression.

Si on note les valeurs exactes des composant du champ et vitesses par E et V, les composantes approchées seront noté par E' et V'.

Les résultats obtenue seront la somme des résultats approché plus les corrections qu'on notes E' et V'.

$$E = E^* + E' \quad \text{et} \quad V = V^* + V'$$

Une méthode semi-itérative pour rendre le système moins dense, cette méthode consiste à faire le balayage ligne par ligne, donc rendre le système à un système matrice tri-diagonale.

Référence bibliographique :

[A 1] : Gas ionisé E. Badarev, I. Popescu Edition Meriane Bucarest.
 [A 2] : A. Zerrouk. mémoire de magistère. prévision numérique d'un jets Chlef 1997.
 [A 3] : M. Boumahrat. A. Gourdin Méthodes numériques appliqués
 [A 4] : Méthode à deux termes. Bolzique. Internet Site Yahoo. CPAT.
 [A 5] : William Press, Alain Tenkolsky. Numerical recipes. The art of scientific computing. Cambridge Academies press 1989