

REPUBLIQUE ALGERIENNE DEMOCRATIQUE ET POPULAIRE

MINISTRE DE L'ENSEIGNEMENT SUPERIEUR
ET DE LA RECHERCHE SCIENTIFIQUE
UNIVERSITE MENTOURI CONSTANTINE

FACULTE DES SCIENCES DE L'INGENIEUR
DEPARTEMENT D'ELECTRONIQUE

N° d'ordre :

Série :

MEMOIRE

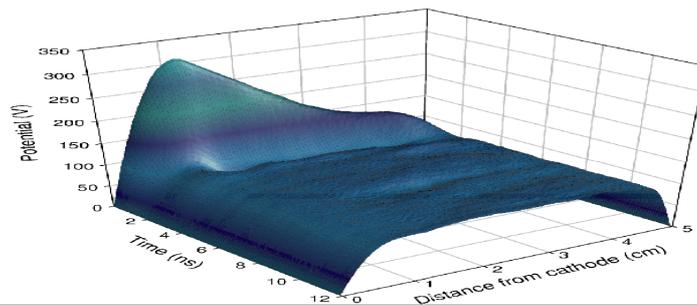
Présenté Pour Obtenir le Diplôme de Magister en Electronique

Option :
Micro Electronique
Par

HANENE BAHOUH

THEME

Contribution à la modélisation d'une décharge continue d'un gaz moléculaire



Soutenu le : / / 2010

Devant le jury

Président : M. BOUCHEMAT

Prof. Université de Constantine

Rapporteur : S.REBIAI

M.C. Université de Constantine

Examineurs: S.SAHLI

Prof. Université de Constantine

A.BELLEL

Prof. Université de Constantine

DEDICACES



*A la mémoire de mon frère Nabil, qui aurait été
Comblé de joie ;*

A la lumière de ma vie mes chers parents ;

*A mon mari, qui me donne la force de continuer jusqu'au
bout ;*

A ma belle mère et mon beau père;

*A mon beau frère, mes chers frères et sœurs, sans oublier mes
nièces et neveux;*

*A tous ceux qui m'ont encouragée de prêt ou de loin ;
Je dédie ce mémoire.*

REMERCIEMENTS



*Je remercie tout d'abord **DIEU** le tout puissant qui m'a éclairé le Bon chemin.*

*Je remercie vivement ma directrice de thèse Madame **SAIDA REBIAI**. Je lui exprime également toute ma gratitude, pour m'avoir proposé ce sujet, mais surtout pour m'avoir encadrée et guidée, pour son soutien et ses multiples coups de main.*

*Je tiens également à remercier Monsieur **M. BOUCHEMAT**, Professeur à l'Université de Constantine d'avoir accepté de présider mon jury de soutenance.*

*J'exprime ma profonde reconnaissance à monsieur **S. SAHLI**, Professeur à l'Université de Constantine, directeur de l'équipe **plasma**, pour m'avoir accueillie dans son équipe et pour les orientations qu'il a pu me donner. Je le remercie d'avoir accepté d'être membre de jury.*

*Je remercie pareillement Monsieur **A. BELLEL**, Professeur à l'Université de Constantine d'avoir accepté d'être membre de jury*

*Je tiens aussi à remercier Madame **F. HOBAR**, Professeur à l'Université de Constantine, directrice du laboratoire **L.M.I.** pour m'avoir accueillie dans son laboratoire.*

*Je Remercie particulièrement Mademoiselle **Z. ZIARI**, Maitre de conférences à l'Université de Constantine pour ses conseils avisés et son optimisme.*

*J'exprime également ma gratitude à toute l'équipe du laboratoire **L. M. I.** pour ses encouragements et son aide. Mes remerciements vont particulièrement à **F. BOUANAKA, A. BERKANE, L. BOULEJNIB et S. BENZEGHDA.***

Tables des Matière

Introduction générale.....	1
----------------------------	---

Chapitre I : Généralités sur les plasmas physiques

I-1 Introduction.....	3
I-2 Classification de l'état de la matière du point de vue thermodynamique.....	3
I-3 Définition d'un plasma.....	4
I-4 Grandeurs caractéristiques	5
I-5 Classification des plasmas	9
I-6 Les plasmas limites	9
I-6-1 La diffusion ambipolaire	10
I-6-2 Répartition du potentiel inter électrode.....	11
I-6-3 Les gaines électrostatiques	13
I-7 Les collisions dans un plasma	17
I-8 Les modèles numériques de décharge	19
I-8-1 Modèles fluides	20
I-8-2 Modèles microscopiques ou particuliers	23
I-8-3 Modèles hybrides	23
I-9 Conclusion	23

Chapitre II : Méthodes numériques

II.1 Introduction.....	24
II-2 Modèle numérique.....	24
II-3 Hypothèses spécifiques et grandeurs caractéristiques.....	25
II-4 La résolution numérique	28

II-5 Conclusion	33
------------------------------	-----------

Chapitre III : Résultats de la simulation

III.1 Introduction	34
III.2 Les gaz atomiques.....	34
III-2-1 Les données de base.....	34
III-2-2 Résultats de la simulation pour l'argon.....	35
III-2-3 Résultats de la simulation pour l'Hélium.....	39
III-3 Les gaz moléculaires.....	42
III-3-1 Résultats de la simulation de la décharge dans un plasma de méthane....	42
III-3-2 Résultats de la simulation pour l'hexafluorure de soufre (SF₆).....	47
III-4 Conclusion.....	52
Conclusion générale.....	53
Bibliographie.....	55



INTRODUCTION
GENERALE

Introduction générale

L'étude des décharges électriques est une discipline ancienne, dont l'un des pionniers est le célèbre physicien anglais M. Faraday, dans la première moitié du 19^{ème} siècle. Le terme "plasma" a été introduit par I. Langmuir en 1928, lors d'études sur les tubes à décharges contenant un gaz ionisé. Ce quatrième état de la matière est passé du domaine de curiosité de la nature, sorte de jouet des physiciens, à celui d'outil industriel indispensable depuis la deuxième moitié du 20^{ème} siècle. En particulier, les applications en traitements de surfaces par plasma sont aujourd'hui utilisées dans de nombreux domaines dont voici quelques exemples :

- Métallurgique: anticorrosion, oxydation, film protecteur,...
- Optique : anti-reflet des verres, couches protectrices ;
- Microélectronique : fabrication des circuits intégrés (gravure, dépôt, dopage), collage, nettoyage
- Stérilisation : d'instruments médicaux, d'emballages ;
- Industrie automobile : collage (des portières, pare-brise,...)
- Emballage : traitement verres, collage.

L'explosion de l'industrie de la microélectronique est intimement liée aux progrès accomplis dans la maîtrise des procédés plasmas impliqués dans la réalisation de composants électroniques à base de silicium.

Par ailleurs, l'étude des plasmas a nécessité des efforts importants dans le domaine de la simulation numérique et bénéficie de la puissance des calculateurs actuels. L'objectif principal de ces études numériques est de proposer des méthodes numériques robustes, précises et les moins coûteux possibles pour simuler les différents phénomènes mis en jeu. Grâce à leur caractère de reproductibilité, les simulations peuvent permettre par exemple, de vérifier une théorie à un coût moins important que l'expérience, mais aussi de compléter, voire de guider, des études expérimentales.

Le travail que nous présentons dans ce mémoire porte sur une contribution à la modélisation d'une décharge continue d'un gaz moléculaire. Cette modélisation impose la détermination de réactions chimiques mises en jeu dans le cœur du plasma et de la cinétique associée ainsi que la détermination, en fonction des divers paramètres opératoires (tension DC, température, pression et composition du gaz, géométrie du réacteur, ...), de la répartition des densités de charges ainsi que du champ et du potentiel électriques.

Nous avons articulé notre mémoire autour de trois chapitres:

Le premier chapitre, comportera deux parties : la première, avec une vocation purement introductive, sera consacrée à la présentation des quelques notions physiques fondamentales sur les décharges par plasmas. Dans la seconde partie, nous rappellerons brièvement les divers modèles numériques utilisés pour la simulation des différents types de décharges plasmas.

Le deuxième chapitre détaillera le modèle fluide et la technique numérique qui peuvent être appliqués pour le calcul de la décharge. Ce modèle prend en compte la cinétique de formation des espèces chargées du plasma (électrons, ions positifs et ions négatifs) ainsi que leurs transports couplés à l'équation de Poisson pour le champ électrique. Nous décrirons le système d'équations macroscopiques mises en jeu, avec certaines hypothèses spécifiques et grandeurs caractéristiques, ainsi que l'application de la méthode des différences finies pour discrétiser les équations non linéaires, en exprimant les approximations prises en considération et plus particulièrement les conditions aux limites et initiales dans notre modèle.

Dans le troisième chapitre, nous montrerons, tout d'abord, les différents gaz (atomiques et moléculaires) que nous avons traités dans notre modélisation, dans le but de comprendre le comportement électrique de la phase gazeuse du plasma. Nous poursuivrons par une déclaration des valeurs des différents paramètres et coefficients nécessaires pour l'exécution du programme de la décharge. Enfin nous clôturerons ce chapitre par une synthèse des résultats numériques obtenus en termes de distribution spatiale des différentes espèces chargées (électrons, ions positifs et ions négatifs) ainsi que du champ électrique et du potentiel.

Nous terminons notre mémoire par une conclusion générale qui synthétise les résultats obtenus et donne un aperçu de perspectives qui peuvent être développées pour mieux comprendre ce sujet.

CHAPITRE I

***Généralités sur les
plasmas Physiques***

I-1 Introduction

La synthèse et le traitement de couches minces par plasmas froids sont fréquemment utilisés dans la fabrication des circuits intégrés. Ces procédés substituent certaines méthodes conventionnelles en raison des avantages que confère l'utilisation des plasmas : fabrication à basse température évitant tout dommage des composants microélectroniques, plus précis, plus rapides...

Ce chapitre est une introduction générale, assez détaillée, à la physique des plasmas. Il nous a paru utile de faire une présentation élémentaire de certaines notions qui lui sont relatives. Nous expliquerons d'abord les grandeurs caractéristiques d'un plasma de laboratoire et les différentes régions de l'espace inter électrodes, ensuite, nous mettrons en lumière les divers modèles numériques utilisés pour la simulation des différents types de décharges plasmas.

I-2 Classification de l'état de la matière du point de vue thermodynamique

Traditionnellement la matière est classée suivant trois états [1]:

- l'état solide
- l'état liquide
- l'état gazeux

Cependant lorsqu'on chauffe le gaz, sous l'effet de l'agitation thermique ses molécules s'ionisent, peuvent se fragmenter pour donner un ensemble composé d'électrons, d'ions, de fragments moléculaires et d'espèces neutres avec, dans certains cas, une luminescence. On obtient ainsi un gaz partiellement ionisé et globalement neutre. C'est ce qu'on appelle le plasma. Les quatre états de la matière sont illustrés sur la figure I-1.

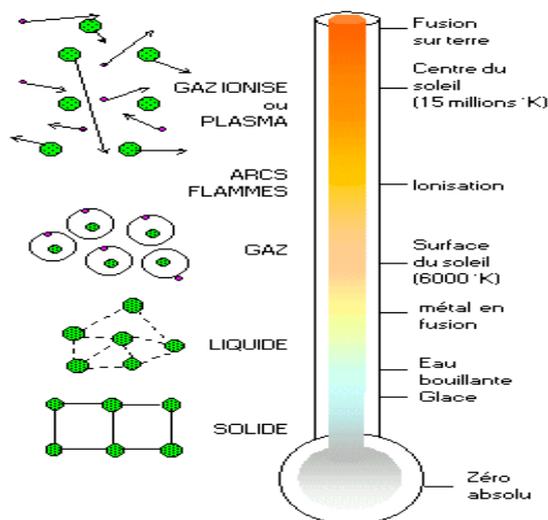


Figure I-1 : Les différents états de la matière du point de vue thermodynamique.

I-3 Définition d'un plasma

Le plasma est le quatrième état de la matière et représente près de 99 % de l'univers. Il existe soit à l'état naturel (couronne solaire, Soleil, intérieur des étoiles,...), soit en laboratoire où il est généralement produit par des décharges électriques. Les plasmas sont des gaz contenant des atomes, des molécules et des ions dans l'état fondamental ou dans un état excité, des électrons et des photons qui proviennent de la désexcitation des états excités.

Dans la vie quotidienne, les gaz sont connus pour être des isolants électriques. Cela vient du fait qu'ils ne contiennent que des espèces neutres (des molécules et des atomes). Par contre, en présence d'un champ électrique assez intense, ils peuvent devenir conducteurs. Un événement extérieur, par exemple le rayonnement cosmique, peut créer des électrons qui sont accélérés par le champ électrique appliqué et qui peuvent alors ioniser les molécules du gaz par impact. Cette création de charges électriques fait passer le gaz à l'état conducteur. Il en résulte donc la création d'un gaz partiellement ionisé contenant n_g neutres, n_p ions positifs et n_e électrons par unité de volume (cas du gaz électropositif) [2, 3], Comme c'est illustré sur la figure I-2.

A l'échelle macroscopique, le gaz est quasiment neutre car les densités d'ions n_p et d'électrons n_e sont pratiquement identiques $n_e \approx n_p$ [4]. Cette quasi-neutralité est maintenue par des forces électrostatiques qui apparaissent dès que $n_e \neq n_p$ et qui font revenir le gaz à l'état neutre.

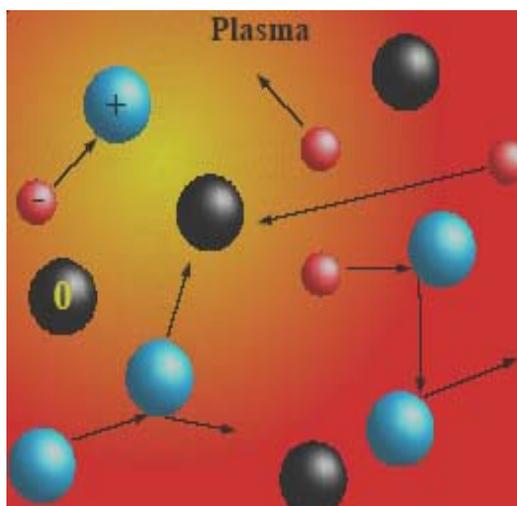


Figure I-2 : Plasma et particules chargées Avec:

- + : les ions ;
- : les électrons qui se déplacent à grandes vitesses ;
- O : les neutres en noirs, qui peuvent changer de statut selon les collisions.

I-4 Grandeurs caractéristiques

Les plasmas sont caractérisés principalement par les paramètres suivants : Le degré d'ionisation, Les températures électronique et ionique, le libre parcours moyen, la longueur de Debye et la densité des particules chargées.

- **Le degré d'ionisation**

Le degré d'ionisation d'un plasma est défini par :

$$\alpha = \frac{n_0}{n + n_0} \quad (\text{I-1})$$

Où n_0 est la densité des électrons (ion positifs) et n est la densité des espèces neutres.

Si $\alpha < 10^{-4}$, alors le plasma sera dit « faiblement » ionisé et si $\alpha > 10^{-4}$, alors il est dit « fortement » ionisé.

Le mouvement des particules chargées peut être alors dominé par des collisions avec d'autres particules chargées si le plasma est « fortement ionisé » ou par collision avec des neutres s'il est « faiblement ionisé ».

- **Les températures électronique et ionique**

Un plasma froid est un milieu de type gazeux hors équilibre thermodynamique. Les énergies des électrons, ions et molécules excitées étant différentes, il n'existe pas de température thermodynamique pour le plasma comme on peut la définir pour un gaz neutre. La valeur des énergies des espèces présentes dans le plasma suit cependant une loi de distribution statistique qui peut être de type Maxwell-Boltzmann [5] et l'on peut ainsi définir la température statistique des différents éléments en utilisant l'équation :

$$E_C = \left(\frac{1}{2}\right) \cdot m \cdot V^2 = \left(\frac{3}{2}\right) \cdot K_B \cdot T \quad (\text{I-2})$$

où E_C est l'énergie cinétique, m la masse de la particule, V la vitesse quadratique moyenne, T la température en Kelvin et K_B la constante de Boltzmann ($1,38 \cdot 10^{-23} \text{ J.K}^{-1}$).

On définit ainsi trois températures :

T_e : pour les électrons ;

T_i : pour les ions ;

T_n : pour les espèces neutres.

Les masses des ions et des molécules étant proches, leurs températures sont voisines et de l'ordre de la température ambiante. Par contre la température électronique est beaucoup plus élevée.

- **La densité**

La densité n est définie comme le nombre de particules par unité de volume, et ce pour chaque espèce (électrons, ions, neutres). La neutralité du plasma implique $n_e = n_p$, en supposant que la densité d'ions négatifs est quasiment nulle [6].

- **La fréquence plasma**

Quand on provoque une perturbation locale dans un plasma, initialement neutre, de sa position d'équilibre en faisant apparaître un excès d'électrons suivant un plan d'épaisseur $d\xi$, comme c'est illustré sur la figure I-3, il va y avoir accumulation de charges qui génèrent un champ électrique qui exercera une force de rappel sur les électrons en excès (revenir vers l'état d'équilibre de neutralité). Ces électrons mis en mouvement effectueront des oscillations autour d'une position d'équilibre moyenne avec une fréquence angulaire ω_{pe} donnée par [4, 7] :

$$\omega_{pe} = \sqrt{\frac{n_e q^2}{\epsilon_0 m_e}} \quad (I-3)$$

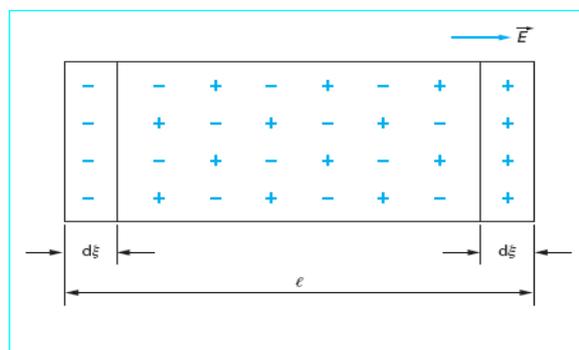


Figure I-3 : Perturbation d'un élément de plasma de longueur l

Si l'on tient compte de la masse finie des ions, on montre aussi que les ions ont un mouvement sinusoïdal de pulsation ω_{pi} , appelée pulsation plasma ionique :

$$\omega_{pi} = \sqrt{\frac{n_p q^2}{\epsilon_0 m_i}} \quad (\text{I-4})$$

avec :

$m_e, (m_i)$: masse de l'électron, (d'ion) ;

ϵ_0 : permittivité du vide ($8,8542 \cdot 10^{-12}$ F/m),

q : la charge électronique ($1,6022 \cdot 10^{-19}$ C),

$n_e = n_p = n_0$ dans le cœur du plasma (avec n_0 la densité de charge initial à $t = 0$ s).

Par ailleurs, ces fréquences rendent compte de la capacité des charges (électrons, ions) à suivre les variations périodiques du champ électrique appliqué par le générateur. On distingue alors trois types de plasmas selon la valeur de la fréquence d'excitation f appliquée par le générateur par rapport aux fréquences plasmas électronique f_{pe} et ionique f_{pi} [8]:

1. les plasmas basses fréquences (quelques centaines de Hz à quelques centaines de kHz) : ($f < f_{pi} < f_{pe}$), où les électrons et les ions suivent les variations du champ appliqué.
2. les plasmas radiofréquences (1 MHz à 0.5 GHz) ($f_{pi} < f < f_{pe}$), où les ions sont confinés dans le plasma alors que les électrons suivent encore les variations du champ électrique.
3. les plasmas hyperfréquences (500 MHz à quelques GHz) : ($f_{pi} < f_{pe} \leq f$), où les électrons et les ions ne peuvent plus suivre le champ électrique appliqué.

- **Le libre parcours moyen**

Considérons le mouvement d'un électron traversant des cibles d'atomes supposés fixes. Le libre parcours moyen λ est donné par la relation [5, 9]:

$$\lambda = \frac{1}{n_g \cdot \sigma} \quad \text{avec} \quad \sigma = \pi \cdot r^2$$

où n_g est la densité du gaz, σ est la section efficace et r est le rayon de l'atome cible.

La fréquence de collision entre l'électron et les atomes cibles ν est : $\nu = \frac{V_{th}}{\lambda}$

qui équivaut à :

$$\nu = \sigma \cdot n_g \cdot \left(\frac{2K_B \cdot T}{m} \right)^{1/2} \quad (I-5)$$

où $V_{th} = \left(\frac{2K_B \cdot T}{m} \right)^{1/2}$, représente la vitesse thermique et m est la masse atomique.

- **La longueur de Debye**

Une charge immergée dans un plasma est entourée de charges de signe opposé qui tendent à écranter son champ coulombien. Cette influence a lieu pour toute distance inférieure à la longueur de Debye λ_D définie par l'Equation [2, 6, 10, 4]:

$$\lambda_D = \sqrt{\frac{\epsilon_0 \cdot K_B \cdot T_e}{n_e \cdot q^2}} \quad \text{Où} \quad \lambda_D (cm) = 6.9 \sqrt{\frac{T_e (K)}{n_e (cm^{-3})}} \quad (I-6)$$

Cette longueur peut également être calculée lorsque les particules chargées négativement sont séparées en deux populations de températures différentes. Par exemple dans le cas de plasmas électronégatifs, contenant les densités d'électrons n_e de température T_e , d'ions négatifs n_n de température T_{i-} et d'ions positifs n_p de température T_{i+} et que l'on considère la quasi-neutralité avant perturbation $n_p = n_e + n_n$, la longueur de Debye en plasma électronégatif s'écrit alors:

$$\lambda_{D-} = \sqrt{\frac{\epsilon_0 \cdot K_B \cdot T_e}{n_e \cdot q^2}} \sqrt{\frac{1 + \alpha}{1 + \gamma\alpha}} = \lambda_D \cdot \sqrt{\frac{1 + \alpha}{1 + \alpha\gamma}} \quad (I-7)$$

Avec $\gamma = \frac{T_e}{T_{i-}}$ et $\alpha = \frac{n_n}{n_e}$ qui représente l'électronégativité du plasma. Pour $\alpha \gg 1$ le plasma est fortement électronégatif [5].

Il en résulte que la neutralité du plasma n'existe qu'à une échelle d'observation supérieure à λ_D . Cette notion est importante pour concevoir un réacteur plasma : la dimension L de l'enceinte doit être très supérieure à λ_D pour assurer la quasi neutralité du plasma.

Le paramètre λ_D peut varier de quelques microns (plasmas denses) à plusieurs dizaines de mètres (Plasmas spatiaux).

I-5 Classification des plasmas

Il existe deux types essentiels de plasmas, les plasmas thermiques et les plasmas électriques :

- **Plasma thermique**

Le gaz est chauffé à une température suffisamment élevée pour une ionisation partielle ou complète. Les espèces présentes sont alors en équilibre thermique les unes avec les autres, telles que :

$$T_e \sim T_i \sim T_n$$

Les plasmas utilisés dans les réacteurs à fusion sont du type thermique. L'un des désavantages des plasmas thermiques est leur caractère destructif par leur température élevée au contact des matériaux.

- **Plasma électrique**

Les plasmas induits électriquement sont appelés « décharges » et à cause de leurs basses températures, ils sont quelquefois assimilés aux plasmas froids. Par définition le plasma froid est un gaz ionisé qui n'est pas à l'équilibre thermodynamique et dont seuls les électrons sont chauffés. Bien évidemment les décharges ne sont pas en équilibre thermique lorsque :

$$T_e \gg T_n \text{ et } T_e > T_i > T_n$$

Les types de plasmas les plus utilisés induits électriquement sont la décharge en courant continu, créée par l'application d'un potentiel DC [11], la décharge radiofréquence RF qui utilise un champ électrique de fréquence radio ~ 13.56 MHz [12, 13] et la décharge micro-onde avec une fréquence de 2.45 GHz [14, 15].

I-6 Les plasmas limites

Seules les caractéristiques du plasma en volume ont été énumérées jusqu'à maintenant, mais que se passe-t-il lorsque le plasma est confiné dans une enceinte ? Que se passe-t-il au niveau des parois du réacteur ?

I-6-1 La diffusion ambipolaire

Dans les zones de forts gradients comme au voisinage d'une paroi, les phénomènes de diffusion des porteurs de charge deviennent très importants. Les gradients de concentration induisent des flux d'électrons et d'ions vers la paroi mais, étant donné la plus grande mobilité des électrons, le flux d'électrons excède celui des ions [3]. La paroi (supposée isolée) va donc se charger négativement en produisant un champ électrique \vec{E}_x dans sa direction comme c'est illustré sur la figure I-4.

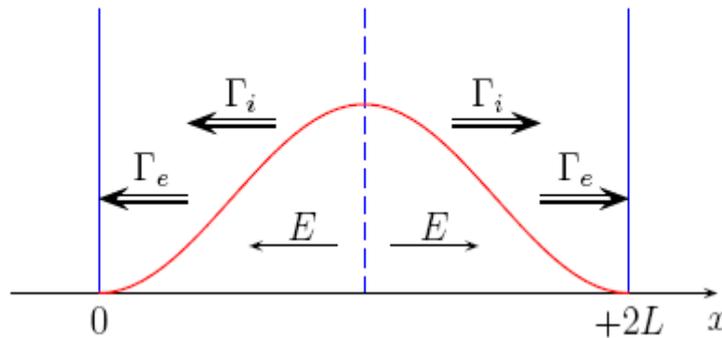


Figure I- 4: La diffusion ambipolaire

Le cœur de la décharge, loin des parois du réacteur, est caractérisé par une densité de charge constante et nulle. Ceci implique en particulier une densité de courant total \vec{j} nul et donc l'égalité des flux électronique et ionique [16]:

$$\vec{j} = \vec{j}_e + \vec{j}_p = q(\vec{\Gamma}_e + \vec{\Gamma}_p) = 0$$

Où $\vec{\Gamma}_e$ et $\vec{\Gamma}_p$ représentent les flux électronique et ionique respectivement avec :

$$\vec{\Gamma}_e = -D_e \vec{\nabla} n_e - n_e \mu_e \vec{E}_x \quad \text{et} \quad \vec{\Gamma}_p = -D_p \vec{\nabla} n_p + n_p \mu_p \vec{E}_x$$

Cette représentation introduit deux coefficients de transports: la mobilité μ et le coefficient de diffusion D pour les particules chargées (électrons, ions).

On trouve donc :

$$\vec{j} = q(n_p \mu_p + n_e \mu_e) \vec{E}_x + q(D_e - D_p) \vec{\nabla} n = 0$$

L'égalité entre flux d'espèces a lieu grâce à un champ électrique, appelé champ ambipolaire, qui s'établit de manière à retarder les électrons et accélérer les ions. Ce champ est obtenue en écrivant l'égalité des flux totaux d'ions et électrons ($\vec{\Gamma}_e = \vec{\Gamma}_p$). En tenant compte de l'électroneutralité ($\mathbf{n}_e = \mathbf{n}_p$), le champ électrique ambipolaire est présenté par la relation [7]:

$$\vec{E}_x = \frac{D_p - D_e}{\mu_e + \mu_p} \cdot \frac{\vec{\nabla}n}{n} \quad (\text{I-8})$$

De telle sorte que le flux ambipolaire est donné par $\vec{\Gamma}_a = \vec{\Gamma}_p = \vec{\Gamma}_e$ on trouve donc [5, 17]:

$$\vec{\Gamma}_a = -\frac{\mu_p D_e + \mu_e D_p}{\mu_p + \mu_e} \vec{\nabla}n$$

$$\vec{\Gamma}_a = -D_{amb} \vec{\nabla}n$$

Le coefficient de diffusion ambipolaire \mathbf{D}_{amb} est calculé à partir des mobilités et des coefficients de diffusions des électrons et des ions.

Utilisons la relation d'Einstein ($\frac{D}{\mu} = \frac{K_B T}{q}$) pour les particules chargées (électrons, ions positifs)

et pour $\mu_e \gg \mu_p$, La relation précédente peut être simplifiée pour aboutir à une expression assez simple du coefficient de diffusion ambipolaire [7] :

$$D_{amb} = \frac{D_p \cdot \left(1 + \frac{T_e}{T_i}\right)}{1 + \frac{T_e D_p}{T_i D_e}} \cong D_p \left(1 + \frac{T_e}{T_i}\right) \quad (\text{I-9})$$

Le plasma a, pour le moment, été considéré comme électriquement neutre, équipotentiel et loin des perturbations. On peut donc définir un potentiel qui correspond à l'ensemble des espèces du plasma : le potentiel plasma \mathbf{V}_p .

I-6-2 Répartition du potentiel inter électrode

Considérons d'abord le cas, présenté sur la figure I-5-a, d'un plasma confiné entre deux électrodes reliées à la masse et séparées par une distance d. Avec la neutralité de charges ($\mathbf{n}_e \approx \mathbf{n}_p$), le potentiel électrique Φ et le champ électrique \mathbf{E}_x sont nuls partout.

Les électrons plus mobiles ne sont pas retenus par le plasma et sont absorbés rapidement par les parois. Dans une échelle courte de temps, cela aboutit à la formation d'un espace de charge positive près des parois, dû à la présence d'ions plus inertes (c.à.d $n_e \ll n_i$) comme c'est illustré sur la figure-I-5-b. Cet espace de charge positive présente un profil de potentiel $\Phi(x)$, avec la valeur positive V_p dans le plasma, et tombant rapidement à zéro près des parois. Comme le champ électrique est dirigé du plasma vers les parois, les électrons chargés négativement sont retenus dans le plasma et les ions chargés positivement, en entrant dans la gaine, sont attirés par les parois. Tant que le processus d'ionisation dans le plasma peut produire suffisamment d'ions, le profil du potentiel peut rester stationnaire.

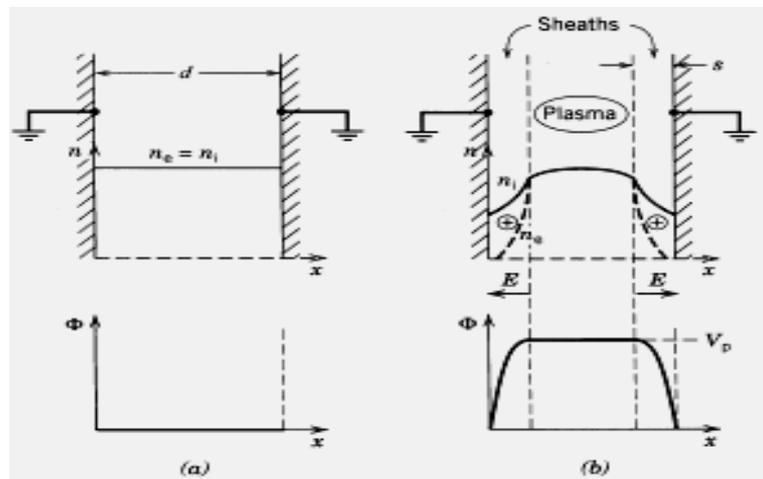


Figure I- 5: Répartition du potentiel et densité des ions et des électrons :
a) avant et b) après la formation de la gaine.

Lorsque le plasma est généré (excitation électrique), il apparaît des zones sombres entre le plasma et tout autre corps le limitant spatialement, en particulier, les électrodes et les parois de l'enceinte. Ces zones sombres traduisent les variations de la densité des charges et les variations de potentiel entre le plasma et tout autre corps interagissant avec lui.

L'évolution du potentiel dans l'espace inter électrode montre la présence de trois zones différentes. Comme l'illustre la figure I-6, ces zones sont [18] :

- La colonne positive qui est le milieu « plasma » proprement dit, limitée par les deux zones sombres qui avoisinent les électrodes. Dans cette zone le potentiel notée V_p est pratiquement constant.
- Une gaine cathodique qui sépare la cathode de la colonne positive.

- Une gaine anodique qui sépare l'anode de la colonne positive.

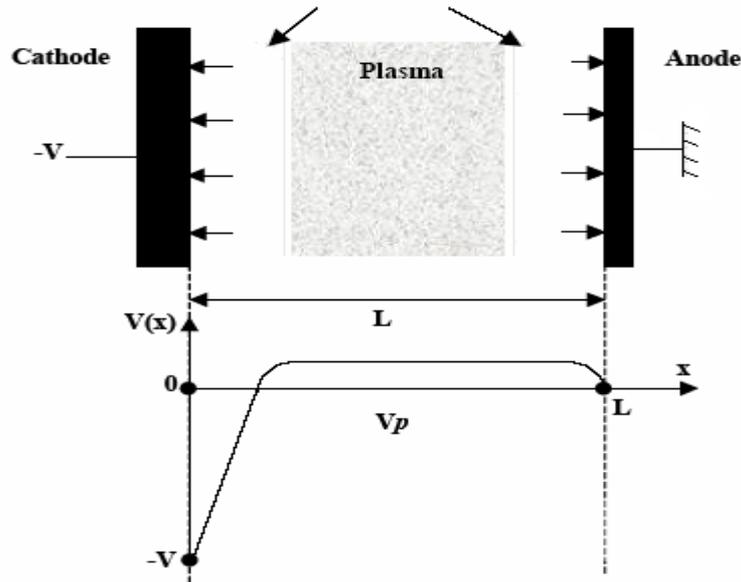


Figure I-6 : Variation du potentiel entre les deux électrodes dans le cas d'une décharge continue.

I-6-3 Les gaines électrostatiques

La gaine est une région aussi appelée « zone de charge d'espace » dont la taille est de l'ordre de la longueur de Debye λ_D [18,19]. Dans cette zone il existe un champ électrique très intense qui va accélérer les électrons émis par la cathode entretenant ainsi l'excitation et l'ionisation du gaz dans une zone intermédiaire appelée pré gaine « zone d'ionisation ». De la même manière, les ions créés dans la pré gaine vont être accélérés du plasma vers la cathode par ce champ électrique.

Dès l'amorçage du plasma, les parois du réacteur vont être soumises aux flux thermiques Γ des différentes espèces k (ions, électrons, neutres) présentes [20, 21, 22]:

$$\Gamma_k = \frac{1}{4} n_k \sqrt{\frac{8K_B T_k}{\pi m_k}} \quad (\text{I-10})$$

En moyenne (temporelle et spatiale) la gaine de charge d'espace entourant le plasma est nécessairement positive (gaine ionique) pour pouvoir maintenir l'électro-neutralité du plasma malgré la différence de mobilité des électrons (légers et rapides) et celles des ions positifs (lourds et lents). Le potentiel plasma moyen V_p est positif par rapport aux parois ce qui tend à freiner

l'évacuation des électrons et à accélérer celle des ions positifs. La valeur du V_p s'ajuste de telle sorte que les flux électronique et ionique perdus sur les parois soient égaux en moyenne dans le temps.

Il faut que la densité ionique devienne supérieure à la densité électronique dans la gaine, ce qui impose aux ions une vitesse dirigée minimum, avant que la gaine ne puisse se former. Cette vitesse minimum U_b a été calculée par Böhm en 1949 pour une gaine non collisionnelle (cas des plasmas basse pression : $p < 20$ mTorr) [5, 23]:

$$U_b = C_s = \sqrt{\frac{K_B T_e}{m_i}} \quad (\text{I-11})$$

Où C_s est la vitesse de Böhm, pour la gaine non collisionnelle, en l'absence d'ions négatifs. C_s est également appelée vitesse acoustique ionique.

Pour une gaine collisionnelle le critère de Böhm sur la vitesse acoustique des ions reste valable mais doit être légèrement modifié. La vitesse acoustique effective devient:

$$U_b = C_s \left(1 + \frac{\pi \lambda_D}{2 \lambda_i}\right)^{\frac{1}{2}} \quad (\text{I-12})$$

Où λ_i désigne le libre parcours moyen collisionnel des ions.

Les ions acquièrent cette vitesse minimum (ou cette énergie cinétique $E_c = \frac{1}{2} m_i U_b^2$) dans la pré-gaine, où le champ électrique est négligeable et les densités ioniques et électroniques décroissent [10, 24], il y a donc une chute de potentiel égale à :

$$V_p - V = \frac{1}{2} \frac{K_B T_e}{q} \quad (\text{I-13})$$

Cette situation est synthétisée sur la figure I-7 en termes de distribution spatiale de densités électroniques, ioniques et de potentiel électrique:

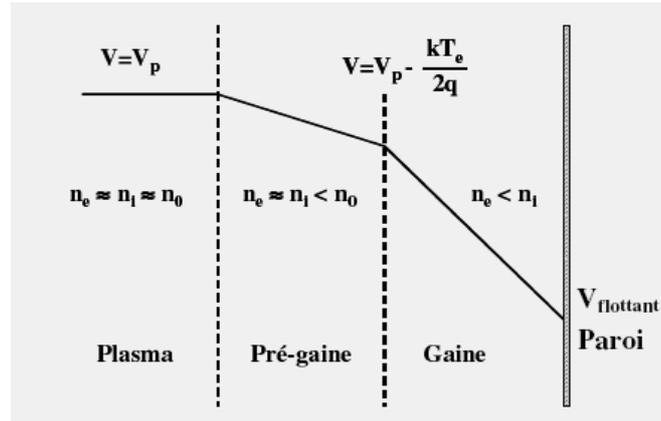


Figure I-7 : Schéma représentant les densités ioniques et électroniques et les chutes de potentiel entre le plasma et les parois du réacteur.

Le flux ionique bombardant les parois est égal au flux de Böhlm [5]: $\Gamma_p = n_{pg} \times U_b$ (où n_{pg} représente la densité d'ions à la lisière de la gaine). Or, à la lisière de la gaine on a $n_{pg} = n_{eg}$. Si on suppose que la densité d'électrons obéit à la loi de distribution de Boltzmann, alors la densité électronique entre le centre du plasma n_{e0} et la lisière de la gaine n_{eg} chute d'un facteur :

$$\frac{n_{eg}}{n_{e0}} = \exp\left(-\frac{q\Delta V}{K_B T_e}\right) = \exp\left(-\frac{K_B T_e}{2K_B T_e}\right) = \exp(-0.5) \approx 0.6$$

À cause de la chute de potentiel dans la pré gaine. D'où l'expression du flux ionique arrivant sur les parois : $\Gamma_p = 0.6 n_{e0} \times U_b = 0.6 n_{p0} \times U_b$ (car le plasma est électriquement neutre $n_{e0} = n_{p0}$).

La chute de potentiel dans la gaine ($V_g = V_p - V_f$) qui accélère les ions entre le cœur du plasma et les parois, est définie par l'égalité des flux d'ions et d'électrons perdus en surface [10]:

$$\Gamma_e = \frac{1}{4} n_e V_{eT} = \frac{1}{4} n_{e0} V_{eT} \exp\left(-\frac{qV_g}{K_B T_e}\right)$$

$$\Gamma_e = \Gamma_i \Rightarrow \frac{1}{4} n_{e0} V_{eT} \exp\left(-\frac{qV_g}{K_B T_e}\right) = n_{i0} U_b \exp\left(-\frac{1}{2}\right) \Rightarrow V_g = \frac{K_B T_e}{q} \ln\left(\frac{V_{eT}}{4U_b \exp(-1/2)}\right)$$

Avec $V_{eT} = \sqrt{\frac{8K_B T_e}{\pi m_e}}$ la vitesse thermique des électrons.

$$\text{Donc on obtient [10] : } V_p - V_f = V_g = \frac{K_B T_e}{2q} \ln\left(\frac{\exp(1) m_i}{2\pi m_e}\right) \quad (\text{I-14})$$

Cette différence de potentiel donne l'énergie des ions qui bombardent la paroi.

Remarque

Cette remarque est consacrée au calcul du flux d'ions positifs atteignant une surface plane et à la définition des conditions de formation de la gaine de charge d'espace positive, dans le cas d'une décharge non collisionnelle contenant des ions négatifs. Les densités dans le milieu du plasma sont notées n_{e0} , n_{p0} et n_{n0} avec $n_{p0} = n_{e0} + n_{n0}$ et en lisière de gaine, sont notées n_{eg} , n_{pg} et n_{ng} . La distribution des charges négatives en fonction du potentiel est donnée par [25]:

$$n_e + n_n = n_{eg} \exp\left(\frac{q\phi}{K_B T_e}\right) + n_{ng} \left(\frac{q\phi}{K_B T_{i-}}\right)$$

Qui s'écrit :

$$n_e + n_n = \frac{n_{pg}}{1 + \alpha_s} \left\{ \exp\left(\frac{q\phi}{K_B T_e}\right) + \alpha_s \exp\left(\frac{\gamma q\phi}{K_B T_e}\right) \right\}$$

Avec $\alpha_s = \frac{n_{ng}}{n_{eg}}$ représente la fraction d'ions négatifs à la lisière de la gaine.

Si on appelle U_s la vitesse à la lisière de la gaine en présence d'ions négatifs, on obtient une condition pour U_s qui définit la nouvelle vitesse de Böhm, U_b , pour les plasmas électronégatifs :

$$U_s \geq U_b = \sqrt{\frac{K_B T_e}{m_i}} \sqrt{\frac{1 + \alpha_s}{1 + \gamma \alpha_s}} = C_s \sqrt{\frac{1 + \alpha_s}{1 + \gamma \alpha_s}} \quad (I-15)$$

U_b est la vitesse des ions positifs minimum requise pour former la gaine. Elle nous permet de calculer la chute de potentiel, qui existe dans la pré gaine ; c'est à dire entre le milieu du plasma ($\Phi = V_p$) et la lisière de gaine ($\Phi = 0$). On peut appliquer le théorème de l'énergie cinétique aux ions entre le centre du plasma (vitesse nulle) et la lisière de gaine (vitesse = U_b) ce qui donne la relation suivante [26, 27]:

$$V_p = \frac{K_B T_e}{2q} \cdot \frac{1 + \alpha_s}{1 + \gamma \alpha_s} \quad (I-16)$$

Lorsque α_s est nul, on retrouve la formule classique du critère de Böhm pour les décharges

électropositives : $V_p = \frac{K_B T_e}{2q}$

Nous allons voir que le flux d'ions positifs à la surface et la chute de potentiel sont intimement liés et que la présence d'ions négatifs change ces deux paramètres.

- **Épaisseur de la gaine**

Pour déterminer de façon plus précise la dimension de la gaine I_g , comprise entre la lisière de la gaine (anodique ou cathodique) et l'électrode, il est possible de prendre l'expression de Child Langmuir [1, 28] qui donne la variation du courant entre deux électrodes :

$$j_p = \frac{4\varepsilon_0}{9} \sqrt{\frac{2q}{m_i}} \cdot \frac{V^{3/2}}{I_g} \quad (\text{I-17})$$

En égalant ce courant à celui de Bohm $j_p = n_p q \sqrt{\frac{K_B T_e}{m_i \exp(1)}}$ [28], on peut déterminer l'expression de l'épaisseur de gaine I_g [2, 5]:

$$I_g = \lambda_D \left(\frac{qV}{K_B T_e} \right)^{3/4} = \lambda_D \left(\frac{q(V_P - V_{\text{Parois}})}{K_B T_e} \right)^{3/4} \quad (\text{I-18})$$

Il apparaît donc que pour un plasma donné, les épaisseurs des gaines cathodique et anodique sont liées à la chute de potentiel ($V_g = V_P - P_{\text{aroi}}$).

La gaine est très importante dans les traitements par plasma puisque ses propriétés déterminent comment les particules du plasma interagissent avec la surface en traitement. En particulier, l'énergie et la direction des ions qui frappent la surface du substrat sont déterminées par leur passage à travers la gaine. Une différence de potentiel de l'ordre de dix à des centaines de Volts peut apparaître dans une gaine, ce qui donne aux ions des énergies cinétiques de l'ordre de dizaines à des centaines d'électronvolts. Ces ions énergétiques bombardent la surface et effectuent de la pulvérisation et de l'activation chimique de surfaces en contact avec le plasma [9].

I-7 Les collisions dans un plasma

Lorsque deux particules initialement séparées par une distance d s'approchent l'une de l'autre, elles commencent à interagir et si, après cette interaction, quelque changement mesurable s'est produit, on dit qu'une collision a eu lieu. On peut distinguer [5, 7, 29]:

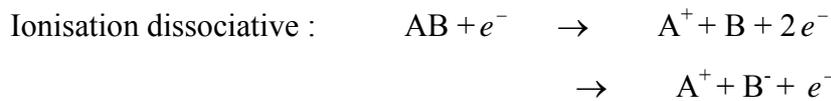
- ◆ Les collisions élastiques
- ◆ Les collisions inélastiques

Dans le premiers cas, il y'a transfert d'énergie cinétique uniquement. Dans le second, une partie de l'énergie cinétique est transformée en énergie interne.

Les processus les plus importants dans un plasma froid sont les collisions inélastiques entre le gaz et les électrons.

Les principaux types de collisions entre une molécule de gaz (AB) et un électron sont les suivants :

✓ **Ionisation de la molécule AB**



Ce phénomène est généralement caractérisé par le coefficient d'ionisation α qui est une fonction du champ électrique réduit $\left(\frac{E}{P}\right)$.

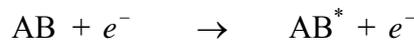
✓ **Attachement des électrons sur la molécule AB**



Ce phénomène est caractérisé par le coefficient d'attachement η fonction de $\left(\frac{E}{P}\right)$.

✓ **Excitation de la molécule AB**

Différents modes d'excitation sont possibles (rotation, vibration...)



(* : Atome ou molécule dans un état excité)

✓ **Dissociation en neutres de la molécule AB**



A cette liste, il faut ajouter les processus de **recombinaison** électron-ion ou ion-ion, de **détachement**, de **relaxation**,...

Il est important de noter que la relaxation d'états excités s'accompagne souvent d'émission de photons et est donc à l'origine de la luminosité de certaines décharges.

Les probabilités des divers types de collisions électron - molécule sont fonctions de l'énergie de ces derniers. Elles ont été déterminées expérimentalement pour un certain nombre de gaz. Elles sont traduites en termes de sections efficaces d'ionisation, de dissociation, d'attachement, etc.

I-8 Les modèles numériques de décharge

L'expérimentation sur les plasmas coutant cher, et du fait de la complexité des problèmes rencontrés dans la physique des plasmas, il est indispensable de développer des modèles numériques de simulation des mécanismes rencontrés lors d'une décharge. En effet, la modélisation joue un rôle assez important dans le développement de la théorie des plasmas de par la pertinence des résultats numériques prédits par ces simulations.

L'étude des plasmas peut être abordée suivant deux angles distincts qui sont la description sous forme de fluide ou l'aspect cinétique [30]. De façon générale, ces modèles permettent la détermination :

- ❖ Des paramètres électriques de la décharge, c'est-à-dire les variations spatio-temporelles du champ électrique, du courant et du potentiel et également la détermination de puissance dissipée et du déphasage tension-courant.
- ❖ Des profils de densités et des fonctions de distribution en énergie des espèces chargées, avec les variations spatio-temporelles correspondantes.
- ❖ Des taux (ou fréquences) des divers processus de collision tels l'ionisation, l'attachement, l'excitation ou la dissociation.

L'équation de base de la théorie des plasmas fait intervenir la fonction de distribution des vitesses et l'équation de Boltzmann qui s'écrit sous la forme [7, 29, 30]:

$$\underbrace{\frac{\partial f_i}{\partial t}}_{(a)} + v_i \underbrace{\frac{\partial f_i}{\partial r}}_{(b)} + \gamma_i \underbrace{\frac{\partial f_i}{\partial v}}_{(c)} = \underbrace{\left(\frac{\partial f_i}{\partial t} \right)}_{(d)}_{collisions} \quad (I-19)$$

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

où :

\mathbf{r} : champ des distances.

γ : champ des accélérations des particules égal à $\frac{\vec{F}_i}{m_i}$, avec F_i est la force extérieure qui s'applique à la particule i de masse m_i ($F_i = e\vec{E}$).

\mathbf{v} : champ des vitesses des particules chargées, dont leur intégration dans l'espace 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 [2];

$$n(\vec{r}, t) = \int_{\mathbf{v}} f(\vec{r}, \vec{v}, t) d\mathbf{v}$$

$$\vec{v}(\vec{r}, t) = \frac{\int_{\mathbf{v}} \vec{v} \cdot f(\vec{r}, \vec{v}, t) \cdot d\vec{v}}{\int_{\mathbf{v}} f(\vec{r}, \vec{v}, t) \cdot d\vec{v}}$$

Or, la valeur du champ électrique dépend elle-même des densités de charges par l'intermédiaire de l'équation de poisson :

$$\nabla E = -\Delta\phi = \frac{q}{\epsilon_0} (n_p - n_e - n_n) \quad (\text{I-20})$$

Dans le cas de modèles dits « auto-cohérents » [31], l'équation de Poisson, qui détermine le champ électrique, doit être couplée à l'équation de Boltzmann.

La résolution de l'équation de Boltzmann n'est pas une chose facile, et son couplage avec l'équation de Poisson ne fait qu'accroître la difficulté. Donc, il est nécessaire d'exiger des hypothèses simplificatrices et des conditions aux limites bien précises.

Pour cette raison, plusieurs types de modèles « auto-cohérents », correspondant à différents niveaux d'approximation, ont été développés. Nous allons maintenant décrire les différents types de modèles « auto-cohérents ».

I -8-1 Modèles fluides

Les propriétés du milieu (densités, vitesse, énergie...) sont décrites uniquement par des grandeurs moyennes, et non par les fonctions de distribution des vitesses des particules. Ces grandeurs sont les solutions des trois premiers moments de l'équation de Boltzmann, qui

correspondent aux équations de continuité, de transfert de quantité de mouvement et de transfert d'énergie [31]. Le système d'équations ainsi formé s'écrit dans le cas des électrons par exemple:

- **Equation de continuité**

Qui représente le premier moment de l'équation de Boltzmann :

$$\frac{\partial n_e}{\partial t} + \vec{\nabla}(n_e \cdot \vec{v}_e) = S_e \quad (I-21)$$

avec :

v_e : la vitesse moyenne des électrons,

S_e : le terme source tel que $S_e = (\nu_i - \nu_a)n_e - r_e n_e n_p$

où

ν_i : la fréquence moyenne d'ionisation,

ν_a : la fréquence moyenne d'attachement,

r_e : le coefficient de recombinaison.

- **Equation de transfert de quantité de mouvement**

Représente le second moment de l'équation de Boltzmann :

$$\frac{\partial n_e m v_e}{\partial t} + \nabla(n_e \cdot m v_e v_e) + \nabla p_e = -q E n_e - n_e m v_e \nu_m \quad (I-22)$$

Avec : $P_e = n_e \cdot K_B \cdot T_e$, la pression électronique et ν_m la fréquence de collisions avec les molécules.

- **Equation d'énergie**

Représente le troisième moment de l'équation de Boltzmann :

$$\frac{\partial w_e}{\partial t} + \nabla(v_e \cdot w_e) + \nabla(p_e v_e) + \nabla Q_e = -q E n_e v_e - n_e \sum_k \varepsilon_k \nu_k \quad (I-23)$$

où : $w_e = n_e \left(\frac{1}{2} m v_e^2 + \frac{3}{2} K T_e \right)$

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.

Ces équations doivent être couplées à l'équation de Poisson mentionnée ci-dessus.

On utilise donc un certain nombre d'approximations permettant sa simplification. Les approximations les plus couramment utilisées sont :

➤ **La représentation dérive-diffusion du flux de particules chargées**

Dans les équations de continuité, les flux de particules chargées sont supposés être la somme d'un terme de dérive et d'un terme de diffusion, dépendant respectivement du champ électrique et des densités des particules chargées telle que [32] :

$$\Gamma_k = n_k v_k = Z \cdot (n_k \mu_k E - \nabla n_k D_k) \quad (I-24)$$

$\mathbf{k} = \mathbf{e}, \mathbf{n}, \mathbf{p}$ (\mathbf{e}, \mathbf{n} et \mathbf{p} désignant respectivement les électrons, les ions négatifs et positifs).

Z égal à 1 pour les ions positifs et -1 pour les particules chargées négativement.

➤ **L'approximation du champ électrique local**

Dans ce cas, les coefficients de transport (μ_k, D_k) et les fréquences moyennes de collision ne dépendent que de l'intensité du champ électrique réduit local (\mathbf{E}/\mathbf{P}) [33].

➤ **L'approximation de l'énergie moyenne**

La fonction de distribution ne dépend que de la densité de l'espèce et de son énergie moyenne. Une telle approximation oblige à poser des hypothèses supplémentaires sur la forme de cette distribution.

Bien que le modèle fluide donne des informations sur les champs électriques et les densités pendant la décharge, il ne permet pas de connaître les distributions en énergie des particules lourdes. Pour calculer ces distributions, on doit développer un modèle particulière Monte Carlo [34].

I -8-2 Modèles microscopiques ou particulières

Dans ce modèle on considère le mouvement individuel de chaque particule chargée en déterminant la fonction de distribution des vitesses $f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)$ [35].

Pour résoudre rapidement l'équation de Boltzmann couplée à l'équation de Poisson, on n'a pas recours à des méthodes aux différences ou éléments finis, comme dans le cas des modèles fluides, mais à des méthodes considérant un nombre fini de particules supposé représenter les espèces chargées, le mouvement des particules dans l'espace position-vitesse (r, v) étant lié au champ électrique et aux collisions.

Pour déterminer l'influence du champ électrique, on intègre les équations de mouvement entre deux collisions, ces dernières étant traitées statistiquement en tirant des nombres aléatoires dont les densités de probabilité dépendent des sections efficaces [33, 36] (on détermine l'instant, la nature des collisions, la trajectoire de la particule après collisions...). L'équation de Poisson est résolue simultanément à intervalles de temps réguliers.

Pour les 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 (MC). Ce type de modèles est le plus précis, mais aussi le plus coûteux en temps de calcul.

I -8-3 Modèles hybrides

Le but du modèle hybride est de concilier les avantages des modèles microscopique et fluide en traitant par exemple certaines régions de la décharge (chute cathodique) par un modèles particulaire et d'autres régions (leur négative ou il y a beaucoup plus de collisions) par un modèle fluide. Les modèles hybrides les plus répandus sont ceux où l'on associe un code Monte Carlo à un modèle de type fluide [37].

I-9 Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons rappelé quelques notions simples sur les plasmas, sur leurs propriétés électriques et les différentes collisions mises en jeu dans une décharge. Nous avons ensuite évoqué les différentes régions créées dans l'espace inter électrodes lorsque la décharge continue est une décharge lumineuse. Enfin, nous avons abordé les différentes approches numériques (fluides, particulaire,...) du modèle de décharge électrique.

CHAPITRE II

Méthodes numériques

II-1 Introduction

La simulation numérique de tout problème formulé par des équations aux dérivées partielles (EDP) est de plus en plus répandue au niveau industriel. Pour notre modèle le système constitué des équations de transport couplées à l'équation de Poisson ne peut être résolu analytiquement. Il est donc nécessaire de procéder à sa résolution en utilisant la méthode de différences finies.

Dans ce chapitre, nous commençons d'abord par écrire les équations de notre modèle, en précisant les hypothèses et les quelques approximations utilisées. Nous décrivons, par la suite, le domaine à modéliser, sans oublier de présenter les données de base choisies pour la simulation.

II-2 Modèle numérique

Le modèle utilisé dans ce travail est de type fluide, auto cohérent avec une représentation dérive-diffusion des flux de particules chargées [21, 38, 39]. Ce modèle est basé sur la résolution des deux premiers moments de l'équation de Boltzmann. Ces deux moments représentent les équations de continuité et de transfert de la quantité de mouvement qui sont couplées à l'équation de Poisson en utilisant l'approximation du champ local. Un modèle simple ne comportant que des électrons et des ions positifs et négatifs dans une géométrie unidimensionnelle peut alors être décrit par le système d'équations suivant :

➤ Equations de continuité :

$$\frac{\partial n_e}{\partial t} + \nabla(n_e v_e) = S_e = n_e(v_i - v_a) - r_e n_e n_p \quad (II-1) \quad \text{pour les électrons}$$

$$\frac{\partial n_p}{\partial t} + \nabla(n_p v_p) = S_p = n_e v_i - r_e n_e n_p - r_i n_n n_p \quad (II-2) \quad \text{pour les ions positifs}$$

$$\frac{\partial n_n}{\partial t} + \nabla(n_n v_n) = S_n = n_e v_a - r_i n_n n_p \quad (II-3) \quad \text{pour les ions négatifs}$$

Avec S_k ($k = e, p$ et n) le terme source de l'équation de continuité pour les différentes espèces chargées présentes dans le plasma, r_e le coefficient de recombinaison électron – ion positif et r_i le coefficient de recombinaison ion positif – ion négatif.

➤ équations de transfert de la quantité de mouvement :

$$\Gamma_e = n_e v_e = -n_e \mu_e E - D_e \nabla n_e \quad (II - 4)$$

$$\Gamma_p = n_p v_p = n_p \mu_p E - D_p \nabla n_p \quad (II - 5)$$

$$\Gamma_n = n_n v_n = -n_n \mu_n E - D_n \nabla n_n \quad (II - 6)$$

➤ Equation de Poisson :

$$\nabla^2 \phi = -\frac{|q|}{\epsilon_0} (n_p - n_e - n_n) \quad (II - 7)$$

II-3 Hypothèses spécifiques et grandeurs caractéristiques

Pour pouvoir résoudre notre système d'équations, nous avons émis quelques hypothèses simplificatrices et nous avons essayé de représenter les grandeurs caractéristiques du système en fonction des paramètres du plasma (températures, densités, ...).

➤ **Hypothèses spécifiques**

Les hypothèses que nous avons posées pour la modélisation de la décharge électrique sont les suivantes :

- Le processus d'ionisation est le processus unique que nous avons considéré dans la modélisation des plasmas atomiques. Ce dernier provient:
 - a- d'un mouvement local dit de colonne positive, et,
 - b- d'un mouvement d'expansion des gaines.

- Les processus de recombinaison, d'attachement et de détachement sont également pris en considération dans le modèle qui traite le plasma d'origine moléculaire.
- le processus d'émission d'électrons secondaires (issus du bombardement ionique et accélérés dans la gaine « processus de leur négative ») est inexploré.
- les températures électronique T_e , et ionique T_i , sont supposées uniformes: On se place dans l'approximation isotherme.
- Le milieu se compose comme un gaz parfait : $P_g = n_g T_g K_B$.
- Le milieu évolue à pression constante.
- L'énergie cinétique de l'électron est négligeable devant son énergie thermique.

➤ **Les grandeurs caractéristiques**

Les équations énumérées ci-dessus sont écrites en fonction des coefficients de diffusion et des mobilités des porteurs de charges ainsi que de leurs fréquences de collisions.

Les coefficients de diffusion D_e et de mobilité μ_e des électrons, ainsi que les fréquences de collisions des électrons avec les espèces lourdes dépendent de la fonction de distribution de l'énergie des électrons (FDEE). Dans l'hypothèse d'une FDEE Maxwellienne, ces coefficients s'expriment directement en fonction de la température des électrons [21, 40].

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

$$\frac{D_e}{\mu_e} = \frac{K_B T_e}{q} = \frac{2}{3} \frac{\xi_e}{q} \quad (II - 8)$$

Cette relation est connue sous le nom de relation d'Einstein où T_e est la température électronique et

ξ_e est l'énergie moyenne avec [29]: $\xi_e = \frac{3}{2} K_B T_e \quad (II - 9)$

- **La fréquence d'ionisation ν_i**

Elle est donnée par la relation:

$$\nu_i = n_g \cdot K_i \quad (II - 10)$$

Où n_g est la densité du gaz et k_i est le taux d'ionisation. Ce dernier dépend de l'énergie de l'électron pour un champ local donné. Les valeurs de k_i sont prises de la littérature. Suivant le gaz considéré, k_i est donné, soit par des courbes expérimentales, soit par des expressions approximatives en fonction des énergies moyennes.

Par ailleurs, pour les ions présents dans le gaz, les coefficients de transport D et μ s'expriment, en fonction de la valeur locale du champ électrique réduit, suivant la relation [41] :

$$D = \frac{K_B T \mu}{q} \quad (II - 11)$$

Où :

$$K_B T = K_B T_g + \frac{m + m_g}{5m + 3m_g} m_g (\mu E)^2 \quad (II - 12)$$

T_g : température du gaz;

m : masse de l'ion.

m_g : masse du mélange gazeux.

➤ Domaines de modélisation

Toute modélisation nécessite, au préalable, la définition du domaine géométrique précis sur lequel elle va être effectuée. De ce fait, nous avons considéré un réacteur à courant continu, composé de deux électrodes conductrices planes et parallèles placées dans une enceinte sous vide dans laquelle est introduit un gaz (ou un mélange de gaz) tel que l'argon, l'oxygène, ou bien encore l'hexafluorure de soufre SF₆. Une électrode (la cathode) est alimentée par une tension négative alors que l'anode est reliée à la masse, comme c'est illustré sur la figure II-1. La dimension de l'espace inter électrodes est de l'ordre de quelques centimètres.

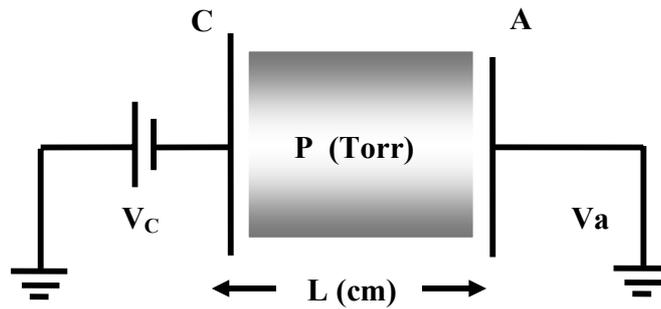


Figure II-1 : La géométrie du réacteur modélisé

III-4 La résolution numérique

Dans ce paragraphe nous précisons les données déclarées comme paramètres d'entrée du programme, nous détaillons le maillage de l'espace inter électrodes, nous fixons les conditions initiales et aux limites et nous définissons les paramètres de sortie qui correspondent aux résultats recherchés par cette simulation.

i- Les paramètres d'entrée du modèle

Ces paramètres permettent de décrire physiquement la décharge électrique. Ils peuvent être modifiés par l'utilisateur à sa guise. Ces paramètres sont:

- La distance inter électrode ;
- La tension appliquée entre les deux électrodes ;
- La pression et la densité du gaz.

ii- Discrétisation et résolution du système d'équations

Après avoir remplacé les équations (II-4), (II-5) et (II-6) dans respectivement (II-1), (II-2) et (II-3) le système d'équations présentées précédemment est écrit de la façon suivante :

$$\frac{\partial n_e}{\partial t} + \text{Div} (-D_e \nabla n_e + n_e \mu_e \nabla V) = S_e \quad (\text{II} - 13)$$

$$\frac{\partial n_p}{\partial t} + \text{Div} (-D_p \nabla n_p - n_p \mu_p \nabla V) = S_p \quad (\text{II} - 14)$$

$$\frac{\partial n_n}{\partial t} + \text{Div} (-D_n \nabla n_n + n_n \mu_n \nabla V) = S_n \quad (\text{II -15})$$

$$\Delta V = -\frac{\rho}{\epsilon_0} = -\frac{|q|}{\epsilon_0} (n_p - n_e - n_n) \quad \text{et} \quad E = -\nabla V \quad (\text{II - 7})$$

La résolution des équations de transport et de Poisson requièrent leur discrétisations spatiale et temporelle. Pour ce faire, nous effectuons, d'abord, un maillage **1D** similaire à celui donné sur la figure II-2. Ce maillage détermine les points sur lesquels seront calculés les densités d'espèces et le champ électrique.

Nous avons choisi un maillage de N_x points, correspondant à un pas de discrétisation ΔX , permettant de bien résoudre les variations spatiales des différentes caractéristiques de la décharge pour des distances inter électrodes de l'ordre du centimètre.

Où $N_x = L_x / \Delta x$ représente le nombre de noeuds dans l'espace inter électrode.

Le domaine est donc défini par l'intervalle $[0, N_x]$. Le centre de cellule C_k , occupant la position k du maillage, a pour coordonnée X_k . On note $X_{(k-1/2)}$ le milieu du segment $[X_{k-1}, X_k]$.

Les nœuds sont donc représentés par les points X_k avec $X_k = (k) \times \Delta X$ et $k \in [0, N_x]$,

La méthode des différences finies [42, 43, 44], souvent utilisée dans ce type de problème, permet de déterminer les valeurs des densités et du potentiel électrique (les inconnues du problème) aux centres des mailles et nécessite le calcul des flux et du champ électrique à l'interface des mailles.

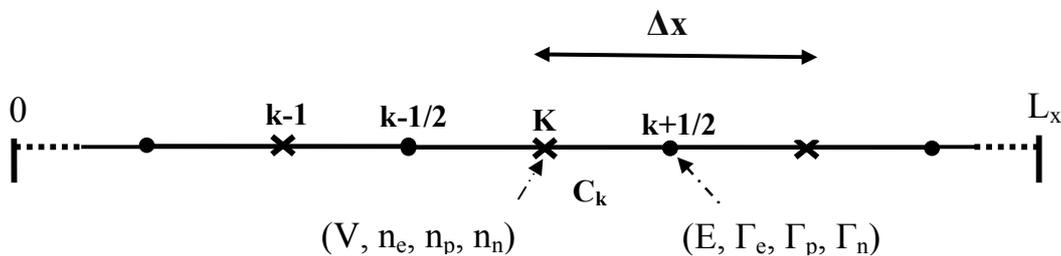


Figure II-2 : Maillage de l'espace inter électrode

➤ **Résolution de l'équation de transport**

L'équation de transport à résoudre est de la forme suivante:

$$\frac{\partial n}{\partial t} + \nabla \Gamma = S \quad (II-16)$$

Le schéma numérique adopté dans notre modèle est similaire à celui décrit par Scharfetter et Gummel [45]. Les flux d'ions et d'électrons sont discrétisés par la méthode des différences finies en utilisant un schéma exponentiel [36, 45, 46]. Le système d'équations est linéarisé et intégré implicitement dans le temps [31, 47].

L'équation (II-16) peut se mettre sous la forme discrétisée suivante en utilisant la méthode des différences finies:

$$\frac{n^{t+\Delta t}(k) - n^t(k)}{\Delta t} + \frac{\Gamma^{t+\Delta t}(k+1/2) - \Gamma^{t+\Delta t}(k-1/2)}{\Delta x} = S^t(k) \quad (II-17)$$

avec :

$$\Gamma(k+1/2) = -\frac{1}{\Delta x} D (f_1(z(k+1/2))n(k+1) - f_2(z(k+1/2))n(k)) \quad (II-18)$$

$$\Gamma(k-1/2) = -\frac{1}{\Delta x} D (f_1(z(k-1/2))n(k) - f_2(z(k-1/2))n(k-1)) \quad (II-19)$$

où :

$$z(k) = \frac{\mu E(k) \Delta x}{D} \quad (II-20)$$

$$f_1(z) = \frac{z}{\exp(z) - 1} \quad (II-21)$$

$$f_2(z) = f_1(z) + z \quad (II-22)$$

Après avoir remplacé les équations (II-18) et (II-19) dans (II-17), la deuxième étape de la discrétisation consiste à réarranger l'équation (II-17) sous la forme :

$$A_W n^{t+\Delta t}(k-1) + A_C n^{t+\Delta t}(k) + A_E n^{t+\Delta t}(k+1) = B(k) \quad (II-23)$$

➤ **Résolution de l'équation de Poisson**

La discrétisation de l'équation de Poisson (II-7) mène à l'équation suivante:

$$\frac{V(k-1) - 2V(k) + V(k+1)}{\Delta x^2} = -\frac{\rho}{\varepsilon_0} \quad (II-24) ,$$

La deuxième étape de la discrétisation consiste à réarranger l'équation (II-24) sous la forme :

$$A_W V(k-1) + A_C V(k) + A_E V(k+1) = B(k) \quad (II-25)$$

La matrice obtenue après discrétisation de l'équation de transport et l'équation de Poisson est tridiagonale (II-23, II-25). De ce fait, sa résolution est effectuée par la méthode de sur-relaxation (SOR) [48], en utilisant un facteur de relaxation ω compris entre les valeurs 1 et 2. En général, la valeur de ce facteur ω n'est pas connue. A priori des essais sont nécessaires pour la déterminer. Cependant, nous avons aussi utilisé une seconde méthode pour la résolution de l'équation de Poisson. Cette méthode est celle d'inversion de la matrice.

iii- Les conditions aux limites et initiales

La résolution du système composé des équations de transport et de l'équation de Poisson nécessite de spécifier des conditions initiales et aux limites aux électrodes qui constituent les frontières du domaine simulé. Le choix de ces conditions est dicté par des considérations physiques et distingue le cas des électrons de celui des ions.

➤ **Les conditions aux limites**

• **Pour les espèces chargées**

Pour les ions positifs les conditions aux limites sont de type Newman [48], elles sont traduites par :

$$\frac{\partial n_p}{\partial x} = 0 \quad \text{à : } \mathbf{x} = \mathbf{0} \quad \text{et} \quad \mathbf{x} = \mathbf{L}.$$

Par contre pour les particules chargées négativement, tel que les électrons et les ions négatifs, les conditions aux limites utilisées sont les conditions de type Dirichlet : c'est-à-dire les densités des espèces chargées sont nulles aux limites car il n'y a pas d'accumulation de charges négatives sur les électrodes :

$$\mathbf{n}_e = \mathbf{n}_n = \mathbf{0} \quad \text{à} \quad \mathbf{x} = \mathbf{0} \quad \text{et} \quad \mathbf{x} = \mathbf{L}.$$

• **Pour le potentiel électrique**

Le potentiel au niveau des électrodes est imposé par le potentiel appliqué :

- en $\mathbf{x} = \mathbf{0}$, à la cathode, le potentiel est $\mathbf{V} = \mathbf{V}_C$
- en $\mathbf{x} = \mathbf{L}$ (**cm**), à l'anode, le potentiel est $\mathbf{V} = \mathbf{V}_A$

➤ **Les conditions initiales**

Pour les conditions initiales, nous considérons à $t = 0s$ deux cas pour les particules chargées :

- Si le potentiel \mathbf{V}_P , dans le milieu du plasma est choisi avec une valeur différente de zéro, nous considérerons donc la relation $\mathbf{n}_e + \mathbf{n}_n \approx \mathbf{n}_p = \mathbf{n}_0$ (cm^{-3}) comme condition initial pour les espèces chargées. Avec \mathbf{n}_0 la densité de charge initiale dans le plasma.
- par contre, si le potentiel \mathbf{V}_P est nul, nous accorderons à la somme $\mathbf{n}_e + \mathbf{n}_n = \mathbf{n}_p$ la valeur \mathbf{n}_0 (cm^{-3}) comme condition initial.

Par contre le potentiel \mathbf{V} est toujours nul à $t = 0s$.

iv- Les paramètres de sortie du modèle

La résolution du système d'équations (II-1) à (II-7) permet de déterminer les variations dans l'espace inter électrodes :

- Du potentiel électrique ;
- Du champ électrique ;
- Des densités d'espèces chargées (électrons, ions positifs et ions négatifs).

v- Conditions de stabilité

Afin d'éviter l'apparition d'instabilités lors de la simulation, nous avons défini un pas de temps Δt caractéristique du système, qui vérifie la relation suivante [41, 50] :

$$\Delta t < \frac{\varepsilon_0}{|q|(n_e \mu_e + n_n \mu_n + n_p \mu_p)} \quad (II - 26)$$

Cependant, dans le cas du modèle implicite traité dans cette étude, il est possible de prendre Δt plus large que la valeur imposée par la relation (II-26) pour réduire le temps de calcul.

II-5 Conclusion

Ce chapitre a été consacré à la modélisation de la décharge électrique. Le modèle proposé est de type fluide auto cohérent. Nous avons présenté le système d'équations qui régissent la décharge plasma dans un réacteur plan pour une tension continue. Nous avons présenté les hypothèses formulées pour traiter le problème et avons exposé les différentes techniques numériques utilisées pour sa résolution numérique.

CHAPITRE III

Les résultats de la simulation

III-1 Introduction

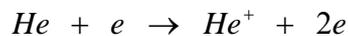
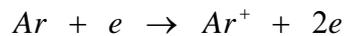
Pour une meilleure compréhension des processus plasmas et de la décharge luminescente, en particulier, nous avons élaboré un modèle fluide auto-cohérent, basé sur la résolution des deux premiers moments de l'équation de Boltzmann. Ces deux moments sont les équations de continuité et de transfert de la quantité de mouvement qui sont couplées à l'équation de Poisson, en utilisant l'approximation du champ local.

Le but de ce chapitre consiste à modéliser les distributions des particules chargées (électrons, ions positifs et ions négatifs), du champ et du potentiel électriques dans un gaz monoatomique tel que l'argon (Ar) et l'hélium (He) puis dans un gaz moléculaire tel que le méthane (CH₄) et l'hexafluorure de soufre (SF₆). Ces plasmas sont créés dans des décharges continues (DC) dans le cas d'une configuration géométrique unidimensionnel.

III-2 Les gaz atomiques

Les gaz monoatomiques traités lors de cette simulation sont l'argon et l'hélium. Comme les autres gaz rares ou nobles, éléments de la colonne 18 du tableau périodique, l'hélium et l'argon sont inertes chimiquement. Leur dernière couche électronique est remplie ce qui rend très difficile leurs réactions avec d'autres éléments. Ce qui permet leur utilisation comme gaz vecteur et dans les procédés de pulvérisations et de dépôt des couches minces.

Nous n'avons considéré, pour chaque gaz, que le processus d'interaction des neutres avec les électrons menant à leur ionisation, suivant les réactions chimiques présentées ci-dessous. Nous sommes donc en présence d'un modèle simple ne comportant que des électrons et des ions positifs Ar^+ (cas de l'argon) ou He^+ (cas de l'hélium) :



III-2-1 Les données de base

Pour décrire la distribution spatiale des particules chargées dans l'espace inter électrodes nous sommes amenés à préciser les valeurs de quelques paramètres d'entrée du programme tels que la densité initiale de charges, les coefficients de diffusion, les mobilités et les températures. Les données nécessaires pour l'exécution des calculs de la décharge pour les deux gaz monoatomiques sont regroupées dans le tableau III-1:

	$D_e.P$ $(\frac{Cm^{-2}Torr}{s})$	$\mu_e.P$ $(\frac{Cm^2Torr}{SV})$	$D_p.P$ $(\frac{Cm^{-2}Torr}{s})$	$\mu_p.P$ $(\frac{Cm^2Torr}{SV})$	ζ (eV)	T_{gaz} (K)	K_i $(\frac{Cm^{-3}}{s})$
Ar $m_i = 40 \text{ uma}$	120×10^4	30×10^4	40	14.44×10^2	6	500	1.7423×10^{-11}
He $m_i = 4 \text{ uma}$	1.15×10^7	7.02×10^5	6.058×10^2	6.9×10^3	24.58	300	10^{-9}

Tableau III-1 : Données de base pour les plasmas d'Hélium et d'Argon [41, 51]

III-2-2 Résultats de la simulation pour l'argon

Les résultats de la simulation de la décharge luminescente d'un plasma d'argon sont donnés pour une pression de 1 Torr, une densité initiale n_0 de $12.5 \times 10^{12} \text{ cm}^{-3}$ et une tension continue négative V_c de -305V. Les distributions unidimensionnelles du potentiel, du champ électrique et de la densité des particules chargées sont utilisées pour illustrer le comportement de la décharge dans le régime normal. Nous rappelons que les calculs sont développés en considérant nul le coefficient d'émission d'électrons secondaires à la cathode, dus au bombardement des ions Ar^+ .

La distribution spatiale des densités électronique et ionique, obtenues pour un temps d'incrément $dt = 10^{-9} \text{ s}$, est illustrée sur la figure III-1.

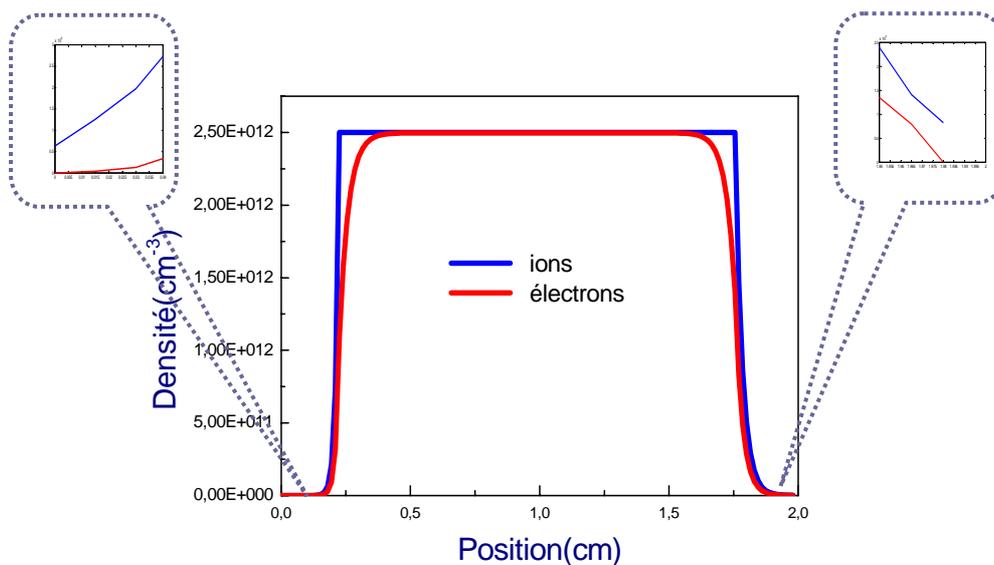


Figure III-1 : Distribution spatiale des particules chargées pour $dt = 10^{-9} \text{ s}$

Cette figure montre clairement trois régions distinctes qui représentent la gaine cathodique, la gaine anodique et la colonne positive. Les deux premières régions sont caractérisées par une densité électronique négligeable par rapport à la densité des ions positifs. La région de la colonne positive (région plasma) est caractérisée par des densités ioniques et électroniques constantes et quasi égales.

Cependant, l'augmentation du temps d'incrément (dt = 10⁻⁴ s) fait apparaître une charge d'espace importante (qui existe effectivement). Cette apparition, illustrée sur la figure III-2, est due au déplacement des électrons qui s'éloignent de la région cathodique avec une vitesse de dérive beaucoup plus importante que celle des ions.

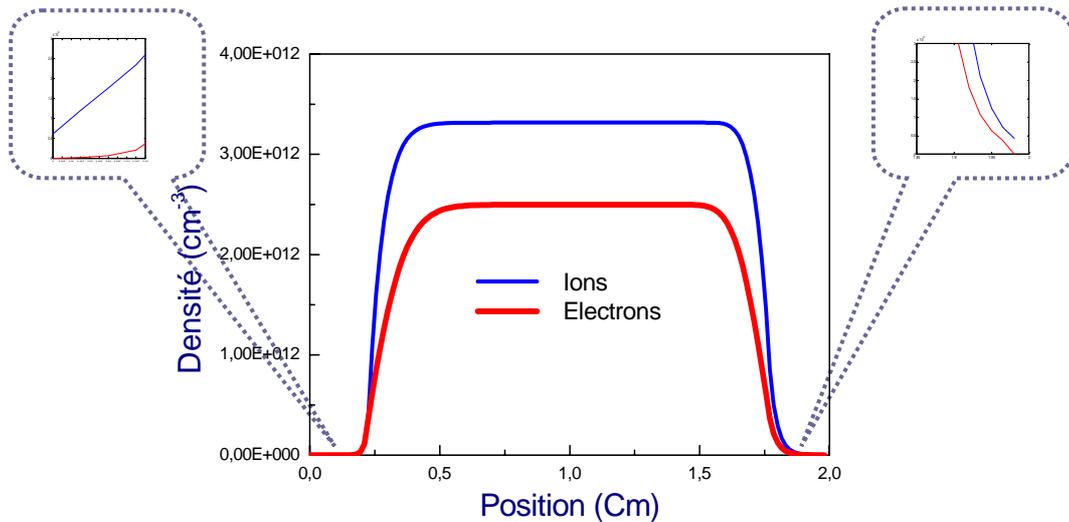


Figure III-2 : Distribution spatiale des particules chargées pour dt = 10⁻⁴ s

Les distributions spatiales du potentiel électrique et du champ électrique, obtenues par nos calculs, sont illustrées sur les figures III-3 et III - 4 respectivement.

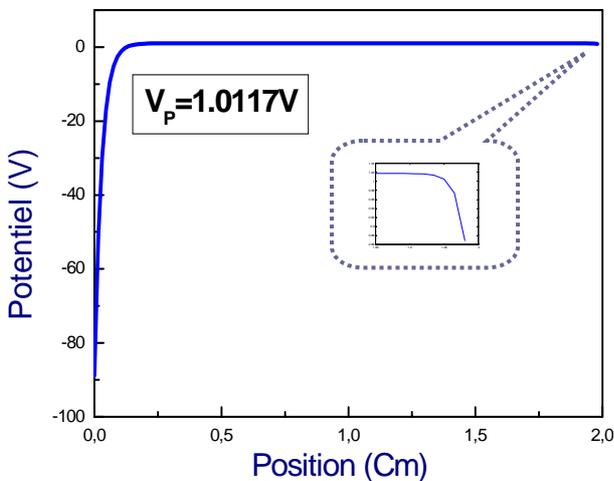


Figure III-3 : Distribution spatiale du potentiel électrique

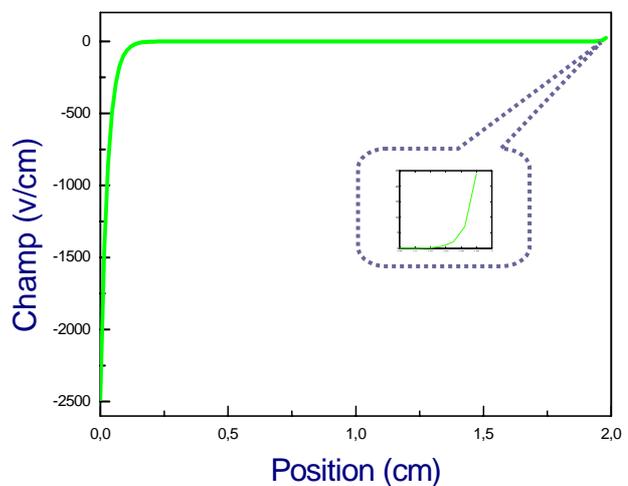


Figure III-4 : Distribution spatiale du champ électrique

La figure III-3 montre la variation de potentiel au sein de la décharge. Typiquement, son profil se compose d'une région de potentiel constant correspondant à la partie lumineuse du plasma ($V_p = 1.0177V$) ainsi que de deux régions de gaines où le potentiel chute vers les électrodes, et qui correspondent à la partie sombre du plasma.

Nous remarquons, sur la figure III-4, que le champ électrique augmente rapidement dans la gaine cathodique et au niveau de la gaine anodique, mais il est quasiment nul dans la colonne positive (régions où se forme le plasma) à cause du potentiel qui est pratiquement constant dans cette région.

i- Influence du potentiel plasma V_p

Les épaisseurs des gaines cathodique et anodique sont liées au potentiel plasma V_p par la relation (I-18) (cf chap 1).

➤ Lorsque V_p est non nul, le milieu plasma correspond à $n_e \approx n_p = n_0$ et pour une tension négative V_c de $-350 V$, deux gaines, une cathodique et l'autre anodique, apparaissent avec des épaisseurs différents. Ceci est observé sur les figures III-1 et III-2.

➤ Lorsque V_p est nul, le milieu plasma correspond à $n_p = n_e = n_0$ et les résultats des calculs, illustrés sur la figure III-5 en terme de distribution des espèces chargées dans l'espace inter électrodes pour un temps d'incrément de $10^{-9}s$, dévoilent l'absence de la gaine anodique.

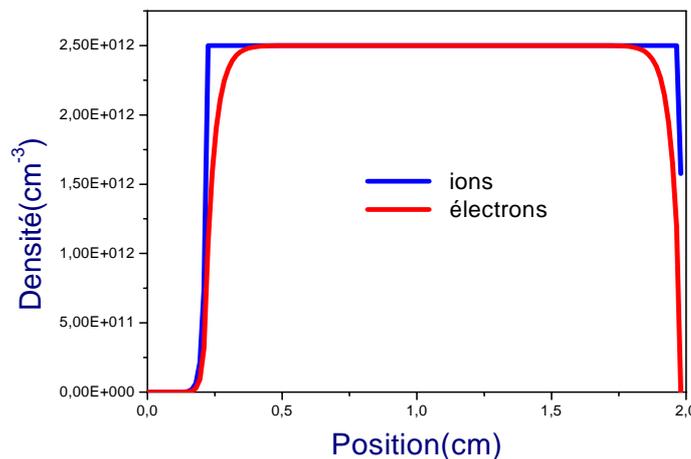


Figure III-5 : Distribution spatiale des particules chargées à $V_p = 0$ et $V_c = -305V$

Le même résultat est obtenu pour une simulation avec une tension positive V_a de $305V$ et différents temps d'incrément ($10^{-9}s$, $10^{-3}s$, et $10^{-2}s$). Cependant, comme le montre la figure III-6, dans ce cas c'est la gaine cathodique qui est nulle.

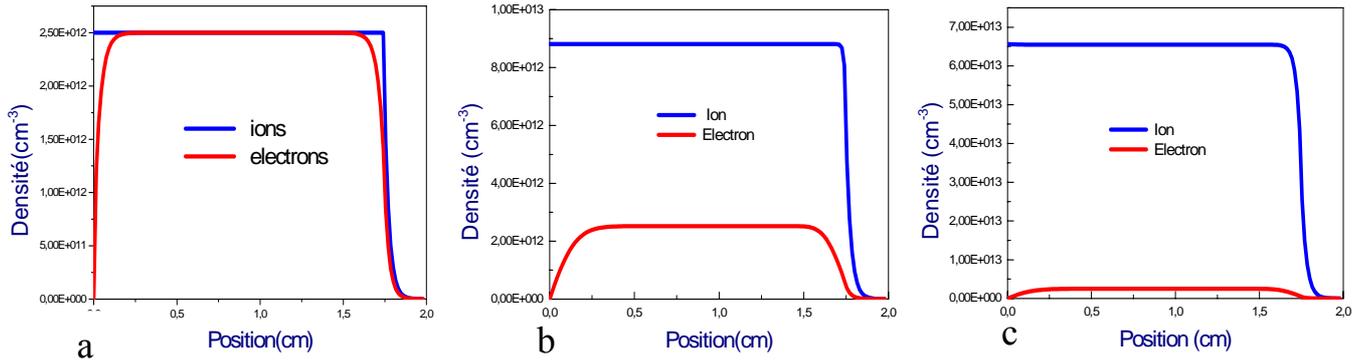


Figure III-6: Distribution spatiale des particules chargées pour différentes valeurs de dt ; (a) : 10^{-9} s, (b) : 10^{-3} s, (c) : 10^{-2} s avec $V_c = 0$ V et $V_a = 305$ V

ii- Influence de la pression du gaz

Sur les figures III-7-a et III-7-b nous avons représenté, respectivement, les densités ioniques et électroniques calculées pour différentes valeurs de la pression du gaz dans le réacteur, en utilisant un temps d'incrément dt de 10^{-9} s et une densité initiale n_0 de $6.82 \times 10^9 \text{ cm}^{-3}$. Ces figures permettent de voir clairement que l'effet primaire de la réduction de la pression est l'augmentation de l'épaisseur des gaines et le rétrécissement de la région plasma.

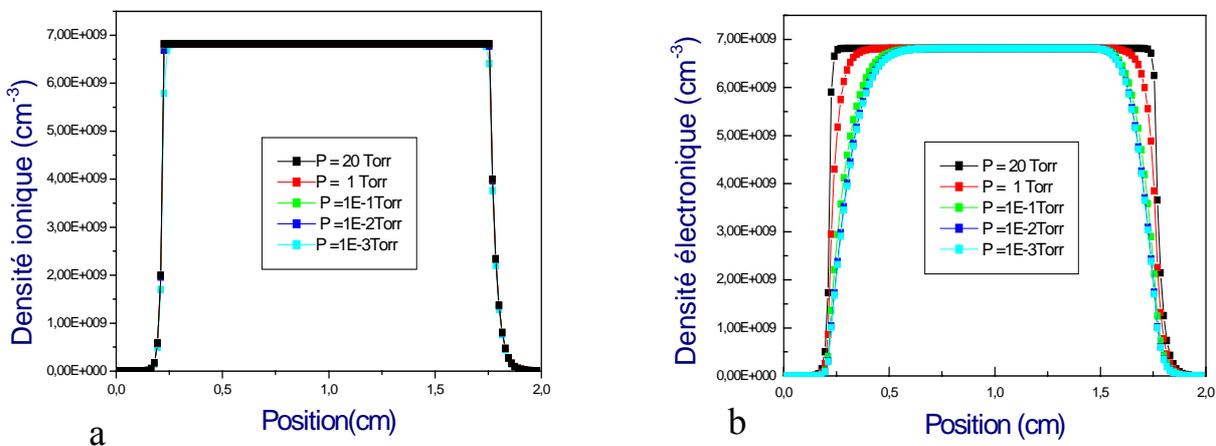


Figure III-7 : Distribution des espèces chargées pour différentes valeurs de la pression pour : (a) : $V_c = -305$ V : ions, (b) : électrons

Puisque les coefficients de transports des espèces chargées tel que les mobilités et les coefficients de diffusion sont inversement proportionnels à la pression, et pour des gammes de pressions assez basses, de l'ordre de 10^{-3} Torr, les libres parcours moyens des électrons et des ions sont bien plus grands. Les paires électron-ion, une fois créées, tombent librement vers les parois sans effectuer de collisions avec les neutres. Nous sommes en présence d'un régime dit de chute libre. Les résultats obtenus par nos calculs sont similaires à ceux obtenus par Evangelos

Gogolidesa et Herbert H.Sawin [52] pour un gaz d'argon soumis à une décharge radiofréquence (RF).

III-2-3 Résultats de la simulation pour l'Hélium

Nous présentons dans ce paragraphe les résultats de simulation d'une décharge électrique appliquée à un plasma d'hélium de densité initiale n_0 de $1.86 \times 10^{12} \text{ cm}^{-3}$, soumis à une pression de 200Torr. L'espace inter électrodes considéré dans ces calculs est de 1cm. La tension négative appliquée à la cathode est de - 250V.

i- Plasma sans perturbation externe ($V_c=V_a=0$)

Un gaz contient toujours initialement quelques électrons et ions qui sont issus, par exemple, de collisions de rayons cosmiques ou de radiations avec le milieu.

Ces charges libres peuvent être accélérées par la présence d'un champ électrique et de nouvelles particules chargées peuvent ensuite être créées lorsqu'elles entrent en collision avec des atomes et des molécules dans le gaz ou avec les surfaces des électrodes.

Ainsi, initialement, pour un champ et un potentiel électriques nuls, juste après ionisation, les densités électronique et ionique sont égales et ont pour valeur initiale n_0 . Cette situation est illustrée sur la figure III-8.

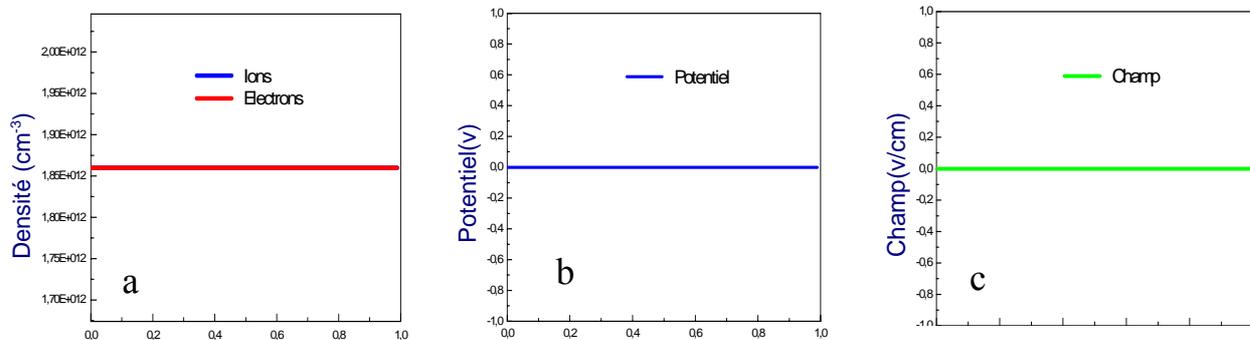


Figure III-8: Distribution spatiale : (a) : des particules chargées, (b) : du potentiel et (c) : du champ à $t = 0s$ et $V_c = V_a = 0V$

Après un intervalle de temps et dans un milieu limité, les charges sont perdues sur les surfaces des électrodes. Or, comme la masse électronique est nettement plus faible que celle des ions positifs He^+ , les électrons sont rapidement perdus au niveau des électrodes, par contre les ions restent inertes. Ce résultat est représenté sur la figure III-9 pour différents temps d'incrémentations ($10^{-9}s$, $10^{-8}s$, et $10^{-7}s$).

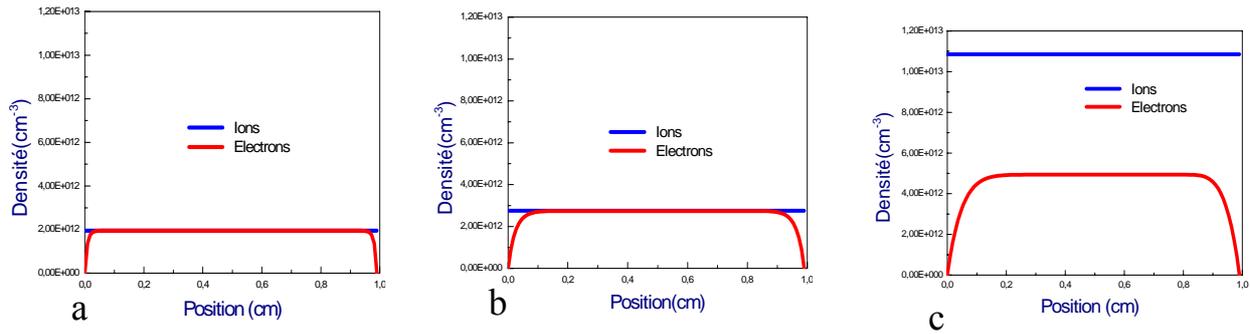


Figure III-9: Distribution spatiale des particules chargées pour différents valeurs de dt : 10^{-9} (a), 10^{-8} (b), 10^{-7} (c) pour $V_c = V_a = 0V$

Le plasma devant rester neutre, il se porte à un potentiel supérieur à celui des électrodes (cas de V_P non nul), afin de retenir et de confiner les électrons. Il se forme alors, à l'interface plasma-électrode, des gaines, dans lesquelles s'établit un champ électrique, dirigé vers les électrodes, qui confine les électrons dans le plasma et accélère les ions vers les surfaces. Les deux gaines sont parfaitement identiques (puisque $V_c = V_a = 0V$) et le profil de potentiel électrique et du champ électrique entre les deux électrodes est celui de la figure III-10.

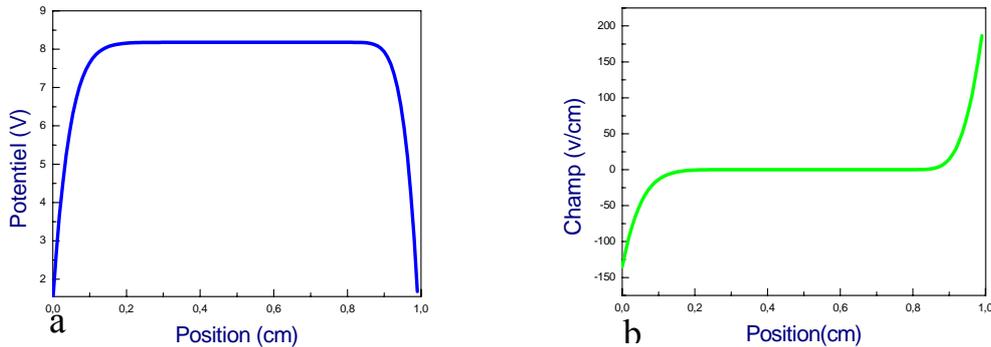


Figure III-10 : Profil du : (a) : potentiel et (b): champ pour $V_c = V_a = 0V$

ii- Plasma avec excitation électrique ($V_c = -250V$ et $V_a = 0V$)

Immédiatement après l'application d'une tension aux bornes des électrodes, la formation des gaines au voisinage de la cathode et de l'anode a lieu. Ces gaines sont dues au mouvement des espèces chargées (électrons, ions positifs), mais les électrons restent beaucoup plus rapides que les ions.

La densité ionique, calculée au niveau de la cathode est de l'ordre de $2.687 \times 10^{11} \text{ cm}^{-3}$ (la même valeur à l'anode). Elle augmente, ensuite, en s'éloignant des électrodes. Le même mouvement est précisé pour la densité électronique qui apparaît clairement depuis la valeur zéro, au niveau des électrodes, jusqu'à la valeur maximale ($n_0 = 1.86 \times 10^{12} \text{ cm}^{-3}$) à l'interface gaine-

plasma, puis les densités des deux particules chargées deviennent égales dans le milieu plasma. Ce mouvement apparaît très bien sur la figure III-11-a où nous avons représenté le profil des densités ionique et électronique.

La distribution spatiale du potentiel et du champ électrique est illustrée, respectivement, sur les figures III-11-b et III-11-c. Ces résultats sont analogues à ceux obtenus dans le cas d'un plasma d'Argon.

Nous faisons remarquer que pour le calcul de ces distributions nous avons utilisé deux méthodes différentes pour la résolution de l'équation de Poisson. Ainsi, nous avons appliqué la méthode de l'inversion de matrice dans le cas du plasma d'Argon est celle de SOR dans ce cas.

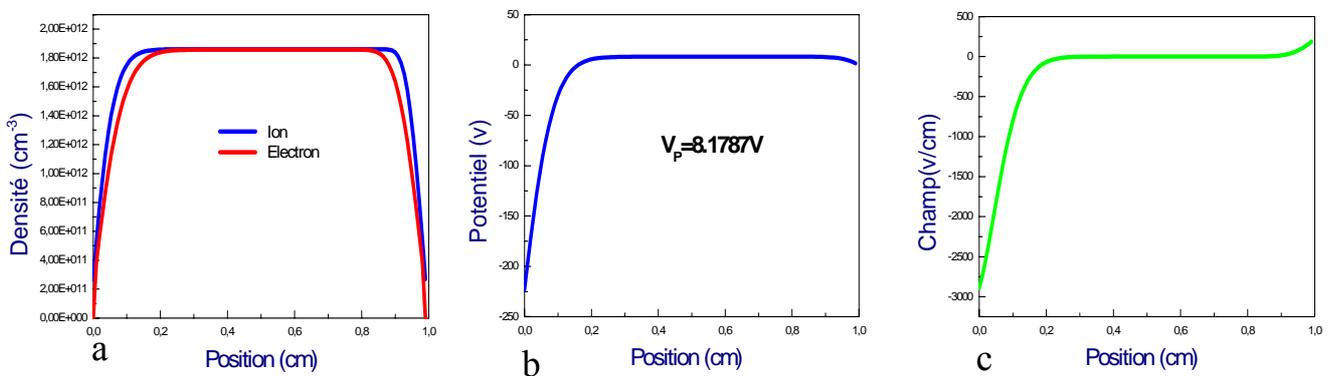


Figure III-11 : Distribution spatiale du: (a) : particules chargées, (b) : potentiel et (c) : champ électrique pour $dt = 10^{-6}$ s.

La comparaison de ce modèle avec un premier modèle de décharge continue d'un gaz neutre (He/H₂) élaboré au niveau de l'équipe par A. Berkane [53], en langage fortran utilisant la méthode des volumes finis, a donné de bons concordances entre les deux résultats, comme c'est illustrer sur la figure III-12.

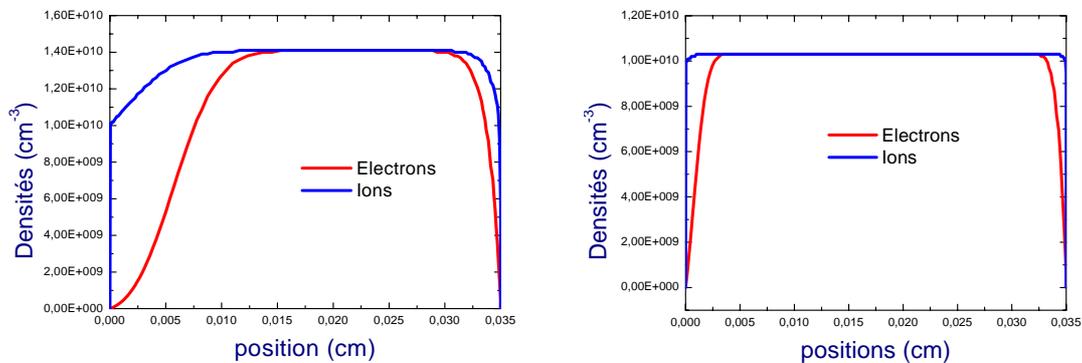


Figure III-12 : Profil des espèces chargées à : (a) : $dt=10^{-17}$ s, (b) : $dt=10^{-18}$ s, pour $L=0.035$ cm. Résultats de A. Berkane [53]

III-3 Les gaz moléculaires

La compréhension des décharges est un enjeu scientifique et industriel puisque les procédés de fabrication microélectronique (gravure, dépôt, traitement de surface) font largement appel aux gaz moléculaires électropositifs ou électronégatifs. Nous nous proposons dans ce paragraphe d'étudier le comportement du plasma pour les deux types de gaz moléculaires. Nous traiterons le cas d'un plasma de méthane (CH_4) pour illustrer les décharges dans un plasma électropositif puis celui de l'hexafluorure de soufre (SF_6) dans le cas du plasma électronégatif.

III-3-1 Résultats de la simulation de la décharge dans un plasma de méthane

Les plasmas contenant des hydrocarbures comme le méthane sont de plus en plus largement utilisés dans l'industrie. On les trouve, par exemple, lors de la fabrication de nanotubes de carbone [54, 55] ou lors de dépôt de couches minces de diamant et éventuellement de matériaux assimilés DLC «Diamon like carbon » [56, 57, 58] ...etc.

Le précurseur carboné utilisé pour ce genre de dépôt est le méthane (CH_4). Sa décomposition au sein du plasma peut conduire à la production d'espèces neutres et d'ions créés par fragmentation de la molécule. Nous pouvons rencontrer des molécules neutres comme le CH_4 , H_2 , C_2H_2 , C_2H_6 , C_2H_4 , C_3H_8 , des ions positifs CH_4^+ , CH_3^+ , CH_5^+ , C_2H_5^+ , des ions négatifs H^- , CH_2^- , des fragments moléculaires comme le CH_3 et le C_2H_5 ainsi que des électrons [54].

i- Les réactions chimiques dans un plasma de CH_4

Les réactions qui peuvent avoir lieu, entre les différentes espèces présentes dans un plasma de méthane, sont regroupées dans le tableau (III-2):

Interaction	Réaction chimique
CH_4 , excitation :	$e^- + \text{CH}_4 \rightarrow \text{CH}_4^* + e^-$ (1)
CH_4 , ionisation :	$e^- + \text{CH}_4 \rightarrow \text{CH}_4^+ + 2e^-$ (2)
CH_4 , ionisation :	$e^- + \text{CH}_4 \rightarrow \text{CH}_3^+ + \text{H} + 2e^-$ (3)
CH_4 , dissociation :	$e^- + \text{CH}_4 \rightarrow \text{CH}_3 + \text{H} + e^-$ (4)
CH_4 , dissociation :	$e^- + \text{CH}_4 \rightarrow \text{CH}_2 + 2\text{H} + e^-$ (5)
C_2H_4 , excitation :	$e^- + \text{C}_2\text{H}_4 \rightarrow \text{C}_2\text{H}_4^* + e^-$ (6)

C ₂ H ₄ , ionisation :	$e^- + C_2H_4 \rightarrow C_2H_4^+ + 2e^-$	(7)
C ₂ H ₄ , dissociation :	$e^- + C_2H_4 \rightarrow C_2H_2 + 2H + e^-$	(8)
C ₂ H ₂ , excitation :	$e^- + C_2H_2 \rightarrow C_2H_2^* + e^-$	(9)
C ₂ H ₂ , ionisation :	$e^- + C_2H_2 \rightarrow C_2H_2^+ + 2e^-$	(10)
C ₂ H ₆ , ionisation :	$e^- + C_2H_6 \rightarrow C_2H_6^+ + 2e^-$	(11)
C ₂ H ₆ , ionisation :	$e^- + C_2H_6 \rightarrow C_2H_5^+ + H + 2e^-$	(12)
C ₂ H ₆ , dissociation :	$e^- + C_2H_6 \rightarrow C_2H_5 + H + 2e^-$	(13)
C ₂ H ₆ , dissociation :	$e^- + C_2H_2 \rightarrow C_2H_4 + 2H + 2e^-$	(14)
C ₃ H ₈ , excitation :	$e^- + C_3H_8 \rightarrow C_3H_8^* + e^-$	(15)
C ₃ H ₈ , dissociation :	$e^- + C_3H_8 \rightarrow C_2H_4 + CH_4 + e^-$	(16)
Ion-neutre :	$CH_4^+ + CH_4 \rightarrow CH_5^+ + CH_3$	(17)
Ion-neutre :	$CH_4^+ + H_2 \rightarrow CH_5^+ + H$	(18)
Ion-neutre :	$CH_5^+ + C_2H_6 \rightarrow C_2H_5^+ + H_2^+ + CH_4$	(19)
Ion-neutre :	$CH_3^+ + CH_4 \rightarrow C_2H_5^+ + H_2$	(20)
Ion-neutre :	$CH_3^+ + CH_4 \rightarrow CH_4^+ + CH_3$	(21)
Ions négatifs :	$CH_2 + e^- \rightarrow CH_2^-$	(22)
	$H + e^- \rightarrow H^-$	(23)

Tableau III-2 : Réactions dans un plasma de méthane, [59 – 61].

Seuls les ions positifs (CH₄⁺, CH₃⁺, CH₅⁺, C₂H₅⁺) et négatifs (H⁻, CH₂⁻) sont pris en compte dans notre modèle de décharge. Nous utiliserons, dans notre simulation, les valeurs moyennes de leur contribution à travers une densité $\langle n_i \rangle$ caractérisée par les valeurs moyenne $\langle m \rangle$, $\langle D \rangle$ et $\langle \mu \rangle$ ainsi que celles des coefficients de réactions calculés par Evangelos Gogolides, Cyrille Buteau, Ahmed Rhallabi et Guy Turban [62].

ii- Les données de base

Les données de base nécessaires pour l'exécution du programme de la décharge pour le méthane sont présentées dans le tableau suivant :

Quantités		Valeurs
$\mu_e \times P$	(m ² Torr/Vs)	18.711
$E/P > 300$	(V m ⁻¹ Torr)	$\mu_e \times P = 763.28 \exp[0.1975(\ln(E/P))^2 - 0.0401(\ln(E/P))^3]$ $\mu_e \times P = 4.01 \times 10^8 (E/P)^{-1.6950} + 17.8565$
$E/P < 256$	(V m ⁻¹ Torr)	
$E/P > 256$	(V m ⁻¹ Torr)	
$\langle \mu_p \times P \rangle$		
$\langle \mu_n \times P \rangle$		0.228
$D_e \times P$	(m ² Torr s ⁻¹)	70
$\langle D_p \times P \rangle$	(m ² Torr s ⁻¹)	9.804×10^{-3}
$\langle D_n \times P \rangle$	(m ² Torr s ⁻¹)	9.804×10^{-3}
$m_i \langle n_p \rangle$	(Kg)	3.38×10^{-26}
$m_i \langle n_n \rangle$	(Kg)	1.24×10^{-26}
T_i	(eV)	0.043
$\langle K_a \rangle$	(m ³ s ⁻¹)	
$\xi < 4.701$	(eV)	$K_i = 2.51 \times 10^{-20} \times \exp[-25.803 / (\xi - 0.025)] \times$ $[3917.85 + 84337.9 \times (\xi - 3.825)]$
$\xi > 4.701$	(eV)	$K_i = 2.51 \times 10^{-20} \times \exp[-4.834 / (\xi - 3.825)] \times$ $[3917.85 + 84337.9 \times (\xi - 3.825)]$
$\langle K_{det} \rangle$	(m ³ s ⁻¹)	3.69×10^{-17}
$\langle K_{rec} \rangle$	(m ³ s ⁻¹)	0

Tableau III-3 : Données de base pour le plasma de méthane [62, 63]

iii- Evolution des différents paramètres dans l'espace inter électrodes

Le modèle du plasma prend en compte une décharge continue (DC) entre deux électrodes planes et parallèles séparées par une distance de 4cm. La décharge est produite dans une atmosphère de méthane (CH₄). La pression considérée est de 1Torr, la tension négative appliquée à la cathode est de -100V. Les calculs sont effectués pour une densité de charges initiale n_0 de $2.001 \times 10^{12} \text{cm}^{-3}$.

Le gaz utilisé dans notre modèle est un gaz moléculaire électropositif, il contient donc des électrons, des ions positifs ainsi que des ions négatifs mais avec une densité négligeable devant

celle des électrons. L'évolution spatiale des particules chargées est représentée sur les figures III-13-a et III-13-b, pour $n_n/n_e=10^{-2}$ et $n_n/n_e=10^{-1}$ respectivement.

Il est clair que $n_p = n_n + n_e$ dans la colonne positive avec, au niveau des électrodes, une densité nulle pour les particules chargées négativement et une densité de $2.0526 \times 10^{11} \text{ cm}^{-3}$ pour les ions positifs

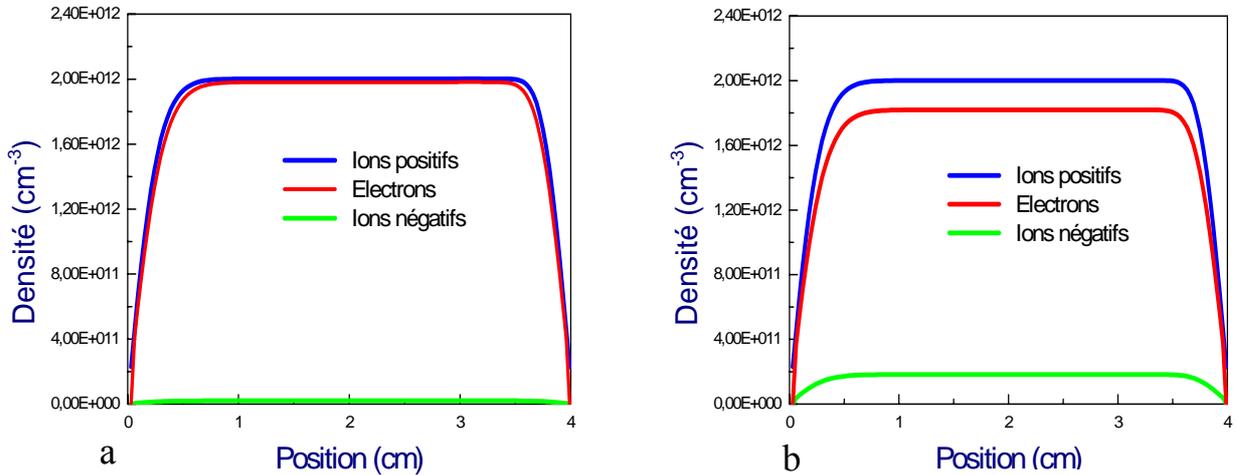


Figure III-13 : Distribution spatiale des particules chargées pour : (a) : $n_n/n_e=10^{-2}$ et (b) : $n_n/n_e=10^{-1}$

Nous remarquons que plus la densité d'ions négatifs n_n est négligeable devant la densité électronique n_e plus on se rapproche de l'égalité $n_p \approx n_e$ dans la colonne positive qui est similaire à celle trouvée dans le cas d'un gaz monoatomique (Ar, He) où $n_n/n_e=0$.

Les mêmes résultats sont obtenus pour les distributions spatiales du champ électrique et du potentiel qui sont illustrées sur la figure III-14 avec un potentiel plasma V_p de 9.7764 V.

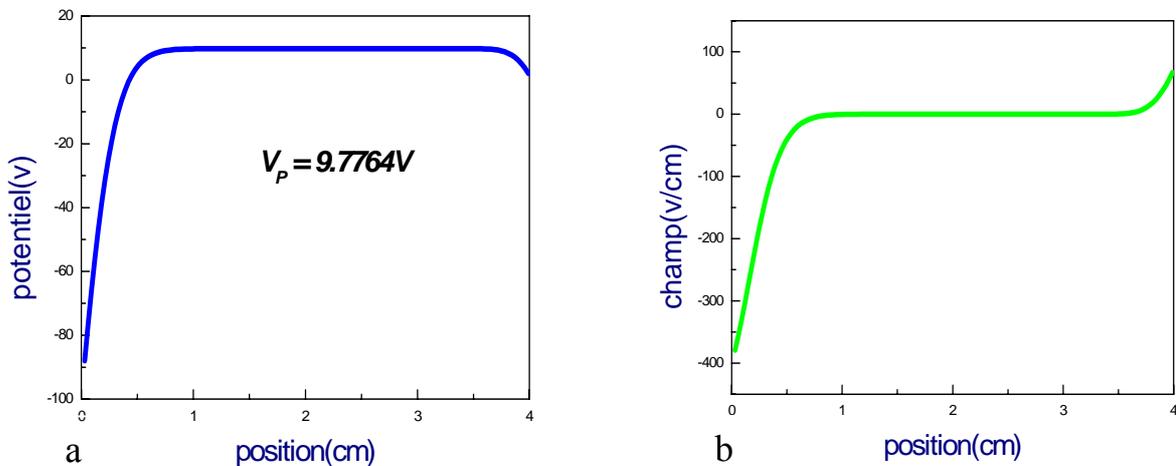


Figure III-14 : L'évolution du : (a): potentiel, (b) : champ pour $V_c = -100V$ et $V_a = 0V$

iv- influence de la densité de charges initiale n_0

Sur la figure III-15, nous avons représenté l'évolution spatiale des particules chargées (n_e , n_p , n_n), pour différentes valeurs de la densité de charge initiale n_0 , calculée avec un temps d'incrément dt de 10^{-9} s. les courbes obtenues montrent clairement que l'effet de l'augmentation de n_0 est l'élargissement de la zone plasma avec rétrécissement des épaisseurs des gaines.

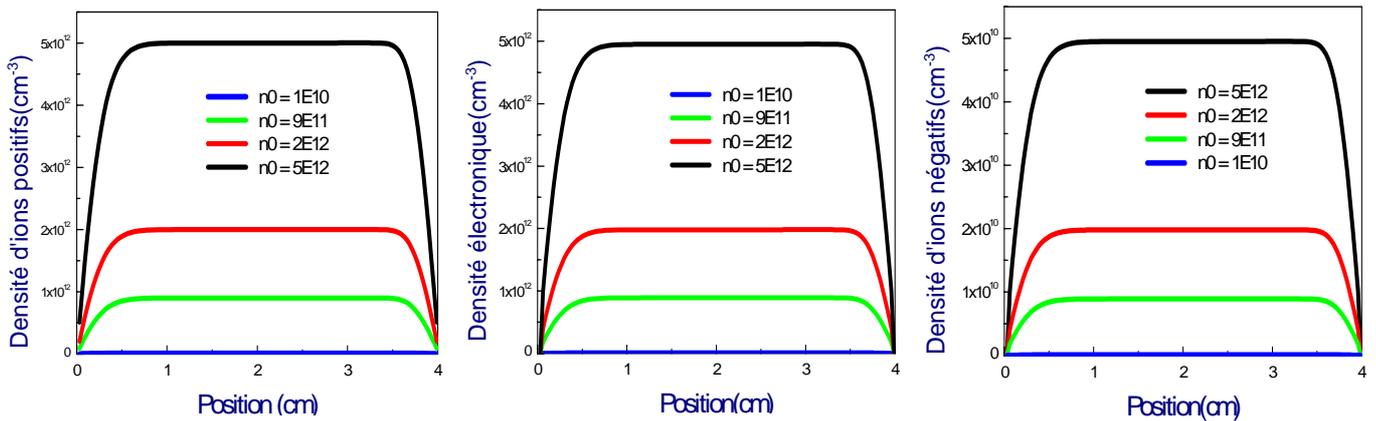


Figure III-15: Evolution spatiale des particules chargées pour différentes valeurs de n_0 .

Les valeurs les plus importantes de n_0 correspondent à un gaz fortement ionisé donc à un degré d'ionisation assez important. Dans ce cas, le libre parcours moyen des particules chargées est plus petit, les paires électron-ion, une fois créées, diffusent vers les parois et effectuent des collisions avec les neutres. Le système entre dans le régime dit de la diffusion ambipolaire.

Les profils du potentiel et du champ électrique dans l'espace inter électrode pour différentes valeurs de n_0 sont présentés sur la figure III-16.

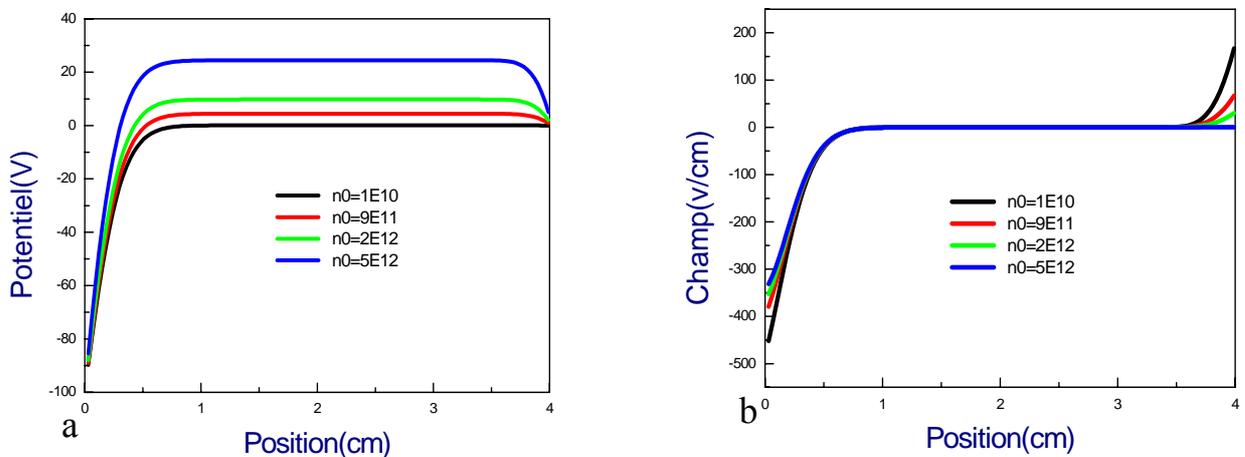


Figure III-16 : Profil du : (a) : potentiel, (b) : du champ pour différentes valeurs de n_0

L'augmentation de la densité initiale n_0 entraîne l'augmentation du potentiel plasma et influe sur les valeurs du champ électrique dans les régions de gaines.

v- influence du potentiel appliqué

La figure III-17 montre que le potentiel électrique dans l'espace inter électrodes est déterminé à la fois par le potentiel extérieur imposé aux électrodes ($V_c = 0V$ et $V_a = 100V$) et par les phénomènes de charges d'espace dans le plasma. Ainsi, il est égal à V_p dans le cœur du plasma et est variable au niveau des gaines.

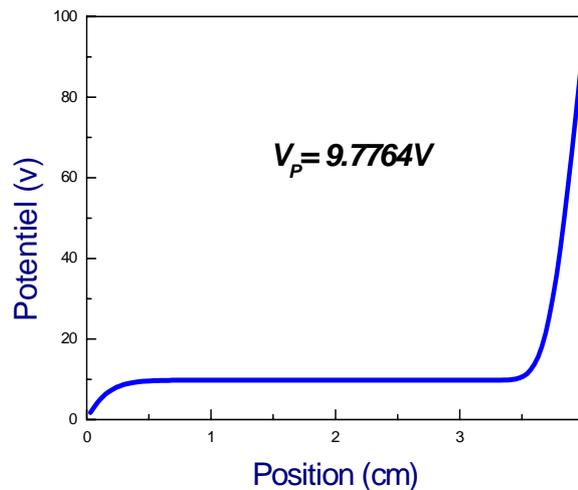


Figure III-17 : Profil du potentiel pour $V_c = 0V$ et $V_a = 100V$

III-3-2 Résultats de la simulation pour l'hexafluorure de soufre (SF_6)

La gravure par plasma d'hexafluorure de soufre s'est imposée comme un moyen incontournable pour la réalisation des composants intégrés en microélectronique. Depuis quelques années, la réalisation de certains micros systèmes électromécaniques (MEMS) ou opto-électromécaniques (MOEMS) utilise cette technologie pour la réalisation de motifs de taille plus importante (échelle sub-millimétrique) [64].

Le modèle de plasma fluide que nous avons développé prend en compte un ensemble d'espèces neutres, des radicaux, d'ions positifs et négatifs ainsi que des électrons.

i- Les réactions chimiques dans le plasma d'hexafluorure de soufre

Les réactions chimiques qui peuvent avoir lieu entre les différentes espèces présentes dans le plasma sont regroupées dans le tableau (III-4) :

Interaction	Réaction chimique
	$SF_6 + e^- \rightarrow SF_6 + e^-$
Transfert de quantité de mouvement	$SF_6 + e^- \rightarrow SF_5 + F + e^-$ (1) $SF_5 + e^- \rightarrow SF_4 + F + e^-$
Excitation vibrationnelle	$SF_6 + e^- \rightarrow SF_6^* + e^-$ (2)
Ionisation dissociative	$SF_6 + e^- \rightarrow SF_5^+ + F + 2e^-$ (3)
Ionisation dissociative	$SF_6 + e^- \rightarrow SF_4^+ + 2F + 2e^-$ (4)
Ionisation dissociative	$SF_6 + e^- \rightarrow SF_3^+ + 3F + 2e^-$ (5)
Attachement	$SF_6 + e^- \rightarrow SF_6^-$ (6)
Attachement dissociative	$SF_6 + e^- \rightarrow SF_5^- + F$ (7)
Attachement dissociative	$SF_6 + e^- \rightarrow SF_5 + F^-$ (8)
Attachement atomique	$F + e^- + e^- \rightarrow F^- + e^-$ (9) $F + e \rightarrow F^- + h\nu$ (10)
Attachement dissociatif moléculaire	$F_2 + e^- \rightarrow F^- + F$ (11) $SF + e^- \rightarrow F^- + S$ (12)
Association d'atomes et d'ions positifs	$F + F^+ + F \rightarrow F_2^+ + F$ (13) $F^+ + S + F \rightarrow SF^+ + F$ (14)

Tableau III-4 : Réactions dans un plasma d'hexafluorure de soufre [65, 66]

Les espèces chargées prises en considération, dans notre travail, sont les électrons, les ions positifs (SF_3^+) et les ions négatifs (SF_5^-) suivant les réactions chimiques (5 et 7) respectivement.

ii- Les données de base

Les données de base nécessaires pour l'exécution du programme de la décharge pour l'hexafluorure de soufre sont présentées dans le tableau suivant :

Quantités		Valeurs
$\mu_e \times P$	(cm ² Torr/Vs)	14×10^4
$D_e \times P$	(cm ² Torr/s)	100×10^4
m_i (SF ₃ ⁺)	(uma)	89.05
$\mu_p \times P$	(cm ² Torr/Vs)	5×10^2
$D_p \times P$	(cm ² Torr/s)	13
m_i (SF ₅ ⁻)	(uma)	127.05
$\mu_n \times P$	(cm ² Torr/Vs)	5×10^2
$D_n \times P$	(cm ² Torr/s)	13
T_{gaz}	(K)	500
K_i	(cm ³ s ⁻¹)	$K_i = 2.1 \times 10^{-9} (\xi - 5) \exp[-6.2/(\xi - 5)]$
$\xi > 5$	(eV)	
$\xi < 5$	(eV)	$K_i = 0$
K_r (SF ₃ ⁺ , SF ₅ ⁻)	(cm ³ /s)	4×10^{-8}

Tableau III-5 : Données de base pour un plasma d'hexafluorure de soufre [62, 63]

iii- Evolution des différents paramètres dans l'espace inter électrodes

Les résultats de la simulation pour le plasma d'hexafluorure de soufre, illustrés sur la figure III-18, sont obtenus pour une pression de 1Torr et une distance inter électrodes de 2cm. La tension appliquée à la cathode est négative, elle est de -329V . La densité de charge initiale n_0 considérée est de $3.49 \times 10^{12} \text{ cm}^{-3}$.

L'hexafluorure de soufre est un gaz moléculaire électronégatif [65] composé d'atomes halogènes (le fluor F), qui est caractérisé par une forte affinité électronique, il peut donc facilement capter un électron, selon la réaction $X + e^- \rightarrow X^-$. En conséquence, la densité électronique dans ce gaz est négligeable devant la densité d'ions négatifs.

L'examen de l'évolution des densités d'espèces chargées (n_e , n_p , n_n) à un temps d'incrément 10^{-8} s et pour une électronégativité du plasma α de 38.9960, nous a montré

que $n_p \approx n_e + n_n$ dans la colonne positive (c'est la quasi neutralité), où la densité des ions positifs est presque égale a celle des ions négatifs avec une densité électronique négligeable.

Les ions négatifs sont confinés dans la partie centrale de la décharge et la densité d'ions positifs dans les gaines est supérieure à celle des électrons dans le plasma comme c'est illustré sur la figure III-18-a.

Si on compare ces résultats avec ceux obtenus dans le cas d'un gaz électropositif (le méthane et même l'argon ou l'hélium), nous remarquons que, dans ces gaz, la densité électronique est très grande devant celle des ions négatifs et presque égale à celle des ions positifs dans le cœur du plasma. Cependant nous pouvons remarquer que l'évolution du potentiel et du champ électrique, illustré sur les figures III-18-b et III-18-c respectivement, est similaire aux résultats trouvés pour un gaz électropositif, dans ce cas d'électronégativité du gaz.

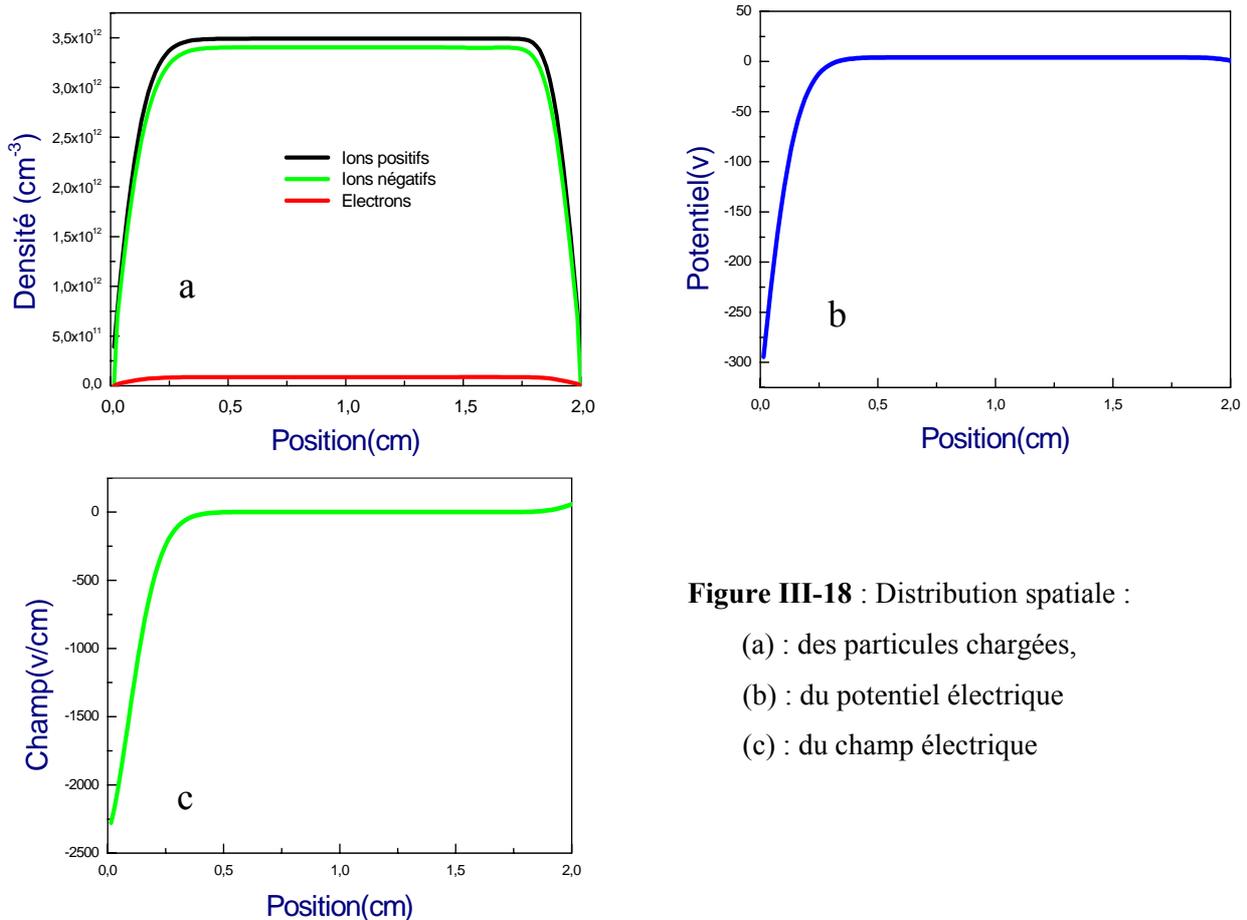


Figure III-18 : Distribution spatiale :

- (a) : des particules chargées,
- (b) : du potentiel électrique
- (c) : du champ électrique

iv- influence de l'électronégativité du plasma (α)

Les distributions des densités d'espèces chargées, du champ électrique et du potentiel sont données sur les figures III-19-a, III-19-b et III-19-c, respectivement, pour différentes valeurs de α qui représente le rapport (n_n/n_e) et pour un temps d'incrément dt de 10^{-11} s. Nous pouvons constater que l'augmentation de l'électronégativité du plasma (α) par l'accroissement de la densité d'ions négatifs, formés par attachement électronique ou par attachement dissociatif, produit un décalage du potentiel plasma vers les valeurs négatives. Un nouvel ion négatif créé reste dans le cœur du plasma et ne peut être consommé que par collision. Ceci rend le potentiel plasma V_p plus négatif dans la colonne positive.

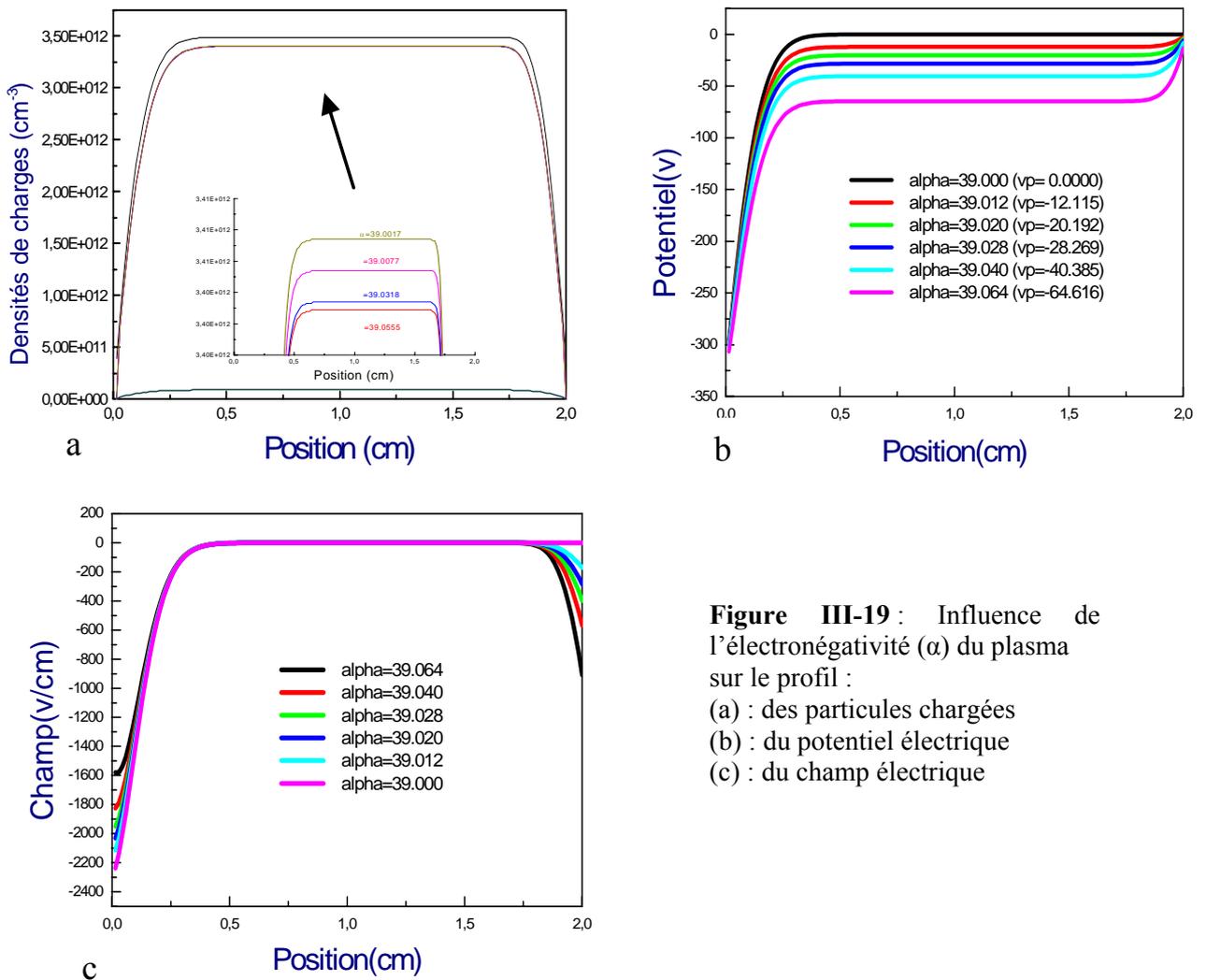


Figure III-19 : Influence de l'électronégativité (α) du plasma sur le profil :
 (a) : des particules chargées
 (b) : du potentiel électrique
 (c) : du champ électrique

v - influence du potentiel appliqué

Les profils de potentiel présentés sur la figure III-20 ont été calculés dans l'espace inter électrodes pour différentes valeurs de α , avec une tension anodique de 329V pour une tension appliquée à la cathode V_c égale à -329V puis 0V.

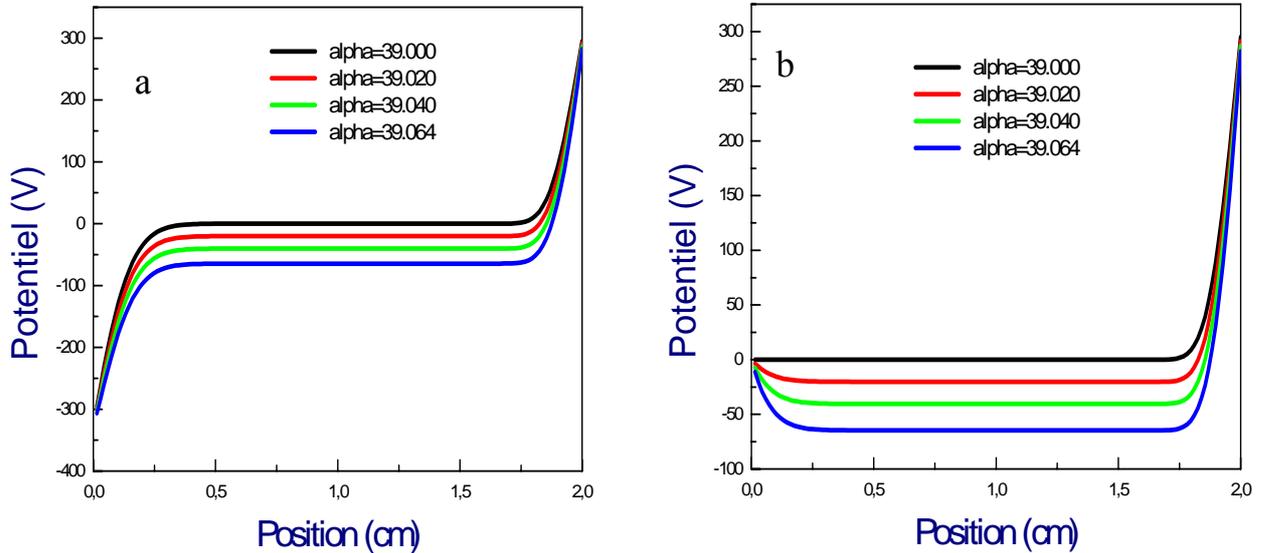


Figure III-20 : Distribution de potentiel à : (a) : $V_c = -329V$ et $V_a = 329V$, (b) : $V_c = 0 V$ et $V_a = 329V$, pour différentes valeurs de α

Ces profils montrent que l'évolution du potentiel électrique est déterminée par la tension extérieure imposé aux électrodes ($V_c = -329$, $V_a = 329$) et ($V_c = 0$, $V_a = 329$).

III-4 Conclusion

Nous avons présenté dans ce chapitre les résultats de notre simulation en considérant un modèle fluide auto-cohérent, pour la résolution des deux premiers moments de l'équation de Boltzmann, qui sont couplés à l'équation de Poisson.

Nous avons traité le cas de gaz atomiques (Ar, He) et moléculaires (CH_4 , SF_6). Les résultats de notre simulation sont illustrés en termes de variation dans l'espace inter électrodes du potentiel, du champ électrique et des densités de charges.

Nous avons exploité cette simulation pour étudier l'effet, entre autres, de la pression de gaz, de la densité de charges et du potentiel plasma sur la distribution des différentes espèces chargées présentes dans le plasma.



CONCLUSION
GENERALE

Conclusion générale et perspective

Le travail que nous avons présenté dans ce mémoire consiste à élaborer un modèle numérique qui permet la simulation de la distribution des différentes espèces chargées, du potentiel et du champ électrique dans l'espace inter électrodes d'un réacteur plasma, pour une décharge continue dans le cas d'une configuration géométrique unidimensionnelle.

L'étude est effectuée pour un plasma froid issu de gaz moléculaires électropositif ou électronégatif. Elle s'inscrit dans le cadre des efforts entrepris actuellement par la communauté scientifique pour le développement et la modélisation des réacteurs plasmas en génie des procédés. Pour cela, et après application de certaines hypothèses simplificatrices, nous avons développé un modèle de simulation de type fluide auto-cohérent, en langage MATLAB, pour décrire la distribution des particules chargées, du champ électrique et du potentiel dans l'espace inter électrodes. Le modèle élaboré est basé sur la résolution des deux premiers moments de l'équation de Boltzmann. Ces deux moments, qui sont les équations de continuité et de transfert de la quantité de mouvement, sont couplés à l'équation de Poisson pour constituer un système d'équations non linéaires qui ne peut être résolu analytiquement. Nous avons donc procédé à sa résolution en utilisant la méthode de différences finies.

Nous avons appliqué le modèle à la simulation du plasma dans le cas de gaz atomiques (Hélium, Argon) pour sa validation puis nous avons traité le cas de gaz moléculaires. Les résultats sont donnés aussi bien pour un gaz électropositif (CH_4) que pour un gaz électronégatif (SF_6) en termes d'évolution spatiale des densités d'ions positifs, d'ions négatifs, d'électrons, de variation du champ électrique et du potentiel entre les deux électrodes.

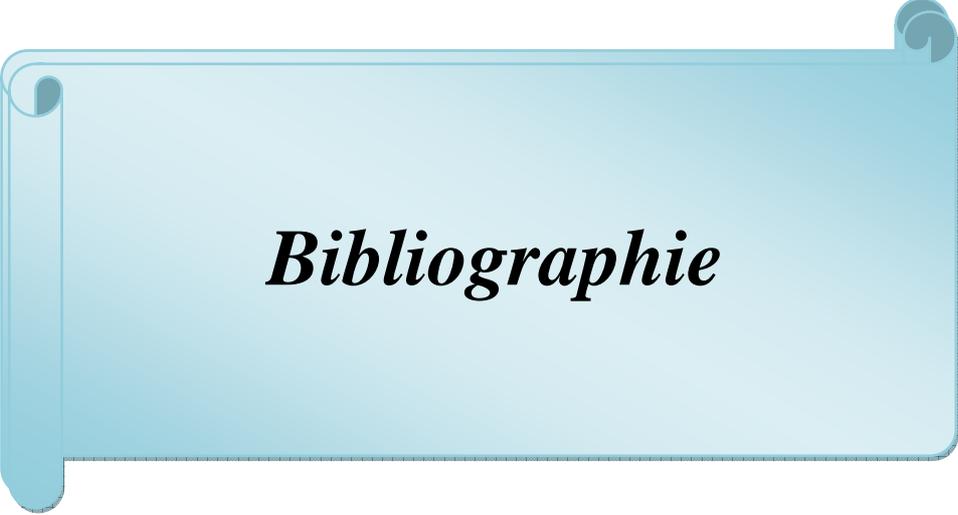
L'effet de certains paramètres tels la pression, l'électronégativité, le potentiel plasma et la densité initial n_0 sur la distribution des espèces chargées et sur l'évolution des gaines électrostatiques a été aussi simulé. Par exemple, dans le cas d'un plasma d'Argon, notre simulation a mis en évidence l'influence du potentiel plasma sur les épaisseurs des gaines cathodiques et anodiques. De même, cette modélisation a montré que l'effet primaire de la réduction de la pression, est l'augmentation de l'épaisseur des gaines et le rétrécissement de la région plasma. Les résultats de notre simulation sont en bon accord avec les modèles rencontrés dans la littérature.

Les résultats de la simulation de la décharge dans un plasma électropositif de méthane (CH_4) ont montré que l'augmentation de la densité initiale n_0 entraîne l'augmentation du potentiel plasma et influe sur les valeurs du champ électrique dans les régions de gaines.

Par ailleurs, La modélisation de la décharge dans le cas de l'hexafluorure de soufre (SF_6) a dévoilé que l'augmentation de l'électronégativité du plasma (α), par l'augmentation de la pression, produit un décalage du potentiel plasma vers les valeurs négatives.

Ce résultat ouvre, maintenant, des perspectives considérables telles que :

- Montrer les profils de concentration des toutes les espèces présentes dans le plasma (espèces chargés et neutres).
- Traiter numériquement ce modèle, en deux dimensions dans un réacteur cylindrique à courant continu.
- Déterminer les variations spatiales des taux d'ionisation, d'attachement et de recombinaison des ions positifs avec les ions négatifs.
- Simuler numériquement ce modèle, en RF et étudier l'évolution du champ et potentiel électriques, des densités électroniques et des taux d'ionisation à différents instants d'un cycle RF.



Bibliographie



- [1]: Robert J Goldston, Paul H Rutherford
« Introduction to Plasma Physics », Copyright © 1995 IOP Publishing Ltd, pp (1, 3-7).
- [2] : Stéphane Béchu
« Mesures de sondes électrostatiques en plasma basse pression », publications de l'université de Saint-Étienne, pp (159-223), 2004.
- [3] : Jean Loup Delcroix, Abraham Bers
« Physique des plasma », InterEdition, ET CNRS Edition, pp (5,223-226), 1994.
- [4]: Richard Fitzpatrick
«Introduction to Plasma Physics», PHY380L, spring 1998, the University of Texas, pp (6-11).
- [5]: Francis F.Chen, Jane P. Chang
« Principles of Plasma Processing », university of California, Los Angeles, pp (1, 4, 16-18), 2002.
- [6]: Claire Tendero
« Torche plasma micro-onde à la pression atmosphérique : application au traitement de surfaces métalliques », Thèse de doctorat de l'université de Limoges (2005).
- [7] : Pierre Fauchais
«Gaz ionisés et plasmas», Technique de l'ingénieur, AF 3 560, pp (3, 6-15).
- [8] : Saida Rebiai
« Étude des propriétés physico-chimiques et électriques de films minces organosilicés déposés par plasmas froids », Thèse de doctorat de l'université de Mentouri de Constantine (2003).
- [9] : Christian Sarra-Bournet
« Design et réalisation d'un réacteur plasma à pression atmosphérique pour des traitements de surfaces dans le domaine des biomatériaux », Thèse pour l'obtention du grade de maître ès sciences de l'université de Laval (2007).
- [10] : Anne-Marie Pointu, Jérôme Perrin, Jacques Jolly
« Plasmas froids de décharge », Technique de l'ingénieur, D 2830, pp (4, 6-8).
- [11]: Vikas Midha, Badri Ramamurthi, Demetre J. Economou
«Time evolution of an ion-ion plasma after the application of a direct current bias voltage», Journal of Applied Physics, vol 91, N^o 10, (6282- 6287), University of Houston 2002.
- [12]: Shahid Rauf, Mark J. Kushner
«The effect of radio frequency plasma processing reactor circuitry on plasma characteristics», Journal of applied physics vol 83, N^o 10, (5087-5094), 15 May 1998.
- [13]: M Yan, W J Goedheer
« A PIC–MC simulation of the effect of frequency on the characteristics of VHF SiH₄/H₂ discharges », Plasma Sources Sci. Technol. 8, pp (349–354), 1999.

- [14]: S.Sahli, S.Rebiai, P.Raynaud, Y.Segui, A.Zenasni, S.Mouissat
«Plasmas and polymers», 7, 327, 2002.
- [15]: Y. Arnal, S. Béchu, A. Lacoste, O. Maulat, J. Pelletier
« Plasma micro-onde basse pression excités à la résonance cyclotronique électronique », publications de l'université de Saint-Étienne, pp (324-352), 2004.
- [16]: Paul M. Bellan
«Fundamentals of Plasma Physics», editor California, pp (17-19), 2004.
- [17]: R. E. Robson, R. D. White, Z. Lj. Petrovic
« Colloquium: Physically based fluid modeling of collisionally dominated low-temperature plasmas », Reviews of Modern Physics Vol 77, N^o4, pp (1303-1320), October 2005.
- [18]: Casper V Budtz-Jørgensen
«Studies of Electrical Plasma Discharges», thèse de doctorat de l'Université Aarhus, Danemark 2001.
- [19]: François Cayla
« Modélisation de l'interaction entre un arc électrique et une cathode », Thèse de doctorat de l'Université Toulouse III – Paul Sabatier 2008.
- [20]: K Bera, B Farouk, Y H Lee
«Effects of reactor pressure on two-dimensional radio-frequency methane plasma: a numerical study», Plasma Sources Sci. Technol. 8, pp (412 – 420), 1999.
- [21]: J.P.Boeuf, L.C.Pitchford
«Two-dimensional model of a capacitively coupled rf discharge and comparisons with experiments in the Gaseous Electronics Conference reference reactor», Physical Review E, Vol 51, N^o2, pp (1376-1390), 1995.
- [22]: Xiaohui Yuan, Laxminarayan L. Raja
«Computational Study of Capacitively Coupled High-Pressure Glow Discharges in Helium», IEEE Transactions on Plasma Science, Vol 31, N^o4, pp (495-503), 2003.
- [23]: T. E. Sheridan, J. Goree
«Collisional plasma sheath model», Phys. Fluids Vol 3, N^o 10, pp (2796-2804), 1991.
- [24]: Martin Kogelschatz
« Etude des interactions plasma–surface pendant la gravure du silicium dans des plasmas HBr/ Cl₂/O₂ », thèse de doctorat de l'Université Joseph Fourier – Grenoble 1 2004.
- [25]: Agnès Granier, M-C Bordage, J-B-A Mitchell, C Rebrion-Rowe, Collectif
«Plasmas Froids : cinétiques, transports et transferts», PU Saint-Etienne, pp (129-133), 2006.
- [26]: Akihiro Kono
«Formation of an oscillatory potential structure at the plasma boundary in electronegative plasmas», J. Phys. D: Appl. Phys. 32, pp (1357–1363), 1999.

- [27]: Akihiro Kono
«Negative ions in processing plasmas and their effect on the plasma structure», *Applied Surface Science* 192, pp (115–134), Japan 2002.
- [28]: Stanley Humphries Jr
«Modeling ion extraction from a free-plasma surface with a flexible conformal mesh», *Journal of computational physics* 204, pp (587–597), 2005.
- [29]: Jean-Pierre Bœuf
«Absorption et dissipation d'énergie dans un plasma hors équilibre», publications de l'université de Saint-Étienne, pp (17-48), 2004.
- [30]: T. J. Chung:
«Computational Fluid Dynamics», Cambridge University Press, pp (936-939), 2002.
- [31]: Annemie Bogaerts, Renaat Gijbels
«Numerical modelling of gas discharge plasmas for various applications», *Science Direct* Vol 69, pp (37–52), 2003.
- [32]: Seung Min Lee, Yong Jun Hong, Young Sik Seo, Felipe Iza, Gyoo Cheon Kim, Jae Koo Lee
«Simulations of biomedical atmospheric-pressure discharges», *Computer physics communications*, pp (1-6) 2009.
- [33]: J.P. Boeuf, Th. Callegari, C. Punset, R. Ganter
«Modeling as a Tool for Plasma Display Cell Optimization», *Workshop Digest of the 18th International Display Research Conference, Asia Display'98*, pp (209-220), 1998.
- [34]: Guangye Chen, Laxminarayan L. Raja
«Fluid modeling of electron heating in low-pressure, high-frequency capacitively coupled plasma discharges», *Journal of applied physics* Vol 96, N^o 11, pp (6073-6081), The University of Texas 2004.
- [35]: Annemie Bogaerts, Kathleen De Bleecker, Violeta Georgieva, Dieter Herrebout, Ivan Kolev, Myriam Madani, Erik Neyts
«Numerical modeling for a better understanding of gas discharge plasmas», *An International Journal* Vol 9, N^o 3, pp (321-344), 2005.
- [36]: Annemie Bogaerts, Renaat Gijbels
«Hybrid Monte Carlo - fluid modeling network for an argon / hydrogen direct current glow discharge», *Spectrochimica Acta Part B* 57, pp (1071–1099), 2002.
- [37]: T. R. Govindan, M. Meyyappan
«One-Dimensional Modeling Studies of the Gaseous Electronics Conference RF Reference Cell», *Journal of Research of the National Institute of Standards and Technology*, Vol 100, N^o 4, pp (463-472), 1995.
- [38]: C.-T. Hung, M.-H. Hu, J.S.Wu, F.-N. Hwang
«A new paradigm for solving plasma fluid modeling equations», *Computer Physics Communications* 177, pp (138–139), 2007.

- [39] : Nikofaos V. Mantraris, Ancireas Boudouvis, Evangelos Gogolides
«Radio-frequency plasmas in CF₄: Self-consistent modeling of the plasma physics and chemistry», Journal of Applied Physics. Vol 77, N^o 12, pp (6169-6180), 1995.
- [40]: M.H. Baghli, B. Benyoucef, K. Hassouni
« Modélisation numérique et étude expérimentale d'un procédé plasma d'élimination de particules de suies carbonées », Revue des Energies Renouvelables ICRES-07, pp (135 – 144), 2007.
- [41]: Gerjan Hagelaar
« Modeling of microdischarges for display technology », Eindhoven: Technische Universiteit Eindhoven, 2000.
- [42]: Yi-hung Lin, Raymond A. Adomaitis
«Simulation and Model Reduction Methods for an RF Plasma Glow Discharge», Journal of computational physics 171, pp (731–752), 2001.
- [43]: Aurel Salabas
« Fluid model for charged particle transport in capacitively coupled radio-frequency discharges », thèse de doctorat de l'université Técnica De Lisboa (2003).
- [44] : Eric Goncalvès
«Résolution numérique, discrétisation des EDP et EDO», Institut national polytechnique de Grenoble, Septembre 2005.
- [45]: E. P. Hammond, K. Mahesh, P. Moin
«A Numerical Method to Simulate Radio-Frequency Plasma Discharges », Journal of Computational Physics 176, pp (402–429), 2002.
- [46]: E.Havlickova
«Fluid Model of Plasma and Computational Methods for Solution», WDS'06 Proceedings of contributed papers, Part III, pp (180–186), 2006.
- [47]: J.P. Bœuf
«Numerical model of rf glow discharges», physical Review A, Vol 36, N^o 6, pp (2782-2792), 1987.
- [48]: J.P. Bœuf
«A two-dimensional model of DC glow discharges», J. Appl. Phys, Vol 63, N^o5, pp (1342-1349), 1988.
- [49]: T. E. Nitschke, D. B. Graves
«A comparison of particle in cell and fluid model simulations of low-pressure radio frequency discharges», Journal of Applied Physic, Vol 76, N^o 10, pp (5646-5660), 1994.
- [50]: Ph. Belenger, J.P. Bœuf
«Transition between different regimes of rf glow discharges», Physical Review A, Vol 41, N^o 8, pp (4447-4459), 1990.

- [51]: Evangelos Gogolides, Herbert H. Sawin
«Continuum modeling of radio-frequency glow discharges. I. Theory and results for electropositive and electronegative gases», *Journal of applied physics*, Vol 72, N^o 9, pp (3971-3987), 1992.
- [52]: Evangelos Gogolides, Herbert H. Sawin
«Continuum modeling of radio-frequency glow discharges. II. Parametric studies and sensitivity analysis», *Journal of applied physics*, Vol 72, N^o9, pp (3988-4002), 1992.
- [53]: Amel Berkane
«Contribution a la compréhension de processus se produisant lors de l'élaboration de films dans un plasma froid», thèse de magister de l'Université de Constantine, Algérie (2006).
- [54] : Akinori Oda, Yoshiyuki Suda, Atsushi Okita
«Numerical analysis of pressure dependence on carbon nanotube growth in CH₄/H₂ plasmas», *Thin Solid Films* 516, pp (6570–6574), 2008.
- [55]: David Hash, Deepak Bose, T. R. Govindan, M. Meyyappan
«Simulation of the dc plasma in carbon nanotube growth», *Journal of applied physics*, Vol 93, N^o 10, pp (6284-6290), 2003.
- [56]: Nikolaos V. Mantzaris, Evangelos Gogolides, Andreas G. Boudouvis, Ahmed Rhallabi, Guy Turban
«Surface and plasma simulation of deposition processes: CH₄ plasmas for the growth of diamond like carbon», *Journal of applied physics*, Vol 79, N^o 7, pp (3718-3729), 1996.
- [57]: Steven L. Girshick, John M. Larson
«Thermal plasma synthesis of diamond», *Pure & Appl. Chem*, Vol 70, N^o 2, pp (485-492), 1998.
- [58]: R. Saito, J. Sano, N. Ishigaki, T. Kimura and S. Yugo
«Theoretical analysis of the diffusive ion in biased plasma enhanced diamond chemical vapor deposition», *Journal of applied physics* Vol 90, N^o 5, pp (2559-2564), 2001.
- [59]: Herrebouf, A. Bogaerts, M. Yan, R. Gijbel
«One-dimensional fluid model for an RF methane plasma of interest in deposition of diamond-like carbon layers», *Journal of Applied Physics* Vol 90, N^o 2, pp (570-579), 2001.
- [60]: I.B. Denysenko, S. Xu, J.D. Long, P.P. Rutkevych, N.A. Azarenkov, K. Ostrikov
«Inductively coupled Ar/CH₄/H₂ plasmas for low-temperature deposition of ordered carbon nanostructures», *Journal of applied physics* Vol 95, N^o 5, pp (2713-2724), 2004.
- [61] : A.L. Alexandrov et I. V. Schweigert
«Two-dimensional PIC-MCC simulations of capacitively coupled radio-frequency discharge in methane», *physics.plasm-ph*, pp (1-24), 10 Jun 2004.
- [62]: Evangelos Gogolides, Cyrille Buteau, Ahmed Rhallabi, Guy Turban
«Radio-frequency glow discharges in methane gas: modelling of the gas-phase physics and chemistry», *Journal of applied physics*, 27, pp (818-825), 1994.

- [63]: K Bera, B Farouk, Y H Lee
«Effects of reactor pressure on two-dimensional radio-frequency methane plasma: a numerical study», *Plasma Sources Sci. Technol.* 8, pp (412–420), 1999.
- [64]: Yasunori Tanaka, Yasunobu Yokomizu, Member, IEEE, Motohiro Ishikawa, Toshiro Matsumura
«Particle Composition of High-Pressure SF₆ Plasma with Electron Temperature Greater than Gas Temperature», *IEEE Transactions on plasma science*, Vol 25, N^o5, pp (991-995), 1997.
- [65]: Lizhu Tong, Kenichi Nanbu
«Self-consistent particle simulation of radio frequency SF₆ discharges: Role of ion recombination», *Science Direct, Vacuum* 80, pp (1012–1015), 2006.
- [66]: Kim C. Lobring, Catherine E. Check, Thomas M. Gilbert, Lee S. Sunderlin
«New measurements of the thermochemistry of SF₅⁻ and SF₆⁻», *International Journal of Mass Spectrometry* 227, pp (361–372), 2003.

ABSTRACT

The objective of the work presented in this memory consists in elaborating of a numeric computing program that permits to simulate the behaviour of various species in a reactor at the time of formation of films elaborated by cold plasma in DC glow discharge for a molecular gas.. After application of some simplifying hypotheses, we developed a simulation model based on a fluid approximation. We used MATLAB language to describe the distribution of the charged species; the electric field and the potential in the interelectrodes space. The elaborated model is based on the numeric method of finites differences. We applied the model to the simulation of plasma in the case of atomic gases (Helium, Argon) for his validation. Then, we treated the case of molecular gases. The results of our simulation are given as well for an electronegative gas (SF_6) that for an electropositive gas (CH_4) in terms of spatial distribution of densities of charges, electric potential and electric field in the inter electrodes space. The effect of some parameters such the pressure, the electronegativity the potential plasma and the density of gas has also been simulated.

Keywords: Fluid model, atomic plasma, molecular plasma, finites differences, electrostatic sheath, potential plasma.

Résumé

L'objectif du travail présenté dans ce mémoire consiste à élaborer un programme de calcul numérique qui permet de simuler le comportement des espèces chargées dans un réacteur de dépôt par plasma froid lors d'une décharge continue dans un gaz moléculaire. Pour cela, et après application de certaines hypothèses simplificatrices, nous avons développé un modèle de simulation de type fluide, en langage MATLAB, pour décrire la distribution des espèces chargées, du champ électrique et du potentiel dans l'espace inter électrodes. Le modèle élaboré est basé sur la méthode numérique des différences finies. Nous avons appliqué le modèle à la simulation du plasma dans le cas de gaz atomiques (Hélium, Argon) pour sa validation puis nous avons traité le cas de gaz moléculaires. Les résultats sont donnés aussi bien pour un gaz électronégatif (SF_6) que pour un gaz électropositif (CH_4) en termes de distribution spatiale des densités d'ions positifs, d'ions négatifs, d'électrons, de variation du champ électrique et du potentiel dans l'espace inter électrodes. L'effet de certains paramètres tels la pression, l'électronégativité le potentiel plasma et la densité de charge initiale de gaz ont été aussi simulés.

Mots clés : Modèle fluide, plasma atomique, plasma moléculaire, différences finies, densités de charges, gaines électrostatiques, potentiel plasma.

MATLAB

()

(SF₆)

(CH₄)