

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

UNIVERSITE MOULOUD MAMMERI - TIZI-OUZOU

FACULTE DES SCIENCES  
DEPARTEMENT DE CHIMIE



**UMMTO**

## **MEMOIRE DE MASTER**

Spécialité : Physique et Chimie des Matériaux

Présenté par :

**KASRI Salima**

### ***THEME***

## ***Étude et modélisation des décharges radiofréquences basse pression à couplage capacitif***

Soutenu le 09/09/2012 devant le jury d'examen composé de :

<b><i>M. HAMIDI</i></b>	<b><i>Mahdi</i></b>	<b><i>MACA</i></b>	<b><i>UMMTO</i></b>	<b><i>Président</i></b>
<b><i>M. MEZEGHRANE</i></b>	<b><i>Abdelaziz</i></b>	<b><i>MCCB</i></b>	<b><i>UMMTO</i></b>	<b><i>Promoteur</i></b>
<b><i>M. DEGHCHE</i></b>	<b><i>Djamel</i></b>	<b><i>MCCB</i></b>	<b><i>UMMTO</i></b>	<b><i>Examineur</i></b>
<b><i>M. DJOUDER</i></b>	<b><i>Madjid</i></b>	<b><i>MACA</i></b>	<b><i>UMMTO</i></b>	<b><i>Examineur</i></b>

Laboratoire de Physique et Chimie Quantique (LPCQ) de Tizi-Ouzou, Bâtiment Recherche  
(Hasnaoua) Niveau 2, porte 1

## *Étude et modélisation des décharges radiofréquence basse pression à couplage capacitif*

### **RESUME :**

*Le plasma de laboratoire est l'état de matière qui résulte de l'ionisation du gaz par différentes techniques parmi lesquelles la décharge électrique. Pour la représentation mathématique des décharges on dénombre essentiellement trois modèles que sont : le modèle particulaire, le modèle fluide et le modèle hybride fluide-particulaire.*

*L'étude entreprise dans le cadre de ce mémoire a trait à la simulation d'une décharge RF à couplage capacitif basse pression par un modèle fluide à une dimension en utilisant le code Siglo-RF, développée par Kinema Software en collaboration avec l'équipe de Jean Pierre Bœuf de l'université de Toulouse. C'est un modèle fluide auto-cohérent qui consiste à déduire à partir de l'équation de Boltzmann et en utilisant ses trois premiers moments, une série d'équations différentielles aux dérivées partielles susceptibles de représenter l'ensemble des phénomènes physiques qui se produisent dans la décharge étudiée que se soit dans l'argon, le méthane ou encore le silane. A partir de ces équations et en utilisant la méthode numérique des différences finies, suivant le schéma exponentiel de Sharfetter et Gummel; nous avons calculé la distribution spatio-temporelle des électrons et des ions ainsi que la répartition du champ électrique, des densités de flux ionique et électronique .Ces résultats ont montré un accord satisfaisant avec les résultats disponibles dans la littérature.*

**MOTS CLES :** Équation de Boltzmann - Moment de l'équation de Boltzmann - Gaz faiblement ionisé - Décharge lumineuse RF - Modèle fluide – Codes Bolsig et SigloRF - Différences finies - Plasmas d'argon, de méthane et de silane

## **REMERCIEMENTS**

*Les calculs et les discussions concernant ce travail de Master ont été réalisés dans le laboratoire LPCQ. A cet effet, je tiens à présenter mes remerciements et ma reconnaissance au Directeur, aux secrétaires et ingénieurs de cet organisme.*

*Il m'est agréable d'exprimer ma profonde gratitude à mon promoteur Mr Abdelaziz MEZEGHRANE qui m'a aidée et soutenue tout au long de mon travail, et qui n'a jamais manqué de m'orienter et de me conseiller pour la concrétisation de ce travail.*

*Mes remerciements les plus sincères aux membres de jury qui m'ont fait l'honneur d'avoir accepté d'examiner ce modeste travail.*

*Je suis aussi reconnaissante à tous les enseignants de la Faculté des sciences, département de physique et de chimie de l'université de Mouloud Mammeri, qui m'ont encouragée et guidée tout au long de mon cursus de formation.*

*Je tiens à exprimer mes remerciements les plus profonds à tous les membres de ma famille, pour leurs soutiens indéfectibles, en l'occurrence mes très chers parents, mes adorables sœurs Yasmine et Lydia et mon frère Youcef.*

*Enfin, mes remerciements s'adressent également à tous ceux et celles qui m'ont aidée de près ou de loin à l'élaboration de ce travail.*

# TABLE DES MATIERES

INTRODUCTION GENERALE.....	1
----------------------------	---

## CHAPITRE I : GENERALITES SUR LES PLASMAS DE DECHARGES

I.1. INTRODUCTION.....	3
I.2. CONCEPTS FONDAMENTAUX DES PLASMAS FROIDS.....	4
I.2.1. La température électronique et ionique.....	4
I.2.2. Le degré d'ionisation.....	5
I.2.3. Les effets collectifs : longueurs de Debye, la fréquence plasma.....	6
I.2.4. Le libre parcours moyens .....	7
I.3. LES COLLISIONS DANS UN PLASMA FROIDS.....	7
I.4. APPLICATIONS DES PLASMAS FROIDS .....	9
I.5. LES DECHARGES ELECTRIQUES.....	9
I.5.1. Rappel sur les décharges DC.....	9
I.5.1.1. Les décharge luminescente DC.....	12
I.5.1.2. Les différentes régions de la décharge luminescente normale .....	13
I.5.2. Les décharges RF.....	14
I.5.2.1. L'intérêt de l'excitation RF .....	14
I.5.2.2. Les mécanismes de décharge RF.....	16

I.5.2.3. Le couplage de l'excitation RF .....	17
I.6. LES DECHARGES A COUPLAGE CAPACITIF BASSE PRESSION .....	18
I.6.1. La tension d'autopolarisation.....	19
I.7. MODÉLISATION NUMRÉIQUE DES DÉCHARGES RF .....	20
I.7.1. Le modèle microscopique .....	22
I.7.2. Le modèle fluide.....	23
I.7.3. Le modèle hybride.....	23
I.8. CONCLUSION .....	24

## **CHAPITRE II : DESCRIPTION DU MODELE FLUIDE**

II.1. INTRODUCTION.....	25
II.2. DE L'EQUATION DE BOLTZMANN AUX EQUATIONS FLUIDES.....	26
II.2.1. Équation de continuité .....	28
II.2.2. Équation de la quantité de mouvement .....	29
II.2.3. Équation de transport de l'énergie cinétique .....	31
II.3. FERMETURE DES EQUATIONS FLUIDES.....	32
II.3.1. Approximation dérive-diffusion .....	32
II.3.2. Approximation de champ et de l'énergie locale.....	35
II.4. RECAPITULATIF DES EQUATIONS.....	36
II.5. CONCLUSION.....	37

## **CHAPITRE III : TRAITEMENT NUMERIQUE**

III.1. INTRODUCTION.....	38
III.2. LA MÉTHODE DE DISCRÉTISATION .....	39
III.3. CRITERE DE CONVERGENCE.....	40
III.4. SCHÉMA RÉCAPITULATIF DU CODE DE CALCUL .....	41
III.5. GEOMETRIE DU RÉACTEUR A MODÉLISER.....	42
III.6. LES HYPOTHESES CONSIDEREES.....	42
III.7. LES CONDITIONS INITIALES .....	43
III.8. LES CONDITIONS AUX LIMITES.....	43
III.9. CONCLUSION .....	44

## **CHAPITRE IV : RÉSULTATS ET DISCUSSIONS**

IV.1. INTRODUCTION.....	45
IV.2. LES PARAMETRES STANDARDS DE LA DÉCHARGE .....	46
IV.3. PRÉSENTATION DES GAZ ÉTUDIÉS.....	46
IV.3.1. Gaz atomique : argon.....	46
IV.3.2. Les gaz moléculaires.....	47
IV.3.2.1. Gaz électropositif : le méthane.....	47
IV.3.2.2. Gaz électronégatif : le silane.....	48
IV.4. Présentation du code BOLSIG.....	49
IV.5. PRÉSENTATION DES RÉSULTATS ET INTERPRETATIONS.....	50

IV.5.1. Profil du champ électrique et des densités de particules chargées.....	50
IV.5.2. Variation spatio-temporelle du champ électrique.....	51
IV.5.3. Densité des particules chargées pour les différents plasmas.....	53
IV.5.4. Densité de courant.....	54
IV.5.5. Terme source.....	55
IV.5.6. Variation spatio-temporelle du coefficient d'ionisation, d'attachement, et du chauffage électronique.....	57
<b>IV.6. ÉTUDE PARAMÉTRIQUES.....</b>	<b>61</b>
IV.6.1. Influence de la tension et de la fréquence .....	61
IV.6.2. Influence de la température du gaz.....	62
<b>IV.7. COMPARAISON : MODELE-LITTÉRATURE.....</b>	<b>63</b>
<b>IV.8. CONCLUSION.....</b>	<b>64</b>
 <b>CONCLUSION GENERALE.....</b>	 <b>66</b>
 <b>RÉFÉRENCES BIBLIOGRAPHIQUES .....</b>	 <b>68</b>

# INTRODUCTION GENERALE

---

La physique des plasmas est la branche de la physique qui étudie les propriétés, la dynamique et les applications des plasmas. Un plasma est une phase de la matière constituée de particules chargées, d'ions et d'électrons. Il existe deux grandes catégories de plasma ; les plasmas dits naturels et les plasmas de laboratoire. L'étude de la première catégorie concerne le domaine de l'astrophysique, quant à la deuxième, elle se rapporte à des domaines très variés qui vont de la production d'énergie par les plasmas chauds au traitement de surface par les plasmas froids. Ces plasmas froids de décharge sont aujourd'hui utilisés 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,...)

Deux approches peuvent être entreprises dans l'étude des plasmas froids : l'approche expérimentale ou l'approche théorique basée sur la simulation numérique. L'objectif principal de ces études numériques est de proposer des méthodes numériques robustes, précises et les moins coûteux possibles.

Le travail que nous avons réalisé au laboratoire de Physique et Chimie Quantique de l'Université de Tizi-Ouzou, sous la direction de Mr. Abdelaziz Mezeghrane, porte sur l'approche théorique, en l'occurrence l'étude et la modélisation fluide unidimensionnelle d'une décharge RF couplée capacitivement à basse pression. Ce type de décharge est utilisé principalement pour les techniques de dépôt et de gravure des couches minces dans les réacteurs PECVD.

Pour une meilleure description de notre travail, nous avons structuré ce mémoire en quatre chapitres:

Le chapitre I est consacré à l'étude bibliographique des plasmas de décharge. En premier lieu, nous rappelons quelques notions fondamentales de la physique des plasmas froids. En second lieu nous décrivons les différents types de décharge et plus particulièrement les décharges radiofréquences (RF). Enfin, nous rappelons brièvement les divers modèles numériques utilisés pour la simulation des décharges plasmas.

La modèle fluide utilisé est présentée au chapitre II. Nous avons développé le système d'équations macroscopiques qui caractérise le milieu. Nous avons également rappelé les hypothèses simplificatrices adoptées.

Dans le chapitre III, on décrit la méthode de résolution basée sur la technique des différences finies, en exprimant les approximations prises en considération et plus particulièrement les conditions aux limites et initiales de notre décharge.

Le chapitre IV illustre l'ensemble des résultats obtenus. Une comparaison avec les résultats expérimentaux publiés dans la littérature fait l'objet du dernier paragraphe. Ce chapitre se termine par une conclusion.

Nous terminons notre mémoire par une conclusion générale qui synthétise les résultats obtenus et donne un aperçu des perspectives qui peuvent être développées pour une meilleure compréhension de la problématique étudiée.

---

# CHAPITRE I

## GÉNÉRALITÉS SUR LES PLASMAS DE DÉCHARGES

---

### I.1. INTRODUCTION

L'état plasma est généralement défini comme étant le quatrième état de la matière. Les étoiles et la plupart de la matière interstellaire sont des plasmas. Il constitue de ce fait plus de 99% de la matière visible de l'univers. Ce concept a été introduit pour la première fois par le physicien-chimiste Irving Langmuir en 1928 [1] pour désigner la « colonne positive » (voir § I. 5) de certaines décharges électriques dans un milieu gazeux, et ceci par analogie avec le plasma sanguin auquel ce phénomène s'apparente visuellement [2]. Par la suite, ce mot a été utilisé, surtout en astrophysique, pour désigner un état dilué de la matière, analogue à un gaz, mais constitué de particules chargées, d'électrons et d'ions positifs et négatifs, en proportions telles que le milieu soit globalement neutre [3]. Cette définition a été étendue pour désigner tout milieu (gazeux en général) partiellement ou totalement ionisé, globalement quasi-neutre et qui consiste en un nombre égal de charges positives et négatives et de différents atomes et/ou molécules non ionisés.

La physique des plasmas est un domaine multidisciplinaire ; physique atomique, phénomènes de transport, électromagnétisme, matériaux, etc., et de ce fait leur étude théorique est assez complexe. Les plasmas de décharge sont aussi multi applications. C'est ainsi qu'ils sont utilisés dans les domaines des hautes technologies telles que les nanotechnologies (industrie de la microélectronique), l'exploration spatiale (propulsion ionique), les programmes de recherche sur la fusion thermonucléaire : la fusion inertielle et la fusion par confinement magnétique, et dans les dépôts de couches minces ou de traitement de surfaces.

Ce travail de mémoire s'inscrit dans le cadre général de la recherche associée aux décharges dans des gaz faiblement ionisés appelés aussi plasmas froids et ce premier chapitre est dédié aux rappels des propriétés fondamentales des plasmas de décharges électriques à basse pression. Comme il sera accordé un intérêt particulier aux décharges basse pression excitées par une tension sinusoïdale radiofréquence (RF), étant donné que la modélisation dont il est question dans ce mémoire est relative à ce type de décharge. Nous aborderons brièvement en dernier lieu l'étude cinétique des plasmas ainsi que les différents modèles de simulations traités dans la littérature. Ce chapitre se termine bien évidemment par une conclusion.

Le lecteur intéressé par une description détaillée de la physique des plasmas et des décharges électriques pourra consulter les ouvrages classiques cités en références [02-05].

## I.2 CONCEPTS FONDAMENTAUX DES PLASMAS FROIDS

### I.2.1. La température électronique et ionique

Un plasma froid est un système hors équilibre thermodynamique ; les énergies des électrons, des ions et des molécules neutres sont différentes. La faible inertie des électrons, la masse de l'électron est de l'ordre de 2000 fois plus faible que celle des ions, fait qu'ils sont plus « réactifs » [2] et récupèrent de ce fait la plus grande partie de l'énergie déposée par le champ d'excitation extérieur. C'est pour cette raison qu'il n'existe pas de température thermodynamique pour le plasma comme on peut la définir pour un gaz neutre. Cependant, la valeur des énergies des espèces présentes dans le plasma suit une loi de distribution statistique qui peut être de type Maxwell-Boltzmann [6] et l'on peut ainsi définir la température statistique des différents éléments en utilisant l'équation :

$$E_C = \left(\frac{1}{2}\right)mV^2 = \left(\frac{3}{2}\right)k_B T \quad (\text{I.1})$$

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.

On définit ainsi trois températures :

$T_e$  : pour les électrons ;

$T_i$  : pour les ions ;

$T_n$  : pour les espèces neutres.

Ces températures représentent uniquement l'état d'agitation des particules et sont exprimées en électron volt (eV).

Dans le cas des plasmas à l'équilibre thermodynamique, on peut définir une seule température  $T$  qui est aussi égale à la température physique du milieu :

$$T_e = T_L = T_i = T \quad (\text{I.2})$$

$T_L$  désigne la température des espèces lourdes (ions et neutre). Les ions sont dans ce cas chauds et réactifs.

Dans le cas des plasmas hors-équilibre thermodynamiques, la température électronique et la température des espèces lourdes diffèrent ( $T_L \neq T_e$ ). Les masses des ions et des neutres étant proches, leurs températures sont voisines et sont de l'ordre de la température ambiante. Par contre la température électronique est beaucoup plus élevée ( $T_e \gg T_i \approx T_L \approx T_g$ ), les ions sont considérés comme « froids » et non réactifs.

La température électronique est de l'ordre de 1 à 10 eV alors que la température des ions et des neutres reste aux alentours de 0.025 à 0.05eV [7].

Les principales caractéristiques des plasmas froids sont les suivantes : (i) ils sont entretenus électriquement ; (ii) les collisions des particules chargées avec les molécules neutres du gaz sont importantes ; (iii) ils sont spatialement limités et les pertes aux surfaces sont importantes ; (iv) l'ionisation des neutres maintient le plasma dans un état d'équilibre ; et (v) les électrons ne sont pas en équilibre thermique avec les ions [8].

### **I.2.2. Le degré d'ionisation**

Le degré d'ionisation d'un plasma est un paramètre qui relie les densités électronique ( $n_e$ ), ionique ( $n_i$ ) et des neutres ( $n$ ) par la relation :

$$\alpha = \frac{n_0}{n + n_0} \quad (\text{I.3})$$

où  $n_0$  est la densité des électrons ( $n_e$ ) ou des ions positifs ( $n_i$ ).

Cette notion est très importante car elle permet de distinguer les plasmas froids des autres types de plasma. Quand la valeur de  $\alpha$  est inférieure à  $10^{-4}$  alors on est en présence de plasmas faiblement ionisés ou encore plasmas froids, régis par les processus réactifs. Si la valeur de  $\alpha$  est très supérieure à  $10^{-4}$  on parle de plasma fortement ionisé ou plasma chaud. Le transport électronique est fortement conditionné par les collisions coulombiennes à longue portée et le plasma est dominé par les processus radiatifs. Ces plasmas on peut les trouver par exemple au cœur des étoiles où se produisent des réactions de fusions nucléaires.

### I.2.3. Les effets collectifs : longueurs de Debye et fréquence plasma

La neutralité électrique n'est qu'une propriété macroscopique du plasma puisque, considérée individuellement, une charge se trouve entourée d'un certain nombre de charge de signe opposé. En réalité, par un phénomène semblable à celui observé dans les électrolytes, le potentiel de la charge est écranté sur une distance dite longueur de Debye ( $\lambda_D$ ), définie par la relation [9] :

$$\lambda_D = \left( \frac{\epsilon_0 k_B T_e}{n_e q^2} \right)^{1/2} \quad (\text{I.4})$$

En remplaçant la permittivité électrique du vide ( $\epsilon_0$ ) et la charge électrique élémentaire ( $q$ ) par leurs valeurs, on aboutit aux formules pratiques suivantes :

$$\lambda_D = 6.9 \sqrt{\frac{T_e(K)}{n_e}} = 743 \sqrt{\frac{T_e(eV)}{n_e}} \quad (\text{I.5})$$

$\lambda_D$  est exprimée en cm et  $n_e$  en  $\text{cm}^{-3}$

La neutralité électrique n'existe donc qu'à une échelle d'observation supérieure à  $\lambda_D$ . Tout gaz ionisé dont la dimension  $L$  (la plus petite dimension de l'enceinte qui le contient) satisfait l'inégalité  $L \gg \lambda_D$  est dominé par les effets collectifs qui masquent les comportements individuels. Ce comportement collectif se manifeste en particulier lorsque l'on écarte le plasma de l'équilibre électrostatique.

Supposons, par exemple, que l'on sépare, sur une distance  $\delta x$ , deux tranches d'électrons et d'ions, initialement superposées. La charge superficielle qui en résulte sur les faces opposées crée une force de rappel pendulaire, entraînant une oscillation sinusoïdale de pulsation [9] :

$$\omega_{pe} = \left( \frac{n_e q^2}{m_e \epsilon_0} \right)^{1/2} \quad (\text{I.6})$$

$\omega_{pe}$  est dite pulsation plasma électronique, à laquelle est associée la fréquence  $f_{pe} = \frac{\omega_{pe}}{2\pi}$ ,

donnée par la formule pratique [9] :

$$f_{pe} = 9000 \sqrt{n_e} \quad (\text{I.7})$$

où  $f_{pe}$  est donnée en Hz et  $n_e$  en  $\text{cm}^{-3}$ .

Dans certaines conditions, les ions effectuent aussi de telles oscillations [1] avec une pulsation  $\omega_{pi}$  appelée pulsation plasma ionique :

$$\omega_{pi} = \left( \frac{n_i q^2}{m_i \epsilon_0} \right)^{1/2} = \omega_{pe} \left( \frac{m_e}{m_i} \right)^{1/2} \quad (\text{I.8})$$

#### I.2.4. Le libre parcours moyen

Considérons le mouvement d'un électron traversant des cibles d'atomes supposés fixes. Le libre parcours moyen ( $\lambda$ ), qui correspond à la distance parcourue entre deux collisions successives, est donné par la relation [6, 10]:

$$\lambda = \frac{1}{n_g \cdot \sigma} \quad (\text{I.9})$$

où  $n_g$  est la densité du gaz et  $\sigma = \pi \cdot r^2$  est la section efficace, où  $r$  désigne le rayon de l'atome cible.

La fréquence de collision ( $\nu$ ) entre l'électron et les atomes cibles est donnée par :

$$\nu = \frac{V_{th}}{\lambda} = \sigma \cdot n_g \cdot \left( \frac{2k_B T}{m_e} \right)^{1/2} \quad (\text{I.10})$$

$V_{th} = \left( \frac{2k_B T}{m_e} \right)^{1/2}$  représente la vitesse thermique des électrons.

### I.3. LES COLLISIONS DANS UN PLASMA FROIDS

Les collisions entre les électrons et les particules neutres du milieu sont les phénomènes précurseurs de création d'ion et/ou de radicaux qui jouent un rôle primordial dans les applications industrielles (gravure, dépôt, émission lumineuse,...) [7].

Les processus collisionnels peuvent se décomposer en deux groupes [7]: les collisions primaires entre les électrons et les particules neutres du gaz et les collisions secondaires qui font intervenir les produits formés dans le premier groupe. Les collisions entre une molécule (AB) d'un gaz donné et un électron peuvent être élastiques ou inélastiques. Dans le premier cas il y'a uniquement transfert d'énergie cinétique. Dans le second cas, une partie de l'énergie cinétique est transformée en énergie interne (l'énergie cinétique totale n'est plus conservée). Ce sont des processus qui ont un seuil d'énergie d'excitation dont l'ordre de grandeur dépend non seulement de la cible mais surtout des processus considérés : les niveaux rotationnels présentent un seuil inférieur à 10meV et sont de ce fait plus facilement excités,

pour les processus vibrationnels, ce seuil varie (en fonction des molécules considérées) entre 0.1 et 0.5eV. Notons que l'attachement requière moins d'énergie que l'ionisation.

Dans un plasma froid, les processus les plus importants sont les collisions inélastiques entre les molécules neutres et les électrons. On peut les décrire comme suit [10] :

✓ **Ionisation de la molécule AB**

Ionisation simple :  $AB + e^- \rightarrow AB^+ + 2e^-$

Ionisation dissociative :  $AB + e^- \rightarrow A^+ + B + 2e^-$  ou encore  $AB + e^- \rightarrow A^+ + B^- + e^-$

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

Attachement simple :  $AB + e^- \rightarrow AB^-$

Attachement dissociatif :  $AB + e^- \rightarrow A + B^-$

✓ **Excitation de la molécule AB**

Différents modes d'excitation sont possibles (rotation, vibration...):  $AB + e^- \rightarrow AB^* + e^-$

( $AB^*$  désigne une molécule dans un état excité)

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

Formation de radicaux :  $AB + e^- \rightarrow A^* + B + e^-$

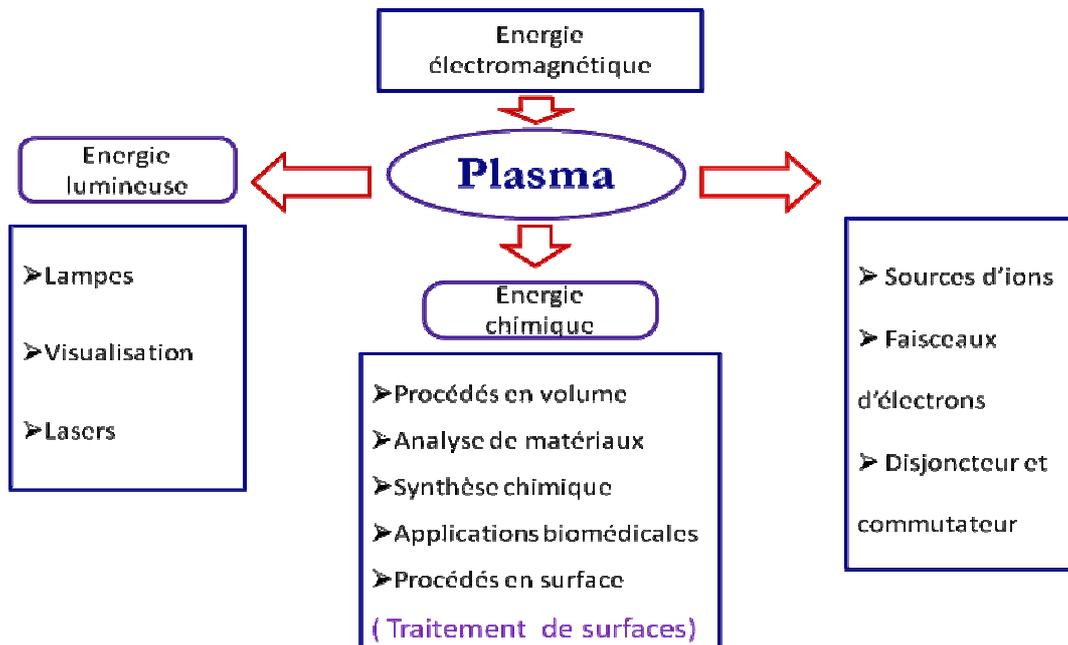
A cette liste, il faut ajouter les processus de recombinaison électrons-ion ou ion-ion, de détachement, de relaxation... Il est utile de rappeler que la relaxation d'états excités s'accompagne souvent d'émission de photons, d'où la luminosité de certaines décharges.

Les probabilités des divers types de collisions électrons-molécules sont fonctions de l'énergie des électrons. 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.4. APPLICATION DES PLASMAS FROIDS

Dans le domaine des plasmas froids, le milieu gazeux peut être considéré comme un système de conversion d'énergie dans lequel l'énergie électrique est transformée en énergie thermique,

lumineuse, cinétique ou chimique. La figure I.1 est un diagramme synoptique des diverses applications des plasmas froids en fonction de l'énergie considérée.



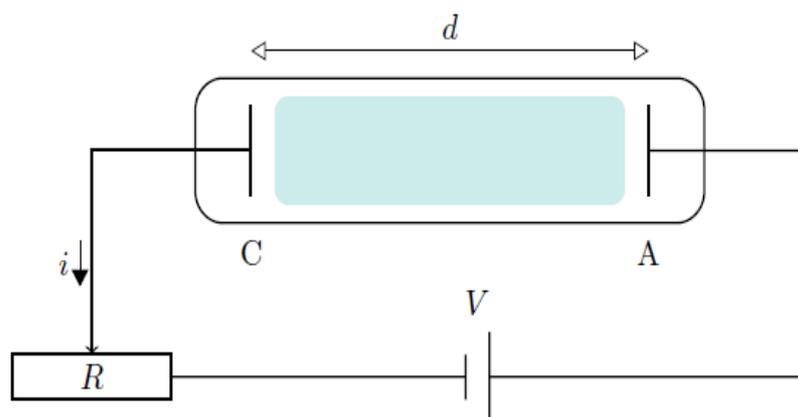
*Figure I.1 : Diagramme montrant le plasma froid comme système de conversion d'énergie et les applications associées. D'après [12-13].*

## I.5. LES DECHARGES ÉLECTRIQUES

Avant d'aborder la description des décharges radiofréquences, il nous a paru utile de faire la distinction entre les sources d'excitation dites «basse densité» et celles dites «haute densité». Celles permettant de produire des plasmas dont les densités électroniques sont supérieures à  $10^{10} \text{ cm}^{-3}$  sont appelées hautes densité et les autres sont appelées basse densité. Les décharges DC (courant continu) et RF à couplage capacitif sont généralement des sources basses densités.

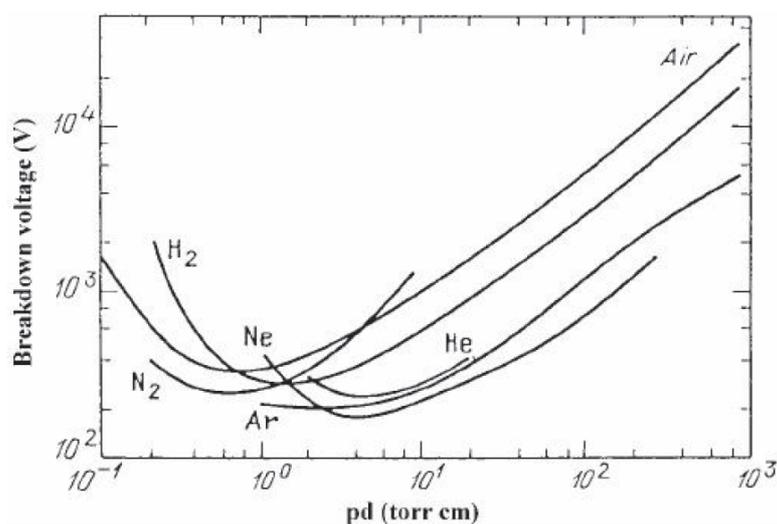
### I.5.1. Rappel sur les décharges DC

La décharge électrique est un phénomène qui se produit lors du passage d'un courant électronique dans un gaz. Les premières études sur les mécanismes d'initiation de décharge ont été menées par Townsend au début des années 1930 [13]. Le dispositif étudié est représenté schématiquement sur la figure I.2. Il est composé de deux électrodes métalliques planes soumises à une tension continue  $V$  et séparées par une distance  $d$ . Le dispositif est placé dans une enceinte fermée, contenant un gaz dont la pression  $P$  est de l'ordre du torr.



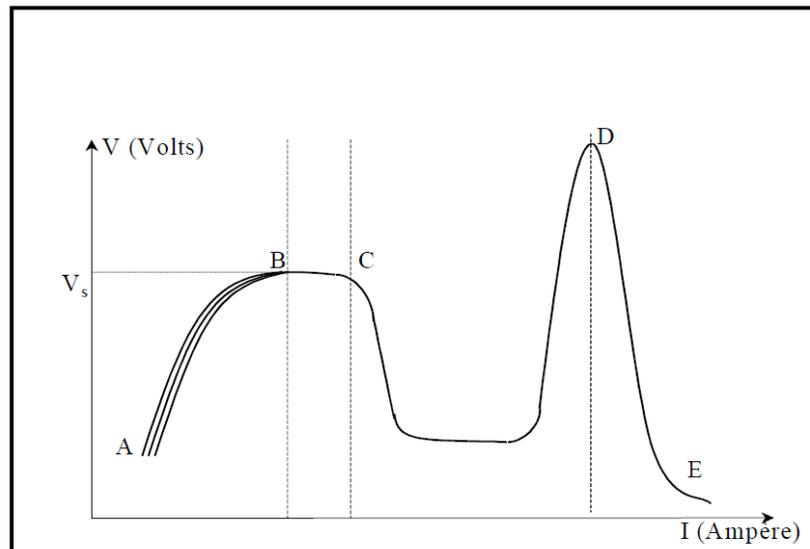
**Figure I.2 :** Dispositif de référence étudié par Townsend [13]

Les gaz étant de bons isolants, aucun courant ne les traverse. Mais si la tension dépasse une valeur critique  $V_d$  dite tension disruptive ou tension de claquage, il y a claquage : on mesure brutalement une intensité dans le circuit et on observe par la suite une émission lumineuse. La valeur de la tension disruptive est donnée par les courbes de Paschen (1916) [14], représentées sur la figure I.3 et qui sont fonction du produit de l'épaisseur  $d$  par la pression  $P$  et dépendent également de la composition du gaz. On remarque que la tension de claquage présente un minimum pour une certaine valeur du produit  $pd$ .



**Figure I.3 :** Tension de claquage en fonction du produit pression distance inter-électrode pour différents gaz (courbes de Paschen) dans le cas de deux électrodes planes parallèles [14].

Une fois la décharge amorcée, différents régimes sont observés en fonction du potentiel  $V$  appliqué. On peut représenter la caractéristique typique courant - tension par le schéma de la figure I.4.



**Figure I.4 :** Schéma de la caractéristique courant - tension d'une décharge électrique [15].

La figure I.4 donne un aperçu sur les différents types de décharges apparaissant lorsque l'on fait varier la tension (V).

Le gaz est initialement isolant. Puis, si on commence par appliquer une tension faible, un courant apparaît, dû au déplacement des électrons germes déjà présents dans le gaz en raison de l'ionisation produite par des agents extérieurs (rayonnement UV par exemple). Si le processus extérieur d'émission d'électrons s'arrête (arrêt de l'éclairage par exemple), la décharge cesse et ne s'entretient pas par elle-même, c'est donc une *décharge non entretenue* ou *décharge non autonome* (région AB). En revanche, pour un courant plus important, les ions formés par ionisation arrivant à la cathode peuvent extraire d'autres électrons par processus d'émission secondaire. La décharge devient autonome et le courant n'est plus limité que par le circuit extérieur. On parle alors d'une *décharge de Townsend* ou *décharge sombre* (région BC). Dans tout le domaine ABC, la charge d'espace est négligeable (l'intensité du courant électrique est faible) et la distribution du champ électrique ne dépend que de la géométrie des électrodes et de la tension appliquée. Puis, si l'on augmente davantage le courant, on atteint la zone *des décharges lumineuses* (région CD). Le tube devient assez lumineux et le potentiel V décroît. La luminosité n'est pas homogène (apparition de régions lumineuses et sombres), le champ électrique n'est plus uniforme et les effets de charge d'espace deviennent importants. C'est d'ailleurs la raison pour laquelle il existe un fort couplage entre l'équation de Poisson et les équations décrivant l'évolution des particules chargées (cf. chapitre II) dans cette zone.

Enfin, lorsque le courant est suffisamment important, la tension recommence à décroître et après une région de transition, on atteint le *régime d'arc électrique* (région DE). Les électrons

qui étaient émis jusqu'ici à la cathode sous l'effet du bombardement ionique, le deviennent par effet thermoélectronique. Le gaz est maintenant complètement conducteur.

Il est à noter que cette théorie est seulement adaptée pour décrire les décharges à faible produit  $P \times d$ , la théorie de Townsend n'est cependant plus valable pour décrire les décharges à haute pression [15]. En effet, lorsque le produit  $P \times d$  dépasse un certain seuil – de l'ordre de 300-500 torr.cm [15] selon le gaz considéré – les propriétés de la décharge sont profondément modifiées. Les modifications portent essentiellement sur le régime de Townsend et sur la décharge luminescente, tandis que les arcs à haute pression ne diffèrent pas essentiellement des arcs à basse pression. Pour l'étude de ce type de décharge on peut se référer aux ouvrages cités dans les références [15 - 17].

Le domaine de travail pour les procédés de dépôt par plasma froid est celui des décharges luminescentes (région CD) basse pression.

#### **1.5.1.1. Les décharges luminescentes DC**

On distingue généralement trois types de décharges luminescentes [15] :

##### ✓ *La décharge luminescente subnormale :*

Après la zone de la décharge de Townsend, si le courant de la décharge augmente, le potentiel décroît d'abord rapidement puis lentement jusqu'à atteindre une valeur constante : c'est le régime subnormal. Le courant est faible et la décharge n'occupe qu'une partie de la cathode.

##### ✓ *La décharge luminescente normale :*

Dans ce régime, le potentiel de la décharge reste constant même si le courant devient plus important, cette propriété a été utilisée pour produire des sources de tension constante. L'aire  $a$  de la surface couverte par la décharge est proportionnelle au courant  $i$ , donc la densité de courant  $j = \frac{i}{a}$  est constante.

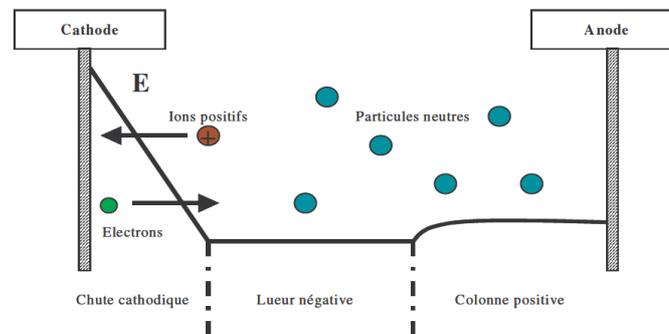
##### ✓ *La décharge luminescente anormale :*

Elle apparaît lorsque le courant  $i$  est supérieur à  $jS$  ( $i > jS$ ), où  $S$  est l'aire totale de la cathode. Le courant et le potentiel augmentent ensemble. La décharge s'établit sur n'importe quelle surface autour de la cathode (Supports, câbles métalliques, etc.).

Nous ne nous intéresserons dans ce travail qu'aux décharges luminescentes normales dont les principales caractéristiques sont présentées dans le paragraphe suivant.

### I.5.1.2. Les différentes régions de la décharge lumineuse normale

La décharge lumineuse se différencie facilement de la décharge de Townsend car l'espace inter-électrodes est divisé en une série de régions lumineuses et sombres. Celles-ci sont caractérisées par des propriétés électriques qui leur sont propres.



*Figure I.5 : Représentation schématique des différentes régions d'une décharge lumineuse normale [18].*

La figure I.5 représente les différentes régions existant dans le cas de deux électrodes planes et parallèles placées dans un tube cylindrique rempli de gaz à une pression comprise entre quelques milliers de torr jusqu'à quelques torr. Les principales régions sont [18]:

✓ **Région sombre de chute cathodique ou gaine :**

Une zone de charge d'espace positive située entre le plasma et les électrodes crée un champ électrique intense qui agit sur les particules chargées : les électrons sont accélérés vers le plasma alors que les ions sont accélérés vers les parois. Les électrons gagnent de l'énergie dans la chute cathodique, pour ioniser et exciter les particules neutres du gaz.

✓ **Région de la lueur négative :**

Dans cette zone le champ électrique est faible et les électrons ne peuvent plus gagner d'énergie. L'énergie accumulée est déposée sous forme d'excitation et d'ionisation des neutres du gaz. Un grand nombre d'atomes se désexcite en émettant des photons qui sont à l'origine de la forte luminosité de cette région. C'est la partie la plus lumineuse de la décharge

✓ **Région de la colonne positive :**

Pour une pression  $P$  constante et une distance inter-électrodes suffisamment élevée, la colonne positive peut apparaître. Dans cette région le champ électrique augmente localement permettant aux électrons d'ioniser le gaz et ainsi compenser les pertes des espèces chargées par recombinaison, attachement et diffusion aux parois.

L'importance relative des différentes zones qui viennent d'être présentées dépend de la nature du gaz, de la distance inter-électrodes, de la pression et du potentiel appliqué aux électrodes.

Il est important de mentionner que seules la lueur négative et la colonne positive sont des zones neutres et constituent de ce fait un plasma. Elles diffèrent cependant par le mode d'accélération des électrons causant l'ionisation. Dans le cas de la lueur négative, les électrons gagnent leur énergie à l'extérieur (*i.e.* dans la gaine cathodique), tandis que dans le cas de la colonne positive c'est le champ électrique qui confère leur énergie aux électrons.

Par ailleurs, dans le cas où l'on souhaite déposer un matériau isolant et ce en appliquant une décharge luminescente continue (DC), l'écoulement des charges à travers les électrodes n'est plus possible dès que celles-ci commencent à être recouvertes. Pour éviter l'extinction de la décharge, on applique un signal d'excitation radiofréquence dont la demi-période est inférieure au temps de charge de l'isolant. Les charges accumulées durant la première demi-période seront alors neutralisées au cours de la seconde demi-période. Ce type de décharge s'appelle : *décharges radiofréquences*. Elles sont largement utilisées dans les procédés d'élaboration de couches minces. Le paragraphe suivant leur sera consacré.

## **I.5.2. Les décharges RF**

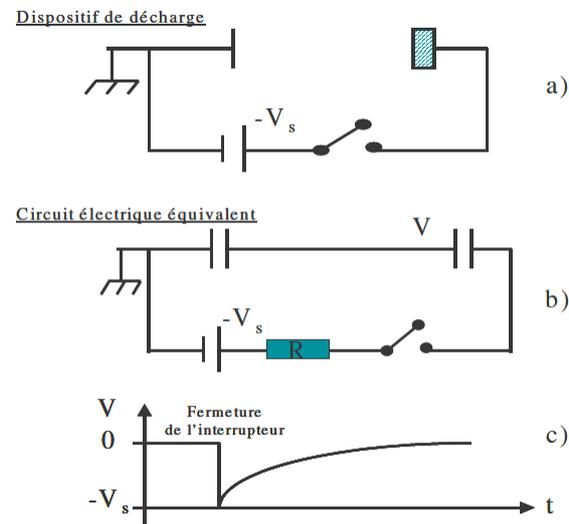
Les décharges luminescentes radiofréquences (RF) sont des décharges fonctionnant avec une excitation dont la plage de fréquence varie de quelques dizaines de kHz à quelques MHz [19]. Elles sont largement utilisées dans les procédés d'élaboration de couches minces (PECVD) [8]. Dans la gamme radiofréquence, on utilise généralement la valeur de 13.56 MHz comme fréquence d'excitation. Celle-ci n'est pas un chiffre magique ; il représente seulement une valeur qui a été imposée par la réglementation internationale des télécommunications avec laquelle on peut émettre une certaine quantité d'énergie sans interférer avec les signaux de télécommunications.

### **I.5.2.1. L'intérêt de l'excitation RF**

Comme mentionné précédemment, l'intérêt majeur de l'excitation RF est de pouvoir déposer des matériaux isolants contrairement à l'excitation DC. Comment cela est possible ? C'est ce que nous allons voir dans le paragraphe suivant.

Pour illustrer cela, considérons la figure I.5(a) : un potentiel DC est appliqué entre deux électrodes dont l'une est recouverte par une matière isolante. Le circuit est équivalent au schéma électrique présenté en figure I.5(b). L'évolution au cours du temps de la différence de

potentiel  $V$  aux bornes de l'isolant est représentée sur la figure I.5(c). A l'instant  $t = 0$  nous avons  $V = -V_s$ . Si la tension  $V_s$  est suffisante, la décharge s'amorce, puis progressivement la différence de potentiel aux bornes de l'isolant chute et s'annule ( $V = 0$ ) et la décharge s'éteint.



**Figure I.5 :** Schéma de principe du phénomène de charge d'une électrode isolante lors d'une décharge DC [18,20].

L'application d'un potentiel DC à une électrode recouverte d'un matériau non-conducteur est équivalente au phénomène classique de charge d'un condensateur. La différence de potentiel s'annule car les électrons présents à la surface de l'isolant sont neutralisés par les ions du plasma et ne sont pas renouvelés : le courant DC ne pouvant plus circuler la décharge s'éteint. Pour une valeur de tension appliquée  $V_s$  de 1000 V, un courant  $I$  de 1 mA et une capacité  $C$  de 1 pF, le temps de charge est d'environ :  $t = \frac{Q}{I} = \frac{CV_s}{I} \approx 10^{-6} s$ , avec  $Q$  la quantité de charge accumulée pendant le temps  $t$ .

Dans le cadre de cet exemple, une excitation alternative de fréquence  $f \geq 1MHz$  est suffisante pour empêcher l'accumulation de charges superficielles et entretenir une décharge sur l'échantillon isolant. Périodiquement chacune des électrodes devient une cathode puis une anode et les charges positives déposées durant la partie cathodique du cycle sont neutralisées par un flux d'électrons durant la partie anodique du cycle.

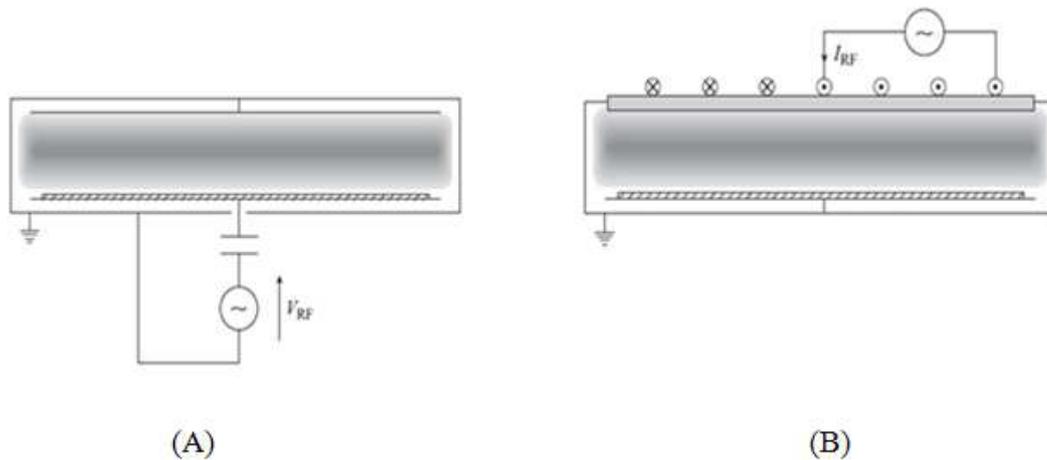
### I.5.2.2. Les mécanismes de décharge RF

Quand la fréquence est basse, la décharge RF ressemble à une décharge fonctionnant en régime continu (DC) avec un changement périodique du rôle des électrodes à chaque moitié du cycle RF. En effet, l'émission secondaire joue un rôle non négligeable pour l'entretien du plasma dans cette gamme de fréquences. On parle de décharge fonctionnant en régime gamma ( $\gamma$ ). Cependant, quand la fréquence de la décharge augmente et atteint des valeurs de quelques MHz, les ions ne peuvent plus suivre le mouvement du champ électrique. Seuls les électrons, ayant une mobilité très grande à cause de leur masse, sont capables de suivre les oscillations du champ électrique. L'énergie gagnée par les électrons dans le champ électrique sera dissipée localement par ionisation et excitation. Les électrons du plasma sont dans ce cas les responsables de l'entretien de la décharge. Les électrons issus de l'émission secondaire par impact ionique sur les parois n'ont plus d'importance capitale. On parle de régime ( $\alpha$ ) [8, 11,19].

### I.5.2.3. Le couplage de l'excitation RF

Il existe plusieurs modes de couplage de l'énergie au gaz (capacitif, inductif, hélicon, résonance cyclotronique électronique, magnétron, cavité résonnante...). En ce qui concerne les décharges RF nous distinguons deux façons fondamentales et surtout classiques qui sont : (i) le couplage inductif (ICP) et (ii) le couplage capacitif (CCP) (voir la figure I.6).

Pour la fabrication des microprocesseurs, l'industrie microélectronique utilise massivement les décharges inductives et capacitives double fréquences (DFC) [5]. L'industrie des écrans plats et des panneaux photovoltaïques quant à elle, utilise principalement les réacteurs capacitifs qui permettent d'obtenir des procédés uniformes sur des surfaces importantes [21]. Les décharges RF à couplage capacitif sont généralement utilisées dans des applications basse pression et les densités électroniques produites, typiquement autour  $10^{15}$ - $10^{16}$  m<sup>-3</sup> [5], sont plus faibles comparées à celles produites par les ICP et qui sont de l'ordre de  $10^{16}$ - $10^{18}$  m<sup>-3</sup> [5].



**Figure I.6** : Schémas simplifiés des décharges à couplage capacitif (A) et à couplage inductif (B).

Le schéma B de la figure I.6, présente le principe du réacteur à couplage inductif, la puissance est transmise aux électrons de la décharge à travers une électrode diélectrique à partir d'un champ électromagnétique RF induit. La circulation d'un courant RF dans plusieurs enroulements conducteurs génère un champ magnétique alternatif. La force de Lorentz oblige les électrons à décrire des trajectoires hélicoïdales autour des lignes de champ magnétique perpendiculaires aux plans des enroulements : le champ électrique et la densité de courant sont azimutaux. Dans ce type de configuration à couplage électrique indirect, les gaines de champ électrique sont fines et l'énergie des ions est peu élevée. Quant au schéma A de la même figure, il représente le principe du réacteur à couplage capacitif qui fut développé dans les années 1970 [5] et historiquement, il était le premier réacteur RF industriel capable de fonctionner même avec des électrodes non-conductrices.

Son principe est relativement simple, il consiste en un jeu de deux électrodes planes et parallèles séparées d'une distance de quelques centimètres. Un gaz neutre de faible pression remplit l'espace inter-électrodes. L'une des électrodes est alimentée par un générateur de tension RF (généralement  $f = 13,56$  MHz), alors que l'autre est reliée à la masse électrique.

Les électrons ayant une fréquence plasma beaucoup plus élevée que celle des ions, sont préférentiellement chauffés dans le champ électrique. L'ionisation des particules neutres par impact électronique est le processus prédominant de création d'espèces chargées (ions, électrons). Les particules chargées créées disparaissent principalement par diffusion et/ou recombinaison aux parois du réacteur. La mobilité des électrons étant beaucoup plus élevée que celle des ions, les pertes électroniques aux parois sont initialement plus élevées que les pertes ioniques : une charge d'espace positive (gaine), dans laquelle nous retrouvons la majeure partie de la tension appliquée, se forme en face de chaque électrode. Dans ces zones,

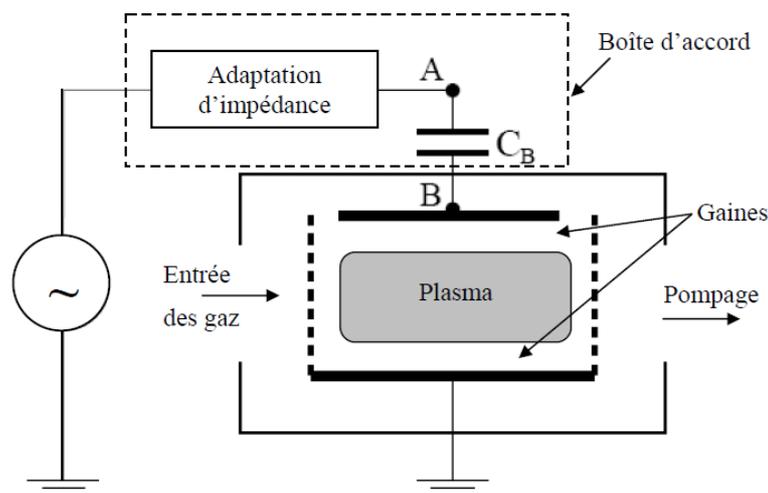
il règne un fort champ électrique qui repousse les électrons vers le plasma et accélère les ions vers les parois. C'est cette propriété de bombardement ionique des parois qui est principalement mise à profit dans la plupart des procédés plasma industriel.

Dans ce type de configuration à couplage électrique direct, les gaines sont relativement larges et l'énergie des ions est élevée. Par rapport aux décharges RF à couplage inductif, il existe un fort couplage entre la densité, l'énergie des espèces ionisées et la puissance dissipée dans la décharge : plus la puissance dissipée dans le plasma est élevée, plus la densité (le flux) ionique est élevée, et plus l'énergie de bombardement des ions est importante. Cette interaction empêche un contrôle indépendant de l'énergie et du flux d'ions.

Parce que notre modélisation concerne les décharges RF à couplage capacitif basse pression, nous avons jugé important de rappeler certaines de leurs caractéristiques.

## I.6. LES DÉCHARGE RF À COUPLAGE CAPACITIF BASSE PRESSION

Une représentation schématique de la configuration de ce type de réacteur est donnée par la figure I.7.



**Figure I.7:** Schéma de principe d'une source RF à couplage capacitif avec [8].

La boîte d'accord optimise la puissance couplée à la décharge et ce en adaptant l'impédance du circuit extérieur à l'impédance de sortie du générateur qui est de  $50\Omega$ . Elle assure également la protection du générateur RF.

La fréquence d'excitation étant relativement élevée, le courant total de décharge ( $J_T$ ) est principalement un courant de déplacement entre les électrodes et le plasma.  $J_T$  est la somme

de trois composantes (Eq. I.11): le courant d'ions ( $J_i$ ), le courant d'électrons ( $J_e$ ) et le courant de déplacement ( $J_d$ ). Cette dernière composante du courant total est générée par les variations temporelles du champ électrique sur les électrodes (Eq I.12) [18]. La mesure du courant de décharge nécessite un montage expérimental particulier détaillé dans la référence [8].

$$J_T = J_e + J_i + J_d \quad (\text{I.11})$$

$$J_d = \epsilon_0 \frac{dE}{dt} \quad (\text{I.12})$$

avec  $\epsilon_0$  la permittivité du vide,  $E$  le champ sur l'électrode.

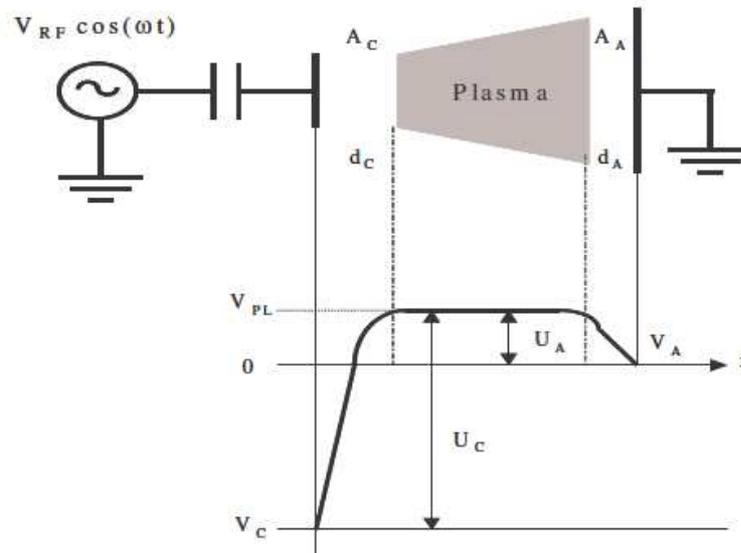
Une autre propriété du couplage électrique capacitif est un courant total net nul sur tout le circuit incluant la décharge durant un cycle RF. Nous verrons dans le paragraphe suivant que si les électrodes présentent une asymétrie au niveau de leur surface, une valeur moyenne continue appelée « tension d'auto polarisation » s'ajoute à la tension RF appliquée.

### I.6.1. La tension d'autopolarisation

Dans le cas général, les décharges RF capacitives présentent une configuration asymétrique où l'électrode à la masse présente la plus grande surface. Il en résulte le développement d'une tension d'autopolarisation sur l'électrode RF pour assurer l'égalité des flux de courant aux électrodes sur un cycle RF complet [8].

Pour mieux comprendre, considérons le schéma de la figure I.8. La surface de l'électrode ( $A_C$ ) alimentée par le potentiel RF (cathode) est minimisée par rapport à celle de l'électrode ( $A_A$ ) qui est reliée à la masse (anode). L'électrode portée au potentiel RF est séparée du générateur par un condensateur de blocage de sorte qu'aucun courant total de conduction ne s'écoule de l'électrode vers le plasma et vice versa. La décharge fonctionne en régime de décharge luminescente normal et recouvre la totalité de la surface des deux électrodes. Lorsque le potentiel de gaine diminue, des électrons suffisamment énergétiques sortent du plasma et s'accumulent sur la capacité de blocage. Lorsque le potentiel de gaine augmente de nouveau les électrons sont repoussés dans le plasma alors que les ions affluent sur l'électrode. La mobilité entre électrons et ions étant très différente, la charge accumulée sur la capacité croît jusqu'à l'égalité des flux d'espèces chargées à travers les gaines. Ainsi un potentiel continu et négatif (tension d'autopolarisation  $V_{DC}$ , également appelée DC self-biasing ou encore DC offset) apparaît sur la cathode et s'ajoute à la tension RF. La chute de potentiel résultante et par conséquent le champ électrique dans la gaine cathodique est plus élevé que dans la gaine

anodique. La densité de courant à l'électrode C est également supérieure à celle à l'électrode A. Cette plus grande chute de potentiel moyennée dans le temps augmente la vitesse dirigée des ions à la cathode. Cet effet est très utile pour des applications comme la pulvérisation et la gravure dont les performances dépendent fortement de l'énergie des ions qui pulvérisent la surface du substrat.



**Figure I.8 :** Représentation schématique de la distribution moyennée dans le temps du potentiel entre les électrodes pour une décharge RF à couplage capacitif.  $A_A$  et  $A_C$  représentent les surfaces des électrodes,  $d_C$  et  $d_A$  les épaisseurs de gaine,  $V_C$  le potentiel moyen de l'électrode connectée au générateur ( $V_A - V_C = V_{DC}$ ),  $V_A$  le potentiel moyen de l'électrode à la masse,  $V_{PL}$  le potentiel plasma,  $U_A$  et  $U_C$  les chutes de potentiel dans les gaines,  $V_{RF}$  l'amplitude de la tension appliquée entre les deux électrodes [18].

Comme nous l'avons mentionné auparavant, une modélisation numérique complète du réacteur plasma permet de contribuer à mieux contrôler le procédé de dépôts tels les procédés PECVD. Dans le paragraphe suivant, nous allons donc décrire les différents aspects de cette modélisation.

## I.7. MODÉLISATION NUMÉRIQUE DES DÉCHARGES RF :

La complexité des phénomènes mis en jeu et leur couplage dans les réacteurs rendent extrêmement difficile la description de la décharge dans son intégralité. Un modèle complet devra par exemple décrire le transport des particules chargées dans le champ électrique, la

cinétique des neutres ainsi que les réactions de surface, l'influence des particules pulvérisées et le circuit électrique extérieur. C'est pour ces raisons que la modélisation d'un réacteur RF réel est généralement subdivisée en trois grandes parties couplées : la modélisation électrique, la modélisation cinétique et hydrodynamique et la modélisation des réactions de surface.

En ce qui concerne notre travail, nous abordons uniquement la modélisation électrique des décharges RF. Sachant que le nombre de particules à décrire est gigantesque (quelques  $10^{10} \text{cm}^{-3}$ ), il serait impossible de les décrire individuellement. On suppose qu'elles sont décrites par une fonction de distribution, solution d'une équation cinétique.

En fonction de la nature des collisions dominantes dans la décharge, on distingue différentes équations de transport [15,19] :

**L'équation de Focker- Planck** lorsque les collisions entre les particules chargées et les particules neutres sont dominantes, c'est le cas où les interactions coulombiennes à longue portée (mais écrantées à la longueur de Debye) sont prépondérantes.

**L'équation de Vlasov** lorsque les particules chargées ne font pas de collisions.

**L'équation de Boltzmann** lorsque les collisions entre les particules chargées et les particules neutres sont dominantes, dans ce cas c'est les interactions binaires à courte portée entre particules chargées et neutres qui dominent.

Les plasmas auxquels on s'intéresse sont des plasmas faiblement ionisés avec un degré d'ionisation inférieur à  $10^{-4}$ . Le mouvement des particules chargées est décrit par l'équation de Boltzmann qui s'écrit [4]:

$$\frac{df_i}{dt} \equiv \frac{\partial f_i}{\partial t} + v_i \cdot \frac{\partial f_i}{\partial r} + \gamma_i \cdot \frac{\partial f_i}{\partial v} = \left( \frac{\partial f_i}{\partial t} \right)_{collision}. \quad (\text{I.13})$$

où

$r$  : champ des distances,

$\gamma_i$  : 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  $m_i$  ( $\vec{F}_i = e\vec{E}$ ) et

$v$  : champ des vitesses des particules chargées.

Cette équation décrit l'évolution spatio-temporelle de la fonction de distribution des vitesses des particules chargées sous l'effet de forces extérieures comme le champ électrique et en

tenant compte des gradients spatio-temporels (terme de gauche) et des collisions entre les particules (terme de droite ou opérateur de collision).

Il est important de signaler qu'il est nécessaire en principe de résoudre autant d'équations de Boltzmann que de particules présentes dans le gaz et qu'on couplerait à l'équation de Poisson. En effet les porteurs de charges se déplacent dans un champ électrique qui dépend lui-même des densités. Il se trouve malheureusement que la résolution numérique d'un tel système est bien trop complexe, ce qui implique d'indispensables simplifications. Ceci nous amène aux différents types de modèles électriques possibles [22] qu'on peut classer en deux catégories : les modèles *macroscopiques* (ou *fluides*) et les modèles *microscopiques* (ou *particulaires*).

Chaque modèle s'applique préférentiellement à des conditions de décharge différentes. Les modèles microscopiques sont plus particulièrement adaptés pour les conditions de décharge basse pression, c'est-à-dire lorsque le libre parcours moyen des particules chargées est du même ordre de grandeur que les dimensions caractéristiques du système alors que les modèles macroscopiques sont plus efficaces dans un régime collisionnel à pression plus élevée. Il existe également d'autres types de modèles électriques qui sont les *modèles hybrides*.

### I.7.1 Le modèle microscopique

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

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  $(\mathbf{r}, \mathbf{v})$  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 (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.7.2 Le modèle fluide**

Le modèle de décharge où la description du transport des particules est basée sur les valeurs moyennes est appelé modèle fluide. Il assimile le plasma à un fluide à plusieurs composantes en interaction.

En principe, la cinétique des électrons et des ions dans un plasma faiblement ionisé doit être caractérisée en toute rigueur en utilisant l'équation de Boltzmann ou le modèle particulaire.

Mais en pratique, on peut supposer que le milieu est continu ce qui signifie que les propriétés des particules chargées présentes dans le plasma (densités, vitesses, énergies) sont décrites par des grandeurs moyennes c'est-à-dire comme étant un ensemble continu (ou fluide), et non par leurs fonctions de distribution. On ne résout pas l'équation de Boltzmann, mais on considère ses trois premiers moments, qui représentent respectivement les équations de conservation de la densité, du transfert de la quantité de mouvement et de l'énergie. Les équations obtenues sont couplées à l'équation de Poisson, et le système d'équations ainsi obtenu est fermé moyennant quelques hypothèses simplificatrices.

Ce modèle est largement utilisé pour la modélisation des plasmas de méthane, utilisé dans la fabrication des films DLC (Diamond-Like Carbon) ou de diamant nanocristallin, les plasmas de silane qui sont utilisés dans l'industrie de la microélectronique ou la fabrication des panneaux photovoltaïques ou encore les plasmas d'argon utilisés dans la pulvérisation cathodique.

### **I.7.3 Le modèle hybride**

Le modèle microscopique qui permet un traitement rigoureux de la cinétique des particules est plus difficile à mettre en œuvre que le modèle fluide dont l'inconvénient est de ne pas prendre en compte le comportement hors équilibre des particules.

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 modèle particulaire et d'autres régions (leur négative où il y a beaucoup plus de collisions) par un modèle fluide. Les modèles hybrides les plus répandus sont ceux qui associent un code Monte Carlo à un modèle de type fluide.

## **I.8. CONCLUSION**

Dans ce chapitre, nous avons rappelé quelques notions simples relatives aux plasmas notamment leurs propriétés électriques et les différentes collisions mises en jeu. Nous avons ensuite évoqué les différentes régions créées dans l'espace inter-électrodes dans les décharges continues, pour ensuite aborder les décharges excitées RF et plus particulièrement celles à couplage capacitif. Enfin, nous avons abordé les différentes approches numériques (fluide, particulaire...) du modèle de décharge électrique. Pour notre modélisation, nous avons opté pour un modèle fluide 1D, une description assez détaillée de ce modèle va faire l'objet du chapitre suivant.

# CHAPITRE II

## DESCRIPTION DU MODELE FLUIDE

---

### II.1. INTRODUCTION

Pour décrire le transport de particules chargées dans les décharges RF basse pression à couplage capacitif, nous avons adopté une représentation fluide basée sur la solution des équations de transport, qui sont les trois premiers moments de l'équation de Boltzmann et qui correspondent aux équations de continuité, de transfert de quantité de mouvement et de transfert d'énergie [19, 23], lesquelles sont couplées avec l'équation de Poisson. Cette description fluide incorpore un certain nombre d'approximations déjà utilisées par d'autres auteurs : la description électronique qui a initialement utilisé que les équations de continuité et de transfert de quantité de mouvement, inclut maintenant le troisième moment de l'équation de Boltzmann représentant le transport d'énergie moyenne électronique ; un champ électrique effectif remplace le champ électrique standard dans l'équation du moment des ions, qui est écrit en forme plus complète. La condition de fermeture pour le système d'équations est basée sur l'approximation d'énergie locale plutôt que sur l'approximation de champ électrique locale [24].

L'objectif de ce présent chapitre est de décrire le modèle fluide de notre simulation. Dans un premier, temps nous allons revoir la procédure suivie pour retrouver les équations fluides à partir de l'équation de Boltzmann, puis justifié les hypothèses simplificatrices considérées dans ce travail et en dernier lieu nous exposerons les hypothèses de fermetures de notre système d'équations.

## II.2. DE L'ÉQUATION DE BOLTZMANN AUX ÉQUATIONS FLUIDES

Dans ce paragraphe nous allons nous appliquer à retrouver les équations hydrodynamiques en partant du calcul des moments de l'équation de Boltzmann. Cette démonstration s'inspire largement du raisonnement de Delcroix [2] et de Moisan et Pelletier [4].

Soit  $f_\alpha(r, v, t)$  la fonction de distribution d'un ensemble de particules de type  $\alpha$ . Cette fonction vérifie l'équation d'évolution (ou de Boltzmann) décrite auparavant :

$$\frac{\partial f_\alpha}{\partial t} + v_\alpha \cdot \nabla_{\vec{r}} f_\alpha + \frac{\vec{F}}{m_\alpha} \cdot \nabla_{\vec{v}} f_\alpha = \left( \frac{\partial f_\alpha}{\partial t} \right)_{coll} \quad (\text{II.1})$$

Sous forme tensorielle, cette équation s'écrit [26] :

$$\frac{\partial f_\alpha}{\partial t} + \sum v_\alpha \cdot \frac{\partial f_\alpha}{\partial x_i} + \sum \frac{F_i}{m_\alpha} \cdot \frac{\partial f_\alpha}{\partial v_i} = \left( \frac{\partial f_\alpha}{\partial t} \right)_{collision}. \quad (\text{II.2})$$

On notera  $\overline{\psi(r, t)}$  la valeur moyenne de la grandeur  $\psi(r, v, t)$  qui est définie par :

$$\overline{\psi(r, t)} = \frac{1}{n_\alpha} \int \psi(r, v, t) f_\alpha dv \quad (\text{II.3})$$

Dans le modèle hydrodynamique, à chaque variable microscopique ( $\psi(r, v, t) = 1, mv, mv^2/2$ ) correspond, pour cause de présence de gradients dans l'espace des phases, un flux macroscopique décrit par des équations dites de transport : ce sont les équations hydrodynamiques.

Pour obtenir celles-ci, multiplions l'équation (II.1) par la quantité  $\psi(r, v, t)$  qui est fonction du vecteur position, du vecteur vitesse et du temps, puis intégrons sur toutes les vitesses [4] :

$$\underbrace{\int \psi \frac{\partial f_\alpha}{\partial t} dv}_A + \underbrace{\int \psi v \cdot \nabla_r f_\alpha dv}_B + \underbrace{\int \psi \frac{F}{m_\alpha} \cdot \nabla_v f_\alpha dv}_C = \int \psi \left( \frac{\partial f}{\partial t} \right)_{coll} dv \quad (\text{II.4})$$

Après un examen des différents termes (A, B, C) de l'équation (II.4), nous obtenons [4, 26] :

$$A \equiv \int_v \psi \frac{\partial f_\alpha}{\partial t} dv = \frac{\partial}{\partial t} \int_v \psi f_\alpha dv - \int_v \frac{\partial \psi}{\partial t} f_\alpha dv = \frac{\partial (n_\alpha \overline{\psi})}{\partial t} - n_\alpha \frac{\partial \overline{\psi}}{\partial t} \quad (\text{II.5})$$

$$B \equiv \int_v \psi v_i \frac{\partial f_\alpha}{\partial x_i} dv = \frac{\partial}{\partial x_i} \int_v (\psi v_i) f_\alpha dv - \int_v \left( \frac{\partial \psi}{\partial x_i} v_i \right) f_\alpha dv = \frac{\partial (n_\alpha \overline{\psi v_i})}{\partial x_i} - n_\alpha v_i \frac{\partial \overline{\psi}}{\partial x_i} \quad (\text{II.6})$$

$$C \equiv \int_v \psi \frac{F_i}{m_\alpha} \frac{\partial f_\alpha}{\partial v_i} dv = \int \int \int_{v_x, v_y, v_z} \frac{\psi F_x}{m_\alpha} \frac{\partial f_\alpha}{\partial v_x} dv_x dv_y dv_z + \int \int \int_{v_x, v_y, v_z} \frac{\psi F_y}{m_\alpha} \frac{\partial f_\alpha}{\partial v_y} dv_x dv_y dv_z + \int \int \int_{v_x, v_y, v_z} \frac{\psi F_z}{m_\alpha} \frac{\partial f_\alpha}{\partial v_z} dv_x dv_y dv_z \quad (\text{II.7})$$

Dans la dernière équation et afin d'introduire la valeur moyenne, nous allons effectuer une intégration par partie sur la variable  $v_x$  par exemple [4] :

$$\int \int \int_{v_x, v_y, v_z} \frac{\psi F_x}{m_\alpha} \frac{\partial f_\alpha}{\partial v_x} dv_x dv_y dv_z = \int \int_{v_y, v_z} dv_y dv_z \left\{ \left[ \psi \frac{F_x}{m_\alpha} f_\alpha \right]_{v_x=-\infty}^{v_x=+\infty} - \int_{v_x} f_\alpha \frac{\partial}{\partial v_x} \left( \psi \frac{F_x}{m_\alpha} \right) dv_x \right\} \quad (\text{II.8})$$

- Le premier terme de droite  $f_\alpha \frac{\psi F_x}{m_\alpha}$  est nul, autrement l'un des moments de l'équation de Boltzmann serait infini, ce qui est physiquement impossible.
- Le second terme se calcule facilement en admettant l'hypothèse de divergence nulle des forces de volume (dans notre cas cette force est due seulement au champ électrique  $\vec{E}$ ) :

$$\frac{\partial F_x}{\partial v_x} = \frac{\partial F_y}{\partial v_y} = \frac{\partial F_z}{\partial v_z} = 0 \quad (\text{II.9})$$

L'équation (II.7) s'écrit alors :

$$C \equiv \int_v \psi \frac{F_i}{m_\alpha} \frac{\partial f_\alpha}{\partial v_i} dv = - \frac{n_\alpha}{m_\alpha} \overline{F_i} \frac{\partial \psi}{\partial v_i} \quad (\text{II.10})$$

En reportant les équations (II.5), (II.6) et (II.10) dans l'équation (II.4), on obtient l'évolution de la grandeur macroscopique de la variable microscopique  $\psi$  :

$$\frac{\partial(n_\alpha \bar{\psi})}{\partial t} - n_\alpha \frac{\partial \bar{\psi}}{\partial t} + \nabla_r \cdot (n_\alpha \bar{\psi} v_i) - n_\alpha v_i \cdot \nabla_r \bar{\psi} - n_\alpha \frac{F}{m} \cdot \nabla_v \bar{\psi} = \int_v \bar{\psi} \left( \frac{\partial f_\alpha}{\partial t} \right)_{coll.} dv \quad (\text{II.11})$$

L'équation (II.11) est appelée équation générale de transport, et pour obtenir les équations hydrodynamiques, il suffit de remplacer  $\bar{\psi}$  par 1 pour l'équation de transport de particules, par  $mv$  pour le transport de quantité de mouvement, et  $\frac{mv^2}{2}$  pour le transport d'énergie.

Dans la suite de ce document et par souci d'alléger l'écriture des équations, nous avons omis d'ajouter l'indice  $\alpha$  relatif à l'espèce de particules considérée.

### II.2.1. Équation de continuité : équation de conservation de la densité de particules

Cette équation représente le 1<sup>er</sup> moment hydrodynamique ; le moment d'ordre zéro en  $v$ . Elle correspond à la variable microscopique :  $\bar{\psi} = v^0 = 1$ , de sorte que [4] :

$$\frac{\partial \bar{\psi}}{\partial t} = 0, \quad \frac{\partial \bar{\psi}}{\partial v} = 0, \quad \frac{\partial \bar{\psi}}{\partial r} = 0 \quad (\text{II.12})$$

L'équation (II.11) se réduit alors à :

$$\frac{\partial n}{\partial t} + \nabla_r \cdot (n \bar{u}) = \int_v \left( \frac{\partial f}{\partial t} \right)_{coll} dv \quad (\text{II.13})$$

Cette équation décrit le transport de particules (le flux de particules plus précisément) sous l'effet des différentes actions qu'elles subissent (champ de force  $F$  et collisions). Cette équation est appelée équation de conservation du nombre de particules ou équations de continuité. Elle est de nature scalaire (tenseur d'ordre zéro).

Le membre de droite de l'équation (II.13) traduit le rôle des collisions. Il correspond au terme de génération de particules et peut se mettre sous la forme suivante [26] :

$$\int_v \left( \frac{\partial f_\alpha}{\partial t} \right)_{collision} dv = \left( \frac{\partial n_\alpha}{\partial t} \right)_{collision} \quad (\text{II.14})$$

Il peut exprimer l'ionisation, l'attachement, la recombinaison, etc. Pour rendre ce terme source explicite, on définit des fréquences de créations et de disparition des particules. Ces fréquences dépendant essentiellement de la nature du gaz, de la fonction de distribution des espèces entrant en collisions, et de la pression [19].

Si on note par :

$\nu_i$  : La fréquence d'ionisation (électrons-ions positifs),

$\nu_a$  : La fréquence d'attachement (électrons-ions négatifs),

$\nu_{detach}$  : Fréquence de détachement,

$k_{recomb(e-i)}, k_{recomb(i-i)}$  : La fréquence de recombinaison (électrons-ions positifs (e-i), ions négatifs-ions positifs (i-i), et

$n_e, n_p, n_n$  les densités des électrons, des ions positifs et des ions négatifs, le terme source s'écrira d'après [23]:

$$\text{Dans le cas des électrons} \quad S_e = (\nu_i - \nu_a)n_e + \nu_{detach}n_n - k_{recomb(e-i)}n_en_p \quad (\text{II.15})$$

$$\text{Dans le cas des ions positifs} \quad S_i = \nu_in_e - k_{recomb(e-i)}n_en_p - k_{recomb(i-i)}n_in_p \quad (\text{II.16})$$

$$\text{Dans le cas des ions négatifs} \quad S_i = \nu_in_e - k_{recomb(i-i)}n_in_p - \nu_{detach}n_p \quad (\text{II.17})$$

Les électrons sont créés par ionisation et disparaissent par attachement et recombinaison.

## II.2.2. Équation de la quantité de mouvement : équation de conservation du moment

Cette équation représente le 2<sup>ème</sup> moment hydrodynamique; le moment d'ordre un en  $v$ , dans ce cas elle correspond à la variable microscopique :  $\psi = mv^1 = mv$ , de sorte que [4]:

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = 0 \quad \frac{\partial \psi}{\partial r} = 0 \quad \frac{\partial \psi}{\partial v} = m\underline{I} = m\delta_{ij} \quad (\text{II.18})$$

Où  $\underline{I}$  est le tenseur identité d'ordre deux; tenseur qui a pour composantes  $\delta_{ij}$  et qui n'est autre que le symbole de Kronecker ( $\delta_{ij} = 1$  si  $i = j$ ,  $\delta_{ij} = 0$  si  $i \neq j$ ). L'équation (II.11) s'écrira donc :

$$\frac{\partial}{\partial t} nm\bar{v} + \nabla_r \cdot (nm\bar{v}\bar{v}) - n\bar{F} \cdot \underline{I} = \int_v mv \left( \frac{\partial f}{\partial t} \right)_{coll} dv \quad (\text{II.19})$$

C'est une relation de nature vectorielle (tenseur d'ordre 1). Pour évaluer la dyade (tenseur d'ordre 2)  $\overline{v\overline{v}}$ , posons :

$$v = u + w \quad (\text{II.20})$$

Où  $w$  est la vitesse d'une particule relativement à la vitesse moyenne ( $\overline{v} = u$ ) de l'ensemble des particules. La vitesse  $w$  est donc une vitesse dont la moyenne est nulle ( $\overline{w} = 0$ ). Dans le langage statistique,  $w$  est une vitesse centrée par rapport à sa valeur moyenne.

Nous obtenons alors, compte tenu de l'équation (II.20) :

$$nm\overline{v\overline{v}} = nm.\overline{ww} + 2\overline{uw} + \overline{uu} \quad (\text{II.21})$$

Comme  $\overline{uw} = \overline{w}u = 0$ , et  $\overline{uu} = uu$ , la relation précédente peut s'écrire :

$$nm\overline{v\overline{v}} = P + nm\overline{uu} \quad (\text{II.22})$$

où  $P = nm\overline{ww}$  est le tenseur d'ordre 2 de pression cinétique.

L'équation (II.19) peut alors prendre la forme :

$$\frac{\partial}{\partial t} \overline{nm\overline{u}} + \nabla_r P + \nabla \cdot (nm\overline{uu}) - n\overline{F} = \int_v m v \left( \frac{\partial f}{\partial t} \right)_{coll} dv \quad (\text{II.23})$$

Compte tenu des propriétés du gradient :  $\nabla \cdot (nuu) = (nu \cdot \nabla)u + u(\nabla \cdot nu)$ , l'équation précédente peut se mettre sous la forme :

$$\frac{\partial}{\partial t} \overline{nm\overline{u}} + \nabla_r P + nm(u \cdot \nabla)u + mu(\nabla \cdot nu) - n\overline{F} = \int_v m v \left( \frac{\partial f}{\partial t} \right)_{coll} dv \quad (\text{II.24})$$

- $F$  est la force extérieure totale exercée sur les particules, qui peut être due au champ électrique et/ou au champ magnétique. Dans le cas qui nous intéresse, on considérera seulement le champ électrique.
- $P$  est le tenseur de pression cinétique qui peut induire une force non négligeable en présence de fort gradient. Il représente la densité d'énergie d'agitation thermique [19]. Il s'écrit sous forme intégrale comme:

$$P = m \int (v-u)(v-u) f(r, v, t) dv \quad (\text{II.25})$$

Le terme de droite de l'équation (II.24) décrit la variation totale de la quantité de mouvement par unité de temps sous l'effet des forces extérieures, de la pression cinétique P et des collisions. Comme pour l'équation de continuité, on définit ici aussi une fréquence de transfert de quantité de mouvement  $\nu_m$ . Ce terme se réduit à la forme simple :  $nm\nu_m$ .

En portant l'équation (II.15) dans l'équation (II.24), on obtient :

$$nm \left( \frac{\partial}{\partial t} + (\bar{v} \cdot \nabla_r) \right) \cdot \bar{v} = n\bar{F} - \nabla_r P - Sm\bar{v} + nm\nu_m \bar{v} \quad (\text{II.26})$$

$\nabla_r P$  représente une force par unité de volume.

### II.2.3. Équation de transport de l'énergie cinétique

Cette équation représente le 3<sup>er</sup> moment hydrodynamique ; le moment d'ordre deux en  $v$ , dans ce cas elle correspond à la variable microscopique :  $\psi = \frac{mv^2}{2}$ , de sorte que [4]:

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = 0 ; \frac{\partial \psi}{\partial r} = 0 ; \frac{\partial \psi}{\partial v} = mv \quad (\text{II.27})$$

L'équation (II.11) s'écrit alors :

$$\frac{\partial}{\partial t} \left( \frac{1}{2} nm\bar{v}^2 \right) + \nabla \left[ \frac{1}{2} nm\bar{v}v^2 \right] - n\bar{F}v = \int \frac{1}{2} mv^2 \left( \frac{\partial f}{\partial t} \right)_{coll} dv \quad (\text{II.28})$$

qui une relation de nature scalaire (tenseur d'ordre zéro).

On peut écrire l'équation de transport du flux d'énergie thermique Q (moment d'ordre 3), et ainsi de suite pour les moments supérieurs, ce qui conduit à engendrer un nombre infini d'équations hydrodynamiques. En principe et pour obtenir une solution générale du problème, il faut résoudre une infinité de moments de l'équation de Boltzmann. Ceci étant impossible, alors on a recours à des hypothèses simplificatrices. Ces hypothèses permettent de limiter les nombres de moments de l'équation de Boltzmann. En effet Les équations décrites

précédemment présentent l'inconvénient de former un système indéterminé. En somme, l'évolution d'une variable donnée est toujours dépendante d'une autre variable dont l'ordre tensoriel lui est supérieur d'une unité. On dit qu'un tel système constitue une hiérarchie. Cette hiérarchie des équations hydrodynamiques résulte de l'existence de gradients dans l'espace des positions, et elle apparaît sous la forme d'une divergence d'un tenseur d'un ordre supérieur d'une unité à l'ordre tensoriel de l'équation hydrodynamique considérée. Pour briser cette dépendance hiérarchique, il faut poser une hypothèse simplificatrice sur le tenseur d'ordre le plus élevé apparaissant dans l'équation de transport du moment le plus élevé que l'on désire conserver, procédure communément appelée fermeture des équations de transport.

Dans notre travail on s'est arrêté au 3<sup>ème</sup> moment (ordre 2) pour les électrons et au 2<sup>ème</sup> moment (ordre 1) pour les ions, ce qui est généralement suffisant dans la pratique et plus particulièrement pour les décharges capacitives.

## II.3. FERMETURE DES ÉQUATIONS FLUIDES

### II.3.1. Approximation dérive-diffusion

En se mettant dans nos conditions de travail (fréquence RF, champ électrique...), des hypothèses simplificatrices sont envisagées pour rendre possible la résolution numérique des moments de l'équation de Boltzmann. Ces approximations se résument à :

- Une première approximation serait de négliger l'énergie de dérive (dirigée) devant l'énergie thermique. Ceci est valable dans le plasma où le champ électrique est relativement faible (quelques V/cm), et que l'énergie cinétique est pratiquement égale à l'énergie thermique.
- La comparaison entre la fréquence de collisions entre particules ou la fréquence d'échange de quantité de mouvement et la variation temporelle du flux de particules qui suit la variation de l'excitation RF, mène à la conclusion suivante :

$$\frac{\partial(n|\bar{v}|)}{\partial t} \ll n\nu_m |\bar{v}| \quad (\text{II.29})$$

Par exemple, pour les électrons dans un plasma d'argon ( $\mu_e \approx 10^6 \text{ cm}^2 \text{ v}^{-1} \text{ s}^{-1}$ ,  $e = 1,6 \cdot 10^{-19} \text{ C}$ ,  $m_e = 9,1 \cdot 10^{-31}$ ) à 1 torr, la fréquence de transfert de quantité de mouvement est  $\nu_m = \frac{e}{m\mu_e} = 10^9 \text{ s}^{-1}$ . La fréquence d'excitation RF peut aller jusqu'à quelques MHz.

L'approximation est alors justifiée même à hautes fréquences.

- Une troisième et dernière approximation consiste à considérer le tenseur de pression cinétique diagonal et isotrope.  $P = pI$ , où  $p$  est la pression scalaire et  $I$  est le tenseur unité.

En utilisant ces trois approximations, les équations de transport données précédemment prennent les formes simplifiées ci-dessous :

i) *Équation de transfert de quantité de mouvement :*

$$n\bar{v} = n \left( \frac{q}{mV_m} \right) E - \frac{1}{mV_m} \nabla(nk_B T) \quad (\text{II.30})$$

Les forces extérieures sont représentées dans ce cas par le champ électrique uniquement.

Sachant que la mobilité des particules de l'espèce  $\alpha$  est donnée par :  $\mu_\alpha = \left( \frac{q_\alpha}{m_\alpha V_m} \right)$ , et le

coefficient de diffusion des particules de l'espèce  $\alpha$  s'exprime comme :  $D_\alpha = \left( \frac{k_B T_\alpha}{m_\alpha V_m} \right)$ . De

plus, ces deux coefficients sont reliés par la relation d'Einstein donnée par :

$$\frac{D_e}{\mu_e} = \frac{k_B T_e}{e} = \frac{2\mathcal{E}}{3e}$$

L'équation (II.30) s'écrit finalement en tenant compte des expressions de  $\mu_\alpha$  et  $D_\alpha$  comme :

$$n\bar{v} = n\mu_\alpha E - D_\alpha \nabla(n_\alpha) = \phi_\alpha \quad (\text{II.31})$$

Cette équation représente l'approximation de dérive-diffusion (DDA), énoncée en 1986 par Graves and Jensen [24], elle est à la base de beaucoup de modèles physiques notamment dans les modèles fluides. Elle montre que le flux de particules est composé d'un terme de dérive proportionnel au champ électrique et d'un terme de diffusion.

Cette approximation est justifiée dans le régime collisionnel quand l'énergie orientée est négligeable comparée à l'énergie thermique et quand les variations du champ électrique sont petites sur un temps de collision.

ii) *Équation de transport de l'énergie* : compte tenu des hypothèses simplificatrices citées ci-dessus, on obtient [19] :

$$\frac{\partial n_e \bar{\mathcal{E}}}{\partial t} + \frac{5}{3} \nabla \cdot (n_e \bar{\mathcal{E}} \bar{v}) + \nabla \cdot Q - n_e q \bar{v} \cdot E = -n_e \nu_e \bar{\mathcal{E}} \quad (\text{II.32})$$

où  $\bar{\mathcal{E}}$  désigne l'énergie moyenne des électrons,  $\nu_e$  la fréquence d'échange d'énergie par collisions,  $\mathbf{E}$  le champ électrique et  $Q$  le flux de chaleur. Ce dernier terme dépend des moments supérieurs de l'équation de Boltzmann.

Une relation de fermeture du système à l'ordre 3 est de considérer que le flux de chaleur est proportionnel au gradient de température. Le facteur de proportionnalité est le coefficient de conductivité thermique ( $K$ ) des électrons dans le gaz qui est lui-même proportionnel à la densité des électrons et à leur coefficient de diffusion dans le gaz. Ces coefficients s'écrivent :

$$Q = K \nabla T \quad \text{avec} \quad K = \frac{5}{3} n_e D_e$$

L'équation (II.32) peut se mettre sous la forme suivante :

$$\frac{\partial n_e \bar{\mathcal{E}}}{\partial t} + \nabla \cdot \left( \frac{5}{3} n_e \bar{\mathcal{E}} \bar{v} + Q \right) - n_e q \bar{v} \cdot E = -n_e \nu_e \bar{\mathcal{E}} \quad (\text{II.33})$$

Telle que :  $\frac{5}{3} n_e \bar{\mathcal{E}} \bar{v} + Q = -\frac{5}{3} \mu_e \varepsilon n_e E - \frac{5}{3} D_e \varepsilon \nabla n_e + \frac{5}{3} D_e n_e \nabla \varepsilon = -\mu_e n_e \varepsilon E - D_e \nabla (n_e \varepsilon) = \Gamma_\varepsilon$

Dans l'expression précédente, nous avons posé :  $\mu_\varepsilon \equiv \frac{5}{3}\mu_e$  et  $D_\varepsilon \equiv \frac{5}{3}D_e$

L'équation de conservation de l'énergie électronique moyenne s'écrit finalement [24] :

$$\frac{\partial(n_e \mathcal{E})}{\partial t} + \nabla \cdot \Gamma_\varepsilon = -\Gamma_\varepsilon E + \frac{\delta(n_e \mathcal{E})}{\delta t} \quad (\text{II.34})$$

Le terme  $\frac{\delta(n_e \mathcal{E})}{\delta t}$  traduit le transfert d'énergie dû aux processus collisionnels. On Notera que cette équation est largement utilisée dans les modélisations fluides des décharges.

Contrairement à l'équation de transport de la quantité de mouvement, on a conservé le terme en  $\left(\frac{\partial}{\partial t}\right)$  dans l'équation de transfert d'énergie. Ceci est dû au fait que le temps de relaxation de l'énergie est plus grand que celui de la relaxation de la quantité de mouvement. Ce qui conduit à une fréquence d'échange d'énergie plus petite que celle de la quantité de mouvement. Cette fréquence risque d'être du même ordre de grandeur que la pulsation RF du champ électrique.

### II.3.2. Approximation du champ local et de l'énergie locale

Un modèle formé par les équations de continuité des électrons et des ions et les équations de transport de quantité de mouvement des électrons et des ions, considère l'hypothèse du champ local. Celle-ci consiste à calculer l'ensemble des coefficients électroniques en résolvant l'équation de Boltzmann pour les électrons en régime permanent, sans gradient spatial et sous un champ uniforme. Tous les coefficients de transport et de réactions en un point donné et en un instant donné ne dépendent alors plus que du champ réduit  $E/N$  ; ratio de l'intensité du champ électrique sur la densité du gaz, ou encore de  $\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) / p$  ; où  $\mathbf{E}(\mathbf{r}, t)$  est le champ électrique au point  $r$  et à l'instant  $t$  et  $p$  est la pression du gaz. Autrement dit, la FDE au point  $(r, t)$  est considérée la même que pour un champ réduit uniforme.

Les coefficients de transport dépendent de (E/P) et non de l'énergie. Cette hypothèse est plus valable pour les ions que pour les électrons. En effet, la mobilité ionique est faible à cause de leurs masses. L'énergie gagnée par les ions dans le champ électrique est dissipée

« localement » par collision avec les autres espèces. Cette approche n'est pas complètement vraie pour les électrons. A cause de leurs grandes mobilités les électrons peuvent gagner de l'énergie à un endroit et la dissiper plus loin, notamment pour les électrons au voisinage de la gaine, zone où le champ est très fort. Un modèle plus réaliste consiste en la résolution du troisième moment de l'équation de Boltzmann pour les électrons. C'est l'équation de transport de l'énergie. L'hypothèse de fermeture dans ce cas s'appelle approximation de l'énergie locale.

Finalement et pour compléter le modèle, on détermine le champ électrique à travers l'équation de Poisson.

$$\nabla \cdot E(x) = \frac{e}{\epsilon_0} [n_i(x) - n_e(x)] \quad (\text{II.35})$$

où  $e$  est la charge élémentaire,  $\epsilon_0$  est la permittivité du milieu (proche de celle du vide) alors que  $[n_i(x) - n_e(x)]$  correspond à la charge d'espace nette à une position  $x$  donnée.

## II.4. RÉCAPITULATIF DES ÉQUATIONS

Nous allons regrouper dans ce paragraphe l'ensemble des équations de transport du modèle fluide régissant un gaz faiblement ionisé.

Le modèle fluide unidimensionnel se résume aux équations suivantes :

### Pour les électrons :

- $\frac{\partial n_e}{\partial t} + \frac{\partial \phi_e}{\partial x} = S_e, S_e = (v_i - v_a)n_e + v_{\text{detach}}n_n - k_{\text{recomb}(e-i)}n_en_p$
- $\phi_e = n_e \langle v_e \rangle = -e\mu_e E n_e - D \frac{\partial n_e}{\partial x}$
- $\frac{\partial (n_e \mathcal{E})}{\partial t} + \left(\frac{5}{3}\right) \frac{\partial \phi_\epsilon}{\partial x} = S_\epsilon, S_\epsilon = -e\phi_e \cdot E - n_e L(\epsilon), \phi_\epsilon = -n_e \epsilon \mu_e E - D_\epsilon \frac{\partial (n_e \mathcal{E})}{\partial x}$

**Pour les ions positifs**

- $\frac{\partial n_p}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} \phi_p = S_p, S_p = v_i n_e - k_{recomb(e-i)} n_e n_p - k_{recomb(i-i)} n_n n_p$
- $\phi_p = n_i v_i = +e \mu_p E n_p - D_p \frac{\partial n_p}{\partial x}$

**Pour les ions négatifs**

- $\frac{\partial n_n}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} \phi_n = S_n, S_n = v_a n_e - k_{recomb(i-i)} n_n n_p - v_d n_n$
- $\phi_n = +e \mu_n E n_n - D_n \frac{\partial n_n}{\partial x}$

**Pour le champ électrique**

- $\frac{\partial^2}{\partial x^2} V = -\frac{e}{\epsilon_0} [n_p - n_e - n_n], \quad E = -\frac{\partial V}{\partial x}$

**II.5 CONCLUSION**

Certaines hypothèses simplificatrices ont été introduites afin de permettre une résolution moins fastidieuse et cela sans altérer la réalité des phénomènes physiques de la décharge. Malgré les simplifications apportées, les équations restent très couplées, reflétant ainsi la complexité des phénomènes physiques qui gouvernent l'évolution de chaque gaz. En effet, chacun des paramètres définissant l'état du fluide (densité, vitesse, énergie) dépend lui-même d'autres paramètres mathématiques par l'intermédiaire de leur gradient local. L'imbrication de tous les phénomènes dans les systèmes d'équations fermés conduit à un modèle très sensible à la moindre variation de l'un des paramètres du gaz. Ainsi, le chapitre suivant sera entièrement dédié à la présentation et au développement de la méthode numérique utilisée pour la résolution du modèle fluide.

# CHAPITRE III :

## TRAITEMENT NUMERIQUE

---

### III.1. INTRODUCTION

Les équations aux dérivées partielles (EDP) sont omniprésentes dans toutes les sciences, puisqu'elles apparaissent aussi bien en dynamique des structures, mécanique des fluides que dans les théories de la gravitation ou de l'électromagnétisme.

La majorité de ces équations ne peuvent être traitées par des méthodes mathématiques classiques (analytiques). Ainsi, l'approche numérique constitue une alternative remarquable et peut même s'avérer préférable.

Le traitement numérique passe par la discrétisation qui permet de passer d'un système d'équations différentielles à un système d'équations algébriques, et cela en préservant au maximum l'information physique contenue dans le système initial. Pour cela il existe trois grande famille de méthodes numériques que sont : (1) les différences finies, (2) les volumes finis et (3) les éléments finis.

La méthode développée dans le cadre de ce mémoire, consiste à discrétiser les équations de transport couplées à l'équation de Poisson par la méthode des différences finies [10]. Celle-ci consiste à remplacer les dérivées partielles par des différences divisées ou combinaisons de valeurs ponctuelles de la fonction en un nombre fini de points discrets ou nœuds du maillage. La méthode des différences finies repose sur deux notions : la discrétisation des operateurs de dérivation ou différentiation et la convergence du schéma numérique ainsi obtenu. Elle présente les avantages suivants : grande simplicité d'écriture et faible coût de calcul en plus de la considération des non-linéarités. Ces inconvénients sont :

limitation à des géométries simples et difficultés de prise en compte des conditions aux limites de type Neumann.

Dans les paragraphes suivants, nous allons donner un aperçu succinct de la méthode de discrétisation de notre modèle. Nous décrirons par la suite le domaine à modéliser, et on rappellera les hypothèses et les quelques approximations utilisées. En dernier lieu, nous présenterons les conditions initiales et aux limites utilisées.

### III.2. LA MÉTHODE DE DISCRÉTISATION

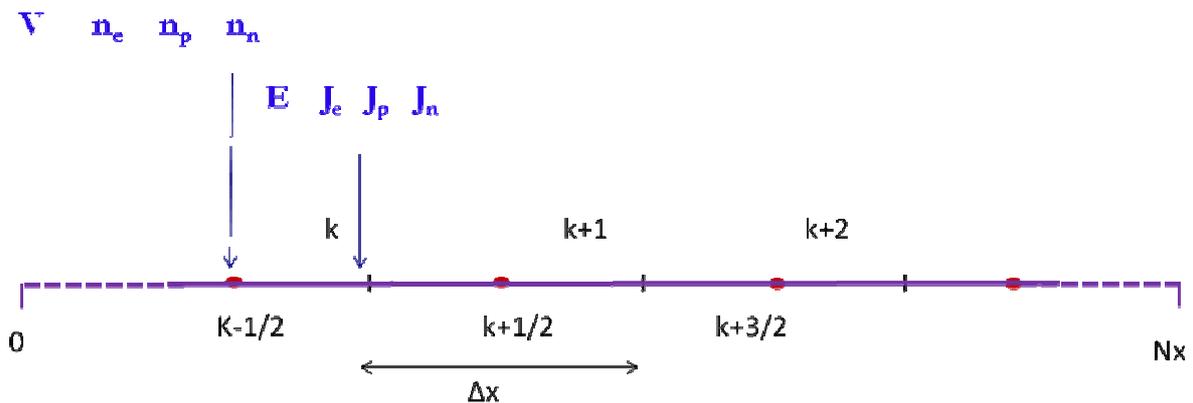
La résolution des équations de transport et de Poisson par la méthode des différences finies requière leur discrétisation spatiale et temporelle. Rappelons que la forme des équations de conservation précédemment établies peut se mettre sous la forme canonique suivante :

$$\frac{\partial A}{\partial t} + \text{div}(A) = S \quad (\text{II.1})$$

Pour cela, l'espace de la décharge est subdivisé en mailles élémentaires. Dans notre cas, le maillage que nous avons effectué est un maillage 1D similaire à celui donné sur la figure (III.1). 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  $\Delta x$  suffisamment petit pour permettre de bien résoudre les variations spatiales des différentes caractéristiques de la décharge pour des distances inter-électrodes ( $L_x$ ) de l'ordre du centimètre. et où  $N_x = \frac{L_x}{\Delta x}$  représente le nombre de nœuds dans l'espace inter électrode.

Le domaine est donc défini par l'intervalle  $[0, N_x]$ . Les nœuds sont représentés par les points  $X_k$  avec  $X_k = (k) \times \Delta x$  et  $k \in [0, N_x]$  et le centre des nœuds est représenté par la coordonnée  $X\left(k - \frac{1}{2}\right)$  qui représente le milieu du segment  $[X_{k-1}, X_k]$ .



**Figure III.1** : Représentation schématique de la discrétisation pour des différences finies à 1D.

Cette méthode 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.

Le schéma de discrétisation numérique utilisé est le schéma exponentiel de Scharfetter–Gummel pour le gradient spatial [27,28] et l'algorithme de Crank–Nicholson pour les dérivées temporelles. L'algorithme semi-implicite de Crank–Nicholson présente l'avantage de surmonter les restrictions fortes sur le pas de temps d'intégration, d'habitude imposé par des algorithmes explicites, et donc ne plus être limité par la condition de convergence de Courant–Friedrichs–Lewy (CFL).

La matrice obtenue après discrétisation des équations de transport et de l'équation de Poisson est tridiagonale et sa résolution est effectuée par la méthode itérative de Newton. Cette méthode couple les équations de transport et de Poisson d'une manière autocohérente.

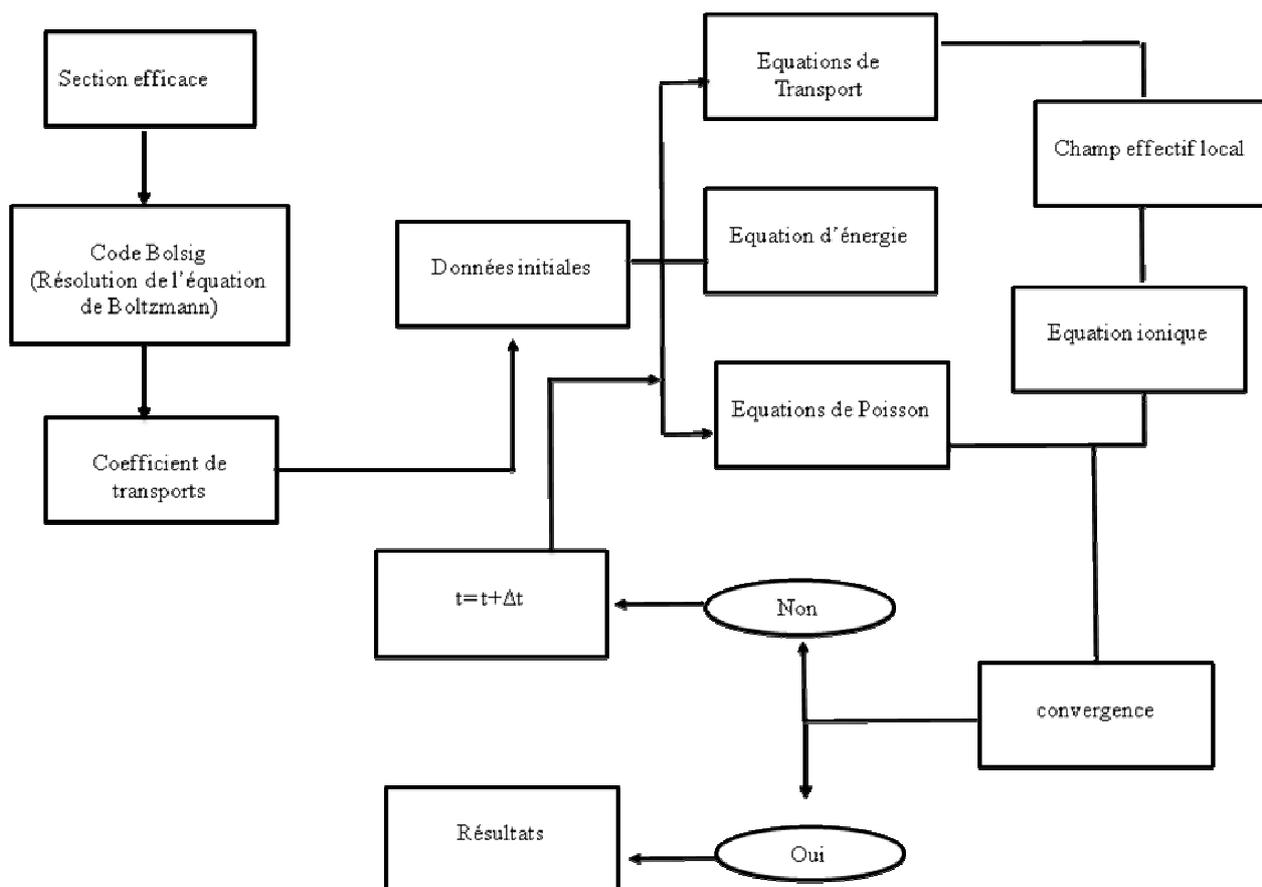
L'originalité de la méthode itérative réside dans la prise en compte de tous les termes non linéaires de l'équation de Boltzmann et ce sans qu'il y ait de problèmes de convergence et de stabilité.

### III.3. CRITERE DE CONVERGENCE

En raison des conditions initiales éloignées de la solution recherchée et aussi en raison des fluctuations statistiques, la convergence des résultats ne peut être définie par la comparaison entre les résultats obtenus par deux cycles RF successifs. Il est nécessaire de suivre l'évolution des résultats sur un nombre de cycles suffisamment important.

Cela a été fait en considérant l'évolution temporelle des densités des espèces chargées au centre de la décharge, à l'instant initial et au premier cycle, la densité plasma commence par une valeur initiale choisie arbitrairement mais respectant la neutralité électrique du plasma. Après un temps assez long, les densités de chaque espèce se stabilisent et deviennent indépendantes du temps. Le temps nécessaire pour atteindre la convergence caractérisée par un régime permanent trouvé (à environ 5% près) est de l'ordre de 50  $\mu$ s. Sachant que pour la fréquence choisie (13.56 MHz), la durée d'un cycle est de  $7.37 \times 10^{-2}$   $\mu$ s, le nombre de cycles minimum pour atteindre la convergence dans nos conditions de simulation est d'au moins 680 cycles.

### III.4. SCHÉMA RÉCAPITULATIF DU CODE DE CALCUL



### III.5. GÉOMETRIE DU RÉACTEUR À MODÉLISER

Toute modélisation nécessite, au préalable, la définition du domaine géométrique précis sur lequel elle va être effectuée. Les gaz étudiés sont confinés dans un réacteur à couplage capacitif excité par une décharge RF. Dans notre cas, les deux électrodes conductrices planes et parallèles sont symétriques ; elles sont placées dans une enceinte sous vide dans laquelle est introduit un gaz (ou un mélange de gaz). Une électrode (la cathode) est alimentée par une tension alternative alors que l'anode est reliée à la masse, comme c'est illustré sur la figure III.2. La dimension de l'espace inter électrodes est de l'ordre de quelques centimètres.

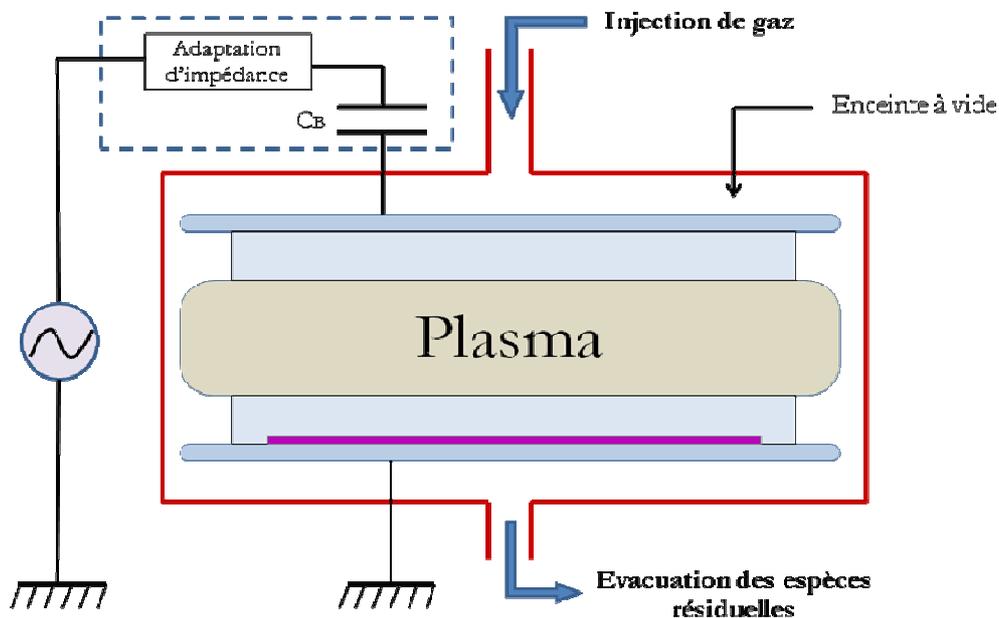


Figure III.2 : Représentation schématique du réacteur étudié

### III.6. LES HYPOTHESES CONSIDEREES

Pour pouvoir résoudre notre système d'équations, nous avons émis quelques hypothèses simplificatrices. Dans ce qui suit nous allons en faire un petit résumé :

- 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.

- Les températures électronique et ionique sont supposées uniformes: On se place dans l'approximation isotherme.
- Le milieu se comporte 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.
- Le processus d'émission d'électrons secondaires (issus du bombardement ionique et accélérés dans la gaine « processus de lueur négative ») est inexploré ( $\gamma = 0$ ), ainsi que l'influence d'un champ magnétique ( $B = 0$ ).

### III.7. LES CONDITIONS INITIALES

Pour des conditions de tension RF élevées et de pression basse, une densité électronique suffisamment haute doit être utilisée dans le jeu de conditions initial pour assurer l'allumage de la décharge.

La densité électronique agit comme un paramètre très sensible qui assure le développement rapide d'une solution physique. En fait, un petit nombre d'électrons peut être rapidement éliminé du volume de décharge en raison d'une combinaison de plusieurs facteurs : champs électriques élevés, haute mobilité électronique et les flux aux frontières assez élevés. Dans ces cas, l'initiation de la décharge peut être réalisée si la densité électronique initiale est suffisamment élevée (environ  $10^6$ - $10^7$  cm<sup>-3</sup>).

### III.8. LES CONDITIONS AUX LIMITES

Le modèle de décharge présenté dans ce chapitre est associé à un ensemble de conditions aux limites qui dépendent des frontières considérées et des phénomènes qu'elles représentent. Elles ne sont pas toujours évidentes en raison de la complexité des phénomènes physique aux extrémités du plasma. Néanmoins les conditions les plus utilisées dans la littérature portent sur le flux des espèces ou sur la valeur de la densité sur les électrodes pour les conditions de

types de Dirichlet, ou encore la valeur du gradient de la densité des espèces chargées, pour les conditions de type Neumann. Pour notre modèle c'est ce qui a été pris en compte :

--Pour l'équation de Poisson dans le cas d'une paroi métallique :

$$V(\text{électrodes à la masse}) = 0$$

$$V(\text{électrodes alimentées}) = V_d, V_d = V_{RF} \cos(2\pi\nu_{RF}t)$$

--Pour le flux d'électrons sur les parois :

$$\Gamma_e = \frac{1}{4} n_e V_{e,th}$$

$V_{e,th}$  est la vitesse moyenne thermique des électrons, elle s'exprime comme suit :

$$\overline{V_{e,th}} = \sqrt{\frac{8k_B T_e}{\pi m_e}}$$

--Pour le flux d'ions sur les parois :

$$\frac{\partial n_i}{\partial r} = 0$$

### III.9. CONCLUSION

Dans ce chapitre, nous avons présenté les différentes techniques numériques utilisées pour la résolution numérique de notre modèle fluide auto-cohérent de notre décharge électrique. Nous avons tenté de donner les raisonnements les plus clairs possibles. Le chapitre suivant sera consacré à la présentation des résultats obtenus ainsi que leurs interprétations.

# CHAPITRE IV

## RESULTATS ET DISCUSSIONS

---

### IV.1. INTRODUCTION

Dans ce présent chapitre nous allons présenter les résultats obtenus de notre simulation ainsi que leurs interprétations. Dans notre travail, nous avons considéré deux types de gaz : un gaz atomique qu'est l'argon (Ar), et deux gaz moléculaires en l'occurrence le méthane (CH<sub>4</sub>) pour illustrer les décharges dans un plasma électropositif et le silane (SiH<sub>4</sub>) pour illustrer les décharges dans un plasma électronégatif.

Les résultats sont exprimés en termes de variation dans l'espace inter-électrodes, des densités de particules chargées, du terme source et de variation spatio-temporelle du champ électrique, du coefficient d'ionisation, du coefficient d'attachement et du chauffage électronique

Nous avons exploité cette simulation pour étudier, entre autres, les effets de la pression, de la température du gaz, de la fréquence et de la tension appliquée sur le comportement de la décharge.

Avant de passer à l'exposer et à l'interprétation des résultats obtenus, nous allons résumer dans le paragraphe suivant les données et les paramètres de base de la simulation.

## IV.2. LES PARAMÈTRES STANDARDS DE LA DÉCHARGE

Paramètres de la décharge	Valeurs
Température du gaz ( $T_g$ )	300 K
Distance inter-électrode ( $d$ )	3 cm
Pression du gaz ( $P$ )	0.1 Torr
Tension appliquée ( $V_{RF}$ )	100 V
Fréquence RF ( $F_{RF}$ )	13.56 MHz
Densité électronique initiale ( $n_0$ )	$1 \times 10^7 / \text{cm}^3$

*Tableau IV.1 : Les paramètres standards de la décharge.*

Il est à noter que dans le logiciel SIGLO-RF, l'utilisateur peut changer à sa guise les paramètres standards de la simulation.

## IV.3. PRÉSENTATION DES GAZ ÉTUDIÉS

### IV.3.1. Gaz atomique : argon

Le gaz monoatomique traité lors de cette simulation est l'argon (Ar). Comme les autres gaz rares ou nobles, éléments de la colonne 18 du tableau périodique, l'argon est inerte chimiquement. Sa dernière couche électronique est saturée ce qui rend très difficile sa réaction avec d'autres éléments. Ceci lui permet d'être utilisé en général comme gaz vecteur dans les procédés de pulvérisations et de dépôt de couches minces.

Nous n'avons considéré, pour ce gaz, que le processus d'interaction des neutres avec les électrons de premier ordre 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  $Ar^+$  :

	Réaction	Réaction chimique	Seuil d'énergie
1	Élastique	$\text{Ar}$	
2	Excitation	$\text{Ar} \rightarrow \text{Ar}^*$	11.5eV
3	Ionization	$\text{Ar} + e \rightarrow \text{Ar}^+ + 2e$	15.8 eV

*Tableau IV.2. : Représentation des réactions chimiques et leurs seuils d'énergies pour l'argon. D'après A.V. Phelps [29].*

### IV.3.2. Gaz moléculaires

#### IV.3.2.1. Gaz électropositif : le méthane

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

Le précurseur carboné utilisé pour ce genre de dépôt est le méthane ( $\text{CH}_4$ ). 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  $\text{CH}_4$ ,  $\text{H}_2$ ,  $\text{C}_2\text{H}_2$ ,  $\text{C}_2\text{H}_6$ ,  $\text{C}_2\text{H}_4$ ,  $\text{C}_3\text{H}_8$ , des ions positifs  $\text{CH}^{4+}$ ,  $\text{CH}^{3+}$ ,  $\text{CH}^{5+}$ ,  $\text{C}_2\text{H}^{5+}$ , des ions négatifs  $\text{H}^-$ ,  $\text{CH}^{2-}$ , des fragments moléculaires comme le  $\text{CH}_3$  et le  $\text{C}_2\text{H}_5$  ainsi que des électrons [10].

Ceci nous amène à considérer plusieurs réactions entre les différentes espèces présentes dans le plasma de méthane. Dans notre modèle de décharge, nous avons considéré le jeu de réactions résumé dans le tableau (IV.3) ci-dessous :

	Réaction	Réaction chimique	Seuil d'énergie
1	Élastique	$\text{CH}_4$	
2	Excitation.vib	$\text{CH}_4 \rightarrow \text{CH}_4(\text{V24})$	0.162eV
3	Excitation. vib	$\text{CH}_4 \rightarrow \text{CH}_4(\text{V13})$	0.361 eV
4	Excitation.diss	$\text{CH}_4 \rightarrow \text{CH}_4^*$	9 eV
5	Excitation.diss	$\text{CH}_4 \rightarrow \text{CH}_4^*$	10 eV
6	Excitation.diss	$\text{CH}_4 \rightarrow \text{CH}_4^*$	11 eV
7	Excitation.diss	$\text{CH}_4 \rightarrow \text{CH}_4^*$	12 eV
8	Ionization.diss	$\text{CH}_4 \rightarrow \text{CH}_4^+$	12.6 eV
9	Ionization.Diss	$\text{CH}_4 \rightarrow \text{H} + \text{CH}_3^+$	14.3 eV
10	Attachment.Disso	$\text{CH}_4 \rightarrow \text{CH}_3 + \text{H}^-$	7.7eV
11	Attachment.dissocia	$\text{CH}_4 \rightarrow \text{H}_2 + \text{CH}_2^-$	9eV

*Tableau IV.3. : Représentation des réactions chimiques et leurs seuils d'énergies pour le méthane. D'après Morgan [29]*

#### IV.3.2.2. Gaz électronégatif : le Silane

Les plasmas de silane ( $\text{SiH}_4$ ) pur ou en dilution sont largement ré pondus dans diverses technologies des semiconducteurs, i.e. les circuits intégrés, les écrans plats, les cellules solaires en silicium amorphe ou nanostructuré, etc [8].

Ici aussi on peut trouver plusieurs réactions, entre les différentes espèces présentes dans le plasma, nous avons considéré celles décrite ci-dessous :

	Réaction	Réaction chimique	Seuil d'énergie
1	Elastique	$\text{SiH}_4$	
2	Excitation.vib	$\text{SiH}_4 \rightarrow \text{SiH}_4(\text{V24})$	0.113 eV,
3	Excitation.vib	$\text{SiH}_4 \rightarrow \text{SiH}_4(\text{V13})$	0.27 eV,
4	Excitation	$\text{SiH}_4 \rightarrow \text{SiH}_4^*$	7.7 eV.
5	Excitation.diss	$\text{SiH}_4 \rightarrow \text{SiH}_4^*$	8.4 eV,
6	Ionisation	$\text{SiH}_4 \rightarrow \text{SiH}_4^+$ ,	11.6 eV,
7	Attachment	$\text{SiH}_4 \rightarrow \text{SiH}_2^- + \text{H}_2$ ,	---

*Tableau IV.4 : Représentation des réactions chimiques et leurs seuils d'énergies pour le silane. D'après M. Kurachi et Y. Nakamura [29].*

#### IV.4. Présentation du code BOLSIG

La résolution du modèle fluide exige des paramètres d'entrées tels que les coefficients de transport et les taux de réactions qui représentent l'effet des collisions. Dans l'approximation dite de Lorentz dans le cas des gaz faiblement ionisés, seules les collisions électron-neutre et ion-neutres sont prises en considération.

Suivant le type de modélisation à effectuer, les données nécessaires relatives aux électrons sont de nature différente. Une modélisation microscopique a besoin des variations en fonction de l'énergie électronique des sections efficaces de collision [2]. Par contre, pour réaliser une modélisation macroscopique, il faut connaître la dépendance en fonction du champ électrique appliqué ou de l'énergie moyenne des électrons des coefficients de transport et des taux de production ou de destruction des espèces. Certaines de ces grandeurs, fonction du champ électrique, sont accessibles expérimentalement mais, dans la plupart des cas, pour la plage de champ électrique et pour les concentrations du mélange gazeux étudiés, tous les paramètres ne sont pas connus, et on a recours assez souvent à des codes de calcul pour les déduire.

Il existe plusieurs de ces codes, et on peut citer à titre d'exemple ; ELENDF [13], Bolsig ou encore son successeur Bolsig+. Bolsig est plus général et présente de surcroît une interface de commande très simple à utiliser que les autres codes disponibles. Il a été développé en 1996 par Kinema Software et CPAT (Centre de Physique des Plasmas et Application de Toulouse) sous la direction de J.P.Boeuf, L.C.Pitchford et W.L.Morgan [29].

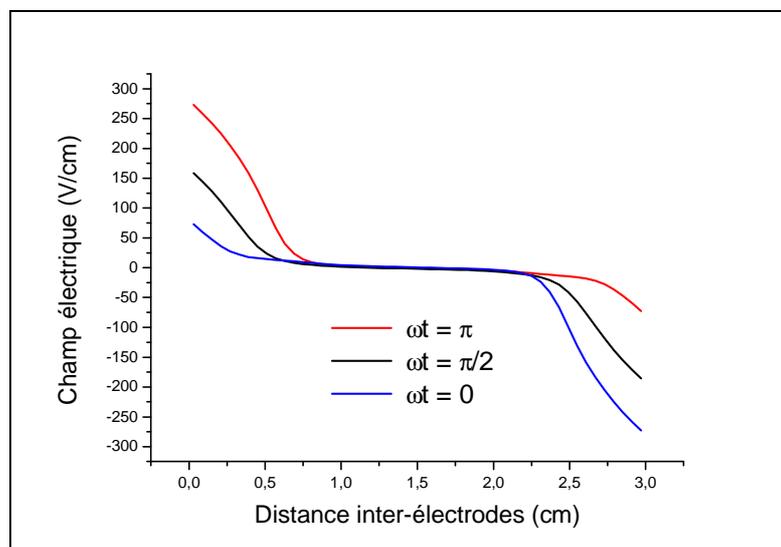
Tous ces codes, fournissent les solutions stationnaires de l'équation de Boltzmann électronique dans un champ électrique uniforme, utilisant l'approximation classique dite approximation à deux termes [30].

Ces codes donnent en sortie : la mobilité électronique - l'énergie moyenne - les taux d'ionisation et d'excitation - les coefficients de diffusion ainsi que les coefficients de transport. BOLSIG se révèle donc un outil indissociable de l'utilisation de SIGLO.

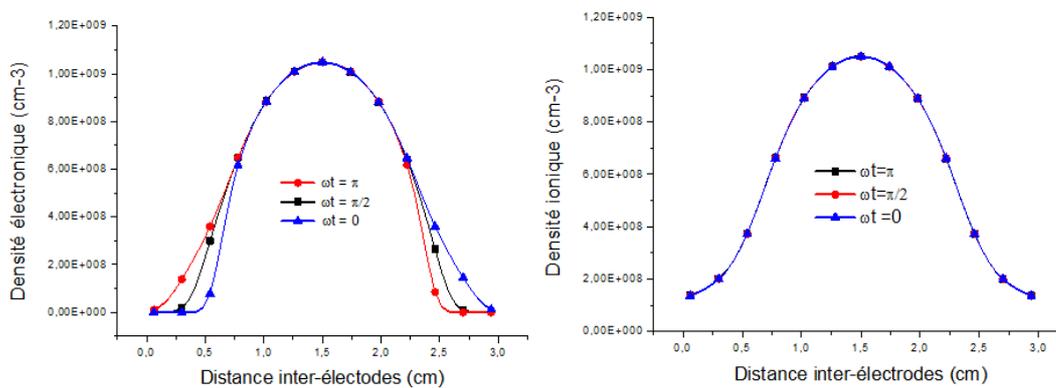
## IV.5. PRÉSENTATION DES RÉSULTATS ET INTERPRÉTATIONS

### IV.5.1. Profil du champ électrique et des densités de particules chargées

Le champ électrique est une conséquence directe du potentiel électrique. Il décroît à partir de la cathode jusqu'à s'annuler au voisinage de la gaine, et reste quasiment nul au cœur de la décharge puis augmente une deuxième fois au niveau de l'anode (voir figure VI.1). Le fait que le champ électrique présente un gradient important près des électrodes est justifié par la nature des gaines qui sont des régions de charges d'espace.



*Figure IV.1 : Profil du champ électrique dans la décharge d'argon à différents instants*



*Figure IV.2 : Profils des densités électronique (à gauche) et ionique (à droite) dans la décharge d'argon*

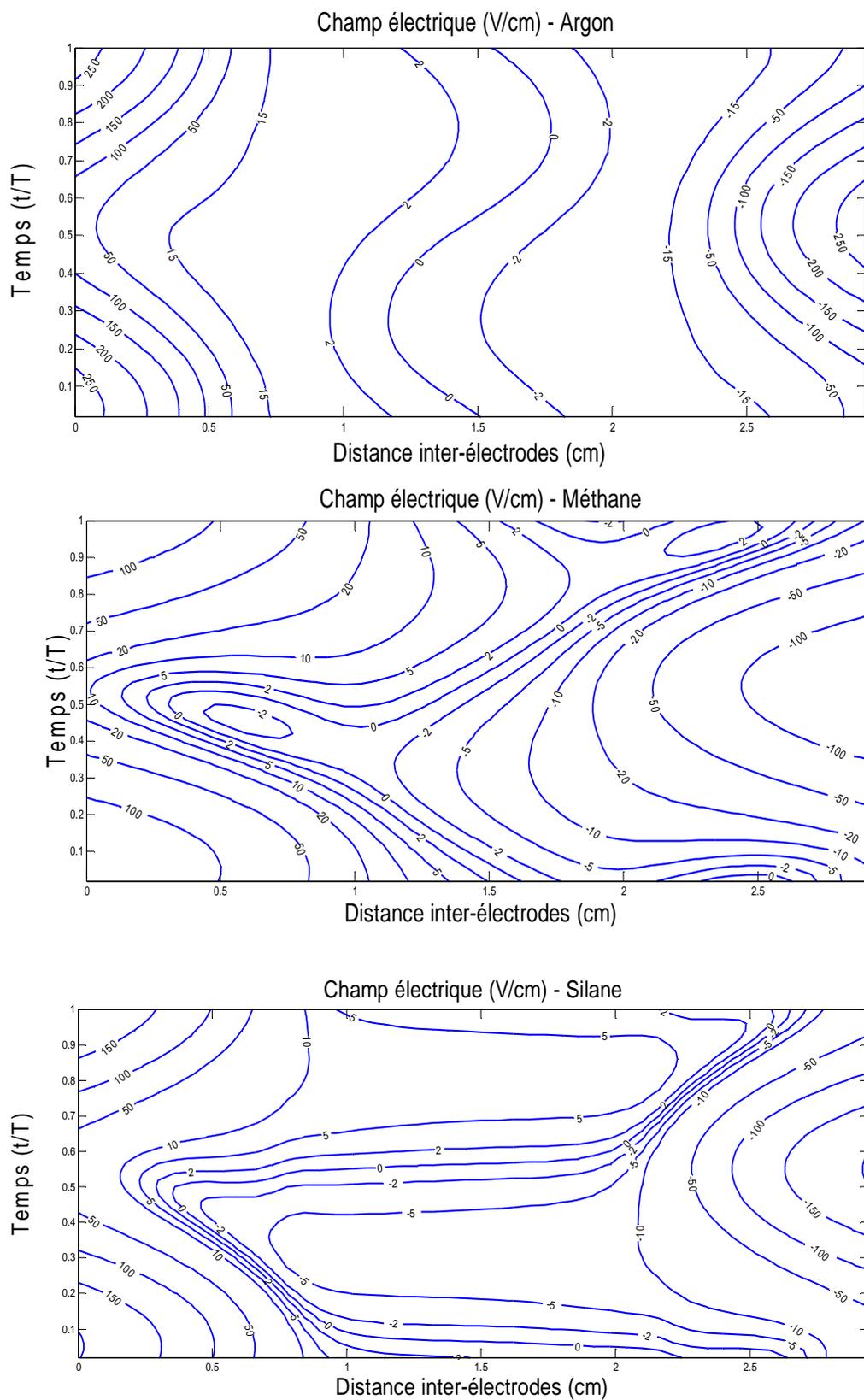
Il apparaît d'après la figure (IV.2) que la densité électronique augmente au fur et à mesure que l'on s'éloigne de l'électrode alimentée, pour chuter ensuite au bord de l'électrode à la masse. Cette densité, surtout au voisinage des électrodes, oscille autour d'une valeur moyenne. Il en est de même pour la densité ionique, sauf que la concentration ionique est relativement indépendante de la phase du signal électrique appliqué.

#### **IV.5.2. Variation spatio-temporelle du champ électrique**

La figure (IV.3) donne pour les différents gaz, la variation spatio-temporelle du champ électrique entre les deux électrodes sur une période radiofréquence. On distingue deux parties pour chaque électrode. Une partie anodique, quand l'électrode est au potentiel positif, dans laquelle les ions sont repoussés et les électrons sont attirés. L'autre partie est cathodique lorsque l'électrode joue le rôle d'une cathode. Dans cette partie les électrons sont repoussés alors que les ions sont attirés. Le champ électrique suit l'oscillation de l'excitation RF appliquée. Il présente un mouvement périodique. La gaine est en contraction pendant la phase anodique de l'électrode et elle est en expansion pendant la phase cathodique. Le mouvement oscillatoire du champ électrique est un mécanisme très intéressant du dépôt d'énergie dans le plasma. Du fait de la rapidité des électrons, ceux-ci sont en partie piégés dans le plasma et présentent un mouvement oscillatoire. Dans les gaines, le champ électrique est très intense et donc la vitesse des électrons est grande et on assiste à une ionisation et excitation dans cette zone.

L'analyse des résultats de la figure VI.3 montre que le champ électrique près des électrodes est plus intense dans le cas d'un gaz atomique. D'un autre côté et dans le cas des gaz moléculaire, on constate que l'intensité du champ électrique est plus grande pour un gaz moléculaire électronégatif (silane) que pour un gaz électropositif (méthane). Ceci s'explique par le fait que l'attachement des électrons sur des molécules de Silane est plus facile que l'ionisation. Ceci est d'autant plus valable quand on est en présence d'un champ faible. Or l'entretien du plasma exige un taux d'ionisation plus grand que celui de l'attachement pour compenser les pertes des électrons. L'attachement a lieu dans le plasma, d'où la valeur importante du champ électrique en dehors des gaines.

Le champ électrique accélère les électrons du plasma, qui dissipent « localement » leur énergie par ionisation et excitation. On se retrouve dans le régime de colonne positive. Ce phénomène a la même importance que le « Wave-Riding » où la majeure partie de l'énergie est déposée grâce à l'oscillation des gaines de champ électrique.

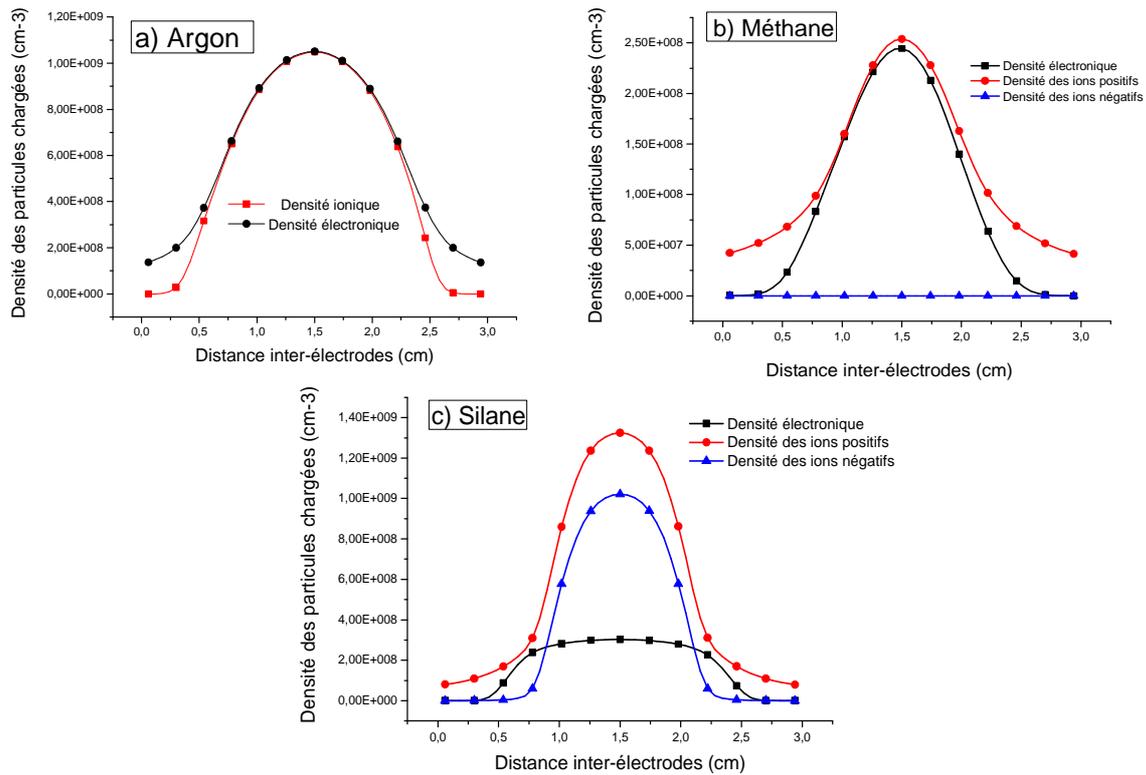


*Figure IV.3 : Variation spatio-temporelle du champ électrique*

### IV.5.3. Densité de particules chargées dans les différents plasmas

Les profils de densité électronique, des ions positifs et négatifs (méthane et silane) sont illustrés par la figure IV.4. À cause de leur très grande mobilité, les électrons suivent instantanément les fluctuations du champ électrique. En revanche les ions présentent une structure figée dans le temps. La grande masse des ions est à l'origine de leur faible mobilité. Les ions restent insensibles (à hautes fréquences) aux variations temporelles du champ électrique. Ils ne voient qu'un champ moyen. Ils présentent une densité constante dans le temps et un flux continu vers les électrodes. Les décharges électriques dans l'argon et dans le méthane exhibent un comportement similaire (figures IV.a et IV.b).

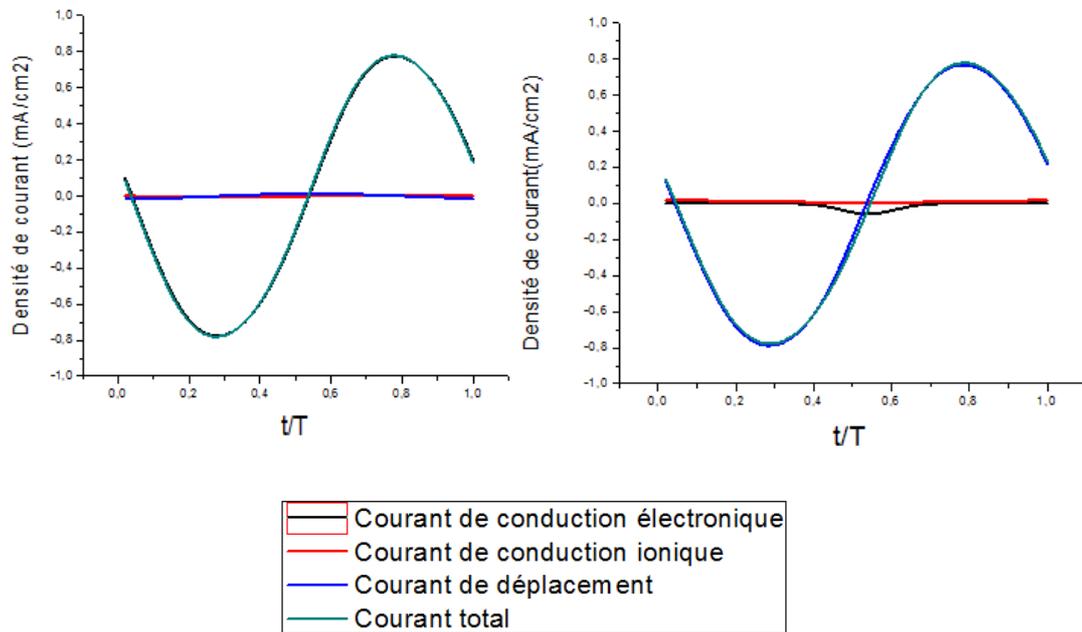
Dans le cas d'un gaz électronégatif (figure IV.c), il est clair que la présence des ions négatifs provoque une autre distribution de charges dans le plasma. En effet, et vu que les décharges RF présentent un potentiel plasma supérieur à celui des électrodes, les charges négatives sont piégées dans l'espace inter-électrode. Pour les électrons, l'état stationnaire est atteint quand le taux d'attachement est contrebalancé par celui de l'ionisation. Pour les ions négatifs, l'état stationnaire est atteint lorsque le taux d'attachement et celui de la recombinaison sont égaux. La fréquence de recombinaison du Silane est beaucoup plus lente que celle de l'attachement. On est en permanence en présence d'une charge négative dans le plasma qui va dominer celle des électrons. La densité des électrons est faible à cause de la neutralité électrique macroscopique du plasma.



**Figure IV.4.** Profils des densités électroniques dans l'argon (a), le méthane (b) et le silane (c).

#### IV.5.4. Densité de courant

Les composantes du courant total de la décharge sont : le courant de déplacement  $\left( \epsilon_0 \cdot \frac{\partial E}{\partial t} \right)$ , le courant de conduction électronique et le courant de conduction ionique. À un instant donné, le courant total de la décharge a une valeur bien définie et selon la position dans l'espace inter-électrodes, le courant est dominé par l'une de ces composantes. Sur l'électrode RF, le courant dominant est le courant de déplacement (figure IV.5). Ce courant provient de l'oscillation des gaines et est d'autant plus important que la fréquence d'excitation RF est élevée. Au centre du plasma et vu que le champ électrique présente une valeur moyenne constante, le courant le plus important est le courant de conduction. Ce dernier est dû à la dérive des espèces chargées. Ce champ moyen est proportionnel à la mobilité des porteurs de charges. Pour cette raison, le courant de conduction électronique est plus grand que celui dû au mouvement des ions, ce que confirme d'ailleurs la figure ci-dessous.



**Figure IV.5 :** Variations temporelles sur un cycle radiofréquence des composantes de la densité de courant au centre du plasma (à gauche) et sur l'électrode RF (à droite).

#### IV.5.5. Terme source

Le terme source est le terme de droite de l'équation de transport des espèces chargées. Il comporte les termes de créations et de perte des particules chargées auxquelles on s'intéresse. Ça peut être de l'ionisation, de l'attachement, de la recombinaison ou encore du détachement. En fonction de la nature du gaz, on peut envisager différentes combinaisons de ces termes. La figure (IV.6) représente la superposition du taux d'ionisation et d'attachement au champ électrique équivalent pour les trois types de gaz.

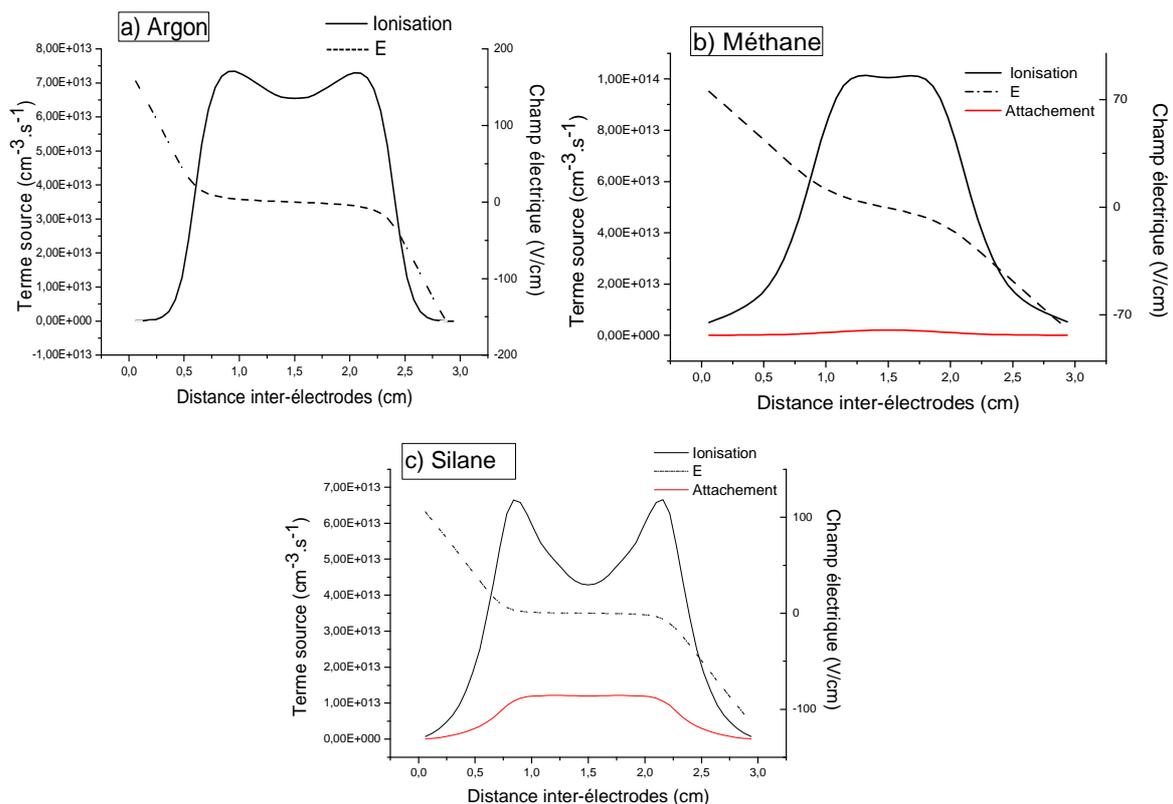
Il est clair, d'après cette figure, que le maximum du terme source d'ionisation ne coïncide pas avec le maximum du champ électrique, mais l'ionisation apparaît lorsque le champ électrique atteint son minimum, il serait donc intéressant d'examiner l'origine de la source d'ionisation.

Le terme source des espèces chargées dans le cas d'une décharge d'argon est essentiellement donné par l'ionisation en volume par collision électron-neutre. L'argon présente un faible taux de recombinaison comparé à son taux d'ionisation dans les décharges qu'on étudie. La perte des électrons se fait essentiellement par diffusion ambipolaire vers les parois. L'ionisation dans ce cas provient de l'oscillation des gaines. Les électrons oscillent à une

vitesse très grande et ionisent localement les atomes neutres de l'argon. C'est le phénomène de Wave-Riding et a lieu en lisière de gaine. Le terme source présente un maximum dans cette région (figure IV.6.a).

Dans le cas d'une décharge de méthane (figure IV.6.b), le champ électrique ne présente pas de plateau nul dans le cœur du plasma, ce qui se traduit par un taux d'ionisation plus au moins uniforme dans le volume du plasma. On constate aussi que l'attachement en volume est très faible et la perte d'électrons se fait également par diffusion ambipolaire.

Pour le silane qui est un exemple type de gaz électronégatif, le champ électrique est en moyenne nul dans le volume du plasma et présente des valeurs importante dans et en lisière de gaines. Ce champ électrique accélère les électrons qui dissipent localement l'énergie engrangée par ionisation et excitation. On constate également (figure IV.6.c), que la perte d'électrons se fait par diffusion ambipolaire mais également par attachement électronique dans le volume du plasma.



**Figure IV.6** : Profils du terme source

#### **IV.5.6. Variation spatio-temporelle des coefficients d'ionisation et d'attachement et du chauffage électronique**

Les figures IV.7, IV.8 et IV.9 illustrent les profils spatio-temporels des coefficients d'ionisation et d'attachement et le chauffage électronique respectivement. Ces figures sont données pour mieux illustrer ce qui a été discuté précédemment. On rappelle que la cathode (électrode RF) est à la position 3 cm alors que l'anode est à l'origine. On constate que pour les trois gaz, l'ionisation présente des pics près des électrodes avec un pic plus étalé près de l'électrode RF. Pour l'attachement électronique en volume (figure IV.8), on constate qu'il est plus important à tout instant dans la décharge de silane. Nous avons également omis délibérément de représenter le coefficient d'attachement électronique relatif à l'argon à cause de sa faible valeur. Comme discuter dans la section précédente et à cause de l'oscillation des gaines, les électrons sont plus accélérés et donc plus chauffés en lisières de gaines. Ce que confirment les courbes de la figure IV.9.

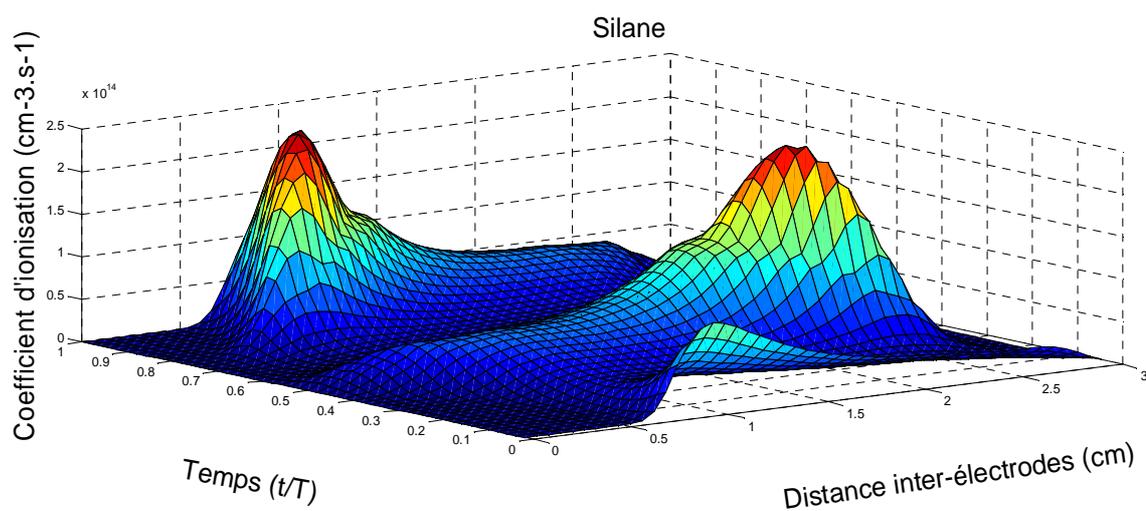
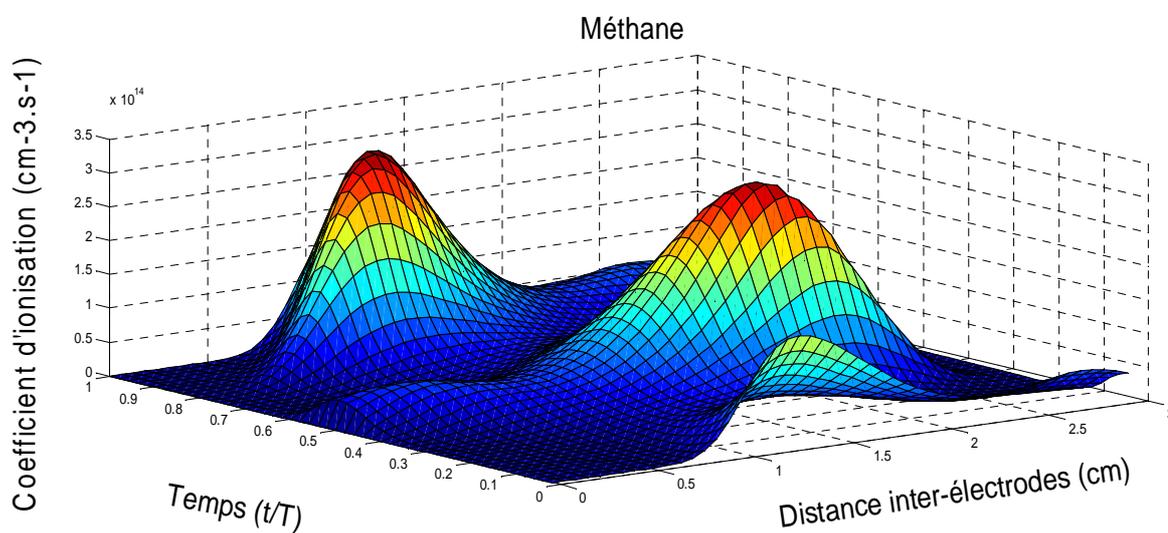
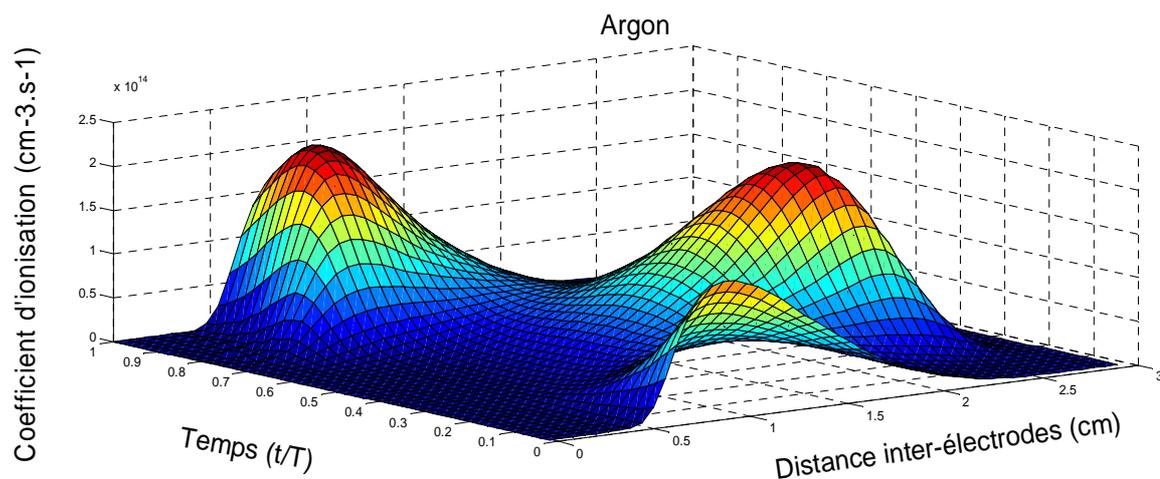
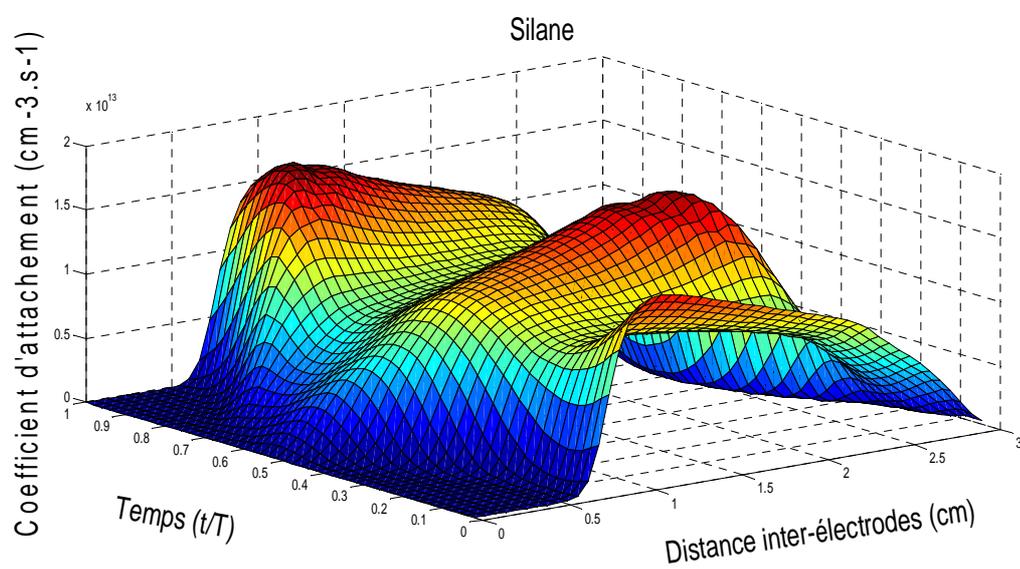
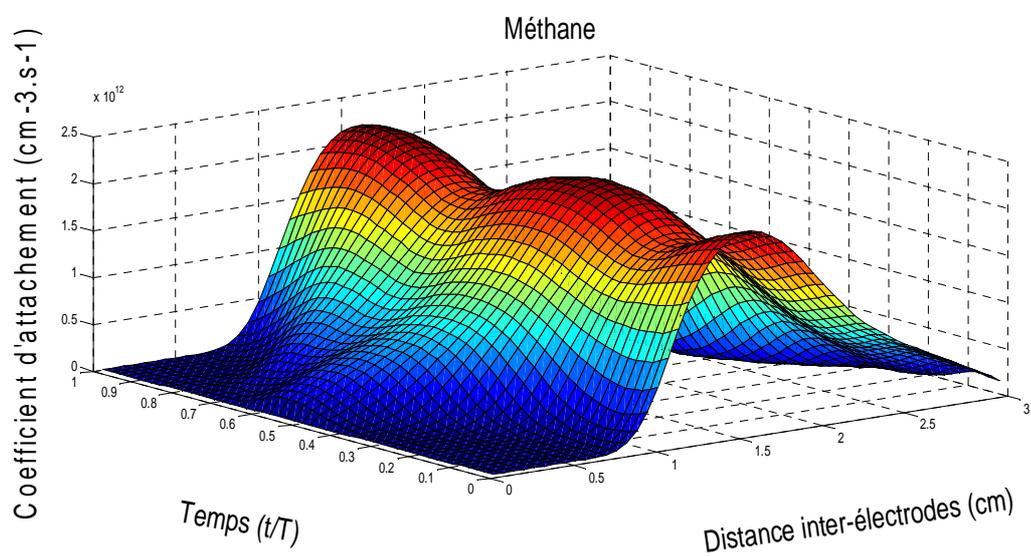
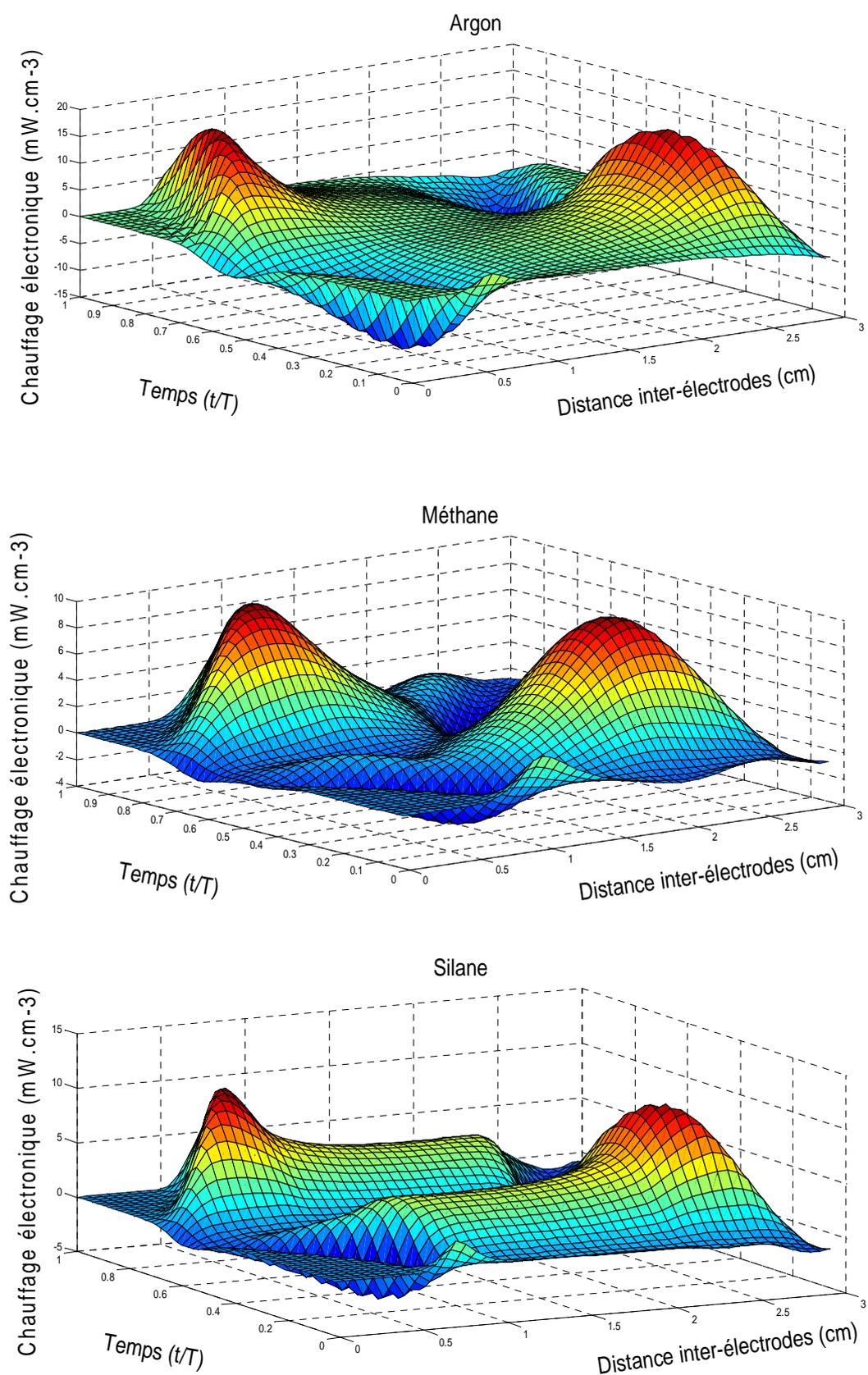


Figure IV.7 : Coefficient d'ionisation des gaz étudiés.



**Figure IV.8** : Coefficient d'attachement électronique des gaz étudiés.



**Figure IV.9 :** Chauffage électronique dans les gaz étudiés.

## IV.6. ÉTUDE PARAMÉTRIQUES

### IV.6.1. Influence de la tension et de la fréquence

La fréquence d'excitation RF est un paramètre important concernant le mécanisme du dépôt d'énergie dans le plasma. En effet et tenant compte du phénomène de Wave Riding cité auparavant, les électrons oscillent dans l'interface plasma-gaine. Cette oscillation provoque l'ionisation et donc l'entretien du plasma à basse puissance (régime  $\alpha$ ). En revanche, à forte puissance, l'émission secondaire de la décharge (régime  $\gamma$ ) devient prépondérante. La transition entre ces deux régimes s'effectue en augmentant la puissance injectée dans le plasma. L'augmentation de la fréquence induit une augmentation de la densité plasma (figure IV.10), on constate alors le rôle très important de la fréquence dans l'ionisation (régime  $\alpha$ ). On notera qu'on ne peut mener d'étude dans le régime  $\gamma$  avec la version actuel du code SIGLO-RF car il ne permet pas de tenir compte de l'émission secondaire d'où la limite 100MHz de la fréquence d'excitation. Les mêmes observations sont à porter pour l'évolution de la décharge en fonction de la tension appliquée (figure IV11).

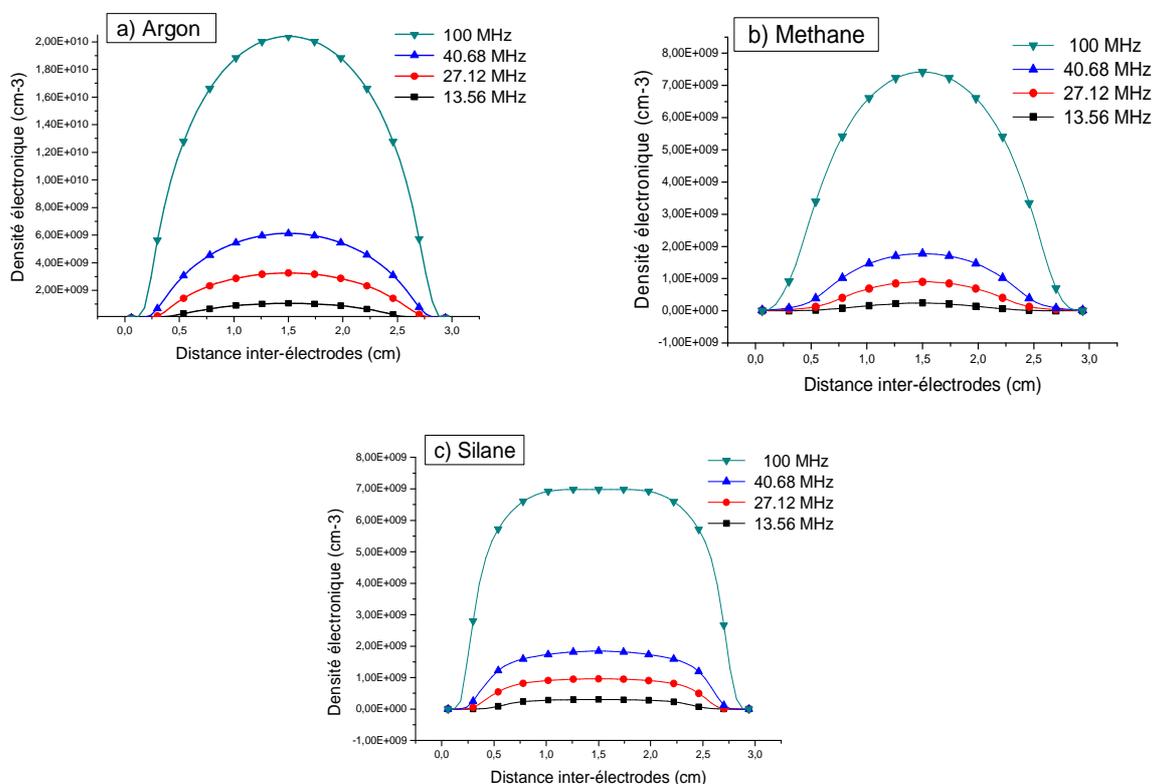
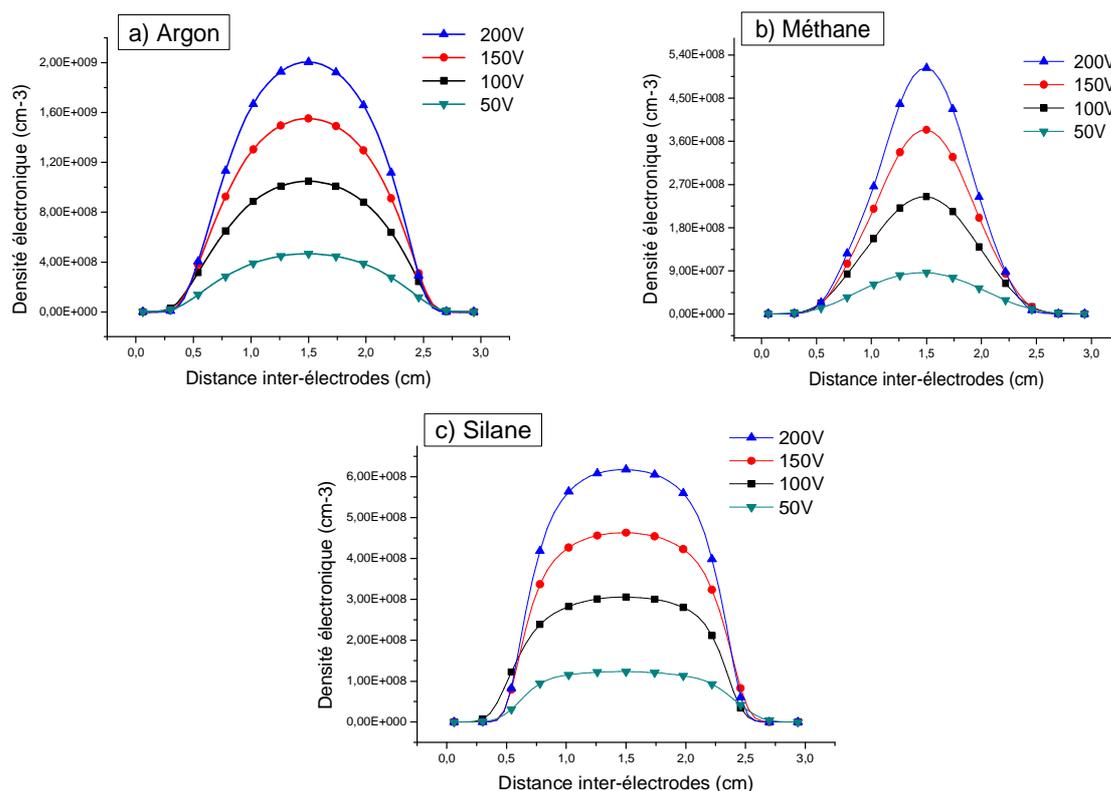


Figure IV.10 : Évolution spatiale de la densité électronique en fonction de la fréquence



*Figure IV.11 : Évolution spatiale de la densité électronique en fonction de la tension appliquée*

#### IV.6.2. Influence de la température du gaz

Les courbes représentant l'évolution spatiale de la densité électronique en fonction de la température pour les trois gaz étudiés sont données par la figure IV.12. On constate que la densité électronique est inversement proportionnelle à la température appliquée dans les trois gaz. Ceci est en partie dû à une plus grande perte d'énergie électronique sous forme de collision élastique ou encore à un plus grand nombre de niveaux vibrationnels susceptibles d'être excités dans le cas des gaz moléculaires.

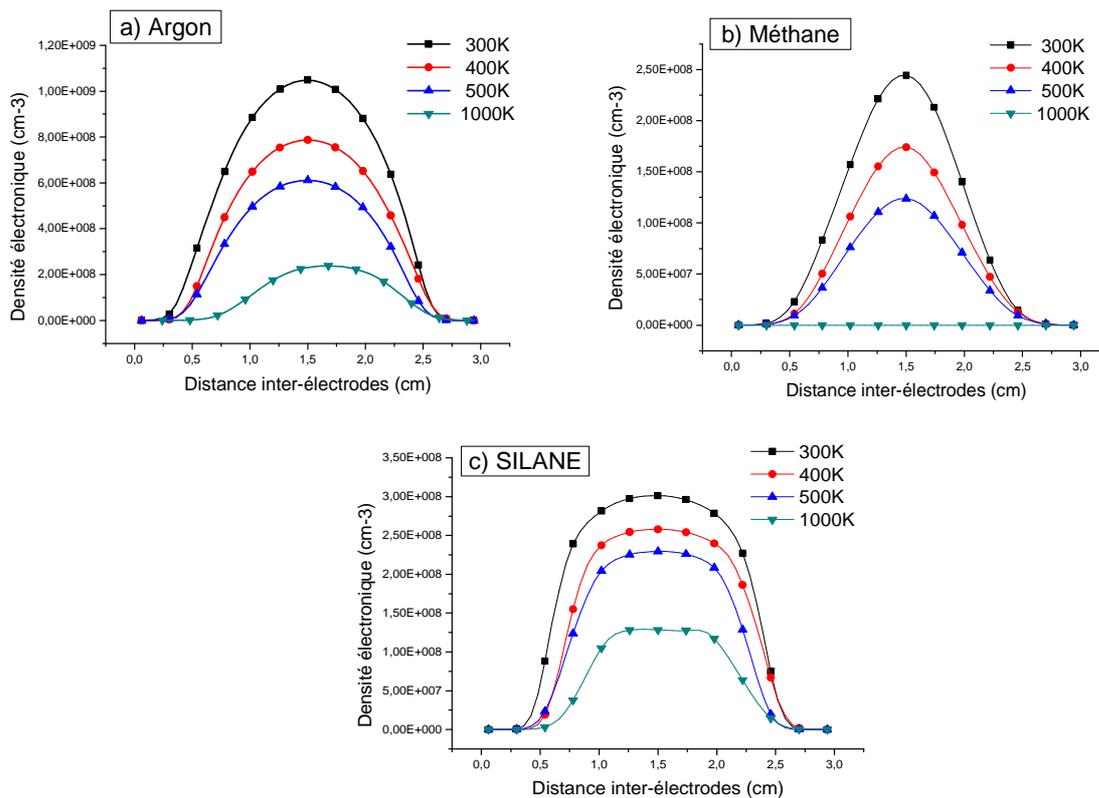


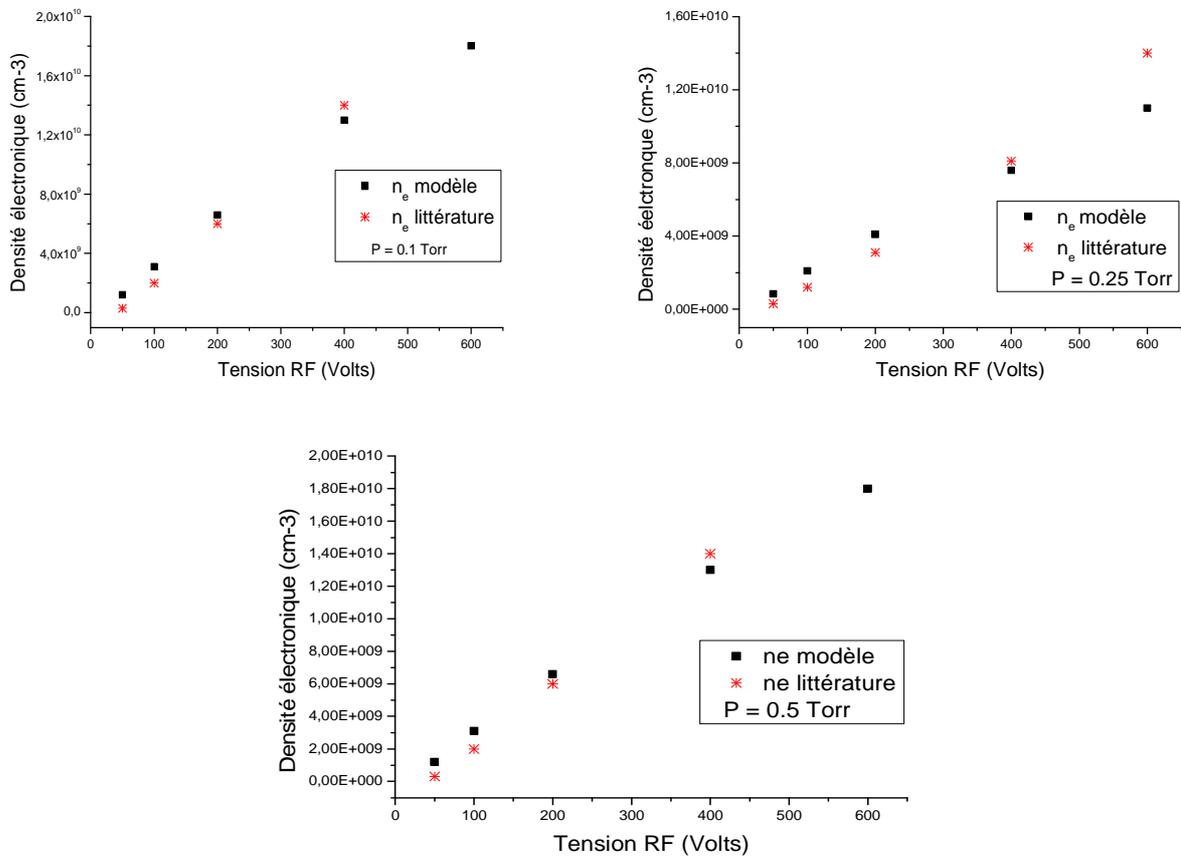
Figure IV.12 : Évolution spatiale de la densité électronique en fonction de la température du gaz

## IV.7. COMPARAISON : MODÈLE-LITTÉRATURE

Pour valider le modèle fluide à une dimension avec équation d'énergie, on suggère une comparaison avec des résultats d'autres travaux issus de la littérature.

On se place dans les mêmes conditions de distance inter-électrodes, de fréquences et de pressions et on compare l'évolution de la densité électronique en fonction de la tension appliquée de nos résultats et des résultats de Tarik Hbid [28].

La figure IV.13 présente l'évolution de la densité électronique au centre du plasma en fonction de la tension RF appliquée pour trois pressions différentes : 0.1 mTorr, 0.25 mTorr et 0.5 mTorr. On constate que dans les trois cas l'accord est assez satisfaisant et la densité électronique suit la même allure d'évolution que ceux de T. Hbid. Néanmoins un léger écart est à signaler que nous imputons aux jeux de sections efficaces choisis et qui peut être amélioré en ayant recours à différentes base de données.



**Figure IV.13 :** Évolution de la densité électronique dans l'argon en fonction de la tension pour différentes valeurs de la pression

## IV.8. CONCLUSION

Le travail présenté dans ce chapitre est basé sur la simulation d'une décharge radiofréquence à couplage capacitif dans un gaz maintenu à basse pression ( $\sim 0.1$  Torr). Nous avons choisi trois gaz que sont l'argon, le méthane et le silane. Ce choix est motivé non seulement pour leur large domaine d'utilisation mais aussi pour pouvoir mettre en exergue les différences nuances existant entre les décharges dans un gaz atomique ou moléculaire ou encore électropositif ou électronégatif.

Ainsi, nous avons étudié l'évolution du champ électrique, des densités électronique et ionique (positive ou négative), des densités de courant et également la variation du terme source figurant dans les équations de transport. Nous avons complété ce travail par une étude paramétrique de la décharge en fonction de la température, de la tension appliquée (puissance déposée) et de la pression.

Les résultats obtenus nous ont permis d'aboutir aux résultats suivants :

- La chute du potentiel électrique a lieu principalement dans les gaines alors qu'il est relativement constant dans le volume du plasma, ce qui engendre un champ électrique très variable dans les gaines et constant avec de faibles valeurs dans le volume.

- Les profils de densités électronique et ionique sont relativement uniformes dans le cœur du plasma et décroît dans les gaines pour s'annuler sur les électrodes. De plus la densité électronique varie instantanément avec le champ électrique mais pas la densité ionique qui suit le champ effectif moyen d'où des profils constants pour toutes les phases du signal d'excitation.

- Les courants de décharge sont principalement capacitifs sur les électrodes et de conduction dans le volume de la décharge.

- Les taux d'ionisation obtenus laisse clairement envisager que le mécanisme de gain de l'énergie est dû à l'oscillation des électrons qui est lui-même induit par celui des gaines.

- Les électrons énergétiques (responsable de l'ionisation) se trouvent en lisière de gaine.

- La perte d'électrons est essentiellement due à la diffusion ambipolaire dans les gaz électropositifs (atomique ou moléculaire) alors qu'elle est due à la fois à l'attachement électronique et la diffusion ambipolaire qui ne peut être négligée.

- La comparaison des résultats obtenus avec ceux de la littérature montre un accord très satisfaisant en ce qui concerne le comportement global et un léger écart en valeur dû très certainement aux choix des différents paramètres d'entrer du code Siglo-RF.

---

## CONCLUSION GENERALE

---

Ce travail a été consacré à l'étude bibliographique et à la modélisation unidimensionnel d'une décharge excitée RF à couplage capacitif basse pression.

La modélisation est réalisée en utilisant le modèle fluide auto-cohérent qui décrit la distribution des particules chargées, du champ et du potentiel électriques dans l'espace inter-électrodes. Ce modèle adopté considère le plasma comme un milieu fluide continu, et se base sur la résolution des trois premiers moments de l'équation de Boltzmann pour les électrons et les deux premiers moments seulement pour les ions, couplés à l'équation de Poisson pour le champ électrique tout en se plaçant dans le cadre de l'approximation de l'énergie locale et du champ local.

Les résultats obtenus nous ont permis de mieux comprendre le fonctionnement de ce type de décharges électriques et de distinguer la différence de comportement selon que le gaz utilisé est atomique ou moléculaire ou encore de nature électropositif ou électronégatif. Ainsi, on a pu constater que la chute de potentiel se fait essentiellement dans les gaines de charge d'espace alors qu'il est relativement uniforme dans le volume du plasma. Ceci se traduit par un champ très variable dans les gaines et relativement faible et uniforme dans le volume du plasma.

Les profils de densités électronique et ionique exhibent des allures en formes de cloche, relativement uniforme dans le cœur du plasma et décroît dans les gaines pour s'annuler sur les électrodes. Notons que la densité électronique suit instantanément la variation du champ électrique alors que la densité ionique présente un profil constant pour toutes les phases du signal d'excitation radiofréquence.

L'étude des densités de courant montre que celui-ci est essentiellement capacitif sur les électrodes alors qu'il est principalement de conduction dans le cœur de la décharge.

Les taux d'ionisation que nous avons obtenus nous permettent d'affirmer que le mécanisme de gain d'énergie est essentiellement dû à l'oscillation des électrons qui est induit par la

compression et l'expansion des gaines. Ceci se traduit par la présence d'électrons énergétiques en lisière de gaine et un taux d'ionisation plus important dans ces régions aussi. Le taux d'attachement et/ou de recombinaison étant très faible dans le cas des gaz électropositifs (atomique ou moléculaire) ce qui induit une perte d'électrons principalement par diffusion ambipolaire sur les parois. Dans le cas des gaz électronégatifs, le taux d'attachement électronique est important dans le volume du plasma (densité d'ions négatifs plus importante que la densité électronique) et la perte des électrons est due à l'attachement mais également à la diffusion ambipolaire qui ne peut être négligée.

Nos résultats ont été également comparés aux résultats disponibles dans la littérature. Cette comparaison a conforté nos résultats qui ont été en très bon accord avec les valeurs établies antérieurement par d'autres équipes de recherche.

En perspective, nous envisageons de tenir compte de l'émission secondaire pour aborder la transition du régime  $\alpha$  vers le régime  $\gamma$  et également élargir notre champ d'investigation par un choix plus judicieux des sections efficaces. Nous envisageons également d'aborder les décharges dans des mélanges gazeux types tels que le méthane/azote ou encore argon/silane.

---

## REFERENCES BIBLIOGRAPHIQUES

---

- [1]: I. Langmuir, *proc.nat.acadi.Sci, US*, 14. 627 (1928)
- [2]: J.L. Delcroix et A. Bers, *Physique des plasmas 1*, InterEditions /CNRS Editions, 1994
- [3]: J.L. Delcroix et A. Bers, *Physique des plasmas 2*, InterEditions /CNRS Editions, 1994
- [4] : M.Moissan, J.Pelletier ; *Physique des plasmas collisionnels ; Application aux décharges haute fréquence*, Collection Grenoble Science, 2006
- [5]: P. Chabert, N. Braithwaite, *Physics of Radio-Frequency Plasmas*, Cambridge, 2011
- [6]: Francis F.Chen, Jane P. Chang, *University of California, Los Angeles*, pp (1, 4, 16-18), 2002.
- [7]: eBook, ressource internet
- [8]: A. Mezeghrane, thèse de doctorat, Université de Tizi-Ouzou, Algérie 2010
- [9]: A. Pointu, J. Jolly, J. Perrin, *Technique d'ingénieur » plasmas froids de décharge-propriétés électriques*
- [10]: H. Bahouh, mémoire de master, Université Mentouri Constantine, Algérie 2010
- [11]: M. Moreno, thèse de doctorat, Ecole des Mines de Paris, France 2006
- [12]: *Plasmas froids : Génération, caractérisation et technologies*, Publication de l'université de Saint – Etienne, 2004.
- [13]: P. Seimandi, thèse de doctorat, 2010, Université Toulouse III-Paul Sabatier, France 2010
- [14]: Y.P.Raizer. *Gas discharge physics*. Springer-Verlag. 1991
- [15] : K. Redouane, thèse de doctorat, Université Paul Sabatier de Toulouse, France 1999
- [16]: C. Lazzaroni, thèse de doctorat, Ecole Polytechnique de Paris, France 2010

- [17]: P. Seimandi, thèse de doctorat, Université Paul Sabatier de Toulouse, France 2010
- [18] : L. Therese, thèse de doctorat, 2005, Université Paul Sabatier de Toulouse, France 2005
- [19] : T. Hbid, thèse de doctorat, Université Paul Sabatier de Toulouse, France 1995
- [20]: Chapman, B, Glow Discharge Processes, Sputtering and Plasma Etching New York USA 1980
- [21]: P. Levif, thèse de doctorat, 2007, Ecole Polytechnique de Paris, France 2007
- [22] : François Vidal, 2000, Modélisation des plasmas froids I, cours Paris-sud.
- [23]: Siglo RF,
- [24]: A. Salabas, thèse de doctorat, Université de Lisbonne, Portugal 2003
- [25]: D. Herrebout, Thèse de doctorat, Université Antwerpen 2003.
- [26]: A. Mezeghrane, mémoire de magister, Université A. Mira de Bejaia. Algérie 2001
- [27]: D.L.Scharfetter, and H.K.Gummel IEEE Trans.Electron Devices Appl.Phys. Lctt, 57, 374, 1990
- [28] T. Hbid, thèse de doctorat, Université Paul Sabatier de Toulouse, France 1995
- [29]: Bolsig
- [30] : G.J.M. Hageelaar, L.C. Pitchford, Plasma Source Sci. Technol. 722-733 14 (2005)

## *Étude et modélisation des décharges radiofréquence basse pression à couplage capacitif*

### **RÉSUMÉ :**

*Le plasma de laboratoire est l'état de matière qui résulte de l'ionisation du gaz par différentes techniques parmi lesquelles la décharge électrique. Pour la représentation mathématique des décharges on dénombre essentiellement trois modèles que sont : le modèle particulaire, le modèle fluide et le modèle hybride fluide-particulaire.*

*L'étude entreprise dans le cadre de ce mémoire a trait à la simulation d'une décharge RF à couplage capacitif basse pression par un modèle fluide à une dimension en utilisant le code Siglo-RF, développée par Kinema Software en collaboration avec l'équipe de Jean Pierre Bœuf de l'université de Toulouse. C'est un modèle fluide auto-cohérent qui consiste à déduire à partir de l'équation de Boltzmann et en utilisant ses trois premiers moments, une série d'équations différentielles aux dérivées partielles susceptibles de représenter l'ensemble des phénomènes physiques qui se produisent dans la décharge étudiée que se soit dans l'argon, le méthane ou encore le silane. A partir de ces équations et en utilisant la méthode numérique des différences finies, suivant le schéma exponentiel de Sharfetter et Gummel; nous avons calculé la distribution spatio-temporelle des électrons et des ions ainsi que la répartition du champ électrique, des densités de flux ionique et électronique .Ces résultats ont montré un accord satisfaisant avec les résultats disponibles dans la littérature.*

**MOTS CLES :** Équation de Boltzmann - Moment de l'équation de Boltzmann - Gaz faiblement ionisé - Décharge luminescente RF - Modèle fluide – Codes Bolsig et SigloRF - Différences finies - Plasmas d'argon, de méthane et de silane