

**REPUBLIQUE ALGERIENNE DEMOCRATIQUE ET POPULAIRE
MINISTERE DE L'ENSEIGNEMENT SUPERIEUR ET DE LA RECHERCHE
SCIENTIFIQUE**

**UNIVERSITE CONSTANTINE 1
Faculté des Sciences de la Technologie
DEPARTEMENT D'ELECTRONIQUE**

N° d'ordre :
Série :

THÈSE

Présentée pour obtenir le diplôme de Doctorat en Sciences
en Électronique

Par

BOUANAKA FOUZI

THEME

Contribution à la Modélisation des Plasmas de Dépôt Basse Pression

Soutenue le : 12 / 12 / 2013

Devant le jury :

Président: Mr : A. BELLEL Prof. Université Constantine 1

Rapporteur: Mme : S. REBIAI M.C. A. Université Constantine 1

Examineurs : Mme : F. LALAM Prof. Université Tizi-Ouzou

Mr : A. BENHAYA Prof. Université Batna

Melle : Z. ZIARI M. C. A. Université Constantine 1

Remerciements

Tout d'abord, je rends grâce à DIEU le tout puissant qui m'a éclairé le bon chemin pour terminer cette thèse de doctorat.

*Je tiens à adresser mes sincères remerciements à ma directrice de thèse Madame **Saida Rebiai**, qui a dirigé ce travail de recherche, Pour m'avoir fait confiance malgré les connaissances plutôt légères que j'avais sur la physique des plasmas, puis pour m'avoir guidé, encouragé et conseillé, j'ai pu apprécier autant ses qualités scientifiques que ses qualités humaines. Ses conseils avisés et sa très grande ouverture d'esprit ont été primordiaux pour la bonne réalisation de ce travail de thèse. Je garderai un excellent souvenir de notre collaboration.*

Encore une fois mille mercis.

*Je voudrais remercier Monsieur le Professeur **S.Sahli**, directeur du Laboratoire **L.M.I.** pour m'avoir accueillie dans son laboratoire et dont les remarques constructives et les conseils me furent bien utiles pour mener à bien ce travail.*

*Je pense ici en particulier à Monsieur le Professeur **A. BELLEL**, qui de plus m'a fait l'honneur de présider le Jury de cette thèse,*

Je le remercie profondément

Je remercie chaleureusement les membres du jury :

*M^{me} **A. LALAM**, Professeur à l'université de Tizi-Ouzou, M^r **A. BENHAYA** Professeur à l'université de Batna et M^{elle} **Z. ZIARI** maitre de conférences (A) à l'université de Constantine, qui m'ont fait l'honneur d'être les examinateurs de ce travail et qui ont permis l'amélioration de ce mémoire grâce à leurs remarques avisées.*

*J'associe à ces remerciements tous mes collègues, amis (ies)
ainsi que l'ensemble des membres du L.M.I et d'ailleurs, pour ces enrichissantes
années passées en leur compagnie, leur aide et leur soutien, mes remerciements
vont particulièrement à **H. Bahouh, A. Berkane et R. Abidat***

*Enfin je remercie tous ceux qui ont contribué de loin ou de près
à l'élaboration de ce travail.*

SOMMAIRE

<i>Introduction Générale</i>	1
Références bibliographiques de l'introduction	5

Chapitre I

Généralités sur Les Plasmas

I-1 Introduction	7
I-2/ Constituants d'un Plasma	9
I-2-1 Les électrons.....	9
I-2-2 Les ions	9
I-2-3 Les neutres	10
I-2-4 Les espèces monoatomiques.....	10
I-2-5 Les fragments moléculaires	10
I-2-6 Les Photons.....	10
I-3 Conditions de création d'un plasma	11
I-4 Génération d'un plasma électrique	11
I-4-1 Décharge à courant continu (DC)	12
I-4-2 Décharge radio fréquence (RF)	17
I-4-3 Décharges micro-ondes	18
I-5 Grandeurs caractéristiques d'un plasma	19
I-5-1 Densités de charges et degré d'ionisation.....	19
I-5-2 Température du plasma	19
I-5-3 Libre parcours moyen.....	22
I-5-4 Longueur de Debye.....	22
I-5-5 Neutralité	23
I-5-6 Fréquence plasma.....	23
I-5-7 La région de gaine dans un plasma.....	24
I-5-8 Le potentiel plasma	25
I-5-9 Le potentiel flottant.....	25
I-5-10 Le critère de Bohm.....	26

1-5-11 Distribution en énergie des électrons.....	27
I-6 Coefficients caractéristiques dans les plasmas.....	30
I-6-1 Mobilités.....	30
I-6-2 Coefficient de diffusion.....	31
I-7 Classification des plasmas.....	32
I-7-1 les plasmas chauds.....	32
I-7-2 les plasmas thermiques.....	32
I-7-3 Les plasmas froids	32
I-8 Collisions dans le plasma	34
I-8-1 Collisions élastiques.....	34
I-8-2 Collisions inélastiques.....	34
I-8-3 Les collisions avec transfert de charge.....	35
I-9 Vitesse thermique.....	36
I-10 Sections efficaces de collision.....	37
I-11 Décharge à courant continu et interaction avec	
la surface (émission secondaire)	39
I-12 Plasmas de dépôts	41
I-13 Conclusion	42
Références bibliographiques du chapitre I.....	43

Chapitre II

Modèle Proposé et Systèmes d'Équations

II-I Introduction	47
II-2 Les modèles numériques de décharge	48
II-2-1 Modèles non auto-cohérents.....	49
II-2-2 Modèles auto- cohérents	49
II-2-2-1 Modèles Particulaire (microscopiques)	49
II-2-2-2 Modèle Fluide.....	50

II-2-2-3 Modèle hybride.....	52
II-3 modèle proposé et système d'équations	53
II-3-1 Equations de transport pour les électrons.....	53
II-3-2 Equation de transport pour les Ions.....	55
II-3-3 L'équation d'énergie pour les électrons	56
II-3-4 Les grandeurs caractéristiques	57
II-4 Mouvement des électrons dans un champ électrique	58
II-5 Modélisation des trajectoires des électrons par	
la méthode PIC-MC	58
II-5-1 Schéma de principe du code PIC-MC.....	59
II-5-2 Temps de vol libre et technique de la collision nulle.....	63
II-5-3 Traitements des collisions entre électrons et neutres.....	66
II-6 Conclusion	68
Références bibliographiques du chapitre II	70

Chapitre III

Méthodes Numériques et Conditions de Simulation

III-1 Introduction	74
III-2 Considérations générales	74
III-3 Maillage spatiale et définition de la configuration de la décharge	76
III-4 Les différences finies	77
III-4-1 Principe - ordre de précision.....	77
III-4-2 Notation indicielle - cas 1D.....	78
III-4-3 Schéma d'ordre supérieur.....	79
III-4-4 Dérivée d'ordre supérieur.....	80
III-5 Intégration sur le temps	81
III-6 Schémas numériques explicites et implicites	82
III-7 Discrétisation spatiale des équations de transport et de l'énergie	83
III-8 Le schéma de discrétisation de Scharfetter-Gummel	83

III-9	Traitement numérique de l'équation de Poisson	85
III-10	Intégration des équations de mouvement des électrons	86
III-11	Le choix du pas de temps	87
III-12	Le choix du pas de maillage	87
III-13	Conditions aux limites	88
III-14	Conclusion	90
	Références bibliographiques du chapitre III	91

Chapitre IV

Résultats et Discussions

IV-1	Introduction	93
IV-2	Résultats 1D dans le cas d'un plasma non collisionnel	93
IV-2-1	Cas stationnaire	95
IV-2-2	Cas non stationnaire	97
IV-3	Résultats 2D dans le cas d'un plasma collisionnel	99
IV-4	Influence des paramètres technologiques sur les caractéristiques de la décharge	107
IV-4 -1	Influence de la pression de gaz	108
IV-4-2	Influence du temps de vol libre (t_{vol})	110
IV-4-3	Effet de l'émission secondaire sur les caractéristiques électriques de la décharge luminescente continue	113
a-	L'effet de l'émission secondaire des électrons	114
b-	Influence de la variation du coefficient d'émission secondaire	117
IV-4-4	Influence de la distance inter-électrodes	120
IV-5	Conclusion	126
	Références bibliographiques du chapitre IV	127
	Conclusion Générale	129

INTRODUCTION

GENERALE

Introduction Générale

Au cours des dernières années les plasmas sont largement utilisés dans les domaines de la science, l'industrie, le biomédical et la technologie de fabrication des composants électroniques. Les équipes scientifiques s'efforcent d'optimiser les paramètres du plasma et les dispositifs (réacteurs) de création de la décharge plasma pour atteindre la meilleure performance de production. Cependant, c'est souvent une activité très coûteuse. Dans la dernière décennie, la performance des systèmes informatiques a augmenté rapidement et donc la modélisation des plasmas prend un temps de simulation court. Les paramètres du plasma dans les dispositifs technologiques peuvent être prédits par cette voie avec une grande précision, plus rapidement et à moindre coût [1].

La technologie de décharge plasma luminescente à basse pression fournit plusieurs variétés d'applications dans l'industrie micro-électronique et de traitement des surfaces des matériaux. Il ya eu des intérêts récents d'application des décharges plasmas luminescentes, tels que la gravure, le traitement des plaquettes de semi-conducteurs, le traitement des matériaux et la modification de surfaces par dépôt de films de diamant [2]. Dans les dispositifs semi-conducteurs, les avantages de plasmas sont bien connus. Ils génèrent de fortes concentrations d'espèces réactives qui peuvent attaquer et déposer des films minces à de faibles températures du gaz, de sorte que les substrats ne soient pas endommagés. Par conséquent, une compréhension détaillée des processus fondamentaux de la décharge luminescente est nécessaire pour la conception, la caractérisation et l'optimisation des paramètres de la décharge de ces applications des plasmas.

Les plasmas sont créés au sein de réacteurs initialement remplis de gaz neutres et alimentés par une source extérieure d'énergie. Le travail que nous présentons dans ce mémoire porte sur les décharges luminescentes continues (DC) à basse pression qui ont longtemps été utilisés pour les lasers à gaz et les lampes fluorescentes. La décharge DC est maintenue par émission d'électrons secondaires issus de la cathode.

La modélisation des décharges plasmas est maintenant considérée comme un outil très complémentaire à l'analyse expérimentale pour la conception et l'optimisation du réacteur à plasma pour des applications spécifiques [3, 4]. La simulation numérique du réacteur à plasma

permet une mise à l'échelle exacte du réacteur et prédit les paramètres pour un fonctionnement optimal, en ce qui concerne notamment la composition du gaz et de la pression, de la configuration d'électrodes, les caractéristiques de l'alimentation électrique, etc... [5, 6]. Elle fournit des informations détaillées sur les systèmes complexes pour lesquels les méthodes analytiques de calcul sont impuissantes. Elle permet ainsi d'accéder à des paramètres physiques du plasma souvent inaccessibles à l'expérience.

La modélisation d'une décharge plasma permet de déterminer la cinétique de particules neutres et chargées en intégrant tous les mécanismes de collisions qui pourraient survenir dans le gaz [7]. En outre, la modélisation du plasma est devenue un outil précieux pour comprendre la physique du plasma et a contribué à développer des réacteurs à plasma efficaces [8]. Ceci a été rendu possible par le développement de modèles simplifiés et le choix des techniques de simulation appropriées [7]. Les modèles fluides, particules (PIC-MC) et hybrides sont couramment utilisés pour la simulation numérique des plasmas à basse température [9].

En particulier, l'argon est utilisé en tant que gaz porteur dans le procédé plasma et c'est l'un des plus nobles gaz utilisés pour le traitement de surfaces par plasma. En outre, la modélisation plasma d'argon est toujours d'actualité, en raison de la simplicité des réactions chimiques qui se produisent dans la décharge, afin de tester les différents modèles développés dans le but d'obtenir des modèles plus efficaces [10]. Dans ce travail, nous nous concentrons sur la modélisation d'une décharge plasma (DC) à faible pression dans l'argon. Le modèle proposé permet de mieux comprendre et optimiser les processus technologiques basés sur l'utilisation des plasmas froids dans l'industrie. Cette étude est importante car elle permet une description de l'évolution des caractéristiques électriques du plasma étudié sous l'influence du champ électrique appliqué à une géométrie à deux dimensions. Cette configuration (à la différence du modèle unidimensionnel) permet la prise en compte de l'expansion radiale de la décharge, ce qui est une situation plus réaliste qui décrit le comportement électrique de la décharge [11].

En cas de basse pression, la simulation des trajectoires des particules nécessite la connaissance de tous les processus de collisions définis par leurs sections efficaces de collision. La probabilité d'une collision pendant un temps de vol libre (temps moyen entre

deux collisions successives) ne peut être connue sans effectuer des intégrations non-analytiques. Une solution à ce problème consiste à appliquer le concept de « collision null » (concept proposé dans ce travail). Cette technique implique l'introduction d'une section de collision fictive faisant constante la fréquence totale de collision.

Le modèle proposé dans ce travail est élaboré à l'aide de **MATLAB**. Les résultats obtenus fournissent différents profils des caractéristiques du plasma. Le but de cette étude est de simuler les distributions des particules chargées, électrons et ions argon, du potentiel et du champ électriques ainsi que de l'énergie et la vitesse des électrons du gaz plasmagène, créé entre deux électrodes par une décharge DC, en utilisant une géométrie bidimensionnelle. Les effets de certains paramètres de décharge, tel la pression, la distance inter électrodes et la valeur du coefficient d'émission secondaire d'électrons par la cathode, sur ces distributions sont aussi étudiés par ce modèle.

Le contenu de ce mémoire est réparti en quatre chapitres organisés de la manière suivante :

- ✚ Dans le premier chapitre, qui suit cette introduction générale, nous donnerons les principales définitions et propriétés électriques d'un plasma. Nous traiterons les conditions de création d'une décharge et les différents types de décharge. Nous décrirons aussi les décharges électriques à tension continue et énumérerons les différents processus de collision susceptibles de se produire entre les constituants d'un plasma.

- ✚ Dans le deuxième chapitre, nous exposerons les équations mathématiques pour le modèle utilisé pour décrire et caractériser la décharge électrique, considérée dans cette étude. Nous présenterons également l'équation du mouvement et donnerons quelques rappels sur la méthode Monte Carlo en décrivant notamment le principe de la génération de nombres aléatoires suivi du calcul des trajectoires et du traitement des collisions.

- ✚ Dans le troisième chapitre, nous discuterons les aspects numériques utilisés pour résoudre le système d'équations décrits dans le chapitre II. Nous appliquerons ensuite la méthode des différences finies incorporant le schéma de discrétisation exponentielle [**Scharfetter et Gummel**] dans le traitement spatial du système d'équations.

✚ Le quatrième et le dernier chapitre portera sur les résultats de notre simulation, d'une décharge continue DC dans un plasma d'argon. Nous traiterons, en particulier l'influence de la pression du gaz, du temps de vol libre et la variation du coefficient d'émission secondaire et de la distance inter électrodes sur les densités de charges, le champ électrique et le potentiel ainsi que la distribution en énergie des électrons.

Enfin, une conclusion générale fera la synthèse des principaux résultats obtenus.

Références bibliographiques de l'introduction

- [1] P. Bartos, R. Hrach, P. Jelinek, “*Multidimensional fluid–particle modeling technique in low-temperature argon plasma at low pressure*”, Science Direct, Vacuum 82 220–223, (2008).
- [2] M. A. Lieberman, A. J. Lichtenberg, “*principles of plasma discharges and materials processing*”, (John Wiley, New York), (1994).
- [3] S. M. Lee, Y. J. Hong, Y. S. Seo, F. Iza, G. C. Kim, and J.K. Lee “*Simulations of biomedical atmospheric-pressure discharges*”, Comp. Phys. Comm. **180**, 636 (2009).
- [4] I. Denysenko, K. Ostrikov, P.P. Rutkevych, S. Xu, “*Numerical Simulation Of Nanoparticle-Generating Electronegative Plasmas In The Pecvd Of Nanostructured Silicon Film*”, Computational Materials Science, 30(3-4), 303-307, (2004).
- [5] I. Rafatov, E. A. Bogdanov and A. A. Kudryavtsev, “*On the accuracy and reliability of different fluid models of the direct current glow discharge*” Phys. Plasmas 19, V. 033502 (2012).
- [6] B. T. CHIAD, T. L. AL-ZUBAYDI, M. K. KHALAF, A. I. KHUDIAR, « *Construction And Characterization Of A Low Pressure Plasma Reactor Using Dc Glow Discharge*», Journal of Optoelectronics and Biomedical Materials Vol. 1, Issue 3, September p. 255 – 262, (2009).
- [7] D. Hash, D. Bose, T.R. Govindan, M. Meyyappan, “*Simulation of the dc plasma in carbon nanotube growth*”, Journal of Applied Physics, 93, 10, 6284-6290 Part 1, (2003).
- [8] A. Bogaerts, R. Gijbels, « *Numerical modeling of gas discharge plasmas for various applications* » Vacuum, Volume 69, Issues 1–3 pp, 37-52, (2003).
- [9] A. Bogaerts, K. D. Bleeker, I. Kolev, M. Madani, “*Modeling of gas discharge plasmas: What can we learn from it?*”, Elsevier, Surface & Coatings Technology 200 62– 67, (2005)

- [10] I. Rafatov, E. A. Bogdanov and A. A. Kudryavtsev, "Account of nonlocal ionization by fast electrons in the fluid models of a direct current glow discharge", *Phys. Plasmas* 19, V. 093503 (2012)
- [11] E. A. Bogdanov, S. F. Adams, V. I. Demidov, A. A. Kudryavtsev and J. M. Williamson, "Influence of the transverse dimension on the structure and properties of DC glow discharges", *Phys. Plasmas*, v.17, N10, 103502(1-11), (2010).

Chapitre I

Généralités Sur les Plasmas

I-1 Introduction

Le terme "plasma", introduit en physique en 1928 par le physicien Langmuir [1], désigne un gaz ionisé électriquement neutre. Le plasma constitue le quatrième état de la matière après l'état solide, l'état liquide et l'état gazeux. A l'état solide, les molécules sont rapprochées les unes des autres ce qui donne au solide son caractère indéformable. Si on fournit de l'énergie, sous forme de chaleur par exemple, les molécules tentent de s'éloigner les unes des autres sans adopter de forme propre ; c'est l'état liquide. Si la chaleur augmente encore, le liquide se transforme en gaz et un gaz surchauffé forme un plasma, 4^{ème} état de la matière où les électrons sont excités ou arrachés des atomes [2]. L'ensemble des états cités est illustré sur la figure I-1.

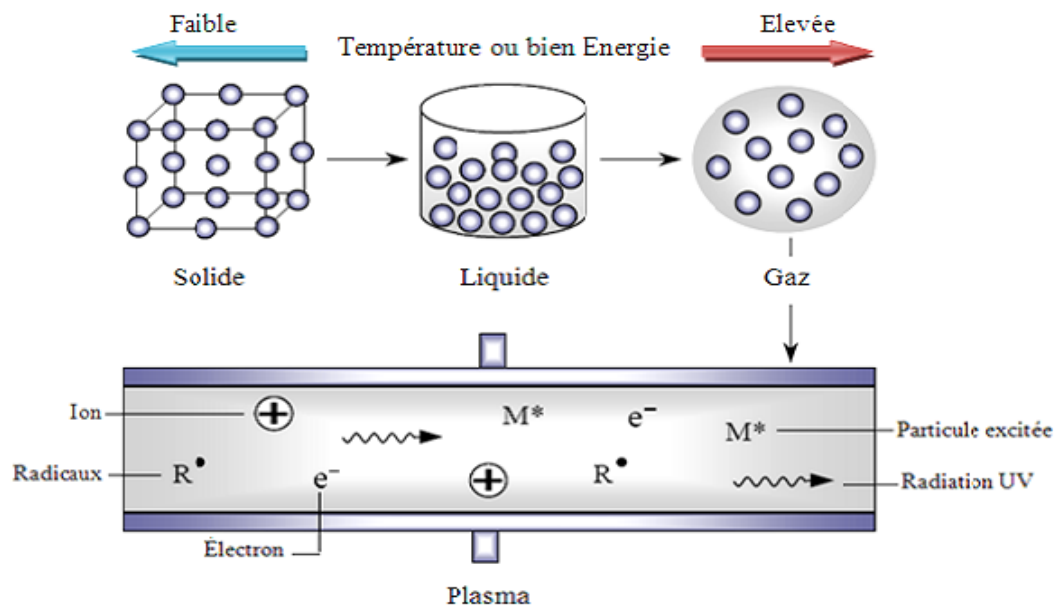


Figure I-1 : Représentation schématique des quatre états de la matière [3].

Le plasma est le quatrième état de la matière formant 99% de l'univers. Il se trouve dans la nature dans les nébuleuses, dans le nuage d'hydrogène composant le milieu interstellaire, dans les étoiles (cœur de l'étoile siège de réactions de fusion nucléaires) et dans l'environnement terrestre. Le plasma peut être créé artificiellement dans les laboratoires tels que les décharges plasmas électriques dans les tubes fluorescents et les plasmas de fusion dans les tokamaks.

Par ailleurs, La physique des plasmas est développée en intégrant toutes les avancées de la physique moderne. Cette technologie peut être utilisée pour de nombreuses applications telles que les lampes à néon, les écrans plasmas ainsi que la gravure ou le dépôt par plasma en micro-électronique où plus de 50% des étapes de fabrication des microprocesseurs utilisent les plasmas, mais aussi dans de nombreuses nouvelles technologies de traitement de surfaces comme l'implantation ionique [4].

Le procédé de création de plasma est basé sur l'injection d'un gaz « plasma gène » dans une enceinte sous vide partiel ou à pression atmosphérique. Une source électrique est appliquée pour produire notamment l'ionisation du gaz plasmagène. Le champ électrique agit directement sur les particules chargées (les électrons et les ions) où l'énergie injectée est transférée principalement aux électrons, qui participent à la formation d'espèces actives par processus d'ionisation, d'attachement, de recombinaison mais aussi d'excitation et de dissociation du gaz. Les interactions dans le plasma créent un comportement collectif, (figure I-2), qui n'existe pas dans les gaz neutres et procurent au plasma des propriétés uniques [5].

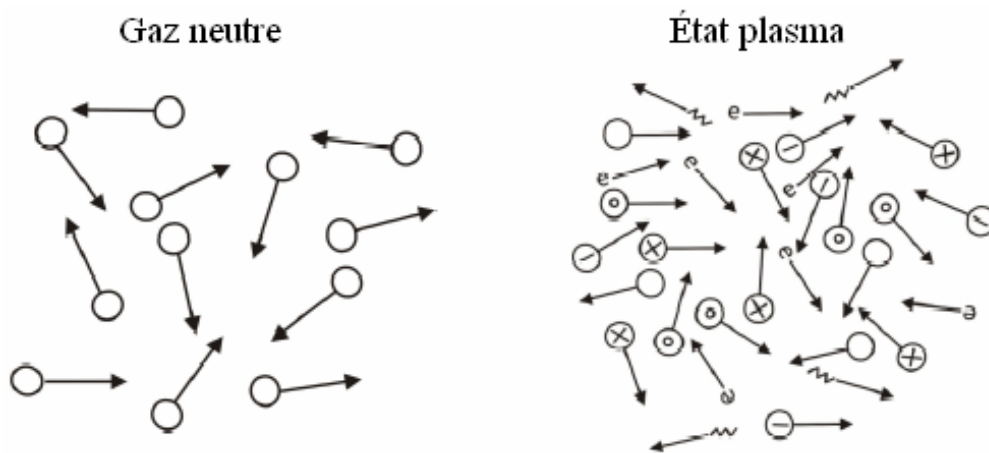


Figure I-2 : Schéma de la différence entre un gaz neutre et un plasma [6].

I-2 Constituants d'un Plasma

Un plasma est constitué de particules neutres (atomes, molécules, radicaux libres), d'ions positifs ou négatifs, d'électrons et des photons. Il peut aussi contenir des atomes (ou molécules) dits «excités », dans lesquels les électrons restent liés au noyau, mais sont portés à des états d'énergie potentielle élevés. Leur désexcitation s'effectue avec émission de photons. Cela permet à ce gaz d'être émetteur de lumière. Un plasma peut être qualifié comme un milieu gazeux partiellement ou totalement ionisé et macroscopiquement neutre selon que les charges positives et négatives s'équilibrent entre elles ou pas. Du fait de la présence de particules chargées libres, le plasma est un conducteur électrique.

Les constituants d'un plasma sont différents par leurs masses et leurs charges [7], on distingue:

I-2-1 Les électrons

Les électrons sont les particules les plus énergétiques et rapides dans un plasma à cause de leur faible masse. Le mouvement, la vitesse et l'énergie des électrons dans un réacteur plasma dépendent de la nature du gaz plasmagène, de la pression et de la source d'excitation de la décharge. Les électrons représentent le véritable moteur des décharges électriques. Ils sont responsables des principales réactions produites dans le plasma. A haute fréquence les électrons réparent aux perturbations électriques sur des échelles de temps beaucoup plus courtes, contrairement aux ions [7].

I-2-2 Les ions

A l'inverse des électrons, les espèces ioniques dans un plasma sont très variées. Lorsque la décharge électrique est très puissante, les ions sont en général de composition chimique simple mais peuvent être multichargés. Par contre dans les décharges traditionnelles (faible puissance), les ions sont en général une fois chargés.

Les ions existent principalement sous forme d'ions positifs, mais il n'est pas exclu la présence d'ions négatifs dans le cas de gaz électronégatifs (oxygène, halogène).

A cause de leur importante masse et leur faible mobilité, leur comportement est très différent de celui des électrons. Il dépend de la fréquence du champ électrique d'entretien, de la décharge et de la densité électronique. Dans un plasma froid, la concentration des ions est environ 10^4 fois plus faible que celle des neutres [7].

I-2-3 Les neutres

Les neutres sont les espèces majoritaires dans un plasma, ils sont responsables de la formation des dépôts solides. Les collisions électron- neutre dans plasma peuvent produire des ions, des radicaux ou des espèces excitées. Les neutres peuvent être soit dans l'état fondamental, ou dans une série d'états excités, leur désexcitation produit des photons.

I-2-4 Les espèces excitées

Les espèces monoatomiques peuvent exister dans des états électroniques radiatifs ou métastables. Les états radiatifs se désexcitent vers l'état fondamental par émission de photons ultra-violet ou visibles et les états métastables ne se désexcitent que lors des collisions avec les parois ou d'autres particules. Les espèces multi-atomiques occupent des états vibrationnels ou rotationnels, car leur degré de liberté est plus élevé.

I-2-5 Les fragments moléculaires

Un plasma contient un grand nombre de fragments moléculaires qui peuvent être des atomes simples (H, O, ..) ou d'édifices moléculaires plus complexes, parmi lesquels on reconnaît les radicaux de la chimie traditionnelle (CH_3 , CH_2 , CH) [7].

I-2-6 Les Photons

Le photon particule élémentaire, de masse et de charge nulle, le photon est l'aspect corpusculaire de la lumière dans un plasma. Les plasmas sont des sources abondantes de photons émis par la désexcitation des états électroniques. Ces photons sont caractérisés par des longueurs

d'ondes (ou fréquences) dépendant des espèces émissives. Ils sont donc porteurs d'information sur la composition du plasma (spectroscopie d'émission optique). La quantité de photons émis par le plasma peut représenter une part notable de l'énergie dissipée dans la décharge.

I-3 Conditions de création d'un plasma

Pour créer un plasma globalement ionisé, à partir d'un milieu gazeux, il est nécessaire de respecter certaines conditions sur la tension appliquée, la pression du gaz et les dimensions du réacteur. Ceci se traduit par :

- Donner une énergie suffisante aux atomes pour arracher plusieurs électrons et obtenir des atomes partiellement ou totalement ionisés. Cette énergie peut être fournie de différentes façons [8] :
 - Décharges électriques; décharge RF ou microondes, décharge DC, DBD.
 - Chauffage; on peut avoir un milieu bien constitué de plasma pour des températures de l'ordre de 4.10^6 K (\approx température de couronne solaire).
 - Absorption de rayonnement; le plasma se forme si l'absorption des photons par des atomes est suivie par une recombinaison suffisamment lente.
- Utiliser tout procédé de couplage (capacitif ou inductif) du milieu avec une source d'énergie ou par impact d'électrons énergétiques [9].
- Bien assurer les paramètres primaires ou par exemple avoir un degré d'ionisation qui compense les pertes de charges qui résultent de recombinaisons surfaciques ou volumiques.

I-4 Génération d'un plasma électrique

En exploitant les propriétés électriques du plasma, nous pouvons éviter la nécessité d'utiliser des températures élevées. A cause de la présence des particules chargées (électrons et ions), nous pouvons les chauffer en appliquant un champ électrique, tout en gardant fixes les

températures des atomes gazeux neutres (température ambiante). Notamment les électrons, avec une masse plus faible sont facilement accélérés et leurs énergies, avec des valeurs de la température électronique (T_e) comprises entre 1 et 10 eV, sont suffisantes pour ioniser les atomes neutres. Les plasmas induits électriquement sont appelés les décharges.

Les plasmas à des basses températures sont assimilés à des plasmas froids [10]. Par définition le plasma froid est un gaz ionisé qui n'est pas à l'équilibre thermodynamique et dont seuls les électrons sont chauffés. Les décharges ne sont pas en équilibre thermique lorsque :

$$T_e \gg T_g \quad \text{et} \quad T_e > T_i > T_g$$

Avec T_i et T_g sont respectivement la température ionique et du gaz.

Les types de plasmas les plus utilisés sont induits électriquement par une décharge [11] :

- En courant continu DC créée par l'application d'un potentiel DC.
- Radiofréquence RF qui utilise un champ électrique de fréquence radio de l'ordre de 13.56 MHz
- Micro-onde de fréquence de l'ordre du GHz.

A basse pressions, ces décharges fonctionnent suivant le régime luminescent. A pression atmosphérique, on réalise des plasmas avec des décharges à haute tensions pulsées (décharge couronnes) ou alternatives avec cathode isolante (décharges à barrière diélectrique DBD).

I-4-1 Décharge à courant continu (DC)

La décharge luminescente à basse pression est le plus ancien des plasmas froids. Comme le montre la figure I-3, cette décharge est réalisée entre une cathode et une anode où une différence de potentiel est appliquée aux bornes du tube à travers une résistance de charge R par un générateur de f.é.m. V_0 . En agissant sur la valeur de la résistance R et celle de la tension V_0 ,

on peut faire varier le courant i , pour des pressions voisines du Torr, soit du mbar ou de Pascal (760 Torr = 1 bar = 10^5 Pascal).

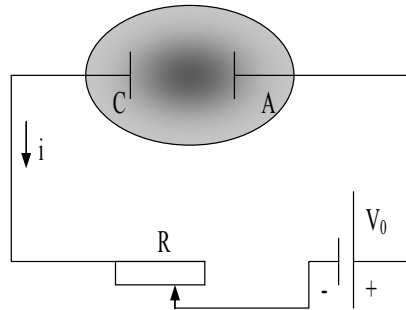


Figure I -3 : Production d'un plasma par une décharge continue.

Ainsi, on obtient une caractéristique courant- tension de la décharge dont l'allure est représentée par la figure I- 4. Cette courbe fait apparaître plusieurs domaines correspondant aux différents régimes de fonctionnement, que nous allons décrire [7].

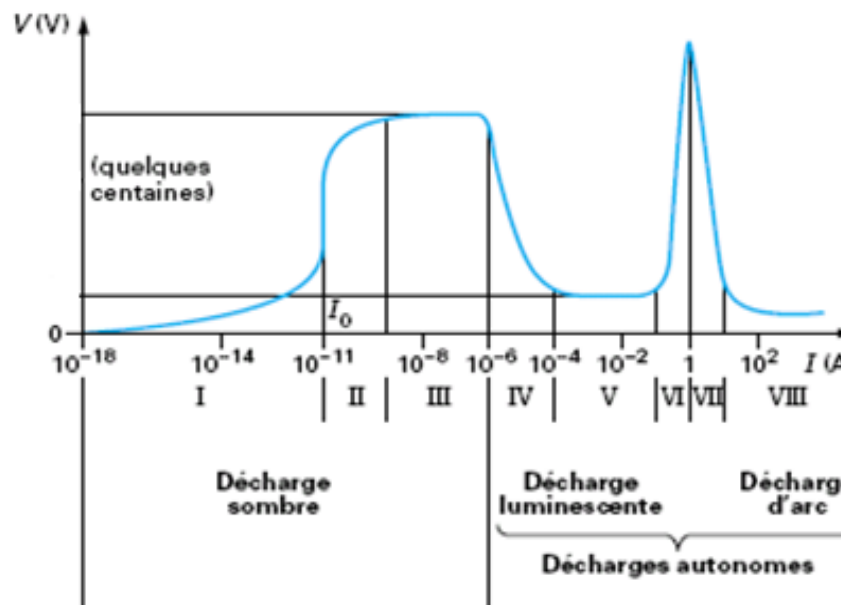


Figure I-4 : Caractéristique courant-tension d'une décharge continue [2].

A- Décharge sombre

Elle contient les régions suivantes :

Région I : décharge non autonome sans multiplication électronique

Lorsqu'on augmente le courant I de la décharge, il y a augmentation de la tension. Comme ces deux grandeurs sont faibles il n'y a pas donc ionisation ni création de porteurs et donc la décharge ne peut s'entretenir d'elle-même. Pour cette raison, elle est dite non autonome.

Région II : décharge non autonome avec multiplication électronique

Si l'on augmente suffisamment le courant, la tension appliquée à l'électrode se remet à croître, caractérisant une amplification de l'ionisation et une multiplication électronique. Cet effet se produit lorsque, sous l'action du champ appliqué, certains électrons acquièrent une énergie suffisante pour ioniser une particule neutre créant de nouveaux électrons susceptibles à leur tour d'ioniser le gaz.

Région III : Décharge de Townsend

Le courant se met à croître plus vite. Le nouveau mécanisme d'ionisation responsable de cette augmentation du courant et l'émission secondaire due au bombardement de la cathode par des ions positifs.

B- Décharge luminescente (autonome) :

Elle s'étale sur cinq régions possibles:

Régions IV et VI :

Ce sont deux régions de transition qui entourent la région V sur les caractéristiques. Elles sont appelées respectivement décharges luminescentes sub-normale et anormale.

Région V :

C'est la décharge luminescente normale qui constitue un régime familier, puisqu'il est utilisé notamment dans les tubes d'éclairage (tubes à néon, tubes fluorescents).

Dans les décharges luminescentes d'autres phénomènes et propriétés peuvent apparaître comme :

- L'apparition d'une charge d'espace avec une non uniformité du champ électrique axial.
- Luminosité visible à l'œil.
- Non homogénéité de la décharge, mise en évidence par la répartition de cette luminosité en cinq zones différentes illustrées sur la figure I-5, représentant respectivement :

1- L'espace cathodique :

Il est caractérisé par une zone de charge d'espace positive, où règne un champ électrique qui décroît fortement. Les électrons sont accélérés par ce champ et quittent la cathode rapidement alors que les ions positifs sont attirés par l'électrode négative.

2- La lueur négative :

C'est la zone la plus lumineuse de la décharge, cela est dû à de nombreux processus qui peuvent être des collisions [entre (électron-électron), (électron-ion), (électron-neutre)...etc.] ou des excitations et des désexcitations.

Le mouvement des électrons est désordonné, et le champ électrique devient quasi nul.

3- L'espace sombre de Faraday :

L'émission de lumière et d'énergie des électrons sont faibles donc pas d'ionisation, et la présence de particules négatives conduit à l'accroissement du champ électrique. Ce qui crée une nouvelle accélération des électrons.

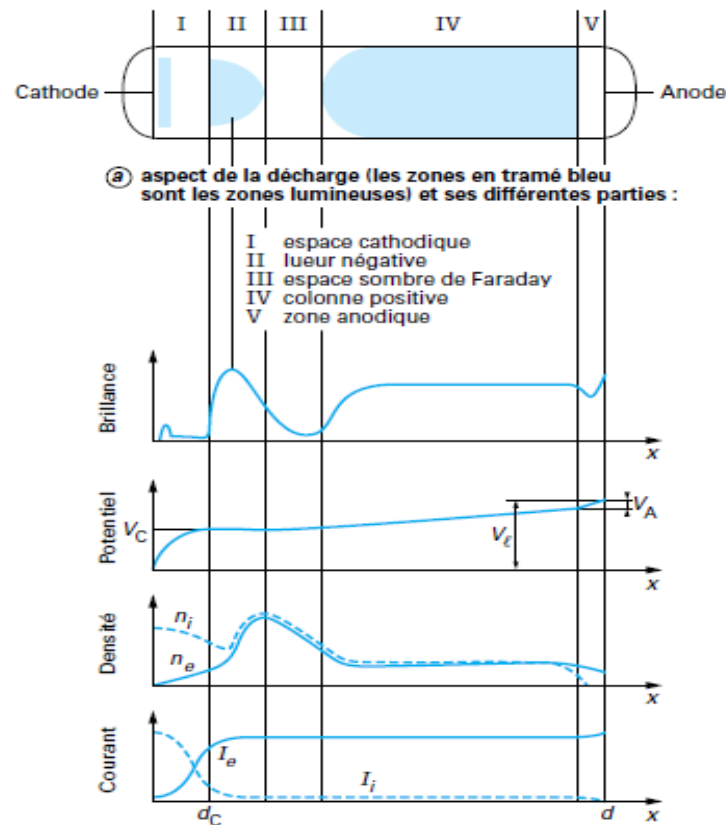


Figure I-5 : Architecture d'une décharge luminescente normale [2].

4- La colonne positive :

Elle est caractérisée par des propriétés électriques et spectrales constantes :

- Même concentration d'électrons et d'ions.
- La décharge est maintenue en équilibre grâce au champ ambipolaire qui donne une accélération aux ions et fait ralentir les électrons.
- Une distribution de vitesse isotrope pour chaque type de particules, avec une température électronique très supérieure à celle des ions et des neutres.
- Enfin, la constance des densités de courant (la densité de courant ionique (j_i) est beaucoup plus faible que la densité de courant électronique (j_e)) qui traduit

l'équilibre entre l'ionisation par les électrons et les pertes de particules chargées vers les parois du tube, sur la surface duquel elles se recombinent [2].

5- La zone anodique :

L'anode étant un collecteur d'électrons, elle comprend la zone de charge d'espace négative avec un champ électrique plus important que la colonne positive.

I-4-2 Décharge radio fréquence (RF)

La décharge RF avec électrodes intérieures est schématisée sur la figure I-6. La fréquence commerciale est 13.6 Mhz. Le générateur RF est relié à une électrode, dite active, via un adaptateur d'impédance qui permet de polariser négativement cette électrode. On retrouve le fonctionnement de la cathode d'une décharge lumineuse. Ce type de décharge est surtout utilisé en microélectronique, pour graver des surfaces en position cathodique ou pour déposer des films en position anodique [12].

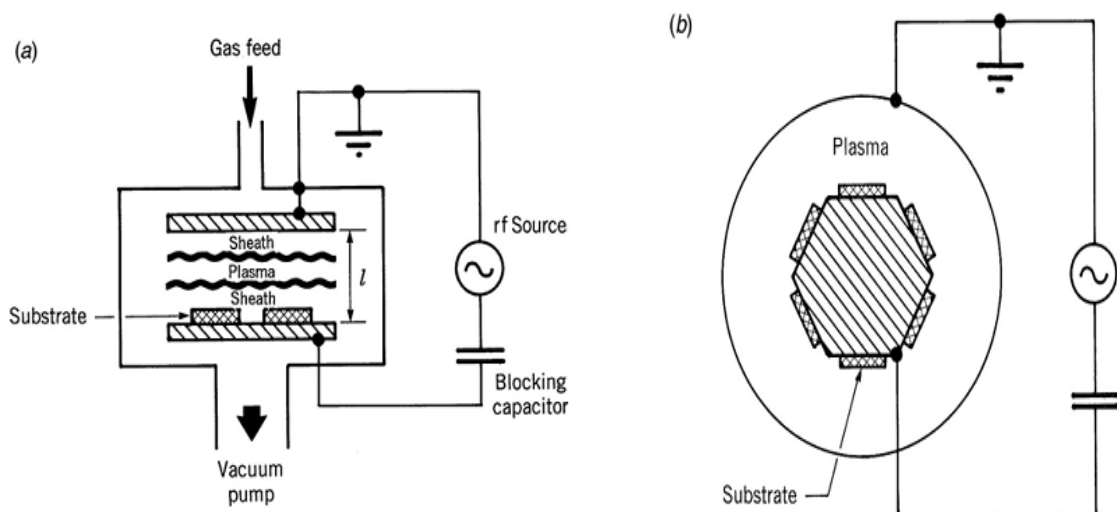


Figure I-6 : Décharges RF : (a) Plane parallèle géométrie et (b) coaxiale (hexode) géométrie [5].

Suivant la fréquence RF appliquée, deux cas peuvent être considérés:

- Cas des décharges RF à basse fréquence : Quand la fréquence du signal alternatif appliqué est inférieure à la fréquence propre d'oscillation des ions f_{pi} (f_{pi} de l'ordre de 1MHZ) ; les ions parviennent à suivre l'expansion des gaines. La densité des ions sera donc modulée dans le temps avec un changement périodique de la tension des électrodes.

- Cas des décharges RF à haute fréquence: ($f \geq f_{pi}$) 1MHz - 0.9GHz

Dans le cas d'une décharge plasma RF à haute fréquence, les ions ne peuvent plus suivre le mouvement des variations du champ électrique. Ils ne voient que le champ moyen dans les gaines et sont confinés dans le plasma. Cependant, les électrons peuvent suivre les variations du champ électrique dans la région des gaines et être accélérés au moment de leur expansion avec une énergie suffisante pour ioniser le gaz.

I-4-3 Décharges micro-ondes

La décharge micro-onde (la fréquence commerciale est 2450 Mhz) peut être réalisée avec des antennes, à l'intérieur d'une enceinte, ou à l'extérieur du tube à décharge par des cavités. Les décharges micro-ondes sont guidées le long de dispositif et transmettent leur énergie aux électrons libres du gaz plasmagène. Ce qui donne lieu à des collisions inélastiques excitatrices et ionisantes entre les électrons et les neutres. A ce stade, le gaz est partiellement ionisé et passe à l'état plasma [13]. Le plasma obtenu est caractérisé par une bonne uniformité en volume et en surface. Le schéma d'une torche plasma micro-onde est illustré sur la figure (I-7) suivante.

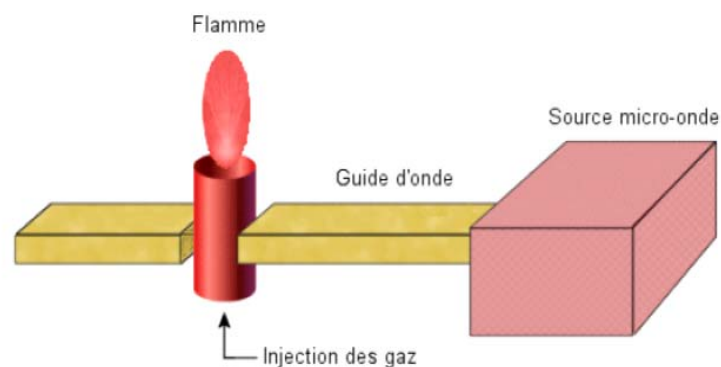


Figure I-7: Schéma d'une torche plasma micro-onde [14].

Dans les plasmas à hyperfréquence ou micro-ondes la fréquence propre d'oscillation des électrons (f_{pe}) est inférieure à la fréquence du signal appliqué (f) et supérieure à la fréquence

propre d'oscillation des ions (f_{pi}) ($f_{pi} < f_{pe} < f$), les ions et les électrons ne peuvent plus suivre le champ électrique. Les courants au sein de la décharge sont le résultat des déplacements par diffusion ou convection des espèces chargées.

I-5 Grandeurs caractéristiques d'un plasma

Les plasmas sont caractérisés principalement par les paramètres suivants :

I-5-1 Densités de charges et degré d'ionisation

La neutralité du plasma n'est vérifiée que si la densité des particules chargées est suffisamment importante [7]. La densité n est définie comme le nombre de particules par unité de volume (cm^{-3}), et ce pour chaque espèce (électrons, ions, neutre). Un paramètre intéressant pour caractériser le plasma est son taux d'ionisation α donné par le rapport [15] :

$$\alpha = \frac{n_e}{n_e + n_n} \quad (\text{I-1})$$

Ce dernier représente le rapport du nombre d'électrons libres n_e sur le nombre de particules totales $n_e + n_n$, ou n_n est le nombre de particules neutres par unité de volume.

I-5-2 Température du plasma

La température du plasma est définie comme la moyenne des énergies de translations des particules dans la décharge. Étant donné la différence de masses qui existe entre les électrons et les espèces lourdes, ces deux populations sont souvent considérées comme étant deux systèmes chacun dans leur propre équilibre thermodynamique. C'est pourquoi, lorsqu'on parle de plasma, on entend souvent parler de plusieurs températures (électronique, ionique, gaz) qui peuvent être toutes différentes. La température électronique est souvent considérée la plus importante pour déterminer et démontrer les phénomènes dans le plasma puisqu'ils sont les agents les plus actifs pour l'ionisation du gaz et la création de radicaux.

On peut diviser les plasmas en deux catégories. La première concerne les plasmas « chauds » ou dits en équilibre thermodynamique locale (LTE). Ils sont caractérisés par une densité d'énergie élevée et une température égale pour toutes les espèces (ions, électrons, neutres). Les plasmas naturels comme les étoiles, les éclairs, les flammes, etc. sont en équilibre thermodynamique ce qui n'est pas le cas pour la plupart des plasmas créés en laboratoire.

Pour obtenir une LTE entre les températures électroniques et ioniques en laboratoire, on doit travailler à des pressions au-dessus de 10 Torr (Figure I-8), où il y a un large excès de collisions électron-neutre et électron-ion par rapport aux collisions avec les murs du réacteur. Les plasmas chauds sont utilisés dans le traitement de matériaux pour leur densité d'énergie élevée et leur capacité à chauffer, fondre et dans certains cas, vaporiser le matériel à être traité [16]. On peut aussi déposer des couches métalliques et densifier ou effectuer de la sphéroïdisation de poudres [17]. On les utilise aussi de plus en plus comme source d'espèces réactives à hautes températures dans la synthèse chimique par plasma de matériaux extrêmement purs [18].

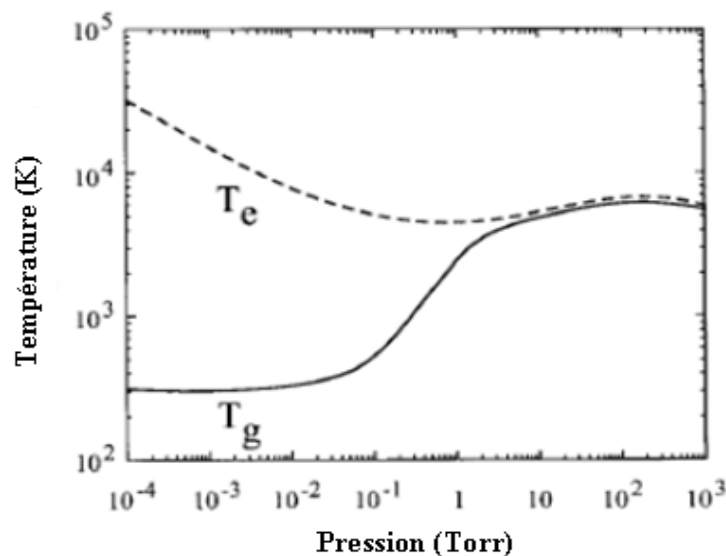


Figure I- 8 : Température électronique T_e , et température du gaz T_g , en fonction de la pression au sein d'un plasma [19].

La deuxième catégorie appartient aux plasmas hors équilibre thermodynamique, appelés plasmas « froids », qui n'ont pas une seule température proprement dite [20]. On définit

cependant trois températures importantes $T_e \gg T_i > T_n$, où T_e est la température électronique, T_i la température ionique et T_n la température des neutres, proche de la température ambiante. Ils sont caractérisés par une densité d'énergie plus faible que les plasmas en LTE et une différence marquée entre la température électronique et la température des particules lourdes [20, 21].

Les plasmas de décharge peuvent également être classés dans les plasmas LTE et les plasmas non-LTE. Cette subdivision est généralement liée à la pression dans le plasma. En effet, une forte pression de gaz implique de nombreuses collisions dans le plasma, conduisant à un échange d'énergie efficace entre les espèces du plasma et par conséquent des températures égales. Une faible pression de gaz, d'autre part, conduit à plus que quelques collisions dans le plasma et par conséquent à des températures différentes de l'espèce de plasma en raison d'un transfert d'énergie efficace. La raison en est que, comme suggéré ci-dessus, non seulement la pression joue un rôle, mais aussi la distance inter électrodes (qui est très faible dans les exceptions mentionnées ci-dessus). En général, c'est le produit de deux paramètres noté P.d qui classifie les plasmas en LTE et non- LTE [22].

La température électronique est reliée à son énergie cinétique moyenne pour un système à l'équilibre thermodynamique par :

$$E_c = \frac{1}{2} m_e v^2 = \frac{3}{2} k_B T \quad (I-2)$$

Avec m_e et v la masse et la vitesse des électrons et k_B la constante de Boltzmann.

Cette température est exprimée en degré Kelvin ou en eV, sachant que $1\text{eV} = 1.16 \cdot 10^4 \text{K}$.

Notre étude au sein de ce mémoire va se restreindre aux plasmas froids, la majorité de ces plasmas sont créés en laboratoire à des pressions de 10^{-4} Torr à 10 Torr.

I-5-3 Libre parcours moyen

Le libre parcours moyen (λ) est la distance qu'une particule (électron, ion, neutre, etc.) traverse entre deux collisions, due à la nature statistique des collisions, il a une distribution spécifique. Il peut généralement être décrit par l'équation suivante [23] :

$$\lambda = \frac{1}{\Pi (r_1 + r_2)^2 \times N} \quad (\text{I-3})$$

Où r_1 , r_2 sont les rayons des particules en collisions; N est la densité du nombre de la particule (nombres de particules par unité de volume). C'est pourquoi les plasmas se font généralement à basse pression. En abaissant la pression et en diminuant N , on a donc un libre parcours moyen plus grand. Cela permet aux particules d'avoir plus de temps pour être accéléré par le champ électrique entre les collisions et ainsi fournir un plus grand transfert d'énergie lors de la collision. Ceci facilite l'ionisation et l'obtention d'un état plasma stable.

I-5-4 Longueur de Debye

Un milieu plasma préserve sa neutralité électronique, suite aux différentes forces électrostatiques, sur une échelle spatial définie par la longueur de Debye (λ_D). C'est la distance d'écrantage du potentiel d'un ion positif par le nuage des électrons qui l'entourent. Cette longueur définit le seuil au-dessus duquel l'individualité des particules disparaît, et l'ensemble des particules est perçu comme un nuage électronique.

La longueur de Debye ne dépend que de la température électronique et de la densité électronique n_e . Ce paramètre peut être généralement approximé par l'équation suivante [24] :

$$\lambda_D = \sqrt{\frac{\epsilon_0 k_B T_e}{n_e e^2}} \quad (\text{I-4})$$

Où ϵ_0 est la permittivité du vide, e est la charge de l'électron.

Un gaz ionisé est considéré comme un plasma si sa longueur de Debye est beaucoup plus petite que les dimensions physiques du plasma et si le nombre de particules dans la sphère de Debye est plus grand que l'unité.

I-5-5 Neutralité

La première des caractéristiques d'un plasma est d'être quasiment neutre. Cette quasi neutralité est réalisée lorsque la densité des particules chargées est suffisante. Dans ce cas, les particules se répartissent de façon à neutraliser localement le milieu. Si une particule s'éloigne de sa position, les particules environnantes exercent sur elle une force de rappel. Ceci donne naissance à la notion d'oscillation plasma [25].

I-5-6 Fréquence plasma

La fréquence plasma renforce le caractère collectif du comportement des particules chargées. Considérons une densité de charge électronique recouvrant parfaitement une densité de charge ionique, et supposons également que la masse des ions est infinie (ions immobiles), si par une brève perturbation externe nous déplaçons le nuage électronique (figure I-9) par rapport au nuage ionique, une charge d'espace négative apparaît.

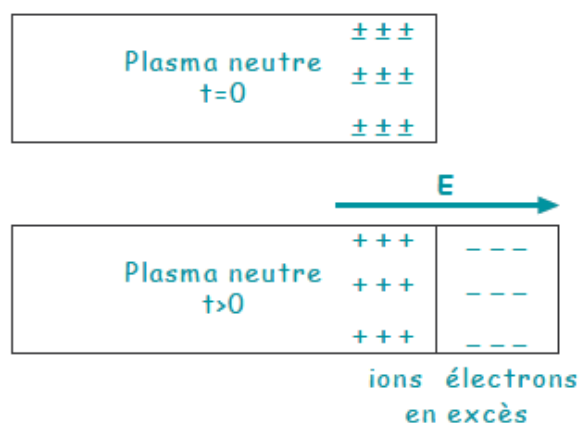


Figure I-9 : Schéma de principe des oscillations plasma [12].

Elle crée un champ électrostatique interne s'opposant à la perturbation et pour but de rétablir la quasi-neutralité. Les électrons vont osciller autour de leur position d'équilibre à une fréquence caractéristique appelée la fréquence plasma électronique [23, 24].

$$f_{pe} = \frac{\omega_{pe}}{2\pi} = \frac{1}{2\pi} \left(\frac{e^2 n_e}{\varepsilon_0 m_e} \right)^{1/2} \approx 8980 \sqrt{n_e} \quad (\text{Hz}) \quad (\text{I-5})$$

Avec ω_{pe} (rad/s) la pulsation plasma électronique. Si maintenant nous considérons la masse finie des ions, ils vont aussi osciller à une fréquence caractéristique appelée la fréquence plasma ionique :

$$f_{pi} = \frac{\omega_{pi}}{2\pi} = \frac{1}{2\pi} \left(\frac{e^2 n_i}{\varepsilon_0 m_i} \right)^{1/2} \approx 33 \sqrt{n_i} \quad (\text{Hz}) \quad (\text{I-6})$$

Avec ω_{pi} (rad/s) la pulsation plasma ionique, n_i (cm^{-3}) la densité ionique et m_i la masse ionique.

La fréquence plasma est alors la somme des fréquences plasmas électronique et ionique :

$$f_p = \frac{1}{2\pi} (\omega_{pe} + \omega_{pi}) \quad (\text{I-7})$$

I-5-7 La région de gaine dans un plasma

La gaine d'un plasma est une interface abrupte entre le volume du plasma et les murs du réacteur, les électrodes, ou toute autre surface présente dans le réacteur. Les gaines se forment autour d'un plasma parce qu'initialement, les électrons ont une vitesse thermique $(e.T_e / m_e)^{1/2}$ au moins 100 fois plus grande que les ions $(e.T_i / m_i)^{1/2}$ due à leur masse plus faible et leur température plus grande $T_e > T_i$ [7, 26]. Ainsi, les électrons vont frapper plus souvent les murs de la chambre ou les électrodes et conséquemment seront retirés du plasma. Les ions laissés

derrière vont donc créer une accumulation de charges positives autour du plasma qui va résister à la perte de plus d'électrons. La figure I-5 montre comment cette tension DC varie entre les deux électrodes. On peut voir facilement comment les électrons sont repoussés des murs de la chambre et guidés vers le plasma. Les ions par contre sont attirés vers les électrodes mais vu leur grande masse ils sont peu mobiles. Dans ce contexte, seuls les ions qui arrivent « par hasard » à l'interface entre le plasma et la gaine seront attirés par les électrodes. Dans la plupart des réacteurs à plasma, on peut observer cette région appelée « dark sheath » qui est moins lumineuse que le cœur du plasma. Dans cette région, la densité et l'énergie des électrons sont plus faibles, il y a donc moins de collisions avec des molécules et ainsi, moins de photons sont émis à partir de cette région.

I-5-8 Le potentiel plasma

Le plasma est un gaz macroscopiquement neutre où y règne un champ électrique nul et un potentiel constant. C'est le potentiel plasma noté V_p . Il est positif par rapport aux parois et sert souvent de référence.

I-5-9 Le potentiel flottant

Le potentiel flottant V_f est un potentiel auquel se fixe un corps plongé dans un plasma. Son existence est due au fait que ce corps se charge d'abord négativement à cause de la grande mobilité des électrons. Puis, les électrons sont repoussés et les ions attirés par le corps chargé négativement jusqu'à ce que l'équilibre entre le flux électronique et le flux ionique soit atteint, le corps se porte alors au potentiel flottant. Il est alors entouré d'une zone de charge d'espace qui est en général positive, appelée gaine plasma. La valeur de V_f est généralement donnée par rapport à V_p [27]:

$$V_f = V_p - \frac{KT_e}{2e} \ln\left(\frac{m_i}{2.25 m_e}\right) \quad (\text{I-8})$$

Le potentiel V_f est plus négatif que le potentiel plasma.

I-5-10 Le critère de Bohm

Bohm a avancé l'hypothèse de l'existence d'une zone de transition entre une gaine d'épaisseur L_g et le plasma, appelée " pré gaine". C'est une zone de quasi-neutralité électrique dans laquelle le potentiel passe lentement de V_f à V_p .

D'après le critère de Bohm, la vitesse des ions à la lisière de la gaine doit être supérieure ou égale à leur vitesse thermique $(\frac{KT_e}{m_i})^{\frac{1}{2}}$ afin qu'ils puissent sortir du plasma. Le potentiel en lisière de gaine noté V_l est [1, 28]:

$$V_l = V_p - V_f = \frac{KT_e}{2e} \quad (I-9)$$

Les différentes zones citées ci-dessus sont représentées sur la figure I-10 suivante :

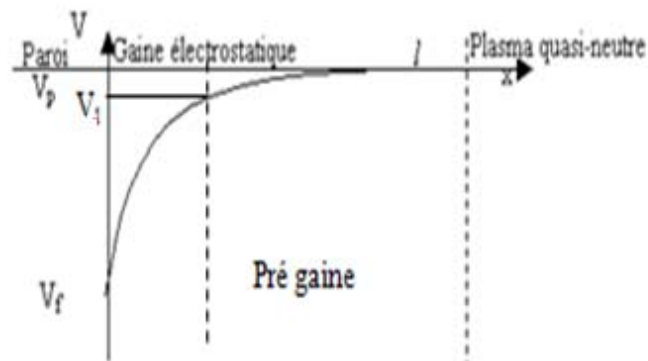


Figure I-10 : Répartition du potentiel électrique dans un plasma au voisinage d'une paroi [29].

1-5-11 Distribution en énergie des électrons

Les électrons libres sont les espèces énergétiques dans les plasmas. Ils obtiennent l'énergie du champ électrique beaucoup plus rapidement que les ions et lorsqu'on considère seulement les collisions élastiques, on peut les considérer thermiquement isolés des atomes et molécules par leurs différences de masses. De cette façon, les électrons accumulent assez d'énergie cinétique pour effectuer des collisions inélastiques et produire l'ionisation nécessaire pour soutenir la décharge [30]. La fonction de distribution en énergie des électrons peut être différente suivant les paramètres plasmas considérés [31], et on distingue :

a- La distribution de Maxwell

Pour un système isotrope, homogène et stationnaire sans force extérieure (cas de l'équilibre thermodynamique) la forme de la distribution en énergie est donnée par la fonction suivante est illustré sur la figure I-11 [2]:

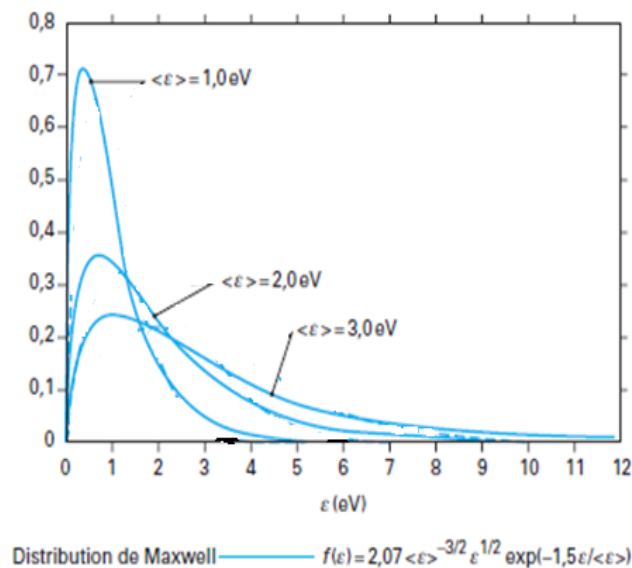


Figure I-11 : Distribution d'énergie des électrons d'un plasma froid [2].

$$f(\varepsilon) = 2.07 \langle \varepsilon \rangle^{-3/2} \varepsilon^{1/2} \exp(-1.5\varepsilon / \langle \varepsilon \rangle) \quad (\text{I-10})$$

Avec $\langle \varepsilon \rangle$: valeur moyenne de l'énergie.

Où ε représente l'énergie des électrons donnée par la relation suivante :

$$\varepsilon = \frac{3}{2} K.T_e \quad (\text{I-11})$$

b- La distribution de Boltzmann

La distribution de Maxwell ne correspond qu'aux collisions élastiques et si, pour un plasma en équilibre thermodynamique, on souhaite prendre en compte la distribution des énergies internes sur les différents niveaux du fait des collisions inélastiques, il convient d'utiliser la distribution de Boltzmann. Elle prédit la fonction de distribution pour le nombre fractionnaire de particules occupant un ensemble d'états qui ont chacun pour énergie ε . La fonction de distribution de Boltzmann peut s'écrire sous la forme

$$f(\varepsilon) = A e^{-\varepsilon / kT} \quad (\text{I-12})$$

Avec A une constante de normalisation.

Une autre idée contenue dans la distribution de Boltzmann ci-dessus est que si l'économie d'énergie est améliorée en augmentant la température de sorte que l'énergie totale disponible pour les particules est augmentée, une particule donnée est plus susceptible d'obtenir une quantité donnée d'énergie. Par ailleurs, s'il ya une énergie de seuil particulière pour un phénomène donné, comme l'ionisation ou l'excitation, alors la probabilité que cela se produise va augmenter avec la température d'une manière généralement prévisible.

c- La distribution de Margenau et Druyvesteyn

Pour des champs électriques suffisamment importants pour ne plus être négligés dans l'équation de Boltzmann, mais en négligeant les collisions inélastiques et à des fréquences ω telles que $\omega \ll \nu_{e0}$ (ν_{e0} fréquence de collision entre électrons et neutres), on obtient une fonction de distribution dite de Margenau. Si l'on suppose que σ_{e0} (section efficace de collision électrons-

neutres) est indépendante de la vitesse, alors v_{e0} varie linéairement avec la vitesse et la distribution de Margenau devient celle de Druyvesteyn, donnée par :

$$f(\varepsilon) = 1.04 \langle \varepsilon \rangle^{-3/2} \varepsilon^{1/2} \exp(-0.05 \varepsilon^2 / \langle \varepsilon \rangle^2) \quad (\text{I-13})$$

Il est à noter que pour des conditions de décharge données, la pression du gaz a une grande influence sur la distribution en énergie des électrons présents dans un plasma. L'exemple illustré sur la figure I-12 montre comment la réduction de la pression, d'un plasma d'argon, de 3000 mTorr (400 Pa) à 70 mTorr (10 Pa) entraîne une évolution de la FDEE d'une distribution de **Druyvesteyn** à une distribution **Maxwellienne** [32]. Cette transformation s'explique par l'augmentation du nombre de collisions entre électrons.

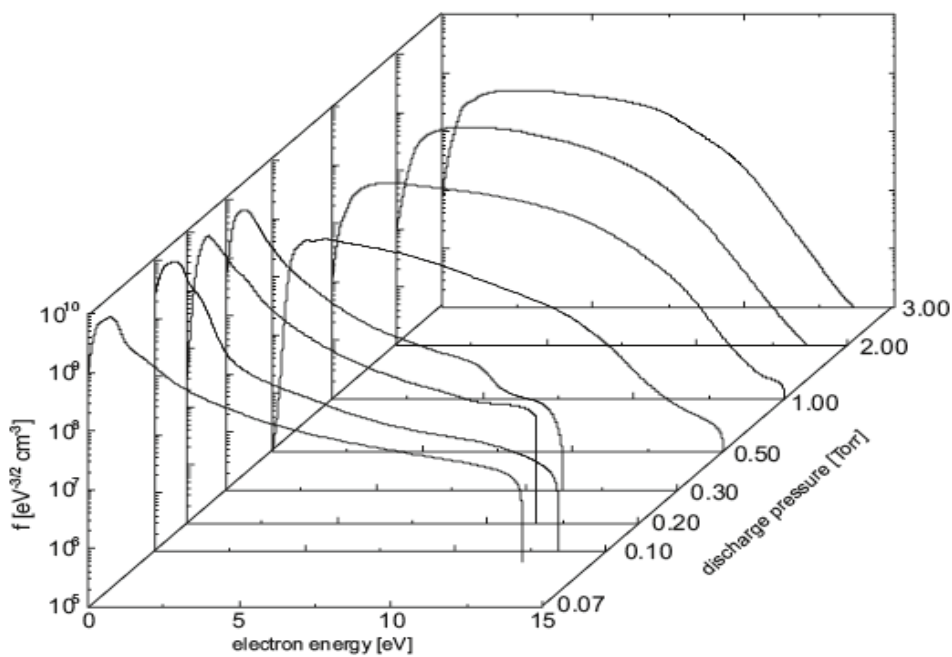


Figure I-12 : Effet de la pression d'un plasma d'argon sur la FDEE [32].

I-6 Coefficients caractéristiques dans les plasmas :

Les champs électrique et magnétique, qu'ils soient statiques, uniformes ou variables dans le temps et dans l'espace, agissent sur le mouvement des particules présentes dans le plasma et modifient les densités de courant et de charge. Nous nous intéressons dans le cadre de ce travail à l'effet d'un champ électrique constant.

I-6-1 Mobilités

Sous l'effet du champ électrique, les charges sont accélérées suivant la deuxième loi de Newton, sur le mouvement des particules, donnée ci dessous :

$$m_e \frac{d\vec{u}_e}{dt} = -e\vec{E} \quad (\text{I-14})$$

$$m_i \frac{d\vec{u}_i}{dt} = +e\vec{E} \quad (\text{I-15})$$

Avec \vec{u}_e et \vec{u}_i les vitesses de dérive correspondant respectivement aux électrons et aux ions.

L'intégration de l'équation (I-14), dans le cas de l'électron par exemple, donne l'expression de sa vitesse de dérive suivante:

$$\vec{u}_e = \frac{-e\vec{E}}{m_e} \tau_e \quad (\text{I-16})$$

Avec τ_e : temps moyen entre deux collisions, soit [4] :

$$\tau_e = \frac{l_e}{\bar{v}_e} \quad (\text{I-17})$$

l_e : libre parcours moyen (puisque la vitesse d'agitation thermique électronique est plus élevée par rapport à la vitesse de dérive électronique ($\bar{v}_e \gg u_e$))

\bar{v}_e : Vitesse d'agitation thermique.

Ce qui permet d'écrire :

$$\vec{u}_e = -\frac{el_e}{m_e \bar{v}_e} \vec{E} = -\mu_e \vec{E} \quad (\text{I-18})$$

Avec :

$$\mu_e = \frac{el_e}{m_e \bar{v}_e} \quad [\text{m}^2/\text{V s}] \quad (\text{I-19})$$

Dans le cas des ions les relations (I.18) et (I.19) s'écrivent:

$$\vec{u}_i = -\frac{el_i}{m_i \bar{v}_i} \vec{E} = \mu_i \vec{E} \quad (\text{I-20})$$

Avec :

$$\mu_i = \frac{el_i}{m_i \bar{v}_i} \quad [\text{m}^2/\text{V s}] \quad (\text{I-21})$$

μ_e et μ_i sont respectivement les mobilités des électrons et des ions.

I-6-2 Coefficient de diffusion

La diffusion des particules est décrite par la loi de Fick [4] :

$$\vec{j}_k = -D_k \overrightarrow{\text{grad}} n_k \quad (\text{I-22})$$

Où : \vec{j}_k est le flux des particules de type k en $[\text{m}^{-2}\text{s}^{-1}]$.

D_k est le coefficient de diffusion des particules de type k.

Ainsi, le déplacement des particules par diffusion crée un flux de charge qui s'exprime, dans le cas des électrons, par :

$$\vec{j}_e = -eD_e \overrightarrow{\text{grad}} n_e \quad (\text{I-23})$$

Et dans le cas des ions, par :

$$\vec{j}_i = -eD_i \overrightarrow{\text{grad}} n_i \quad (\text{I-24})$$

Si l'on considère simplement la théorie cinétique des gaz et que l'on suppose que les températures électronique et celle des espèces lourdes sont identiques [4] :

$$T_e = T_k \Rightarrow D_k = \frac{l_k \vec{V}_k}{3} \quad (\text{I-25})$$

On en déduit donc :

$$\frac{D_e}{D_i} = \frac{l_e \vec{V}_e}{l_i \vec{V}_i} = \frac{l_e}{l_i} \sqrt{\frac{m_i}{m_e}} = \frac{\mu_e}{\mu_i} \quad (\text{I-26})$$

I-7 Classification des plasmas

A partir des paramètres présentés précédemment, il est possible de classer les différents plasmas. Cette classification permet alors de ressortir trois catégories de plasma : les plasmas chauds, les plasmas thermiques et les plasmas non-thermiques.

I-7-1 les plasmas chauds

La température de ce type de plasma est de l'ordre de quelques millions de degrés et correspond généralement aux plasmas stellaires (soleil...). Le taux d'ionisation de ces plasmas est proche de 100%. Nous trouvons ce type de plasma dans le domaine de la fusion thermonucléaire.

I-7-2 les plasmas thermiques

Ces plasmas sont caractérisés par une température égale pour toutes les espèces (électrons, ions, molécules) de quelques milliers de degrés, par une densité énergétique élevée et par un taux d'ionisation inférieur à 100%. Leurs applications sont dans la soudure à arcs électriques, et la production de la matière, etc.

I-7-3 Les plasmas froids

Dans ce type de plasma, la température des ions et des neutres, proche de la température ambiante, est bien inférieure à celle des électrons (10^4 - 10^5 K). De plus, la densité d'énergie et le taux d'ionisation sont plus faibles que dans le cas des plasmas thermiques. Les électrons peu nombreux mais énergétiques permettent donc d'obtenir une chimie très efficace tout en gardant le gaz à température ambiante [33].

Les plasmas froids nécessitent actuellement, l'emploi de technologies de vide contraignantes pour des procédés industriels et présentent les avantages suivants [34] :

- Obtention de propriétés de surfaces très spécifiques conduisant à des applications performantes,
- Modification chimique de surface réalisée sans affecter les propriétés intrinsèques du matériau traité et sans modifier son aspect de surface,
- Choix judicieux des gaz de traitement permettant de conduire, avec une faible quantité de matière première, à une chimie de surface très spécifique sans employer de produits chimiques dangereux, toxiques ou polluants.

Les applications des plasmas sont nombreuses (figure I-13). Elles sont liées généralement à l'effet de la température.

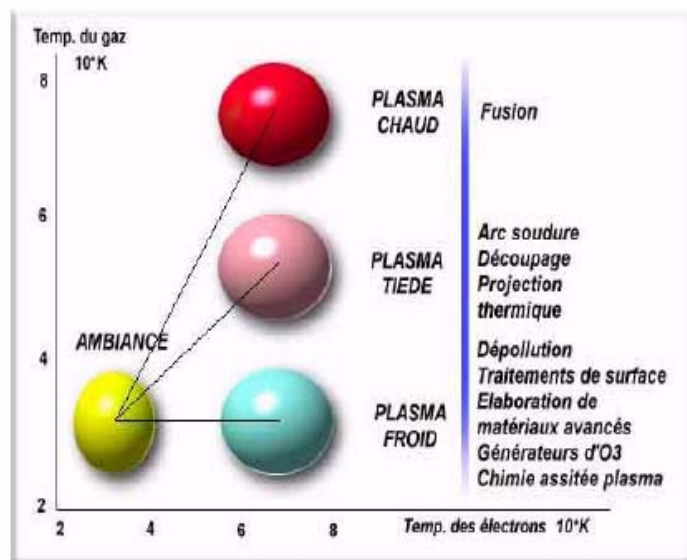


Figure I-13: Domaines d'application des plasmas [10].

Dans le cadre de notre travail, nous nous intéressant à la modélisation de plasmas froids faiblement ionisés.

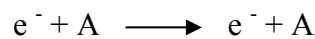
I-8 Collisions dans le plasma

Lorsque deux particules initialement séparées par une distance d s'approchent l'une de l'autre, elles commencent à interagir et si, après cette interaction, quelques changements mesurables se produisent, on dit qu'une collision a eu lieu [4]. C'est de ces collisions que se déroule la formation des espèces réactives de plasma.

Il existe en réalité plusieurs types de collision [35, 36].

I-8-1 Collisions élastiques

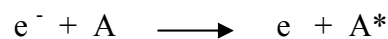
Lors de ces collisions, l'énergie cinétique et la quantité de mouvement sont conservées. Les particules lourdes échangent très facilement leur énergie par collision élastique alors que, lors de la collision d'un électron et d'une particule lourde, la fraction d'énergie est très faible. Un électron devra donc subir des milliers de collisions élastiques pour perdre son énergie.



A: L'atome neutre.

I-8-2 Collisions inélastiques

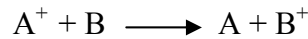
Ce sont des collisions où une partie de l'énergie cinétique E_{cin} est transformée en énergie interne (c'est-à-dire $\Delta E_{cin} < 0$). Il convient cependant que ΔE_{cin} doit être au moins égal à l'énergie interne de l'atome ou de la molécule. Les électrons cèdent une partie de leur énergie cinétique et engendrent des processus d'excitation, de dissociation, d'ionisation et d'attachement. Les collisions inélastiques sont donc la source d'un nombre important de réaction physico-chimique qui vont alors modifier les propriétés macroscopiques de gaz [37].



A^* : L'atome excité.

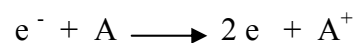
I-8-3 Les collisions avec transfert de charge

Où l'ion A^+ énergétique devient neutre A rapide, et le neutre B, initialement à la température du gaz, devient B^+ :



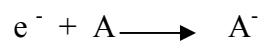
I-8-3-1 L'ionisation

Dans le cas des décharges RF basse pression, l'ionisation du gaz est due au processus d'interaction électron molécule. La collision entre un électron et une molécule donne un électron diffusé, un électron éjecté et un ion positif. Ces deux électrons sont accélérés par le champ électrique et donnent un nouveau processus.



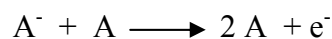
I-8-3-2 L'attachement

L'électron peut être saisi par une molécule pour donner un ion négatif. Ce processus se produit surtout lorsque le gaz est électronégatif.



I-8-3-3 Le détachement électronique

La collision d'un ion négatif avec un neutre donne deux neutres A et un électron émis.



I-8-3-4 La conversion ionique

L'impact d'ion sur une molécule conduit à la dissociation de cette molécule et l'apparition d'un nouveau type d'ion.

Sur le tableau suivant, nous avons regroupé un ensemble de réactions induites par impact électronique dans une collision inélastique [38] :

Processus	Réaction
Ionisation par impact électronique	$e^- + A \rightarrow 2e^- + A^+$
Ionisation dissociative	$e^- + AB \rightarrow 2e^- + A + B^+$
Excitation par impact électronique	$e^- + A \rightarrow e^- + A^*$
Recombinaison radiative	$e^- + A^+ \rightarrow A^* + h\nu$
Recombinaison à trois corps	$e^- + A^+ + B \rightarrow B + A^*$
Attachement à trois corps	$e^- + A + B \rightarrow A + B^-$
Détachement par impact électronique	$e^- + A^- \rightarrow 2e^- + A$
Dissociation par impact électronique	$e^- + AB \rightarrow e^- + A + B$

Tableau I-1 : Ensemble de réactions induites par impact électronique.

Où A et B sont des espèces chimiques (particules neutres, atomes, molécules...).

I-9 Vitesse thermique

Dans les plasmas, les collisions rencontrées le plus fréquemment sont binaires, c'est-à-dire entre deux particules, et peuvent être élastiques ou inélastiques. Les collisions élastiques induisent une composante aléatoire dans le mouvement des particules, suite au transfert d'énergie cinétique, caractérisé par une vitesse aléatoire gardant une valeur constante entre les collisions, appelée vitesse thermique et définie, en fonction de la température (T), par la relation :

$$v_{th} = \sqrt{8k_B T / \pi m} \quad (I-27)$$

I-10 Sections efficaces de collision

Les collisions électron- molécule conduisent généralement à l'ionisation et à la formation de produits plus ou moins excités (électroniquement, vibrationnellement, rotationnellement...) dont on cherche à déterminer la nature et le taux de formation en fonction de l'énergie électronique. Pour cela, on ne va pas nécessairement générer un plasma, mais simplement bombarder le gaz à étudier avec des électrons issus d'une source dont on peut contrôler l'énergie. Le taux de formation des espèces excitées peut être alors déterminé en étudiant les variations de leur spectre d'émission ou de masse.

En balayant toute la gamme d'énergie des électrons (de 0 à quelques centaines d'ev), on peut alors déterminer le seuil énergétique des diverses excitations, ionisations, dissociations...

On traduit généralement les diverses probabilités de ces processus (qui sont donc fonction de l'énergie) en terme de sections efficaces d'excitation, ionisation... [12].

Dans ce paragraphe, nous allons seulement considérer les processus les plus probables dans une décharge luminescente, à but analytique, créée dans un plasma d'argon.

La figure I-14 suivante, représente la variation, avec l'énergie de la particule incidente, de la section efficace des principales interactions qui sont:

- 1) la collision élastique électronique,
- 2) l'ionisation par impact électronique des atomes d'argon de niveau fondamental,
- 3) l'excitation par impact électronique des atomes d'argon de niveau fondamental,
- 4) l'excitation par impact électronique des atomes d'argon du niveau fondamental vers des niveaux métastables,

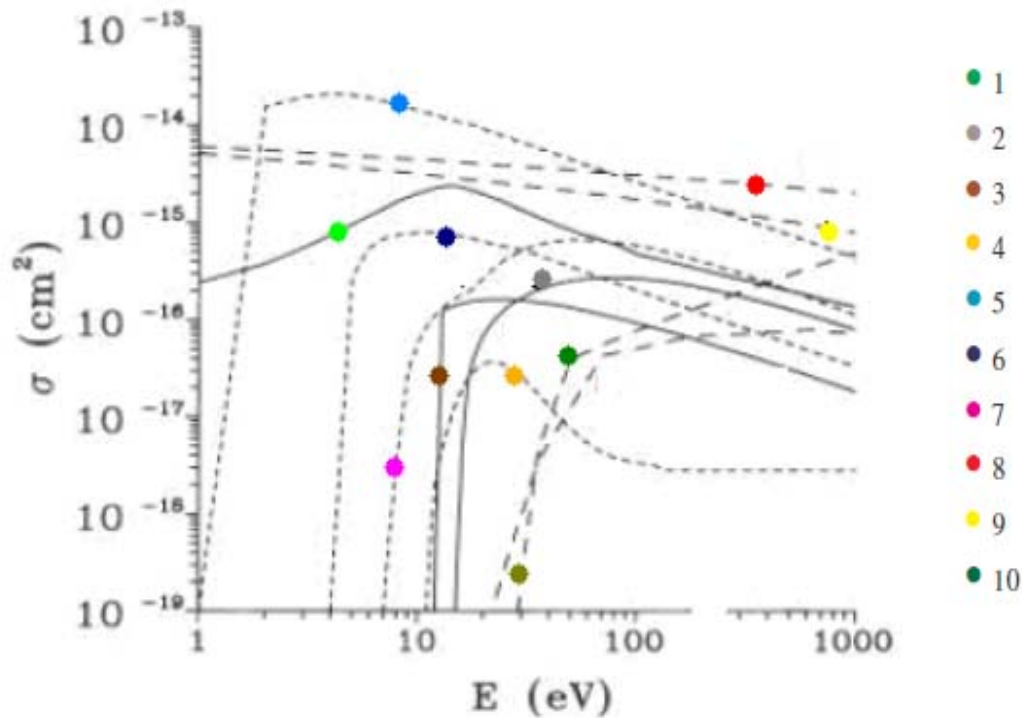


Figure I-14 : Exemple de jeu de sections efficaces de collisions (électrons, ions, atomes) en fonction de l'énergie de la particule incidente [39].

- 5) l'excitation par impact électronique à partir des niveaux métastables d'argon,
- 6) l'ionisation par impact électronique à partir des niveaux métastables d'argon,
- 7) l'ionisation par impact électronique des atomes de cuivre de niveau fondamental,
- 8) le transfert de charge symétrique des ions d'argon,
- 9) la collision élastique entre atomes et ions d'argon,
- 10) l'ionisation par impact d'ions et d'atomes d'argon, et excitation par impact d'atomes d'argon sur les niveaux métastables,
- 11) l'excitation par impact d'ions d'argon sur les niveaux métastables.

I-11 Décharge à courant continue et interaction avec la surface (émission secondaire)

Considérons deux plaques séparées par une distance d , avec une différence de potentiel V_0 et une pression du gaz P entre les deux plaques. A cause du champ électrique entre les deux plaques, les électrons émis par la cathode seront accélérés vers l'anode, créant des paires d'électron-ion par collision avec les atomes neutres. Les ions générés de cette façon et accélérés par le champ vont bombarder la cathode et provoquent l'émission de nouveaux électrons. Le rendement d'émission par bombardement ionique est appelé le coefficient d'émission secondaire γ (le nombre des électrons émis par ion incident sur la surface), qui dépend du matériau de la cathode. C'est une importante source d'énergie pour l'émission des électrons à partir de la surface aux limites du plasma [21].

Lorsque le degré d'ionisation, par le procédé d'émission secondaire, est assez grand, entre les deux électrodes, un plasma se forme. Cependant, pour que le plasma soit entretenu, la formation des paires électron-ion doit être suffisante pour compléter la perte des particules chargées sur les électrodes et les parois du réacteur (dans la direction à l'axe anode- cathode).

A basse pression, le procédé d'ionisation devient inefficace, car la probabilité de collision entre l'électron et l'atome neutre est faible. Alors qu'à des pressions trop élevées, les collisions élastiques empêchent les électrons d'atteindre l'énergie qui leur est nécessaire pour ioniser l'atome. La collision ion- atome neutre augmente la perte des ions vers les parois. D'où pour une distance d fixe, il existe une pression optimale pour l'amorçage du plasma.

La relation théorique de l'apparition de l'arc électrique est décrite par la **courbe de Paschen**, illustrée sur la figure I-15, pour laquelle le terme prépondérant est le produit pression-distance ($P \cdot d$). Cette figure indique qu'il existe toujours une tension électrique minimale pour une certaine distance entre les électrodes à une pression donnée, permettant au courant électrique de décharger dans le gaz. Cette valeur est appelée le **minimum de Paschen**.

Les courbes de la figure 1-14 se calculent à partir des relations [19]:

$$V_{\text{claquage}} = \frac{Bpd}{C + \ln(pd)} \quad (\text{I-28})$$

$$C = \ln \left(\frac{A}{\ln \left(1 + \frac{1}{\gamma} \right)} \right) \quad (\text{I-29})$$

A et B sont des constantes mesurées expérimentalement. Dans le cas d'un plasma d'argon A vaut $14 \text{ Torr}^{-1} \cdot \text{cm}^{-1}$ et B $180 \text{ V} \cdot \text{Torr}^{-1} \cdot \text{cm}^{-1}$ [40]. γ est le second coefficient de Townsend, qui dépend de la nature des électrodes.

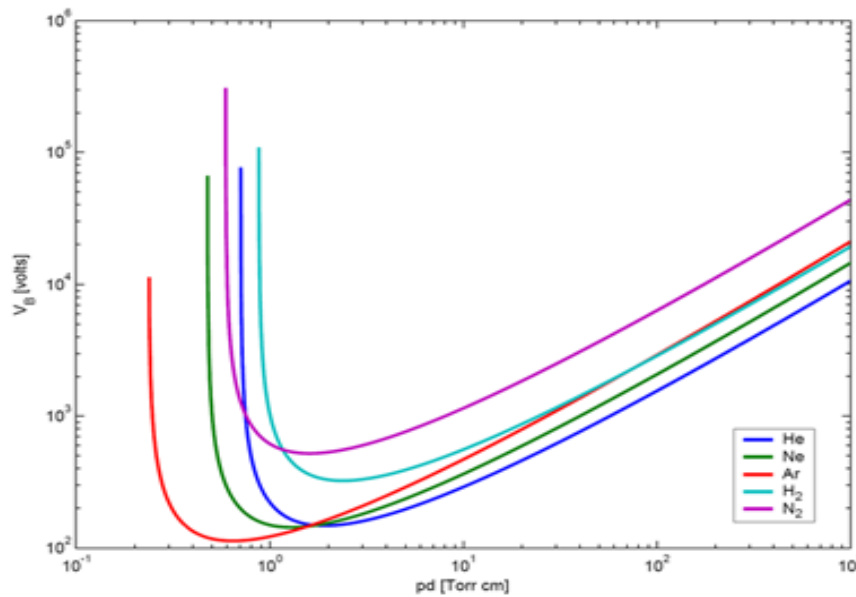


Figure I-15: Courbes de Paschen obtenues pour l'hélium, le néon, l'argon, l'hydrogène et l'azote [41].

La tension de claquage est donc fonction du produit ($P \cdot d$). Aux basses pressions, les collisions entre les électrons et les ions sont très peu fréquentes et l'ionisation s'en trouve pénalisée. Aux hautes pressions, les collisions sont si fréquentes que les électrons disposent d'un temps très court pour emmagasiner l'énergie nécessaire à l'ionisation des neutres. Dans les deux cas, la décharge ne pourra s'établir que si l'on fournit au système une tension suffisamment élevée. Entre les deux se situe un point optimal pour lequel la tension à appliquer est minimale.

Les décharges électriques fonctionnant selon un mécanisme de Townsend présentent la création de régions de charges d'espace importantes. Ces charges d'espace sont dues à la différence de mobilité entre les électrons et les ions où les électrons plus rapides, laissent derrière eux les ions plus lourds. Ainsi, dans ces zones c'est le fort champ de charge d'espace qui gouverne la décharge et non le champ extérieur.

I-12 Plasmas de dépôts

Le dépôt chimique en phase vapeur assisté par plasma (Plasma-Enhanced Chemical Vapor Deposition **PECVD**) est un procédé utilisé pour déposer des couches minces sur un substrat à partir d'un état gazeux (vapeur) [42]. La couche mince va donc « croître » en épaisseur à partir de zéro. En pratique, on distingue deux grandes familles de méthodes [43] :

- Celles qui font appel à un gaz porteur tel l'argon pour déplacer le matériau à déposer d'un récipient au substrat et qui s'apparentent aux techniques de diffusion utilisées dans la fabrication des composants actifs.
- Celles qui impliquent un environnement à pression très réduite et dans lesquelles le matériau à déposer sera véhiculé grâce à une impulsion initiale de nature thermique ou mécanique.

A des basses pressions, les plasmas peuvent être aussi utilisés pour traiter les matériaux. Le principe consiste à placer les matériaux à traiter dans une chambre sous vide, dans laquelle on injecte un gaz de procédé comme l'argon ou l'oxygène, par exemple, à une pression comprise entre $7.5 \cdot 10^{-3}$ et $7.5 \cdot 10^{-1}$ Torr, le gaz se décompose partiellement : c'est l'état plasma [44]. Les décharges basse pression permettent d'obtenir des espèces chimiques actives à des températures considérées, d'où la possibilité d'obtenir un plasma dont la température électronique est très supérieure à la température ionique. La simulation numérique de ces décharges est un moyen

puissant d'investigation des phénomènes physiques, parallèle et complémentaire aux approches théoriques et expérimentales. Ce type de plasma est généralement créé à partir d'un gaz par une décharge électrique pouvant être générée à partir de sources radio-fréquences (13,56 MHz), micro-ondes (2,45 GHz) ou par une décharge électrique continue entre deux électrodes. Comme nous nous intéressons à l'évolution du gaz dans la décharge, nous considérons dans cette étude une simple décharge en courant continu (DC) créée sous une pression de quelques Torr dans de l'argon entre deux électrodes pour simplifier les calculs.

I-13 Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons présenté un rappel sur la définition et les propriétés électriques d'un plasma, les conditions de création d'une décharge et les différents types de décharge. Nous avons décrit aussi les différentes régions créées dans l'espace inter électrodes dans le cas d'une décharge continue luminescente. Enfin, nous avons abordé les différentes collisions mises en jeu dans une décharge et donné, ainsi, un tableau récapitulatif des réactions chimiques qui sont à l'origine de la production des diverses particules, chargées et neutres, stables et excitées, qui constituent le plasma.

Références bibliographiques du chapitre I

- [1] L. Tonks, I. Langmuir, « *Oscillations in Ionized Gases* », Physical Review, Vol 33, (1929).
- [2] Technique de l'ingénieur « *Plasmas froids de décharge* »- D2 830 (1-21)
- [3] Radhia ABD JELIL, « *Modélisation de la relation entre les paramètres du procédé plasma et les caractéristique de la qualité du matériau textile par apprentissage de données physiques* », thèse doctorat de l'université de LILLE 1, (2010).
- [4] P. FAUCHAIS « *Gaz ioniser et plasmas* » vol. AF 3560 p (1-2), publié dans technique de l'ingénieur en (1980).
- [5] M.A. Lieberman and A. J. Lichtenberg « *Principles of Plasma Discharge and Materials Processing*» Second Edition, Printed in the U.S.A, ISBN 0-471-72001-1 (2005).
- [6] CHRISTIAN SARRA-BOURNET, « *Design Et Réalisation D'un Réacteur Plasma à Pression Atmosphérique Pour Des Traitements De Surfaces Dans Le Domaine Des Biomatériaux*», Mémoire présenté pour l'obtention du grade de maître ès sciences (M.Sc.), Université Laval QUÉBEC (2007)
- [7] J-L. DELACROIX, « *physique des plasmas* », Inter Edition, ETCNRS Edition p 5, (1994).
- [8] L. Rezeau et G. Belmont « *Quelques propriétés des plasmas* », Université de Pierre et Marie Curie, (2007).
- [9] Maxime Mikikian « *Piégeage de poussières dans la gaine d'un plasma de décharge continue* », thèse doctorat de l'université de Provence, (1999).
- [10] « *Applications innovantes des plasmas hors équilibres* », Ecrin, Paris, ISBN : 2-912154-11-1, 31-03-2004.
- [11] Fridman, Alexander, A. Kennedy and A. Lawrence « *Plasma Physics and Engineering*», ebook ISBN13: 9780203334874, (2004).
- [12] Laurent THERESE « *Plasmas Radiofrequence Pour L'analyse Des Materiaux. Etudes Experimentale, Analytique Et Numerique.* » Thèse, l'université Toulouse III, (2005).

- [13] C. Tendero « *Torche plasma micro-onde à la pression atmosphérique application au traitement de surface métallique* » Thèse : Chimie Physique : Univ de Limoges, France ; (2005).
- [14] P.Guay et L. Frederic « *Bruleur de CO par méthode plasma* ». Université de Québec : Institut National de Recherche Scientifique : Energie et Matériaux [en ligne], (2001).
[http:// www.nanotechnologies.qc.ca/propos/liens/articles/bruleur_plasma.pdf](http://www.nanotechnologies.qc.ca/propos/liens/articles/bruleur_plasma.pdf).
- [15] P. SEIMANDI « *Modélisation mathématique et numérique de décharges couronnes pour le contrôle d'écoulements* », Thèse doctorat de l'université de Toulouse, (2010).
- [16] P. Fauchais, « *Understanding plasma spraying* », *Journal of Physics D (Applied Physics)*, 37, 86, (2004).
- [17] E. Pfender, « *Thermal plasma technology: Where do we stand and where are we going* », *Plasma Chem. Plasma Proc.*, 19: 1-31, (1999).
- [18] M. I. Boulos. « *New Frontiers In Thermal Plasmas From Space To Nanomaterials* » nuclear engineering and technology, vol.44 no.1 february 2012
- [19] A. Bogaerts, E. Neyts, R. Gijbels, J. V. Mullen « *Gas discharge plasmas and their applications* », ELSEVIER, *Spectrochimica Acta Part B* 57, 609–658, (2002).
- [20] Jean-Luc Raimbault, « *Introduction à la Physique des Plasmas* », Master 1 Physique Appliquée et Mécanique, Université Paris-Sud 11, 2010-2011.
- [21] N.St.J. Braithwaite « *Introduction to gas discharges* », *Plasma Sources Sci. Tech.*, vol. 9, pp. 517-527, (2000).
- [22] A. Schutze, J. Y. Jeong, S. E. Babayan, J. Park, G. S. Selwyn, R. F. Hicks, « *The Atmospheric-Pressure Plasma Jet: A Review and Comparison to Other Plasma Sources* », *IEEE Trans. Plasma Sci*, 26, 1685, 1998.
- [23] A. Lieberman, and A. Lichtenberg, « *Principles of plasma Discharge and Materials Processing* », New York: John Wiley & Sons. 600, (1994).

- [24] J.L.Delcroix, A.Bers « *Physique des plasmas* », volume I et II, publié dans Inter Editions/CNRS Editions, (1994).
- [25] D. BENYOUCEF « *Modélisation Particulaire Et Multidimensionnelle Des Décharges Hors Equilibre A Basse Pression Excitées Par Champs Electromagnétiques* » thèse. Université de Toulouse III – Paul Sabatier, mai (2011).
- [26] R. N. Franklin « *Ambipolar diffusion is a misnomer* », *J. Phys. D: Appl. Phys.* **36** 828-831, (2003)
- [27] E. Bouvier, « *Etude de la nature de couches barrières à l'oxygène réalisées par plasma basse fréquence en fonction des conditions d'élaboration* », Thèse de Doctorat de l'université P. Sabatier, Toulouse N° d'ordre 3457, (1999).
- [28] G. D. Severn, « *A note on the plasma sheath and the Bohm criterion* » Department of Physics, University of San Diego, San Diego, California 92110.
- [29] Francis F. Chen, Jane P. Chang, « *principles of plasma processing* », Course Notes , Los Angeles, (2002).
- [30] R.S. Sigmond, M. Goldman, " *Electrical Breakdown and Discharges in Gases* », Part.B, NATO-ASI Series, B89b, *Plenum Press* (1983).
- [31] Christian Sarra-Bournet, « *Design et réalisation d'un réacteur plasma à pression atmosphérique* », thèse doctorat université LAVAL 2007
- [32] Gerhard Franz, « *Low Pressure Plasmas and Microstructuring Technology* », ISBN 978-3-540-85848-5, Springer Dordrecht Heidelberg London New York , (2009).
- [33] O. Guitella « *nature de la synergie plasma-potocatalyseur pour la destruction d'un composé organique volatil type : l'acétylène* », thèse physique école polytechnique, France, (2006).
- [34] Coating Plasma Industrie « *traitement de surface par plasma froids* » www.cpi-plasma.com

- [35] J.C.Mateo- Velez « *Modélisation et simulation numérique de la génération de plasma dans les décharges couronnes et son interaction avec l'aérodynamique* » Thèse : Dynamique des fluides, Ecole Nationale Supérieure de l'Aéronautique et l'Espace, France, (2006).
- [36] M. Redolfi « *Etude de l'oxydation de différents types d'hydrocarbures par des procédés utilisant des technique de décharges électrique non-thermique à pression atmosphérique, application à la problématique du démarrage à froid.* » Thèse, génie des procédés, Université paris XIII, France, (2007).
- [37] A. Labergue « *Etude de décharge électrique dans l'air pour le développent d'actionneurs plasmas- application au contrôle de décollements et d'écoulements* », Thèse, Génie Electrique, université de Poitiers, France, (2005).
- [38] A. BOGAERTS « *Mathematical modeling of a direct current glow discharge in argon*», Universiteit Antwerpen (1996).
- [39] A. Bogaerts and R. Gijbels, « *Hybrid Monte Carlo—fluid modeling network for an argony hydrogen direct current glow discharge*», Spectrochimica Acta Part B 57 1071–1099, (2002).
- [40] http://fr.wikipedia.org/wiki/Loi_de_Paschen
- [41] Alain Phommahaxay, « *Contribution à l'étude de micro-dispositifs de protection des circuits radiorécepteurs aux impulsions hyperfréquences de puissance associant microtechnologies et phénomènes d'émission électronique* », Docteur de l'Université de Marne-La-Vallée, 2007
- [42] http://fr.wikipedia.org/wiki/D%C3%A9p%C3%B4t_chimique_en_phase_vapeur_assist%C3%A9_par_plasma
- [43] M.-A. Pinault, « *Techniques de dépôt* », Cour Master MATEC – CEDER, (2006).
- [44] <http://isytech-plasma.com/-Le-plasma-?lang=fr>

Chapitre II

Modèle Proposé et Systèmes d'Equations

II-I Introduction

La modélisation du réacteur plasma et l'analyse numérique des résultats obtenus nous permettent d'avoir une idée précise sur l'effet des paramètres opératoires tels que la géométrie des électrodes, la nature du champ électrique appliqué, la composition et la pression du gaz...

En effet, par la simulation on obtient des réponses rapides concernant les effets de tous ces différents paramètres opératoires (la pression, l'espaces inter-électrodes, le débit de gaz, etc.) sur la performance générale du système. Pour un réacteur donné, les modèles les plus précis de la décharge doivent être utilisés pour étudier le transport des particules chargées, les épaisseurs des gaines, la distribution spatiale des espèces chargées, la distribution spatiale de l'énergie des électrons et la dynamique de la gaine, etc.

Un grand nombre de modèles simplifiés par des hypothèses d'approximations existent comme le model (1D) qui permet d'évaluer les caractéristiques fondamentales du plasma (densité d'électrons, température, etc.) avec des temps de calcul raisonnables contrairement à ce qui existe réellement (modèles 2D ou 3D) en raison de la complexité des systèmes et limitations de la capacité des ordinateurs.

De tels modèles peuvent être utilisés dans une première approche pour sélectionner certaines réactions et les données de base associées mais ne peuvent pas être utilisés comme outil prédictif. Le développement d'un modèle de décharge plus rigoureux et réaliste doit tenir compte du fort couplage qui existe entre le champ électrique appliqué et le transport des particules.

La modélisation numérique permet notamment un traitement plus rigoureux de l'équation de Boltzmann qui décrit le transport des particules dans la décharge. Nous allons maintenant examiner en détail les différents types de modèles numériques.

II-2 Les modèles numériques de décharge

Il existe de nombreux modèles mathématiques adaptés aux différents types de plasmas. Ils font tous appel à un couplage entre les équations d'évolution des particules et du champ électrique. Le grand nombre d'équations et de degrés de liberté (3 d'espace, 3 de vitesse, plus le temps) classe les problèmes de la physique des plasmas parmi les plus difficiles à résoudre numériquement.

De façon générale, ils permettent la détermination:

- Des paramètres électriques de la décharge, c'est-à-dire les variations spatio-temporelles du champ électrique et du potentiel.
- Des profils de densités des espèces chargées ou des neutres et les distributions spatio-temporelles des énergies et des fonctions de distribution.
- La position et la vitesse des particules.

Le mouvement des particules est décrit dans le cas général, par l'équation de Boltzmann [1, 2]:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + v \frac{\partial f}{\partial r} + \gamma \frac{\partial f}{\partial v} = \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_c \quad (\text{II.1})$$

(a) (b) (c) (d)

Ou :

v : Champ de vitesses des particules.

r : Position.

γ : Champ des accélérations des particules (forces extérieures)

$f(r, v, t)$: fonction de distribution des vitesses des particules

Cette équation exprime le fait que la fonction de distribution évolue temporellement (a) en raison du mouvement des particules (b), des variations de vitesse des particules sous l'effet de forces extérieures comme le champ électrique (c), et des différentes collisions entre les particules du plasma (d).

II-2-1 Modèles non auto-cohérents

Les modèles non auto-cohérents, dans lesquels on estime indépendamment (modèle ou mesure expérimentales) les variations spatio-temporelles du champ électrique, sont bien entendu beaucoup moins rigoureux, mais sont plus simples et donc plus rapides.

II-2-2 Modèles auto-cohérents

Dans le cas de modèles dits « **auto-cohérents** », l'équation de Poisson, qui détermine le champ électrique, doit être couplée à l'équation de Boltzmann.

En effet, les différentes fonctions de distribution des espèces chargées dépendent de la valeur du champ électrique qui dépend lui-même des densités et de l'énergie des espèces chargés.

Dans la pratique, la résolution de l'équation de Boltzmann est extrêmement délicate et son couplage avec l'équation de Poisson ne fait que compliquer le problème. Pour cette raison, plusieurs types de modèles auto-cohérent, correspondant à différents niveaux d'approximation, ont été développés. Selon l'approche utilisée pour simuler les plasmas de décharges, on peut distinguer trois catégories de modèles [3-5] :

- Modèle Particulaire.
- Modèle Fluide.
- Modèle hybride.

II-2-2-1 Modèles Particulaire (microscopiques)

La méthode **PIC-MCC** (**P**article-**I**n-**C**ell **M**onte-**C**arlo **C**ollision) est un outil très performant et efficace pour l'étude des plasmas froids car il permet de décrire l'évolution dans le temps et dans l'espace, des particules chargées sous l'effet des champs et des collisions. Dans un cas purement électrostatique, la méthode consiste à suivre les trajectoires d'un nombre

représentatif de particules chargées, des électrons et des ions, dans l'espace des phases, et de décrire l'interaction collective de ces particules par la résolution de l'équation de Poisson.

La détermination des trajectoires des particules dans l'espace sous l'effet du champ électrique, tenant en compte tous les types de collision existants et pour un nombre de particules important devient relativement difficile, du fait que la méthode PIC-MC demande un traitement individuel de chaque particule. Le coût des simulations pour ce type de méthode est très élevé en termes de ressources (CPU et mémoire) [3, 6].

La simulation des trajectoires par la méthode PIC est relativement facile car on considère un nombre fini de particules dans un plasma non collisionnel. La détermination des valeurs du champ dans un réseau nous a permis de calculer les vitesses des particules. Par contre dans un plasma collisionnel, le traitement de collisions est nécessaire.

II-2-2-2 Modèle Fluide

Un modèle de décharge, où le transport de particules chargées est décrit à l'aide des valeurs moyennes pour certains paramètres de plasma est appelé un modèle fluide.

En principe, la cinétique des électrons et des ions dans un gaz faiblement ionisé peut être décrite en utilisant les équations de Boltzmann correspondantes. L'équation de Boltzmann est une équation de continuité dans l'espace de phase (r, v) , qui détermine la fonction de distribution des particules $f(r, v, t)$, à chaque position (r, v) et le temps t , sous l'effet de forces externes et les processus de collision avec les molécules de gaz.

Mais, on peut aussi caractériser le plasma de décharge directement à partir des grandeurs moyennes: densité, vitesse moyenne, énergie moyenne, etc. Dans ce cas l'équation de Boltzmann est remplacée par ses moments qui correspondent à une série, en théorie illimitée, d'équations hydrodynamiques [7]. La base des modèles fluides nécessite deux hypothèses principales pour limiter le nombre d'équations et fermer le système d'équations obtenues. La première hypothèse concerne l'ordre physique pour limiter le nombre d'équations hydrodynamiques générées par l'équation de Boltzmann. On peut aller par exemple jusqu'au deuxième moment de l'équation de Boltzmann (ordre 1) ou jusqu'au troisième moment (ordre 2). A l'ordre 1, on considère l'équation de conservation de la densité et de la quantité du mouvement tandis qu'à l'ordre 2, on ajoute l'équation de conservation de la densité d'énergie. Comme le système d'équation ainsi

obtenu est ouvert, c'est-à-dire avec plus d'inconnues que d'équations, la seconde hypothèse concerne la condition de fermeture du système ce qui exige des hypothèses supplémentaires. A l'ordre 1, le système est fermé en adoptant l'hypothèse du champ local où les paramètres de transport et de réaction sont supposés dépendre directement du champ électrique régnant localement à un instant donné dans la décharge électrique. A l'ordre 2, le système est fermé en utilisant l'hypothèse de l'énergie locale où les paramètres de transport et de réaction sont supposés dépendre directement de l'énergie moyenne des particules chargées.

a-Approximation du champ local (ACL)

Dans l'approximation du champ local (ACL), les coefficients de transport des électrons et les taux des réactions sont à la fois fonctions du champ réduit $E(r, t) / p$; où $E(r, t)$ est le champ électrique au point r et à l'instant t et p est la pression du gaz. Autrement dit; la fonction de distribution de l'énergie des électrons (FDE) au point (r, t) est considérée la même que pour un champ réduit uniforme. Cette hypothèse de l'équilibre au champ local signifie que l'énergie gagnée par les électrons en présence du champ électrique au point (r, t) est localement compensée par la perte d'énergie due aux collisions.

b- Approximation de l'énergie locale (AEL)

Dans l'Approximation de l'énergie locale (AEL), les coefficients de transport des électrons et les taux des réactions sont fonction de l'énergie moyenne des électrons calculée par l'équation de continuité de l'énergie dans le modèle fluide.

Suite à l'évolution dans le domaine de modélisation des plasmas, un accord général a fait que les modèles fluides comprennent l'équation de continuité, l'équation de transport d'énergie moyenne des électrons et l'équation de Poisson. Pour une résolution du problème à une dimension 1D [8] ou deux dimension 2D [9].

Souvent, les équations de transport dans les modèles fluides sont encore simplifiées en adoptant l'approximation de drift diffusion, (ADD), qui décrit les flux de particules chargées comme la somme d'une dérive plus un terme de diffusion, en ignorant tous les autres termes [10].

Cependant, les modèles fluides ne peuvent pas prendre en considération les fonctions de distribution des espèces (par exemple, la distribution d'énergie des ions), mais seulement des moyennes sur les distributions. Cet inconvénient est souvent compensé par des codes hybrides.

Pour valider les modèles fluides, les résultats de simulations obtenus doivent être confrontés avec les données expérimentales et les résultats de modèles particuliers correspondants [11]. L'avantage exceptionnel des modèles fluides, qui jusqu'à présent ne peuvent pas être remis en cause par des modèles statistiques en dimensions équivalentes, c'est leur convergence rapide.

II-2-2-3 Modèle hybride

Le terme « hybride » est utilisé pour désigner soit des simulations qui tiennent compte de deux groupes d'électrons [12, 13], ou des codes complexes pour la modélisation des décharges plasmas [14, 15].

Le modèle hybride est utilisé pour désigner une simulation en considérant deux ensembles d'électrons. Ces deux groupes de populations électroniques sont relativement indépendants. Le premier inclut la majorité des électrons à faible énergie. Le deuxième groupe est composé par les électrons énergétiques accélérés en présence du champ électrique. Afin d'optimiser le temps de calcul les électrons du premier groupe sont traités à l'aide du modèle fluide. Par contre, les électrons rapides sont traités en adoptant une méthode de type Monte Carlo (MC).

Le but du modèle hybride est de combiner les avantages des modèles microscopique et fluide en traitant par exemple certaines régions de la décharge (chute cathodique) par un modèles particulière et d'autres régions (leur négative ou il y a beaucoup plus de collisions) par un modèle fluide. Les modèles hybrides les plus répandus sont ceux où l'on associe un code Monte Carlo à un modèle de type fluide [16].

Il est également possible de développer des codes numériques hybrides en combinant différents modules de calcul décrivant les différents processus survenus dans la phase gazeuse ou des interactions gaz-surface [17].

II-3 modèle proposé et système d'équations

Dans notre travail, le milieu est supposé continu ce qui signifie que les propriétés des particules chargées présentes dans le plasma (densités, vitesses, énergies) sont décrites par des grandeurs moyennes, c'est-à-dire comme étant un ensemble continu, et non par leurs fonctions de distribution. On ne résout pas l'équation de Boltzmann, mais on considère ses trois premiers moments, qui représentent respectivement les équations de conservation de la densité, du transfert de la quantité de mouvement et de l'énergie. Les équations obtenues sont couplées à l'équation de Poisson. Les hypothèses qui peuvent être faites sont [7, 8, 18] :

- La représentation dérive-diffusion du flux de particules chargées : le flux d'une particule chargée est représenté par la somme d'un terme de dérive et d'un terme de diffusion. Cette représentation simplifie les équations, mais introduit deux nouvelles inconnues : la mobilité et le coefficient de diffusion de la particule.
- L'approximation de l'énergie moyenne : la fonction de distribution ne dépend que la densité de l'espèce et de son énergie moyenne.

II-3-1 Equations de transport pour les électrons

C'est l'équation de conservation de la quantité de charge qui représente le premier moment de l'équation de Boltzmann et qui est obtenue par son intégration dans l'espace des vitesses:

$$\frac{\partial n_e}{\partial t} + \frac{\partial n_e V_e}{\partial r} = S_e \quad (\text{II.2})$$

Avec n_e la densité électronique, V_e la vitesse moyenne des électrons, t le temps et r la position. S_e est le terme source qui décrit la variation de la fonction de distribution sous l'effet des collisions. Il représente le bilan des réactions où il y a création ou pertes d'électrons par collisions inélastiques.

- ❖ Dans le cas général, pour l'électron, le terme source peut être écrit de la façon suivante [4, 19].

$$S_e = (\nu_i - \nu_a) n_e + \nu_{\text{detach}} n_n - r_e n_e n_p \quad (\text{II.3})$$

Où : ν_i est la fréquence moyenne d'ionisation,

ν_a est la fréquence moyenne d'attachement,

ν_{detach} est la fréquence moyenne de détachement,

r_e est le coefficient de recombinaison,

et n_n est la densité des ions négatifs.

- ❖ Et, dans le cas d'un simple gaz supposé électropositif, pas de processus d'attachement, le terme S_e peut être représenté par :

$$S_e = n_e \nu_i - r_e n_e n_p \quad (\text{II.4})$$

- ❖ Dans le cas général, pour une particule p, le terme source de son équation de continuité s'exprime par [20] :

$$S_p = \sum_r N_{pr} R_r \quad (\text{II.5})$$

Où : N_{pr} est le nombre de particules de l'espèce p créées dans la réaction r. Il peut être négatif (disparition de la particule p) ou positif (création de la particule p)

R_r est le taux de réaction. Il est proportionnel à la densité des particules qui interviennent dans la réaction, par exemple, pour une réaction:

➤ où interviennent deux particules de densités respectives n_{1r} et n_{2r} on a :

$$R_r = k_r n_{1r} n_{2r} \quad (\text{II.6})$$

➤ à trois particules de densités respectives n_{1r} , n_{2r} et n_{3r} on a :

$$R_r = k_r n_{1r} n_{2r} n_{3r} \quad (\text{II.7})$$

k_r étant le coefficient du taux de réaction.

II-3-2 Equation de transport pour les Ions

Les ions ne peuvent pas répondre aux oscillations rapides du champ électrique en raison de leur forte inertie, et donc ils reçoivent très peu d'énergie du champ électrique. Par ailleurs, le transfert d'énergie entre les électrons et les ions (avec de très différentes masses), est tout à fait inefficace. Ces faits justifient que l'énergie ionique moyenne est beaucoup plus faible que l'énergie moyenne des électrons, qui est similaire à l'énergie thermique des neutres. Ainsi, le modèle fluide décrit le transport des ions en ne considérant que les deux premiers moments de l'équation de Boltzmann, ce qui correspond à la continuité et aux équations de transport d'ions. Ces équations sont écrites comme suit :

$$\frac{\partial n_i}{\partial t} + \frac{\partial n_i V_i}{\partial r} = S_i \quad (\text{II.8})$$

Avec n_i la densité des ions, V_i la vitesse moyenne ionique et S_i le terme source.

Le terme source S_i dans l'équation ci-dessus est déterminé par la composition chimique du plasma à l'aide des coefficients de taux de réaction. Pour les décharges DC, il est préférable d'utiliser des coefficients de Townsend au lieu des coefficients de taux réaction. Les coefficients de Townsend fournissent une meilleure description de ce qui se passe dans la région cathodique [21].

Les flux des particules chargées sont :

$$\text{Pour } \alpha = e, i \quad \left\{ \begin{array}{l} \Gamma_e = n_e V_e = -n_e \mu_e E - D_e \frac{\partial n_e}{\partial r} \\ \Gamma_i = n_i V_i = n_i \mu_i E - D_i \frac{\partial n_i}{\partial r} \end{array} \right. \quad (\text{II.9})$$

Ou E, D, μ sont respectivement le champ électrique, les coefficients de diffusions des porteurs de charge (électron, ion) et leur mobilités.

II-3-3 L'équation d'énergie pour les électrons

Pour améliorer la représentation des processus d'ionisation, un troisième moment de l'équation de Boltzmann, qui correspondant à l'équation de transport de l'énergie pour les électrons, peut être ajouté au système. Cette équation est donnée par :

$$\frac{\partial n_\varepsilon}{\partial t} + \nabla [n_\varepsilon \cdot (\mu_\varepsilon \cdot E) - D_\varepsilon \cdot \nabla n_\varepsilon] + \Gamma_\varepsilon \cdot E = S_\varepsilon \quad (\text{II.10})$$

Avec n_ε la densité d'énergie des électrons. D_ε , μ_ε , sont respectivement les coefficients de diffusion et de mobilité de l'énergie et S_ε est la somme des pertes d'énergie des électrons par collision.

Dans les décharges lumineuses, la charge d'espace due à la présence d'ions et d'électrons est suffisante pour modifier le champ électrique dans la décharge. Ce phénomène doit être décrit en couplant les équations de transport électronique et ionique avec l'équation de Poisson pour le champ électrique.

L'équation de Poisson s'écrit :

$$\varepsilon_0 \nabla^2 V = -e(n_i - n_e) \quad (\text{II.11})$$

Les équations de transport pour les électrons et les ions et l'équation d'énergie sont couplées à celle de Poisson et forment ainsi un modèle électrique auto-cohérent de la décharge.

II-3-4 Les grandeurs caractéristiques

Les équations énumérées ci-dessus sont écrites en fonction des coefficients de diffusion et des mobilités des porteurs de charges et des fréquences de collisions. Les coefficients de diffusion D_e et de mobilité μ_e des électrons, ainsi que les fréquences de collisions des électrons avec les espèces lourdes dépendent de la fonction de distribution de l'énergie des électrons (FDEE). Dans l'hypothèse d'une FDEE Maxwellienne, ces coefficients s'expriment directement en fonction de la température des électrons [22].

❖ La relation entre les deux principaux coefficients de transport D_e et μ_e est :

$$\frac{D_e}{\mu_e} = \frac{K_B T_e}{q} = \frac{2}{3} \frac{\xi_e}{q} \quad (\text{II.12})$$

Cette relation est connue sous le nom de relation d'Einstein où T_e est la température électronique et ξ_e est leur énergie moyenne avec:

$$\xi_e = \frac{3}{2} K_B T_e \quad (\text{II.13})$$

De même, les coefficients de transport D et μ des ions présents dans le gaz sont liés par la relation d'Einstein suivante [23] :

$$\frac{D_i}{\mu_i} = \frac{K_B T_i}{q} \quad (\text{II.14})$$

Par ailleurs, les coefficients de diffusion et de mobilité de l'énergie de l'électron sont calculés à partir du coefficient de diffusion et de la mobilité des électrons par :

$$\begin{aligned} D_\varepsilon &= (5/3).D_e, \\ \mu_\varepsilon &= (5/3).\mu_e \end{aligned} \quad (\text{II.15})$$

Le modèle présenté ci-dessus permet la résolution de l'équation de Boltzmann et la détermination des densités des espèces chargées, du champ électrique et de l'énergie moyenne d'électrons dans l'espace inter électrodes.

Ce modèle est insuffisant pour décrire la décharge lorsque l'hypothèse de milieu continu n'est pas correcte. Dans ces conditions, on fait appel à des modèles qui associent un modèle particulière au modèle fluide pour déterminer le mouvement et les vitesses des particules dans la décharge.

II-4 Mouvement des électrons dans un champ électrique

Grâce au champ électrique appliqué en régime DC, les électrons peuvent être accélérés (chauffés) efficacement et acquérir une énergie, jusqu'à quelques dizaines d'électronvolts [24, 25]. Ces électrons vont provoquer des collisions le long de leur trajectoire, et en particulier des collisions d'ionisation au-delà d'une énergie seuil (ε seuil = 15,7 eV pour la première ionisation de l'argon). Ils ionisent les neutres et un plasma est alors produit, d'où l'appellation d'électrons primaires (ou encore électrons chauds ou rapides).

Sous l'effet du champ électrique, ils effectuent un mouvement obéissant à l'équation de Lorentz :

$$m \frac{dV}{dt} = qE \quad (\text{II.16})$$

Où V est la vitesse de la particule, m sa masse et q sa charge.

II-5 Modélisation des trajectoires des électrons par la méthode PIC-MC

Les trajectoires et les vitesses des particules chargées sous l'effet du champ électrique sont déterminées par la méthode hybride PIC-MC basée sur l'intégration des équations de mouvement classique (Newton). La méthode PIC-MC résulte de la combinaison de la méthode Particle-In-Cell (PIC) [26] et de la méthode Monte Carlo (MC) pour le traitement de collisions [27]. Le milieu dans lequel la particule évolue est discrétisé (maillage) comme un réseau à 1D ou

2D est le champ électrique qui y règne est déterminé en chaque point du nœud de la grille spatiale.

En présence de collisions, il est nécessaire de compléter le modèle PIC avec le modèle MC qui est basée sur la théorie des probabilités. Les collisions sont donc introduites par tirage de nombres aléatoires, uniformément distribués entre 0 et 1, qui obéissent à la théorie des probabilités [27, 28]. De manière générale, la méthode PIC-MC est une approche utilisée pour l'étude d'un ensemble de particules chargées soumises à un champ électrique, uniforme ou non, statique ou variable dans le temps. Cette méthode permet aussi d'établir un bilan statistique de l'ensemble des particules et d'obtenir ainsi des grandeurs macroscopiques caractérisant le système étudié [29].

Nous utilisons la méthode PIC-MC [26-30] pour le calcul des trajectoires des électrons dans un champ électrique statique en tenant compte les collisions électron-neutre de types élastique et inélastique (excitation et ionisation directes). La densité des neutres et leur température (300 K) sont considérées constantes. La vitesse des neutres est négligée par rapport à la vitesse des électrons (cibles immobiles). Les paramètres plasma et ceux du gaz sont donnés par la suite.

Dans ce qui suit, nous allons donner les schémas de principe du code utilisé dans notre travail (PIC), l'intégration des équations de mouvement (PIC) et la méthode de la collision nulle (MC) pour la détermination du temps entre deux collisions successives.

II-5-1 Schéma de principe du code PIC-MC

Le schéma de principe du code PIC, permettant le calcul des trajectoires en absence de collision (ou entre deux collisions) est présenté sur la figure II-1.

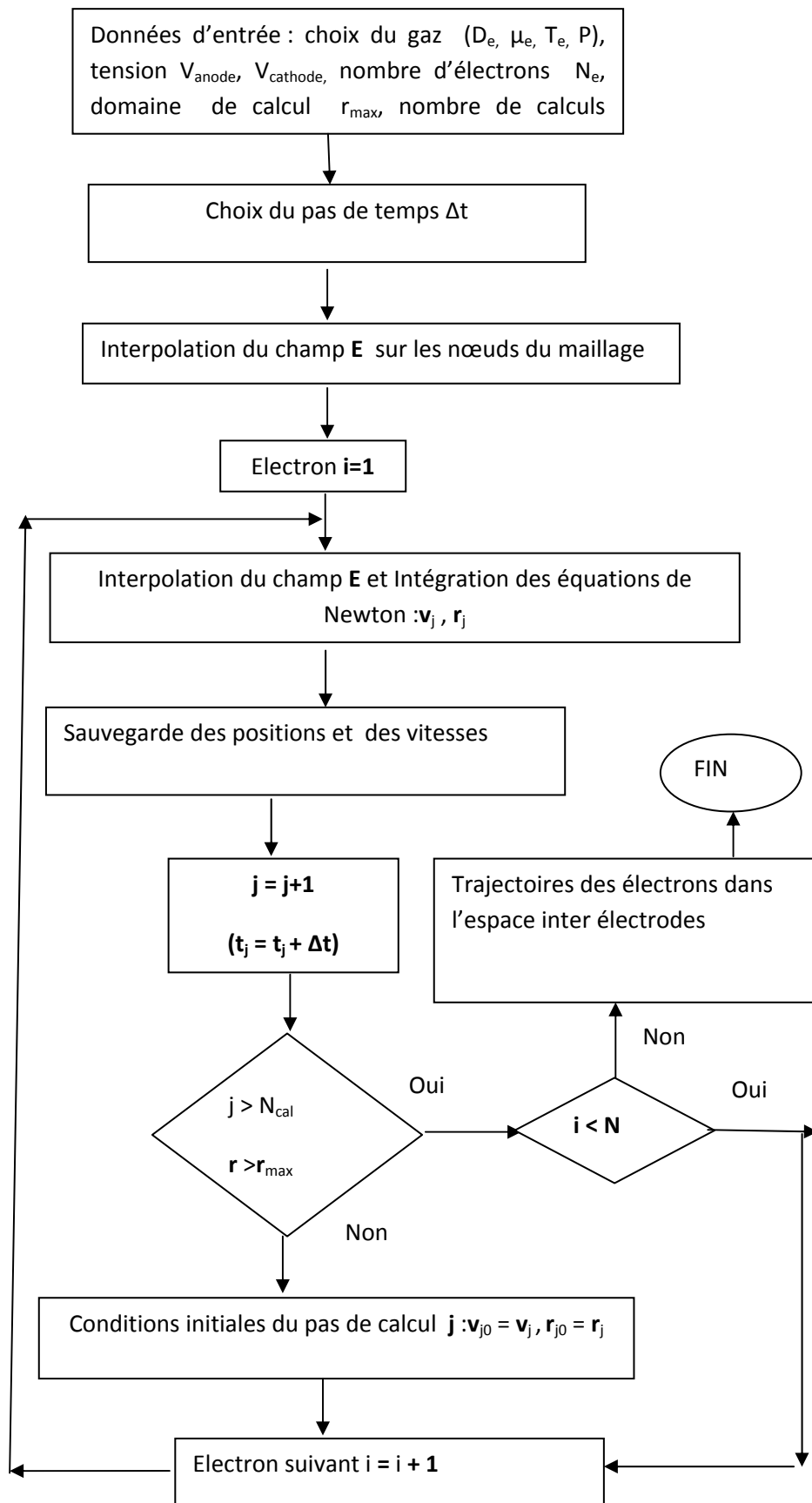


Figure II-1 : Schéma de l'algorithme PIC pour le calcul des trajectoires des électrons dans un champ électrique.

La simulation de la trajectoire d'un électron démarre à l'instant $t_0 = 0$, en un point donné des coordonnées \mathbf{r}_0 , avec une vitesse initiale \mathbf{v}_0 choisie. Après le choix du pas de temps et du maillage, le champ électrique est calculé aux nœuds de la maille par interpolation des valeurs numériques obtenues par la résolution de l'équation de Poisson en utilisant la méthode des différences finies (MDF). Afin de pouvoir intégrer les équations de mouvement pour l'obtention des coordonnées en un point \mathbf{r}_j , il est nécessaire de déterminer le champ électrique en un point de coordonnées \mathbf{r}_{j-1} . La trajectoire d'un électron est calculée pendant un temps d'observation :

$$t_{cal} = N_{cal} * \Delta t \quad (\text{II.17})$$

Avec :

t_{cal} : le temps de calcul

N_{cal} : nombre totale des points de calcul

Δt : le pas du temps

En présence des collisions, le code PIC est intégré dans le schéma présentant l'algorithme MC (figure II-2). Le temps entre deux collisions (temps de vol libre), est une variable aléatoire dont la densité de probabilité est liée à la fréquence de collision totale électron - neutre. Le premier temps de vol libre, $t_1 - t_0$, est obtenu par tirage d'un nombre aléatoire suivant la loi de probabilité. Pendant ce temps, l'électron est soumis au champ de force extérieure par la loi fondamentale de la mécanique classique et sa trajectoire est déterminée par la méthode PIC décrite précédemment ($\Delta t \ll t_1 - t_0$). A partir des conditions initiales ($t_0, \mathbf{v}_0, \mathbf{r}_0$), on peut alors calculer les paramètres ($t_1, \mathbf{v}_1, \mathbf{r}_1$) de l'électron avant qu'il subisse une collision. La méthode utilisée pour la détermination de ces paramètres est présentée dans les sections suivantes.

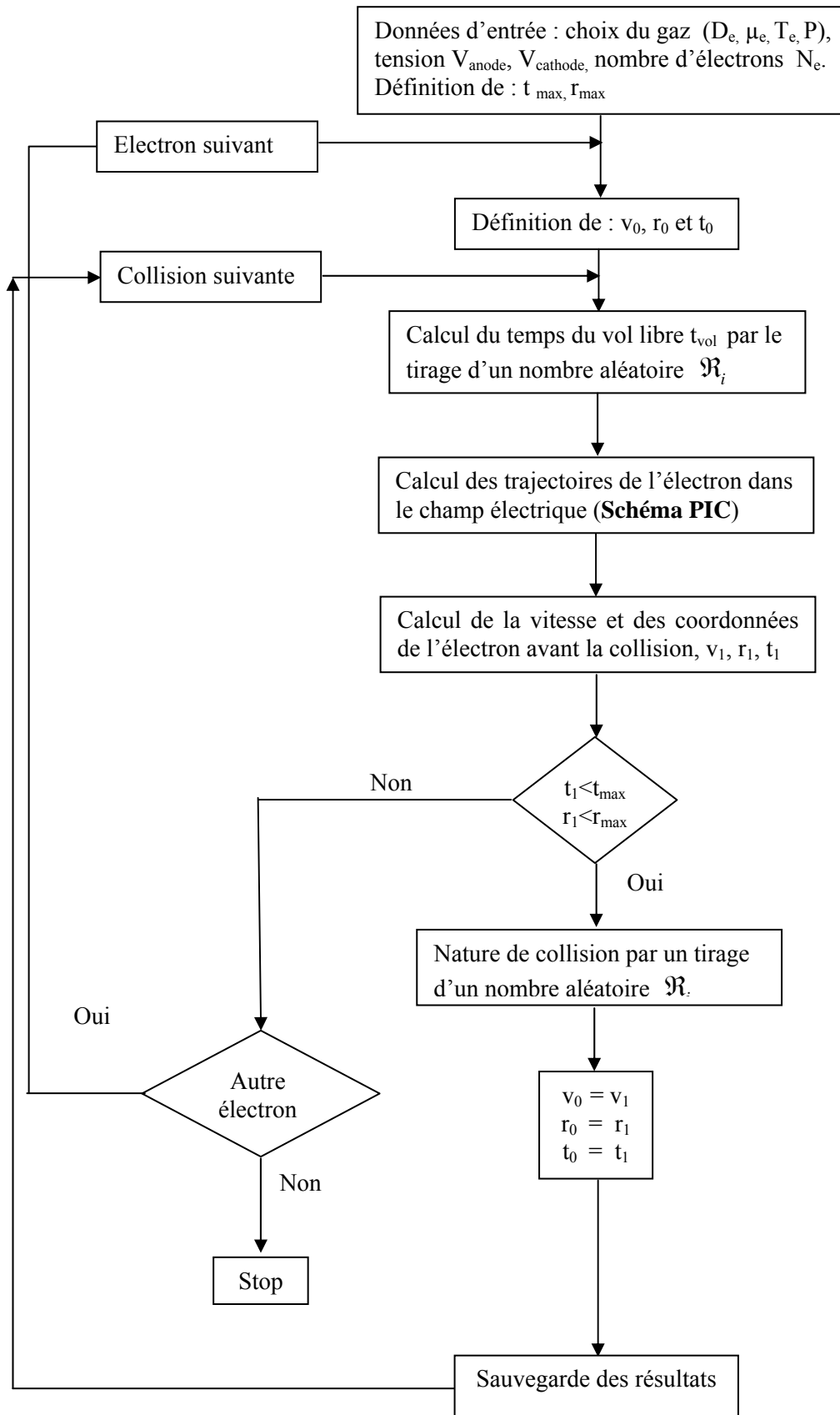


Figure II-2 : Schéma de la méthode Monte-Carlo (MC) pour le traitement des collisions électron - neutre.

Le mouvement des particules chargées entre deux collisions successives est gouverné par les équations de la mécanique classique de Newton ou par les équations différentielles de Hamilton. Dans le cas du champ électrique déterminé par la méthode (MDF), nous utilisons les équations de la mécanique classique de Newton et leur intégration est effectuée par la méthode Leap-Frog [chapitre III].

$$\left. \begin{aligned} \frac{dV}{dt} &= \frac{-e}{m_e} E(x) \\ \frac{dr}{dt} &= V \end{aligned} \right\} \frac{d^2 r}{dt^2} = \frac{-e}{m_e} E(x) \quad (\text{II.18})$$

Où e et m_e sont la charge élémentaire et la masse de l'électron, respectivement ; r est la position et V la vitesse de la particule.

II-5-2 Temps de vol libre et technique de la collision nulle

Le temps entre deux collisions (temps de vol libre), est une variable aléatoire, dont la densité de probabilité est liée à la loi de probabilité [26-29] :

$$\int_a^{y_i} f(x) dx = R_i \int_a^b f(x) dx \quad (\text{II.19})$$

Selon laquelle, pour une collection de nombres aléatoires R_i (uniformément distribuée entre 0 et 1), il est possible de déterminer une collection de nombres aléatoires y_i distribués selon une fonction $f(x)$ dans l'intervalle $[a, b]$ [26-29]. Le temps de vol libre est défini par $t_{\text{vol}} = t_1 - t_0$, où t_0 est l'instant initial et t_1 est l'instant d'une collision. Ce dernier (t_1) est déterminé si l'instant t_0 et la fréquence totale de collision ν_T sont connus. La fréquence totale de collision électron-neutre est une fonction de la vitesse électronique (ou l'énergie de la charge) selon :

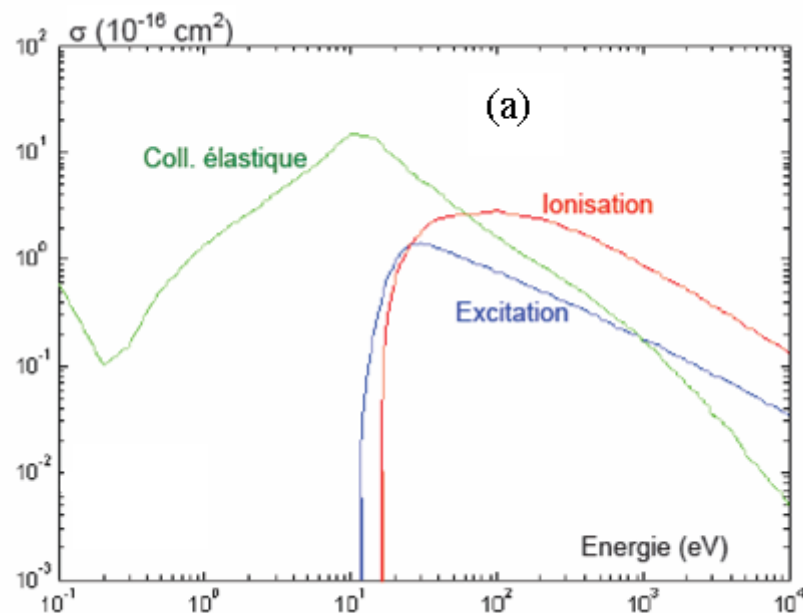
$$\nu_T(\varepsilon) = n \sigma_T(\varepsilon) v \quad (\text{II.20})$$

Où n est la densité des neutres, V est la vitesse de l'espèce chargée à l'instant t et σ_T est la section efficace totale de collision.

Les méthodes proposées pour le calcul du temps de vol [31] sont : la méthode de la collision nulle et la méthode du pas de temps constant. Dans ce travail, nous avons utilisé la technique de la collision nulle (collision virtuelle) [27, 29,32, 33]. Cette technique consiste à introduire une collision fictive de section efficace telle que la fréquence de collision totale ν_{tot} soit constante [29] :

$$\nu_{tot} = \nu_T + \nu_{nulle} = \max_{0 \leq \varepsilon \leq \varepsilon_{lim}} \left(\left(\frac{2\varepsilon}{m_e} \right)^{1/2} \sum_p n \sigma_p(\varepsilon) \right) = \text{const} \quad (\text{II.21})$$

Où ν_T est la fréquence totale de toutes les collisions réelles, ν_{nulle} est la fréquence des collisions nulles, σ_p est la section efficace de collision p , ε est l'énergie de l'électron et ε_{lim} est l'énergie maximale considérée. La figure II-3 représente les sections efficaces et les fréquences de collisions électron – neutre pour l'argon à la pression de 1 mTorr, la fréquence totale étant calculée d'après l'Equation (II-21) [34, 35] :



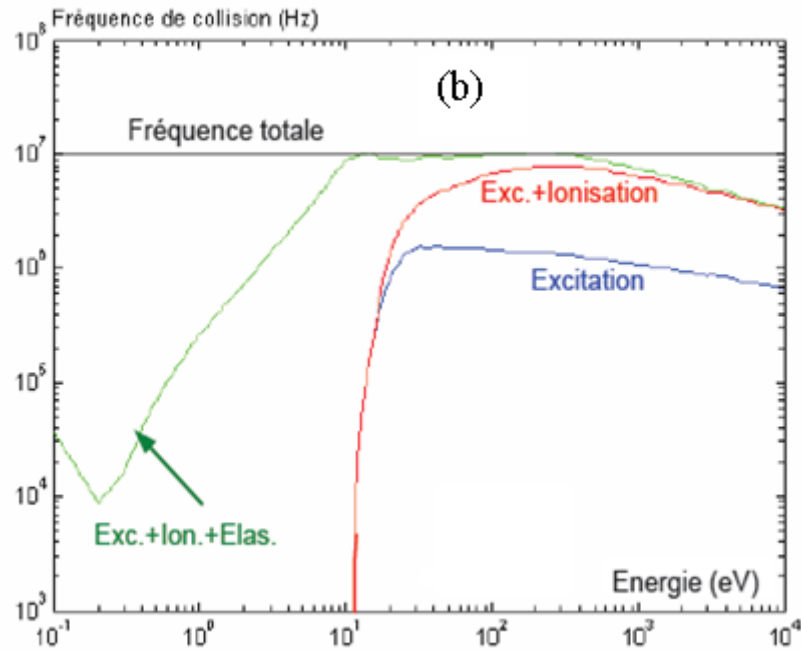


Figure II-3 : Sections efficaces a) et fréquences b) de collisions électron – atome pour l’argon, à la pression de 1 mTorr [29].

La probabilité de collision pendant un temps de vol t_{vol} est donnée par l’expression suivante :

$$P(t_{vol}) = \exp\left(-\int_0^{t_{vol}} \nu_T(\varepsilon) dt\right) \tag{II.22}$$

Pour déterminer le temps de vol libre, il faut intégrer l’équation (II-22) qui, dans le cas général, n’a pas de solution analytique parce que la fréquence de collision est une fonction de l’énergie de la particule projectile qui varie en fonction du temps. Pour optimiser les temps de calcul, on introduit la notion de collision nulle correspondant à une fréquence additionnelle choisie de telle sorte que la fréquence totale de collision soit toujours constante quelque soit l’énergie. Cette constante est en général égale à la fréquence totale maximale de collision réelle.

Le temps de vol libre d'une particule sous l'effet du champ électrique est calculé par la relation (en supposant $t_0 = 0$) :

$$t_{\text{vol}} = - \frac{1}{V_{\text{tot}}} \ln(1 - P) \quad (\text{II.23})$$

Qui peut s'écrire :

$$t_{\text{vol}} = - \frac{1}{V_{\text{tot}}} \ln(R_1) \quad (\text{II.24})$$

Où R_i est un nombre aléatoire uniformément distribué entre 0 et 1,

La méthode de collision nulle introduit en plus des collisions réelles une collision virtuelle qui rend la fonction de distribution du temps de collision très simple. La conséquence est la diminution du temps de calcul [27, 36]. Le traitement des collisions est présenté comme suit :

II-5-3 Traitements des collisions entre électrons et neutres

Les collisions réelles entre un électron et une particule neutre peuvent être des collisions élastiques ou inélastiques (excitations, ionisations). La fréquence totale de collision est donc :

$$V_T = V_{\text{él}} + V_{\text{ion}} + V_{\text{ex}} \quad (\text{II.25})$$

En tenant compte de la collision nulle, la fréquence totale de collision des électrons s'écrit :

$$V_{\text{tot}} = V_{\text{él}} + V_{\text{ion}} + V_{\text{ex}} + V_{\text{null}} = \text{constante} \quad (\text{II.26})$$

En divisant chaque terme par v_{tot} :

$$1 = \frac{V_{\text{él}}}{V_{\text{tot}}} + \frac{V_{\text{ion}}}{V_{\text{tot}}} + \frac{V_{\text{ex}}}{V_{\text{tot}}} + \frac{V_{\text{null}}}{V_{\text{tot}}} \quad (\text{II.27})$$

Soit $P_i = \frac{V_i}{V_{tot}}$ ($i = 1, \dots, k$) représentant la probabilité qu'une collision de type i (élastique, ionisation, excitation ou nulle) se produise à l'instant t_1 , alors l'équation (II.27) peut être réécrite sous la forme :

$$\sum_{i=1}^k P_i = \frac{\sum_{i=1}^k V_i}{V_{tot}} = 1 \quad (\text{II.28})$$

En fait, la fréquence de collision pour chaque type de collision ($v_{él}$, v_{ion} , v_{ex}) dépend de la vitesse relative v_r avant la collision, qui est définie par $v_r = v - V$ où V est la vitesse de la particule cible (neutre). La probabilité d'une collision de type i peut être calculée en connaissant la densité des neutres (n), les sections efficaces de chaque processus ($\sigma_i(\varepsilon)$) et la vitesse (v) de la particule projectile à l'instant de collision (t_1) selon :

$$P_i = \frac{v_i(\varepsilon)}{V_{tot}} = \frac{n \sigma_i(\varepsilon) v}{V_{tot}} \quad (\text{II.29})$$

La nature de chaque type de collision est déterminée par le tirage d'un nombre R_{col} aléatoire uniformément distribué entre 0 et 1 qui vérifie la relation suivante [27, 37, 38]:

$$\sum_{i=1}^{n-1} P_i < R_{col} < \sum_{i=1}^n P_i \quad (\text{II.30})$$

La figure II- 4 représente la méthode de détermination de la nature des collisions d'un électron d'énergie ε , A partir de l'énergie ε et de la valeur du nombre aléatoire R_{col} on cherche l'intersection P comme montré sur la figure II- 4. Par exemple, pour le cas où le point P est situé entre deux lignes p_2 et p_3 , ainsi :

$$(p_{exc} + p_{ion}) < R_{col} < (p_{exc} + p_{ion} + p_{él})$$

D'après la figure (II- 4) la collision est donc élastique.

Quelques types de collision sont possibles :

- ❖ Pour une collision nulle, les vitesses avant et après la collision sont identiques.
- ❖ Pour une collision réelle (élastique, d'excitation, d'ionisation), la vitesse après la collision dépend de la nature de la collision et doit être recalculée.

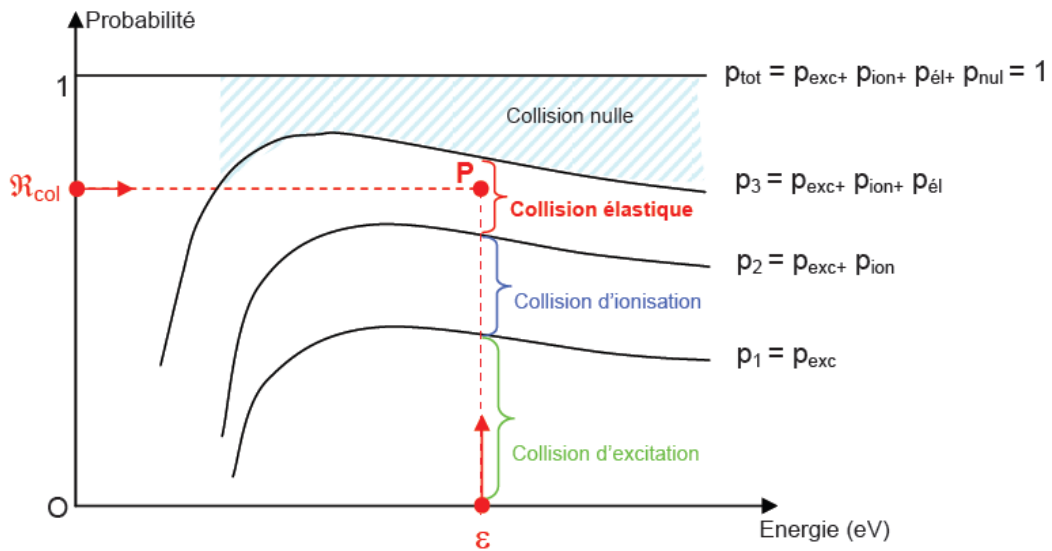


Figure II-4 : Méthode de détermination de la nature de la collision entre un électron d'énergie ϵ (eV) et un neutre [29, 34].

II-6 Conclusion

Nous avons vu dans ce chapitre que les phénomènes de transport des particules chargées sont entièrement décrits par l'équation de Boltzmann. A partir de cette propriété, un modèle électrique auto-cohérent idéal consiste en un système d'équations couplant l'équation de Boltzmann pour les électrons les ions avec l'équation de Poisson.

En effet, les porteurs de charges se déplacent dans un champ électrique qui dépend lui-même des densités. Cependant, la résolution numérique d'un tel système apparemment simple,

est trop complexe à mettre en œuvre. Pour cela, nous avons présenté le système d'équations qui régissent la décharge plasma dans un réacteur plan pour une tension continue. Nous avons aussi présenté les hypothèses formulées pour traiter le problème. Enfin, pour décrire complètement la trajectoire et les vitesses des électrons nous avons pris en considération les collisions sous l'effet d'un champ électrique, qui permettent d'accélérer les électrons et faisant l'intérêt d'une modélisation numérique de ces phénomènes.

Références bibliographiques du chapitre II

- [1] Rémy Mével, «Etude De Mécanismes Cinétiques Et Des Propriétés Explosives Des Systèmes Hydrogène-Protoxyde D'azote Et Silane-Protoxyde D'azote Application à La Sécurité Industrielle», Thèse doctorat, Université d'Orléans, (2009).
- [2] Oday A.Hamadi, «*The Fundamentals of Plasma-Assisted CVD Technique Employed in Thin Films Production* », IJAPLett Vol. 1, No. 2, (2008).
- [3] A. Bogaerts, R. Gijbels, «*Numerical modelling of gas discharge plasmas for various applications* », Vacuum 69 37–52, (2003).
- [4] J.P. Boeuf, Th. Callegari, C. Punset, and R. Ganter «*Modeling as a Tool for Plasma Display Cell Optimization*», Université de P. Sabatier, Workshop Digest of the 18th International Display Research Conference, Asia Display'98, pp. 209-220 (1998).
- [5] Xiaohui Yuan and Laxminarayan L. Raja «*Computational Study of Capacitively Coupled High-Pressure Glow Discharges in Helium* », IEEE TRANSACTIONS ON PLASMA SCIENCE, VOL. 31, NO. 4, (2003)
- [6] S. M. Lee, Y. J. Hong, Y. S. Seo, F. Iza, G. C. Kim, J. K.Lee: «*Simulations of biomedical atmospheric-pressure discharges*», Computer Physics Communications (2009).
- [7] L. Delcroix and A. Bers, « *Physique des plasmas* », Inter Editions et CNRS Editions, (1994).
- [8] J.P. Boeuf, « *Numerical model of rf glow discharges* », *Phys. Rev. A* **36** (6), 2782, (1987).
- [9] G. J. Nienhuis, « *Plasma models for silicon deposition* », Ph.D. thesis, Utrecht University (1998).

- [10] Y-H Lin, R. Adomaitis, « *A Global Basis Function Approach to DC Glow Discharge Simulation* », Technical Research Report, University of Maryland, Harvard University, and Industry, T.R. 97-81
- [11] A. Salabas, « *Fluid model for charged particle transport in capacitively coupled radio-frequency discharges* », *these de Universidade Técnica de Lisboa*, (2003).
- [12] J. P. Boeuf and L. C. Pitchford, « *Pseudospark discharges via computer simulation* », *IEEE Trans. on Plasma Science* **19** (2), 286, (1991).
- [13] P. Hartmann, H. Matsuo, Y. Ohtsuka et al , « *Heavy-Particle Hybrid Simulation of a High-Voltage Glow Discharge in Helium* », *Jpn. J. Appl. Phys.* Vol. 42 (2003).
- [14] P. L. G. Ventzek, R. J. Hoekstra and M. J. Kushner, « *Two-dimensional modeling of high plasma density inductively coupled sources for materials processing* », *J. Vac. Sci. Technol.* **B 12** (1), 461 (1994).
- [15] U. Kortshagen and L. D. Tsendin « *Electron Kinetics, and Applications of Glow Discharges* », *NATO ASI Series* Vol. 367, Kluwer Academic, New York, (2002).
- [16] T. R. Govindan and M. Meyyappan « *One-Dimensional Modeling Studies of the Gaseous Electronics Conference RF Reference Cell* », *Journal of Research of the National Institute of Standards and Technology*, vol 100, N^o 4, pp.463-472 (1995).
- [17] T. J. Sommerer and M. J. Kushner, « *Numerical investigation on the kinetics and chemistry of rf glow discharge plasmas sustained in He, N₂, O₂, He/N₂/O₂, He/CF₄/O₂, and SiH₄/NH₃ using a Monte Carlo-fluid hybrid model* », *J. Appl. Phys.* 71, 1654 (1992).
- [18] J. P Boeuf « *A two dimensional model of dc glow discharges* », *J. Appl. Phys.* 63(5), 1342-1349, March (1988).
- [19] D. BENYOUCEF « *Modélisation Particulaire Et Multidimensionnelle Des Décharges Hors Equilibre A Basse Pression Excitées Par Champs Electromagnétiques* » thèse. Université de Toulouse III – Paul Sabatier, mai (2011).

- [20] G. J. M Hagelaar, G. M. W. Kroesen, «*Modeling of the microdischarges in plasma addressed liquid crystal displays*», Journal Of Applied Physics Volume 88, Number 5 (2000)
- [21] M. A. Lieberman and A. J. Lichtenberg, «*Principles of Plasma Discharges and Materials Processing*», John Wiley & Sons, Inc. (2005).
- [22] M.H. Baghli¹, B. Benyoucef¹ et K. Hassouni «*Modélisation numérique et étude expérimentale d'un procédé plasma d'élimination de particules de suies carbonées*», Revue des Energies Renouvelables ICRES-07 135 – 144, Tlemcen, Algérie (2007).
- [23] Gerjan Hagelaar , «*Modeling of microdischarges for display technology*» (2000).
- [24] A. B. Petrin, «*Electron cyclotron resonance used in low pressure microwave plasma reactors with permanent magnets*», Russian Microelectronics, Vol. 34, No 4, (2005).
- [25] A. Gumberidze, M. Trassinelli, N. Adrouche et al, «*Electronic temperatures, densities and plasma X-ray emission of a 14.5 GHz Electron-Cyclotron Resonance Ion Source* », arXiv:10003.0159v1 [physics.plasma-ph], (2010).
- [26] C.K. Birdsall, «*Particle-in-cell charged-particle simulations, plus Monte Carlo collisions with neutral atoms, PIC-MCC*», IEEE trans. Plasma Sci. 19, pp.65-86 (1991)
- [27] Irving Langmuir, Schenectady Museum, «*Modèle fluides et cinétiques Plasmas faiblement ionisés* », M2 Physique des Plasmas - Plasmas faiblement ionisés - JL Raimbault, 2010
- [28] Manfred Gilli, «*Methodes Numeriques* », D'épartement d'économétrie Université de Genève ,Version : 25 mars 2006.
- [29] Tan Vinh Tran, «*Caractérisation Et Modélisation Des Plasmas Micro-Onde Multi-Dipolaires*», Université Joseph Fourier 2006

- [30] G. N. Marques, A. J. Preto, S. Stephany, A. Passaro, N. M. Abe, A.C.J.Paes, «*Plasmas Simulations using the Particle-In-Cell Model and Finite Element Method in Parallel Architecture*», Laboratoro Associado de Computação e Matemática Aplicada-LAC/INPE, Brasil. Virtual Engineering Laboratory, Institute for Advanced Studies-IEAv/CTA, Brasil
- [31] Kenichi Nanbu, «*Probability Theory of Electron–Molecule, Ion–Molecule, Molecule–Molecule, and Coulomb Collisions for Particle Modeling of Materials Processing Plasmas and Gases*», IEEE Transactions on plasma science, vol. 28, no. 3, June (2000).
- [32] Boumhali, D. Saifaoui, A. Dezairi, B.Zine ,” *Collision Simulation in Plasma Sheath Using the Monte Carlo Technic* », M.J.Condensed Matter, Vol 5, No 2 , pp 177-180. June (2004).
- [33] M.J.Brennan, «*Optimization of Monte Carlo codes using null collision techniques for experimental simulation at low E/N*», IEEE trans. Plasma Sci. 19, pp.256-261, (1991)
- [34] R. Rejoub, B. G. Lindsay, and R. F. Stebbings, «*Determination of the absolute partial and total cross sections for electron-impact ionization of the rare gases* », Physical Review A, volume 65, (2002).
- [35] Phelps and coworkers at JILA; Collision data;
jilawww.colorado.edu/research/colldata.html.
- [36] Tiberiu M. Minea, « *Simulation particulière d’une décharge magnétron radio-fréquence, comparaison à l’expérience* », these, Unviversité de Paris-Sud, (1998).
- [37] M.Yousfi, A. Hennad, A.Alkaa, «*Monte Carlo simulation of electron swarms at low reduced electric fields*», Physical Review E, vol 49, 4, (1994).
- [38] Ana Draghici Lacoste, « *Amorçage et entretien en cavite resonnante d’une décharge microonde d’hydrogène en impulsions de haute puissance* », Thèse de doctorat, Université Paris-Sud Orsay, (1998).

Chapitre III

Méthodes Numériques et Conditions de Simulation

III-1 Introduction

Dans ce chapitre, nous discutons les aspects numériques qui ont été utilisés pour résoudre le système d'équations décrits dans le chapitre II. Nous avons choisi de discrétiser les équations aux dérivées partielles par la méthode des différences finies, en assurant une représentation spatiale adéquate des phénomènes mis en jeu pour obtenir une solution.

Avec ce but à l'esprit, nous avons adopté une méthode aux différences finies incorporant le schéma de discrétisation exponentielle [1] dans le traitement spatial du système d'équation, et un algorithme implicite pour les équations dans le temps. Cette dernière permet de surmonter les fortes restrictions sur le pas de temps d'intégration, généralement imposées par les algorithmes explicites [2, 3]. De même, l'équation de Poisson est également résolue en utilisant une technique implicite. La solution d'équilibre est définie en imposant un critère de convergence sans modifications des principaux paramètres du plasma.

III-2 Considérations générales

Un réacteur à courant continu est considéré. Il est composé de deux électrodes conductrices planes et parallèles placées dans une enceinte sous vide dans laquelle est introduit un gaz (argon). Une électrode (la cathode) est alimentée par une tension négative, alors que la seconde (l'anode) est reliée à la masse, comme c'est illustré sur la figure III-1. La dimension de l'espace inter électrodes (d) est de l'ordre de quelques centimètres.

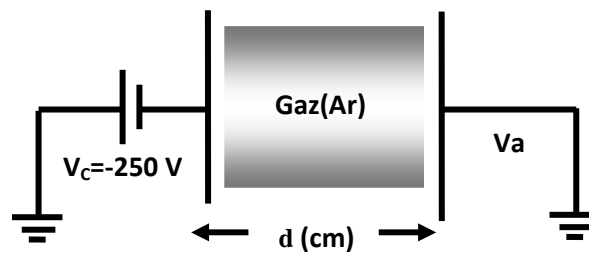


Figure III-1 : Schéma du réacteur modélisé.

Les équations de transport de particules chargées couplées avec l'équation d'énergie et l'équation de Poisson forment un système d'équations aux dérivées partielles (EDP). La solution de ce système d'équations donne la distribution spatiale des densités et des flux de particules chargées (pour les électrons, et pour les ions positifs, respectivement), l'énergie moyenne des électrons et la répartition du champ électrique à l'intérieur de la décharge.

Le problème peut être résolu en utilisant des méthodes numériques discrètes, en divisant le domaine $D(x, y)$ (voir la figure III-2) en un ensemble de régions discrètes limitées par un réseau fini de points (i, j) appelé maillage de calcul ou une grille.

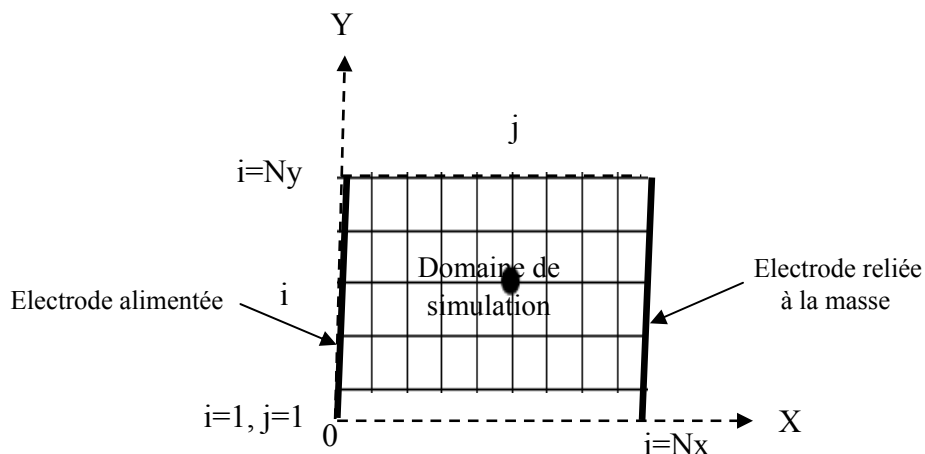


Figure III-2 : schéma représentatif du domaine de simulation et du maillage.

La première série d'équations aux dérivées partielles est alors approchée en chaque point discret par un ensemble d'équations décrivant, à chaque fois, les diverses variables physiques à différents points dans le domaine D . Avec la méthode d'analyse qui permet de résoudre le problème dans une gamme continue de (x, y, t) des variables, la discrétisation numérique assure une solution en un nombre fini de points, seulement. Une augmentation du nombre de points du maillage de calcul se traduit par une meilleure description et, par conséquent, à une solution plus précise. Lors du choix d'une méthode de discrétisation les conditions suivantes doivent être vérifiées:

- ❖ La préservation des lois de conservation de quantités physiques.
- ❖ La vérification de la signification physique de la solution.
- ❖ la précision, évaluer la quantité d'information perdue quand une fonction continue est discrétisée.

Nous avons adopté ici la méthode des différences finies (FDM) [4-6]. Elle est relativement facile à mettre en œuvre et elle peut être appliquée à un domaine de discrétisation rectangulaire.

III-3 Maillage spatiale et définition de la configuration de la décharge

Le système constitué des équations de transport et de l'énergie des électrons couplées à l'équation de Poisson ne peut être résolu analytiquement. Il est donc nécessaire de procéder à sa résolution en utilisant la méthode des différences finies. La résolution des équations du transport, de l'énergie et du champ électrique requiert une discrétisation spatio-temporelle. Pour ce faire, on donne d'abord un maillage, 2D dans ce cas, qui détermine les points sur lesquels seront calculées les densités des espèces chargées, l'énergie des électrons et le champ électrique (figure III.3).

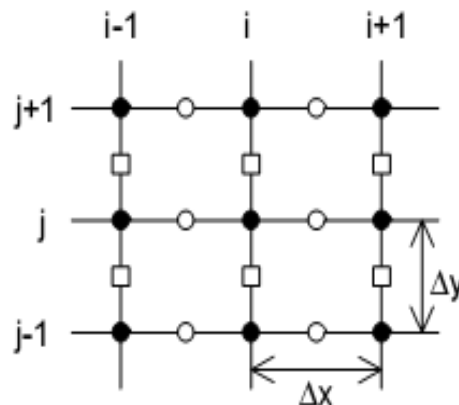


Figure III- 3: Maillage utilisé pour la résolution numérique des équations

III-4 Les différences finies

Après avoir défini le maillage de calcul, la méthode des différences finies (MDF) est appliquée au système d'équations (EDP). La méthode consiste à remplacer les dérivées partielles par des différences divisées ou combinaisons de valeurs ponctuelles de la fonction en un nombre fini de points discrets ou nœuds du maillage [7].

- **Avantages** : grande simplicité d'écriture et faible coût de calcul.
- **Inconvénients** : limitation à des géométries simples, difficultés de prise en compte des conditions aux limites de type Neumann.

III-4-1 Principe - ordre de précision

La méthode des différences finies consiste à représenter les dérivées des équations à traiter au moyen des développements de Taylor et se déduit directement de la définition de la dérivée. Cette méthode est le résultat des travaux de plusieurs mathématiciens du 18ème siècle (Euler, Taylor, Leibniz...).

Soit $u(x; y; t)$ une fonction de l'espace et du temps. Par définition de la dérivée, on a :

$$\frac{\partial u}{\partial x} = \lim_{\Delta x \rightarrow 0} \frac{u(x + \Delta x, y, t) - u(x, y, t)}{\Delta x} \quad (\text{III.1})$$

Si Δx est petit, un développement de Taylor de $u(x + \Delta x, y, t)$ au voisinage de x donne :

$$u(x + \Delta x, y, t) = u(x, y, t) + \Delta x \frac{\partial u}{\partial x}(x, y, t) + \frac{\Delta x^2}{2} \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(x, y, t) + \frac{\Delta x^3}{6} \frac{\partial^3 u}{\partial x^3}(x, y, t) + \dots \quad (\text{III.2})$$

En tronquant la série au premier ordre en Δx , on obtient :

$$\frac{u(x + \Delta x, y, t) - u(x, y, t)}{\Delta x} = \frac{\partial u}{\partial x}(x, y, t) + e(\Delta x) \quad (\text{III.3})$$

L'approximation de la dérivée $\frac{\partial u}{\partial x}(x)$ est alors d'ordre 1 indiquant que l'erreur de troncature $e(\Delta x)$ tend vers zéro comme la puissance première de Δx . La puissance de Δx avec laquelle l'erreur de troncature tend vers zéro est appelée l'ordre de la méthode.

III-4-2 Notation indicielle - cas 1D

Considérons le cas d'une étude monodimensionnelle où le problème consiste à déterminer une grandeur $u(x)$ sur l'intervalle $[0,1]$. La recherche d'une solution discrète de cette grandeur nous amène à effectuer un maillage n de l'intervalle de définition. On considère alors un maillage (ou une grille de calcul) composé de $N + 1$ points x_i pour $i = 0, \dots, N$ régulièrement espacés avec un pas Δx . Les points $x_i = i \Delta x$ sont appelés les nœuds du maillage.

Le problème se généralise pour la détermination d'une grandeur sur un ensemble de dimension infinie. Il se ramène ainsi à la recherche de N valeurs discrètes de cette grandeur aux différents nœuds du maillage.

Notation : on note u_i la valeur discrète de $u(x)$ au point x_i , soit $u_i = u(x_i)$. De même pour la dérivée de $u(x)$ au nœud x_i , on note :

$$\left(\frac{\partial u}{\partial x} \right)_{x=x_i} = \left(\frac{\partial u}{\partial x} \right)_i = u_i', \quad (\text{III.4})$$

Cette notation s'utilise de façon équivalente pour toutes les dérivées d'ordre successif de la grandeur u . Le schéma aux différences finies d'ordre 1 présenté ci-dessus s'écrit, en notation indicielle :

$$\left(\frac{\partial u}{\partial x} \right)_i = \frac{u_{i+1} - u_i}{\Delta x} + e(\Delta x) \quad (\text{III.5})$$

Ce schéma est dit "avant" ou "décentré avant" ou upwind. Il est possible de construire un autre schéma d'ordre 1, appelé "arrière" [8].

$$\left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)_i = \frac{u_i - u_{i-1}}{\Delta x} + e(\Delta x) \quad (\text{III.6})$$

III-4-3 Schéma d'ordre supérieur

Des schémas aux différences finies d'ordre supérieur peuvent être construits en manipulant des développements de Taylor au voisinage de x_i . On écrit :

$$\begin{aligned} u_{i+1} &= u(x_i + \Delta x) = u_i + \Delta x \left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)_i + \frac{\Delta x^2}{2} \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}\right)_i + e(\Delta x^2) \\ u_{i-1} &= u(x_i - \Delta x) = u_i - \Delta x \left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)_i + \frac{\Delta x^2}{2} \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}\right)_i + e(\Delta x^2) \end{aligned} \quad (\text{III.7})$$

Où $e(\Delta x^2)$ est l'erreur de troncature d'ordre 2

La soustraction de ces deux relations, sans tenir compte de l'erreur de troncature, donne:

$$u_{i+1} - u_{i-1} = 2\Delta x \left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)_i + e(\Delta x^2) \quad (\text{III.8})$$

Ce qui permet d'obtenir le schéma d'ordre deux dit "centré" pour approcher la dérivée première de u :

$$\left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)_i = \frac{u_{i+1} - u_{i-1}}{2\Delta x} + e(\Delta x^2) \quad (\text{III.9})$$

Pour obtenir des ordres supérieurs, il est nécessaire d'utiliser un ensemble de nœuds voisins de x_i . Le nombre de points nécessaires à l'écriture du schéma s'appelle le stencil. Par exemple, un schéma aux différences finies d'ordre 3 pour la dérivée première s'écrit [8] :

$$\left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)_i = \frac{-u_{i+2} + u_{i+1} - 3u_i - 2u_{i-1}}{6\Delta x} + e(\Delta x^3) \quad (\text{III.10})$$

Avec $e(\Delta x^3)$ est l'erreur de troncature d'ordre 3.

III-4-4 Dérivée d'ordre supérieur

Le principe, pour les dérivées d'ordre supérieur, est identique et repose sur les développements de Taylor au voisinage de x_i . Par exemple pour construire un schéma d'approximation de la dérivée seconde de u , on écrit [7] :

$$\begin{aligned}
 u_{i+1} &= u_i + \Delta x \left(\frac{\partial u}{\partial x} \right)_i + \frac{\Delta x^2}{2} \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \right)_i + \frac{\Delta x^3}{6} \left(\frac{\partial^3 u}{\partial x^3} \right)_i + e(\Delta x^4) \\
 u_{i-1} &= u_i - \Delta x \left(\frac{\partial u}{\partial x} \right)_i + \frac{\Delta x^2}{2} \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \right)_i - \frac{\Delta x^3}{6} \left(\frac{\partial^3 u}{\partial x^3} \right)_i + e(\Delta x^4)
 \end{aligned}
 \tag{III.11}$$

Avec $e(\Delta x^4)$ est l'erreur de troncature d'ordre 4

En faisant la somme de ces deux égalités, sans tenir compte de l'erreur de troncature, on aboutit à :

$$u_{i+1} - u_{i-1} - 2u_i = \Delta x^2 \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \right)_i + e(\Delta x^4)
 \tag{III.12}$$

Ce qui permet d'obtenir le schéma d'ordre deux dit "centré" pour approcher la dérivée seconde de u :

$$\left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \right)_i = \frac{u_{i+1} - 2u_i + u_{i-1}}{\Delta x^2} + e(\Delta x^2)
 \tag{III.13}$$

Il existe aussi une formulation "avant" et "arrière" pour la dérivée seconde, toutes deux d'ordre 1 :

$$\left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \right)_i = \frac{u_{i+2} - 2u_{i+1} + u_i}{\Delta x^2} + e(\Delta x)
 \tag{III.14}$$

$$\left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \right)_i = \frac{u_i - 2u_{i-1} + u_{i-2}}{\Delta x^2} + e(\Delta x)$$

Il est également possible de construire, par le même procédé, des schémas aux différences finies d'ordre supérieur pour les dérivées deuxième, troisième, etc.

III-5 Intégration sur le temps

L'intégration sur le temps commence à l'instant $t = 0$ par des conditions initiales imposées. Les conditions initiales sont typiques et correspondent aux densités des particules chargées, une température électronique de quelque eV et une vitesse initiale pour les électrons (condition de démarrage). Le flux et le champ électrique sont normalement mis à zéro. Toutefois, ces conditions à faible pression, et une densité initiale suffisante d'électrons doivent être utilisées dans l'ensemble des conditions initiales, afin d'assurer l'allumage de la décharge. La densité d'électronique agit comme un paramètre très sensible pour assurer le développement d'une solution physique [9].

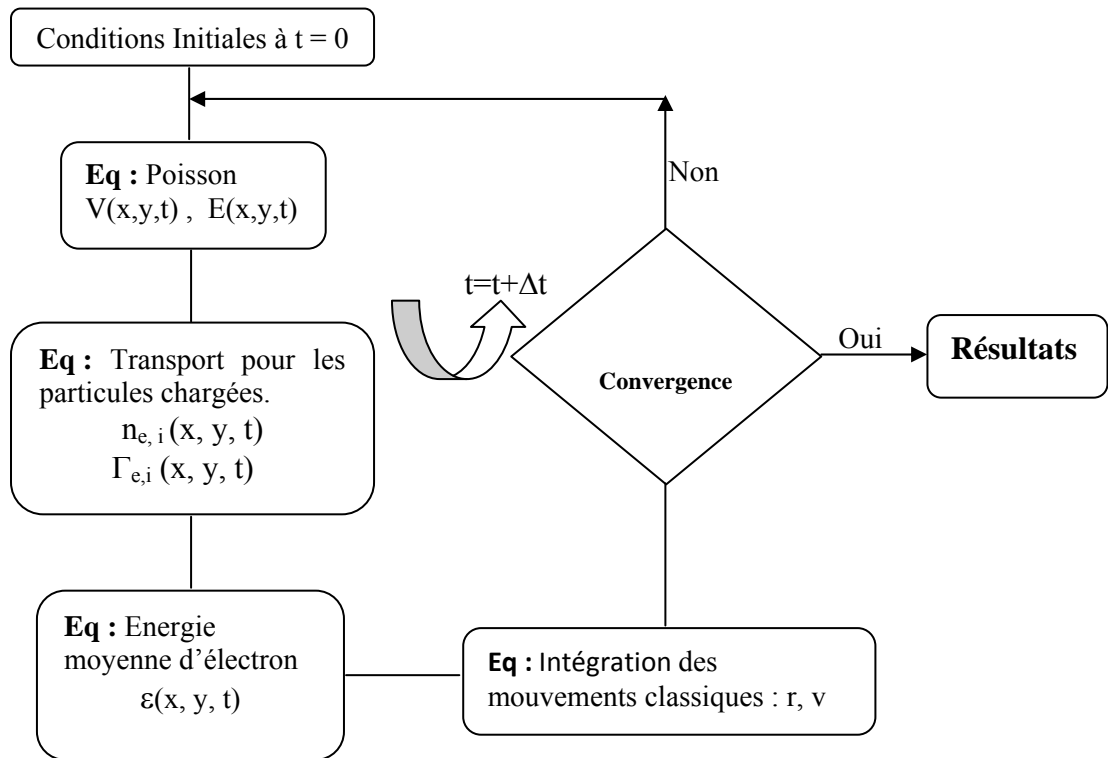


Figure III-4: L'organigramme de calcul général du modèle.

La procédure itérative est définie comme suit : utiliser les valeurs de densités de particules chargées pour résoudre l'équation de Poisson et calculer la distribution du champ électrique dans la décharge. Ce profil de champ électrique est utilisé pour calculer les nouvelles densités de particules chargées. Les flux de particules de charge sont utilisés pour mettre à jour

les nouvelles valeurs du champ électrique dans l'espace inter-électrodes, à la fin de chaque itération. Les nouvelles valeurs de densités sont insérées à nouveau dans l'équation de Poisson et le processus est répété jusqu'à la convergence [4, 10, 11].

Cette question de convergence est liée à la méthode utilisée pour faire avancer le système d'équations en temps: explicite, implicite ou semi-implicite. Dans ce travail, les équations de transport des électrons, des ions et l'équation d'énergie, ainsi que celle de Poisson sont intégrées dans le temps en utilisant une méthode implicite qui peut assurer la stabilité des algorithmes en évitant les grandes durées de calcul typiques des schémas explicites.

III-6 Schémas numériques explicites et implicites

Pour souligner la différence entre les méthodes explicites, implicites et semi-implicites dans le temps d'intégration, on considère l'équation de continuité d'électrons (Cf. Chapitre II : équations II.2, 8 et 10). Lorsqu'on utilise la méthode des différences finies pour discrétiser le terme de dérivée temporelle, elle peut être formulée par [11] :

$$n_e^{k+1} - n_e^k = f(t^k, n_e^k) \Delta t \quad (\text{III.15})$$

Les flux des particules chargées (donnés par l'équation II.9) sont calculés au moment t_k . L'équation (III.15) illustre le schéma d'intégration temporelle explicite ou avant, où les flux (dans l'exemple ci-dessus inclus dans la fonction f) sont estimés en utilisant les valeurs de la solution obtenue au moment t_k . Les valeurs des flux obtenus sont utilisées par la suite pour calculer les nouvelles valeurs de la densité électronique à une étape de l'intégration de temps avant t_{k+1} .

Si le flux et les estimations du terme source impliquent les valeurs de la solution obtenues à l'instant t_{k+1} , la méthode d'intégration de temps implicite ou vers l'arrière est donnée par la relation suivante [12, 13].

$$n_e^{k+1} - n_e^k = f(t^{k+1}, n_e^{k+1}) \Delta t \quad (\text{III.16})$$

Une voie médiane entre les schémas explicites et implicites est donnée par l'algorithme de **Crank-Nicholson**, qui décrit l'évolution temporelle des variables à l'aide des estimations du flux et les modalités de sources obtenues par la méthode des **Trapèzes**. Le choix d'une méthode implicite, basé sur l'algorithme de **Crank-Nicholson** à intégrer les équations aux dérivées partielles dans le temps, peut éviter des restrictions importantes sur le pas de temps d'intégration qui sont normalement associées à des méthodes explicites [14].

III-7 Discrétisation spatiale des équations de transport et de l'énergie

Nous avons choisi pour notre modèle un schéma numérique similaire à celui utilisé pour le transport des électrons dans les semi-conducteurs et décrit par **Scharfetter et Gummel** [1]. Les flux d'ions et d'électrons sont discrétisés par la méthode des différences finies en utilisant un schéma exponentiel. Le système d'équations est linéarisé et intégré implicitement. Le pas d'intégration dans le temps est pris constant. Le terme de transport dans les équations de continuité pour les particules (II.2 et 8) et pour l'énergie des électrons (II.10) est discrétisé comme suit [3, 15]:

$$\frac{n_{i,j}^{k+1} - n_{i,j}^k}{\Delta t} + \frac{\Gamma_{i+1/2,j}^{k+1} - \Gamma_{i-1/2,j}^{k+1}}{\Delta x} + \frac{\Gamma_{i,j+1/2}^{k+1} - \Gamma_{i,j-1/2}^{k+1}}{\Delta y} = S_{i,j}^k \quad (\text{III.17})$$

III-8 Le schéma de discrétisation de Scharfetter-Gummel

Le schéma de Scharfetter-Gummel [1], aussi appelé système exponentiel, est une méthode de discrétisation alternative pour les flux des particules et de densité d'énergie de charge au niveau des emplacements demi-point. Le schéma exponentiel est basé sur la solution analytique pour un flux de dérive-diffusion constant entre deux points de maillage. Selon l'axe des x , la forme de discrétisation des flux (Γ_x) par le schéma exponentiel est donnée par l'équation (III.18), l'expression de Γ_y est analogue.

Sur l'intervalle $[x_i, x_{i+1}]$ ou $[y_i, y_{i+1}]$ on suppose que les coefficients de diffusion et les mobilités sont constants. L'équation discrétisée est sous la forme suivante:

$$\Gamma_{x,i+1/2,j} = -\frac{1}{\Delta x} D(f_1(z_{x,i+1/2,j})n_{i+1,j} - f_2(z_{x,i+1/2,j})n_{i,j}) \quad (\text{III.18})$$

Avec :

$$z_{x,i+1/2,j} = \frac{\text{sgn}(q)\mu E_{i+1/2,j}\Delta x}{D_x} \quad (\text{III.19})$$

Et les fonctions $f_1(z)$ et $f_2(z)$ sont définies par :

$$f_1(z) = \frac{z}{\exp(z) - 1} \quad (\text{III.20})$$

$$f_2(z) = \frac{z \exp(z)}{\exp(z) - 1} = f_1(z) + z \quad (\text{III.21})$$

Pour $z = 0$, nous avons $f_1(0) = f_2(0) = 1$.

Après avoir remplacé les équations (III.19), (20) et (21) dans l'équation (III.18), la deuxième étape consiste à réarranger l'équation de continuité discrétisée sous la forme d'une équation de cinq points:

$$a_{i,j}^E n_{i+1,j}^{k+1} + a_{i,j}^W n_{i-1,j}^{k+1} + a_{i,j}^N n_{j+1}^{k+1} + a_{i,j}^S n_{i,j-1}^{k+1} + a_{i,j}^C n_{i,j}^{k+1} = A_{i,j} \quad (\text{III.21})$$

C'est une équation linéaire concernant la densité de charge dans un point du domaine de simulation, dont les cinq points de grille voisins sont : l'est, l'ouest, le nord, le sud et le centre, où les coefficients de l'équation (III.21) sont respectivement donnés par :

$$a_{i,j}^E = -\frac{\Delta t}{\Delta x^2} D f_1(z_{x,i+1/2,j}) \quad (\text{III.21.a})$$

$$a_{i,j}^W = -\frac{\Delta t}{\Delta x^2} D f_2(z_{x,i-1/2,j}) \quad (\text{III.21.b})$$

$$a_{i,j}^N = - \frac{\Delta t}{\Delta y^2} Df_1(z_{y,i,j+1/2}) \quad (\text{III.21.c})$$

$$a_{i,j}^S = - \frac{\Delta t}{\Delta y^2} Df_2(z_{y,i,j-1/2}) \quad (\text{III.21.d})$$

$$a_{i,j}^C = 1 - a_{i-1,j}^E - a_{i+1,j}^W - a_{i,j-1}^N - a_{i,j+1}^S \quad (\text{III.21.e})$$

III-9 Traitement numérique de l'équation de Poisson

Le traitement auto-cohérent du transport des particules chargées dans les décharges électriques est assuré par leur couplage avec l'équation de Poisson. Le champ électrique est fortement lié à la fois à la tension externe appliquée et au déséquilibre de la neutralité dû à la différence de mobilités entre les différentes espèces du milieu dans le volume de la décharge (champ de charges d'espace).

Ce champ électrique s'écrit :

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}) = - \mathbf{grad} V(\mathbf{r})$$

Où $V(\mathbf{r})$ est le potentiel calculé, correspondant au sein de la décharge. En résolvant l'équation de Poisson, il faut connaître les profils actualisés des densités de particules chargées n_e et n_i . Les solutions conventionnelles de l'équation de Poisson sont généralement implicites en ce sens que le profil du champ électrique est obtenu au moment t_{k+1} [11].

Dans cette étude, nous avons adopté un traitement implicite de l'équation de Poisson qui se justifie, non seulement par la nécessité d'éviter une restriction au pas du temps typique des schémas explicites, mais aussi par la cohérence par rapport à la technique d'intégration adoptée pour les équations de transport. La discrétisation de l'équation de Poisson mène à l'équation suivante:

$$(\nabla E)_{i,j} = \frac{E_{x,i+1/2,j} - E_{x,i-1/2,j}}{\Delta x} + \frac{E_{y,i,j+1/2} - E_{y,i,j-1/2}}{\Delta y} \quad (\text{III.22})$$

Notons que le champ électrique est lié au potentiel par les relations suivantes :

$$(E_x)_{i+1/2,j} = - \frac{V_{i+1,j} - V_{i,j}}{\Delta x} \quad (\text{III.23})$$

$$(E_y)_{i,j+1/2} = - \frac{V_{i,j+1} - V_{i,j}}{\Delta y} \quad (\text{III.24})$$

III-10 Intégration des équations de mouvement des électrons

Le mouvement des particules chargées entre deux collisions successives est gouverné par les équations de la mécanique classique (II.7). Leur intégration est effectuée par la méthode Leap-Frog schématisée sur la figure III-5 [16-18].

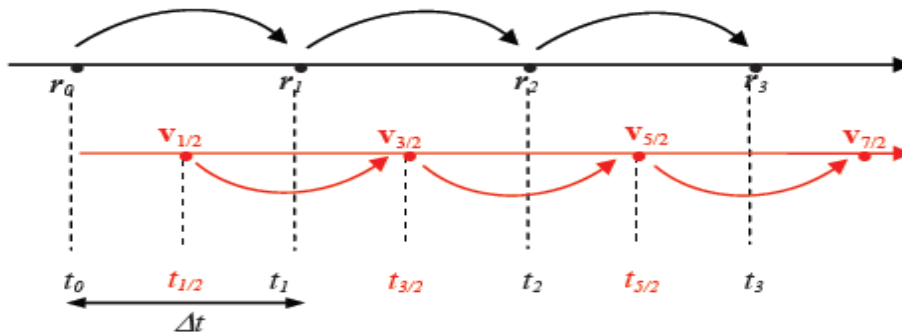


Figure III-5 : Schéma de l'algorithme de la méthode d'intégration **Leap-Frog** [18].

En suivant la méthode **Leap-Frog**, les équations de mouvement (II.7) sont remplacées par les équations aux différences finies suivantes :

$$m_e \frac{V_{i+1/2} - V_{i-1/2}}{\Delta t} = -eE_i \quad (\text{III.25})$$

$$\frac{r_{i+1} - r_i}{\Delta t} = V_{i+1/2} \quad (\text{III.26})$$

Où m_e , r_i et v_i sont respectivement la masse, la position et la vitesse de l'électron à l'instant $(i * \Delta t)$; $V_{i-1/2}$ et $V_{i+1/2}$ respectivement la vitesse à l'instant $(i - 1/2) * \Delta t$ et $(i + 1/2) * \Delta t$, où Δt est le pas de temps.

Le principal avantage de cette méthode est son temps de calcul et l'inconvénient majeur est le manque de contrôle sur l'erreur effectuée pendant l'intégration. Toutefois, elle s'est avérée efficace pour suivre les trajectoires électroniques [17,18].

III-11 Le choix du pas de temps

Les paramètres caractéristiques du plasma, déterminés pour nos conditions opératoires : argon à la pression de l'ordre du mTorr, conduisent à l'inégalité entre la fréquence plasma électronique est celle ionique ($f_{pe} > f_{pi}$). La fréquence la plus élevée est donnée par la pulsation plasma électronique. Ainsi, le pas de temps de calcul doit être choisi à partir du processus le plus rapide. Dans notre cas, c'est l'oscillation des électrons dans le plasma [16]. Le pas de temps constant choisi pour le calcul des trajectoires satisfait à la condition suivante [19] :

$$\Delta t < \frac{2 \pi}{\omega_{pe}} \quad (\text{III.27})$$

Avec :

Δt : pas du temps choisi

ω_{pe} : la pulsation plasma électronique

III-12 Le choix du pas de maillage

Comme discuté précédemment, la configuration du champ électrique dans notre domaine de simulation est déterminée numériquement avec la méthode des différences finies suivant le maillage. Il est donc nécessaire de calculer, dans un premier temps, le champ électrique aux nœuds de la maille. Le pas de maillage $\Delta x = \Delta y$ choisi doit être inférieur à la longueur de Debye, il doit satisfaire la condition suivante [19] :

$$\Delta x \leq \frac{\lambda_D}{2} \quad \text{et} \quad \Delta y \leq \frac{\lambda_D}{2} \quad (\text{III.28})$$

Où λ_D est la longueur de Debye électronique.

III-13 Conditions aux limites

Le modèle physique de la décharge continue, présenté précédemment, décrit le transport de particules chargées dans un dispositif à plasma, est à résoudre dans un domaine d'injection spécifié. Afin de définir complètement ce problème mathématique, un ensemble de conditions aux limites adéquates est nécessaire. Notez que la simulation correcte du milieu plasma est fortement dépendante des conditions aux limites adoptées.

La résolution numérique des équations dans le modèle 2D nécessite la mise en place de conditions initiales aux limites. Selon les travaux rapportés dans la littérature [2, 20-22], la solution numérique de l'équation aux dérivées partielles dépend essentiellement de la nature de ces conditions et les mesures d'intégration. Il est connu que la validité de nos résultats numériques est strictement liée à ces conditions physiques, électriques et numériques (voir figure III-6).

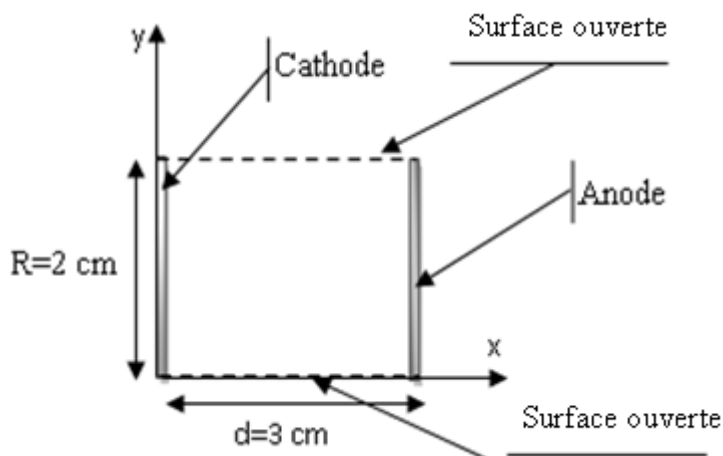


Figure III-6: Représentation schématique des conditions aux limites utilisées dans notre modèle.

Les limites du domaine de simulation sont les deux électrodes métalliques et les surfaces ouvertes :

- A l'anode, pour le flux électronique et le flux d'énergie électronique les conditions aux limites sont de type Dirichlet, elles sont traduites par :

$$\Gamma_e = \frac{1}{4} v_e n_e \quad \Gamma_\varepsilon = \frac{1}{2} v_e \varepsilon, \quad \text{avec} \quad \varepsilon = \frac{3}{2} k_B T_e$$

- La cathode est le siège d'une émission d'électrons par bombardement ionique. Pour un code numérique bien précis, un coefficient d'émission secondaire d'électrons doit être inclus de manière à décrire les processus de création des électrons secondaires à la cathode, observable à travers les concentrations d'électrons dans la zone de décharge [21, 22]. Nous utilisons une valeur constante de γ pour décrire les conditions aux limites à la cathode comme indiqué ci-dessous:

$$\Gamma_e = \frac{1}{4} V_e n_e - \gamma \Gamma_i$$

Où V_e est la vitesse thermique donnée par:

$$V_e = \sqrt{8 k_B T_e / \pi m_e}$$

Et l'énergie des électrons au niveau de la cathode est donnée par:

$$\Gamma_\varepsilon = \frac{1}{2} V_e \varepsilon - 2 k_B T_e \gamma \Gamma_i$$

- Conditions aux limites pour les ions positifs à l'anode et la cathode sont les suivantes [22]:

$$\Gamma_i = \frac{1}{4} V_i n_i + \alpha n_i \mu_i (\hat{n} \cdot E)$$

Ici, la vitesse thermique des ions est donnée par:

$$V_i = \sqrt{8 k_B T_i / \pi m_i}$$

\hat{n} est le vecteur unitaire normal orienté vers la surface, et α est un terme qui commute entre 0 et 1 en fonction du sens de la dérive d'ions positifs à la surface: $\alpha = 1$ si $\hat{n} \cdot E > 0$ sinon $\alpha = 0$ [22].

-A la surface ouverte, une série de conditions aux limites de Neumann symétrie est imposé. Ceci permet d'assumer une dérivée axiale nulle de la densité des particules chargées et du flux d'énergie:

$$\frac{\partial \Gamma_e}{\partial x} = 0, \quad \frac{\partial \Gamma_i}{\partial x} = 0 \quad \text{et} \quad \frac{\partial \Gamma_\varepsilon}{\partial y} = 0$$

- Les conditions aux limites pour le potentiel électrique sont :

➤ Au niveau des électrodes, le potentiel en $x=0$ (à la cathode) est imposé par la valeur appliquée ($V_C = V_{\text{appliquée}}$) et en $x = d$ (à l'anode), le potentiel est nul ($V_A = 0 \text{ V}$).

➤ Au niveau des surfaces ouvertes, nous avons : $\frac{\partial V}{\partial y} = 0$

III-14 Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons discutés les aspects numériques qui ont été utilisés pour résoudre le système d'équations décrit dans le chapitre II. Nous avons adopté une méthode aux différences finies incorporant le schéma de discrétisation exponentielle [Scharfetter et Gummel 1969] dans le traitement spatial du système d'équations et l'algorithme implicite pour les équations dans le temps. Le modèle est complété par une étude des trajectoires électroniques et la vitesse des électrons dans l'espace inter-électrodes, par l'intégration des équations de mouvement classique. Leur intégration est effectuée par la méthode Leap-Frog (Saute Mouton). En particulier, cette simulation numérique va nous permettre de calculer des configurations du champ électrique, de calculer les trajectoires et vitesses des électrons sous l'effet des collisions électron-neutre, en présence d'un champ électrique.

Références bibliographiques du chapitre III

- [1] D.L. Scharfetter and H.K. Gummel, «*Large-signal analysis of a silicon Read diode oscillator*», IEEE Trans. Electron Devices ED **16**, 64 (1969).
- [2] J. P. Boeuf and L. C. Pitchford, «*Two-dimensional model of a capacitively coupled rf discharge and comparisons with experiments in the Gaseous Electronics reference reactor*», Phys. Ref. E **51** (2), 1376-1390 (1995).
- [3] G.J. Nienhuis, W.J. Goedheer, E.A.G. Hamers, W.G.J.H. van Sark, and J. Bezemer, «*A self-consistent fluid model for radio-frequency discharges in SiH₄-H₂ compared to experiments*», J. Appl. Phys. **82** (5), 2060 (1997).
- [4] K.W. Morton and D.F. Mayers, «*Numerical Solution of Partial Differential Equations*», Cambridge University Press, (2005).
- [5] L. Lapidus and G. F. Pinder, «*Numerical solution of partial differential equations in science and engineering*» John Wiley & Sons, Inc., (1982).
- [6] J. H. Ferziger and M. Perić, «*Computational methods for fluid dynamics* », Springer, (1999).
- [7] Eric Goncalves « *RESOLUTION NUMERIQUE, DISCRETISATION DES EDP ET EDO* », Thèse de doctorat de Institut National Polytechnique De Grenoble, (2005).
- [8] [Cel.archives-ouvertes.fr/docs/.../MethodesNumeriques_EricGoncalves.pdf](http://tel.archives-ouvertes.fr/docs/.../MethodesNumeriques_EricGoncalves.pdf)
- [9] Gerjan Hagelaar , « *Modeling of microdischarges for display technology*», (2000).
- [10] P.J. Roache, «*Computational Fluid Dynamics*», Hermosa, Albuquerque NM, (1976).
- [11] M.S. Barnes, T.J. Colter, and M.E. Elta, «*Large-signal time-domain modeling of low-pressure rf glow discharges*», J. Appl. Phys. **61** (1), 81-89 (1987).
- [12] Krista G. Marchand , BS Captain, USAF, «*Computational Model Of One-Dimensional Dielectric Barrier Discharges*», Thèse for the Degree of Master of Science (Applied Physics), Department of Defense, or the United States Government, (2005).

- [13] T.E. Nitschke and D.B. Graves, «*A comparison of particle in cell and fluid model simulations of low-pressure radio frequency discharges*», J. Appl. Phys. **76**, 5646 (1994).
- [14] A. Salabas «*Fluid model for charged particle transport in capacitively coupled radio-frequency discharges*», Thèse de doctorat de l'université Tunica de Lisboa (2003).
- [15] J. D. P. Passchier and W. J. Goedheer, «*A two-dimensional model for an argon rf discharge*» J. Appl. Phys. **74** (6), 3744-3751 (1993).
- [16] Jean-Pierre Nougier, «*Méthode de calcul numérique*», Hermes Science, (2001).
- [17] Catalin Vitelaru, «*Caractérisation Du Procédé Plasma De Pulvérisation Cathodique Magnétron À Ionisation Additionnelle Pour La Synthèse De Couches Minces*», thèse, Université de Paris-Sud 11, (2011).
- [18] Tan Vinh Tran, «*Caractérisation Et Modélisation Des Plasmas Micro-Onde Multi-Dipolaires*», Université Joseph Fourier 2006
- [19] Francis T. Crawford and Stephen B. Gabriel; «*Numerical Simulation Of The Hollow Cathode Plasma Using A PIC-DSMC Code*», School of Engineering Sciences, University of Southampton, UK.
- [20] A. Salabas, G. Gousset, L.L.Alves, «*Charged particle transport modelling in silane–hydrogen radio-frequency capacitively coupled discharges*», Science Direct, Vacuum, **69**, pp 213-219, (2003).
- [21] I. Rafatov, E. A. Bogdanov and A. A. Kudryavtsev, «*On the accuracy and reliability of different fluid models of the direct current glow discharge* », Phys. Plasmas **19**, V. 033502 (2012).
- [22] I. Rafatov, E. A. Bogdanov and A. A. Kudryavtsev, «*Account of nonlocal ionization by fast electrons in the fluid models of direct current glow discharge* », Phys. Plasmas **19**, V. 093503 (2012).

Chapitre IV

Résultats et Discussions

IV-1 Introduction

Dans ce chapitre nous présentons, dans un premier temps, les résultats de notre simulation dans le cas d'une décharge continue à basse pression (0.1 - 1 Torr) d'un plasma d'argon confiné entre deux électrodes [1-4].

Le modèle particulaire décrit dans le chapitre II nous a permis d'étudier les caractéristiques électriques de la décharge continue applicable à des basses pressions (0.1 - 1 Torr), en analysant les variations spatiales du champ électrique, des densités électroniques et ioniques, de l'énergie moyenne d'électrons et de la fonction de distribution d'énergie. Le gaz choisi pour tester et valider le modèle proposé est l'argon pur, parce que l'argon est un gaz neutre qui est souvent utilisé comme gaz tampon dans des mélanges incluant par exemple l'oxygène.

De plus, plusieurs travaux expérimentaux et modèles numériques sont disponibles dans la littérature [5] et peuvent être utilisés pour la validation du travail présenté.

Nous présenterons, par la suite, les résultats de l'étude, grâce au modèle proposé, de l'effet de certains paramètres technologiques (pression, émission secondaire, espace inter électrodes...) sur les propriétés de la décharge.

IV-2 Résultats 1D dans le cas d'un plasma non collisionnel

Le modèle de la décharge électrique en courant continu proposé est de type microscopique ou particulaire. Il permet la résolution, dans un plasma non collisionnel, de l'équation de Boltzmann en considérant un nombre fini de particules chargées. Le principe de la méthode PIC (figure II-1) repose sur un maillage de l'espace inter électrodes selon un réseau à une dimension (**1D**).

Le champ électrique \mathbf{E} est déterminé (à l'état stationnaire puis en fonction du temps) par la résolution de l'équation de Poisson. Sa valeur en tout point de coordonnées quelconques

est obtenue par interpolation à partir de valeurs numériques résultantes de la méthode des différences finies.

Une fois le champ électrique déterminé, le code PIC permet le calcul des positions des électrons, en l'absence de collisions, à partir de l'instant initial $t_0 = 0$, en un point donné d'abscisse x_0 , possédant une vitesse initiale v_0 choisie.

Le modèle proposé dans cette étude est élaboré dans le cas d'un plasma d'argon généré par une décharge continue à une pression de 0.1 Torr dans un réacteur composé de deux électrodes planes et parallèles (figure III-1). La cathode est portée à une tension de -250 V et l'anode est reliée à la masse. La dimension de l'espace inter électrodes est de l'ordre de 3 cm.

Les données de base nécessaires pour l'exécution du programme sont la mobilité et le coefficient de diffusion des électrons présents dans le gaz. À basse pression, le produit pression distance (P.d) de l'ordre de 0.3 Torr.cm nous assure une décharge luminescente normale caractérisée par des propriétés électriques et spectrales constantes. Dans ce cas, la mobilité des électrons par la valeur normalisée, prise de la littérature [6], suivante :

$$p \cdot \mu_e = 3 \cdot 10^5 \text{ cm}^2 \cdot \text{V}^{-1} \cdot \text{S}^{-1} \cdot \text{Torr} \quad (\text{IV-1})$$

Le coefficient de diffusion est déduit de cette valeur à travers l'application de la relation d'Einstein (Cf. Chapitre II), en considérant une température électronique T_e de 4 eV (valeur approximative dans le cas d'un plasma froids).

Le pas de temps de calcul est choisi par rapport au processus le plus rapide et satisfait la condition $\omega_{pe} \Delta t < 2\pi$. Pour une pulsation électronique ω_e de $5 \cdot 10^7$ rad/s, ce pas est de $1 \cdot 10^{-7}$ s.

Le pas de maillage choisi est $\Delta x = 0,2$ mm. Il satisfait la condition : $\lambda_D / \Delta x \geq 2$, puisque la longueur de Debye électronique λ_D , calculée avec une densité initiale d'électrons n_0 de 10^{13} cm^{-3} est de l'ordre de 0.2 cm.

La résolution du système d'équations nous a permis de déterminer les distributions spatiales du potentiel, du champ électrique et de la densité d'électrons. Pour valider le modèle,

nous avons examiné deux cas ; un premier cas stationnaire et un second cas où on fait intervenir la variable temps.

IV-2-1 Cas stationnaire

La résolution du système d'équations est effectuée en considérant nul le terme $\partial n_{e,i} / \partial t$ dans les équations de transport des espèces chargées (II.2). Le résultat de la simulation est illustré sur les figures IV-1 (a, b). La distribution spatiale du potentiel entre les deux électrodes (figure IV-1 (a)) montre bien la présence de trois zones distinctes observées expérimentalement et qui sont : La colonne positive qui est le milieu " plasma", dans laquelle le potentiel notée V_p est pratiquement constant et égal à environ 18V dans le cas de cet exemple. Cette zone est limitée par les deux zones sombres qui avoisinent les électrodes. Ce sont les régions de gaines cathodique et anodique où le potentiel varie jusqu'aux valeurs V_A et V_c appliquées aux électrodes.

Le champ électrique (figure IV-1 (a)), en tout point de l'espace inter électrodes, est déterminé à la fois par le potentiel extérieur imposé aux électrodes ($V_c = -250V$, $V_a = 0V$) et par les phénomènes de charges d'espaces dans le plasma. Il est variable au niveau des gaines et nul dans la zone plasma [7].

La distribution spatiale de la densité électronique, illustrée sur la figure IV-1 (b), montre une densité nulle sur les électrodes (conditions aux limites) qui augmente par la suite jusqu'à la valeur maximale dans la zone plasma qui est atteinte au niveau des interfaces gaines – plasma.

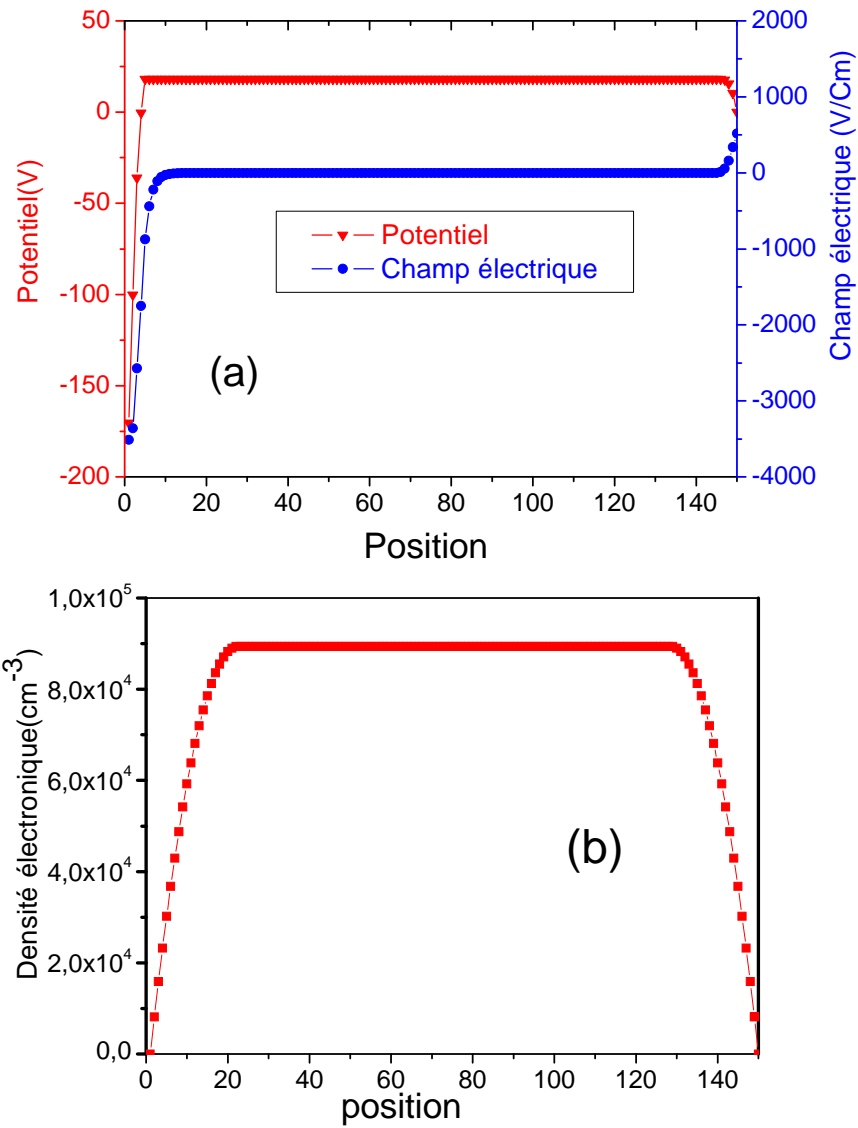
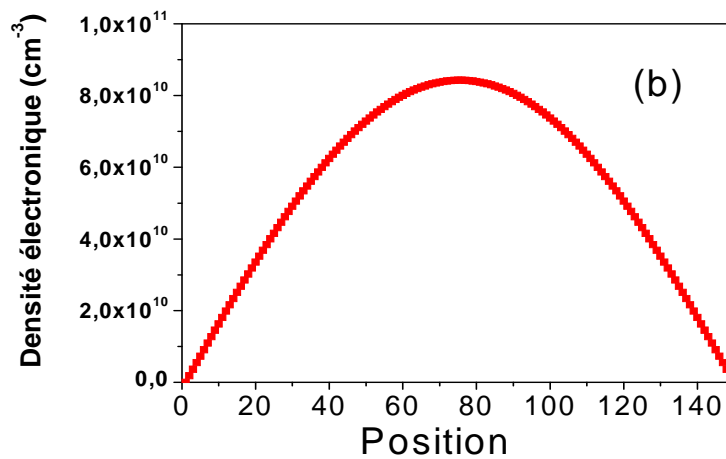
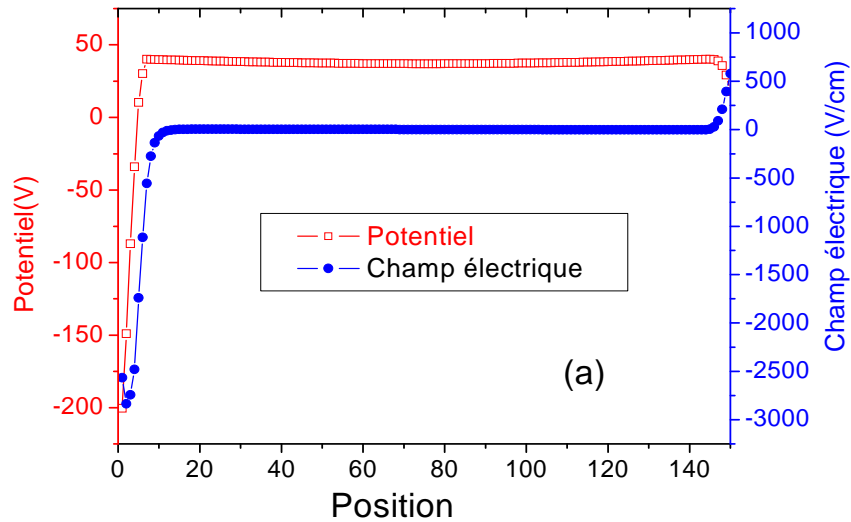


Figure IV-1 : Distribution spatiale à l'état stationnaire : (a) du champ et du potentiel électriques, (b) de la densité électronique.

IV-2-2 Cas non stationnaire

La deuxième étape de notre modélisation correspond au calcul de la trajectoire et de la vitesse des électrons, en considérant la variation de la densité d'électrons avec le temps. Les résultats de la simulation, calculés avec un pas du temps $\Delta t=10^{-7}$ s, sont illustrés sur la figure IV- 2 ci-dessous.



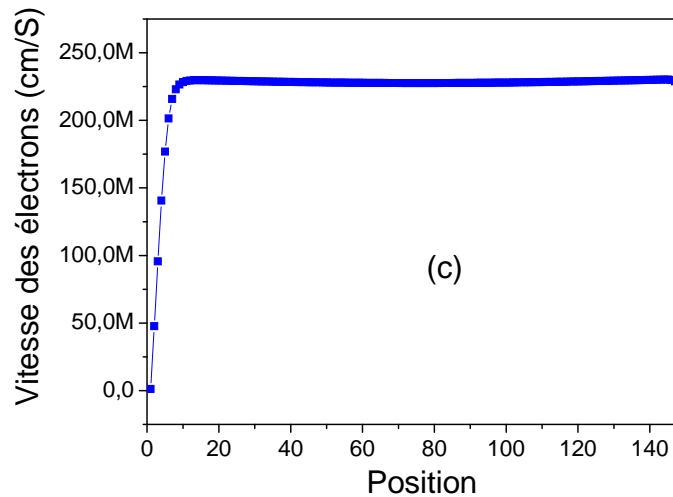


Figure IV-2 : distribution spatiale: (a) du champ et du potentiel électriques, (b) de la densité d'électrons, (c) de la vitesse des électrons

Les courbes obtenues présentent les mêmes profils de potentiel et de champ électriques (figure IV-1 (a)) calculés dans le cas stationnaire. La densité électronique est confinée au cœur du plasma avec une valeur maximale de l'ordre de $8.45 \cdot 10^{10} \text{ cm}^{-3}$ (figure IV-2 (b)). La vitesse de déplacement des électrons (figure IV-2 (c)) est pratiquement constante dans la zone plasma où le champ électrique est nul. Elle est de l'ordre de $2.28 \cdot 10^8 \text{ cm/s}$. Dans les régions de gaines cathodique et anodique, cette vitesse est d'autant plus faible que l'on se rapproche des électrodes.

Nous avons comparé les résultats que nous avons obtenus pour la vitesse des électrons dans l'espace inter électrodes par l'utilisation de la méthode PIC avec ceux obtenus par H. Matsuura et T. Yamamoto [8] dans le cas d'un plasma d'hydrogène avec un pas du temps de l'ordre de $3 \cdot 10^{-7} \text{ s}$ illustrés sur la figure (IV-3). Nous remarquons que le profil de vitesse de l'ion H^+ , illustré sur la figure est en bon accord qualitatif avec celui que nous avons obtenu pour les électrons dans le cas de notre étude. Cet accord se traduit par la constance de la vitesse de la particule, dans la zone plasma et sa variation dans les régions de gaine. Cette comparaison nous a permis d'appuyer la validité de notre modélisation. Nous avons observé un excellent accord entre les deux résultats ce qui a permis de appuyer la validité de notre modélisation.

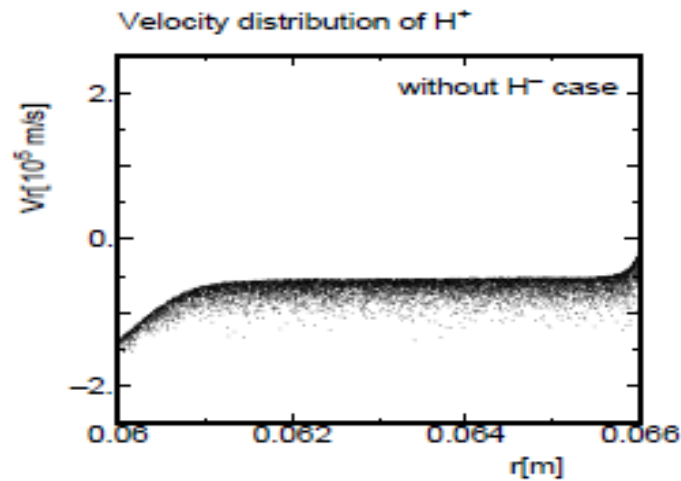


Figure IV-3 : distribution spatiale de la vitesse des H⁺ [8].

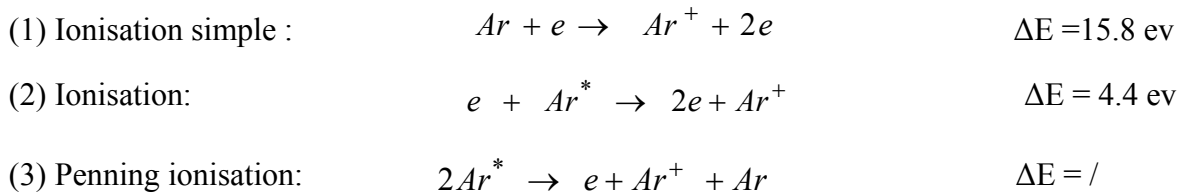
Nous avons présenté dans cette première partie du travail une contribution à la modélisation numérique d'une décharge plasma basse pression non collisionnelle. Et nous avons développé, dans le cas d'un plasma d'argon généré par une décharge continue, un modèle particulaire unidimensionnel, basé sur la méthode PIC (**P**article-**I**n-**C**ell). Ce modèle permet la détermination de l'évolution du potentiel, du champ électrique et de la densité d'électrons dans l'espace inter électrodes, l'espace dans lequel les particules évoluent sous l'action du champ électrique appliqué.

IV-3 Résultats 2D dans le cas d'un plasma collisionnel

Dans le cas des plasmas basse pression, la simulation des trajectoires des particules nécessite la connaissance de tous les processus de collision par leurs sections efficaces de collision. La probabilité d'une collision pendant le temps de vol libre (temps moyen entre deux collisions successives) ne peut être connue sans effectuer des intégrations de sections non-analytiques. L'une des solutions à ce problème consiste à appliquer le concept de «collision null» (concept proposé dans ce travail). Cette technique implique l'introduction d'une section de collision fictive faisant constante la fréquence totale de collision [6, 9,10].

Le but de cette étude est de simuler les distributions des particules chargées (espèces actives dans la décharge électrique), le potentiel, le champ électrique, l'énergie et la vitesse des électrons du gaz (Argon), en utilisant une géométrie à deux dimensions créée dans une décharge DC. Pour confirmer la validité du modèle, les effets de la pression (0,1 Torr-1 Torr) et le temps de vol libre ($5,11 \times 10^{-9}$ à $1,46 \times 10^{-7}$ s) sur ces distributions sont étudiées.

Dans cette section, nous décrivons en détail comment la vitesse d'un électron individuel est simulée. Tout d'abord, nous utilisons l'hypothèse du gaz faiblement ionisé, en tenant compte des collisions électrons-neutres. Un ensemble de réactions chimiques, entre ionisation, excitation, recombinaisons etc..., peut prendre naissance dans le plasma d'argon. Les trois réactions les plus importantes, dans le cas du gaz faiblement ionisé, sont considérées dans notre travail sont présentées ci-dessous [11, 12]:



Avec ΔE l'énergie perdue lors de la réaction.

Le terme Source S_α dans les équations (II-2 et II-8) est déterminé par des procédés d'ionisation :

$$S_e = S_i = n_e N_g k_i \quad (\text{IV-5})$$

Ici, N_g représente la densité de gaz et k_i le coefficient de l'ionisation.

S_ε la perte d'énergie d'électrons dans l'équation (II-10) est obtenue en additionnant la perte d'énergie par collisions sur les réactions considérées.

$$S_\varepsilon = \sum_{i=1}^3 k_i N_g n_e \Delta E_i \quad (\text{IV-6})$$

Les résultats de simulation sont donnés pour une décharge luminescente en courant continu (DC) dans les mêmes conditions précédentes pour une pression de 1 Torr, une température ionique T_i de 300 K (égale à la température du gaz ; cas de plasmas froids) et un taux d'émission secondaire d'électrons $\gamma = 0,03$ à la cathode et $\gamma = 0$ à toutes les autres surfaces. La distribution bidimensionnelle des caractéristiques du plasma est présentée sur les figures (IV-4) - (IV-8) pour illustrer le comportement de cette décharge.

La figure IV-4 et la figure IV- 5 représentent la distribution spatiale des densités électronique et ionique dans la décharge pour un temps de vol libre de $4,99 \cdot 10^{-8}$ s. La densité maximale des espèces chargées est d'environ 10^{13} cm^{-3} . Cette valeur est nettement plus importante que celle obtenue dans le cas d'un plasma non collisionnel. L'évolution observée est due à l'émission d'électrons secondaires par les électrodes et à l'augmentation du processus d'ionisation.

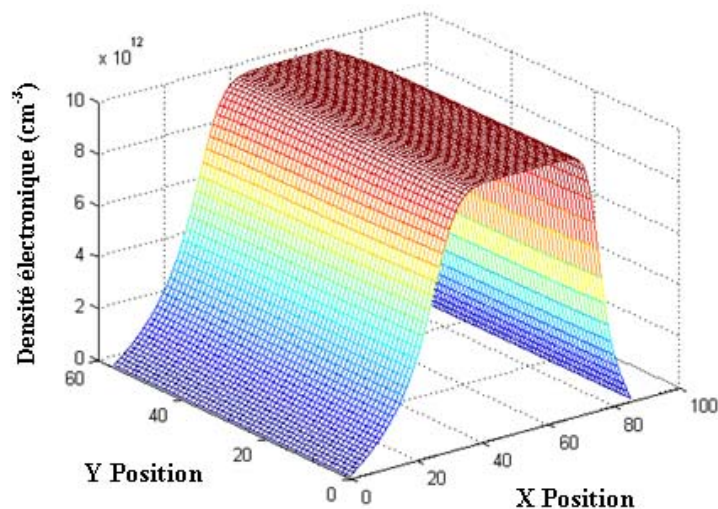


Figure IV- 4: Variation spatiale de la densité électronique

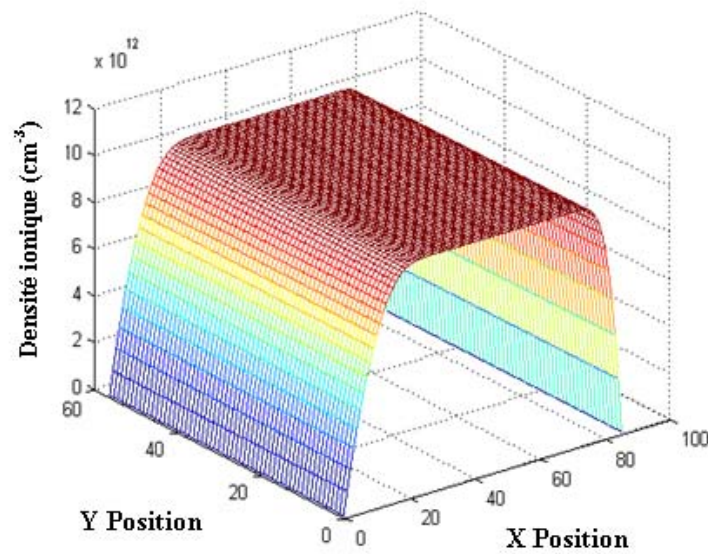


Figure IV- 5: Variation spatiale de la densité ionique

Nous remarquons, d'après la figure IV-6 que le potentiel prend la plus grande valeur, environ 45 V, dans la zone plasma et la plus faible dans la cathode qui est alimenté par une tension négative de -250 V. La figure IV- 7 illustre la répartition spatiale du champ électrique. Dans la gaine cathodique, la variation de champ est linéaire en raison de la chute de potentiel. Le champ est égal à zéro dans la zone plasma, où le potentiel est constant.

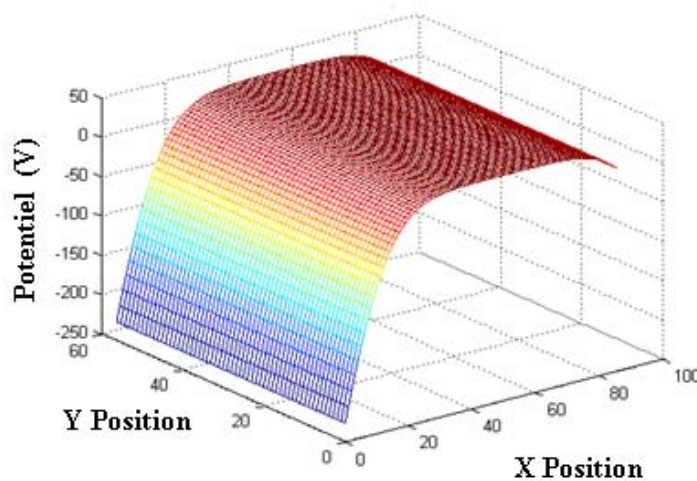


Figure IV- 6: Variation spatiale du potentiel électrique

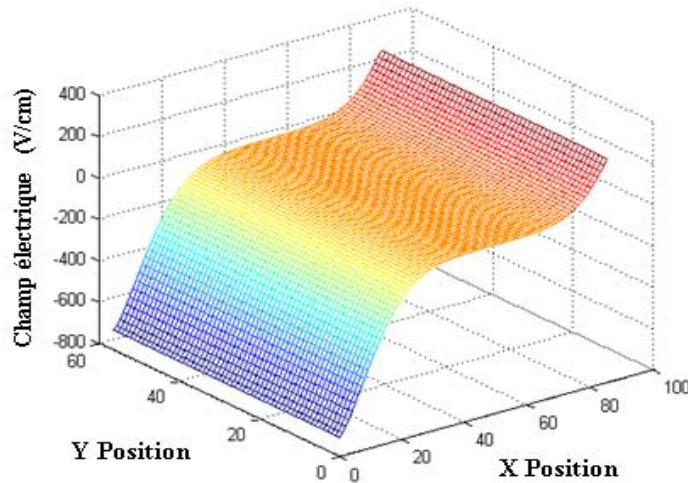


Figure IV- 7: Variation spatiale du champ électrique

La figure IV-8 montre le profil 2D obtenu pour la densité d'énergie moyenne des électrons dans l'espace inter électrodes. Ce profil montre que l'énergie moyenne des électrons ne présente des valeurs importantes que dans les régions de gaines où il présente deux maxima. Il s'agit d'un effet de la forte intensité du champ électrique dans ces régions où la température des électrons est élevée. Ces résultats sont comparés avec la simulation effectuée par I. Rafatov [13], pour $p = 1$ Torr, $V = 250$ V et $L = 1$ cm, pour une décharge lumineuse dans l'argon avec un modèle fluide simple et un modèle fluide étendu, où les coefficients de transport et les taux de réactions chimiques pour les électrons induits sont calculés en fonction de l'énergie moyenne des électrons. La densité d'électrons du plasma obtenu par notre simulation (autour de 10^{13} cm⁻³) pour « P.L = 3 Torr.cm » semble cohérente avec les nouveaux modèles où la densité électronique du plasma est d'environ 10^{11} à 10^{12} cm⁻³, contrairement au modèle fluide étendue où la densité électronique est sous-estimée.

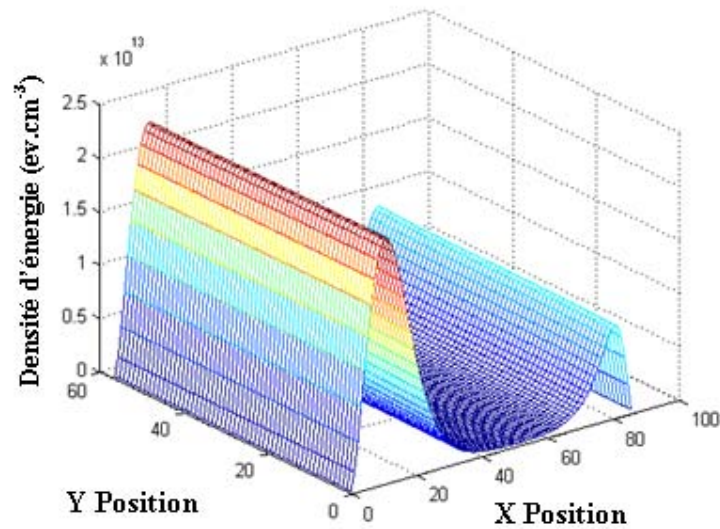


Figure IV-8: Variation spatiale de la densité d'énergie électronique

Suite aux conditions utilisées au niveau de surfaces ouvertes, les différentes caractéristiques illustrées sur les figures IV- (4-8) gardent un profil uniforme le long des électrodes. Par conséquent, dans ce qui suit, nous ne présenterons que le profil axial des caractéristiques étudiées.

La répartition axiale de l'énergie moyenne d'électrons est représentée sur la figure (IV-9). L'énergie des électrons au niveau du bord de la gaine cathodique est très élevée en raison de l'énergie obtenue à partir du champ électrique. La diminution de l'énergie d'électrons après la gaine et dans la région plasma (zone neutre) est due à la perte d'énergie par collision et par le transfert de chaleur par conduction. Cette région est caractérisée par une énergie moyenne faible d'environ 0,04 eV.

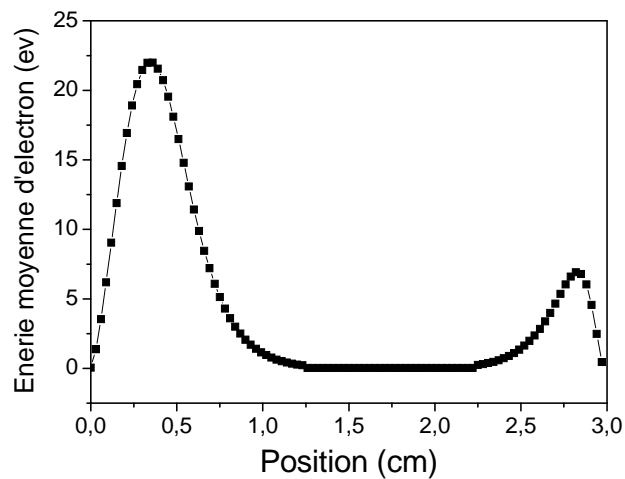


Figure IV-9: Répartition axiale de l'énergie électronique moyenne

La valeur maximale de l'énergie moyenne des électrons dans la gaine cathodique est d'environ 22 eV. Elle correspond à une température électronique de 14,66 eV. Cette valeur est proche de celle obtenue par les deux modèles de la référence [13] mais inférieure à celle obtenue par I. Rafatov et al [11] à l'aide de modèles fluides élaborés par le logiciel COMSOL multiphysics pour un plasma d'argon avec un produit pression-distance de l'ordre de 3 Torr.cm, une tension appliquée de 250 V et un coefficient d'émission secondaire de 0,06 avec un coefficient de diffusion et une mobilité d'électrons constants. Le profil d'énergie moyenne électronique obtenu par I. Rafatov et al est illustré sur la figure (IV-10).

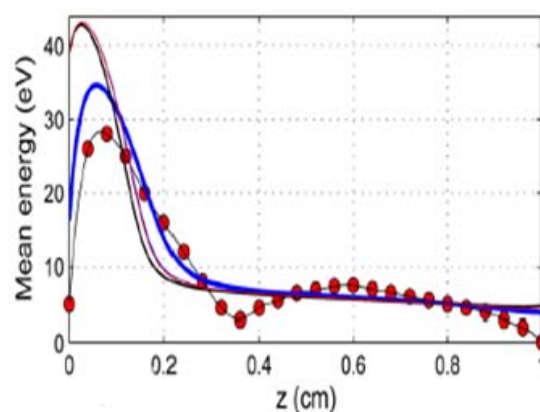


Figure IV-10 : Profil de l'énergie moyenne électronique. Résultat de I. Rafatov et al (en bleu) [11].

La figure (IV-11) montre la distribution spatiale de la vitesse des électrons. Nous avons remarqué que la vitesse sur la cathode est égale à la vitesse initiale (condition de démarrage) puis la variation de la vitesse suit une augmentation dans la gaine. La vitesse des électrons est pratiquement constante, dans la zone plasma où le champ électrique est nul, elle est de l'ordre de $6,2 \cdot 10^6$ cm / s, puis cette vitesse diminue en s'approchant de l'anode. La valeur maximale de la vitesse (zone plasma) est nettement plus faible que celle calculée par la méthode PIC dans le plasma non collisionnel ($2,28 \cdot 10^8$ cm/s). Cette réduction de la vitesse peut être due au freinage des électrons par collisions successives.

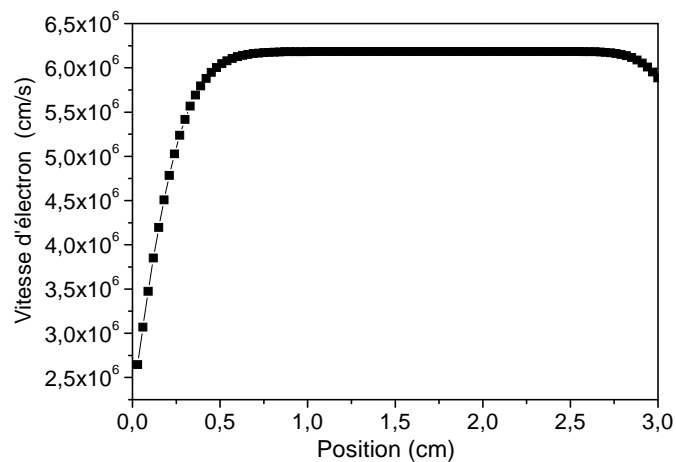


Figure IV-11: distribution axiale de la vitesse des électrons.

Nous avons représenté la distribution en énergie des électrons présents dans le réacteur sur la figure (IV-12). Cette distribution déduite des calculs de densités de charges et d'énergie moyenne présente une faible densité d'électrons avec une énergie relativement élevées (3-12 eV) et une majorité d'électrons avec une énergie moyenne autour de 1 à 3 eV. Le potentiel d'ionisation des atomes correspond à la queue de la distribution d'énergie des électrons, ce qui explique le faible taux d'ionisation des plasmas froids. Il est important de noter que la plage d'énergie de la plupart des électrons est comprise entre 1-3 eV.

Nous retrouvons, avec le profil de cette distribution, le profil de la distribution Maxwellienne donnée par l'équation I-10 (Chapitre I) qui confirme la répartition en énergie des particules dans un système isotrope, homogène et sans force extérieure.

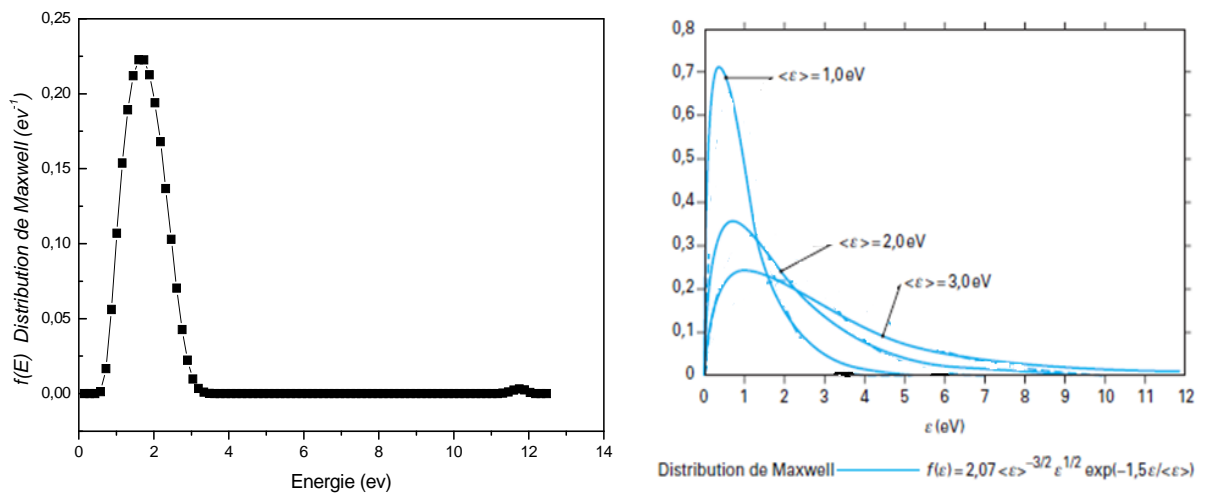


Figure IV-12: Distribution d'énergie des électrons

Nous remarquons d'après cette figure qu'un faible nombre d'électrons possède des énergies relativement élevées (3-12 eV) alors que l'énergie de la majorité des électrons se retrouve autour de 1 à 3 eV. Le potentiel d'ionisation des atomes correspond à la queue de la distribution d'énergie des électrons, ce qui explique le faible taux d'ionisation des plasmas froids. Il est important de noter que la plage d'énergie de la plupart des électrons est comprise entre 1-3 eV.

IV-4 Influence des paramètres technologiques sur les caractéristiques de la décharge

Après avoir validé le modèle proposé pour une décharge continue dans un plasma d'argon élaboré avec une pression de 1 Torr, une distance inter électrodes de 3 cm, un coefficient d'émission secondaire γ de 0.03 et une température du gaz de 300 K. Nous utilisons dans ce qui suit, le modèle élaboré pour étudier l'effet de certains paramètres technologiques, tels : la pression, le temps de vol libre, l'émission secondaire d'électrons par la cathode et la dimension de l'espace inter électrodes sur les différentes caractéristiques de la décharge, particulièrement la densité et l'énergie électroniques.

IV-4 -1 Influence de la pression de gaz

Sur les figures (IV-(13-15)), nous avons représenté respectivement les variations du profil : de potentiel, du champ électrique, de la densité des électrons au niveau de la gaine et de l'énergie moyenne des électrons pour différentes valeurs de la pression dans la gamme (0.1 - 1 Torr). Le choix de ces valeurs est conditionné par le produit Pression. distance qui ne doit pas dépasser 10 Torr.cm, lorsque la pression varie de 0,1 Torr à 1 Torr. Les résultats de simulation sont donnés avec un incrément de temps (dt) de $3,98 \times 10^{-11}$ s.

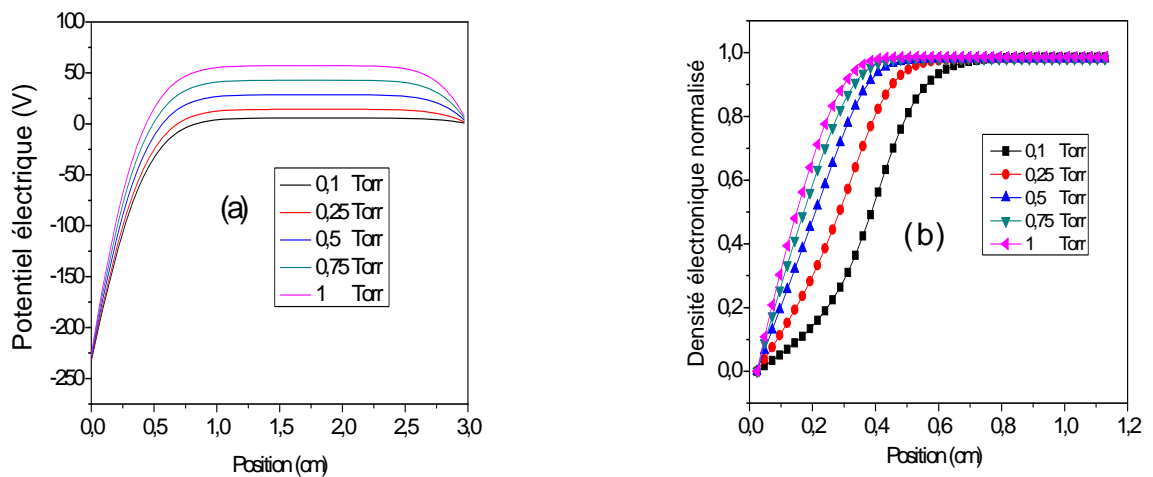


Figure IV-13: Effet de la pression sur : (a) le profil du potentiel et (b) la distribution normalisée de la densité des électrons dans la gaine cathodique.

Les courbes obtenues montrent clairement que l'effet de l'augmentation de la pression provoque une augmentation dans le potentiel plasma V_p avec un rétrécissement simultané de l'épaisseur de la gaine (voir la figure IV-14).

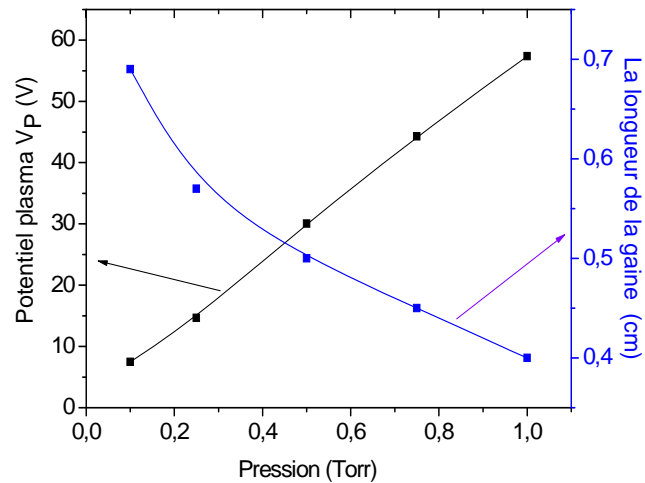


Figure IV-14: Effet de la pression: le potentiel plasma et la longueur de la gaine

La figure (IV-15) montre une augmentation du champ électrique et de l'énergie moyenne des électrons dans les gaines. Ces résultats confirment bien que l'énergie transférée par le champ électrique engendre une augmentation de l'énergie moyenne électronique au niveau des gaines.

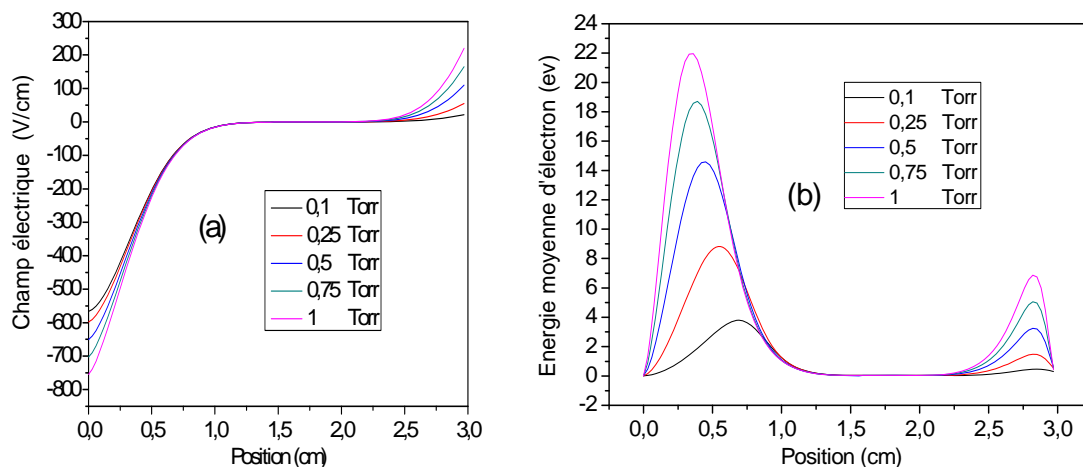


Figure IV-15: Effet de la pression sur : (a) le champ électrique et (b) l'énergie électronique.

Selon la figure IV-16 nous constatons que lorsque la pression augmente la vitesse des électrons dans la colonne positive diminue. La vitesse passe de $6,4 \times 10^7$ cm / s sous une pression de 0,1 Torr à la valeur de $6,2 \times 10^6$ cm / s sous une pression de 1 Torr.

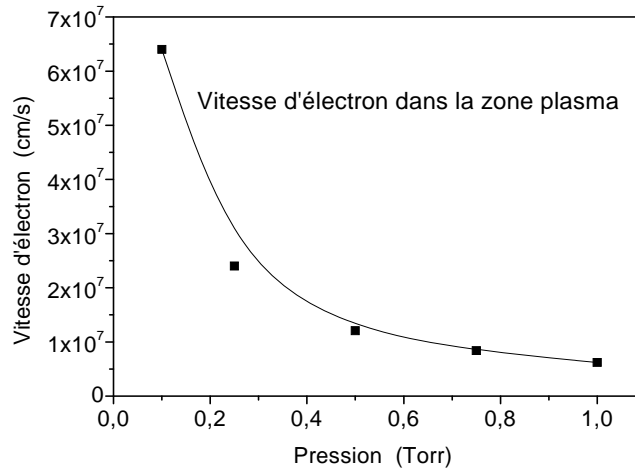


Figure IV-16: Effet de la pression sur la vitesse des électrons dans la zone plasma

IV-4-2 Influence du temps de vol libre (t_{vol})

Le modèle présenté est testé pour plusieurs valeurs de temps de vol libre. La simulation est effectuée pour une pression de 1 Torr. La figure IV-17 montre la variation de la densité d'électrons dans l'espace inter électrodes en fonction du temps de vol libre. Les courbes montrent un rétrécissement de la zone plasma avec l'augmentation du t_{vol} .

En effet, cette augmentation du temps de vol libre est directement liée à une réduction du nombre de collisions entre les particules qui produisent une diminution de la zone de plasma.

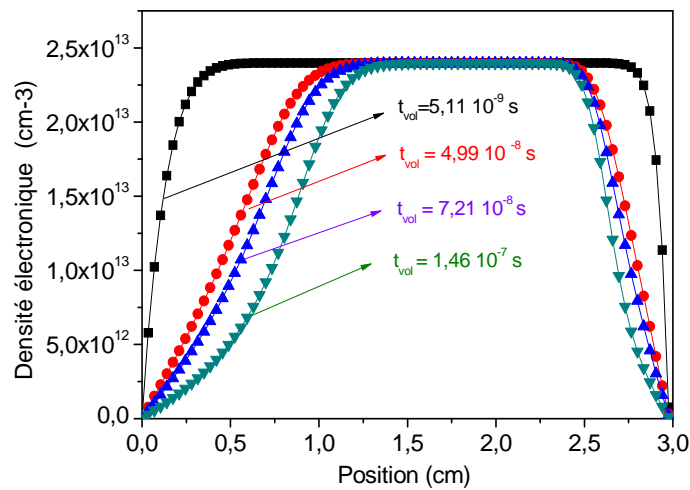


Figure IV-17: La variation de la densité des électrons dans l'espace inter-électrodes en fonction du temps de vol libre.

Sur la figure IV-18, nous avons représenté l'évolution spatiale de l'énergie moyenne des électrons pour différentes valeurs de temps de vol libre. Les courbes obtenues montrent clairement la présence des deux maxima d'énergie (E_{max1} et E_{max2}) dans les gaines dont la position et l'intensité évoluent avec le temps de vol libre t_{vol} .

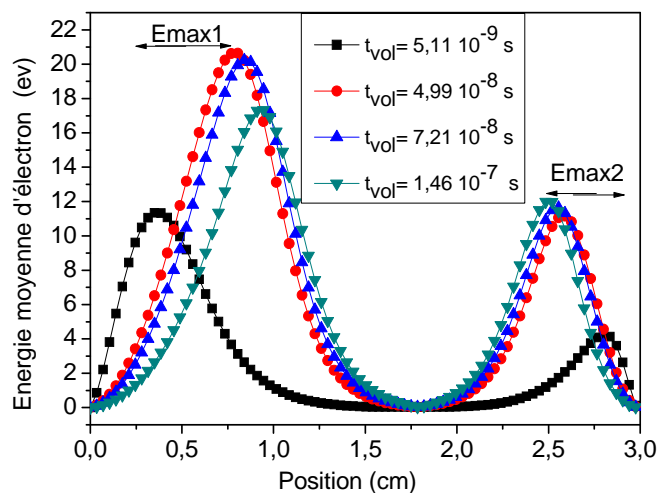


Figure IV-18: L'évolution spatiale de l'énergie moyenne des électrons pour différentes valeurs du temps de vol libre.

L'intensité E_{max2} augmente avec la valeur de t_{vol} . En effet, le moment le plus important des valeurs de temps de vol libre correspond à moins de collisions, ce qui signifie moins de perte d'énergie (voir figure IV-19).

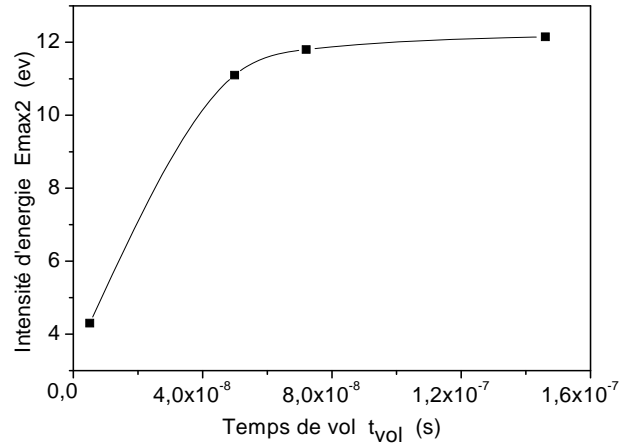


Figure IV-19: L'intensité de E_{max2} pour différentes valeurs de temps de vol libre.

L'exploitation complète de la figure IV-17 et la figure IV-18 nous donne l'évaluation de la largeur de la gaine et la position du maximum d'énergie E_{max1} (par rapport à la cathode) avec le temps de vol libre. Les courbes obtenues montrent une augmentation similaire des deux paramètres avec le temps de vol libre t_{vol} (voir Figure IV-20).

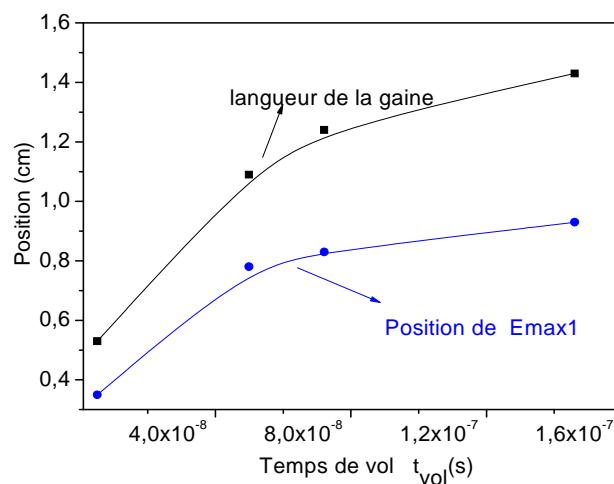


Figure IV-20: La longueur de la gaine et de la position du maximum d'énergie E_{max1} pour différents valeurs de temps de vol libre.

Dans cette partie de notre travail, nous avons considéré un modèle collisionnel d'une décharge DC à basse pression dans l'argon pour une configuration à deux dimensions et en prenant en considération la notion de collision nulle. Les résultats de notre simulation sont illustrés en termes de variation dans l'espace inter électrodes du potentiel, du champ électrique et des densités de charges et de l'énergie moyenne électronique. Nous avons exploité cette simulation pour étudier l'effet de la pression de gaz et du temps de vol libre sur les caractéristiques électrique du plasma. Les résultats indiquent que le modèle collisionnel proposé est en bon accord avec les caractéristiques du plasma à des pressions comprises entre 0,1 et 1 Torr. En outre, nous avons corrélié l'augmentation du temps de vol libre de $5,11 \times 10^{-9}$ à $1,46 \times 10^{-7}$ s avec l'augmentation simultanée de l'épaisseur des gaines et la valeur du maximum d'énergie moyenne d'électrons.

IV-4-3 Effet de l'émission secondaire sur les caractéristiques électriques de la décharge luminescente continue

Un des objectifs principaux de notre code est l'utilisation d'un modèle réaliste pour l'émission d'électrons secondaires par la surface de l'électrode. Cette émission sous l'action d'un ion est décrite par le coefficient représentant le nombre d'électrons secondaires produits à la cathode par ion, généralement connu sous le nom de rendement d'électrons par ion et notée γ [14]. Ce coefficient dépend de la matière de la cathode et de la nature du gaz [15, 16].

Nous rapportons dans notre étude, l'effet de la variation du coefficient d'émission secondaire γ sur les caractéristiques de décharge. Pour mieux illustrer l'effet de γ , nous avons présenté, dans un premier temps, une étude comparative de modèles traités avec et sans la prise en compte du coefficient γ . Par la suite, nous avons donné les résultats de la simulation sur l'effet de la modification de γ sur les caractéristiques du plasma afin de déterminer la valeur qui valide le modèle.

a- L'effet de l'émission secondaire des électrons

Nous avons abordé l'étude de l'effet de l'émission secondaire, des électrons par la cathode, sur les caractéristiques de la décharge par une étude comparative de ces caractéristiques calculées avec un coefficient d'émission secondaire γ nul (pas d'électrons secondaire dans la décharge) et un coefficient d'émission secondaire γ égal à 0.3.

Les résultats de la simulation des caractéristiques de la décharge sont présentés sur la figure IV-21 en termes de profils de la densité électronique, du potentiel et du champ électrique.

La forme du profil de la densité électronique est comparable dans les deux cas (Figure IV-21 (a)). Cependant, la densité d'électrons prévue lorsque γ est négligée est de l'ordre de $9,95 \times 10^{12} \text{ cm}^{-3}$. Elle est nettement inférieure à celle ($1,9 \times 10^{13} \text{ cm}^{-3}$) calculée avec $\gamma = 0,3$. La distribution du potentiel électrique représente une différence moyenne de 20 V pour le potentiel plasma V_p (figure IV-21 (b)).

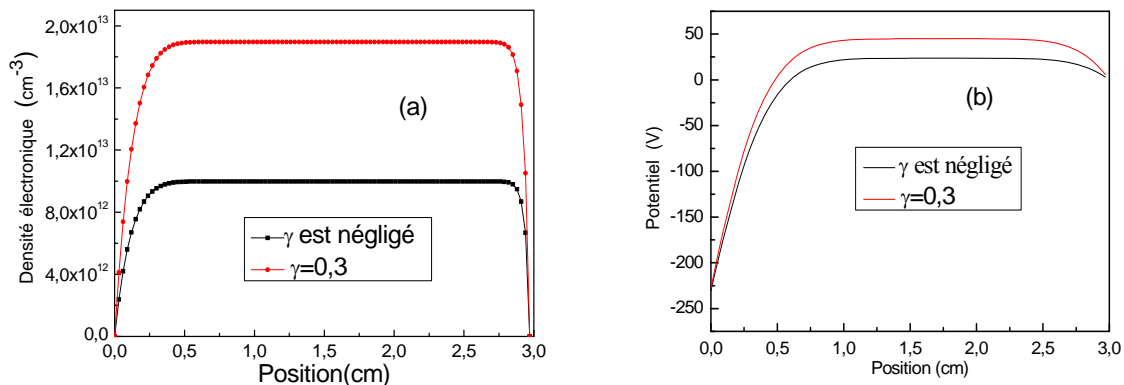


Figure IV-21: Distribution axiale de: (a) la densité d'électrons et (b) le potentiel électrique. La ligne noire indique les résultats de la simulation lorsque γ est négligé, et la ligne rouge montre les résultats de simulation pour $\gamma = 0,3$.

Les résultats présentés ici indiquent que le coefficient d'émission secondaire peut être un paramètre important dans la décharge. Ainsi, pour un calcul précis, un coefficient d'émission secondaire doit être inclus dans les conditions aux limites, de manière à décrire le processus de création des électrons secondaires et le maintien la décharge de façon plus réaliste.

L'effet de l'émission secondaire sur le champ électrique et l'énergie moyenne d'électrons est représenté sur la figure IV-22 (a, b).

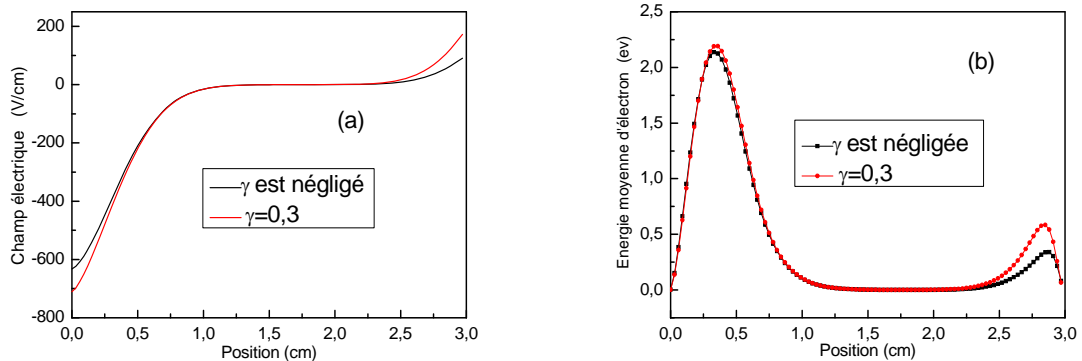
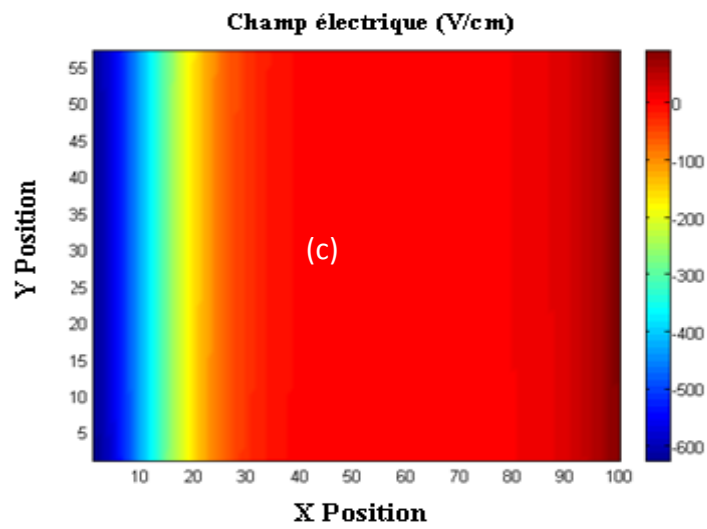
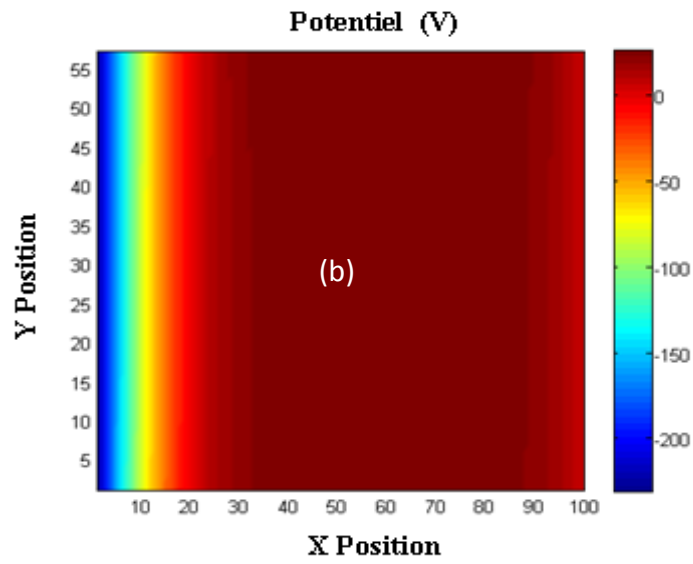
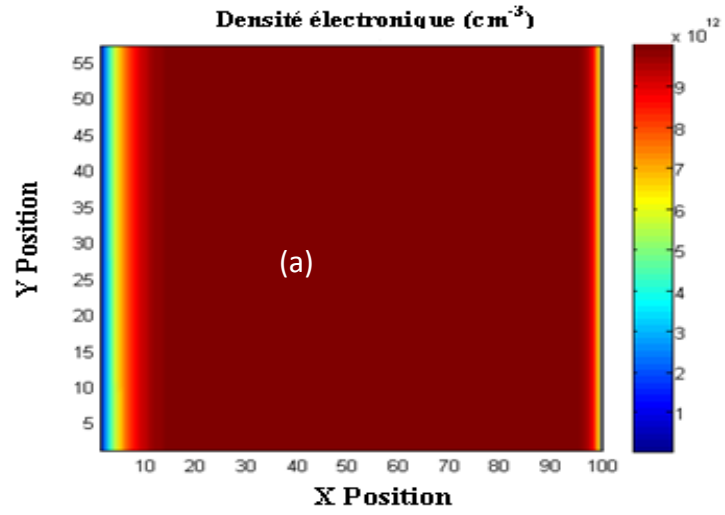


Figure IV-22 : Distribution axiale: (a) du champ électrique et (b) : de l'énergie moyenne des électrons. La courbe noire indique les résultats de la simulation pour $\gamma = 0$ et la courbe rouge montre les résultats de simulation pour $\gamma = 0,3$.

En présence de l'émission secondaire ($\gamma = 0,3$), l'augmentation du champ électrique dans les gaines conduit à une augmentation des pics de l'énergie moyenne d'électrons. La chute de l'énergie des électrons dans la zone plasma est due à la perte d'énergie par collision et par le transfert de chaleur par conduction.

Enfin, les résultats de la simulation bidimensionnelle de la décharge à courant continu d'un plasma d'argon avec $\gamma = 0,3$, une pression de 0,1 Torr et un espace inter-électrodes fixe $d = 3$ cm, sont représentés sur la figure IV-23, en termes de densité d'électrons, de potentiel, du champ électrique et de l'énergie moyenne des électrons.



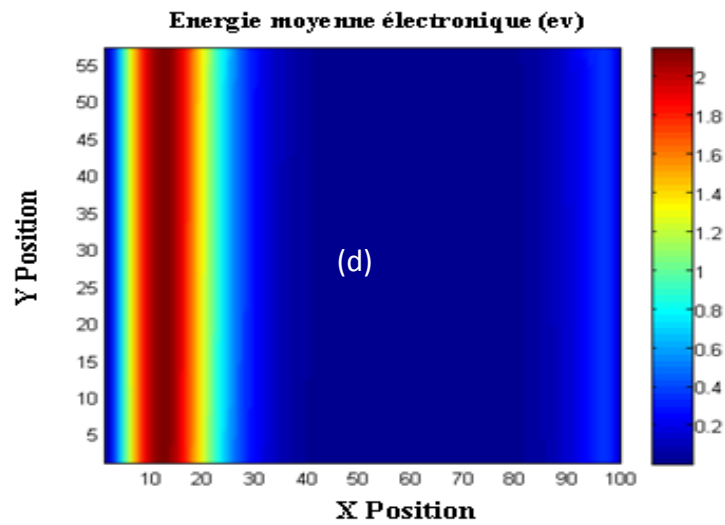


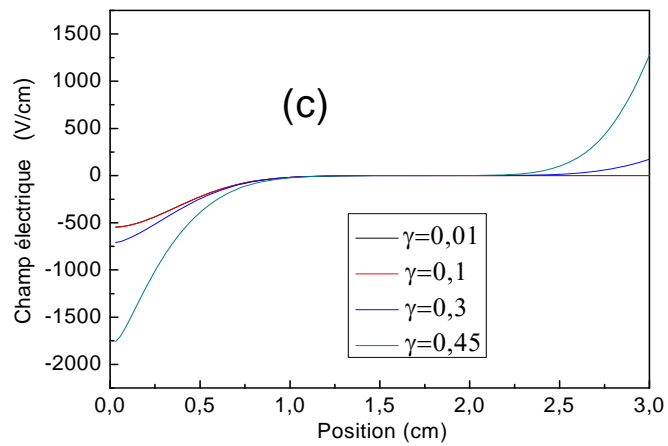
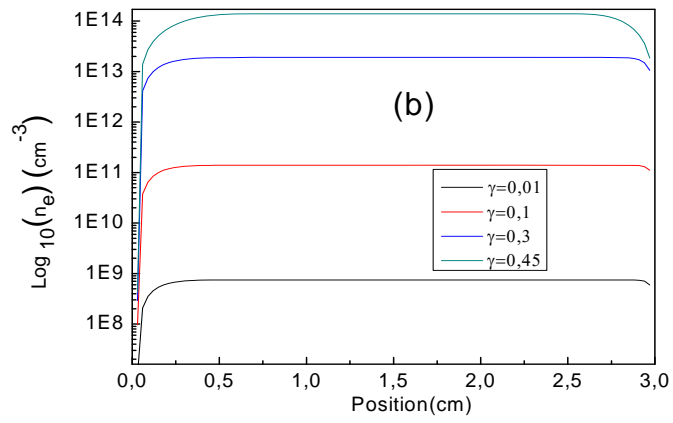
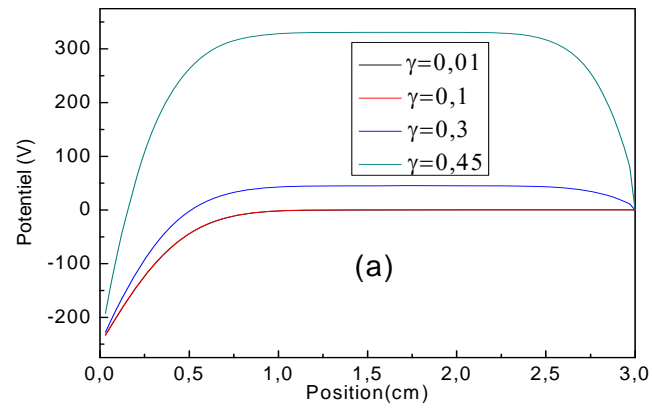
Figure IV-23 : La distribution spatiale : (a) du potentiel électrique, (b) de la densité d'électrons, (c) du champ électrique et (d) de l'énergie moyenne des électrons.

Cette figure montre que, selon les conditions considérées aux surfaces ouvertes, les différentes caractéristiques abordées dans cette étude présentent une distribution uniforme dans la zone de décharge.

b- Influence de la variation du coefficient d'émission secondaire

Après avoir observé l'effet d'un taux d'émission secondaire non nul ($\gamma = 0.3$) sur les caractéristiques du plasma d'argon. Nous présentons dans ce qui suit l'étude de l'effet de la variation de ce paramètre. Nous avons maintenu constantes toutes les données du modèle et nous avons simulé la décharge pour des valeurs de γ variant de 0.01 jusqu'à 0.45.

L'effet du coefficient d'émission secondaire γ sur les profils axiaux des caractéristiques du plasma est représenté sur la figure IV-24 pour la décharge continue dans l'argon.



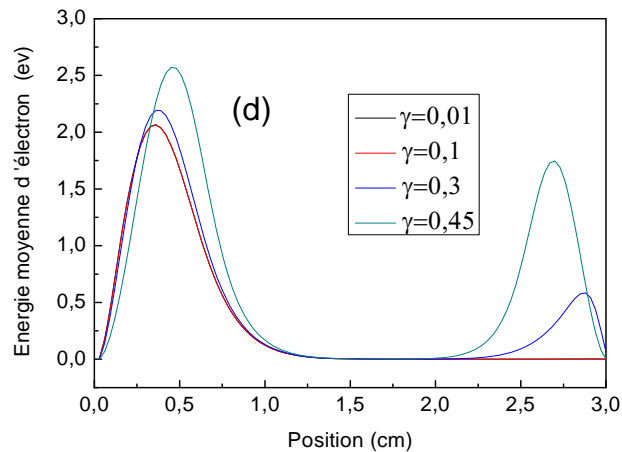


Figure IV-24 : Influence du coefficient d'émission secondaire γ sur: (a) le potentiel électrique, (b) la densité d'électrons, (c) le champ électrique, et (d) l'énergie moyenne des électrons

D'après la figure IV-24, nous remarquons que l'augmentation de la valeur de γ conduit à une augmentation du potentiel plasma de 1,35 V pour $\gamma = 0,01$ à 330,16 V pour $\gamma = 0,45$ et le rétrécissement de la région plasma (zone neutre). Nous notons également une augmentation de l'énergie moyenne des électrons dans les gaines (figure IV-24 (d)) en raison de l'augmentation de l'énergie acquise par l'augmentation du champ électrique (figure IV-24 (c)). Il est également montré que l'augmentation du coefficient γ provoque un accroissement important de la densité d'électrons (à partir de $7,45 \times 10^8 \text{ cm}^{-3}$ à $1,40 \times 10^{14} \text{ cm}^{-3}$) dans la zone centrale du plasma (figure IV-24 (b)). Cette augmentation est due à une ionisation supplémentaire dans la zone plasma par des électrons secondaires. Les résultats obtenus montrent l'importante influence de l'émission secondaire sur les caractéristiques électriques de la décharge à des valeurs plus élevées de γ (supérieure à 0,01). La valeur la plus élevée du coefficient d'émission secondaire peut produire une avalanche dans laquelle la charge positive sur la surface attire plus d'électrons et entraîne une augmentation de la densité électronique. Selon cette analyse, les prédictions du modèle sont correctes pour les valeurs obtenues pour $\gamma = 0,3$, en particulier le résultat obtenu pour le potentiel plasma $V_p = 45,07 \text{ V}$ qui est en accord avec les valeurs rapportées dans la littérature [17].

Dans les modèles de décharge luminescente, les coefficients d'émissions secondaires γ sont généralement considérés comme les principales sources d'incertitude. Toutefois, les résultats

de la modélisation présentés ici, montrent bien que l'émission secondaire à partir d'électrodes peut être un paramètre important qui contrôle les caractéristiques de la décharge. Pour un code bien précis, l'émission secondaire doit être considérée et son coefficient doit être correctement choisi, de manière à décrire les processus de création d'électrons secondaires.

IV-4-4 Influence de la distance inter-électrodes

La géométrie du réacteur joue un rôle important dans les technologies plasma. Il est important d'étudier la mise à l'échelle des dimensions du réacteur à plasma tels que sa distance inter électrodes. Cette section analyse la variation des caractéristiques du plasma avec l'évolution de la distance considérée entre les deux électrodes du réacteur. L'étude est réalisée pour un plasma d'argon à une pression de 0,1 Torr et une tension appliquée de -250 V, avec un coefficient d'émission secondaire γ de 0,3, en adoptant trois valeurs différentes de d (3 cm, 3,5 cm et 4 cm). Pour des valeurs du produit pression distance (P.d) variant de 0.3 jusqu'à 0.4 nous sommes toujours dans le régime d'une décharge luminescente, l'augmentation du produit pression distance (P.d) au-delà de 10 Torr.cm implique une augmentation très rapide du champ électrique pour obtenir l'ignition de la décharge comme est montré sur les courbes de **Paschen** (Cf. figure I-14, Chapitre I) [18].

Les résultats de notre simulation sont illustrés sur les figures IV-25 et 26 en termes de variation dans l'espace inter électrodes des densités d'électrons et d'ions, du potentiel et champ électriques et de l'énergie moyenne électronique.

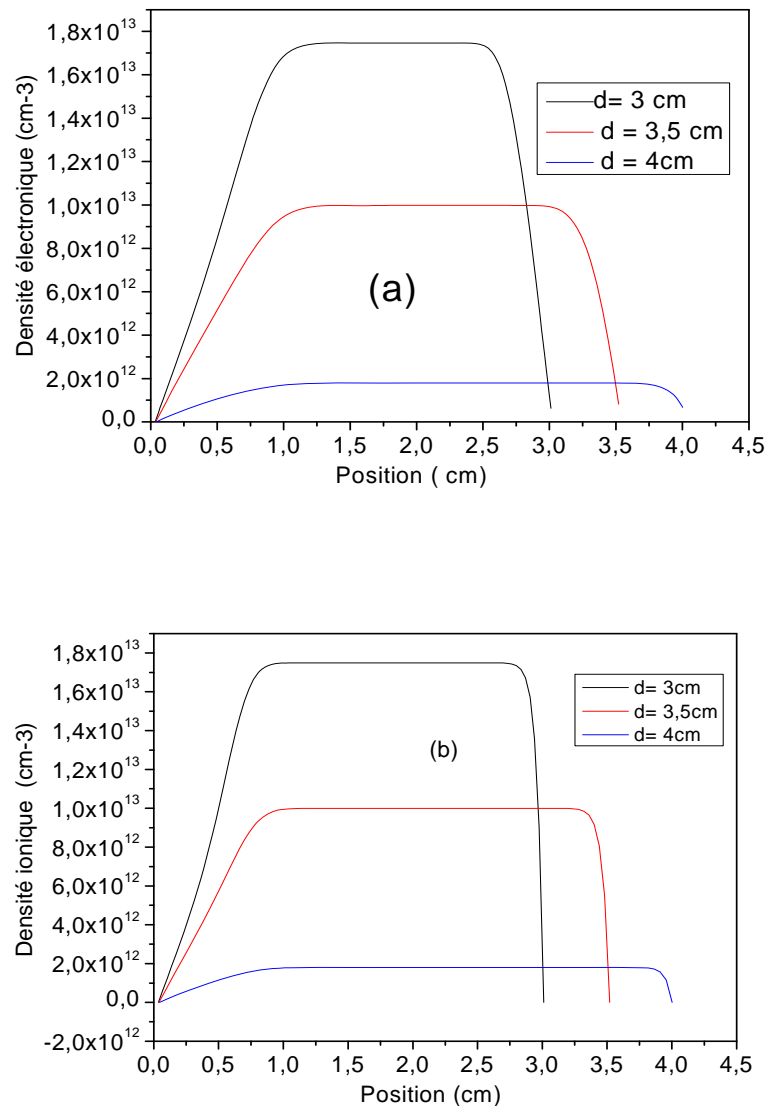


Figure IV-25 : La distribution axiale de: (a) la densité électronique, (b) la densité ionique pour différentes valeurs de d .

D'après la figure IV-25, nous remarquons que plus l'espace inter électrodes est réduit, passage de 4 à 3 cm, plus la zone plasma (région neutre) devient étroite avec une densité de charge plus importante. La densité de charge augmente de $1,86 \cdot 10^{12} \text{ cm}^{-3}$ à $1,75 \cdot 10^{13} \text{ cm}^{-3}$ lorsque la distance inter électrodes diminue de 4 à 3 cm. En effet, la réduction de l'espace inter électrodes, en laissant la pression du gaz constante entraîne une évolution de la densité de charge.

Les figures IV-26 (a) et (b) montrent bien une réduction de la zone neutre avec la diminution de la distance d et une augmentation du potentiel plasma (voir figure IV-27).

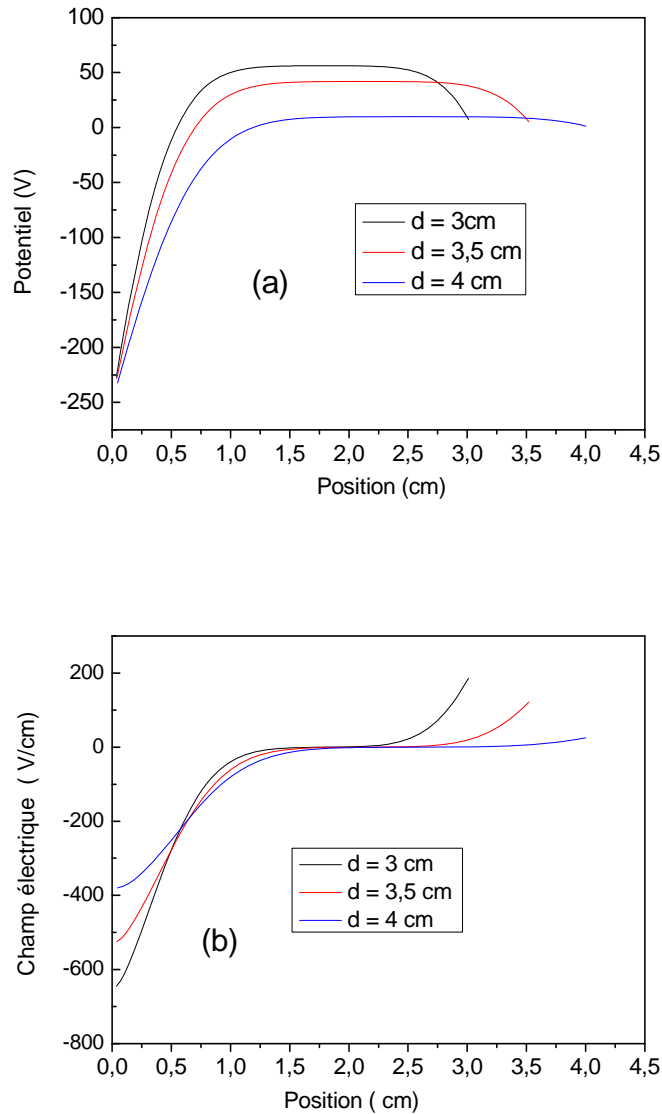


Figure IV-26: Distribution axiale de: (a) le potentiel électrique et (b) le champ électrique.

Pour différentes valeurs de d

Par ailleurs pour allumer un plasma, la tension de claquage pour le gaz doit être dépassée. Cette tension dépend de l'électrode, de l'espacement d et de la pression P [18].

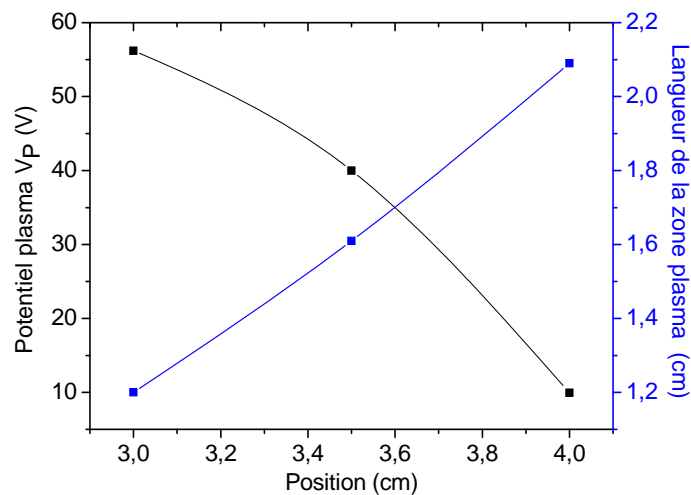


Figure IV-27 : Le Potentiel plasma et la longueur de la zone plasma Pour différentes valeurs de d .

L'augmentation de la valeur du champ électrique dans la zone cathodique, avec la réduction de la distance d , influe sur l'énergie des électrons et leur procure une température d'autant plus importante que la distance d est faible. Nous avons représenté sur la figure IV-28 l'évolution spatiale de l'énergie moyenne des électrons pour différentes valeurs de d . Les courbes obtenues montrent clairement que les deux maxima d'énergie (E_{max1} et E_{max2}) situés au niveau des gaines varient avec la distance d .

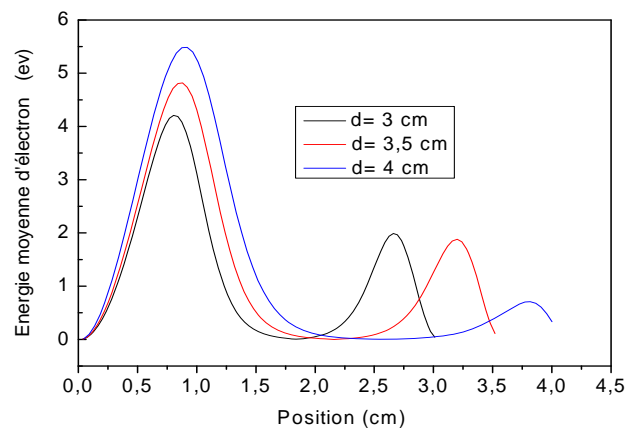


Figure IV-28 : L'énergie moyenne d'électrons pour différentes valeurs de d

Par ailleurs, l'augmentation de la valeur du champ électrique dans la région de cathode et la réduction de la distance d affectent l'énergie des électrons et leur donnent une énergie

beaucoup plus élevée que la distance d est supérieure. La figure IV-29 montre que l'énergie augmente de 4,45 eV à 5,45 eV lorsque d augmente de 3 à 4 cm. Mais dans la région d'anode, l'énergie diminue de 5,4 eV à 4,4 eV lorsque d augmente de 3 à 4 cm (voir figure IV-29).

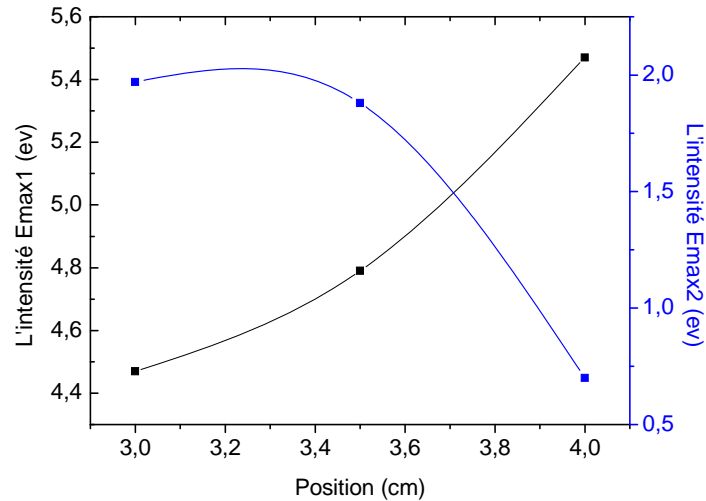


Figure IV-29: L'intensité Emax1 et Emax2 pour différentes valeurs d

Ces résultats sont comparés avec la simulation effectuée par A.Salabas [19] pour un plasma radio fréquence d'hydrogène, à une pression de 0,5 Torr et une tension appliquée V_{rf} de 200 V. Les simulations utilisent un rayon d'électrode constant $R = 6,4$ cm, en adoptant trois autres valeurs de d : 2,4 cm, 3,2 cm et 6,4 cm pour des produits $P \cdot d$ variant de 1,2 à 1,6 Torr cm. Les résultats obtenus par A.Salabas sont illustrés sur la figure (IV-30) en termes de distribution axiale de la densité électronique et du potentiel électrique pour différentes valeurs de d .

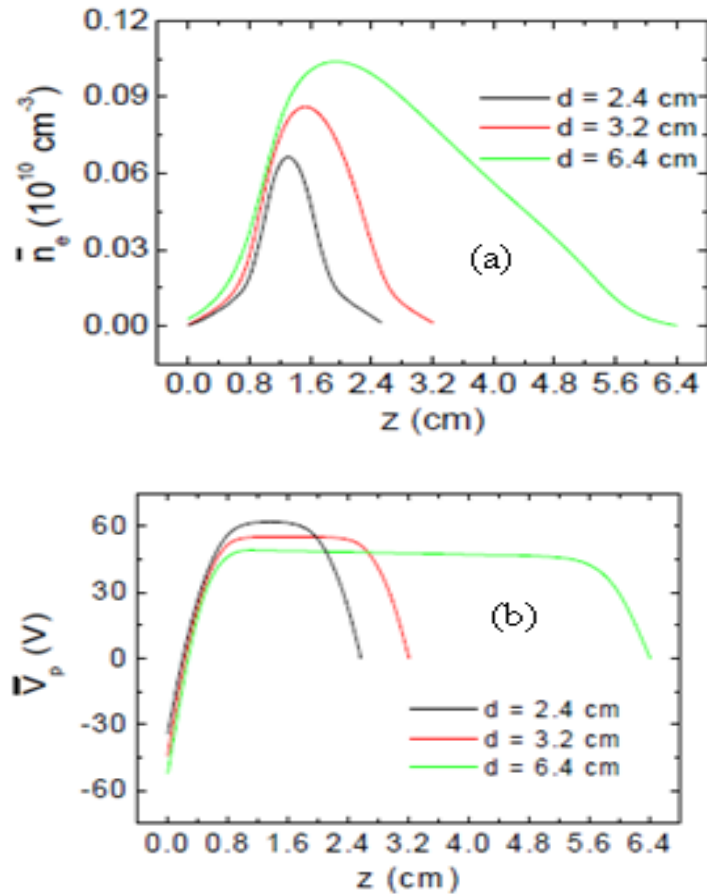


Figure IV-29: La distribution axiale: (a) de la densité électronique et (b) du potentiel électrique [19].

Le profil de la densité électronique en fonction de la distance inter-électrodes est analysés sur la figure IV-30 (a). Une observation de cette figure montre que: (i) la valeur maximale de la densité d'électrons est peu affecté par les variations de d , passant de $7 \cdot 10^8 \text{ cm}^{-3}$ à $d = 2,4 \text{ cm}$ à $1.1 \cdot 10^9 \text{ cm}^{-3}$ à $d = 6,4 \text{ cm}$, (ii) à des valeurs faibles de d , la densité maximum d'électrons est symétrique situé entre les électrodes, mais elle s'écarte vers l'électrode haute fréquence à décharges asymétriques produites à des distances plus grandes entre les électrodes, (iii) le profil de densité à proximité de l'électrode RF devient plus droit aux grandes valeurs de d . En cas de variation de d de 2.4 cm à 6.4 cm , le potentiel diminue de 14 V (voir figure (IV-29 (b))).

L'étude de l'effet de la distance de l'espace inter électrodes d , montre clairement que la réduction de l'espace inter-électrodes produit une augmentation de la densité d'électrons, dans la zone neutre, et une augmentation de la valeur du champ électrique dans la région de la cathode, tout en affectant l'énergie des électrons dans les gaines.

IV-5 Conclusion

Un modèle numérique de type particulière PIC-MC basé sur le concept de "collision nulle" pour le traitement des collisions a été explicité dans ce chapitre pour étudier les caractéristiques électriques et énergétiques dans les décharges DC maintenues à des basses pressions dans l'argon. Les espèces chargées du plasma prises en compte sont les électrons, les ions positifs d'argon Ar^+ . Nous avons étudié l'effet de certains paramètres tel que : la pression du gaz, le temps de vol libre, le coefficient d'émission secondaire et l'espace inter électrodes sur les caractéristiques (densité de charge, potentiel et champ électrique et énergie moyenne d'électrons) du plasma.

Références bibliographiques du chapitre IV

- [1] F. Bouanaka, S. Rebiai, H. Bahouh, S. Sahli, «*PIC-MC Simulation Method Of DC Discharge Plasma*», Advanced Materials Research, Vol 227(2011), PP 121-124.
- [2] F. Bouanaka, S. Rebiai, H. Bahouh, S. Sahli, «*Modeling of low pressure collisional argon plasma in DC discharge* »,Global Journal of Physical Chemistry, Volume 2 | Issue 2 | 2011.
- [3] F. Bouanaka, S. Rebiai « *Pressure and Free Flight Time Effects on Glow Discharge Characteristics*», *International Journal of Computer Applications* (0975 – 8887) Volume 72– No.1, May (2013).
- [4] F. Bouanaka, S. Rebiai, «*Effect of secondary emission on argon glow discharge characteristics* », The International Review of Physics (IREPHY), Vol 7, N° 1, ISSN1971-680X, February 2013.
- [5] Gerhard Franz, « *Low Pressure Plasmas and Microstructuring Technology* », Springer-Verlag Berlin Heidelberg 2009.
- [6] S. Roy and B. P. Pandey «*Modeling low pressure collisional plasma sheath with space-charge effect* », PHYSICS OF PLASMAS VOLUME 10, NUMBER 6, (2003).
- [7] F. Bouanaka, S. Rebiaï, H. Bahouh, S. Sahli, « *Numerical Modeling Of Electron's Trajectories In Cold Plasma By PIC Method* », M. J. Condensed Matter Volume 12, Number 3, December 2010.
- [8] H.Matsuura, et al. « *Velocity distributions in the Hydrogen plasma sheath with negative ions*», Proc. PSS-2005/SPP-22, 573, (Nagoya, 2005)
- [9] A. Bogaerts, R. Gijbels, « *Hybrid Monte Carlo—fluid modeling network for an argon/hydrogen direct current glow discharge* », Spectrochimica Acta Part B. 57, 1071. (2002)

- [10] I. Denysenko, K. Ostrikov, and P.P. Rutkevych et al, « *Numerical simulation of nanoparticle-generating electronegative plasmas in the PECVD of nanostructured silicon film* », Computational Materials Science, 30 303, (2004)
- [11] I. Rafatov, E. A. Bogdanov and A. A. Kudryavtsev, « *On the accuracy and reliability of different fluid models of the direct current glow discharge* », Phys. Plasmas 19, V. 033502 (2012)
- [12] N. Balcon, « *Atmospheric pressure Radio Frequency discharges, diagnostic and numerical modeling* », Thèse Doctorat Université Toulouse III - Paul Sabatier, (2007).
- [13] I. Rafatov, E. A. Bogdanov and A. A. Kudryavtsev, « *Account of nonlocal ionization by fast electrons in the fluid models of a direct current glow discharge* », Phys. Plasmas 19, V. 093503 (2012)
- [14] Laurent Juliet and Jean-François Roussel, « *Numerical Modeling of Plasma Sheath Phenomena in the Presence of Secondary Electron Emission* », IEEE TRANSACTIONS ON PLASMA SCIENCE, VOL. 30, NO. 1, (2002)
- [15] Yasushi Motoyama, Hideomi Matsuzaki, and Hiroshi Murakami, « *A Study of the Secondary Electron Yield of Insulator Cathodes for Plasma Display Panels* » IEEE Transactions On Electron Devices, Vol. 48, No. 8, (2001)
- [16] Min Sup Hur, Jae Koo Lee, Hyun Chul Kim, and Bong Koo Kang, « *The Effective Coefficient of Secondary Electron Emission in Plasma Display Panel* », IEEE Transactions On Plasma Science, VOL. 29, NO. 5, (2001)
- [17] Heon Chang Kim, Yong Tae Sul, *Member, IEEE*, and Vasilios I. Manousiouthakis, « *On rapid computation of time periodic steady State in Simulation of capacitively coupled RF plasma* », IEEE TRANSACTIONS ON PLASMA SCIENCE, VOL. 32, NO. 2, April 2004.
- [18] A. Schütze, J.Y. Jeong et al, « *The Atmospheric-Pressure Plasma Jet: A Review and Comparison to Other Plasma Sources* », IEEE transactions on plasma science, Vol. 26, No. 6, December 1998.
- [19] A. Salabas, « *Fluid model for charged particle transport in capacitively coupled radio-frequency discharges* », thèse de Universidade Técnica De Lisboa, 2003.

CONCLUSION

GENERALE

Conclusion générale

Le plasma est plus fréquemment présent dans de nombreuses applications industrielles. C'est un domaine de recherche très actif que ce soit du point de vue technique d'élaboration et utilisation ou du point de vue modélisation et simulation.

Notre travail de recherche est une contribution à la modélisation des décharges plasmas dans le cas des basses pressions. Notre étude a été basée sur la connaissance et la maîtrise des propriétés physico-chimiques du plasma réactif en fonction des divers paramètres opératoires contrôlant la décharge électrique (pression, nature du gaz plasmagène, source d'excitation, distance inter-électrodes du réacteur,...). Elle est essentielle pour les applications industrielles comme par exemple le dépôt de nano-films minces ou la gravure plasma à basse pression, le traitement de surface

A cet effet, notre étude a été axée sur l'élaboration d'un modèle numérique de décharge plasma de type particulaire. Cette étude nous a permis une description précise de l'évolution des particules dans un système (réacteur) à deux dimensions dans le cas d'un plasma d'argon sous l'effet du champ électrique appliqué.

Dans un premier temps nous avons proposé un modèle numérique de type particulaire PIC-MC dans le cas des décharges DC en langage MATLAB. Cette étude a pour objet d'introduire les concepts élémentaires permettant de construire un code de simulation particulaire utilisable en physique des plasmas. Nous avons décomposé notre simulation en deux parties :

- ✚ La première est consacrée à l'étude du comportement électrique du plasma est réalisée à l'aide d'un modèle PIC (Particle-In-Cell) qui est bien adapté aux plasmas basse pression non collisionnels. Le code particulaire (**PIC**) présenté résout numériquement les équations du mouvement d'un électron soumis à une différence de potentiel, en utilisant les lois de la mécanique classique. Il permet, dans un premier temps, la détermination du champ électrostatique locale **E** par la résolution de l'équation de Poisson, puis le calcul de la position et de la vitesse de la particule en mouvement, en l'absence de collision.

- ✚ La deuxième partie est centrée sur l'élaboration du modèle de type **PIC-MC** qui est utilisé pour la simulation de l'électrodynamique des particules chargées dans le plasma. La simulation des trajectoires de ces particules nécessite la connaissance de tous les processus collisionnels, à travers leurs sections efficaces de collision.

Les résultats sont donnés en termes de distribution spatiale des densités d'ions, d'électrons, de variation du champ électrique et du potentiel, de l'énergie moyenne et de la vitesse des électrons dans l'espace inter électrodes.

Nous avons exploité cette simulation pour étudier l'effet de certains paramètres technologiques, tels : la pression, le temps de vol libre, l'émission secondaire d'électrons par la cathode et la valeur de l'espace inter- électrodes sur les différentes caractéristiques du milieu plasma.

L'étude de l'influence de la pression de gaz et du temps de vol libre sur les caractéristiques électriques du plasma a indiqué que le modèle collisionnel proposé fournit un bon accord avec les caractéristiques du plasma à des pressions comprises entre 0,1 et 1 Torr. En outre, nous avons corrélé l'augmentation du temps de vol libre à partir de $5,11 \times 10^{-9}$ à $1,46 \times 10^{-7}$ s avec l'augmentation simultanée de l'épaisseur des gaines et la valeur du maximum d'énergie moyenne des électrons.

Nous avons aussi étudié l'effet de l'émission secondaire des électrons, par bombardement ionique de la cathode, sur les caractéristiques électriques de la décharge luminescente continue. Les résultats de la modélisation présentés ont montré que l'émission secondaire d'électrons à partir d'électrodes peut être un paramètre important qui contrôle les caractéristiques de décharge. Pour un code bien précis, l'émission secondaire doit être considérée et son coefficient doit être correctement choisi, de manière à décrire les processus de création d'électrons secondaires. Selon cette analyse, les prédictions du modèle semblent cohérentes pour les données obtenues pour $\gamma = 0.3$, et particulièrement la valeur obtenue pour le potentiel plasma $V_p = 45,07$ V qui est en accord avec les valeurs rapportées dans la littérature.

En fin, Nous avons étudié l'effet de la distance inter électrode d (de 3 à 4 cm) et nous avons constaté que plus l'espace inter électrodes est réduit plus la zone plasma devient étroite

avec une densité de charge plus importante. De plus nous avons remarqué une augmentation de la valeur du champ électrique dans la zone cathodique, tout en affectant l'énergie des électrons dans les gaines.

Comme perspective à ce travail, il serait intéressant d'introduire dans le modèle plus de réactions chimiques, que celles utilisées, pour tenir compte de toutes les interactions susceptibles de se produire dans le plasma d'argon. Un autre aspect qui serait intéressant à développer et de traiter le modèle en considérant la variation des coefficients de transport en fonction de l'énergie électronique et de ne plus les considérer constants. En fin, après avoir validé le modèle pour un gaz simple, nous envisagerons de l'appliquer à un gaz moléculaire, donc plus complexe.

ملخص

خصصت هذه المذكرة لوضع ودراسة تحليلية لنموذج رقمي ذي بعدين للتفريغات الكهربائية للبلازما تحت ضغط منخفض. يتم تطبيق النموذج النظري المقترح في مفاعل يتألف من قطبين متقابلين ومتوازيين، حيث يربط المهبط بجهد سالب يقدر بـ 250 V. تستند المدونة المقترحة على حل معادلة الاستمرارية المرتبطة بمعادلة Poisson و معادلة الطاقة. لتمثيل مسارات و سرعة الجسيمات يتطلب منا معرفة جميع عمليات الاصطدام من قبل مقاطعها المشتركة. احتمال الاصطدام أثناء فترة الحركة الحرة لا يمكن أن يعرف دون معرفة التكامل من المقاطع غير التحليلية. الحل المقترح لهذه المشكلة يتمثل في تطبيق مفهوم "لا تصادم". و يستخدم Matlab لحل المعادلات التفاضلية الجزئية التي تحكم سلوك التفريغ. لتأكيد صحة و فعالية هذا النموذج يجب دراسة تأثير الضغط، وزمن الحركة الحرة، والانبعاثات الثانوية لإلكترونات من سطح القطب وتأثير المسافة بين القطبين على خصائص البلازما.

الكلمات المفتاحية :

التفريغات الكهربائية للبلازما ، نموذج رقمي ، مفاعل البلازما ، الجسيمات المشحونة ، الانبعاثات الثانوية لإلكترونات

RÉSUMÉ

Le présent travail développe et teste un modèle de simulation d'une décharge luminescente continue (DC) à basse pression. Le modèle théorique proposé est appliqué à un plasma d'argon collisionnel dans un réacteur constitué de deux électrodes planes et parallèles, où la cathode est alimentée par une tension de -250 V. Le code proposé est basé sur la résolution de l'équation de continuité couplée à l'équation de Poisson et l'équation de l'énergie moyenne électronique. La simulation des trajectoires et la vitesse des électrons nécessite la connaissance de tous les processus de collision définis par leurs sections efficaces. La probabilité de collision durant un temps de vol libre ne peut être connue sans effectuer des intégrations non-analytiques. La solution proposée à ce problème consiste à appliquer la notion de "collision nulle". La simulation est effectuée en utilisant la méthode des différences finies. Le logiciel **Matlab** est utilisé pour résoudre les équations aux dérivées partielles qui régissent le comportement de la décharge. L'étude de l'influence de la pression, le temps de vol libre, le coefficient de l'émission secondaire des électrons issus de la surface de l'électrode et la distance inter-électrodes sur les caractéristiques du plasma sont aussi étudiés.

Mots clés — *Décharge PlasmaDC, Plasma d'Argon, modélisation, Méthode des différences finies, Modèle PIC-MC, espèces chargées, Potentiel Plasma, Energie moyenne d'électron.*

ABSTRACT

The present work develops and tests a computationally model of a DC glow discharge in low pressure. The proposed theoretical model is applied to collisional argon plasma in a reactor consisting of two plane parallel electrodes where the cathode is heated to a voltage of -250 V. The proposed code is based on solving the continuity equation coupled with Poisson's equation and electrons mean energy's equation. The particles trajectories simulation requires the knowledge of all collisional processes through their collision cross sections. The probability of collision during a free flight time can not be known without performing integrations of non-analytical cross sections. The proposed solution to this problem consists in the application of the "null collision" concept. The simulation is carried out using finite difference method. **Matlab** software is used to solve the partial differential equations that govern the behavior of the discharge. The study of the pressure, the free flight time, the secondary emission of electrons from the electrode surface and the inter-electrodes distance effect, on the plasma characteristics, confirms the validity of this model.

Keywords— *DC glow discharge, argon plasma, modeling, finite difference method, PIC-MC model, charged particles, plasma potential, electron mean energy.*