

République Algérienne Démocratique et Populaire

MINISTÈRE DE L'ENSEIGNEMENT SUPÉRIEUR ET DE LA
RECHERCHE SCIENTIFIQUE
UNIVERSITÉ MENTOURI DE CONSTANTINE
FACULTÉ DES SCIENCES DE L'INGÉNIEUR

Département d'Electronique

N° d'ordre :

Série :

Mémoire

Présenté pour obtenir le diplôme de **Magister**
En Electronique

OPTION

Systèmes Microélectroniques et Matériaux
Par

Mme Amel BERKANE

THEME

**CONTRIBUTION A LA COMPREHENSION
DE PROCESSUS SE PRODUISANT
LORS DE L'ELABORATION DE FILMS
DANS UN PLASMA FROID**

Soutenu le : 20/06/2006

Devant le jury composé :

Président:

F. HOBAR

Prof. à l'Université de Constantine

Rapporteur:

S. REBIAI

M.C. à l'Université de Constantine

Examineurs :

M.H. LATRECHE

Prof. à l'Université de Constantine

S. SAHLI

Prof. à l'Université de Constantine

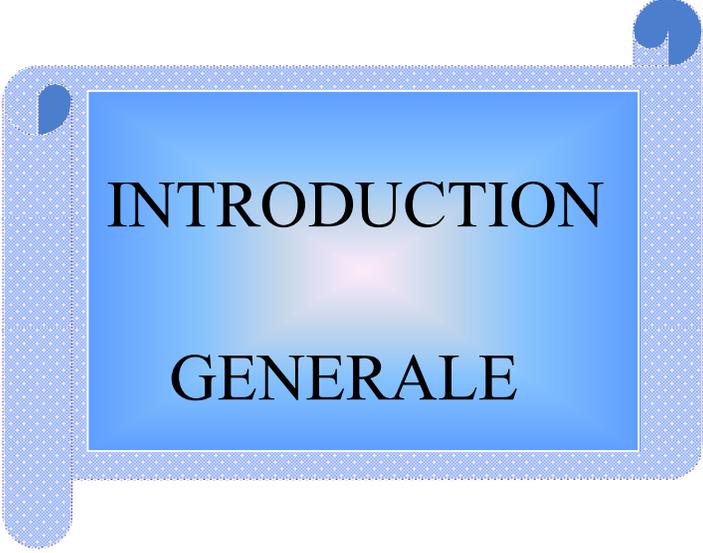
Invité :

M. AFRID

Prof. à l'Université de Constantine

Ce travail a été supporté par l'action intégrée **CMEP.04MD4613**

This document was created with Win2PDF available at <http://www.daneprairie.com>.
The unregistered version of Win2PDF is for evaluation or non-commercial use only.



INTRODUCTION

GENERALE

This document was created with Win2PDF available at <http://www.daneprairie.com>.
The unregistered version of Win2PDF is for evaluation or non-commercial use only.



Introduction générale

Le terme « plasma » a été introduit en 1928, par le physicien américain I. Langmuir pour désigner, dans les tubes à décharge, certaines régions contenant un gaz ionisé, électriquement neutre. Par la suite, plusieurs applications technologiques ont stimulé le développement de la physique des plasmas. Par exemple, citons les études de la décharge dans les gaz pour des applications liées notamment à l'éclairage et au transport d'énergie électrique à de très hautes tensions pour la production de la lumière cohérente intense dans les lasers à gaz et aussi pour le traitement des surfaces.

Les procédés de traitement des surfaces par plasmas froids se sont développés depuis plus de vingt ans dans plusieurs secteurs industriels :

- Dans l'industrie microélectronique pour :
 1. Le nettoyage des surfaces de silicium
 2. La gravure anisotrope des motifs
 3. Le dépôt des couches minces diélectriques pour la passivation des surfaces
 - D'autres applications sont possibles dans :
 4. La protection des matériaux (par exemple les métaux) contre l'humidité ou la corrosion
 5. Le dépôt sur des membranes polymères des films barrières imperméables à la vapeur d'eau et à l'oxygène (en vue de conditionnement d'aliments)
 6. La modification des propriétés des surfaces comme la dureté ou la mouillabilité des matériaux pour rendre bio compatible des prothèses implantées dans le corps humain.
- Cette technologie intéresse donc des secteurs aussi divers que la métallurgie, l'industrie agro-alimentaire, l'automobile, l'espace, le secteur médical etc.

L'intérêt croissant de ces procédés vient du fait que l'activation électrique permet le traitement à des températures du gaz et surtout du substrat beaucoup plus basses que l'activation thermique classique.

Jusqu'à il y a peu de temps et parce qu'on n'arrivait pas à faire plus, la conception et la mise au point des équipements industriels se sont effectuées presque uniquement par voie empirique grâce à des campagnes longues et coûteuses.

Mais, le progrès de la connaissance scientifique et des ordinateurs a consisté à analyser tous les phénomènes existants puis à les lier au sein de modèles cherchant à représenter le fonctionnement des réacteurs plasmas.



Introduction générale

Le travail que nous présentons dans ce mémoire porte sur une contribution à la compréhension des processus se produisant dans un réacteur lors de l'élaboration de films par plasmas froids, en prenant en considération à la fois les phénomènes :

- électriques, tels que le champ et le potentiel, liés à la décharge,
- énergétiques liés aux collisions entre particules,
- hydrodynamiques liés à l'écoulement du gaz dans l'espace inter électrodes
- et chimiques liés aux interactions des molécules entre elles et avec les surfaces.

L'objectif de cette étude étant la présentation des divers modèles numériques qui permettent l'identification des différents phénomènes physico-chimiques intervenant dans le réacteur de dépôt par plasmas froids. Pour présenter ce travail, nous avons décomposé ce mémoire en quatre chapitres :

- Le premier chapitre est consacré à la présentation non exhaustive des notions fondamentales concernant les décharges par plasmas. Nous décrivons les paramètres caractéristiques du plasma ainsi que les différents types de décharge dans le plasma et présentons le mécanisme de dépôt de couches minces.

- Dans le deuxième chapitre, après une description brève des différentes techniques de diagnostics du plasma, nous évoquons les différentes approches expliquant le fonctionnement d'un réacteur plasma, avec l'écriture des équations mathématiques pour le modèle fluide utilisé pour la décharge électrique, dans notre travail.

- Le troisième chapitre est centré sur l'élaboration du modèle hydrodynamique. Un traitement numérique des équations de continuité et de Navier– Stokes, pour un mélange gazeux présent dans un réacteur à écoulement longitudinal, est développé, pour prédire le profil de l'écoulement gazeux depuis l'entrée du réacteur jusqu'à sa sortie.

- Dans le quatrième chapitre, nous montrons le modèle fluide de la décharge électrique que nous avons réalisé dans le but de comprendre le comportement électrique de la phase gazeuse du plasma. Nous décrivons, dans un premier temps, le traitement numérique des équations de continuité et de quantité de mouvement pour les espèces chargées (électrons–ions) et leur couplage avec l'équation de Poisson, tout en exprimant les hypothèses et les approximations prises en considération dans cette première initiative. Nous présentons, par la suite, les résultats de cette simulation numérique en terme de distribution des espèces chargées ainsi que de champ électrique, dans l'espace inter électrode. Cette série de chapitre est suivie par une conclusion générale où nous présentons l'ensemble des résultats acquis par ce travail et où nous donnons les grandes lignes des perspectives envisagées pour la suite de ce travail.

This document was created with Win2PDF available at <http://www.daneprairie.com>.
The unregistered version of Win2PDF is for evaluation or non-commercial use only.

ABSTRACT

The aim of the work presented in this memory consists in describing the different processes that get involved in a reactor at the time of the formation of films elaborated by cold plasmas. It represents a contribution to the clarification of three models. An electrical discharge model, a hydro dynamical model, and the last consist of a mass transfer model whose coupling leads to the global modeling of the reactor.

Taking into account some simplifying hypotheses, we developed two models of simulation, the first is hydrodynamic, it concerns the gas flow distribution between the equal area electrodes, and the second one is electric, to describe the distribution of the charged species and the electric field, in the dc glow discharge. The two elaborate models are based on the finite volume method.

A numeric treatment of the steady state Navier - Stokes equations for a present gas mixture in a longitudinal -flow reactor has been developed to obtain the gas velocity field between the equal area electrodes. The results gotten thanks to the fluid model are compliant with those gotten in the literature.

Keywords:

Plasma, Fluid model, glow discharge, hydrodynamic model.

This document was created with Win2PDF available at <http://www.daneprairie.com>.
The unregistered version of Win2PDF is for evaluation or non-commercial use only.

CHAPITRE I

PHYSIQUE DES PLASMAS ET
TECHNIQUES DE DEPOT

I-1 Introduction

La technique de dépôt chimique assisté par plasma est actuellement très exploitée dans la fabrication de composants électroniques, dans le traitement de surfaces ainsi que dans le dépôt de nouveaux matériaux à basse température ayant des propriétés physico-chimiques, électriques et optiques intéressantes [1, 2, 3].

Dans ce chapitre, nous présentons quelques généralités sur les plasmas ainsi que les décharges électriques. Nous rappelons les différents processus de collisions et évoquons les différentes techniques de dépôt de films minces.

I-2 Définition d'un plasma

- Le plasma est souvent défini comme le quatrième état de la matière dans la séquence solide – liquide - gaz. C'est un milieu partiellement ou complètement ionisé et macroscopiquement neutre.

- Le plasma est constitué :

- de particules neutres : atomes et /ou molécules
- d'ions positifs et/ou négatifs
- d'électrons
- de photons
- et de radicaux.

Sa neutralité se traduit par [4, 5, 6]:

$$n_p = n_e + n_n$$

Où - n_p (n_n) est la densité d'ions positifs (négatifs)

- n_e est la densité d'électrons.

Cette neutralité est la conséquence des forces électrostatiques très intenses qui apparaissent dès que l'on a [7] $n_e \neq n_i$ (gaz électropositif), avec n_i la densité d'ions.

- Le degré d'ionisation d'un gaz est défini par le rapport :

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

n_0 est la densité des neutres et n est la densité des électrons (ions positifs)

La valeur du degré d'ionisation dans les divers types de gaz ionisés varie en pratique des valeurs très faibles, inférieures à 10^{-4} pour les gaz faiblement ionisés, jusqu'aux valeurs proches de 1 pour les plasmas fortement ionisés. Dans le cas d'un plasma d'hélium à 1eV, par exemple (figure I-1), le gaz est faiblement ionisé lorsque le degré d'ionisation α est inférieur à $\alpha_0 = 10^{-7}$ [7].

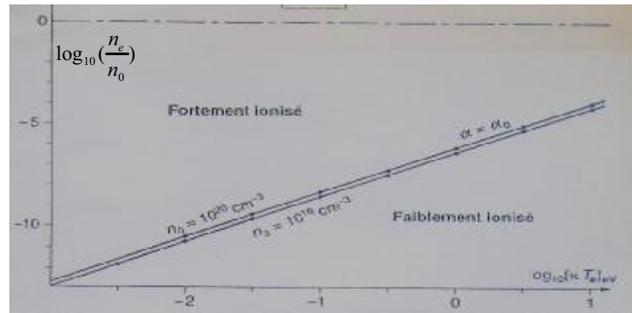


Figure I-1 : les deux familles de gaz ionisés. Cas de l'hélium [7]

La majeure partie de la matière qui constitue l'univers se trouve dans cet état de plasma dans la séquence solide–liquide–gaz. Il s'agit de plasmas naturels (l'intérieur des étoiles, la couronne solaire, l'ionosphère et les espaces interstellaires et interplanétaires). Il existe alors des plasmas naturels et artificiels qui peuvent se trouver à l'état condensé ou gazeux. Ces derniers qu'on a coutume de dénommer plasmas froids ou plasmas chauds selon qu'ils soient faiblement ou fortement ionisés, sont créés par des décharges électriques dans un gaz, dans les Tokamaks pour la fusion thermonucléaire contrôlée [8].

Un plasma froid est caractérisé par la température relativement faible des espèces majoritaires au niveau macroscopique ; les molécules (neutres ou ions) sont sensiblement à la même température qui est la température du gaz (typiquement inférieure à quelques centaines de degré Celsius). En revanche les électrons peu nombreux, possèdent une énergie cinétique plus importante (plusieurs électron–volt) qu'on peut exprimer en terme de température électronique selon la relation [4, 5, 7] :

$$E = \frac{1}{2} m_e v_e^2 = \frac{3}{2} k T_e$$

Avec m_e la masse de l'électron, v_e sa vitesse, k la constante de Boltzmann et T_e la température électronique.

L'ordre de grandeurs de T_e est de plusieurs dizaines de milliers de degrés Kelvin ($\approx 10^4$ K) [7, 9]. Un plasma froid est donc un milieu hors équilibre thermodynamique. C'est ce type de plasma qui est utilisé dans les procédés de dépôt. On peut ainsi, alors même que la température moyenne du milieu est très inférieure à la température minimale de réaction, réaliser des réactions chimiques très endothermiques. Cela est rendu possible par la formation, grâce aux collisions, d'atomes ou de radicaux libres très réactifs (et qui ne pourraient se former qu'à très haute

température à l'équilibre thermodynamique) et la présence d'ions possédant une énergie correspondant à une très haute température. Les grandeurs de base permettant de décrire un plasma, sont la densité n_e et la température T_e électroniques. La théorie des plasmas s'applique à des milieux dont n_e varie de 10^{-6} cm^{-3} à 10^{25} cm^{-3} . Les températures électroniques peuvent varier de 10^{-2} eV à 10^4 eV . Les ordres de grandeur des différents plasmas en fonction de ces paramètres sont donnés sur la figure I-2.

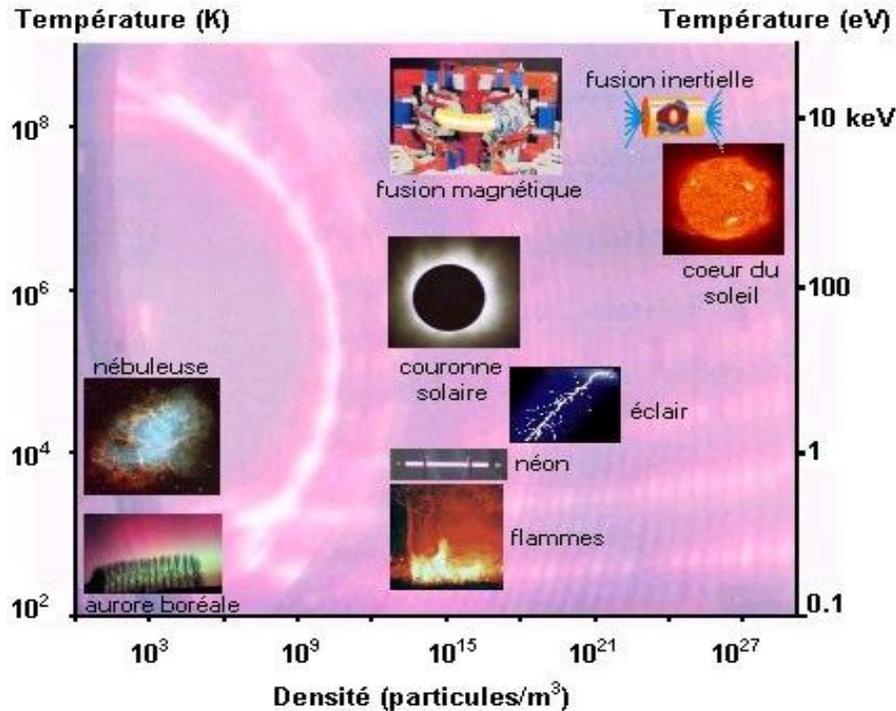


Figure I-2 : Classification de $n_e = f(T_e)$ pour différents plasmas [10]

I-3 Grandeurs caractéristiques d'un plasma

Le plasma est défini par un certain nombre de paramètres électriques dont la connaissance est nécessaire pour aboutir à une modélisation adéquate de la décharge électrique. Ces grandeurs sont rappelées dans ce paragraphe.

I-3-a La fréquence plasma

Quand on provoque une perturbation locale dans un plasma initialement neutre, sous la forme d'un excès de charges électriques positives ou négatives, celui-ci va tendre à revenir vers l'état d'équilibre de neutralité. Ce phénomène provoque l'oscillation des espèces chargées et en

particulier les électrons qui, étant plus légers, sont les premiers à répondre à la perturbation, compte tenu de la différence de masse entre ions et électrons. On définit la pulsation plasma par [7] :

$$\omega_{pe} = \left[\frac{n_{e0} e^2}{m_e \epsilon_0} \right]^{\frac{1}{2}}$$

Avec e : charge de l'électron ;

n_{e0} : densité électronique du plasma non perturbé ;

ϵ_0 : permittivité du vide ;

m_e : masse de l'électron.

Cette pulsation est souvent appelée improprement fréquence plasma. En toute rigueur, la

fréquence plasma est la quantité : $f_{pe} = \frac{\omega_{pe}}{2\pi}$

De la même façon, la pulsation plasma des ions est définie par : $\omega_{pi} = \left[\frac{n_{i0} e^2}{m_i \epsilon_0} \right]^{\frac{1}{2}}$

Avec n_{i0} la densité des ions et m_i leur masse.

Si la fréquence plasma des électrons est de l'ordre du gigahertz, celle des ions est de l'ordre du mégahertz.

I-3-b La gaine plasma

Lorsque le plasma est limité par une frontière, une paroi métallique par exemple, il se forme autour de cette frontière une « gaine » où les propriétés du plasma sont différentes. En général cette gaine n'est pas électriquement neutre. Son épaisseur est typiquement de l'ordre de l'amplitude du déplacement des électrons au cours de leur oscillation. Elle est appelée Longueur de Debye et est donnée par [9] :

$$\lambda_{Debye} = \left[\frac{\epsilon_0 k T_e}{e^2 n_{e0}} \right]^{\frac{1}{2}}$$

I-3-c 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-3-d 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 [5]:

$$V_f = V_p - \frac{kT_e}{2e} \ln\left(\frac{m_i}{2.25 m_e}\right)$$

- Le potentiel V_f est plus négatif que le potentiel plasma.

-La connaissance de ce paramètre et du potentiel plasma nous renseigne sur l'énergie des ions qui bombardent un substrat isolé [6]. D'après Delsol [11], dans le cas du réacteur RCER (réacteur à décharge micro-onde), la chute de potentiel dans la gaine ($V_p - V_f$) mesurée par sonde de Langmuir est de l'ordre de 10V. Ainsi, la surface de l'échantillon présent dans l'enceinte est soumise à un bombardement d'ions provenant du plasma et dont l'accélération est produite dans la gaine électrostatique.

I-3-e 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 $\left(\frac{kT_e}{m_i}\right)^{\frac{1}{2}}$ afin qu'ils puissent sortir du plasma. Le potentiel en lisière de gaine noté V_l est [5]:

$$V_l = V_p - V_f = \frac{kT_e}{2e}$$

Les différentes grandeurs électriques sont représentées sur la figure I-3 suivante :

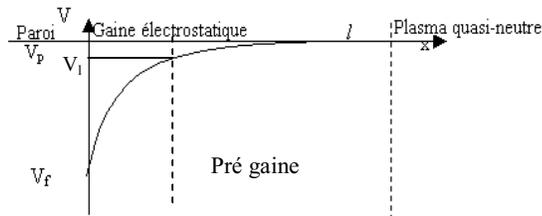


Figure I-3 : Répartition du potentiel électrique dans un plasma au voisinage d'une paroi

I-4 Les décharges électriques

Elles correspondent au passage du courant dans un gaz généralement considéré comme isolant au départ. On peut générer simplement une décharge en introduisant un gaz sous basse pression (quelques 10 torr à quelques torr), dans une enceinte contenant deux électrodes soumises à une différence de potentiel tel que le montre la figure I-4.

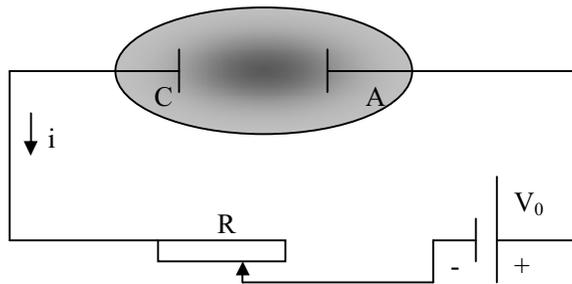


Fig. I-4 : Circuit d'alimentation d'un tube à décharge en courant continu

Selon la nature du gaz et le champ électrique appliqué, on peut distinguer les différents régimes d'une décharge en suivant l'évolution du courant en fonction de la tension appliquée entre les électrodes (figure I-5).

Dans le cadre de ce travail, nous nous limitons aux décharges dites luminescentes normales (figure I-5). Dans cette région, la décharge est autonome (auto entretenue), elle est caractérisée par une luminosité visible à l'œil nu et représente un domaine de travail intéressant pour les procédés de dépôts chimiques par plasma [7].

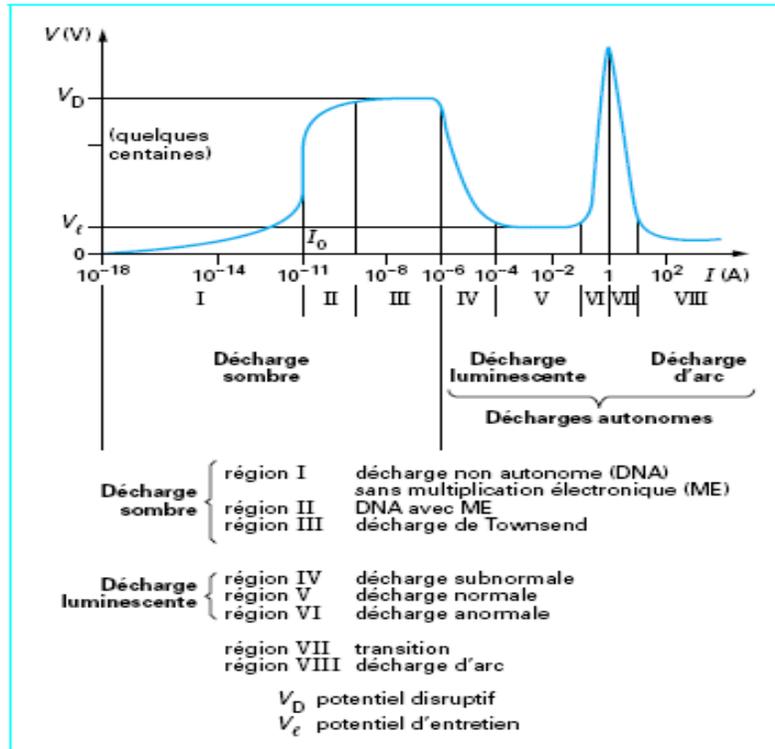


Figure I-5 : Caractéristique courant - tension et différents régimes de la décharge à courant continu. [7, 12]

I-4-a Description d'une décharge luminescente

Lorsque la décharge est établie, l'espace inter électrodes se caractérise par l'apparition de différentes zones lumineuses, par une non uniformité du champ électrique et par une variation du potentiel qui se manifeste principalement au voisinage des deux électrodes. Une distribution typique de la luminosité, dans un réacteur à électrodes parallèles, est illustrée sur la figure I-6.

On distingue, dans l'espace inter électrode cinq régions d'aspect lumineux différent. Ce sont successivement :

i- L'espace cathodique

C'est dans cette zone que le potentiel varie le plus fortement. C'est le lieu où les électrons acquièrent suffisamment d'énergie pour permettre l'entretien de l'ionisation dans la décharge. Cette région est caractérisée par une zone de charge d'espace positive. Elle comprend :

➤ L'espace d'Aston

Les électrons provenant de la cathode sont encore trop lents et ne peuvent ni exciter ni ioniser le gaz.

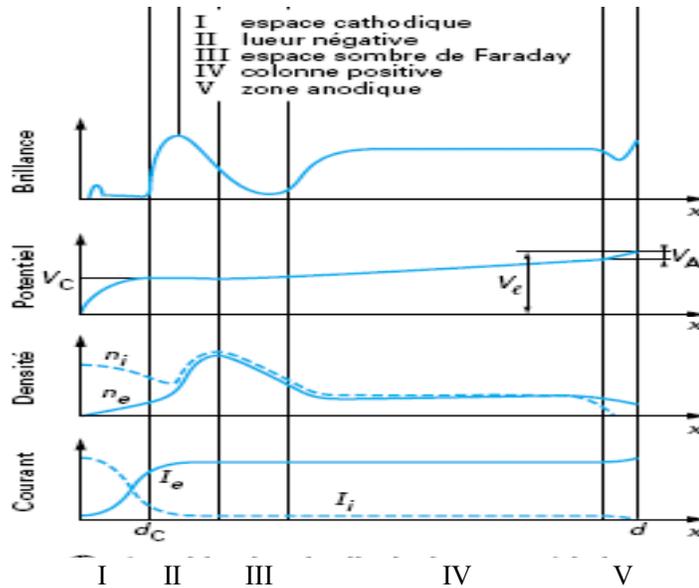
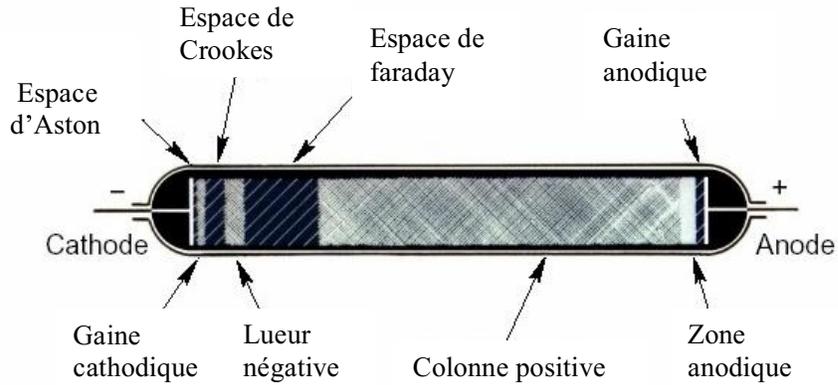


Figure I-6 : Représentation schématique des différentes zones pouvant exister dans l'espace inter électrodes [7, 12].

➤ La gaine cathodique

C'est une zone de charge d'espace où le champ électrique est variable et plus important qu'ailleurs. Une grande partie de la variation du potentiel est située dans cette zone de la

décharge. Les électrons y sont fortement accélérés ainsi que les ions qui vont bombarder la cathode.

➤ *L'espace de "Crooks-Hittorf"*

Les électrons issus de la gaine commencent à effectuer des ionisations du gaz suivies d'effet d'avalanche entraînant une diminution de la charge d'espace positive et donc du champ électrique.

ii- La lueur négative

C'est la partie la plus lumineuse de la décharge. Les électrons accélérés dans la gaine ont acquis une énergie suffisante pour provoquer de nombreux processus d'excitations, de désexcitations et d'ionisation. Le champ est quasiment nul sur cette zone.

iii- L'espace sombre de Faraday

Les électrons ont perdu de l'énergie dans la lueur négative et, de ce fait, les processus d'ionisation deviennent moins probables. L'absence d'ionisation et le drainage des cations vers la cathode contribuent à la création d'une faible charge d'espace négative qui conduit à l'accroissement du champ électrique et donc à accélérer de nouveau les électrons.

iv- La colonne positive

Elle est caractérisée par un champ électrique intrinsèque constant qui permet aux électrons d'acquérir localement l'énergie pour ioniser autant de molécules qu'il est nécessaire pour compenser les pertes électroniques (par attachement et aux parois). La valeur particulière de ce champ correspond donc sensiblement à l'égalité des taux d'ionisation et d'attachement :

$$\alpha(E/P) = \eta(E/P)$$

Le potentiel correspondant est le *potentiel plasma* V_p [7, 9].

v- La gaine anodique

C'est une zone de charge d'espace négative. Son rôle est comparable à celui de la gaine cathodique.

Dans ces types de plasmas, les densités électroniques et ioniques sont de l'ordre de 10^9 à 10^{11} cm^{-3} , mais les électrons ne sont pas en équilibre thermodynamique. En effet les électrons qui sont les espèces les plus énergétiques ($kT_e = 10 \text{ eV}$) du plasma, n'y sont qu'en faible quantité. De ce fait la température moyenne de l'ensemble reste faible d'où l'appellation de « plasma froid ».

I-4-b Les différents types de décharge

Dans le cas des décharges continues que nous avons traitées, si la cathode est recouverte d'un isolant, il y'a accumulation de charges positives sur cette électrode, causant une chute de la différence de potentiel subie par le gaz, entraînant ainsi l'extinction de la décharge. Il est donc impossible de déposer en utilisant une décharge continue. Cependant, appliquer une tension alternative permet d'éviter de telles accumulations. Les fréquences d'oscillation de la tension appliquée qui sont généralement choisies se trouvent dans le domaine des radiofréquences (de quelques kHz).

i- Décharge radiofréquence (RF) : quelques 100Hz – quelques 100kHz

Comme il a été expliqué précédemment, pour éviter l'extinction de la décharge, on applique un signal d'excitation alternatif dont la demi période est inférieure au temps de décharge de l'isolant.

Si on applique une tension $V(t) = V_0 \cos \omega t$, on voit apparaître un mouvement d'oscillation des gaines à la fréquence de l'excitation (figure I-7)

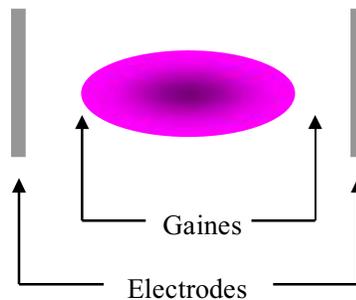


Figure I-7 : Zones de décharge RF dans l'espace inter électrodes.

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

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

Dans ces conditions, 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.

En radiofréquence, la fréquence la plus couramment utilisée est de 13.56 MHz.

ii- Décharges micro-ondes

Dans une décharge micro-onde, l'excitation du plasma est obtenue par une hyperfréquence comprise entre 500MHz et quelques GHz.

Dans les plasmas à hyperfréquence ou micro-ondes ($f_{pi} < f_{pe} < f$), 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-4-c L'auto polarisation

L'auto polarisation du substrat est due à la capacité de couplage qui interdit l'écoulement des charges implantées à la surface de l'électrode vers le circuit extérieur. Ainsi la différence de mobilités des deux espèces électroniques et ioniques conduit à une dérive de potentiel à la surface du substrat vers les tensions négatives, jusqu'à ce que se compensent exactement les flux ioniques et électroniques. La tension au niveau de la cathode se stabilise à la valeur continue V_{dc} . Issue de la loi des airs, V_{dc} est donnée par la relation suivante [5] :

$$V_{dc} = \left[1 - \left(\frac{A_a}{A_c} \right)^n \right] \cdot \bar{V}_p$$

Avec A_a : aire de l'anode

A_c : Aire de la cathode

\bar{V}_p : Potentiel plasma moyen

n : exposant dépendant de la pression:

- n = 2 pour des gaines non collisionnelles ($p < 20$ mtorr)

- n = 1.5 pour des gaines collisionnelles non ionisantes (50 mtorr $< p < 1$ torr)

Pour des gaines supposées purement capacitives, pour un signal RF appliquée du type :

$$V(t) = V_M \sin(\omega t) \quad , \quad \bar{V}_p \text{ est donné par : } \bar{V}_p = \frac{(V_M + V_{dc})}{2}.$$

On voit, d'après la formule de V_{dc} , que V_{dc} sera négatif ou positif suivant les valeurs des deux aires.

Dans le cas d'une décharge symétrique avec $V_{dc} = 0$, la valeur du potentiel moyen est donnée par :

$$\bar{V}_p = V_M / \pi \quad [5].$$

I-5 Les différents types de collisions intervenant dans une décharge

Les collisions entre particules, dans un plasma, sont soit élastiques soit inélastiques. Outre les collisions élastiques où il y'a seulement déviation des particules mises en jeu avec échange de quantités de mouvement et d'énergie cinétique, le processus élémentaire responsable de l'entretien et de la réactivité de la décharge dans un plasma est la collision inélastique entre un électron et une molécule du gaz. Cette collision se fait avec échange de quantité de mouvement et d'énergie cinétique et avec transfert d'énergie cinétique en énergie chimique. Elle entraîne la production des espèces réactives du plasma, telles que les molécules excitées, les radicaux, les ions et les photons.

L'énergie acquise par l'électron soumis à l'action du champ électrique est dépensée sous forme d'excitation, de dissociation, d'ionisation ou de chauffage des molécules du gaz. Ainsi, dans le cas d'un électron avec une molécule AB les principaux types de collisions envisageables sont :

- L'ionisation simple : $e^- + AB \rightarrow AB^+ + 2e^-$
- L'ionisation dissociative : $e^- + AB \rightarrow A + B^+ + 2e^-$
- L'attachement simple : $e^- + AB \rightarrow AB^-$
- L'attachement dissociatif : $e^- + AB \rightarrow A + B^-$
- L'excitation électronique vibrationnelle ou rotationnelle sans dissociation :
 $e^- + AB \rightarrow AB^* + e^-$ (* : atome ou molécule dans un état excité)
- L'excitation dissociative : $e^- + AB \rightarrow A^* + B + e^-$

Nous avons rappelé les processus les plus importants mais à cette liste, il faut rajouter les phénomènes de recombinaison : électron-ion ou ion-ion, des réactions ion-molécule, de détachement, de relaxation, etc...

Il faut noter que les probabilités des divers types de collisions molécule-électron sont fonctions de l'énergie de ces derniers. Elles ont été déterminées expérimentalement pour un

certain nombre de gaz. Elles sont traduites en terme de sections efficaces d'ionisation, de dissociation, d'attachement, etc., qui sont portées sur des courbes en fonction de l'énergie électronique [7].

Le libre parcours moyen λ qui représente la distance parcourue par un électron sans subir d'interaction avec une particule du gaz est donné par :

$$\lambda = \frac{1}{n_g \sigma}$$

Où n_g est la densité du gaz et σ la section efficace de collision. En considérant le plasma comme un gaz parfait, on peut utiliser la relation $P = n_g k T_g$ où P est la pression du gaz et T_g la température du gaz. Le libre parcours moyen s'exprime alors par $\lambda = \frac{k T_g}{P \sigma}$.

Le temps moyen entre deux collisions est alors donné par $\tau = \frac{\lambda}{V}$, avec V la vitesse moyenne de l'électron, ce qui permet de déterminer la fréquence de collision de l'électron avec un atome du gaz $\nu = n_g \sigma V$ et le taux de collision K qui représente la fréquence de collisions par unité de densité des électrons avec les atomes du gaz est donné par $K = \sigma V$. La fréquence de collision de l'électron avec un atome du gaz est $\nu = K n_g$ de même la fréquence de collision d'un atome du gaz avec un électron est donnée par $\nu = K n_e$.

I-6 Mécanismes de dépôt de couches minces par plasma froid

Il existe de nombreuses techniques permettant de déposer des matériaux en films minces sur différents substrats. Parmi celles-ci, le dépôt chimique à partir d'une phase vapeur "CVD" (chemical vapor deposition) a connu un développement important dans l'industrie. La principale différence entre chacun de ces procédés va résider dans le mode d'activation. On peut ainsi distinguer trois types :

i. La CVD thermique dite classique

On la désigne par « thermal CVD » ou « CVD » simplement. La réaction entre le ou les gaz et les parois à recouvrir, est activée par élévation de la température. Pompés à travers un four à

environ 1200°C, à basse ou à haute pression, les gaz sont décomposés par l'effet de la température et se déposent sur les parois de l'enceinte [13]

ii. Les procédés « photo CVD »

Comme son nom l'indique, les vecteurs énergétiques d'activation sont des photons. A faible pression, les gaz circulent dans une chambre éclairée par une lampe UV ou un laser.

iii. Les procédés assistés par plasma

On les désigne par PECVD (plasma enhanced chemical vapor deposition). L'activation du gaz est obtenue par bombardement électronique. On peut utiliser des décharges continues, radio fréquences, ou micro ondes. L'avantage de ce procédé est la possibilité d'effectuer des dépôts à relativement basses températures, ce qui permet d'envisager le traitement de substrats thermosensibles.

En raison des différences entre les modes d'excitation du gaz, les mécanismes physico-chimiques conduisent au dépôt ainsi que les propriétés des films obtenus peuvent varier selon le procédé utilisé. Cependant, on peut décrire schématiquement le processus de dépôt avec la même succession d'étapes.

Les quatre principales étapes qui mènent à la croissance d'un film sont illustrées sur la figure I-8, elles représentent respectivement [9, 14] :

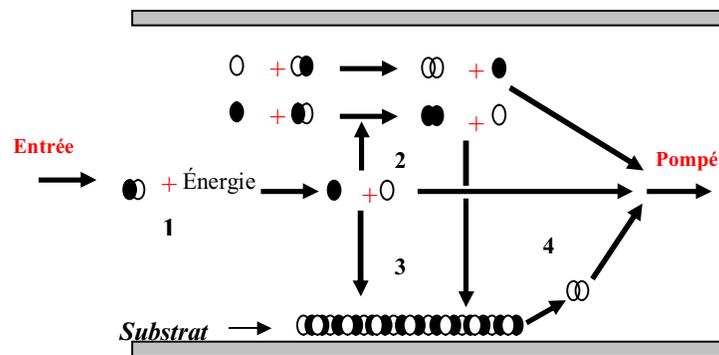


Figure I-8 : Mécanisme de formation d'un film par dépôt chimique

- 1- Une dissociation des molécules du gaz, entraînant la formation de produits plus ou moins réactifs.
- 2- Réaction des produits formés avec d'autres molécules ou produits pour former les « précurseurs du dépôt ».
- 3- Transport des différents produits par le mouvement d'ensemble du gaz (convection forcée ou naturelle) et par diffusion (mouvement des molécules du à leur gradient de concentration) jusqu'aux parois et vers la sortie du réacteur.

- 4- Adsorption des précurseurs sur les parois et incorporation dans la couche en cours de croissance, accompagnée éventuellement de la désorption de sous produits de la surface vers l'évacuation.

On peut remarquer, dans ce schéma, l'importance des phénomènes de transfert de matière et donc celle de la forme et des dimensions du réacteur.

Si l'on considère le réacteur plasma comme une boîte noire, l'opération de dépôt peut être schématisée par un système d'entrées –sorties complexe (figure I-9).

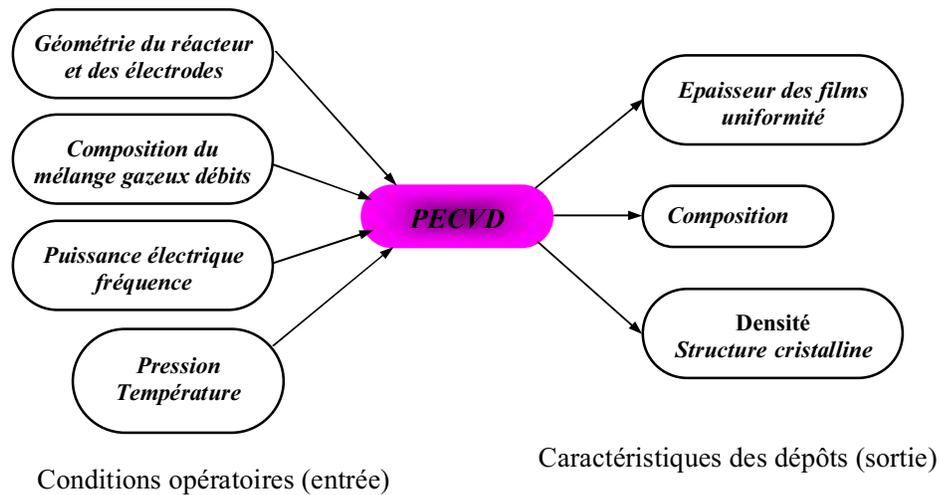


Figure I-9 : Paramètres d'entrée-sortie d'une opération PECVD

L'action d'un de ces paramètres dépend aussi de l'état des autres. Pour cette raison, nous voyons donc bien la nécessité de comprendre parfaitement chacun des processus mis en jeu au cours d'une opération de dépôt.

I-7 Les plasmas fluides

Si les mouvements des espèces lourdes peuvent être négligés pour examiner les conséquences des impacts électrons molécules qui se produisent à des échelles de temps très courtes, il est absolument nécessaire de réintroduire immédiatement après, leur influence car ce sont ces mouvements de convection et de diffusion, à des échelles de temps très courtes, qui transportent les espèces initiales, actives ou produits de réaction, de l'entrée de l'appareil jusqu'aux surfaces à traiter, puis de ces surfaces vers la sortie.

Par ailleurs, pendant ce mouvement, toutes les espèces formées par les interactions électron - molécules vont engendrer une importante série de réactions avec le milieu environnant. Il est, évidemment, absolument indispensable d'analyser ces réactions chimiques qui peuvent induire des changements de composition par modification du milieu environnant (pression du gaz,..) transformant ainsi la réactivité du mélange. De ce fait, les phénomènes de transport et de réactions chimiques dans la phase gazeuse seront traités par un modèle hydrodynamique, qui décrit l'écoulement du gaz par la théorie des fluides.

En effet, le plasma va être considéré comme un fluide constitué de particules chargées où les espèces qui le constituent sont animées d'une vitesse d'écoulement qui sera déterminée à partir de la résolution de l'équation de la mécanique des fluides appelée équation de Navier-Stokes (cf. chapitre II, modèle hydrodynamique).

Par ailleurs, suivant les hypothèses émises sur l'écoulement du gaz dans le réacteur, on peut distinguer différents régimes et types de fonctionnement pour lesquels les équations générales prennent des formes particulières. Ainsi :

a- Le type d'écoulement du fluide peut être laminaire, avec des filets fluides parallèles, ou turbulents. L'identification du type d'écoulement se fait par le calcul du nombre de Reynolds [15, 16] qui tient compte d'un certain nombre de grandeurs du fluide telles que la densité, la vitesse et la viscosité. Le nombre de Reynolds est donné par :

$$R_e = \frac{\rho VD}{\eta} \quad \text{ou bien} \quad R_e = \frac{vD}{\nu} \quad \text{avec} \quad \nu = \frac{\eta}{\rho}$$

Et, η : viscosité dynamique du fluide ;

ρ : masse volumique du fluide ;

ν : viscosité cinématique du fluide ;

D : la grandeur caractéristique du système ;

v : vitesse moyenne.

Si $R_e < 2000$: le type d'écoulement du fluide est laminaire [15]

Et, Si $R_e > 2000$: l'écoulement est de type turbulent

Le passage d'un écoulement laminaire à un écoulement turbulent a lieu pour $R_e \approx 2000$

La figure I-10 illustre l'écoulement du fluide dans les deux cas considérés.

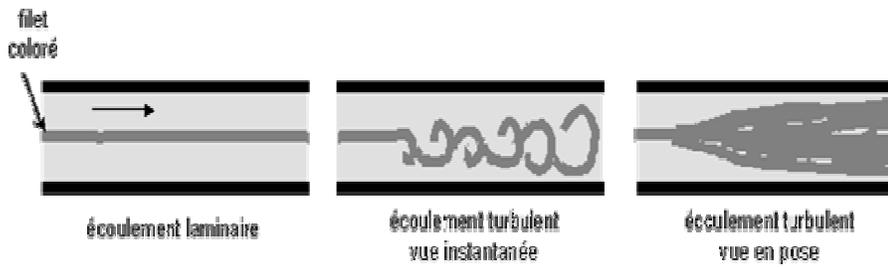


Figure I-10 : Représentation des différents régimes d'écoulement

b- Le régime d'écoulement peut être visqueux ou moléculaire suivant que le libre parcours moyen des espèces λ est inférieur ou supérieur à la distance caractéristique du réacteur d . Ainsi le calcul du nombre de Knudsen K_n , donné par la formule ci-dessous [17], permet d'identifier le régime d'écoulement.

$$K_n = \frac{\lambda}{d} \text{ avec } \lambda = \frac{1}{\sqrt{2}\pi l^2 n}$$

Où l est la distance entre deux atomes ou deux molécules et n le nombre de molécules du gaz.

Si $K_n < 0.01$: l'écoulement est visqueux

Et si $K_n > 10$: l'écoulement est moléculaire

Dans un réacteur, quelques soient les conditions, le régime d'écoulement s'éloigne de l'écoulement visqueux au fur et à mesure que la pression diminue.

c- Le fluide est compressible si les changements de la densité du fluide ont des effets significatifs. Dans le cas contraire, il s'agit d'un fluide incompressible. Afin de déterminer le caractère compressible ou non du fluide, on calcule le nombre de Mach donné par : $M_a = \frac{V_e}{C}$

Où V_e est la vitesse linéaire du gaz, et C la vitesse du son.

Les effets de la compression peuvent être ignorés pour $M_a < 0.4$.

d- Enfin d'autres hypothèses peuvent être émises sur l'écoulement :

- i- Le flux peut être considéré stationnaire où toutes les propriétés du fluide sont constantes dans le temps.

- ii- Il peut être considéré continu en admettant que les propriétés telles que la densité, la pression, la température et la vitesse sont prises pour être bien définies à des points infiniment petits et ne changent pas d'un point à l'autre.
- iii- Le réacteur peut être parfaitement agité avec un mode continu ce qui permet de supposer les concentrations des éléments du gaz constantes au cours du temps et dans tout le réacteur.

I-8 Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons présenté un rappel sur la définition d'un plasma, des décharges électriques et des différents processus mis en jeu au cours d'une opération de dépôt.

Nous avons ensuite évoqué les différents procédés de dépôt et nous avons parlé particulièrement de la technique PECVD.

Nous avons finalement présenté l'approche fluide du plasma avec ses différents régimes d'écoulement.

This document was created with Win2PDF available at <http://www.daneprairie.com>.
The unregistered version of Win2PDF is for evaluation or non-commercial use only.

CHAPITRE II

ANALYSE DES PROCÉDES DE DÉPÔT
ASSISTÉS PAR PLASMAS FROIDS

II-1 Introduction

Le contrôle de processus gouvernant la croissance du film élaboré par plasma froid et de ses propriétés reste complexe et peu expliqué. En effet, l'étude de cette croissance et des caractéristiques de dépôt fait intervenir de nombreux paramètres interdépendants et liés à la conception du réacteur, à la nature du substrat, aux conditions opératoires, au gaz précurseur et aux phénomènes physico-chimiques qui se développent dans le réacteur [1, 18, 19]. Cette étude est par conséquent l'optimisation des réacteurs plasmas froids et est généralement effectuée aussi bien à l'aide de diverses techniques de diagnostics qu'avec l'outil de modélisation.

Nous faisons dans ce chapitre la synthèse de quelques méthodes d'analyse théoriques des procédés de dépôt assistés par plasma. Nous nous intéressons, en particulier, à la modélisation numérique de réacteurs en comparant les différentes approches qui existent, ceci en nous inspirant de la littérature.

II-2 Analyse des procédés de dépôt

L'étude des mécanismes de création et maintien de plasmas froids et de croissances de films ou de traitement de surface peut se faire à l'aide de diverses techniques qui peuvent être complémentaires. On distingue alors :

II-2-a L'analyse expérimentale

Il existe de nombreuses techniques de mesures expérimentales utilisées pour l'analyse des procédés PECVD pour caractériser les plasmas (phase gazeuse) et les films déposés. Parmi ces méthodes nous citons la spectroscopie optique d'émission et d'absorption UV, Visible et IR, la spectrométrie de masse, la spectroscopie d'émission optique et des mesures électriques telles que celle par sonde de Langmuir (phase gazeuse) ou de propriétés diélectriques (films élaborés). Ces différentes méthodes d'analyse nous donnent un certain nombre d'informations telles que la densité électronique et le potentiel plasma de la phase gazeuse [1] ainsi que la composition chimique, des films élaborés, à travers la détection de liaisons chimiques présentes dans le dépôt ou de la mesure de la concentration d'éléments chimiques détectés [20, 21].

Mais, il faut savoir que ces méthodes ne fournissent qu'un nombre réduit d'informations et qu'un grand nombre d'entre elles sont onéreuses, parfois longues à mettre en oeuvre et donnent des résultats souvent délicats à interpréter.

II-2-b L'analyse théorique

Elle peut être :

i- Un traitement simplifié

Lorsqu'on ne dispose pas, comme c'était le cas il y a quelques années, d'outils permettant la résolution d'équations telles que celles considérées dans ce travail, on est conduit à les simplifier (de manière parfois très importante) en formulant des modèles équivalents au problème à traiter. Les résultats ainsi obtenus peuvent s'avérer plus ou moins satisfaisants.

ii- Un traitement numérique

Le développement important de la puissance des moyens de calcul informatique permet aujourd'hui un traitement assez rigoureux des équations qui régissent les différents mécanismes mis en jeu lors d'un processus de dépôt par plasma. Ce qui, de nos jours, pousse les chercheurs qui travaillent dans ce domaine à développer des modèles de simulation numérique de plus en plus précis dans la prédiction des résultats attendus [22].

II- 3 La modélisation d'un procédé de dépôt par plasma

Comme nous l'avons vu précédemment, dans un réacteur de dépôt à partir d'une phase gazeuse, les molécules du gaz sont transportées, dissociées et réagissent en volume ou sur les surfaces. Un modèle détaillé de ce type de processus doit donc tenir compte de chacun de ces phénomènes. C'est pourquoi les analyses théoriques impliquent généralement un couplage entre les trois types de modèles de base suivants :

II-3-a Un modèle de décharge électrique

Ce modèle rend compte du transport des particules chargées et de leurs interactions avec le champ électrique. il permet, en traitant l'équation cinétique des porteurs et l'équation de poisson de déterminer les fonctions de distribution en énergie et les densités d'espèces chargées, le profil du champ électrique et les divers taux d'ionisation, attachement , dissociation...

Dans le cas de plasmas faiblement ionisés où les collisions particules chargées-particules neutres sont dominantes, il est basé sur la résolution de l'équation de Boltzmann qui s'écrit dans le cas général [23, 24]:

$$\frac{\partial f_i}{\partial t} + \vec{v}_i \cdot \vec{\nabla}_r f_i + \frac{\vec{F}_i}{m_i} \cdot \vec{\nabla}_v f_i = \frac{\delta f_i}{\delta t} \quad (1)$$

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

Où v_i est le champ de vitesses des particules i chargées (électron et/ou ion), r est la coordonnée spatiale, \vec{F}_i est la force extérieure qui s'applique à la particule i de masse m_i ($\vec{F}_i = e\vec{E}$) et $f_i(r, v, t)$ est la fonction de distribution de la particule i dans l'espace des phases à six dimensions (x, y, z, v_x, v_y, v_z) dont l'intégration dans l'espace des vitesses permet d'accéder à la valeur moyenne de la densité d'espèces présentes dans la décharge $n(\vec{r}, t)$ et de leur vitesse locale $\vec{v}(\vec{r}, t)$:

$$n(\vec{r}, t) = \int_v f(\vec{r}, \vec{v}, t) dv \quad (2)$$

$$\vec{v}(\vec{r}, t) = \frac{\int_v \vec{v} \cdot f(\vec{r}, \vec{v}, t) \cdot d\vec{v}}{\int_v f(\vec{r}, \vec{v}, t) \cdot d\vec{v}} \quad (3)$$

Les différents termes de l'équation (1) représentent:

- (a) : l'évolution temporaire de la fonction de distribution
- (b) : le mouvement des particules
- (c) : la variation de vitesse des particules sous l'effet des forces extérieures
- (d) : la collision entre les particules

Dans le cas d'une décharge RF, les forces extérieures sont celles engendrées par le champ électrique E qui est relié aux densités de charges par l'intermédiaire de l'équation de Poisson [25]:

$$\nabla \vec{E} = -\Delta \phi = \frac{e}{\epsilon_0} (\sum q_p n_p - n_e) \quad (4)$$

Avec, n_e : densité des électrons

n_p : densité des ions

q_p : charge de la particule

ϕ : Potentiel électrostatique dans le plasma.

Cette dernière relation est alors couplée à l'équation de Boltzmann. La résolution de ce système d'équations est délicate, ce qui impose de faire d'indispensables simplifications. Ceci nous amène à l'utilisation de différents types de modèles dits "auto – cohérents" qui sont soit macroscopiques (ou fluides) soit microscopiques (ou particulaires), suivant que la décharge est réalisée dans des conditions de basses pressions où le libre parcours moyen des particules est du même ordre de grandeur que les dimensions caractéristiques du système, ou pour des pressions plus élevées où règne un régime collisionnel.

i- Les modèles fluides

Dans ces modèles le milieu est supposé continu, les propriétés des particules chargées (densités, vitesses, énergies) sont considérées comme des grandeurs moyennes et non des fonctions de distribution. En considérant, alors, les trois premiers moments de l'équation de Boltzmann dans l'espace des vitesses, on obtient dans le cas des électrons par exemple [7, 26, 27] :

- L'équation de continuité, ou équation de conservation de la quantité de charges qui représente le premier moment de l'équation de Boltzmann et qui est obtenue par son intégration dans l'espace des vitesses:

$$\frac{\partial n_e}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot (n_e \cdot \vec{v}_e) = S_e \quad (5)$$

Avec v_e la vitesse moyenne des électrons et S_e le terme source décrivant 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 [28, 29] :

$$S_e = (\nu_i - \nu_a) n_e + \nu_{\text{detach}} n_n - r_e n_e n_p \quad (6)$$

Où ν_i est la fréquence d'ionisation,

ν_a est la fréquence d'attachement,

ν_{detach} est la fréquence 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 :

$$S_e = n_e \nu_i - r_e n_e n_p \quad (7)$$

- Dans le cas général, pour une particule p, le terme source de son équation de continuité s'exprime par [30] :

$$S_p = \sum_r N_{pr} R_r \quad (8)$$

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 :

$$R_r = k_r n_{1r} n_{2r} \quad (9)$$

→ pour une réaction à trois particules de densités respectives n_{1r} , n_{2r} et n_{3r} on a :

$$R_r = k_r n_{1r} n_{2r} n_{3r} \quad (10)$$

k_r étant le coefficient du taux de réaction.

- L'équation de transfert de quantité de mouvement, représente le second moment de l'équation de Boltzmann, elle est obtenue par intégration de l'équation (1) après sa multiplication par le produit mv_e :

$$\frac{\partial n_e m v_e}{\partial t} + \nabla(n_e \cdot m v_e v_e) + \nabla p_e = -e E n_e - n_e m v_e \nu_m \quad (11)$$

avec, $P_e = n_e k T_e$ la pression électronique et ν_m la fréquence de collisions avec les molécules.

- L'équation d'énergie, elle représente le troisième moment de l'équation de Boltzmann, elle est obtenue par intégration de l'équation de Boltzmann après sa multiplication par le terme densité d'énergie totale w_e :

$$\frac{\partial w_e}{\partial t} + \nabla(v_e \cdot w_e) + \nabla(p_e v_e) + \nabla Q_e = -e E n_e v_e - n_e \sum_k \varepsilon_k \nu_k \quad (12)$$

$$\text{Où } w_e = n_e \left(\frac{1}{2} m v_e^2 + \frac{3}{2} k T_e \right) \quad (13)$$

Avec Q_e le flux de chaleur, ε_k l'énergie de collision entre un électron et une particule k, ν_k la fréquence moyenne des différents processus de collisions inélastiques.

Le modèle fluide permet la résolution de l'équation de Boltzmann et la détermination, à partir des sections efficaces, les paramètres de transport (mobilité, coefficient de diffusion), les coefficients d'ionisation, d'attachement et de dissociation. Il donne alors:

- les taux de dissociation, d'ionisation et d'attachement.
- les densités des espèces chargées.
- le champ électrique dans l'espace inter électrodes.

Ces modèles fluides sont insuffisants pour décrire la décharge lorsque l'hypothèse de milieu continu n'est pas correcte. Dans ces conditions on fait appel à des modèles dits hybrides qui associent un modèle particulaire au modèle fluide.

i- Les modèles hybrides

Ils permettent de décrire le transport des électrons rapides et lents de façon plus rigoureuse. Les premiers sont traités de façon microscopique tandis que les seconds sont traités par un modèle fluide [31]. Ce type de modèle n'est généralement employé que pour décrire les électrons issus de la cathode et qui dissipent leur énergie dans la lueur négative.

ii- Les modèles microscopiques ou particulaires

Ils permettent de résoudre l'équation de Boltzmann en considérant un nombre fini de particules supposées représenter les espèces chargées, le mouvement des particules dans l'espace position-vitesse (r,v) étant lié au champ électrique et aux collisions [32]. Les équations de mouvement sont intégrées entre deux collisions. Ces dernières sont traitées statistiquement en fixant des membres aléatoires dont les densités de probabilité dépendent des sections efficaces. On détermine ainsi l'instant et la nature de la collision ainsi que la trajectoire de la particule après impacte [4].

L'équation de poisson est résolue simultanément à intervalles de temps réguliers.

Dans le cas des plasmas non collisionnels, les équations de mouvement couplées à l'équation de poisson sont généralement résolues par des méthodes particules in cell (PIC), tandis que les collisions sont traitées par des méthodes statistiques de Monte Carlo[33, 34].

L'avantage de ce modèle est de permettre un lien direct entre les processus collisionnels et les caractéristiques électriques de la décharge (RF), surtout lorsque les données du gaz étudié sont mal connues (sections efficaces de collision, de dissociation...), contrairement aux modèles fluides qui décrivent les propriétés électriques des particules chargées à l'aide de grandeurs moyennes. De plus, malgré leur inconvénient lié au temps de calcul assez long, le modèle particulaire reste le mieux adapté à la simulation de plasmas basses pressions qui sont peu collisionnels.

Etant données leurs complexités, les modèles de décharge ne permettent souvent qu'une résolution monodimensionnelle des équations que nous venons de décrire, et ceci sans tenir

compte du transport convectif. En revanche, la connaissance du champ de vitesse est nécessaire à l'établissement d'un bilan de conservation de masse.

Comme initiation dans ce domaine de recherche, dans le cadre de notre travail, nous considérerons des conditions et hypothèses de décharge qui nous permettent d'opter pour le modèle fluide.

II-3-b Un modèle hydrodynamique

Ce modèle prend en compte les processus de transfert de quantité de mouvement à travers l'étude de l'écoulement du gaz entre les électrodes. Il est basé sur l'équation traduisant le transport d'un fluide continu.

Le mouvement des espèces neutres est lui aussi décrit par l'équation de Boltzmann (1). Par intégration de cette équation on peut obtenir les deux équations principales de la mécanique des fluides qui sont utilisées pour définir l'écoulement en milieu continu et qui sont [15, 16]:

- *l'équation de continuité (ou de conservation de masse):*

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = -(\nabla \cdot \rho v) \quad (14)$$

Où - ρ est la masse volumique du fluide, soit $\rho = mN$, m et N étant la masse et la densité du gaz.

- v est la vitesse d'écoulement du gaz.

L'équation de conservation de la quantité de mouvement:

$$\frac{\partial(\rho v)}{\partial t} = -(\nabla \cdot \rho vv) - \nabla p - (\nabla \cdot \tau) + \rho g \quad (15)$$

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

Avec - P : la pression du gaz

- τ : la contrainte visqueuse

- g : l'accélération due à la gravité (9.81 ms^{-2})

Les différents termes de cette équation représentent:

(a) : la vitesse d'accumulation de la quantité de mouvement

(b) : le flux de quantité de mouvement par convection

(c) : la force de pression

(d) : le flux de quantité de mouvement par diffusion

(e) : la force de gravité

Sous des hypothèses de fluide Newtonien incompressible, de viscosité et masse volumiques constantes, les équations (14) et (15) deviennent:

$$\nabla \cdot v = 0 \quad (16) \quad \text{et} \quad \rho \frac{Dv}{Dt} = -\nabla p + \mu \nabla^2 v + \rho g \quad (17)$$

avec μ la viscosité du fluide

La relation (17) n'est autre que la célèbre équation de Navier Stocks [16, 35]

$$\text{avec } \frac{Dv}{Dt} = \frac{\partial v}{\partial t} + \rho(v \cdot \nabla)v \quad (18)$$

L'opérateur spécial $\frac{Dv}{Dt} = \frac{\partial}{\partial t} + v \cdot \nabla v$ est nommé dérivée hydrodynamique, il est égal dans le

$$\text{cas général à [15] : } \begin{cases} \frac{Dc}{Dt} = \frac{\partial c}{\partial t} + v_x \frac{\partial c}{\partial x} + v_y \frac{\partial c}{\partial y} + v_z \frac{\partial c}{\partial z} \\ \frac{Dc}{Dt} = \frac{\partial c}{\partial t} + v \cdot \nabla v \end{cases}$$

II-3-c Un modèle de transfert de matière

Ce modèle traite la chimie du plasma et les interactions entre les espèces réactives du gaz et les couches déposées. Il nécessite une description convenable des interactions des molécules entre elles et avec les surfaces au moyen d'un mécanisme chimique.

Dans un plasma, comme le montre la figure II-1, une grande variété d'espèces plus ou moins réactives est créée ; des ions positifs ou négatifs, des électrons, des atomes, des molécules dans des états plus ou moins excités électroniquement, vibrationnellement ou rotationnellement, des photons des agrégats, des métastables de longue durée de vie et des radicaux neutres ou ioniques. En plus des réactions de ces espèces dans la phase gazeuse, des interactions sont possibles avec le ou les substrats qui doivent être traités. [36]

Les paramètres de ces différentes espèces s'approchant de la surface vont conduire à des processus hétérogènes extrêmement variés tels que : [36, 37, 38]

- La chimisorption
- La physisorption
- La diffusion de surface
- La pulvérisation

- L'implantation des ions
- La désorption des atomes et /ou molécules et /ou radicaux résultant de la gravure et /ou du dépôt.

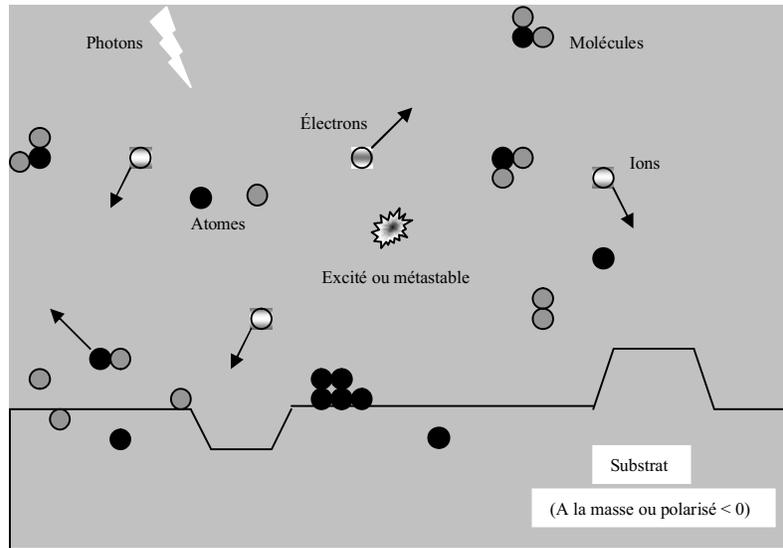


Figure II-1 : Schéma de l'interface plasma – matériau.

Ces processus d'interaction des espèces avec les surfaces sont complexes, et on peut notamment se demander quelle est la quantité d'espèces actives à la surface, quelle est sa nature, comment elle interagit avec le film en cours de croissance et quelle est l'influence de sa structure ?

Les réponses à toutes ces questions seraient nécessaires afin de pouvoir décrire les phénomènes de surface dans une modélisation. Il est donc important de déterminer la nature de ces interactions et les chemins réactionnels pour la simulation numérique du modèle de transfert de matière.

i- Equations du modèle de transfert de matière

Dans ce type de modélisation, le bilan matière est effectué pour chaque espèce. Pour une espèce A_j par exemple, en supposant la masse volumique du fluide et le coefficient de diffusion de A_j dans le mélange constants, on écrit [23, 35, 39] :

$$\frac{\partial c_j}{\partial t} + (\vec{v} \cdot \vec{\nabla}) c_j = D_{j,m} \nabla^2 c_j + R_j \quad (19)$$

(1) (2) (3) (4)

Avec : c_j ; la concentration de l'espèce j ($\text{mole} \cdot \text{m}^{-3}$)

$D_{j,m}$; le coefficient de diffusion de l'espèce j dans le mélange ($m^2.s^{-1}$)

R_j ; le taux de production de l'espèce j par des réactions de volume ($mole^{-1}.m^{-3}.s^{-1}$)

Les différents termes de cette relation représentent :

- (1) : la vitesse d'accumulation de l'espèce A_j ,
- (2) : la vitesse de transport de l'espèce par convection ;
- (3) : la vitesse de transport de l'espèce par diffusion ;
- (4) : la vitesse d'apparition ou de disparition par réaction chimique.

Le terme (4) est donc positif quand l'espèce est effectivement produite et négatif quand elle est consommée, R_j s'exprime par [40] :

$$R_j = \sum_{l=1}^{n_r} \nu_{jl} k_l \prod_{i=1}^{n_{es}} c_i^{\varepsilon_{il} \nu_{il}} + \sum_{l=1}^{n_{di}} \nu'_{jl} K_{dl} [n_{e^-}] c_{dl} \quad (20)$$

où $\varepsilon_{il} = -1$ si $\nu_{il} < 0$, autrement 0

- Le premier terme dans l'égalité (20) représente la somme des productions de A_j par les réactions chimiques où k_l représente la constante de vitesse de la $l^{\text{ème}}$ réaction et ν_{jl} est le coefficient stoechiométrique de A_j dans cette même réaction.

Avec : n_r ; le nombre de réactions chimiques en volume ;

n_{es} ; le nombre d'espèces chimiques en volume ;

n_{di} ; le nombre de réactions de dissociation ;

c_{dl} ; la concentration du produit dissocié dans la $l^{\text{ème}}$ réaction de dissociation ($mole.m^{-3}$)

- Le deuxième terme de la somme représente la production de A_j par l'intermédiaire des diverses réactions de dissociation par impact électronique où ν'_{jl} est le coefficient stoechiométrique de A_j dans la $l^{\text{ème}}$ réaction de dissociation, $[n_{e^-}]$ est la densité électronique moyenne et K_d est la constante de dissociation. elle est calculée par la fonction de distribution $f(\varepsilon)$ en énergie des électrons [23, 35] :

$$K_d = \frac{1}{[n_{e^-}]} \int_0^{\infty} \left(\frac{2\varepsilon}{m_e} \right)^{\frac{1}{2}} \sigma_K(\varepsilon) f(\varepsilon) d\varepsilon \quad (21)$$

Où $\sigma_k(\varepsilon)$ est la section efficace de dissociation de A_k par impact électronique. Elle est déterminée à partir du modèle de décharge.

ii- Traitement numérique des équations de transfert de matière

Ces équations sont discrétisées suivant le même principe que les équations hydrodynamiques. Le modèle utilise les constantes de dissociation par impact électronique et les vitesses de gaz qui sont déterminées respectivement par les modèles de décharge et d'écoulement. Il nous permet alors le calcul de la vitesse de dépôt d'une particule j sur une surface.

iii- Modèles de probabilités de réaction de surface

Différentes approches ont décrit la réactivité en surface, mais dans tous les modèles, on écrit l'égalité du flux de diffusion de l'espèce vers la surface au flux de consommation de cette espèce sur cette même surface, c'est-à-dire:

$$N_j^s = R_j^s \quad (26)$$

Avec généralement, $N_j^s = D_{j,m} \frac{\partial c_j}{\partial x_\perp}$ ou x_\perp représente la coordonnée suivant la direction perpendiculaire à la surface. Mais le problème principal, provient de la détermination du terme de réaction chimique de l'espèce j dans le volume du gaz et qui est le terme R_j et également de la réactivité de l'espèce j avec les surfaces. Cependant la détermination de R_j et des constantes de vitesse des réactions nécessitent de nombreuses études théoriques et expérimentales pour déterminer la validité du modèle. Pour cela, nous présentons deux approches permettant de déterminer le mécanisme réactionnel en nous inspirant de la littérature.

(1) La première approche [9] :

Dans cette approche, on considère un flux incident ϕ d'espèces arrivant perpendiculairement à la surface comme le montre la figure II-2.

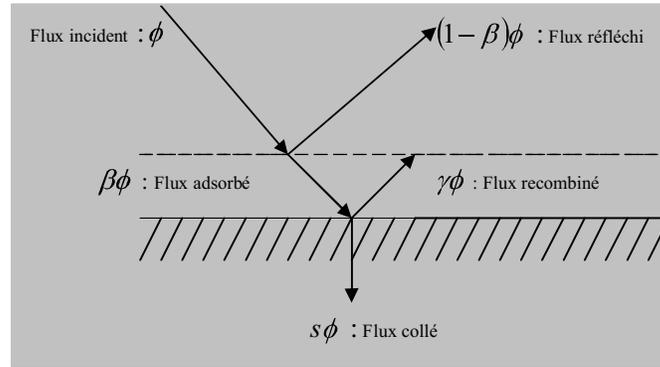


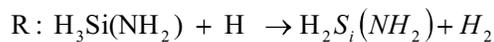
Figure II-2 : Représentation des différents flux d'espèces sur une surface [40]

Ce flux se partage en trois :

- une partie de ce flux va correspondre au collage de l'espèce sur la paroi, avec une probabilité « s » appelée coefficient de collage.
- une autre partie est adsorbée en surface, elle est déterminée par un coefficient β appelé coefficient de disparition ;
- une partie est réfléchie, elle représente le complément $(1 - \beta)$. La partie du flux adsorbée peut être incorporée au dépôt avec désorption de produits volatils, ou bien se recombiner (γ) avec des espèces présentes sur la surface $\beta = s + \gamma$.

Le terme R_j s'écrit alors comme une somme de flux d'espèces arrivant en surface.

Comme exemple, en prenant la réaction de recombinaison [35] :



Avec $k = 8 \times 10^{-13} \text{ cm}^3 \text{ molec}^{-1} \text{ s}^{-1}$ est la constante de vitesse de réaction. Le terme R_j peut alors s'exprimer comme suit :

$$R_j = 2sH_2 + \gamma H_3\text{Si}(\text{NH}_2) - \left(\frac{1}{2}\right)\gamma H_2 \quad (27)$$

La quantité A_j qui disparaît en surface est donnée par le facteur $\beta_j \phi_j$

(2) La deuxième approche :

D'autres auteurs [39, 41, 42] ont introduit la notion du taux de couverture de la surface par l'espèce adsorbée. Rhallabi et Turban [43] ont développé un modèle de surface pour calculer le taux de dépôt du film composé de carbone amorphe a-C : H dans un plasma de méthane CH_4 .

Ce modèle est basé sur la résolution de l'équation de continuité (19), pour deux espèces différentes :

Les neutres et les ions positifs :

$$\frac{\partial N_i}{\partial t} = S - S_V - \frac{D}{\Lambda^2} N_i \quad (28)$$

N_i représente la densité des espèces, D est le coefficient de diffusion pour chaque espèce, et Λ est la longueur de diffusion, S est un terme de production, S_V est un terme de perte dans le volume de plasma. Le taux de couverture θ est défini à partir de l'équation qui exprime l'égalité des flux d'arrivée et de départ des espèces considérées sur la surface :

$$\frac{1}{A} \frac{\partial \theta}{\partial t} = y_{ion}(1-\theta)\Gamma_{ion} - \theta(S_1\Gamma_1 + S_2\Gamma_2) + (1-\theta)(\gamma_1\Gamma_1 + \gamma_2\Gamma_2) \quad (29)$$

Avec A la surface du film, $y_{ion}(1-\theta)\Gamma_{ion}$ le taux de création par pulvérisation de l'atome d'hydrogène, $\theta(S_1\Gamma_1 + S_2\Gamma_2)$ le taux des radicaux adsorbés : CH_3 et C_2H_5 et $(1-\theta)(\gamma_1\Gamma_1 + \gamma_2\Gamma_2)$ le taux de création des radicaux CH_3 et C_2H_5 par recombinaison.

En régime stationnaire ($\frac{\partial \theta}{\partial t} = 0$), le taux de couverture devient :

$$\theta = \frac{y_{ion}\Gamma_{ion} + \gamma_1\Gamma_1 + \gamma_2\Gamma_2}{y_{ion}\Gamma_{ion} + \beta_1\Gamma_1 + \beta_2\Gamma_2} \quad (30)$$

Le taux de dépôt du film a- C : H est exprimé alors par :

$$R = \frac{1}{\rho} (m_1\theta S_1\Gamma_1 + m_2\theta S_2\Gamma_2 + m_3\theta S_3\Gamma_3) \quad (31)$$

Avec m_i la masse des radicaux i et ρ la densité du film du carbone déposé.

II-4 Conclusion

Après avoir donné un aperçu des nombreuses techniques de caractérisations couramment utilisées pour le diagnostic des plasmas et l'analyse des films élaborés, nous avons présenté les

trois modèles de simulation dont l'association, illustrée sur la figure II-3, permet la modélisation de façon globale d'un réacteur plasma.

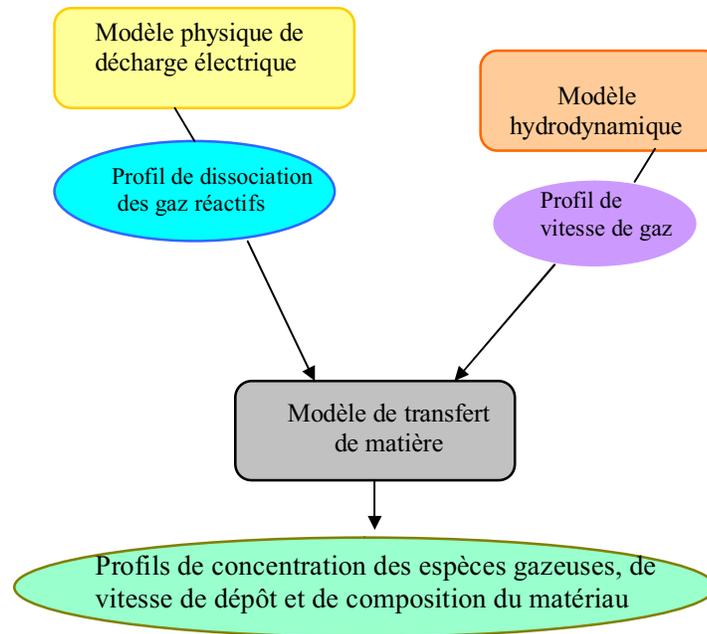


Figure II-3 : Type des modèles pour la simulation du fonctionnement d'un réacteurs plasma

Ainsi, nous avons abordé les différentes approches (fluides, particulaire,...) du modèle de décharge, présenté l'approche hydrodynamique pour l'écoulement du gaz et avons donné un exemple de calcul à développer pour traiter les interactions entre les espèces du plasma et la surface du substrat dans le modèle de transfert de matière.

This document was created with Win2PDF available at <http://www.daneprairie.com>.
The unregistered version of Win2PDF is for evaluation or non-commercial use only.

CHAPITRE III

MODELISATION DE L'ÉCOULEMENT

III-1 Introduction

Dans ce chapitre, nous abordons notre propre analyse et modélisation du réacteur à écoulement longitudinal, utilisé au LGET de Toulouse par l'équipe de Despax [41] et pour lequel ils ont déjà présenté un grand nombre de résultats expérimentaux. Nous utiliserons les résultats obtenus par ces derniers pour confirmer les résultats de notre simulation et nous effectuerons alors une analyse de quelques profils.

Pour ce faire, nous commençons d'abord par la présentation du réacteur considéré et de la procédure de modélisation envisagée. Nous donnerons par la suite les résultats obtenus.

III-2 Le réacteur à écoulement longitudinal

Le réacteur à écoulement longitudinal considéré dans notre étude est représenté sur la figure III-1. Il est constitué d'un tube de quartz de 1200 mm de long, de 151 mm de diamètre extérieure et de 146 mm de diamètre intérieure. Il est équipé d'une nacelle composée de cinq électrodes planes en graphite, parallèles à l'axe du réacteur. Les dimensions de chaque électrode sont de 620 mm x 120 mm x 14 mm, elles sont espacées de 14 mm et permettent le traitement simultané de 40 plaquettes de 100 mm de diamètre (voir figure III-2). Ces électrodes sont reliées au générateur RF et à la terre par l'intermédiaire de deux tiges cylindriques situées vers la sortie du réacteur, créant ainsi 4 plasmas parallèles.

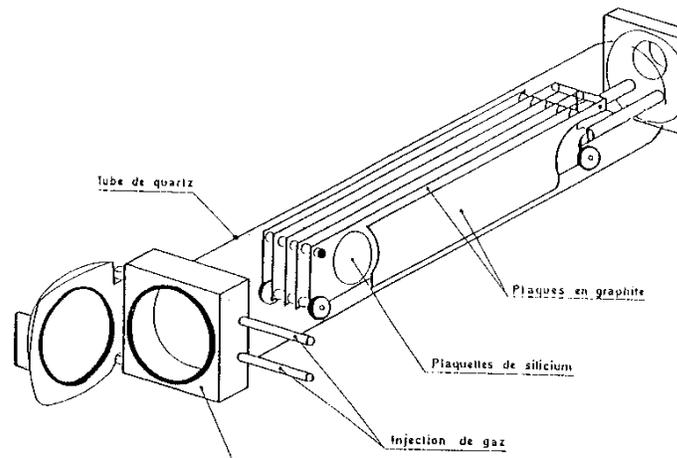


Figure III-1 : Vue en perspective du réacteur [41]

Comme la modélisation de ce réacteur dans son ensemble est difficile [23, 41], le domaine d'étude est réduit à un seul espace inter électrodes sur les quatre que comporte la nacelle.

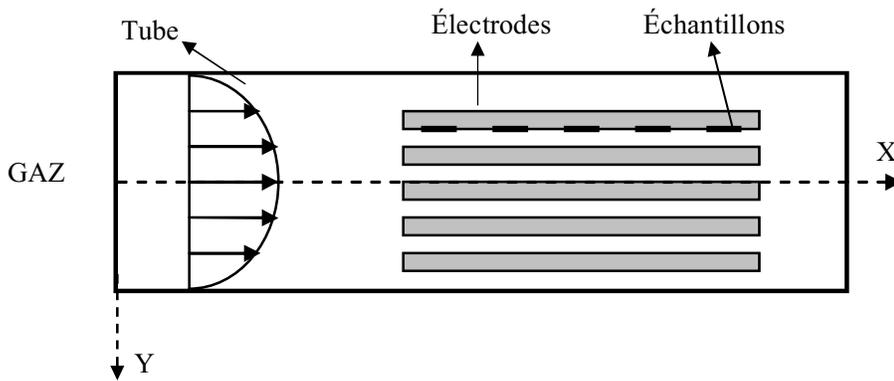


Figure III-2 : Coupe longitudinale du réacteur

III-3 Définition de la géométrie étudiée

Le domaine modélisé est représenté sur la figure III-3. Il est bidimensionnel et peut être limité à la zone hachurée pour des raisons de symétrie.

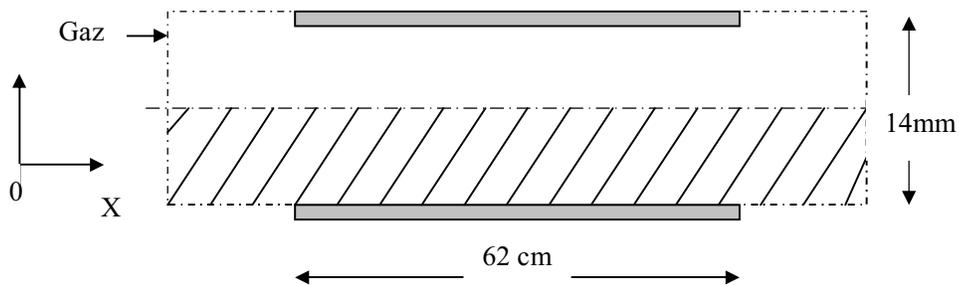


Figure III-3 : Présentation du domaine modélisé

III-4 Hypothèses générales

Nous nous basons, pour notre modèle hydrodynamique sur les conditions plasmas suivantes :

- un mélange gazeux de SiH_4/NH_3 (silane et ammoniac), avec les débits suivants : -
 débit d'ammoniac : $Q_{\text{NH}_3} = 1000 \text{ sccm}$
 - débit de silane : $Q_{\text{SiH}_4} = 40 \text{ sccm}$ (< 5% du mélange)
- Une fréquence RF de 13.56 MHz.
- Une longueur de l'électrode L de 62 cm
- Une distance inter électrode H de 14 mm
- Une vitesse initiale du gaz $v_0 = 2.4 \text{ m/s}$
- Une pression de gaz allant de 0.5 à 3 torr.

- Une température T de 300 °C
- Un rapport d'aspect de L/H=44.28

De plus, Pour développer le calcul qui mène à la résolution du système décrit précédemment, nous avons considéré les hypothèses suivantes :

1. Le milieu est pris comme un gaz parfait ; vu les faibles valeurs de pressions envisagées [40].
2. Le milieu est isotherme, sa température est égale à celle des substrats.
3. La masse volumique ρ et la viscosité μ du fluide sont constantes.
4. Le régime d'écoulement est laminaire, en effet le calcul du nombre de Reynolds a donné $Re=5$, valeur qui est inférieure à 2000 (cf. chapitre I).

III-5 Ecriture des équations du mouvement de fluide

Les équations générales de continuité et de transfert de quantité de mouvement ont été présentées dans le chapitre II de ce mémoire. Leur écriture en coordonnées rectangulaires (suivant les axes x, y), dans le cas d'un fluide incompressible, à température constante et en régime permanent (équations (16) et (17)) donne le système d'équations à résoudre suivant :

Conditions initiales :

$$\text{à } t=0, v_x = v_y = 0$$

Pour $t>0$:

L'équation de continuité

$$\frac{\partial v_x}{\partial x} + \frac{\partial v_y}{\partial y} = 0 \quad (32)$$

L'équation de la quantité de mouvement suivant x et y

$$\frac{\partial v_x}{\partial t} + \rho \left[v_x \frac{\partial v_x}{\partial x} + v_y \frac{\partial v_x}{\partial y} \right] = -\frac{\partial P}{\partial x} + \mu \left[\frac{\partial^2 v_x}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v_x}{\partial y^2} \right] \quad (33)$$

$$\frac{\partial v_y}{\partial t} + \rho \left[v_x \frac{\partial v_y}{\partial x} + v_y \frac{\partial v_y}{\partial y} \right] = -\frac{\partial P}{\partial y} + \mu \left[\frac{\partial^2 v_y}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v_y}{\partial y^2} \right] \quad (34)$$

III-5-a Conditions aux limites

Pour étudier l'écoulement entre les deux électrodes et déterminer les vitesses v_x et v_y , en se

basant sur le domaine illustré sur la figure III-3, il faut définir les conditions aux limites. Les conditions appliquées à ce modèle sont les suivantes :

- i. A l'entrée, soit en $x = 0$: $v_x = v_0$ et $v_y = 0$.
- ii. A la sortie du domaine, soit en $x = 62\text{cm}$, $\frac{\partial v_x}{\partial x} = \frac{\partial v_y}{\partial x} = 0$
- iii. Sur les électrodes ; la vitesse des particules est nulle, soit $v_x = 0$ et $v_y = 0$ pour $y = 0$ et $y = 14\text{ mm}$.

III-5-b Ecriture des équations adimensionnelles

Pour le modèle mathématique, nous faisons les normalisations suivantes [15]:

$$U = \frac{v_x}{v_0} \text{ et } V = \frac{v_y}{v_0} ; \tilde{t} = \frac{t}{H/v_0}$$

$$\tilde{x} = \frac{x}{H} ; \tilde{y} = \frac{y}{H} ;$$

$$P = \frac{P}{\rho v_0^2}$$

Nous obtenons alors :

$$\text{à } \tilde{t} = 0, \quad U = V = 0$$

Pour $\tilde{t} > 0$:

$$\text{- pour l'équation de continuité : } \frac{\partial U}{\partial \tilde{x}} + \frac{\partial V}{\partial \tilde{y}} = 0 \quad (35)$$

- pour l'équation de la quantité de mouvement suivant x :

$$\frac{\partial U}{\partial \tilde{t}} + \frac{\partial(UU)}{\partial \tilde{x}} + \frac{\partial(VU)}{\partial \tilde{y}} = -\frac{\partial P}{\partial \tilde{x}} + \frac{1}{R_e} \left[\frac{\partial}{\partial \tilde{x}} \left(\frac{\partial U}{\partial \tilde{x}} \right) + \frac{\partial}{\partial \tilde{y}} \left(\frac{\partial U}{\partial \tilde{y}} \right) \right] \quad (36)$$

- pour l'équation de la quantité de mouvement suivant y :

$$\frac{\partial V}{\partial \tilde{t}} + \frac{\partial(UV)}{\partial \tilde{x}} + \frac{\partial(VV)}{\partial \tilde{y}} = -\frac{\partial P}{\partial \tilde{y}} + \frac{1}{R_e} \left[\frac{\partial}{\partial \tilde{x}} \left(\frac{\partial V}{\partial \tilde{x}} \right) + \frac{\partial}{\partial \tilde{y}} \left(\frac{\partial V}{\partial \tilde{y}} \right) \right] \quad (37)$$

Les équations différentielles modélisantes sont résolues avec les conditions aux limites suivantes :

$$\begin{aligned}
 A \tilde{x} = 0, U = 1, V = 0 \\
 A \tilde{x} = \frac{L}{H}, \frac{\partial U}{\partial \tilde{x}} = \frac{\partial V}{\partial \tilde{y}} = 0 \\
 A \tilde{y} = 0, U = 0, V = 0 \\
 A \tilde{y} = 1, U = 0, V = 0
 \end{aligned}$$

Les paramètres de contrôle du problème sont :

- a- Le rapport d'aspect $= \frac{L}{H}$,
- b- Le nombre de Reynolds $R_e = \frac{v_0 H}{\nu}$ avec $\nu = \frac{\mu}{\rho}$

III-5-c Maillage numérique

La méthode numérique utilisée dans le cadre de ce travail est celle des volumes finis. Cette méthode est souvent utilisée à l'heure actuelle pour résoudre les problèmes de la dynamique des fluides, quel que soit le nombre de dimensions du problème [45]. Elle consiste à diviser le domaine en un certain nombre de volumes finis aux centres des quels sont placés les points intérieurs du maillage (voir la figure III-4). Les points limites sont centrés aux faces limites. Bien qu'il ne soit pas nécessaire que le maillage soit uniforme, l'uniformité des dimensions des volumes finis suivant chaque direction facilite l'obtention de certaines approximations numériques avec des erreurs de troncature d'un certain ordre désirable. Pour rendre le nombre des volumes finis égal à celui des points du maillage, on considère que les points sur les limites, gauche et droite, du domaine de calcul sont centrés dans des volumes finis ayant des dimensions horizontales nulles. Aussi, les points sur les limites, inférieure et supérieure, du domaine de calcul sont centrés dans des volumes avec des dimensions verticales nulles.

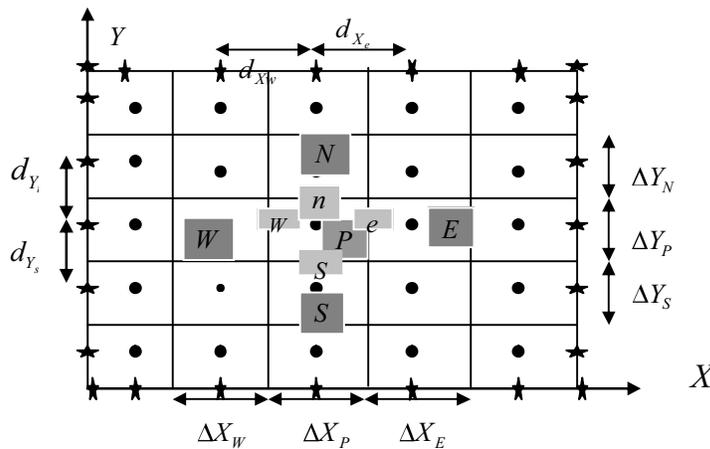


Figure III-4 : Exemple d'un maillage uniforme suivant x et suivant y.

- Points intérieurs
- ★ Points limites

Le centre d'un volume fini typique est dénommé P. Chaque volume fini à l'intérieur du domaine de calcul est adjacent à quatre volumes finis voisins. La détermination de toutes les dimensions des volumes finis, toutes les distances entre les points centrés dans ces volumes, les coordonnées de ces points et les coordonnées des faces des volumes finis, complète les spécifications géométriques du maillage qui s'avéreront nécessaires pour la discrétisation des équations différentielles dans les volumes finis et pour la représentation graphique des résultats.

III-5-d Discrétisation numérique

Pour l'obtention d'une solution numérique précise qui peut reproduire un résultat expérimental, il faut choisir une méthode de discrétisation qui, avec un maillage affiné, peut donner des solutions qui sont à la fois qualitativement et physiquement acceptables. Pour cela, nous avons utilisé une méthode de discrétisation numérique d'ordre deux.

- La discrétisation temporelle en second ordre, qui consiste à écrire [45] :

$$\frac{\partial \phi^{t+\Delta t}}{\partial t} \approx \frac{3\phi^{t+\Delta t} - 4\phi^t + \phi^{t-\Delta t}}{2\Delta t} + O(\Delta t)^2 \quad \phi \text{ est une variable dépendant du temps}$$

Et donc, une discrétisation de la variation temporelle locale, avec une erreur de troncature

d'ordre deux, $(\Delta t)^2$ est :

$$\frac{\partial \phi^{t+\Delta t}}{\partial t} \approx \frac{3\phi^{t+\Delta t} - 4\phi^t + \phi^{t-\Delta t}}{2\Delta t}$$

Cette discrétisation est appelée « second order Euler Backward ». Ainsi on peut démontrer que :

$$\phi^{t+\Delta t} = 2\phi^t - \phi^{t-\Delta t}. \text{ Cette discrétisation est celle d'Adam-Bashforth [45].}$$

- La discrétisation spatiale en second ordre, qui nous permet d'écrire :

$$\frac{\partial \phi}{\partial y_n} = \frac{\phi_N - \phi_P}{d_{y_n}}, \text{ avec une erreur de troncature d'ordre } (d_{y_n})^2.$$

Avec $\frac{\partial \phi}{\partial y_n}$: la valeur de la dérivée première de ϕ , à l'interface au milieu de la distance entre les

points P et N (suivant l'axe y). Cette distance est ci-après dénommée d_{y_n} .

Si le maillage est uniforme, le schéma des différences centrées utilisé pour la discrétisation des dérivées spatiales d'une variable est d'ordre deux, d'où :

$$\phi_n = \frac{\phi_N + \phi_P}{2} - \frac{1}{16} \frac{\partial^2 \phi}{\partial y_n^2} (dy_n)^2 + \dots \quad \text{donc}$$

$$\phi_n = \frac{\phi_N + \phi_P}{2} \quad \text{avec une erreur de troncature d'ordre } (dy_n)^2.$$

Dans ce qui suit, nous utilisons une discrétisation spatiale avec une erreur de troncature de l'ordre $(\Delta x^2), (\Delta y^2)$.

Les résultats des intégrales sont réarrangés sous la forme standard de l'équation de discrétisation algébrique de la quantité de mouvement suivant x :

$$A_P U_{P_U}^{t+\Delta t} = A_E U_{E_U}^{t+\Delta t} + A_W U_{W_U}^{t+\Delta t} + A_N U_{N_U}^{t+\Delta t} + A_S U_{S_U}^{t+\Delta t} + S_U \quad (38)$$

De même, pour l'équation de discrétisation algébrique de la quantité de mouvement suivant y, nous obtenons :

$$A_P V_{P_V}^{t+\Delta t} = A_E V_{E_V}^{t+\Delta t} + A_W V_{W_V}^{t+\Delta t} + A_N V_{N_V}^{t+\Delta t} + A_S V_{S_V}^{t+\Delta t} + S_V \quad (39)$$

A_P, A_E, A_W, A_N et A_S sont des coefficients qui dépendent du nombre de Reynolds.

III-5-e Résolution des équations hydrodynamiques

Pour résoudre l'ensemble des systèmes d'équations de discrétisation des vitesses, de la pression, nous avons suivi l'algorithme SIMPLER (Semi – Implicit – Pressure – Linked - Equation-Revised) [45].

III-5-f Résultats

Nous présentons, dans un premier lieu, les résultats obtenus par nos calculs dans le cas du réacteur cité ci-dessus et donnons, par la suite, les courbes qui illustrent l'effet de l'espace inter électrodes sur les différents paramètres calculés.

i- Réacteur avec rapport d'aspect $L/H = 44.28$

Compte tenu de la simplicité de la géométrie étudiée, nous avons utilisé, pour la représentation de la zone modélisée, un maillage régulier qui comporte 402 x 42 points. Ce maillage, illustré sur la figure III-5, permet l'obtention d'une précision convenable sur les résultats avec un minimum de points et une réduction du temps de calcul.

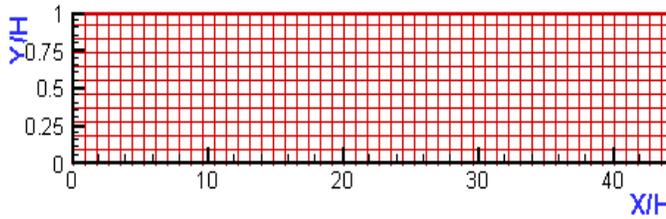


Figure III-5 : Maillage de la zone modélisée

Le domaine modélisé (figure III-1) ne comporte qu'un seul espace inter électrodes. La vitesse moyenne du gaz dans le tube, obtenue expérimentalement par H. Caquineau et A. Dollet [9, 40] dans les conditions de température (300 °C) et de pression (1 Torr), est de $\langle V_x \rangle = 1.56$ m/s, elle est calculée selon la relation $\langle V_x \rangle = \frac{Q_T}{S}$ [9], où S est la section droite du tube (diamètre 15 cm) et Q_T le débit volumique total à (T, P).

Par ailleurs, d'après Bird [15], le profil de vitesse d'un fluide dans un tube en régime laminaire est un profil parabolique comme l'illustre la figure III-6 qui est aisée à déterminer par l'expression :

$$V_x(x) = 2\langle V_x \rangle \left(1 - \left(\frac{r}{R} \right)^2 \right) \quad (40)$$

où r est la distance du point considéré à l'intérieur du tube par rapport à son centre et R le rayon de ce tube.



Figure III-6 : La vitesse moyenne est d'autant plus grande que la section est faible

Avec les paramètres $R_e = 5$, $v_0 = 2.45$ m/s l'écoulement obtenu par nos calculs est uniforme à l'entrée du réacteur, avec une vitesse horizontale constante (égale à 2.4 m/s). Dans l'espace inter électrodes, par contre, il est parabolique avec une vitesse maximale de 4.5 m/s. La vitesse verticale est partout nulle. Ce résultat est illustré sur la figure III-7.

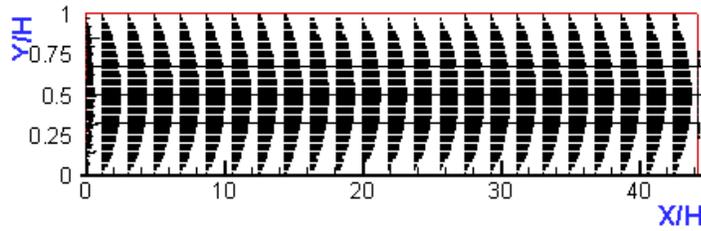


Figure. III-7 : Champ de vitesses « Ecoulement parabolique » dans l'espace inter électrodes.

L'évolution de la pression dans l'espace inter électrodes est représentée sur la figure III-8. Nous remarquons que la pression chute le long de l'écoulement et qu'elle ne subit aucune variation verticale.

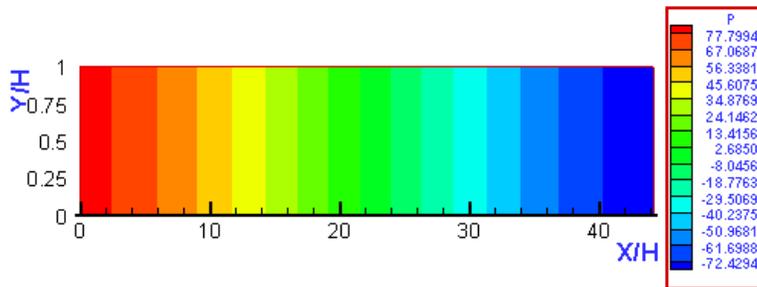


Figure III-8 : Chute axiale de la pression

Les résultats obtenus sont conformes avec ceux obtenus par H. Caqueneau et A.Dollet, pour les mêmes conditions de travail. Ces derniers sont illustrés sur la figure III-9 [35].

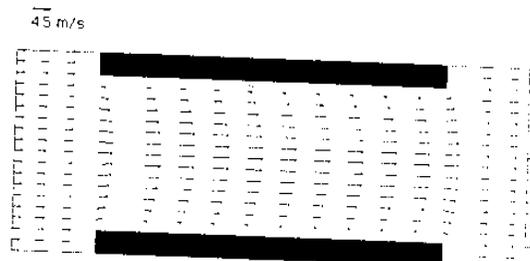


Figure III-9 Vitesse d'écoulement obtenue par H. Caqueneau et A.Dollet [35]

ii- Effet du rapport d'aspect sur les paramètres calculés

Pour étudier l'effet du rapport d'aspect sur la vitesse d'écoulement du gaz et la pression, nous avons fait varier la largeur inter électrodes et calculé ces paramètres. Les résultats obtenus sont illustrés sur la figure III-10.

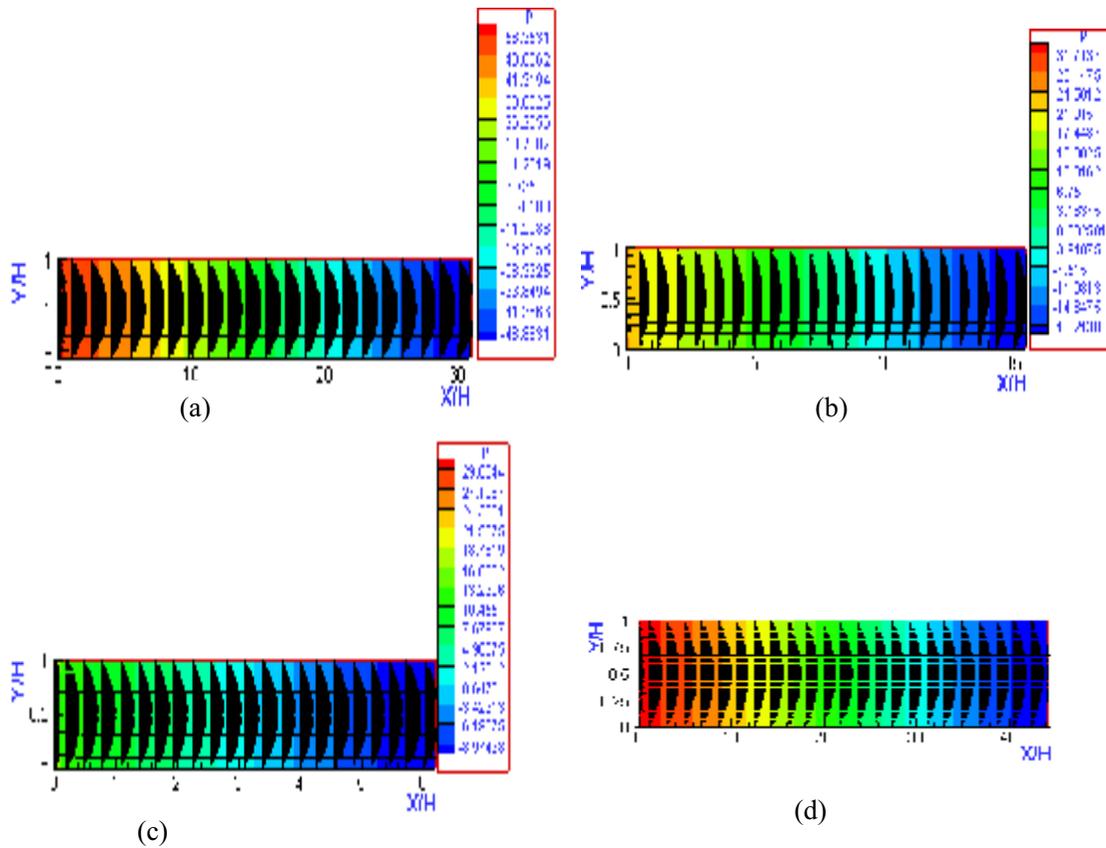


Figure III-10 : Effet du rapport d'aspect sur la vitesse d'écoulement :

- (a) $L/H = 31 \rightarrow H = 2\text{cm}$
- (b) $L/H = 15.5 \rightarrow H = 4\text{cm}$
- (c) $L/H = 6.1 \rightarrow H = 10\text{cm}$
- (d) $L/H = 44.28 \rightarrow H = 1.4\text{cm}$

En faisant varier le rapport d'aspect suivant l'ordre croissant, nous avons remarqué que le profil de vitesse v_x reste toujours parabolique le long de l'espace inter électrodes suivant l'axe x [figure III-10(a) (b) (c)]. La composante v_y de la vitesse du gaz est pratiquement nulle. Il en est de même pour la pression. Nous avons remarqué qu'elle chute le long de l'espace inter électrodes et dépend du rapport d'aspect. Plus l'espace inter électrodes est important plus cette pression est faible

III-6 Conclusion

Nous avons présenté, dans ce chapitre, notre modèle hydrodynamique pour un réacteur à écoulement longitudinal, nous avons commencé d'abord par écrire les équations de Navier-Stokes de « continuité et de quantité de mouvement », qui nécessitent une méthode numérique précise afin de pouvoir donner une solution avec le minimum d'erreurs. Nous avons par la suite étudié l'influence de la variation du rapport d'aspect sur les paramètres calculés.

Les vitesses calculées par ce modèle serviraient comme paramètres d'entrées dans le modèle de transfert de matière ou pour la chimie de plasma pour le calcul de la vitesse de dépôt des espèces sur le film en cours de formation.

This document was created with Win2PDF available at <http://www.daneprairie.com>.
The unregistered version of Win2PDF is for evaluation or non-commercial use only.

CHAPITRE IV

MODELISATION DE LA DECHARGE ELECTRIQUE

*« Une théorie qui a donné de
tels résultats doit contenir une
grande part de vérité »*

H. A. Lorentz

IV-1 Introduction

Pour analyser le comportement électrique de la phase gazeuse du plasma, nous avons besoin de résoudre un certain nombre d'équations de la physique. Ces équations que nous avons présentées dans le chapitre II décrivent le mouvement des particules dans la phase gazeuse.

Dans ce chapitre, nous présentons un développement relativement rigoureux de ces équations et donnons le domaine de calcul ainsi que les conditions aux limites, sans oublier de parler des hypothèses et approximations choisies pour ce modèle. Nous nous focaliserons sur le calcul des données de base qui s'avéreront utiles pour une bonne simulation. Nous terminerons enfin, par une analyse des résultats obtenus et une conclusion.

IV-2 Présentation du réacteur

Dans la phase gazeuse des plasmas hors équilibre, les électrons jouent un rôle primordial, car l'énergie est d'abord transférée à ces particules qui par la suite effectuent des collisions avec les particules neutres du milieu.

Modéliser ces plasmas pour mieux comprendre et optimiser les dispositifs expérimentaux dans lesquelles ils interviennent nécessite la connaissance de données de bases dont nous parlerons par la suite. La limitation majeure à la modélisation est le manque de ces données dans la littérature, provenant de calculs et mesures directes. Ceci s'avère d'autant plus vrai que la nature du gaz ou du mélange gazeux est complexe [M .C Bordage, P. Ségur CPAT .Toulouse]. De ce fait, nous avons considéré, pour l'élaboration du modèle de décharge électrique, le modèle du réacteur présenté sur la figure IV-1 et utilisé par G.J.M. Hagelaar [46]. C'est un réacteur à courant continu. Il est composé de deux électrodes planes et parallèles, l'une est la cathode polarisée négativement avec une tension de 250 V. La deuxième électrode est l'anode reliée à la masse. La dimension de l'espace inter électrodes est de l'ordre de 0.35mm.

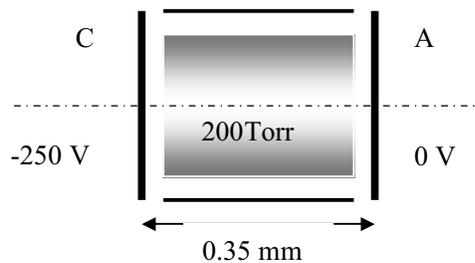


Figure IV-1 : Géométrie du réacteur modélisé

IV-3 Le mélange gazeux

Le gaz introduit dans le réacteur afin de créer la décharge électrique est un mélange gazeux composé d'hélium et d'hydrogène avec les pourcentages suivants :

- 97% d'Hélium (H_e)
- 3% d'Hydrogène (H_2)

Les différentes réactions, qui peuvent avoir lieu dans ce mélange, suite aux processus de collisions des espèces chargées avec les espèces réactives sont présentées sur le tableau IV-1 (a et b).

Réactions	Energie (eV)	Coefficient du taux de réaction
<i>L'excitation</i>		
R1 $e + H_2 \rightarrow e + 2H$	11.7	Fig.IV – 3 (f)
R2 $e + H_2 \rightarrow e + H_2(v)$	12.0	Fig.IV – 3 (e)
R3 $e + H_e \rightarrow e + H_e^*$	20.215	Fig.IV – 3 (a)
<i>L'ionisation par des électrons</i>		
R4 $e + H_2 \rightarrow 2e + H_2^+$	15.4	Fig.IV – 3 (d)
R5 $e + H_e \rightarrow 2e + H_e^+$	24.58	Fig.IV – 3 (c)
R6 $e + H_e^* \rightarrow 2e + H_e^+$	4.365	Fig.IV – 3 (b)
<i>Ionisation par des atomes excités</i>		
R7 $H_e^* + H_2 \rightarrow e + H_2^+ + H_e$	-4.815	$3.2 \times 10^{-11} \text{ cm}^3 \text{ s}^{-1}$
R8 $H_e^* + H \rightarrow e + H^+ + H_e$	-6.615	$1.1 \times 10^{-9} \text{ cm}^3 \text{ s}^{-1}$
R9 $H_e^* + H_e^* \rightarrow e^* + H_e^+ + H_e$	-15.0	$8.7 \times 10^{-10} \text{ cm}^3 \text{ s}^{-1}$
R10 $H_e^* + H_e^* \rightarrow e^* + H_e^+$	-17.4	$2.0 \times 10^{-9} \text{ cm}^3 \text{ s}^{-1}$

Tableau IV-1-a : Réactions dans le mélange gazeux hélium-hydrogène avec présentation de l'énergie moyenne perdue dans la réaction [46].

<i>la conversion de l'ion</i>		
R11	$H_2^+ + H_2 \rightarrow H_3^+ + H$	$2.1 \times 10^{-9} \text{ cm}^3 \text{ s}^{-1}$
R12	$H^+ + 2H_2 \rightarrow H_3^+ + H_2$	$3.1 \times 10^{-29} \text{ cm}^6 \text{ s}^{-1}$
R13	$H_e^+ + 2H_e \rightarrow H_{e_2}^+ + H_e$	$1.1 \times 10^{-31} \text{ cm}^6 \text{ s}^{-1}$
R14	$H_{e_2}^+ + H_2 \rightarrow H_2^+ + 2H_e$	$4.1 \times 10^{-10} \text{ cm}^3 \text{ s}^{-1}$
<i>La recombinaison</i>		
R15	$e + H_3^+ \rightarrow H + H + H$	0
R16	$e + H_3^+ \rightarrow H_2(v) + H$	0
R17	$H^- + H_3^+ \rightarrow 2H_2$	$2 \times 10^{-7} \text{ cm}^3 \text{ s}^{-1}$
<i>La desexcitation</i>		
R18	$e + H_e^* \rightarrow e^* + H_e$	-20.215
<i>L'attachement de l'électron</i>		
R19	$e + H_2(v) \rightarrow H^- + H$	0
<i>Détachement de l'électron</i>		
R20	$H^- + H \rightarrow e + H_2$	0
		$7.6 \times 10^{-11} \text{ cm}^3 \text{ s}^{-1}$

Tableau IV-1-b : Réactions dans le mélange gazeux hélium-hydrogène avec présentation de l'énergie moyenne perdue dans la réaction[46].

IV-3 Principales hypothèses

Pour élaborer ce modèle, nous avons considéré les hypothèses et les approximations suivantes :

1. Ne sont prises en considération que les interactions entre les espèces chargées et le gaz. Les neutres (atomes) dans l'état excité sont négligés (R6) ;
2. L'ionisation est considérée seulement pour les molécules neutres du gaz, nous négligeons les réactions (R7-R8-R9-R10-R18-R19).
3. Les collisions électrons –électrons et électrons –ions ne sont pas prises en compte (R15-R16-R17) ;
4. Nous avons choisi de travailler uniquement avec le processus d'ionisation, nous ignorons l'attachement, l'excitation et la conversion (R1-R2-R3-R11-R12-R13-R14-R20) ;

5. Le transport des ions est décrit par l'équation de continuité et l'équation de quantité de mouvement avec dérive-diffusion ;
6. Le transport des électrons est décrit par les trois premiers moments de l'équation de Boltzmann et qui sont :
- l'Equation de continuité
 - l'Equation de quantité de mouvement
 - l'Equation de l'énergie
7. La diffusion des électrons déterminée par le coefficient de diffusion D_e et la mobilité μ_e sont supposées satisfaire la relation d'Einstein [30] :

$$\frac{D_e}{\mu_e} = \frac{kT_e}{e} = \frac{2}{3} \frac{\xi_e}{e} \quad \xi_e : \text{énergie de l'électron}$$

où la température électronique T_e et/ou l'énergie moyenne $\xi_e = \frac{3}{2} kT_e$, sont déduites de l'équation d'énergie de l'électron.

Afin de fermer ce système pour les équations des moments de l'électron, on doit assumer que :

- a. le tenseur de pression électronique est isotropique, ce qui nous permet d'écrire $P = n_e kT_e$.
- b. l'énergie cinétique de l'électron est négligeable devant son énergie thermique.
- c. les taux moyens de collision électron-neutres dépendent seulement de l'énergie moyenne de l'électron.
- d. la description du deuxième moment (transfert de quantité de mouvement) est traitée dans la forme dérive - diffusion
- e. la fréquence d'ionisation est supposée dépendre du champ électrique local réduit « $\frac{E}{P}$ », rapport du champ électrique et de la pression, exprimé en (V/Torr/cm).
- f. Il n'est pas nécessaire de résoudre l'équation de transfert d'énergie d'électrons, le coefficient de diffusion est déterminé par l'énergie caractéristique $\frac{D_e}{\mu_e}$.

8- Nous avons donc choisi de travailler avec le processus d'ionisation de l'hélium qui est décrit par l'équation R5 (pas de recombinaison) qui provient :

- D'un processus local dit de colonne positive ;
- D'un processus d'expansion des gaines.

9- Nous avons négligé le processus d'émission secondaire d'électrons (processus de la lueur négative ; cf. chapitre I).

10- La décharge est supposée symétrique (aucune distinction n'est effectuée entre les deux électrodes).

IV-4 Système d'équations

Le modèle de la décharge électrique en courant continu est de type fluide, auto cohérent, donc la description du comportement électrique du réacteur peut se faire à l'aide de l'ensemble d'équations décrites au chapitre II, avec les approximations citées précédemment :

➤ Equation de Poisson :

$$\nabla^2 \phi = -\frac{|e|}{\varepsilon_0} (n_p - n_e) \quad (41)$$

➤ Equations de continuité :

$$\frac{\partial n_e}{\partial t} + \nabla(n_e v_e) = S_e \quad (42) \quad \text{pour les électrons}$$

$$\frac{\partial n_p}{\partial t} + \nabla(n_p v_p) = S_p \quad (43) \quad \text{pour les ions}$$

$$S_e = S_p = n_e \nu_i$$

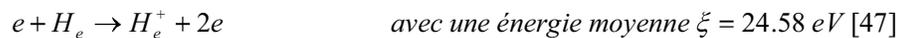
avec ν_i la fréquence d'ionisation

➤ équation de transfert de la quantité de mouvement :

$$n_e v_e = -n_e \mu_e E - D_e \nabla n_e \quad (44)$$

$$n_p v_p = n_p \mu_p E - D_p \nabla n_p \quad (45)$$

Ce système d'équations et appliqué à la réaction R5 :



IV-5 Données de base

Les données de base nécessaires pour l'exécution du programme de la décharge, sont les mobilités et les coefficients de diffusion des espèces chargées :

☞ Les données de base telles que le coefficient de diffusion électronique D_e , la mobilité des électrons μ_e et les fréquences de collisions des électrons avec les espèces lourdes ν dépendent de leur énergie, il est donc nécessaire de connaître les seuils des sections efficaces des différents processus de collisions inélastiques (excitation, ionisation, attachement...) afin de pouvoir calculer ces paramètres.

☞ Par ailleurs, pour les ions présents dans le gaz, les coefficients de diffusion, de mobilités dépendent du champ local réduit.

De ce fait, pour pouvoir les déterminer, nous nous sommes basées sur des courbes obtenues par l'utilisation de l'équation de Boltzmann en énergie, calculées par le logiciel BOLSIG [28, 29] afin de pouvoir calculer tout d'abord :

i- Le coefficient de diffusion $D_e = \frac{kT_e \mu_e}{e}$ avec $kT_e = \frac{2}{3} \xi$

Sachant que l'énergie moyenne ξ de l'électron représente dans ce cas l'énergie d'ionisation donnée dans le tableau ci-dessus par la réaction R5 [47].

ii- La mobilité électronique est obtenue en fonction de la valeur de l'énergie moyenne en eV de la figure IV-2 (a) [47].

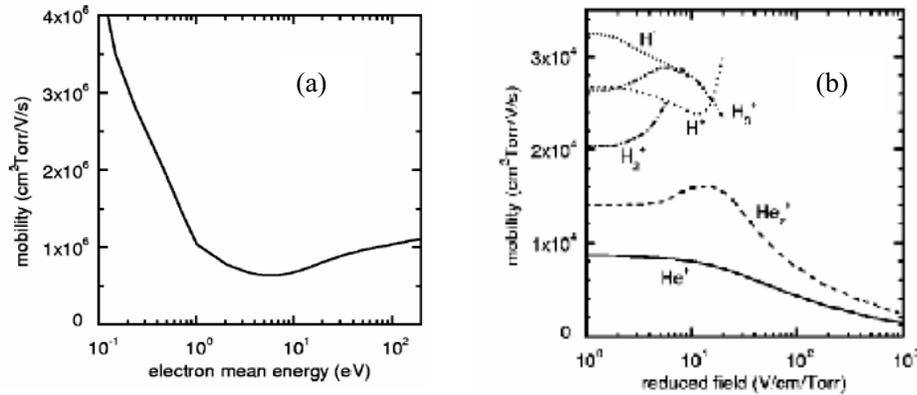


Figure. IV-2 : Mobilité électronique (a) et des différents ions (b) dans le mélange 97% Hélium et 3% Hydrogène [47]

-Le coefficient de diffusion des ions est donné par $D_p = \frac{kT \mu_p}{e}$, avec :

$$kT = kT_g + \frac{m + m_g}{5m + 3m_g} m_g (\mu_p E)^2 \quad [46,47]$$

μ_p : Mobilité des ions;

T_g : Température du gaz;

m : Masse de l'ion (H_e^+)

m_g : Masse du mélange gazeux.

-La valeur de la mobilité μ_p pour l'ion H_e^+ est obtenue à partir de la courbe représentante la mobilité ionique en fonction du champ électrique local (Figure IV-2 (b)).

-Le calcul de la valeur du champ électrique E se fait par la formule suivante:

$$E = \frac{V}{L}$$

où V : représente la différence de potentiel de l'espace inter électrode

L : est la distance entre les deux électrodes (voir Figure IV-1)

- Le taux d'ionisation k_i est obtenu à partir de la courbe qui représente les différents taux de collision en fonction de l'énergie moyenne (figure IV-3).

- La densité des ions H_e^+ est calculée par la loi des gaz parfait $P = nkT$

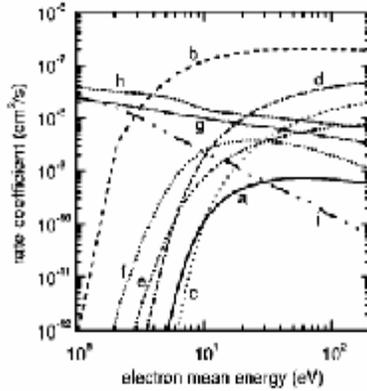


Figure IV-3 : Taux de collision des réaction par impact électronique dans le mélange 97% He 3% H : a- excitation totale de He, b- ionisation par He*, c- ionisation directe, d- ionisation directe de H₂, e- excitation du H₂, f- dissociation du H₂, g et h- recombinaisons du H₃⁺, i- attachement dissociative du H₂ [47]

IV-6 Traitement numérique des équations

IV-6-a Ecriture des équations

Le système d'équations présentées précédemment est écrit de la façon suivante après avoir remplacé les équations (44) et (45) dans respectivement (42) et (43) :

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{Div} \left(-D_e \nabla n_e + n_e \mu_n \nabla V \right) + \frac{\partial n_e}{\partial t} = S_e \quad (46) \\ \text{Div} \left(-D_p \nabla n_p - n_p \mu_p \nabla V \right) + \frac{\partial n_p}{\partial t} = S_p \quad (47) \\ \nabla V = -\frac{\rho}{\epsilon_0} \quad (48) \\ \text{avec} \quad \rho = |e|(n_p - n_e) \\ S_e = S_p = n_e \nu_i \end{array} \right.$$

IV-6-b Conditions aux limites

i- Les conditions aux limites utilisées sont les conditions de Dirichlet : aux contact, c'est-à-dire sur les électrodes :

- en $x = 0$ et $x = 0.35 \text{ mm}$ $n_e = n_p = 0$.

- en $x=0$ (à la cathode), le potentiel $V = V_M = -250V$;

- en $x=0.35\text{mm}$ (à l'anode), $V = 0$.

ii- Les conditions initiales sont :

À $t=0$, $n_e = n_p = 10^{10} \text{ cm}^{-3}$

$V=0$

IV-6-c Discrétisation numérique

Le système d'équations est monodimensionnel. Il est discrétisé par la méthode des volumes finis suivant le schéma illustré sur la figure IV-4.

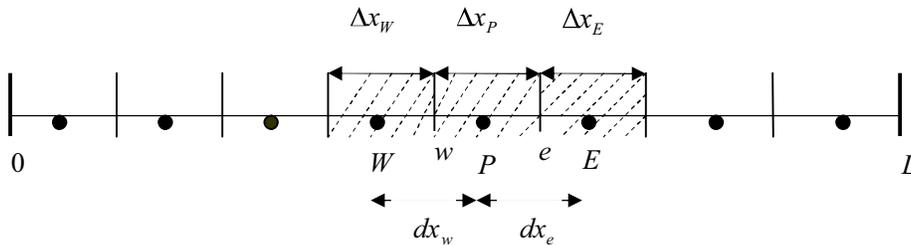


Figure IV-4 : Maillage de l'espace inter électrodes dans le modèle de décharge

Pour des modalités d'écriture, nous posons :

$$n_e \equiv N$$

$$n_p \equiv M$$

Résoudre le système d'équations notées ci-dessus revient à intégrer chaque équation dans un volume fini typique :

▪ Equation de continuité pour les électrons :

La discrétisation de l'équation de continuité par la méthode des volumes finis consiste à réarranger les intégrales sous la forme :

$$A_P N_P^{t+\Delta t} = A_E N_E^{t+\Delta t} + A_W N_W^{t+\Delta t} + S \quad (49)$$

Le système d'équations obtenu après la discrétisation est tri diagonal et résolu directement par l'algorithme de Thomas [48].

- Equation de continuité pour les ions :

En effectuant la même démarche que pour des électrons, nous obtenons le Système d'équations suivant :

$$A_P M_P^{t+\Delta t} = A_E M_E^{t+\Delta t} + A_W M_W^{t+\Delta t} + S \quad (50)$$

Qui est résolu de la même manière.

- Equation de poisson

$$\frac{\partial^2 V}{\partial x^2} = \frac{e}{\epsilon_0} (N - M) \quad (51)$$

La discrétisation spatiale en premier ordre de l'équation de poisson, nous permet d'obtenir

$$\text{le système } A_P V_P^{t+\Delta t} = A_E V_E^{t+\Delta t} + A_W V_W^{t+\Delta t} + S \quad (52)$$

Ce système est tri diagonal et peut être résolu par l'algorithme de Thomas [48].

- Test de convergence :

A partir des conditions initiales, nous faisons tourner le programme avec des pas de $\Delta t = 10^{-16} s$ Jusqu'à atteindre le régime stationnaire.

IV-6-d Résultats du modèle de décharge électrique

La résolution du système constitué par les équations (46) à (48) nous a permis de déterminer les variations spatiales :

- du champ électrique,
- des densités des espèces chargées.

Les résultats que nous présentons, dans un premier lieu, sont ceux obtenus pour les conditions de pression, géométrie et tension citées ci-dessus.

➤ La variation spatiale des densités d'électrons et d'ions H_e^+ , dans la phase gazeuse du plasma composé de 97% d'hélium et 3% d'hydrogène, est illustrée sur la figure IV-5. Le profil de la distribution des ions nous montre l'évolution de la densité des ions tout en allant de la cathode vers l'anode. Cette évolution a une allure de cloche. Ceci est du à la diffusion rapide des électrons de la cathode vers l'anode, puis à leur blocage par le champ électrique aux interfaces plasma – gaine, qui par une augmentation locale près de ces interfaces provoque une ionisation des molécules du gaz suffisamment importante pour favoriser l'accroissement de la densité des électrons créés dans le volume du gaz, et qui pourront sortir finalement de la décharge par diffusion.

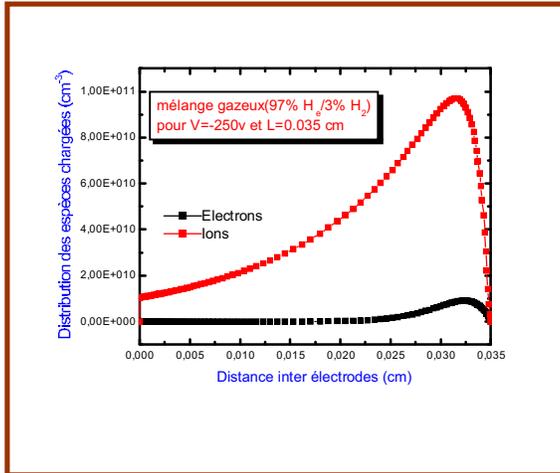


Figure IV-5 : Distribution spatiales des densités des électrons et des ions H_e^+

Comme nous n’avons considéré que le processus d’ionisation des neutres avec les électrons, avec une fréquence d’ionisation considérable ($1.7 \cdot 10^9 \text{ s}^{-1}$), c’est pourquoi nous remarquons que l’ionisation est plus importante et la densité des ions positifs dans les gaines est supérieure à celle des électrons dans le plasma (figure IV-5).

Ces résultats ont été obtenus avec une précision de 10^{16} s. En diminuant le temps d’incrément (de 10^{-17} s à 10^{-18} s), le profil des espèces chargées apparaît mieux. Cependant, d’après les figures IV-6 et IV-7, l’évolution spatiale des densités électroniques et ioniques apparaît clairement depuis les valeurs nulles jusqu’aux valeurs maximales (10^{10} cm^{-3}) à l’interface gaines – plasma, puis les densités deviennent égales dans la colonne positive (neutralité). Ceci nous montre que certains résultats s’améliorent par la réduction du pas du temps.

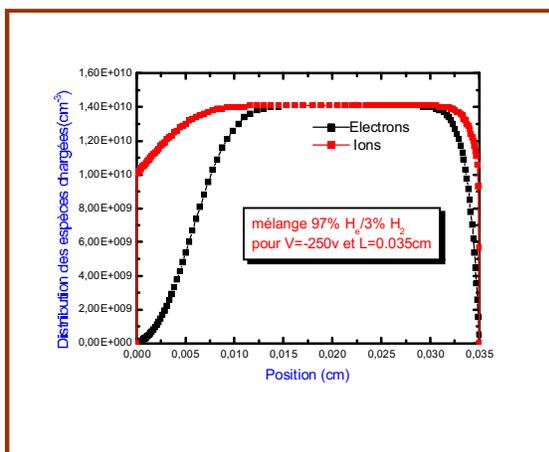


Figure IV-6 : Profil des densités des espèces chargées pour $\Delta t = 10^{-17}$ s

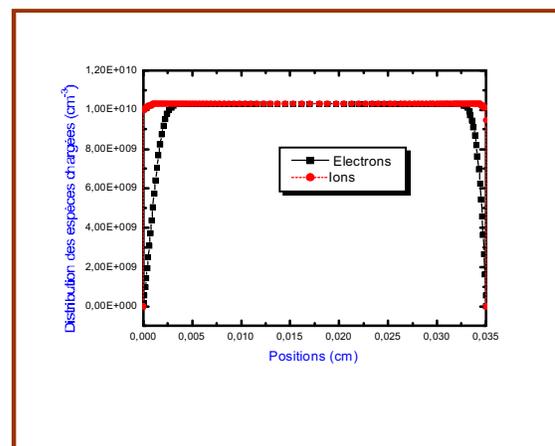


Figure IV-7 : Profil des densités des espèces chargées pour $\Delta t = 10^{-18}$ s

Le même résultat est obtenu pour le champ électrique. Nous l'avons illustré sur la figure IV-8 :

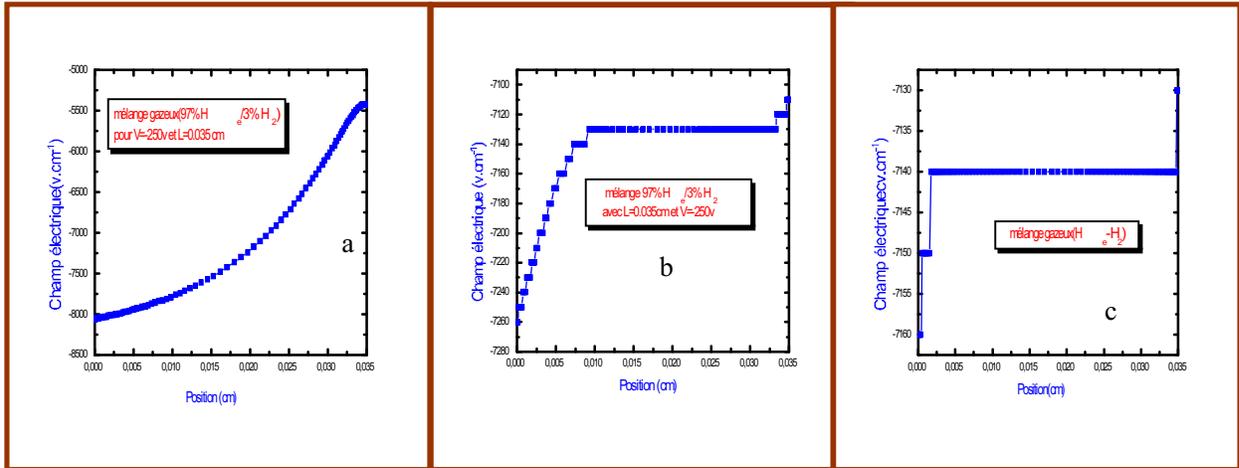


Figure IV-8 : Champ électrique pour différentes valeurs de Δt : 10^{-16} (a), 10^{-17} (b), 10^{-18} (c).

Les figures montrent que le champ électrique, en un point, est déterminé à la fois par le potentiel extérieur imposé aux électrodes ($V=-250V$) et par les phénomènes de charges d'espaces dans le plasma. Ainsi, il est variable au niveau des gaines et constant dans le plasma. Notons aussi l'existence d'une bonne corrélation entre la distribution spatiale des espèces chargées et celle des champs électriques. Dans la colonne positive, le champ électrique est constant et c'est lui qui est responsable de l'égalité des deux courants ionique et électronique en freinant la diffusion rapide des électrons par rapport à celle des ions (différence de mobilités) jusqu'à ce que la diffusion devienne ambipolaire. Ceci est indiqué sur les figures (IV-6) et (IV-7) où l'allure montre l'égalité des densités des deux espèces chargées. L'allure de la densité des électrons (représentée en noir), n'apparaît pas dans la région plasma, ce qui prouve l'égalité de la densité entre les deux espèces. Par ailleurs, la variation du champ électrique dans les gaines provoque une variation de la densité des espèces chargées.

IV-6-4-b- Influence de la distance inter électrodes

Dans ce modèle, la distance inter électrode du réacteur considéré est très petite (0.35 mm), elle

est de l'ordre de la longueur de Debye ($\lambda_{Debye} (mm) = 7.44 \cdot 10^3 \left[\frac{T_e (eV)}{N_e (cm^{-3})} \right]^{\frac{1}{2}}$) (cf. chapitre I), dans

notre cas, elle est égale à 0.30 mm, ce qui indique que les longueurs de la colonne positive et de la zone sombre sont réduites et peuvent même disparaître. Ceci est observé dans la figure IV-5. Donc, il faut souligner à ce stade que seules les zones de chute cathodique et de leur négative

sont nécessaires à l'existence d'une décharge maintenue par un courant continu, ce qui explique la distribution des espèces chargées dans la figure IV-5 pour un temps de 10^{16} s.

Nous avons fait varier la distance inter électrodes (4-10 cm) pour un temps de 10^{16} s, ce qui nous a permis de voir clairement cette distribution sachant que la colonne positive possède une longueur relativement importante dans l'espace inter électrodes et qui permet d'assurer des temps de passage relativement longs et la production de diverses espèces actives. (Figures IV-9, IV-10, IV-11 et IV-12).

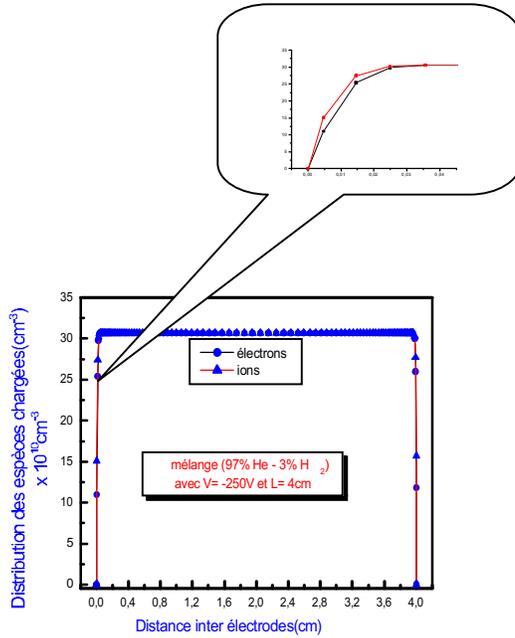


Figure IV-9: Distribution des espèces chargées en fonction de la distance inter-électrodes

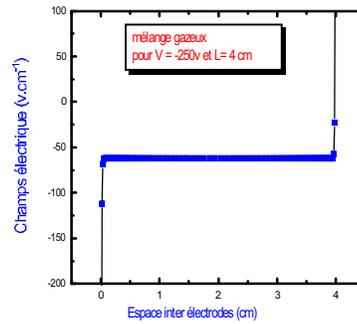


Figure IV-10: Profil du champ électrique en fonction de la distance inter-électrodes

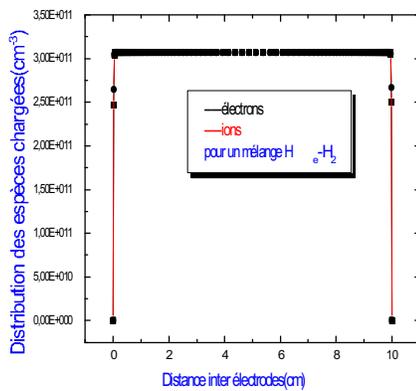


Figure IV-11: Distribution des espèces chargées en fonction de la distance inter électrodes

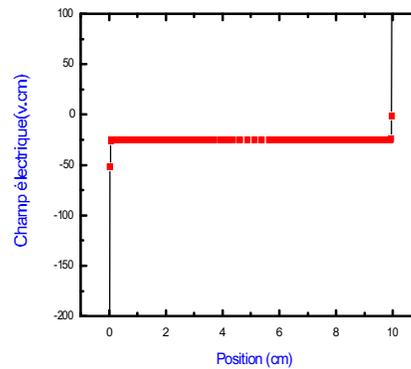


Figure IV-12: Distribution du champ électrique en fonction de la distance inter électrodes

Nous remarquons aussi que la valeur du champ électrique varie en fonction de la distance inter électrodes.

IV-6-4-b- Conditions aux limites

Sur la figure (IV-13), nous avons représenté les densités des électrons pour des conditions aux limites différentes des premiers résultats. En effet, nous avons pris comme conditions à la cathode où $x = 0$, la densité des électrons égale à $2 \times 10^9 \text{ cm}^{-3}$, et à l'anode elle est prise égale à 10^{10} cm^{-3} . Nous remarquons que la densité des électrons évolue depuis $2 \times 10^9 \text{ cm}^{-3}$ et croît au près de l'anode avec une densité de 10^{10} cm^{-3} . Ce résultat prouve que nous pouvons changer les conditions aux limites du réacteur si nous tenons compte de l'effet de l'émission secondaire et calculons son coefficient dans ce modèle comme le cas traité par Hagelaar et qui est illustré sur la figure IV-14 [46].

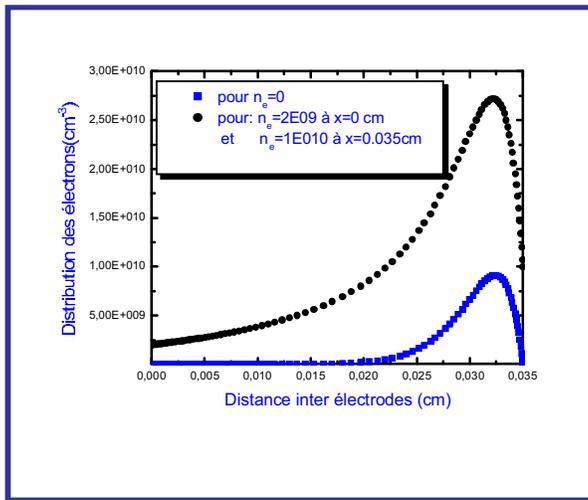


Figure IV-13 : Profil de la densité des électrons pour des conditions aux limites différentes

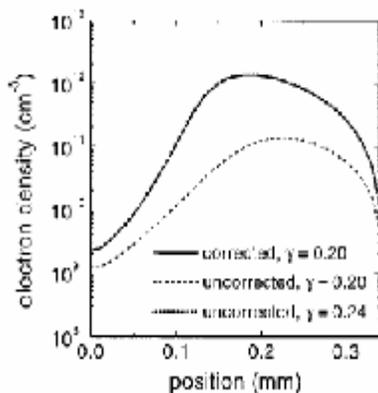


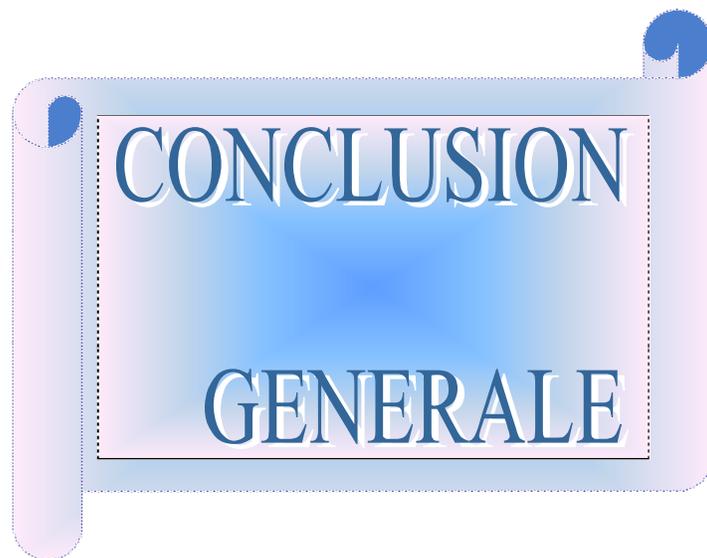
Figure IV-14: Profil de la densité des électrons en fonction de l'espace inter électrodes pour des conditions aux limites considérant le coefficient d'émission secondaire[46].

Conclusion :

Ce chapitre a été consacré à la modélisation de la décharge électrique du plasma dhélium. Cette étude a permis tout d'abord de présenter notre modèle fluide auto cohérent déterminé par les équations de continuité pour les espèces chargées, couplées avec l'équation de poisson, en émettant certaines hypothèses et faisant quelques approximations. Nous avons obtenu des résultats qui nous renseignent sur les densités électroniques et ioniques ainsi que sur la variation du champ électrique dans l'espace inter électrodes, puis nous avons étudié l'influence de la distance inter électrodes sur la distribution des espèces chargées et du champ électrique.

En effet, le modèle que nous avons élaboré, avec certaines conditions et hypothèses simplificatrices, nous permet d'étudier l'influence du taux de réaction (ionisation), de la pression, de la largeur de l'espace inter électrodes et de la tension appliquée sur la distribution des espèces chargées et du champ électrique.

This document was created with Win2PDF available at <http://www.daneprairie.com>.
The unregistered version of Win2PDF is for evaluation or non-commercial use only.



CONCLUSION
GENERALE

This document was created with Win2PDF available at <http://www.daneprairie.com>.
The unregistered version of Win2PDF is for evaluation or non-commercial use only.



Conclusion générale et perspectives

L'objectif du travail présenté dans ce mémoire est de décrire les différents processus entrant dans la formation des films élaborés par plasmas froids. Pour cela, nous avons développé deux modèles de simulation du fonctionnement d'un réacteur plasma, basés sur la méthode numérique des volumes finis. Cette étude a été réalisée dans le cadre d'une collaboration avec M. Afrid, professeur au département de « physique énergétique », de l'université de Constantine.

Dans un premier temps, nous avons élaboré un modèle hydrodynamique, bidimensionnel d'écoulement d'un gaz dans l'espace inter électrodes, en se basant sur les données et résultats expérimentaux du réacteur à écoulement longitudinal, utilisé au LGET de Toulouse par l'équipe de B.Despax [35]. Nous avons obtenu très rapidement des résultats qui sont relativement en bon accord avec ceux du modèle bidimensionnel, réalisé par l'équipe de Despax.

Un modèle de décharge électrique a été traité rigoureusement. Mais le manque de données de base concernant ce modèle, nous a conduit à utiliser un autre type de réacteur à courant continu, celui étudié par G.J.M. Hagelaar et J.P.Boeuf [47]. Nous avons adopté une démarche consistant à traiter de la manière la plus équilibrée possible, les interactions électrons molécules dans la phase gazeuse du plasma. Au vu des premiers résultats, nous avons donné des hypothèses et utilisé des approximations qui ont permis de simplifier la formulation du modèle et d'obtenir des résultats qui sont physiquement qualitativement acceptables.

Il s'est avéré que les simulations nécessitaient un temps de calcul très important. Néanmoins, nous avons pu obtenir grâce au modèle fluide des résultats informant sur la distribution spatiale des densités des espèces chargées et de la variation du champ électrique dans l'espace inter électrodes.

Il faut dire que les étapes de modélisation électrique constituent des phases difficiles et que les résultats auxquels nous sommes parvenus, ne nous donnent pas entière satisfaction. En effet, nous nous sommes basées seulement sur le processus d'ionisation, alors qu'en réalité, pour un gaz faiblement ionisé, les ions ne contribuent que rarement dans le dépôt. Pour arriver à ce stade, il faut considérer la dissociation des espèces chimiques, et calculer leur taux de dissociation et leur recombinaison que nous avons négligée alors qu'elle joue un rôle considérable dans le dépôt des films. Pour cela des mesures directes dans des laboratoires spécialisées nous seraient extrêmement utiles, car la conclusion la plus importante de notre étude



Conclusion générale et perspectives

est que le modèle pour lequel nous avons opté, permet de retrouver, avec une précision très convenable, une large gamme de résultats expérimentaux concernant non seulement la décharge électrique mais aussi la vitesse de dépôt et ses variations dans le réacteur ainsi que la composition des films déposés.

Notre étude aurait été donc plus complète si nous avions pu terminer notre modélisation électrique en radio fréquence. Mais, nous pouvons dire que les résultats obtenus s'ouvrent maintenant à des perspectives considérables dont voici quelques exemples :

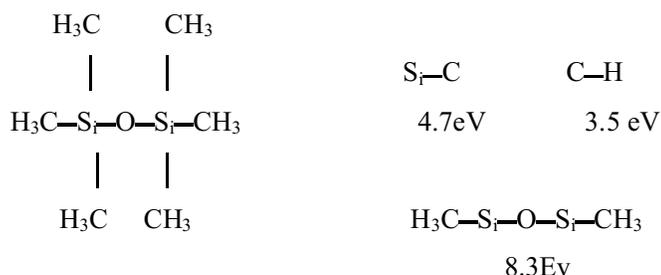
- a- Pour le modèle de la décharge électrique :
 - traiter numériquement ce modèle, en radio fréquence et étudier les variations du champ électrique, des densités électroniques et taux d'ionisation à différents instants d'un cycle RF.
 - résoudre l'équation de Boltzmann en considérant la source avec ionisation et recombinaison.
 - calculer les taux de dissociation des espèces lourdes
- b- Une étude peut être poursuivie afin de développer le modèle de transfert de matière en suivant les étapes suivantes :
 - 1- sélectionner un mécanisme réactionnel en phase gazeuse avec des conditions opératoires et calculer les constantes de vitesse des différentes réactions, pour cela nous pouvons considérer :
 - Les réactions des produits formés par impact électronique avec les réactifs initiaux
 - Les réactions entre les radicaux
 - Les réactions de dissociation des produits formés dans la décharge par impact électronique
 - Les réactions entre les produits formés et les radicaux.
 - 2- Ecrire toutes ces réactions avec les constantes de vitesse envisagées.
 - 3- Déterminer un mécanisme chimique en surface, par exemple, dans notre cas, nous pouvons considérer que seuls les espèces radicalaires produites dans la décharge peuvent réagir sur la surface (basse température)
 - 4- Déterminer les coefficients de probabilité des réactions des espèces considérées (coefficients de collage)
 - 5- Faire une étude expérimentale assez complète des procédés de dépôt assistés par plasma



- 6- Elaborer un modèle numérique de transfert de matière qui nous permet d'obtenir des profils des vitesses de dépôt et de concentrations des espèces considérées avec la composition des films déposés
- 7- Et enfin faire une étude de l'influence des paramètres opératoires (puissance- débit – température - pression- tension) sur la vitesse de dépôt.

Nous pensons donc que cette étape de recherche et de validation du mécanisme chimique est longue et difficile, ce qui nous permet de la considérer comme un objet d'extension de l'étude dans l'avenir.

Notre étude sera consacrée aux espèces produites lors d'une décharge plasma d'un gaz organosilicié utilisé seul ou en mélange avec d'autres gaz comme l'oxygène ou l'argon. Parmi les organosiliciés, nous baserons notre travail sur l'hexamethyldisiloxane (HMDSO : O-(Si-(CH₃)₃)₂) de formule chimique :



Cet organosilicié est très utilisé dans plusieurs secteurs industriels du fait de sa stabilité et sa facilité d'emploi (pression de vapeur élevé à pression et température ambiante) [49]. On le trouve comme couche barrière transparente pour l'emballage agroalimentaire, couche séparatrice de gaz dans des membranes de séparation gazeuse, couche isolante à faible constant diélectrique, dans les composants à semi-conducteurs, ...

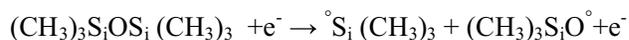
Notre étude aura donc, pour but, l'analyse de la fragmentation de cette molécule dans un réacteur RF et le suivi du dépôt des fragments résultants sur un substrat de silicium, par exemple.

☞ Vu la complexité de la molécule, suivant la puissance de la décharge une grande variété d'interactions, dans la phase gazeuse, peut avoir lieu. Ainsi :

- 2- Pour les faibles puissances, les réactions de dissociation de la molécule peuvent être [49] :

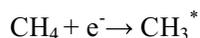


Conclusion générale et perspectives



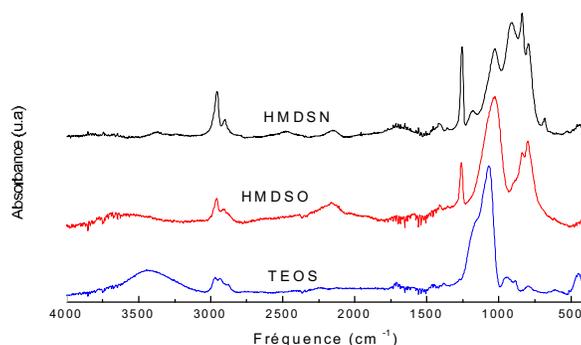
3- Par contre, pour les fortes puissances, la molécule d'HMDSO peut être totalement consommée et la phase gazeuse dominée par ses produits. Ainsi les électrons pourraient interagir avec ces produits pour donner de nouveaux radicaux qui contribueraient au dépôt.

Les réactions possibles sont donc :

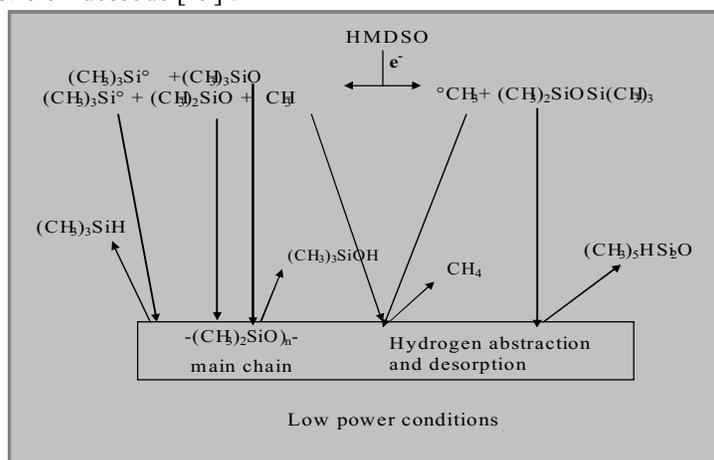


Cet ensemble de fragments peut être identifié grâce à différentes techniques de caractérisation.

Par spectroscopie infrarouge, on peut obtenir, par exemple, les spectres suivants [50] :



Les fragments résultants de la décomposition de la molécule peuvent à leur tours interagir avec la surface du substrat pour contribuer à la croissance du film. Un exemple d'interaction possible est illustré ci-dessous [49] :



This document was created with Win2PDF available at <http://www.daneprairie.com>.
The unregistered version of Win2PDF is for evaluation or non-commercial use only.

BIBLIOGRAPHIE



This document was created with Win2PDF available at <http://www.daneprairie.com>.
The unregistered version of Win2PDF is for evaluation or non-commercial use only.



Bibliographie

- [1] : S. Sahli, S. Rebiaï, P. Raynaud, Y. Segui, A. Zenasni and S. Mouissat
«Deposition of SiO₂-like films by HMDSN/O₂ plasmas at low pressure in a MMP-DECR Reactor», Plasmas and Polymers Vol. 7 No 4, (2002), 327-340.
- [2] : Y. Sakuma, H. Imai, H. Shirai, Y. Moriya, H. Veyama.
« Low temperature formation of microcrystalline silicon films using high-density SiH₄ micro wave plasma ». Thin solid films 386(2001), 261-266.
- [3] : H. J. Lee, K. S. Oh, C. K. Choi
«The mechanical properties of the SiOC (-H) Composite thin films with a low dielectric constant», Surface and coating technology 171(2003), 296-301.
- [4] : Lucien DATE
« Analyse du fonctionnement d'un réacteur de dépôt d'oxyde de silicium assisté par plasma et caractérisation des films », Thèse de doctorat de l'université Paul Sabatier de Toulouse (2000)
- [5] : 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 1999 N° d'ordre 3457
- [6] : M. Latreche,
«Contribution à l'étude des procédés de croissance de films minces obtenus par plasma RCER à partir de monomères organosiliciés »
Thèse de doctorat de l'université P. Sabatier, Toulouse (1993), N° d'ordre 1397.
- [7] : Jean Loup Delcroix,
« Physique des plasmas"1994, InterEdition, ET CNRS Edition p5.
- [8] : Encyclopédie Encarta
« Plasma (physique) ». Microsoft ®. Encarta ® 2006 [CD], Microsoft corporation, 2005
- [9] : A. Dollet,
« Etude du fonctionnement d'un réacteur de dépôt de nitrure de silicium assisté par plasma : Analyse et modélisation numérique », Thèse de doctorat de l'université Paul Sabatier de Toulouse (1993)
- [10] : « densité et température plasma »
[http:// plasma – gate. Weizmann. ac. il / FS f APP. html](http://plasma-gate.weizmann.ac.il/FS/fAPP.html) Free – Software for atomic and plasma – physics.



- [11] : R. Delsol
« Etude de la croissance et des propriétés des couches minces organosiliciées, obtenues dans un plasma multipolaire à résonance cyclotronique électrique répartie »,
Thèse de doctorat de l'université de P. Sabatier, Toulouse (1995), N° d'ordre 1965
- [12] : H Conrads and M Schmidt
« Plasma generation and plasma sources », Plasma Sources Sci. Technol. 9 (2000),
441-454. Printed in the UK
- [13] : Berkane Amel
« Etude et réalisation d'un banc de spectroscopie par plasma »
Mémoire d'ingénieur de l'institut d'électronique, université de Constantine (1992)
- [14] : Dhafira Benzeggouta
« Contribution à l'étude de la croissance de films organosiliciés déposés par plasmas froids », Mémoire de Magister (2003) , Université De Constantine
- [15] : R, B. Bird,
« Transport phenomena » Wiley Int. Edition, New York (1960), pages
77,78,80,83,84,97,98
- [16] : R. Comolet
« Mécanique expérimentale des fluides »
Tome II, Dynamique des fluides réels, quatrième édition Masson (1994), pages 36-37
- [17] : <http://fr. W ikipedia.org/ Wiki/> « Dynamique des fluides »
- [18] : S. Mouisset, S Sahli, Y Segui, P. Raynaud
« Langmuir probe measurement of electrical parameters of a deposition plasma created in HMDSO/A_r mixtures»
Phys, Chem. News 17(2004) 80-84
- [19] : X. W. Liu, J. H. Lin, C. H. Tseng, H. C. Shih
« Optical and structural properties of the amorphous carbon nitride by ECR- plasma »
Materials chemistry and physics 72(2001) 258-263
- [20] : K. Li. O Gabriel and Meichsner
« Fourier transform infrared spectroscopy study of molecular structure formation in thin films during hexamethyldisiloxane decomposition in low pressure rf discharge »
J. Phys ; D : Appl. Phys. 37(2004) 588-594
- [21] : E. de la cal, D. Tafalla, and. F. L Tabares
« Characterization of H_c/ CH₄ dc low discharge plasmas by optical emission spectroscopy, mass spectrometry and actinometry »
J. Appl. Phys. Vol. 73, N° 2, 15 January 1993
- [22] : A. Bogaerts, R. Gijbels,
« Numerical modelling of gas discharge plasmas for various applications », Vacuum 69
(2003), 37-52.

Bibliographie



- [23] : H. Caquineau, B. Despax,
« Plasma reactor analysis using mass transfer model», Recent Res. Devel, Vacuum
Sci. & Tech., 2 (2000), 1-33
- [24] : J. A. Thornton,
« Plasma assisted deposition processes: theory, mechanisms and applications», Thin
solid Films, 107, (1983), 3-19
- [25] : A. S. Grove,
« Physics and technology of semiconductor», Wiley international edition (1967).
- [26] : J. P. Boeuf,
« Numerical model of glow discharges»
Physical review A, volume 36, numbr6, September 15, 1987, 2782-2792
- [27] : J. P Boeuf,
«A two dimensional model of dc glow discharges»
J. Appl. Phys. 63(5),1 March 1988, 1342-1349
- [28] : SIGLO-RF, The FR discharge,
Modeling software, Kinema recherché associates, March, 1995
- [29] : J. P. Boeuf, Th. Calligari, C. Punset and R. Ganter
«Modeling as a tool for plasma display cell optimisation»
Workshop disest of the 10th international display research conference, Asia display'98,
pp. 209-220 (SID, 1998)
- [30] : G. J. M Hagelaar, G. M. W. Kroesen,
«Speeding up fluid models for gas discharges by implicit treatment of the electron
energysource tem», Journal of computation physics 159, (2000), 1-12
- [31] : Han-Ming Wu,
«Tow dimensional hybrid model simulation and validation for radio frequency
inductively coupled oxygen plasma»
Plasma Sources Sci. Technol. 9 (2000) 347-352. Printed in the UK
- [32] : T. E. Nitschke and D. B. Graves,
« A comparision of particle in cell and fluid model simulations of low- pressure radio
frequency discharges»
J. Appel. Phys. 76(10), 1994, 5646-5659
- [33] : Ph. Belenger, J. P. Boeuf,
«Numerical and experimental diagnostics of RF discharges in pure and duty argon»,
Physical review A, Vol.46, N° 12, (1992), 7923-7933
- [34] : M. Surendra, D. B. Graves,
«Self consistent glow-discharge simulation applied to diamond film deposition
reactors». J. Appel. Phys, 71(10), (1992), 5189- 5198

Bibliographie



- [35] : H. Caquineau, G. Dupont, and B. Despax, J. P. Couderc
«Reactor modelling for radio frequency plasma deposition of S_NxH_y : comparison between two reactor designs»
J. Vac. Sci. Technol. A 14(4), (1996), 2071-2082
- [36] : Pascal Brault
« Mécanismes élémentaires d'interaction particules – surfaces »
« Plasmas froids. Réactivité en volume et en surface » ; Publications de l'université de Saint – Etienne, Jean Monnet, Intégrations, 2004, pages80-81
- [37] : T. Belmonte, T. Gzewiec, H. Michel
« Fundamentals and applications of lat post– discharge processes »
Surface and coating technology 142-144 (2001) 306-313
- [38] : V. Guerra and J. Loureiro
« Dynamical Monte Carlo Simulation surface atomic recombinaison »
Plasma sources Sci . Technol. 13 (2004) 85-94
- [39] : Sang- Kyu Park and Demetre J. Economou
« Numerical Simulation of a Single– Wafer Isothermal Plasma Etching Reactor »
L. Electrochem. Soc., Vol ; 137, No. 8 (1990) 2624-2634
- [40] : Hubert Caquineau
« Modélisation numérique de réacteurs plasma: Analyse des processus chimiques et étude de dispositifs de conception variée »
Thèse de doctorat de l'université P. Sabatier de Toulouse, N° d'ordre: 2453, Année: 1996
- [41] : Nikolaos V. Mantzaris and Evangelos Gogolides. Andreas G. Boudouvis. Ahmed Rhallabi and Guy Turban
« Surface and plasma simulation of deposition processes: CH_4 plasmas for the growth of diamondlike carbon ».J. Appl. Phys. 79 (7), (1996), 3718-3729
- [42] : A. Rhallabi – E. Gogolides – G. Turban
« Modelling of plasma surface interactions »
LeVide No 280, Avril- Mai (1996), 185-203
- [43] : A. Rhallabi and G. Turban
« Modeling of amorphous carbon film deposition in methane discharge»
9th International Colloquium On Plasma Processes. Article 6, (1993), 30-32
- [44] : A. Dollet, B. Despax, JP. Couderc
« Modélisation d'un réacteur plasma RF de depot de nitrure de silicium »
9th International Colloquium On Plasma Processes, Juin 1993, N° 4, 33-35
- [45] : M_c –Graw Hill. S. V. Patankar
« Numerical heat transfer and fluid flow », 1980 , pages27,28,29,69,70,126

Bibliographie



- [46] : G. J. M. Hagelaar, F. J. de Hoogand, G. M. W. Kroesen
« Boundary conditions in fluid models of gaz discharges »
Physical Review E. Volume 62, number1, (2000), 1452-1454
- [47] : G. J. M. Hagelaar, G. M. W. Kroesen
« Modeling of the microdischarges in plasma addressed liquid cristal displays. »
J. Appl. Phys., Vol. 88, N° 5, (2000), 2252-2262
- [48] : A.Gourdin, M. Boumahrat
« Méthodes Numériques Appliquées », Office des Publications Universitaires, seconde édition , pages171,172,173,174
- [49] : Patrice Raynaud, Bernard Despax, Yvan Segui, Hubert Caquineau
« FTIR Plasma Analysis of Hexamethyldisiloxane Discharge In Microwave Multipolar Plasma At Different Electrical Powers ». Plasma Process. Polym. 2005, 2,45-52
- [50] : S.Sahli, S.Rebiai, S.Mouissat, Y.Segui, P.Raynaud, A.Zenasni,
« Etude de l'indice de réfraction de films organosiliciés déposés par plasma en vue de leur application en photovoltaïque »
6^{ème} séminaire international sur la physique énergétique. SiPE 6, Bechar, 21-23, Octobre 2002

This document was created with Win2PDF available at <http://www.daneprairie.com>.
The unregistered version of Win2PDF is for evaluation or non-commercial use only.

Très haute température. Les grandeurs de base permettant de décrire un plasma, sont la densité n_e et la température T_e électroniques. La théorie des plasmas s'applique à des milieux dont n_e varie de 10^{-6} cm^{-3} à 10^{25} cm^{-3} . Les températures électroniques peuvent varier de 10^2 eV à 10^4 eV . Les ordres de grandeur des différents plasmas en fonction de ces paramètres sont donnés sur la figure I-2.

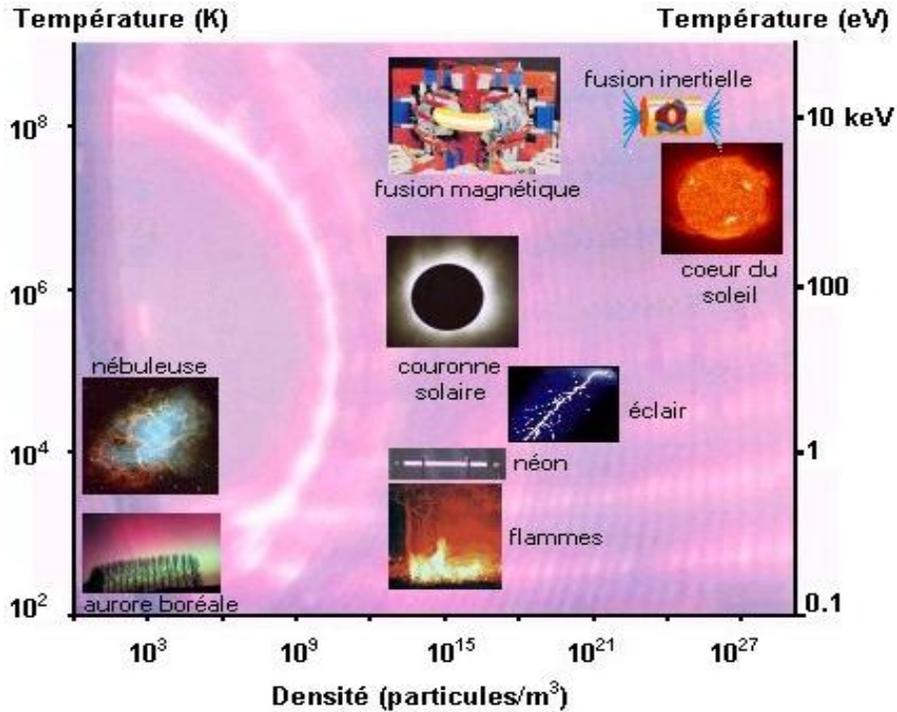


Figure I-2 : Classification de $n_e = f(T_e)$ pour différents plasmas [10]

I-3 Grandeurs caractéristiques d'un plasma

Le plasma est défini par un certain nombre de paramètres électriques dont la connaissance est nécessaire pour aboutir à une modélisation adéquate de la décharge électrique. Ces grandeurs sont rappelées dans ce paragraphe.

I-3-a La fréquence plasma

Quand on provoque une perturbation locale dans un plasma initialement neutre, sous la forme d'un excès de charges électriques positives ou négatives, celui-ci va tendre à revenir vers l'état d'équilibre de neutralité. Ce phénomène provoque l'oscillation des espèces chargées et en particulier les électrons qui, étant plus légers, sont les premiers à répondre à la perturbation,

This document was created with Win2PDF available at <http://www.daneprairie.com>.
The unregistered version of Win2PDF is for evaluation or non-commercial use only.



REMERCIEMENTS



Ce travail a été réalisé sous la direction de Madame Saida REBIAI, Maître de Conférence à l'Université de Constantine, je tiens à la remercier pour m'avoir encadrée et guidée, merci pour la liberté qu'elle m'a laissée ainsi que la confiance dont elle a toujours fait preuve à mon égard, merci pour le suivi et les conseils qu'elle m'a donnés, merci pour sa constante disponibilité.

Madame F. HOBAR, Professeur à l'Université de Constantine, a fait l'honneur d'accepter de présider le jury de ce mémoire de Magister, qu'elle trouve ici l'expression de ma profonde gratitude et mes sincères remerciements.

Je tiens également à remercier Monsieur S. SAHLI, Professeur à l'Université de Constantine d'avoir accepté d'être membre de jury. Merci de m'avoir initié à la science de la modélisation des plasmas, merci pour son soutien et son aide.

J'exprime ma profonde reconnaissance à Monsieur M.H. LATRECHE, Professeur à l'Université de Constantine, d'avoir accepté d'être membre de jury, ainsi que pour sa contribution déterminante et son humour. Merci pour son aide précieux et sa gentillesse.

J'exprime ma gratitude envers Monsieur M. AFRID, Professeur à l'Université de Constantine, d'avoir accepté d'être invité, je le remercie également pour l'intérêt qu'il a bien voulu accordé à mon travail. Malgré ses activités de recherche nombreuses, il a toujours trouvé le temps de me secourir, ses critiques toujours constructives, ses remarques et ses exigences ont été très importantes pour la réalisation de ce travail et ont été très formatives pour moi même.

Un grand merci à F. HACHOUF, Z. ZIARI, M. LAKHDARA, M. MEDJALDI, A. BELEL, pour leur solidarité et dont tous ont fait preuve.

Que soient ici remerciés toutes les personnes qui par leur soutien et leurs encouragements ont rendu possible ce travail. Qu'elles trouvent dans ces quelques lignes l'expression de toute ma reconnaissance.

This document was created with Win2PDF available at <http://www.daneprairie.com>.
The unregistered version of Win2PDF is for evaluation or non-commercial use only.

Résumé

L'objectif du travail présenté dans ce mémoire consiste à décrire les différents processus se produisant dans un réacteur lors de la formation de films élaborés par plasmas froids. Il représente une contribution à la mise au point de modèles électriques, hydrodynamique et de transfert de matière dont le couplage mène à la modélisation complète du réacteur.

Pour cela, et après application de certaines hypothèses simplificatrices, nous avons développé deux modèles de simulation, le premier hydrodynamique, il concerne l'écoulement gazeux dans l'espace inter électrodes, et le second électrique pour décrire la distribution des espèces chargées, du champ électrique, dans le cas d'une décharge continue. Les deux modèles élaborés sont basés sur la méthode numérique des volumes finis.

Un traitement numérique des équations de Navier–Stokes en régime stationnaire pour un mélange gazeux présent dans un réacteur à écoulement longitudinal, a été développé pour obtenir le champ de vitesses entre les deux électrodes. Les résultats obtenus grâce au modèle fluide sont conformes avec ceux obtenus dans la littérature.

MOTS-CLES :

Plasma, Modèle fluide, décharge lumineuse, modèle hydrodynamique.

This document was created with Win2PDF available at <http://www.daneprairie.com>.
The unregistered version of Win2PDF is for evaluation or non-commercial use only.

ملخص

الهدف من هذا العمل هو وصف العمليات التي تحدث في المفاعل أثناء تشكيل شرائح محضرة عن طريق البلازما الباردة.

إنه يمثل مساهمة نماذج كهربائية، هيدروديناميكية وتحول المادة، حيث يؤدي ترابط النماذج الثلاثة إلى نموذج شامل للمفاعل. ولهذا قمنا بوضع فرضيات مبسطة لتطوير نموذجين:

الأول: هيدروديناميكي ويمثل سريان الغاز الموجود بين قطبي المفاعل أما الثاني: فهو يعتمد على وصف توزيع حاملات الشحن، الحقل الكهربائي بين نفس القطبين في حالة التفريغ المستمر. الكلمات الدالة:

البلازما ، النموذج المائع ، التفريغ الضوئي ، النموذج الهيدروديناميكي

This document was created with Win2PDF available at <http://www.daneprairie.com>.
The unregistered version of Win2PDF is for evaluation or non-commercial use only.

SOMMAIRE

INTRODUCTION GENERALE

CHAPITRE I

PHYSIQUE DES PLASMAS ET TECHNIQUES DE DEPOT

I-1 Introduction.....	3
I-2 Définition d'un plasma.....	3
I-3 Grandeurs caractéristiques d'un plasma.....	5
I-3-a La fréquence plasma.....	5
I-3-b La gaine plasma.....	6
I-3-c Le potentiel plasma.....	6
I-3-d Le potentiel flottant.....	7
I-3-e Le critère de Bohm.....	7
I-4 Les décharges électriques.....	8
I-4-a Description d'une décharge luminescente.....	9
i- L'espace cathodique.....	9
ii- La lueur négative.....	11
iii- L'espace sombre de Faraday.....	11
iv- La colonne positive.....	11
v- La gaine anodique.....	11
I-4-b Les différents types de décharge.....	12
I-4-C L'auto polarisation.....	13
I-5 Différents types de collisions intervenant dans une décharge.....	14
I-6 Mécanismes de dépôt de couches minces par plasma.....	15
I-7 Les plasmas fluides.....	17
I-8 Conclusion.....	20

Chapitre II

Analyse des procédés de dépôt assistés par plasmas froids

II-1 Introduction.....	21
II-2 Analyse des procédés de dépôt.....	21
II-2-a L'analyse expérimentale.....	21
II-2-b L'analyse théorique.....	22
II- 3 La modélisation d'un procédé de dépôt par plasma.....	22
II-3-a Un modèle de décharge électrique.....	22
i- Les modèles fluides.....	24
i i- Les modèles hybrides.....	26
iii-Les modèles microscopiques ou particulaires.....	26
II-3-b Un modèle hydrodynamique.....	27
II-3-c Un modèle de transfert de matière.....	28
i- Equations du modèle de transfert de matière.....	29
ii- Traitement numérique des équations.....	31
iii- Modèles de probabilités de réaction de surface.....	31
II-4 Conclusion.....	33

Chapitre III

Modélisation de l'écoulement

III-1 Introduction.....	35
III-2 Le réacteur à écoulement longitudinal.....	35
III-3 Définition de la géométrie étudiée.....	36
III-4 Hypothèses générales.....	36
III-5 Ecriture des équations du mouvement de fluide.....	37
III-5-a Conditions aux limites.....	37

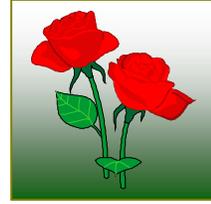
III-5-b	Ecriture des équations adimensionnelles.....	38
III-5-c	Maillage numérique.....	39
III-5-d	Discrétisation numérique.....	40
III-5-e	Résolution des équations hydrodynamiques.....	41
III-5-f	Résultats.....	41
i-	Réacteur avec rapport d'aspect $L/H = 44.28$	41
ii-	Effet du rapport d'aspect sur les paramètres calculés.....	43
III-6	Conclusion.....	45

Chapitre IV

Modélisation de la décharge électrique

IV-1	Introduction.....	46
IV-2	Présentation du réacteur.....	46
IV-3	Le mélange gazeux.....	47
IV-3	Principales hypothèses.....	48
IV-4	Système d'équations.....	50
IV-5	Données de base.....	50
IV-6	Traitement numérique des équations.....	52
IV-6-a	Ecriture des équations.....	52
IV-6-b	Conditions aux limites.....	53
IV-6-c	Discrétisation numérique.....	53
IV-6-d	Résultats du modèle de décharge électrique.....	54
IV-6-4-b-	Influence de la distance inter électrodes.....	56
IV-6-4-b-	Conditions aux limites.....	58
	Conclusion.....	59
	Conclusion générale et perspective.....	60
	Bibliographie.....	64

This document was created with Win2PDF available at <http://www.daneprairie.com>.
The unregistered version of Win2PDF is for evaluation or non-commercial use only.



DEDICACES

A la mémoire de mon père ;

A la lumière de ma vie, ma chère mère ;

A tous mes frères et mes sœurs, sans oublier mes nièces et mes neveux et plus précisément à mon petit frère Rheda et ma sœur Fouzia.

A ma petite famille qui a supporté le rythme imposé par ma vie de thésarde. Elle a fait preuve d'une patience sans limites dans ce marathon et a toujours été à mes côtés dans les moments difficiles : à mon mari et mes petits enfants, Djihane et M. El Amine ;

A tous mes proches ;

A tous mes collègues de travail ;

Je dédie ce mémoire.

This document was created with Win2PDF available at <http://www.daneprairie.com>.
The unregistered version of Win2PDF is for evaluation or non-commercial use only.