

Ministère de l'Enseignement Supérieur et de la Recherche Scientifique

Université Hassiba Benbouali de Chlef

Faculté de Technologie

Département d'Électrotechnique



# THÈSE

Présentée pour l'obtention du diplôme de

## DOCTORAT ES-SCIENCES

Filière : Électrotechnique

Spécialité : Électrotechnique

Par

**Mohamed MOSTEFAOUI**

Thème :

---

### **MODELISATION D'UN PLASMA FROID CREE PAR UNE DECHARGE DANS LE MELANGE HYDROGENE/GAZ RARE**

---

Soutenue le ...../...../....., devant le jury composé de :

BELMADANI Bachir	Professeur	Université de Chlef	Président
Djilali BENYOUCEF	Professeur	Université de Chlef	Rapporteur
MAATALLAH Mohamed	MCA	Université de Khemis Miliana	Examineur
ZGAOUI Abdallah	MCA	Université de Chlef	Examineur
BOT Youcef	MCA	Université de Khemis Miliana	Examineur
RAOUTI Driss	MCA	Université de Saida	Examineur

## ***Remerciements***

Je remercie tout d'abord ALLAH le tout puissant qui m'a éclairé le Bon chemin et m'a donné la force pour le suivre, ainsi que l'audace pour dépasser toutes les difficultés. Nous en sommes reconnaissants et continuons infiniment à le remercier et le glorifier.

A l'issue de la rédaction de cette recherche, je suis convaincue que la thèse est loin d'être un travail individuel. En effet, je n'aurais jamais pu réaliser ce travail doctoral sans le soutien d'un grand nombre de personnes dont l'intérêt manifesté à l'égard de ma recherche m'a permis de progresser dans cette phase délicate.

Je tiens tout d'abord à adresser mes remerciements les plus sincères à mon directeur de thèse, monsieur professeur BENYOUCEF Djilali, pour la confiance qu'il m'a accordée en acceptant de me m'encadrer et pour toutes les heures qu'il a consacrées à diriger cette recherche sans oublier ses précieuses intuitions. J'aimerais également lui dire à quel point j'ai apprécié sa grande disponibilité et son respect sans faille des délais serrés de relecture et de correction des documents que je lui ai adressés.

Je remercie vivement les membres du jury pour l'intérêt qu'ils ont porté à ce travail et d'avoir accepté de le juger : Monsieur BELMADANI Bachir, Professeur à l'université de Hassiba Benbouali Chlef pour l'honneur qu'il me fait de présider le Jury de cette thèse. Je remercie aussi les examinateurs Monsieur ZGAOUI Abdellah Maitre de conférences à l'université de Hassiba Benbouali Chlef ; Monsieur BOT Youcef Maitre de conférences à Université de Khemis Miliana ; Monsieur MAATALLAH Mohamed, Maitre de conférences à Université de Khemis Miliana et ; Monsieur ROUATI Idris Maitre de conférence à l'université de Saida. Qui m'ont fait l'honneur d'être les rapporteurs de ce travail et qui ont permis d'améliorer ma thèse grâce à leurs remarques et leurs conseils éclairés.

J'aimerais aussi profiter de cette occasion pour remercier tous les enseignants du département d'électrotechnique surtout monsieur HELAIMI M'hamed, TEBANI Hocine et TALEB Rachid pour leur l'aide. Mes remerciements vont aussi à mes frères, ma famille et mes amis qui, avec cette question récurrente, « le temps n'est pas venu pour la soutenance de cette thèse ? ».

## Résumé

Notre but dans cette thèse est d'élaborer un modèle mathématique pour un plasma froid qui résulte d'une décharge électrique dans un mélange de gaz Hydrogène/ gaz rares qui non stable de point de vue dynamique thermique. Pour cela on a divisé notre thèse en quatre chapitres plus une introduction générale et une conclusion générale.

Dans introduction générale nous avons l'intérêt de ce travail, comme nous avons présenté tous les chapitres et leurs contenus, qui sont comme suit :

Chapitre I de cette thèse a été consacré pour une présentation théorique générale sur les plasmas pour différents décharges électriques .nous avons présenté la classification des plasmas en fonction des températures, des densités électroniques et aussi les différents caractéristiques du plasma par leurs longueurs fondamentales et les fréquences électronique, sous somme aux sections efficaces des collisions électronique avec les ions ou les particules, on a illustré les différents sorte de collisions qui peuvent se produire dans le plasma, en fin on a expliqué les différents régions qui produites par les décharges électriques stables

Chapitre II est consacré pour le calcul des coefficients de transports des électrons se ci par la résolution de l'équation de Boltzmann, nous avons calculé la mobilité, le coefficient de diffusion et le de degré d'ionisation des mélanges Hydrogène avec chaque gaz l'hélium, néon, argon, krypton et le xénon. Enfin nous avons calculé et présenté les graphes pour ces gaz rares, les résultats on démontré que le gaz Argon c'est le idéale pour les décharges parmi les gaz rares, contenu de cette conclusion on la choisi comme mélange avec hydrogène dans notre travail.

Chapitre III nous avons concéder un plasma à couplage capacitif pour un mélange hydrogène/argon sous une basse pression. Après la présentation des différents composants, le principe de fonctionnement des réacteurs à couplage capacitif et le schéma électrique équivalent. Nous avons présenté aussi un modèle fluide de décharge électrique dans un mélange hydrogène/argon et on a appliqué ce modèle sur Comsol qui utilise la méthode des éléments fini pour résoudre les équations des dérivé partiel, enfin on présenté les résultats avec une interprétation.

Chapitre IV nous avons présenté un couplage inductif pour un mélange hydrogène/argon sous une très basse pression. Après la présentation des différents réacteurs, les principes de fonctionnement, ils fonctionnent comme réacteurs à couplage capacitif pour une alimentation à faible énergie et des réacteurs à couplage inductif pour des alimentations en haute énergie qui

une densité électronique assez grande. Nous avons aussi présenté le schéma électrique équivalent pour ce genre de décharge et aussi un modèle fluide pour un mélange hydrogène /argon qui relie aux équations électromagnétiques, équation de la fission thermique et aux équations du fluide. Enfin nous avons appliqué ce prototype sur Comsol et présentons les résultats avec discussion.

Concernant la conclusion générale, nous avons discuté et commenté les résultats obtenus dans ce travail.

## **Abstract:**

The aim of this thesis is to develop a mathematical model for non equilibrium cold plasma resulting from an electrical discharge in a gas mixture of hydrogen and noble gas. For this purpose, we have divided the thesis into four chapters, accompanied by a general introduction and a general conclusion.

In the **general introduction** we touched on the purpose of this work, we have also presented the different chapters and their contents. These chapters are as follows:

The **first chapter** of this thesis is devoted to a general theoretical overview on plasma resulting from different electrical discharges. In this chapter, we have also discussed the electron collision cross-sections with atoms or molecules, where we have discussed the different types of possible collision in the plasma. This chapter is closed by explaining the different areas resulting to the continuous electrical discharge.

The **second chapter** of this thesis is devoted to calculating the transport coefficients of electrons by solving the Boltzmann equation, where we calculated the mobility, the diffusion coefficient and the ionization coefficient in the mixtures of hydrogen on the first hand, and helium, neon, argon, krypton and xenon on the second hand. At the end of the chapter we calculated and Shown a paschen curve for all the noble gases, where the results showed that argon from all other noble gases is the optimal gas for using in the electrical discharge. In light of this result, we chose it to be used as a mixture with hydrogen gas in the following two chapters.

In the **third chapter**, we dealt about the capacitively coupled plasma in a gas mixture of hydrogen and argon at low pressure. After discussing the details of the installation and the operating principle of these types of reactors, as well as the details of the equivalent electrical circuit, we developed a fluid model for the electrical discharge in the mixture of hydrogen and argon gas. The model has been implemented on Comsol Myltiphysics, which depends on finite element method for solving the partial differential equations, and finally we present the results obtained and analyzed and discussed.

In the **fourth and final chapter** we discussed the inductively coupled plasma in a gaseous mixture of hydrogen and argon at very low pressure, where we showed the types of these reactors, as well as their operating modes, They function as capacitively coupled reactors when fed with weak power and inductively coupled reactors if they are fed with a strong power giving a large electronic density. In this chapter we also showed the equivalent electrical circuit for this type of discharge and developed a fluid model for electrical discharge

in the mixture of hydrogen and argon gas, this model is associated with electromagnetic equations, the heat transfer equation, and the fluid movement. At the end of this chapter we implemented this model on Comsol Myltphysics, then presented and discussed the obtained results.

## ملخص الأطروحة

نهدف من خلال هذه الأطروحة إلى وضع نموذج رياضي للبلازما الباردة الناتجة عن تفريغ كهربائي في خليط غازي متكون من الهيدروجين و غاز حامل وهي غير مستقرة من حيث الديناميكا الحرارية . لهذا الغرض، قمنا بتقسيم الأطروحة إلى أربعة فصول مرفقين بمقدمة عامة و خاتمة عامة .

في المقدمة العامة تطرقنا إلى الغاية المرجوة من هذا العمل، كما قمنا بالتقديم لمختلف الفصول و محتوياتها، و هي كما يلي:

**الفصل الأول** لهذه الأطروحة خصصناه لعرض لمحة نظرية عامة عن البلازما الناتجة عن مختلف التفريغات الكهربائية، حيث قمنا بعرض تصنيف البلازما حسب درجة حرارتها و كثافة إلكتروناتها، وكذا عرضنا فيه مختلف خصائص البلازما من خلال بعض أطوالها البينية و تردد الإلكترونات. تطرقنا في هذا الفصل كذلك إلى المقاطع الفعالة لتصادم الإلكترونات مع الذرات أو الجزيئات، حيث بينا مختلف أنواع التصادمات الممكنة الحدوث في البلازما، و في آخر هذا الفصل شرحنا مختلف المناطق التي ينتجها تفريغ كهربائي مستمر.

**الفصل الثاني** لهذه الأطروحة خصصناه لحساب معاملات النقل للإلكترونات من خلال حل معادلة بولتزمان. حيث قمنا بحساب الناقلية، معامل الانتشار، وكذا معامل التأين للخلائط المتكونة من المهدرجين من ناحية و الهليوم، النيون، الأرجون، الكريبتون، و الغزنيون، كل على حدى من ناحية أخرى. و في آخر الفصل قمنا بحساب و رسم منحني باشن لكل الغازات الحاملة، حيث بينت النتائج أن الأرجون من بين كل الغازات الحاملة الأخرى هو الغاز الأمثل للتفريغ، و على ضوء هذه النتيجة قمنا باختياره لاستعماله كخليط مع غاز الهيدروجين في الفصلين اللاحقين.

في **الفصل الثالث** تطرقنا إلى البلازما ذات الاقتران السعوي في خليط غازي متكون من الهيدروجين و الأرجون تحت ضغط منخفض. فبعد التطرق إلى تفاصيل التركيب و مبدأ تشغيل هته الأنواع من المفاعلات، وكذا تفصيل الدارة الكهربائية المكافئة لها، قمنا بتقديم نموذج مائع للتفريغ الكهربائي في الخليط المتكون من غاز الهيدروجين و الأرجون و قمنا بتنفيذ هذا النموذج على برنامج كمصل الذي يعتمد على طريقة العناصر المنتهية في حل المعادلات التفاضلية ذات المتغيرات الجزئية، وفي الأخير قمنا بعرض النتائج المتحصل عليها و تحليلها و مناقشتها.

و في **الفصل الرابع** و الأخير تطرقنا إلى البلازما ذات الاقتران الحثي (التحريضي) في خليط غازي متكون من الهيدروجين و الأرجون تحت ضغط جد منخفض، حيث قمنا بعرض أنواع هته المفاعلات، وكذا أنماط تشغيلها؛

إذ تشتغل كمفاعلات ذات اقتران سعوي عند تغذيتها بطاقة ضعيفة و مفاعلات ذات اقتران حثي (تخريضي) إذا ما تمت تغذيتها بطاقة قوية معطية كثافة إلكترونية كبيرة. في هذا الفصل قمنا كذلك بتقديم الدارة الكهربائية المكافئة لهذا النوع من التفريغ و قدمنا نموذج مائع للتفريغ الكهربائي في الخليط المتكون من غاز الهيدروجين و الأرغون، هذا النموذج مرتبط مع معادلات الكهرومغناطيسية، معادلة انتشار الحرارة، و معادلة حركة المائع. و في نهاية هذا الفصل قمنا بتنفيذ هذا النموذج على برنامج كمصل و قمنا بعرض النتائج و مناقشتها.

أما **الخاتمة العامة** فخصصناها لتحليل و مناقشة النتائج المهمة المتحصل عليها من خلال هذا العمل.



## Table des matières :

INTRODUCTION GENERALE	1
CHAPITRE : I	
APERÇU THEORIQUE SUR LES PLASMAS DE DECHARGE	
I. Introduction	7
II. les grandeurs de base des plasmas	7
II.1. Degré d'ionisation	7
II.2. Longueurs fondamentales du plasma	8
II.3. Température du plasma	9
II.4. Fréquence plasma	11
III. Section efficace de diffusion	12
III.1. Section efficace en mécanique classique	12
III.2. Section efficace en mécanique quantique	16
IV. Les potentiels d'interactions	17
V. Fonction de distribution	18
VI. Processus collisionnels dans le plasma	21
IV.1. Collision élastique	21
IV.2. Collision de transfert de charge	23
VI.3 Collision inélastique conservative	23
VI.4 Collision d'ionisation	24
VI.5 Attachement électronique	25
VI.6 Collision de détachement	25
VI.7 Collision de recombinaison	26
VI.8. Incidence des ions sur les parois	27
VII. Caractéristique courant-tension d'une décharge électrique	28
VII.1 Décharge Townsend et claquage	30
VII.2 Décharge Luminescente	31
VIII. Propriétés principales d'une décharge Luminescente	31
VI. Conclusion	32
Références de chapitre I	35
CHAPITRE : II	34
CALCUL DES COEFFICIENTS DE TRANSPORT DANS LE MELANGE HYDROGENE/ARGON	
I. Introduction	35
II. Résolution de l'Équation de Boltzmann et Dérivation des Coefficients du Transport	36
II.1. Simplification de l'équation de Boltzmann	36
II.2. Approximation à deux termes	37
II. 3. Croissance de la densité électronique	38
II.4. Champs à haute fréquence	40
II.5. Termes de collision	41
II.6. Équation de la Fonction de Distribution des Énergies Électroniques (FDEE)	44
II.7. Solution numérique de l'équation de FDEE	44

II. 8. Coefficients de transport et taux des réactions du modèle fluide	46
III. Sections efficaces	47
III.1. Hydrogène	49
III.2. Hélium	50
III.3. Néon	51
III.4. Argon	52
III.5. Krypton	53
III.6. Xénon	54
IV. Coefficients de transport dans les mélanges Hydrogène/gaz rares	56
IV.1. Mélange Hydrogène Hélium H <sub>2</sub> /He	56
IV.2. Mélange Hydrogène Néon H <sub>2</sub> /Ne	58
IV.3. Mélange Hydrogène Argon H <sub>2</sub> /Ar	60
IV.4. Mélange Hydrogène Krypton H <sub>2</sub> /Kr	62
IV.5. Mélange Hydrogène Xénon H <sub>2</sub> /Xe	64
V. Courbe de Pashen	67
VI. Conclusion	68
Références de chapitre II	70
<b>CHAPITRE III</b>	
<b>MODELISATION D'UNE DECHARGE RADIOFREQUENCE A COUPLAGE CAPACITIF DANS LE MELANGE HYDROGENE/ARGON</b>	
I. Introduction	76
II. Les réacteurs radiofréquences	76
II.1. Description de décharge radiofréquence à couplage capacitif	78
II.2. Principe de fonctionnement	79
II.3. Les décharges asymétriques: la tension d'auto-polarisation	80
II. 4. Circuits électriques équivalents	83
II. 5. Principaux mécanismes d'amorçage et d'entretien d'une décharge capacitive	85
II.6. Décharge capacitive à double fréquence	86
II.7. Limitations des décharges RF capacitives (Les réacteurs plasma à haute densité)	88
III. Modélisation des décharges radiofréquences	89
III.1. Modèle de circuit électrique équivalent	89
III.2. Modèles cinétiques/ particuliers / statistiques	90
III.3. Modèles hybrides	90
III.4. Modèles fluides	91
IV. Résultats Obtenus Dans un mélange Hydrogène/Argon	94
V. Conclusion	103
Références de chapitre III	104
<b>CHAPITRE IV</b>	
<b>MODELISATION D'UNE DECHARGE RADIOFREQUENCE A COUPLAGE INDUCTIF DANS LE MELANGE HYDROGENE/ARGON</b>	
I. Introduction	108
II. Les réacteurs plasmas à couplage inductif	108

II.1. Principe de fonctionnement	110
II.2. Régime de fonctionnement des plasmas à couplage inductif	113
II.3. Circuits électriques équivalents	115
III. Description du modèle utilisé pour la simulation de la décharge à couplage inductif	116
III.1. Équations des espèces du plasma	117
III.2. Équations électromagnétiques pour le couplage inductif	118
III.3. Équations de Navier-Stokes pour l'écoulement des neutres	119
III.4. Équation de transfert de la chaleur	120
III.5. Conditions aux limites	120
III.6. Paramètres d'entrée du modèle	121
IV. Résultats et discussion	122
V. Conclusion	130
Références de chapitre IV	131
CONCLUSION GENERALE	133

## Table des figures

Fig. I-1 : Classification du plasma en température électronique et en densité...	9
Fig. I-2: Représentation d'oscillation de plasma a symétrie sphérique	11
Fig. I-3: Représentation de la section efficace dans le cas où l'atome est considéré comme sphère et sans tenir compte le potentiel d'interaction	12
Fig. I-4: Représentation d'une collision binaire avec le paramètre d'impact, la déviation dans le centre de la masse par un angle $\theta$ , et la distance d'approche minimale $r_c$	13
Fig. I-5: Schématisation de l'interaction dans un référentiel de centre de masse	14
Fig. I-6: Représentation simplifiée d'une collision élastique électron-atome	22
Fig. I-7: Représentation schématique d'une collision de transfert de charge non-résonant	23
Fig. I-8: Représentation simplifiée d'une collision d'excitation	23
Fig. I-9: Représentation simplifiée de l'ionisation par impact électronique	24
Fig. I-10: Représentation simplifiée de l'attachement direct.	25
Fig. I-11: Représentation simplifiée de détachement	25
Fig. I-12: Schéma simple des processus possibles au niveau de la cible	27
Fig. I.13 : Schéma électrique de la production d'une décharge	28
Fig. I-14: Caractéristique Courant-Tension de la décharge électrique (Meek [12], Loeb [13], Druyvesteyn [14])	28
Fig. I-15: Propriétés principales d'une décharge Luminescente ( Delcroix [1])	31
Fig.II-1: Jeu complet des sections efficaces de collision électron-molécule d'Hydrogène	51
Fig.II-2: Jeu complet des sections efficaces de collision électron-atome d'Hélium	52
Fig.II-3:Jeu complet des sections efficaces de collision électron-atome du Néon	53
Fig.II-4: Jeu complet des sections efficaces de collision électron-atome d'Argon	54
Fig.II-5: Jeu complet des sections efficaces de collision électron-atome de Krypton	55
Fig.I-6: Jeu complet des sections efficaces de collision électron-atome de Xénon	56
Fig.II-7: Comparaison entre la mobilité réduite calculée et les données de mesure (symboles rouges pour l'hydrogène pur et symboles bleus pour le néon pur [29-35]), les lignes continues représentent la mobilité calculée dans le mélange ( $H_2/He$ )	57
Fig.II-8: Comparaison entre l'énergie caractéristique calculée et les données de mesure (symboles rouges pour l'hydrogène pur et symboles bleus pour le néon pur [36-41]), les lignes continues représentent l'énergie caractéristique calculée dans le mélange ( $H_2/He$ )	57
Fig.II-9: Comparaison entre le coefficient d'ionisations calculées et les données de mesure	58

(symboles rouges pour l'hydrogène pur et symboles bleus pour le néon pur [42-49]), les lignes continues représentent les coefficients d'ionisation calculés dans le mélange ( $H_2/He$ )	
Fig.II-10: Comparaison entre la mobilité réduite calculée et les données de mesure (symboles rouges pour l'hydrogène pur et symboles bleus pour le néon pur [29-33], [29], [50-52]), les lignes continues représentent la motilité calculée dans le mélange ( $H_2/Ne$ )	59
Fig.II-11: Comparaison entre l'énergie caractéristique calculée et les données de mesure (symboles rouges pour l'hydrogène pur et symboles bleus pour le néon pur [36-38], [41], [53]), les lignes continues représentent l'énergie caractéristique calculée dans le mélange ( $H_2/Ne$ )	59
Fig.II-12: Comparaison entre le coefficient d'ionisation calculé et les données de mesure (symboles rouges pour l'hydrogène pur et symboles bleus pour le néon pur [42-46], [54-56]), les lignes continues représentant les coefficients d'ionisation calculés dans le mélange ( $H_2/Ne$ )	60
Fig. II-13. Comparaison entre la mobilité réduite calculée et les données de mesure (symboles rouges pour l'hydrogène pur et symboles bleus pour l'argon pur [29-33], [57-60]), les lignes continues représentent la motilité calculée dans le mélange ( $H_2/Ar$ )	61
Fig.II-14: Comparaison entre l'énergie caractéristique calculée et les données de mesure (symboles rouges pour l'hydrogène pur et symboles bleus pour l'argon pur [36-38], [41], [61-63]), les lignes continues représentent l'énergie caractéristique calculée dans le mélange ( $H_2/Ar$ )	61
Fig.II-15: Comparaison entre le coefficient d'ionisation calculé et les données de mesure (symboles rouges pour l'hydrogène pur et symboles bleus pour l'argon pur [42-46], [62,64,65]), les lignes continues représentent les coefficients d'ionisation calculés dans le mélange ( $H_2/Ar$ )	62
Fig.II-16: Comparaison entre la mobilité réduite calculée et les données de mesure (symboles rouges pour l'hydrogène pur et symboles bleus pour le krypton pur [29-33], [58,66,67] ), les lignes continues représentant la motilité calculée dans le mélange ( $H_2/Kr$ )	63
Fig.II-17: Comparaison entre l'énergie caractéristique calculée et les données de mesure (symboles rouges pour l'hydrogène pur et symboles bleus pour le krypton pur [36-38], [41,53]), les lignes continues représentant l'énergie caractéristique calculée dans le mélange ( $H_2/Kr$ )	64
Fig.I-18: Comparaison entre le coefficient d'ionisation calculé et les mesures (symboles rouges pour l'hydrogène pur et symboles bleus pour le krypton pur [42-46], [65,68,69]), les lignes continues représentent les coefficients d'ionisation calculés dans le mélange ( $H_2/Kr$ )	64
Fig.II-19: Comparaison entre la mobilité réduite calculée et les données de mesure (symboles rouges pour l'hydrogène pur et symboles bleus pour le xénon pur [29-33], [60,66,70,71]), les lignes continues représentent la mobilité calculée dans le mélange ( $H_2/Xe$ )	65
Fig.II-20: Comparaison entre l'énergie caractéristique calculée et les données de mesure (symboles rouges pour l'hydrogène pur et symboles bleus pour le xénon [36-38], [53,72,73]), les lignes	66

continues représentent l'énergie caractéristique calculée dans le mélange (H <sub>2</sub> / Xe)	
Fig.II-21: Comparaison entre les coefficients d'ionisation calculés et les données de mesure (symboles rouges pour l'hydrogène pur et symboles bleus pour le xénon pur [42-46], [65,69,70]), les lignes continues représentant les coefficients d'ionisation calculés dans le mélange (H <sub>2</sub> / Xe)	66
Fig.II-22: Variation de la tension de claquage en fonction du produit (courbe de Paschen) dans les gaz rares et l'hydrogène pour une cathode de cuivre	68
Fig.III-1 : schéma simplifié d'un réacteur à couplage capacitif	77
Fig.III-2 : Schéma d'un réacteur à couplage capacitif utilisé pour le traitement de surfaces	79
Fig.III-3 : Oscillations, dans le temps, du potentiel entre les deux électrodes, pour une configuration asymétrique, d'une décharge RF à couplage capacitif.	81
Fig.III-4 : Tension radiofréquence $V_{rf}$ et tension de la cathode VC	82
Fig.III-5: modèle d'une décharge capacitive symétrique avec son circuit électrique équivalent	83
Fig.III-6: Excitation par double fréquence du plasma à couplage capacitif	87
Fig. III-7: Variation spatiotemporelle de la densité électronique pour une décharge radiofréquence dans un mélange (80% H <sub>2</sub> /20% Ar)	96
Fig. III-8: Variation spatiotemporelle de la Température électronique pour une décharge radiofréquence dans un mélange (80% H <sub>2</sub> /20% Ar) fictive	96
Fig. III-9: Variation spatiotemporelle du champ électrique pour une décharge radiofréquence dans un mélange (80% H <sub>2</sub> /20% Ar)	97
Fig. III-10: Variation spatiotemporelle de la densité des ions Ar <sup>+</sup> pour une décharge radiofréquence dans un mélange (80% H <sub>2</sub> /20% Ar)	98
Fig. III-11: Variation spatiotemporelle de la densité des ions ArH <sup>+</sup> pour une décharge radiofréquence dans un mélange (80% H <sub>2</sub> /20% Ar)	98
Fig. III-12: Variation spatiotemporelle de la densité des ions H <sub>3</sub> <sup>+</sup> pour une décharge radiofréquence dans un mélange (80% H <sub>2</sub> /20% Ar)	99
Fig. III-13: Variation spatiotemporelle de la densité des ions H <sub>2</sub> <sup>+</sup> pour une décharge radiofréquence dans un mélange (80% H <sub>2</sub> /20% Ar)	99
Fig. III-14: Variation spatiotemporelle de la densité des ions H <sup>+</sup> pour une décharge radiofréquence dans un mélange (80% H <sub>2</sub> /20% Ar)	100
Fig. III-15: Variation spatiotemporelle de la densité des atomes d'hydrogène H pour une décharge radiofréquence dans un mélange (80% H <sub>2</sub> /20% Ar)	101
Fig. III-16: Variation spatiotemporelle de la densité des atomes métastables de l'argon Ar* pour une décharge radiofréquence dans un mélange (80% H <sub>2</sub> /20% Ar)	101

Fig. III-17: Variation de la densité des électrons, Ar+, ArH+, H3+, H2+, et H+ en fonction du pourcentage d'Argon.	102
Fig.III-18: Variation de la densité des atomes d'Hydrogène et les métastables d'Argon en fonction du pourcentage d'Argon.	102
Fig. IV-1: Schématisation d'un réacteur inductif de type TCP avec configuration planaire	109
Fig. IV-2: Schématisation d'un réacteur inductif de type TCP avec configuration planaire	109
Fig. IV-3: lignes de champ électromagnétique dans un réacteur planaire	110
Fig. IV-4: Évolution de la densité électronique en fonction de la puissance dans un plasma O2/Ar (90%-10%) dans un réacteur ICP pour une pression de 10 mTorr [16].	114
Fig. IV-5 : Modèle électrique équivalent du plasma inductif Mode (H) et Mode (E)	115
Fig. IV-6: Schéma simplifié du réacteur inductif à modéliser	116
Fig. IV-7: Variation spatiale de la vitesse du gaz (unité [m.s-1])	123
Fig. IV-8: Variation spatiale du potentiel magnétique vecteur (unité [V.m-1.s-1])	125
Fig. IV-9: Variation spatiale de la température du gaz (unité [K])	125
Fig. IV-10: Variation spatiale du potentiel électrique (unité [V])	126
Fig. IV-11: Variation spatiale de l'énergie électronique moyenne (unité [eV])	126
Fig. IV-12: Variation spatiale de la densité électronique (unité [m-3])	127
Fig. IV-13: Variation spatiale de la densité des ions Ar+ (unité [m-3])	127
Fig. IV-14: Variation spatiale de la densité des ions ArH+ (unité [m-3])	128
Fig. IV-15: Variation spatiale de la densité des ions H3+ (unité [m-3])	128
Fig. IV-16: Variation spatiale de la densité des ions H2+ (unité [m-3])	129
Fig. IV-17: Variation spatiale de la densité des ions H+ (unité [m-3])	129
Fig. IV-18: Variation spatiale de la densité des métastable d'argon (unité [m-3])	130
Fig. IV-19: Variation spatiale de la densité des atomes d'hydrogène (unité [m-3])	130

## Liste des tableaux

Tableau III-1 : Tableau récapitulatif sur les codes plasma [37]	93
---	----

## Notation et symboles

$\alpha$	Degré d'ionisation
$n_e$	ne la densité des électrons
$n_0$	densité des neutres
$\lambda_L$	la longueur de Landau
$\lambda_D$	la longueur de Debye
$d_e$	la distance inter-particulaire des électrons
$F_S(r,v,t)$	Fonction de distribution à chaque espèce
$\mathcal{E}_c$	L'énergie cinétique moyenne
$\mathcal{E}_{pp}$	L'énergie la plus probable
$\Phi$	Le flux par unité de surface
$R_{su}$	Le Taux de réaction en ( $\text{cm}^3 \cdot \text{s}^{-1}$ )
$k_{su}$	La constante de réaction en ( $\text{cm}^3 \cdot \text{s}^{-1}$ )
$k_B$	k Constante de Boltzmann ( $k = 1.3806503 \cdot 10^{-23} \text{ m}^2 \cdot \text{kg} \cdot \text{s}^{-2} \cdot \text{K}^{-1}$ )
$\mu$	la masse réduite
$V_r$	la vitesse relative
T	la température
K	conductivité thermique
$C_p$	la capacité thermique spécifique à pression constante
Q	le terme source de la chaleur
$P_{ind}$	chauffage inductif
$Q_{elastique}$	chauffage par collision élastique
$Q_{inélastique}$	chauffage par collision inélastique
$Q_{joule}$	(chauffage par effet de joule
$\rho$	la viscosité dynamique
F	la force.
p	la pression du gaz
v	Vecteur de vitesse
e	Charge élémentaire
E	Vecteur du champ électrique
B	Vecteur du champ magnétique
$\mathcal{E}_k$	l'énergie seuil de l'excitation
C	Taux de changement de $f_e$
$\mathcal{E}$	l'énergie électronique en eV
$\sigma_m$	la section efficace totale du transfert de la quantité du mouvement
$\gamma$	est une constante
$D_e$	le coefficient de diffusion
N	la densité totale des neutres
$\delta$	la fonction delta de Dirac
S	la source de la production nette des électrons
$S_{\mathcal{E}}$	l'énergie totale transférée
$n_{\mathcal{E}}$	la densité d'énergie
$m_e$	Masse d'un électron ( $9.109 \cdot 10^{-31} \text{ kg}$ )
$\mu_e$	Mobilité électronique



$\nu$	Fréquence de collision
$C_A$	capacité de la gaine anodique
$C_C$	capacité de la gaine cathodique
$A_A$	l'aire de l'anode
$A_C$	L'aire de la cathode
$d_A$	L'épaisseur moyenne de la gaine anodique
$d_C$	L'épaisseur moyenne de la gaine cathodique
$\bar{U}_A$	Les tensions moyennes aux bornes des gaines anodiques
$\bar{U}_C$	Les tensions moyennes aux bornes des gaines cathodiques
$A_p$	l'aire de la section plasma
$Z_g$	L'impédance caractéristique d'une gaine ( $g = C, A$ )
$J$	la densité de courant
$\sigma_p$	est la conductivité du plasma
$\Gamma_k$	flux
$C$	la vitesse de lumière
$w$	la pulsation de la source
$\text{Im}(\epsilon_r)$	la partie imaginaire de la permittivité relative du plasma
$\sigma$	la conductivité du plasma.
$\delta_e$	d'épaisseur couche de peau
$v_e$	la vitesse des électrons
$\delta_p$	profondeur de la peau
$C_e$	une quantité de l'ordre de 1
$W_e$	Le terme représente le transfert de masse
$\epsilon_p$	constante diélectrique du plasma
$n_i$	la densité
$u_i$	le vecteur vitesse
$S_i$	le terme source
$m_i$	la masse des ions
$Z_i$	la charge des ions
$T_i$	la température des ions
$M_i$	représente le transfert par collision de la quantité de mouvement des ions aux espèces neutres.
$n^*$	la densité du neutre
$D^*$	le coefficient de diffusion du neutre
$S^*$	le terme source du neutre

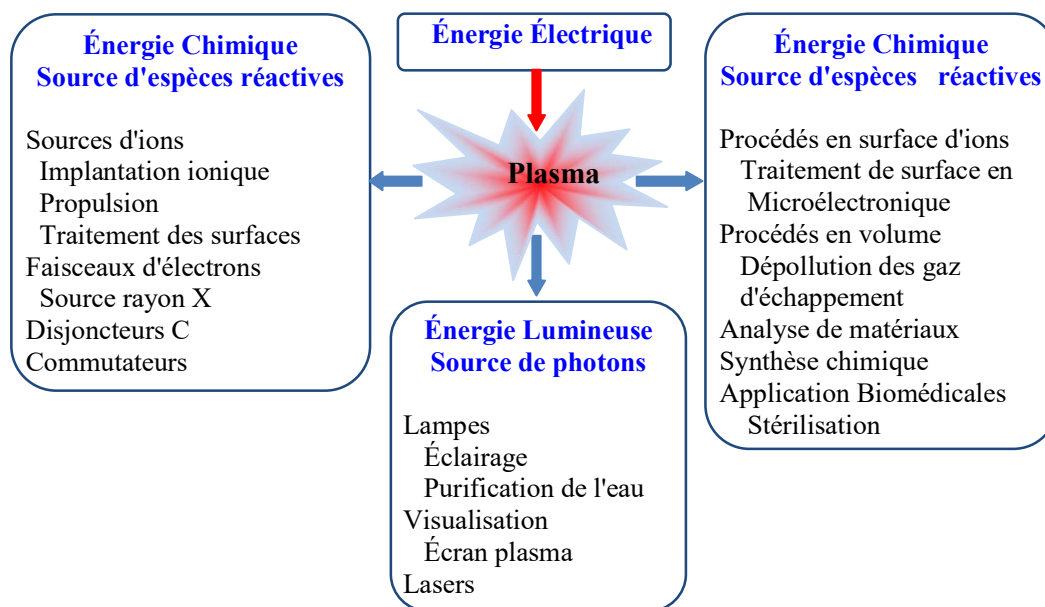
## Liste des abréviations

DC	Courant continu
FDEE	Fonction de distribution d'énergie électronique
$\mu$ O	Microonde
RF	Radiofréquence
TCP	Transformer coupled plasma
PECVD	Plasma-Enhanced Chemical Vapor Deposition
ICP	Inductively Coupled Plasma
CCP	Capacitively Coupled Plasma
MC	Monte Carlo
RCE	Résonance électronique cyclotronique
HDP	High Density Plasma

# **INTRODUCTION GENERALE**

## Introduction générale

Les plasmas froids de décharge électrique sont caractérisés par un rapport entre la température des électrons et celle du gaz, compris entre 1000 et plus. La température du milieu gazeux peut être voisine de la température ambiante alors que des électrons peuvent y acquérir des énergies suffisamment élevées pour faire avec les molécules et/ou les atomes du gaz, des collisions inélastiques d'ionisation, d'attachement et d'excitation. Les propriétés thermodynamiques de ces plasmas rendent alors les décharges de ce type particulièrement bien adaptées pour le traitement de surface de matériaux sensibles à la chaleur telle que les polymères. A l'origine, le terme plasma désignait un gaz totalement ionisé mais globalement neutre, puis cette définition a été étendue aux gaz partiellement ionisés, dont le comportement diffère de celui d'un gaz neutre. C'est un mélange d'électrons, d'ions et d'espèces neutres aux états excités ou fondamentaux. Les neutres excités retombent à leurs états fondamentaux en émettant un rayonnement électromagnétique rendant le plasma lumineux. Le digramme ci-dessous montre les différentes applications des plasmas de décharge.



Les enjeux commerciaux importants de la microélectronique et le coût croissant des réacteurs justifient de plus en plus des investissements dans la compréhension des plasmas froids. Cette compréhension passe nécessairement par la modélisation et la conception des codes en raison de la complexité des phénomènes qui se produisent dans les réacteurs à plasma. L'étude des plasmas a nécessité des efforts importants dans le domaine de la simulation numérique et bénéficie de la puissance actuelle des moyens de calculs et du

développement de méthodes numériques de plus en plus performantes. L'objectif principal de ces études numériques est de trouver des méthodes robustes, précises pour simuler les phénomènes mis en jeu en différentes géométries. Par ailleurs, la modélisation et la simulation numérique, compléments indispensables à l'analyse expérimentale, tiennent une part importante dans l'étude des plasmas. Elles permettent d'approcher le problème posé par une étude paramétrique qui donne la possibilité de faire varier des données pour comprendre les phénomènes dans des nouvelles conditions, et de trouver les conditions optimales de fonctionnement du procédé plasma. L'approche généralement retenue est d'étudier expérimentalement et mathématiquement les plasmas [1] qui contiennent toutes les caractéristiques importantes des systèmes réels. Des modèles sont alors construits afin d'identifier les processus importants du plasma. L'expérimentation vient alors valider les modèles, la compréhension obtenue s'applique au développement des systèmes industriels réels.

La mise en œuvre de réacteurs chimiques à plasma exige, dans l'optique d'une application industrielle, de définir les variables d'action qui permettront de contrôler les rendements chimique et énergétique du réacteur. Le calcul théorique des coefficients de transport d'un plasma nécessite la connaissance de sa composition chimique. Pour caractériser la composition d'un plasma formé d'un mélange de gaz, il faut indiquer les densités des différentes particules présentes. Si le plasma n'est pas en équilibre thermodynamique, les populations de ces particules peuvent varier dans d'assez larges limites et ce indépendamment les unes des autres. Lorsque le plasma est en équilibre thermodynamique local, il s'établit des relations quantitatives déterminées entre les substances entrant dans la composition du plasma. La température est une grandeur particulièrement pertinente à analyser, car elle est d'une part un élément de contrôle du bon déroulement des processus, et d'autre part un paramètre clé dans la connaissance des propriétés des plasmas. Les plasmas créés en laboratoire sont donc définis comme d'excellentes sources d'ions positifs, de photons et des neutres réactifs. Plusieurs sources existent pour la production de ces plasmas tels que les sources DC (à courant continu) [2], les sources RF (radiofréquences avec couplage capacitif ou inductif) et les sources micro-ondes [3]. Ces plasmas sont répartis, suivant leurs températures et leurs densités d'espèces chargées, dans une gamme allant de la température ambiante à faible pression [4], jusqu'à des températures pouvant atteindre plusieurs millions de degrés à des pressions plus élevées [5]. Les plasmas inductifs (Inductively Coupled Plasmas ou ICP) et les plasmas capacitifs (capacitif Coupled Plasmas ou CCP) sont utilisés

dans des domaines variés. On peut citer en premier lieu l'analyse spectrochimique car cette application a probablement été le moteur du plus d'études sur les plasmas inductifs [6], ont entre autres contribué au développement des techniques de modélisation de ces dispositifs [7]. De nombreuses études sont effectuées sur l'utilisation des plasmas inductifs capacitifs ou micro-onde pour détruire les polluants gazeux [8]. Les plasmas à pression atmosphériques sont également été étudiés en tant que source de lumière pour fabriquer des lampes. La technologie plasma à couplage inductif et spectroscopie d'émission atomique (ICP-AES), qui utilise l'argon ou l'air comme gaz plasmagène, montre la plus grande sensibilité pour la détection des métaux lourds. Cependant, la technique d'étalonnage du système reste un point délicat qui nourrit les recherches [9]. Ils ont aussi des applications industrielles, de plus en plus nombreuses, font appel aux technologies plasma. Leurs propriétés sont exploitées dans l'industrie de l'automobile et de l'aéronautique [10]. Les plasmas permettent alors d'enclencher très rapidement les phénomènes de combustion au sein des réacteurs, moteurs et de les maintenir même lorsque le mélange contient un faible taux de combustible. Dans le domaine de l'aérospatial, les plasmas sont utilisés pour modifier les altitudes et trajectoires des satellites en orbite [11]. Le principe est d'expulser les ions positifs produits dans un réacteur de manière à propulser le satellite selon la loi d'action-réaction. Les plasmas sont également de plus en plus utilisés dans le domaine de la médecine, notamment pour le traitement du cancer [1].

Les plasmas de l'hydrogène ont de nombreuses applications et en particulier pour le nettoyage des métaux oxydés dans le domaine de l'archéologie [12-15]. Le Musée national suisse utilise ces plasmas créés par des décharges radiofréquences dans l'hydrogène pour préserver l'intégrité de l'artefact [15]. Ces plasmas sont riches en atomes d'hydrogène ce qui permet de réduire l'hématite en le transformant en magnétite selon la réaction [16]:  
$$3\text{Fe}_2\text{O}_3 + 2\text{H} \rightarrow 2\text{Fe}_3\text{O}_4 + \text{H}_2\text{O}.$$

L'objectif de cette thèse est de contribuer à la modélisation d'une décharge radiofréquence à couplage capacitif ou à couplage inductif dans un mélange d'hydrogène avec un gaz rare, pour connaître les différents phénomènes physicochimiques des plasmas froids créés par ces décharges, notamment la densité électronique, l'enrichissement par les métastases et les atomes d'hydrogène, et aussi la connaissance des ions dominants. Pour atteindre cet objectif, la thèse est divisée en quatre chapitres.

Le premier chapitre présente des généralités et notions de base sur les plasmas et les décharges électriques tel que; la classification des plasmas selon leurs températures et leurs densités électroniques, les grandeurs qui les caractérisent (comme le degré d'ionisation, la température, la densité des électrons, les longueurs fondamentales etc.), la notion de la section efficace de diffusion différentielle en mécanique classique et en mécanique quantique, les différents potentiels d'interaction entre les particules dans le milieu plasma, les différents processus de collision (ionisation, attachement, excitation, etc.), et la fonction de distribution de différentes espèces pour décrire l'état interne du plasma. Ainsi, la caractéristique classique courant-tension d'une décharge électrique dans les gaz, et les propriétés principales d'une décharge luminescente

Le deuxième chapitre est consacré au calcul des coefficients de transport électronique dans les mélanges composés de l'hydrogène et un autre gaz rare (He, Ne, Ar, Kr, Xe) pour différents pourcentages 0% (hydrogène pur), 25%, 50%, 75%, 100% (gaz rare pur). Ces coefficients sont nécessaires pour la description macroscopique des plasmas de décharge. À la fin de chapitre on va montrer une comparaison entre les courbes de Paschen pour chaque gaz rare, et cela pour justifier le choix du gaz rare qui sera utilisé dans le mélange.

Dans le troisième chapitre on va présenter une description et fonctionnelle des réacteurs radiofréquences à couplage capacitif (CCP), ainsi la modélisation de la décharge dans ces réacteurs en utilisant le logiciel commercial COMSOL Multiphysics. C'est un logiciel de simulation qui permet de coupler les équations de plusieurs processus physiques et de résoudre ce système d'équations aux dérivées partielles par la méthode des éléments finis [17]. Il s'agit de modèle de type fluide avec les trois premiers moments de l'équation de Boltzmann couplés à l'équation de Poisson. Le chapitre sera terminé par la présentation et l'interprétation des résultats obtenus lors d'une décharge dans un mélange hydrogène/gaz rare.

Le chapitre quatre est réservé aux décharges radiofréquences à couplage inductif. Après, la présentation du principe de fonctionnement de ces réacteurs, le circuit électrique équivalent, on va présenter le modèle utilisé en couplant quatre phénomènes physique; le transport de différentes espèces chargées dans le plasma, le champ électromagnétique créé par la bobine alimentée par une source du courant radiofréquence, l'écoulement du mélange dans le réacteur, et le transfert thermique dans le réacteur, où le réacteur utilisé présente une géométrie cylindrique. Le chapitre sera terminé par la présentation des résultats obtenus pour une décharge dans le mélange hydrogène/gaz rare.

Enfin, la conclusion générale reprend l'ensemble des résultats importants avec des discussions.

### Références de l'introduction générale

- [1] M. Kushner, "Hybrid modelling of low temperature plasmas for fundamental investigations and equipment design," *Journal of Physics D : Applied Physics*, vol. 42, no. 19, p. 194013, 2009.
- [2] F. Bouanaka, S. Rebiai, H. Bahouh, S. Sahli, "Modeling of low pressure collisional argon plasma in DC discharge," *Global Journal of Physical Chemistry*, vol. 2, 2011.
- [3] A. Bogaerts, E. Neyts, R. Gijbels, J. van der Mullen, "Gas discharge plasmas and their applications," *Spectrochimica Acta Part B*, vol. 57, no. 4, pp. 609–658, 2002.
- [4] M.J. Baldwin, T.C. Lynch, R.P. Doerner, J.H. Yu, "Nanostructure formation on tungsten exposed to low-pressure rf helium plasmas: A study of ion energy threshold and early stage growth," *Journal of Nuclear Materials*, vol. 415, no. 1, p. S104-S107, 2011.
- [5] Y.M. Chiu et al., "Effect of plasma chemistry on the simulation of helium atmospheric pressure plasmas," *Computer Physics Communications*, vol. 182, no.1, pp. 167–169, 2011.
- [6] N. Mutsukura, K. I. Akita, "Infrared absorption spectroscopy measurements of amorphous carbon films prepared in CH<sub>4</sub>/N<sub>2</sub> rf discharge," *Thin Solid Films*, vol. 349, no. 1-2, p. 115–119, 1999.
- [7] M. Foucher, "Dynamique des plasmas radiofréquence à couplage inductif en gaz halogénés simples," Thèse de doctorat, Université Pierre et Marie Curie-Paris VI, 2016.
- [8] Y. J. Kim et al., "Development of a large-area, multi-helicon rectangular plasma source for TFT-LCD processing," *Thin Solid Films*, vol. 435, no. 1-2, p. 270-274, 2003.
- [9] K. Aumaille, A. Granier, B. Grolleau, G. Turban, "Mass spectrometric investigation of the positive ions formed in low-pressure oxygen / tetraethoxysilane and argon / tetraethoxysilane plasmas," *Journal of Applied Physics*, vol. 89, no. 9, p. 5227-5229, 2001.
- [10] S. M. Starikovskaia, "Plasma assisted ignition and combustion," *Journal of Physics D: Applied Physics*, vol. 39, no. 16, p. R265, 2006.
- [11] J. Cheng et al., "Two-dimensional simulation of inductively coupled plasma based on COMSOL and comparison with experimental data," *Journal of Semiconductors*, vol. 34, no 6, p. 066004, 2013.
- [12] Patrice Raynaud et Claude Pomot, "Nettoyage de surfaces de silicium par plasma (PMM) d'argon et d'hydrogène : étude de la désorption de l'hydrogène," Thèse de doctorat en Physique, université de Josef Fourier, Grenoble 1, 1991.



- [13]: P. Fuchs, "Low-pressure plasma cleaning of Au and PtIr noble metal surfaces," *Applied surface Science*, vol. 256, no. 5, pp. 1382-1390, 2009.
- [14]: S. Voltolina, et al., "Assessment of plasma torches as innovative tool for cleaning of historical stone materials," *Journal of Cultural Heritage*, vol. 22, pp. 940-950, 2016.
- [15]: K. Schmidt-Ott and V. Boissonnas, "Low-pressure hydrogen plasma: an assessment of its application on archaeological iron," *Studies in conservation*, vol. 47, no. 2, pp. 81-87, 2002.
- [16]: C. L. Xaplanteris and S. C. Xaplanteris, "Mechanical and Chemical Results in Plasma-Surface Contact. A Study of Sheath Parameters," *Phys. Astron. Int. J.*, vol. 2, no.1, p. 00044, 2018.
- [17] H. Kim, D. Kwon and N. Sik, "Development of New Method for Fluid Simulation of Capacitively Coupled Plasma Discharge," *J. Korean Phys. Soc.*, Vol. 49, pp. 1967-1971, 2006.

# **CHAPITRE: I**

## **APERÇU THEORIQUE SUR LES PLASMAS DE DECHARGE**

## I.1 Introduction

La matière est considérée à l'état plasma lorsqu'elle constitue un milieu gazeux neutre, totalement ionisé où se manifestent des effets collectifs [1]. En pratique, on utilise le terme plasma pour des états non complètement ionisés, mais électriquement neutres dans lequel se produisent des réactions chimiques entre les différentes espèces actives (électrons, ions, radicaux, espèces excitées, photons, ...). Ces réactions sont exploitées dans de nombreuses applications industrielles. Pour classer les plasmas nous devons connaître plusieurs grandeurs (le degré d'ionisation, la température, la densité des électrons, les longueurs fondamentales du plasma, etc.) qui seront détaillés dans ce chapitre. La notion de la section efficace de diffusion différentielle en mécanique classique et en mécanique quantique, les différents potentiels d'interaction entre les particules dans le milieu plasma, les différents processus de collision (ionisation, attachement, excitation, etc..) et la fonction de distribution de différentes espèces pour décrire l'état interne du plasma feront l'objet de ce chapitre. Enfin on va présenter la caractéristique classique courant-tension d'une décharge électrique dans les gaz ainsi que les propriétés principales d'une décharge lumineuse.

## I.2. les grandeurs de base des plasmas

Selon certains grandeurs de base comme la densité et la température des électrons, le degré d'ionisation, la pression, l'énergie transférée au plasma, etc. Les plasmas peuvent être classés en plusieurs types.

### I.2.1. Degré d'ionisation

Les gaz à leurs états normaux sont des isolants électriques, où ils ne contiennent pas de particules chargées . Cependant, si on leurs applique des champs électriques, ils deviennent conducteurs; les phénomènes complexes qui se produisent portent le nom de décharges dans les gaz. Alors, on signifie par le terme décharge électrique, le passage du courant dans un gaz. Ce courant permet de générer des plasmas froids réactifs qui se composent généralement de particules neutres excitées ou non, dissociées ou non, d'électrons et des ions positifs et négatifs. Dans ce cas, on peut définir une grandeur importante appelée degré d'ionisation par:

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

où  $n_e$  la densité des électrons et  $n_0$  la densité des neutres. Selon ce degré, on peut classer ces gaz ionisés en deux grandes familles:

- *Les gaz faiblement ionisés* dans lesquels la fréquence des collisions  $\nu_{e0}$  entre les électrons et les neutres est supérieure aux deux fréquences de collisions  $\nu_{ee} \approx \nu_{ei}$  des électrons entre eux ou avec les ions. Cette inégalité  $\nu_{e0} > \nu_{ee}, \nu_{ei}$  correspond à des degrés d'ionisation  $\alpha$  inférieurs à une valeur critique  $\alpha_0$  (il est noté que chaque gaz a une valeur critique, cette valeur est de l'ordre de  $10^{-4}$  pour l'argon et de l'ordre  $10^{-7}$  pour l'hélium [1]).

- *Les gaz fortement ionisés* dans lesquels on a au contraire  $\nu_{e0} < \nu_{ee}, \nu_{ei}$  ; qui correspondent à des degrés d'ionisation  $\alpha$  supérieurs à  $\alpha_0$ .

### **I.2.2. Longueurs fondamentales du plasma**

Trois longueurs peuvent nous permettre de caractériser les plasmas : la longueur de Landau ( $\lambda_L$ ), la longueur de Debye ( $\lambda_D$ ) et la distance inter-particulaire des électrons ( $d_e$ ).

La longueur de Landau caractérise les distances en deçà desquelles les corrélations deviennent très importantes et pour lesquelles les théories linéaires ne sont plus valables, cette longueur est exprimée en fonction de la charge élémentaire ( $e$ ), la permittivité du vide ( $\epsilon_0$ ) et l'énergie moyenne des électrons ( $k_B T_e$ ), où  $k_B$ , et  $T_e$  sont respectivement la constante du Boltzmann et la température des électrons:

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

La longueur de Debye donne l'ordre de grandeur du "rayon" du nuage électronique, entourant l'ion où le potentiel coulombien est écranté, elle s'exprime en fonction de la température des électrons ( $T_e$ ) et leur densité ( $n_e$ ):

$$\lambda_D = \left( \frac{\epsilon_0 k_B T_e}{e^2 n_e} \right)^{\frac{1}{2}} \quad (\text{I-3})$$

Cette longueur donnera aussi l'ordre de grandeur de la gaine qui se forme au voisinage de la paroi isolante du tube à décharge. Enfin, la distance inter-particulaire donne l'ordre de grandeur de la distance moyenne entre les électrons, elle est donnée par la relation suivante:

$$d_e = \frac{1}{n_e^{1/3}} \quad (\text{I-4})$$

Les plasmas cinétiques classiques correspondent à la double inégalité forte ( $\lambda_L \ll d_e \ll \lambda_D$ ), où  $\lambda_L \ll d_e$  indique que les *corrélations sont peu importantes* dans le plasma puisqu'elles sont faibles pour deux électrons situés à la distance moyenne  $d_e$  et  $d_e \ll \lambda_D$  montre que l'on trouve un grand nombre d'électrons dans la sphère engendrée par le rayon de Debye.

### I.2.3. Température du plasma

Dans les plasmas, les particules chargées, électrons et ions, sont définis par deux températures  $T_e$  et  $T_i$  distinctes. Les masses des neutres, des ions et des molécules étant proches, leurs températures sont voisines et de l'ordre de la température du gaz [2]. Par contre, les électrons à cause de leurs faibles masses sont fortement accélérés par les champs électriques et/ou magnétiques et acquièrent rapidement une haute énergie. Il est donc plus aisé de transmettre de l'énergie aux électrons qu'aux espèces plus lourdes. Selon la température des électrons et leur densité, donc un plasma prendra des noms différents, La figure I-1 donne la classification selon la température et la densité des électrons.

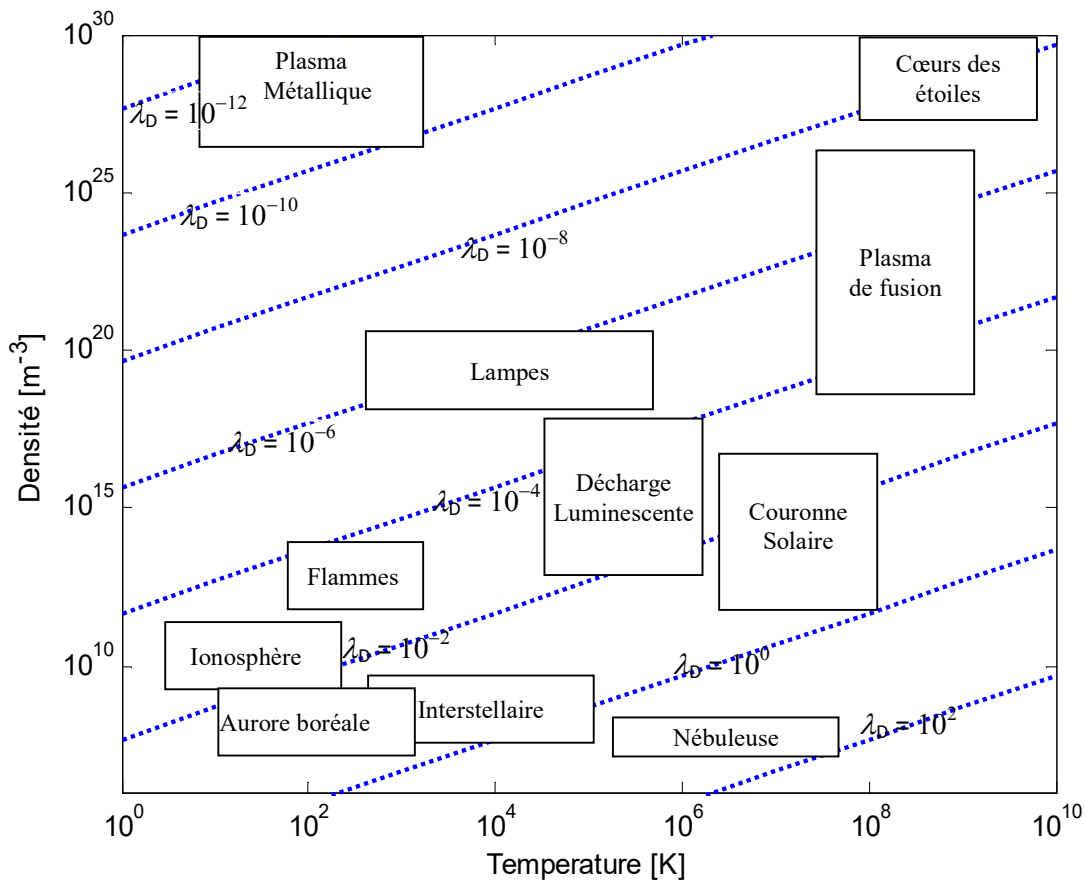


Fig. I-1 : Classification du plasma en température électronique et en densité

Selon la température du plasma, le degré d'ionisation et la densité des électrons, les plasmas peuvent être classés en trois grandes familles [3], [2]:

- *Les plasmas chauds* sont complètement ionisés et se trouvent dans les étoiles où s'y produit un ensemble complexe de réactions de fusion de noyaux légers tels que ceux des isotopes de l'hydrogène et de l'hélium. La température des espèces chargées est supérieure à 10 millions de degrés et le plasma est en équilibre thermodynamique total (voir par exemple: *Hastel* [3], *Brunetti* [4]).

- *Les plasmas thermiques* sont considérés chauds par la communauté des plasmas hors équilibre (plasma froid) et comme plasma froids par la communauté des plasmas de fusion (plasma chaud). Les plasmas thermiques sont des milieux gazeux partiellement ionisés ou fortement ionisés, dans lesquels toutes les particules sont considérées comme ont la même énergie cinétique moyenne. Pour cette raison on peut considérer qu'il existe un équilibre thermique ce qui permet de définir une température unique, dont la valeur dans les régions chaudes peut atteindre 30000 K et pour des pressions de l'ordre de celle de l'atmosphère, l'égalité des températures entre les particules lourdes et les électrons ( $T_e=T_i$ ) est essentiellement assurée par les collisions élastiques dont la densité électronique peut dépasser  $10^{16}\text{cm}^{-3}$ , et elle est environ 1000 fois plus élevée que celle de basse pression. La principale caractéristique des plasmas thermiques est qu'ils sont générés à une pression de  $10^4$ - $10^6$  Pa (l'ordre de la pression atmosphérique). Les électrons présentent donc une vitesse d'agitation thermique proportionnelle à leur température mais possèdent aussi une vitesse de dérive qui est bien plus petite que leurs vitesses thermiques. Les ions sont aussi énergétiques (réactifs et chauds) pour influencer le comportement du plasma. Il s'agit des plasmas de torche ou des plasmas d'arc. Ces plasmas sont ainsi loin d'être froids, mais sont appelés ainsi en

raison de leur énergie très inférieure à celle des plasmas chauds.

- *Les plasmas froids* sont des milieux faiblement ionisés obtenus par l'excitation d'un gaz sous l'effet d'une décharge électrique. Ces plasmas contiennent des molécules ou des atomes neutres (majoritaires) des ions, des électrons, des espèces radicalaires (chimiquement très actives) et des espèces excitées. Dans ce type de plasmas, seuls les électrons sont portés à haute température (haute énergie cinétique) et qui sont responsables à la majorité des réactions chimiques, les autres particules (ions, neutres, radicaux fragments de molécules)

restent à la température ambiante (hors équilibre thermodynamique), et ils sont considérés comme froids [3].

#### I.2.4. Fréquence plasma

L'introduction d'un excès de charge électrique positive ou négative dans un plasma initialement neutre, produit une perturbation locale, celui-ci va tendre à revenir vers l'état d'équilibre de neutralité. Cependant, cette perturbation engendre une oscillation non amortie du plasma. Considérons, par exemple, la situation représentée sur la figure I-2, où il y a une zone qui contient un excès d'électrons et la zone environnante est déficiente en électrons. Cela produit un champ électrique tendant à créer un mouvement des électrons vers la zone déficiente en électrons. Dans ce mouvement, ceux-ci acquerront une certaine énergie cinétique et ils pourront, au bout d'un certain temps, la situation initiale est reconstituée et le cycle recommence.

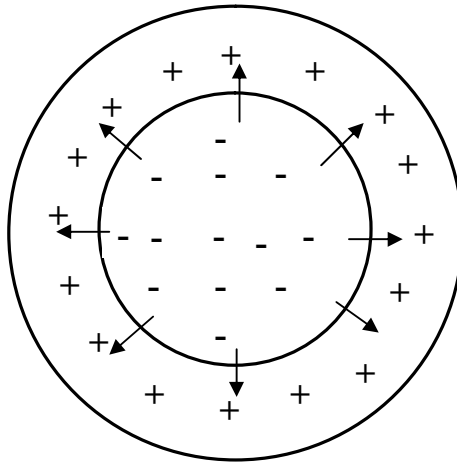


Fig. I-2: Représentation d'oscillation de plasma a symétrie sphérique

Au cours de ces vibrations, les ions beaucoup plus lourds que les électrons restent pratiquement immobiles et les vibrations sont appelées oscillations électroniques du plasma, leur pulsation ( $\omega_p$ ) est donnée par la relation suivante:

$$\omega_p = \sqrt{\frac{e^2 n_e}{\epsilon_0 m_e}} \quad (\text{I-5})$$

où  $e$  est la charge de l'électron et  $n_e$  la densité électronique du plasma. Cette pulsation est souvent appelée improprement *fréquence plasma*. En toute rigueur la fréquence plasma est donnée par :

$$f_p = \frac{\omega_p}{2\pi} \quad (\text{I-6})$$

### I.3. Section efficace de diffusion

Les sections efficaces de diffusion différentielle et totale sont des outils expérimentaux largement utilisés dans l'étude de la physique atomique et subatomique. La section efficace de diffusion permet de relier le paramètre d'impact à l'angle de diffusion d'une particule ayant subi une collision avec le champ de force d'une autre particule. Dans cette section, on va discuter la notion de la section efficace du côté physique et du côté mathématique, en tenant compte la théorie de la physique classique et la théorie de la mécanique quantique.

#### I.3.1. Section efficace en mécanique classique

L'idée d'utiliser une surface pour exprimer une telle probabilité d'interaction remonte probablement à la découverte du noyau atomique par Rutherford en 1911 [1], la section efficace est la surface fictive que devrait avoir une particule cible pour reproduire la probabilité observée de collision ou de réaction avec une autre particule. Si nous supposons que ces collisions se produisent entre objets matériels impénétrables (sphères durs), comme il est montré dans la figure suivante:



Fig. I-3: Représentation de la section efficace dans le cas où l'atome est considéré comme sphère et sans tenir compte du potentiel d'interaction

Si le projectile (électron ou ion) et la cible (atome ou molécule de Rayon  $R$ ) sont considérés comme des sphères durs sans potentiel d'interaction, la section efficace électron-atome ( $\sigma_{e-A}$ ) et la section efficace ion-atome peuvent être calculées par les relations suivantes:

$$\begin{aligned} \sigma_{e-A} &= \pi R^2 \\ \sigma_{A-A} &= 4\pi R^2 \end{aligned} \quad (\text{I-7})$$

Maintenant, si on considère le cas d'un potentiel d'interaction central  $U(r)$  qui dépend seulement de la distance  $r$  par rapport au centre du potentiel. Le faisceau incident sera dans la



direction de l'axe  $z$  et donc la section efficace différentielle sera une fonction de l'angle axiale  $\theta$  seulement et pas de l'angle azimutale  $\varphi$ . Le paramètre d'impact du projectile  $b$  est défini comme la distance entre la trajectoire du projectile et l'axe passant par le centre de la cible (voir figure I-4) dans la région sans interaction (à grande distance avant la cible).

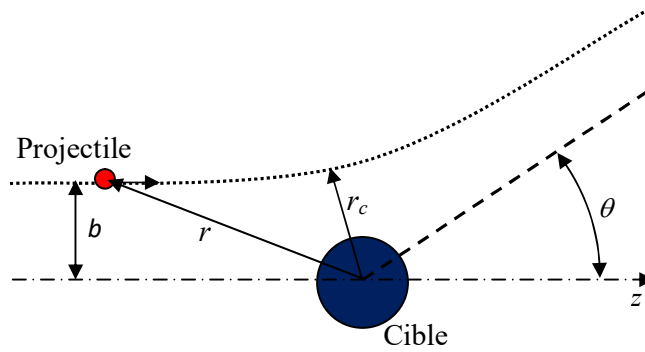


Fig. I-4: Représentation d'une collision binaire avec le paramètre d'impact, la déviation dans le centre de la masse par un angle  $\theta$ , et la distance d'approche minimale  $r_c$

Pour comprendre les idées sous-jacentes aux sections efficaces de diffusion, il est d'abord nécessaire de comprendre la physique derrière une particule se déplaçant dans un champ de force central. Il est connu et peut être dérivé de la dynamique lagrangienne appliquée à une particule se déplaçant dans un champ de force central que le moment cinétique de la particule est conservé:

$$p = \mu r \dot{\theta} \Rightarrow \dot{\theta} = \frac{p}{\mu r} \quad (\text{I-8})$$

où  $\mu$  est la masse réduite du système de particules. En l'absence de forces dissipatives, l'énergie totale ( $E=E_c+U$ , où  $E_c$ : est l'énergie cinétique et  $U$ : est l'énergie potentiel) du système doit également être conservée :

$$E = \frac{1}{2} \mu (\dot{r}^2 + r^2 \dot{\theta}^2) + U(r) \quad (\text{I-9})$$

En substituant la valeur de la vitesse angulaire trouvée à partir de la conservation du moment cinétique, l'énergie prend la forme suivante:

$$E = \frac{1}{2} \mu \dot{r}^2 + \frac{1}{2} \frac{p^2}{\mu r^2} + U(r) \quad (\text{I-10})$$

Cette équation peut être résolue pour la vitesse radiale:

$$\dot{r} = \pm \sqrt{\frac{2}{\mu} (E - U(r)) - \frac{p^2}{\mu r^2}} \quad (\text{I-11})$$

D'après la règle de dérivation en chaîne on a:

$$d\theta = \frac{d\theta}{dt} \cdot \frac{dt}{dr} \cdot dr = \frac{\dot{\theta}}{\dot{r}} dr \quad (\text{I-12})$$

Il s'ensuit que les équations (I-8), (I-11) et (I-12):

$$\theta(r) = \pm \int \frac{(p/r^2) dr}{\sqrt{2\mu \left( E - U(r) - \frac{p^2}{2\mu r^2} \right)}} \quad (\text{I-13})$$

À partir de l'équation (I-11), la vitesse radiale s'annule aux racines du radical. Cela indique à ces points que la particule connaît un tournant. Ces deux racines représentent les rayons maximal et minimal atteints par l'orbite. Le changement angulaire de l'orbite est le double de celui qui résulterait d'un déplacement du minimum au maximum:

$$\Delta\theta = \pm \int_{r_{\min}}^{r_{\max}} \frac{(p/r^2) dr}{\sqrt{2\mu \left( E - U(r) - \frac{p^2}{2\mu r^2} \right)}} \quad (\text{I-14})$$

Cette dernière équation sera utilisée dans l'analyse de l'angle de diffusion d'une particule lorsqu'elle se rapproche du champ de force central. La section efficace de diffusion différentielle est définie comme le nombre d'interactions par particule cible menant à la diffusion dans un élément de l'angle solide à un angle donné divisé par le nombre de particules incidentes par unité de surface. L'analyse suivante est effectuée dans le référentiel de centre de masse. Dans la figure I-5, une particule incidente avec le paramètre d'impact  $b$  est déviée d'un angle  $\theta$  dans un détecteur situé à une grande distance  $L$  du centre de diffusion  $O$ . La surface spécifique différentielle du détecteur est représentée par  $dS$ .

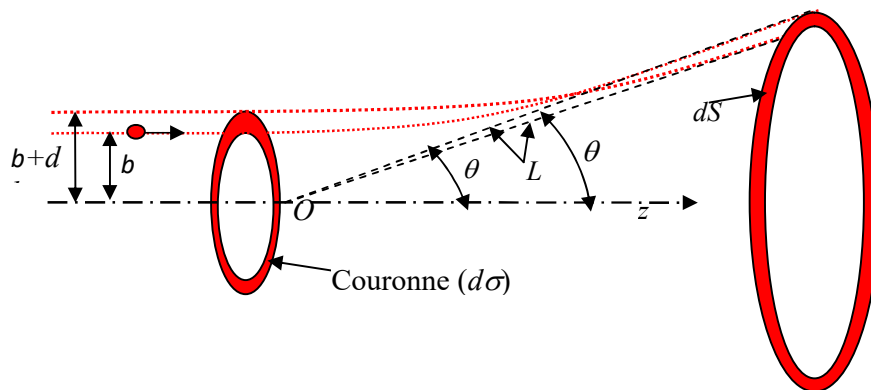


Fig. I-5: Schématisation de l'interaction dans un référentiel de centre de masse

L'angle solide à travers lequel les particules sont déviées sur la figure I-5, est représenté par  $d\Omega$  et peut être obtenu par la relation I-15. Il est important de regarder la figure I-5 pour comprendre la relation entre la surface différentielle  $dS$  et l'angle de déviation.

$$d\Omega = \frac{dS}{L^2} = \frac{(L \cdot |d\theta|)(2\pi L \sin \theta)}{L^2} = 2\pi \sin \theta |d\theta| \quad (\text{I-15})$$

La section efficace différentielle est définie comme le rapport entre la surface de la couronne  $d\sigma$  et l'angle solide  $d\Omega$ , elle est exprimée par la relation suivante:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{2\pi b \cdot |db|}{2\pi \sin \theta |d\theta|} = \frac{2\pi b \cdot |db|}{2\pi \sin \theta |d\theta|} = -\frac{b}{\sin \theta} \cdot \frac{db}{d\theta} \quad (\text{I-16})$$

où l'équation est négative parce qu'une augmentation de  $db$  dans le paramètre d'impact signifie que moins de force est exercée sur la particule, ce qui entraîne une diminution de l'angle de diffusion. L'expression qui relie le paramètre d'impact et l'angle de diffusion d'un système à deux particules subissant une collision de champ de force central dans le repère de centre de masse est donnée comme suit [5]:

$$\theta = \pi - 2b \int_{r_c}^{\infty} \frac{(b/r^2) dr}{\sqrt{1 - \left(\frac{b}{r}\right)^2 - \left(\frac{U(r)}{E_c}\right)^2}} \quad (\text{I-17})$$

$r_c$  est le pôle de l'équation (I-17), il satisfait l'équation suivante:

$$\left(\frac{b}{r_c}\right)^2 + \left(\frac{U(r_c)}{E_c}\right)^2 = 1 \quad (\text{I-18})$$

Maintenant, la section efficace de transfert de quantité du mouvement  $\sigma_m$  peut être obtenue en intégrant le produit de la section efficace différentielle par le terme  $(1 - \cos \theta)$  sur l'angle solide:

$$\sigma_m(E_c) = 2\pi \int_0^{2\pi} \frac{d\sigma(E_c, \theta)}{d\Omega} (1 - \cos \theta) \sin \theta d\theta \quad (\text{I-19})$$

Jusqu'à présent, les discussions ont surtout porté sur les mathématiques, mais il est important de les comprendre pour utiliser l'idée de la section efficace de diffusion de manière pratique, où l'une des utilisations les plus remarquables de cette idée provient de l'équation de diffusion de Rutherford. En utilisant la méthode décrite dans la partie mathématique, il est assez simple de dériver une équation pour la section efficace de diffusion d'une particule subissant une interaction avec un noyau où le potentiel d'interaction est colombien de la forme  $V_0/r$ . L'équation pour cette section est la suivante:

$$\frac{d\sigma(E_c, \theta)}{d\Omega} = \frac{V_0^2}{(4E_c)^2} \cdot \frac{1}{\sin^4\left(\frac{\theta}{2}\right)} \quad (\text{I-20})$$

### I.3.2. Section efficace en mécanique quantique

En mécanique quantique [5], la nature ondulatoire du projectile oblige à considérer le faisceau d'électrons ou d'ions après la collision comme une onde émise par la cible. La section efficace différentielle est ensuite calculée à partir de l'amplitude de diffusion  $f(\theta)$ :

$$\begin{aligned} \frac{d\sigma(T, \theta)}{d\Omega} &= |f(\theta)|^2 \\ f(\theta) &= \frac{1}{2ik} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1)(e^{2i\delta_l} - 1)P_l(\cos\theta) \end{aligned} \quad (\text{I-21})$$

où  $k$  représente le nombre d'onde calculé à partir de l'énergie relative de collision  $T$  et la masse réduite  $\mu_r$ , ( $T = \hbar^2 k^2 / 2\mu_r$ ) avec  $\hbar$  : est la constante de Planck.  $\delta_l$  est l'angle de déphasage partiel de l'onde d'ordre  $l$ . Après la substitution de l'équation (I-21) dans l'équation (I-19) et en intégrant par rapport à  $\theta$ , il s'ensuit que  $\sigma_m$  peut être calculé directement à partir de l'angle de déphasage partiel  $\delta_l$ .

$$\sigma_m(T) = \frac{4\pi}{k^2} \sum_{l=0}^{\infty} (l+1) \sin^2(\delta_{l+1} - \delta_l) \quad (\text{I-22})$$

L'angle de déphasage partiel  $\delta_l$  est calculé simplement en utilisant l'approche semi-classique JWKB (Jeffreys Wentzel Kramers Brillouin) [5] et le potentiel d'interaction.

$$\delta_l^{JWKB} = \underset{r}{\lim} \left[ \frac{\pi}{4} + \int_{r_c}^{\infty} \sqrt{k^2 + \frac{l(l+1)}{r^2} - \frac{2\mu_r U(r)}{\hbar^2}} dr - \frac{l\pi}{2} - kr \right] \quad (\text{I-23})$$

L'angle de déphasage partiel  $\delta_l$  peut être approximé à  $\delta_l^{JWKB}$ , ( $\delta = \delta_l^{JWKB}$ ) uniquement si le potentiel d'interaction change suffisamment lentement avec la distance  $r$ . En utilisant l'astuce de Langer pour remplacer  $(l+1)$  par  $(l+1)+1/4 = (l+1/2)^2$ , l'angle de déphasage amélioré peut être exprimé par:

$$\delta_l \approx \frac{\pi}{2} \left( l + \frac{1}{2} \right) - kr \int_{r_c}^{\infty} \left[ k - \sqrt{k^2 + \frac{(l+1/2)^2}{r^2} - \frac{2\mu_r U(r)}{\hbar^2}} \right] dr \quad (\text{I-24})$$

### I.4. Les potentiels d'interactions

Plusieurs types de potentiel inter-particulaires sont décrits dans la littérature :

*Potentiel de Thomas-Fermi* : Il est possible d'écrire pour toute interaction, symétrique ou non, l'expression de son potentiel  $U(r)$  suivant la forme :

$$U(r) = \sqrt{A_1 A_2} \exp\left(-\frac{B_1 + B_2}{2} r\right) \quad (\text{I-25})$$

où  $A_1, B_1$  et  $A_2, B_2$  sont les coefficients de Born – Mayer de la particule cible et la projectile (1 et 2 respectivement). Abrahamson [6] donne, pour les atomes dont le nombre de charges est compris entre 2 et 105, les coefficients de Born - Mayer pour les potentiels d'interaction de ce type et  $r$  est la distance inter-particulaire

*Potentiel en puissance de  $r$*  : Ce potentiel est donné par l'expression suivante :

$$U(r) = \frac{V_0}{r^n} \quad (\text{I-26})$$

Généralement  $n=4$  dans le cas du potentiel classique de polarisation, et  $V_0$  est déterminée à partir de la polarisabilité de la particule cible (voir par exemple Lieberman [2]).

*Potentiel de Morse* : Le potentiel de Morse [7], nommé d'après le physicien Philip Morse, est applicable pour une molécule diatomique. Ce potentiel est donné par l'expression suivante :

$$U(r) = D_e \left[ \exp(-2\beta(r-r_m)) - 2\exp(-\beta(r-r_m)) \right] \quad (\text{I-27})$$

$D_e$  : est la profondeur du puits de potentiel,  $r_m$  la distance inter-particulaire correspondant à l'équilibre (c'est-à-dire correspondant au minimum du potentiel), et  $\beta$  est un coefficient.

*Potentiel de Lennard-Jones* : Il est souvent utilisé pour décrire les interactions entre deux atomes au sein d'un gaz monoatomique. Son expression en fonction de la distance  $r$  entre les deux noyaux atomiques est :

$$U(r) = \frac{A}{r^{12}} - \frac{B}{r^6} \quad (\text{I-28})$$

où  $A, B$  sont des coefficients proportionnels à l'énergie du puits de potentiel et à la distance minimale d'approche. Le terme à la puissance 6, terme attractif dominant à grande distance, porte le nom d'interaction de *Van der Waals*.

*Potentiel Buckingham* : Ce sont des potentiels très dissymétriques faiblement attractifs et dont la répulsion est plus forte que la partie répulsive du potentiel de Lennard-Jones. Son expression est :

$$U(r) = \frac{D_e}{\alpha - 6} \left[ 6 \exp\left(\alpha \left(1 - \frac{r}{r_m}\right)\right) - \alpha \left(\frac{r}{r_m}\right)^6 \right] \quad (\text{I-29})$$

*Potentiel N core* : Différents modèles de potentiels ont été utilisés pour décrire le cas d'interaction ion-atome, ces potentiels donnent des coefficients de transport en bon accord avec les mesures. Mais dans le cas d'un ion poly atomique avec le gaz parent, Mason et *al.* [8] ont développé un modèle simple pour simuler le noyau sphérique rigide dans les systèmes non-polaire représenté par le potentiel central:

$$U(r) = \frac{\varepsilon_\omega}{2} \left[ \left(\frac{r_m - a}{r - a}\right)^{12} - 3 \left(\frac{r_m - a}{r_m}\right)^4 \right] \quad (\text{I-30})$$

où  $r_m$  et  $\varepsilon_\omega$  sont respectivement la position et la valeur du puits de potentiel,  $r$  est la distance interatomique, et  $a$  est le diamètre du noyau rigide.

Dans le cas d'interaction entre les ions poly atomiques avec des molécules d'un gaz non-parent, le meilleur potentiel est donné par la relation suivante [8]:

$$U(r) = \varepsilon_\omega \left[ 2 \left(\frac{r_m - a}{r - a}\right)^6 - 3 \left(\frac{r_m - a}{r_m}\right)^4 \right] \quad (\text{I-31})$$

### I.5. Fonction de distribution

Pour une description fine d'un plasma au voisinage d'un point donné à un instant donné, la connaissance des densités est insuffisante, il faut aussi décrire l'état énergétique des particules, en particulier leur distribution en vitesse. Pour cela on définit la fonction de distribution de l'espèce  $s$  par la fonction  $f_s(r, v, t)$ . En fait, on peut associer une fonction de distribution à chaque espèce présente dans le plasma et la connaissance de la fonction de distribution de chaque espèce permet de caractériser totalement le plasma étudié.

La fonction de distribution donne le nombre moyen de particules de type  $s$  et de masse  $m_s$  qui, se trouvent dans un volume élémentaire  $dr^3$  autour d'un point  $r$  dont les extrémités de vecteur vitesse se trouvent dans un volume de l'espace des vitesses  $dv^3$  autour du point  $v$ , et à l'instant  $t$ .

A l'équilibre thermodynamique, la fonction de distribution de vitesse est maxwellienne :

$$f_s(r, v, t) = n_s(r, t) \left(\frac{m_s}{2\pi k_B T}\right)^{3/2} \exp\left(-\frac{m_s v^2}{2k_B T}\right) \quad (\text{I-32})$$

où  $k_B$  est la constante de Boltzmann, et  $T$  la température et  $n_s(r,t)$  la densité de la particule de type  $s$  autour du point  $r$  et à l'instant  $t$ . La fonction de distribution maxwellienne en énergie qui correspond au nombre de particules dont leurs énergies sont comprises entre  $\varepsilon$  et  $\varepsilon + d\varepsilon$  s'écrit :

$$f_s(r, \varepsilon, t) = n_s(r, t) \frac{2}{k_B T} \left( \frac{\varepsilon}{\pi k_B T} \right)^{1/2} \exp\left(-\frac{\varepsilon}{k_B T}\right) \quad (\text{I-33})$$

Dans les plasmas froids hors équilibre thermique et chimique, la fonction de distribution n'est malheureusement pas maxwellienne. Elle peut être calculée à l'aide de la résolution de l'équation de Boltzmann par des méthodes directes ou par simulation de type Monte Carlo. Le calcul de cette fonction de distribution et des grandeurs associées fera l'objet du chapitre suivant de ce travail .

Une fois cette fonction de distribution est connue, on peut facilement calculer :

- *La densité*

$$n_s = \iiint f_s dv^3 = \int_0^\infty 4.\pi.v^2 .f_s dv \quad (\text{I-34})$$

- *La vitesse moyenne*

$$\bar{v} = \frac{1}{n_s} \iiint v f_s dv^3 = \frac{1}{n_s} \int_0^\infty 4.\pi f_s v^3 dv = \left( \frac{8 k_B T}{\pi m_s} \right)^{1/2} \quad (\text{I-35})$$

La valeur de  $(8k_B T/\pi m_s)^{1/2}$  n'est vraie que dans le cas d'une maxwellienne

- *La vitesse la plus probable* : on calcule la vitesse pour laquelle  $4\pi v^2 f_s(r, v, t)$  est maximum. Celui-ci se trouve à la valeur de la vitesse pour laquelle la dérivée par rapport à la vitesse est nulle

$$v_{pp} = \frac{d}{dv} [4\pi v^2 f_s(r, v, t)] = \left( \frac{2 k_B T}{m_s} \right)^{1/2} \quad (\text{I-36})$$

La valeur de  $(2k_B T/m_s)^{1/2}$  n'est vraie que dans le cas d'une maxwellienne

- *La vitesse quadratique moyenne (Root Mean Square)*

$$V_{RMS} = \frac{1}{n_s} \sqrt{\iiint v^2 f_s dv^3} = \frac{1}{n_s} \sqrt{\int_0^\infty 4.\pi v^4 f_s dv} = \left( \frac{3 k_B T}{m} \right)^{1/2} \quad (\text{I-37})$$

La valeur de  $(3k_B T/m_s)^{1/2}$  n'est vraie que dans le cas d'une maxwellienne

- *L'énergie cinétique moyenne*

$$\varepsilon_c = \frac{1}{n_s} \frac{1}{2} m_s \iiint f_s (v - \bar{v})^2 dv^3 \quad (\text{I-38})$$

$$= \frac{1}{n_s} \frac{1}{2} m_s \int_0^\infty 4 \cdot \pi \cdot v^2 f_s (v - \bar{v})^2 dv = \frac{3}{2} k_B T$$

La valeur de  $3k_B T/2$  n'est vraie que dans le cas d'une maxwellienne

- *L'énergie la plus probable*

Comme pour la vitesse, l'énergie la plus probable est calculée en prenant la dérivée mais ici comme on veut obtenir l'énergie, on utilise les expressions écrites en termes de l'énergie.

$$\varepsilon_{pp} = \frac{d}{d\varepsilon} \left[ \left( \frac{4\varepsilon}{\pi (k_B T)^3} \right)^{1/2} \exp\left(-\frac{\varepsilon}{k_B T}\right) \right] = \frac{1}{2} k_B T \quad (\text{I-39})$$

Cette relation est vérifiée dans le cas d'une maxwellienne

- *Le flux* par unité de surface de particule traversant un élément de plan dans le même sens que sa normale  $u$

$$\phi = \iiint_{\vec{u} \cdot \vec{v} > 0} f_s \vec{v} \cdot \vec{u} dv^3 \quad (\text{I-40})$$

- *Le Taux de réaction* en  $(\text{cm}^{-3} \cdot \text{s}^{-1})$  entre deux particules (particules de type  $s$  et particules de type  $u$ ).

$$R_{su} = \iiint \iiint v_r \cdot \sigma(v_r) \cdot f_s \cdot f_u \cdot dv_u^3 \cdot dv_s^3 \quad (\text{I-41})$$

$$= n_s \cdot n_u \sqrt{\frac{2}{\pi}} \left( \frac{\mu}{k_B T} \right)^{3/2} \int_0^\infty v_r^3 \cdot \sigma(v_r) \cdot \exp\left(-\frac{\mu v_r^2}{2k_B T}\right) \cdot dv_r$$

où  $v_r$  et  $\mu$  sont respectivement la vitesse relative et la masse réduite. Le dernier terme n'est vérifié que dans le cas d'une maxwellienne.

- *La constante de réaction* en  $(\text{cm}^3 \cdot \text{s}^{-1})$  est :

$$k_{su} = \langle \sigma(v) \cdot v \rangle = \frac{R_{su}}{n_s \cdot n_u} \quad (\text{I-42})$$

où le terme entre crochet ( $\langle \rangle$ ) signifie la valeur moyenne.



- La fréquence de réaction en ( $s^{-1}$ ) pour une particule de type  $s$  avec une particule de type  $u$  est donnée par la relation suivante :

$$\nu_{su} = n_s \langle \sigma(v) \cdot v \rangle = n_s \cdot k_{su} \quad (I-43)$$

Cette fréquence de collision ou de réaction est fonction de la densité des particules cibles  $n_u(r)$ , la section efficace totale  $\sigma_T(E_c)$ , et l'énergie cinétique de la particule projectile  $E_c$ .

$$\nu_{su}(r, \varepsilon) = n_u(r) \cdot \sigma_T(E_c) \cdot \sqrt{\frac{2E_c}{m_s}} \quad (I-44)$$

où  $m_s$  est la masse de la particule projectile et  $E_c$  son énergie relative. La probabilité de collision  $P(t)$  à un instant  $t$  est donnée par l'expression suivante :

$$1 - P(t) = 1 - \exp\left(-\int_0^t \nu_T(E_c) dt\right) \quad (I-45)$$

- Le temps de vol libre est défini comme l'inverse de la fréquence de collision

$$t_{vol} = \frac{1}{\nu_{max}} \quad (I-47)$$

## **I.6. Processus collisionnels dans le plasma**

Le plasma est constitué par des neutres, des ions (positifs ou négatifs), et des électrons. Les collisions principales entre ces espèces sont les suivantes:

### **I.6.1. Collision élastique**

Par définition lors d'une collision élastique, l'énergie interne des particules entrant en collision ne subit aucune modification. Il y a simplement un changement de direction des particules, avec une redistribution des énergies de translation entre les deux. Ceci se traduit par la conservation de la quantité de mouvement et de l'énergie cinétique.

Dans le cas où le gaz cible est supposé être au repos avant la collision, il est possible de relier la fraction d'énergie conservée par la particule incidente lors de la collision à l'angle de déviation  $\chi$  par la relation suivante :

$$\frac{\varepsilon'_p}{\varepsilon_p} = 1 + 2 \frac{m_p m_c}{(m_p + m_c)^2} [\cos \chi - 1] \quad (I-48)$$

Si le projectile et la cible ont la même masse, ce rapport s'écrit :

$$\frac{\varepsilon_p'}{\varepsilon_p} = \frac{1}{2} [\cos \chi + 1] \quad (\text{I-49})$$

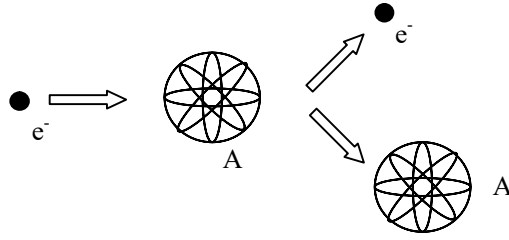


Fig. I-6: Représentation simplifiée d'une collision élastique électron-atome

Il est important de souligner que lors d'une collision élastique, il y a uniquement une redistribution angulaire de la vitesse puisque le module de la vitesse relative est conservé.

$$\frac{1}{2} \mu_r v_r^2 = \frac{1}{2} \mu_r v_r'^2 \quad (\text{I-50})$$

où  $\mu_r$  est la masse réduite et  $v_r$  et  $v_r'$  sont la vitesse relative juste avant la collision et juste après la collision, respectivement

$$\mu_r = \frac{m_p m_c}{m_p + m_c} \quad (\text{I-51})$$

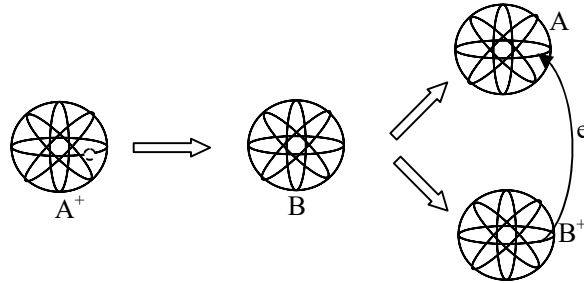
$$v_r = |\vec{v}_p - \vec{v}_c|$$

Si la collision considérée est entre un électron de masse  $m_e$  et un neutre comme la montre la figure précédente, en tenant compte du faible rapport des masses. La fraction d'énergie cinétique emportée par le neutre est donc de l'ordre de  $4 m_e/m_c$ .

### I.6.2. Collision de transfert de charge

Ce type de réaction a lieu entre un ion et un atome (ou une molécule). Si l'on se déplace sous l'action d'un champ électrique dans un gaz parent (par exemple l'ion  $AB^+$  dans un gaz AB), le transfert de charge est dite résonant ou symétrique. Par contre, le transfert de charge est dit non-résonant ou asymétrique lorsque l'ion se déplace dans un gaz non-parent (par exemple l'ion  $A^+$  dans le gaz AB). Au cours d'un transfert de charge résonant, l'ion énergétique  $A^+$  devient un neutre rapide et le neutre B devient un ion où se commence sa vie par l'énergie thermique du gaz. Dans les plasmas froids non-thermiques, le transfert de charge joue un rôle important sur la redistribution de l'énergie moyenne des ions dans le plasma car

il permet de transformer un ion rapide en un ion lent (voir par exemple la these de *Hennad* [9], *Yousfi* [10]). La figure suivante montre un schéma simplifiée de transfert de charge non-résonant entre l'ion  $A^+$  et le gaz atomique B.

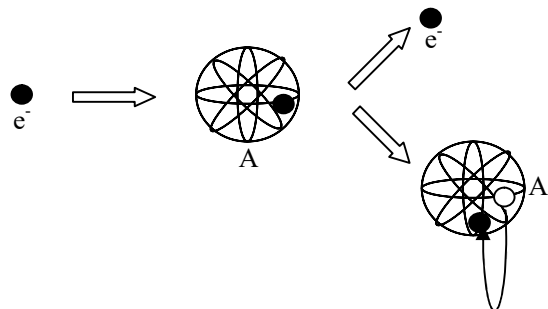


*Fig. I-7: Représentation schématique d'une collision de transfert de charge non-résonant*

### I.6.3. Collision inélastique conservative

La collision inélastique est dite conservative lorsqu'il y a le nombre de particule avant et après collision même si l'énergie cinétique n'est pas conservée. C'est le cas par exemple des collisions entraînant l'excitation des niveaux optiques, vibrationnelles ou rotationnelles des molécules cibles. Les processus d'excitation deviennent significatifs lorsque le champ réduit augmente, cela entraîne une augmentation de l'énergie des particules projectiles au-delà du seuil d'excitation.

Dans la figure suivante on représente le schéma simplifiée de l'excitation par impact électronique, où l'électron effectue une collision avec l'électron de l'orbitale de la particule cible. Si l'énergie transmise à cet électron est supérieure ou égale au seuil d'excitation  $\epsilon_{ex}$ , la particule cible passe de l'état fondamental à un état excité qui peut être de type radiatif. Dans ce cas, la désexcitation est accompagnée par une émission de photons. Ceci n'est pas le cas des états excités de type métastables qui se désexcitent en général suite à une collision.



*Fig. I-8: Représentation simplifiée d'une collision d'excitation*

### I.6.4. Collision d'ionisation

L'ionisation est un processus majeur pour le maintien de la décharge électrique. L'ionisation par impact électronique de la particule cible donne naissance à un électron et un ion positif. Les électrons éjectés et diffusés sont ensuite accélérés par le champ électrique. Ce processus de création d'électrons dépend de l'amplitude du champ réduct qui est comme on le verra dans les chapitres III et IV important dans les gaines. Dans le cas d'un gaz moléculaire, on peut aussi avoir une ionisation dissociative de la molécule cible.

L'électron projectile de l'énergie  $\varepsilon_1$  cède à l'atome (ou molécule) cible une énergie égale au seuil de l'ionisation  $\varepsilon_{ion}$ . L'énergie résiduelle ( $\varepsilon_1 - \varepsilon_{ion}$ ) est répartie entre l'électron diffusé et l'électron éjecté. Dans les modèles de type Monte Carlo, la répartition d'énergie peut être déduite par un simple tirage d'un nombre aléatoire  $R_{ion}$ .

$$\varepsilon_{ej} = R_{ion} \frac{\varepsilon_1 - \varepsilon_{ion}}{2} \tag{I-52}$$

$$\varepsilon_1' = \varepsilon_1 - \varepsilon_{ion} - \varepsilon_{ej}$$

Ces deux relations donnent les modules des vitesses des électrons après la collision ionisante. En ce qui concerne les directions dans le repère du centre de masse, l'électron projectile est diffusé suivant la direction  $(\chi, \psi)$  tandis que l'électron éjecté est dévié dans le même azimut en faisant un angle  $\pi/2$  avec l'électron projectile diffusé (Alkaa [11]).

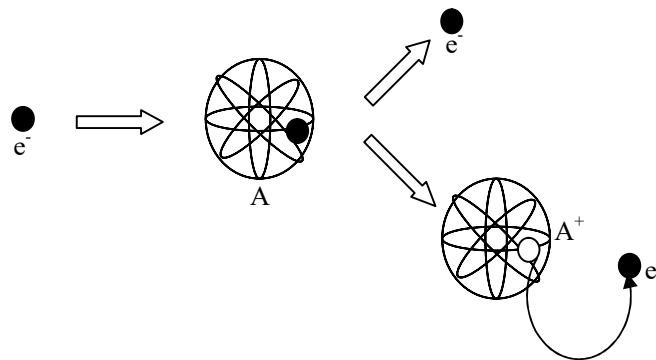


Fig. I-9: Représentation simplifiée de l'ionisation par impact électronique

Dans le cas d'ionisation par impact électronique, il y a aussi la création d'un ion positif. Ce dernier prend les paramètres de la particule cible (vitesse, direction, énergie). Un autre processus peut intervenir où l'électron peut effectuer une ionisation dissociative.

### I.6.5. Attachement électronique

Dans les gaz électronégatifs ( $O_2$ ,  $Cl$ ,  $F...$ ), les atomes ou les molécules en raison de leur affinité électroniques peuvent devenir des ions négatifs lors d'un impact électronique. Ce processus peut jouer un rôle très important parce qu'il modifie le transport et le champ électrique de charge d'espace dans le plasma. Le schéma simplifié du processus d'attachement est donnée sur la figure I-10. Après une collision d'attachement, l'électron va s'accrocher sur une orbitale de la particule cible A pour donner un ion négatif  $A^-$ .

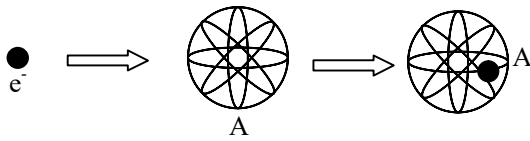


Fig. I-10: Représentation simplifiée de l'attachement direct.

Dans le cas d'une molécule cible, l'attachement peut être dissociatif lorsqu'il produit un ion négatif et une particule neutre.

### I.6.6. Collision de détachement

Lors d'une collision entre un ion négatif et une particule neutre, un électron se détache et conduit à la neutralisation de l'ion négatif. On peut aussi avoir un détachement par impact électronique mais qui est généralement négligeable dans le cas des gaz faiblement ionisés étudiés dans ce travail. Il faut noter que ce détachement par impact électronique est similaire à l'ionisation par impact électronique [2], dans le sens où l'électron entre en collision avec un ion négatif, il libère un électron et neutralise l'ion.

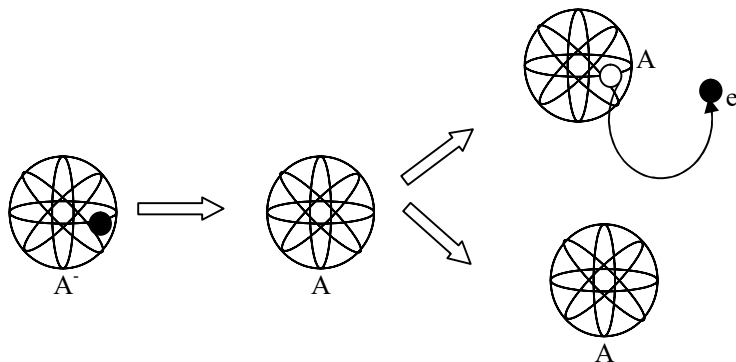


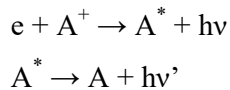
Fig. I-11: Représentation simplifiée de détachement

### I.6.7. Collision de recombinaison

Ce type de réaction peut se faire entre un ion positif et un ion négatif. Au cours de la collision, il y a un transfert d'un électron de l'ion négatif vers l'ion positif produisant la neutralisation de ces deux ions. Ce processus est joué un rôle important pour la diminution des ions négatifs et par suite la balance de cette espèce dans les décharges basse pression (*Lieberman* [2]). Il peut y avoir aussi une recombinaison quand un électron rencontre un ion positif. Dans ce cas, il y a une probabilité que l'électron soit capturé par l'ion, surtout si l'énergie de l'électron est relativement faible, ainsi produisant une particule neutre. Il y a plusieurs types de réactions qui peuvent donner lieu à cette "disparition de charges" par recombinaison.

- *Recombinaison radiative*

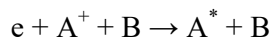
La recombinaison radiative est une réaction à deux corps, où l'électron est "capturé" par l'ion. Pour conserver l'énergie et la quantité de mouvement il faut avoir l'émission d'un photon:



On voit que l'énergie du premier photon a une valeur minimale, dépendant du niveau atomique dans lequel l'électron se trouve. Une fois l'électron "capturé", il y a une "cascade" vers les niveaux plus bas, avec l'émission d'un autre photon.

- *Recombinaison à 3 corps*

Pour des densités de gaz élevées, la recombinaison à 3 corps domine. Dans ce cas la conservation de l'énergie et de la quantité de mouvement est assurée par la présence d'un troisième corps (B), normalement un électron:



- *Recombinaison atomique entre un ion positif et ion négatif*

L'ion atomique négatif atomique peut être créé par attachement dissociatif à partir de l'état fondamental ou via un état excité. L'ion atomique positif peut être créé par ionisation dissociative à partir de l'état fondamental (ionisation directe) ou d'un état métastable

(ionisation par étape). Par exemple, les deux réactions ( $e + O_2 \rightarrow O^- + O$  et  $e + O_2 \rightarrow O^+ + O$ ) peuvent être suivi d'une recombinaison de type :  $O^+ + O^- \rightarrow O + O^*$ . Un autre exemple est celui des deux réactions ( $e + H_2 \rightarrow H^- + H$  et  $e + H_2 \rightarrow H^+ + H$ ) qui peuvent être suivi d'une recombinaison de type :  $H^+ + H^- \rightarrow H + H^*$

### I.6.8. Incidence des ions sur les parois

Dans les décharges radiofréquences, les interactions avec les électrodes et les processus d'interaction plasma/surface peuvent aussi jouer un rôle essentiel sur la formation et le développement de la décharge. Les particules chargées incidentes sur les parois peuvent être réfléchies par la surface. Lors de l'impact avec la surface, les ions peuvent être électriquement neutralisés et perdent ainsi la plus grande partie de leur énergie. Si les ions sont suffisamment énergétiques, ils pourront alors être implantés dans la cible. Dans ce cas, des réarrangements structurels peuvent intervenir au niveau de la cible. Des électrons secondaires peuvent être émis de la cathode sous l'impact du faisceau incident (cas d'une cible métallique). En plus des électrons, des particules de la surface peuvent être arrachées par les particules incidentes si elles sont suffisamment énergétiques : c'est la pulvérisation.

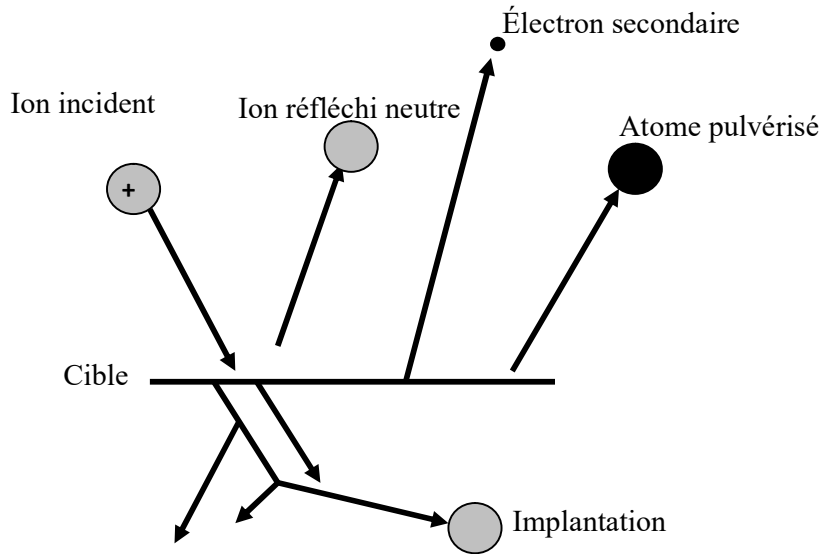


Fig. I-12: Schéma simple des processus possibles au niveau de la cible

### I.7. Caractéristique classique courant-tension d'une décharge électrique

L'application d'une tension continue entre deux électrodes d'un tube à gaz est le réacteur le plus simple qui permet de produire un plasma de décharge (figure. I.13), avec la variation

de la tension de décharge, on peut comprendre les différents régimes de fonctionnement. La figure I-14 représente la caractéristique classique courant – tension de la décharge dans le cas d’un gaz plutôt à relativement basse pression. Cette courbe fait apparaître plusieurs domaines correspondant aux différents régimes de fonctionnement résumés ci-dessous en partant d’une décharge non autonome jusqu’au claquage du gaz se traduisant par un arc électrique qui correspond aux courants les plus forts (région VIII). Ce dernier régime, caractérisé par la génération de plasmas thermiques ou quasi-thermiques constitue à lui seul un vaste domaine d’étude et d’applications non évoquées dans ce travail.

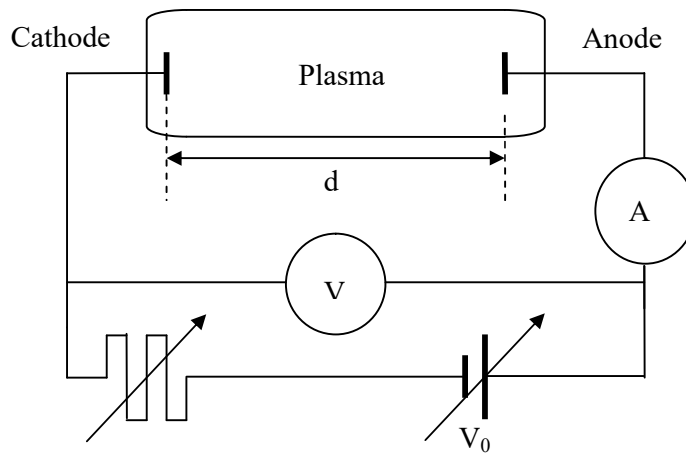


Fig. I.13 : Schéma électrique de la production d’une décharge

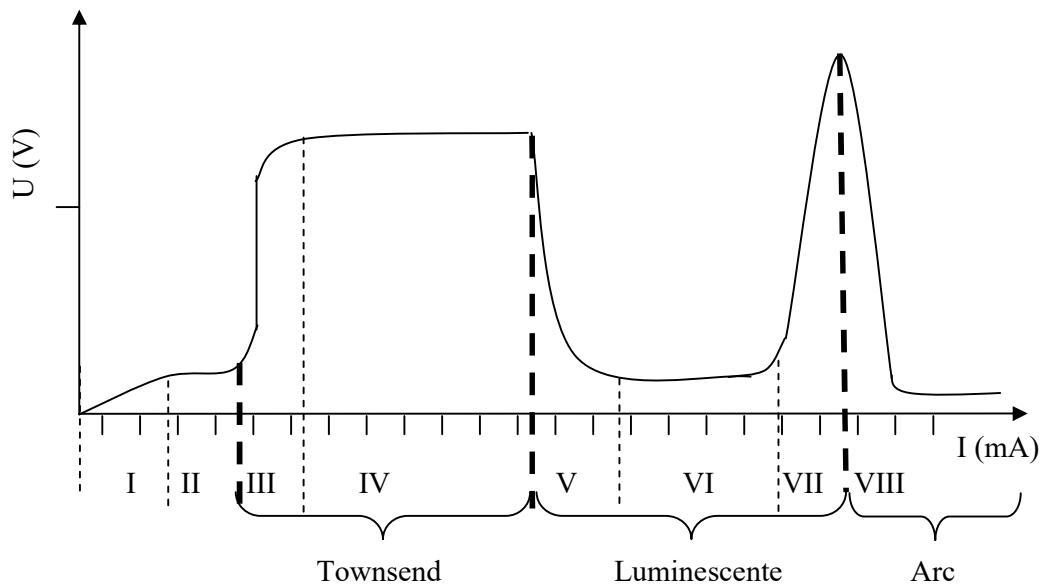


Fig. I-14: Caractéristique Courant-Tension de la décharge électrique (Meek [12], Loeb [13], Druyvesteyn [14])



Région I : Décharge non autonome sans multiplication électronique et non saturée

Région II : Décharge non autonome sans multiplication électronique saturée

Région III : Claquage de type Townsend

Région IV : Décharge de Townsend

Région V : Décharge luminescente subnormale

Région VI: Décharge luminescente normale

Région VII : Décharge luminescente anormale

Région VIII : Décharge d'arc

### **I.7.1 Décharge Townsend et claquage**

Dans les régions (I) et (II) de la figure I-14 où les courants et les tensions sont encore faibles (moins de  $10^{-11}$  A, quelques 10 V), la décharge n'existe qu'en présence d'un agent d'ionisation d'origine extérieure. Elle ne peut s'entretenir d'elle-même si cet agent disparaît. Pour cette raison, elle est dite non autonome, elle se présente par ailleurs sous un aspect sombre. Le taux d'excitation des atomes reste très faible. Les électrons libres présents initialement dans le milieu gazeux sont produits à l'aide du rayonnement extérieur (rayons cosmiques, radioactivité) ou bien par émission secondaire de la cathode par effet thermoïonique ou photoélectrique. Le courant généré dans le circuit, en fonction du nombre d'espèces chargées ayant rejoint les électrodes, va croître, dans un premier temps, avec la tension appliquée (I), à partir d'une certaine tension, presque toutes les espèces chargées (ions et électrons) rejoignent les électrodes. Le courant se sature et cesse de dépendre de la tension (II). Cette saturation est déterminée par le taux de charges créées par les sources externes. Avec l'augmentation de la tension et avant d'atteindre la saturation, le courant se remet à croître (voir région (III) de la figure I-14) parce que le gaz s'ionise par impact électronique, amplifiant le courant dû aux sources externes. C'est l'avalanche électronique résultant de ces processus primaires. Le courant est multiplié par un facteur  $\exp(\alpha d)$  qui correspond au nombre de paires d'ions produites par une avalanche électronique traversant l'espace inter-électrodes. La distance  $d$  est la distance séparant les électrodes et  $\alpha$  est le premier coefficient de Townsend. Ce coefficient d'ionisation définit le nombre d'électrons produits sur le chemin d'un électron parcourant 1 cm dans le sens du champ électrique. Dans cette région, le courant n'est toujours pas auto-entretenu. Pour cela, il faut augmenter encore la tension pour que les processus d'émission secondaire (photo-ionisation, bombardement ionique et métastables (*Meek* [15]) entrent en jeu (création d'électrons par les particules issues des processus

primaires d'ionisation ou d'excitation par impact électronique). Les processus d'émission secondaire sont d'autant plus efficaces, pour la multiplication des avalanches, s'ils se produisent à la cathode : les électrons sont ainsi accélérés sur tout l'espace inter-électrodes jusqu'à l'anode, fournissant une ionisation plus importante qu'un électron provenant du milieu de l'espace inter-électrodes. Dans la région (IV) de claquage, la tension aux bornes des électrodes atteint le seuil de saturation et l'amplification des électrons entre les électrodes tend vers l'infini, autrement dit que la relation suivante est vérifiée.

$$\gamma \left[ e^{\alpha d} - 1 \right] = 1 \quad (\text{I-53})$$

où  $\gamma$  est le second coefficient de Townsend (Townsend [16])

### **I.7.2 Décharge Luminescente :**

On distingue trois régimes dans les décharges luminescentes: subnormal région (V), normal région (VI) et anormal région (VII). Pour le régime normal, la tension est constante et le courant est faible, la surface de la décharge ne recouvre pas radialement toute la surface des électrodes. Quand le courant augmente, la décharge s'étale radialement. A partir d'un certain courant, la surface de la décharge recouvre toute la surface des électrodes. Si on augmente encore le courant, la tension augmente pour maintenir la condition d'auto-entretien ; on se trouve alors dans le régime anormal. Entre la cathode et l'anode, on distingue cinq zones, identifiables par leur luminosité (Figure I-15).

### **I.8. Propriétés principales d'une décharge Luminescente**

La répartition du champ électrique diffère dans chacune de ces zones. Dans l'espace cathodique les électrons quittant la cathode sont accélérés par un champ électrique intense dû à la charge d'espèce accumulée à proximité de la cathode. Ce champ permet aux électrons de gagner assez d'énergie pour ioniser et exciter le gaz. La première couche lumineuse apparaît par suite des processus de désexcitation. Puis, ces électrons qui ont perdu leur énergie sont à nouveau accélérés : ils engendrent d'autres couches lumineuses de faible intensité et beaucoup d'électrons gagnent une énergie capable de provoquer l'ionisation du gaz. La lueur négative est la zone la plus lumineuse, car les électrons arrivant de la chute cathodique sont très rapides et par suite ils sont responsables aux nombreux processus d'excitation et également d'ionisation, les particules excitées émettent de la lumière en se désexcitant. Les électrons qui ont perdu leur énergie atteignent l'espace de Faraday où il n'y a aucune émission lumineuse et la charge d'espace majoritaire est négative car cette zone est caractérisée par un

déficit de réactions qui conduit à la croissance de champ électrique et donc les électrons à nouveau gagnent l'énergie. Dans la colonne positive les densités d'espèces chargées positivement et chargées négativement sont égales ; comme la charge globale d'espace tend vers zéro, les électrons sont ralentis et le champ devient quasi nul. Pour que la décharge soit auto-entretenu, il faut créer des électrons par ionisation pour compenser les pertes aux parois. C'est dans la colonne positive que le champ va augmenter suffisamment pour accélérer de nouveau les électrons qui avaient été ralentis dans la lueur négative. La zone anodique comprend l'espace sombre anodique et la gaine anodique, elle est caractérisée par une charge d'espace négative et une chute de tension anodique et par suite un champ électrique important que dans la colonne positive, cela peut provoquer des réactions réactives qui expliquent l'existence d'une certaine luminosité.

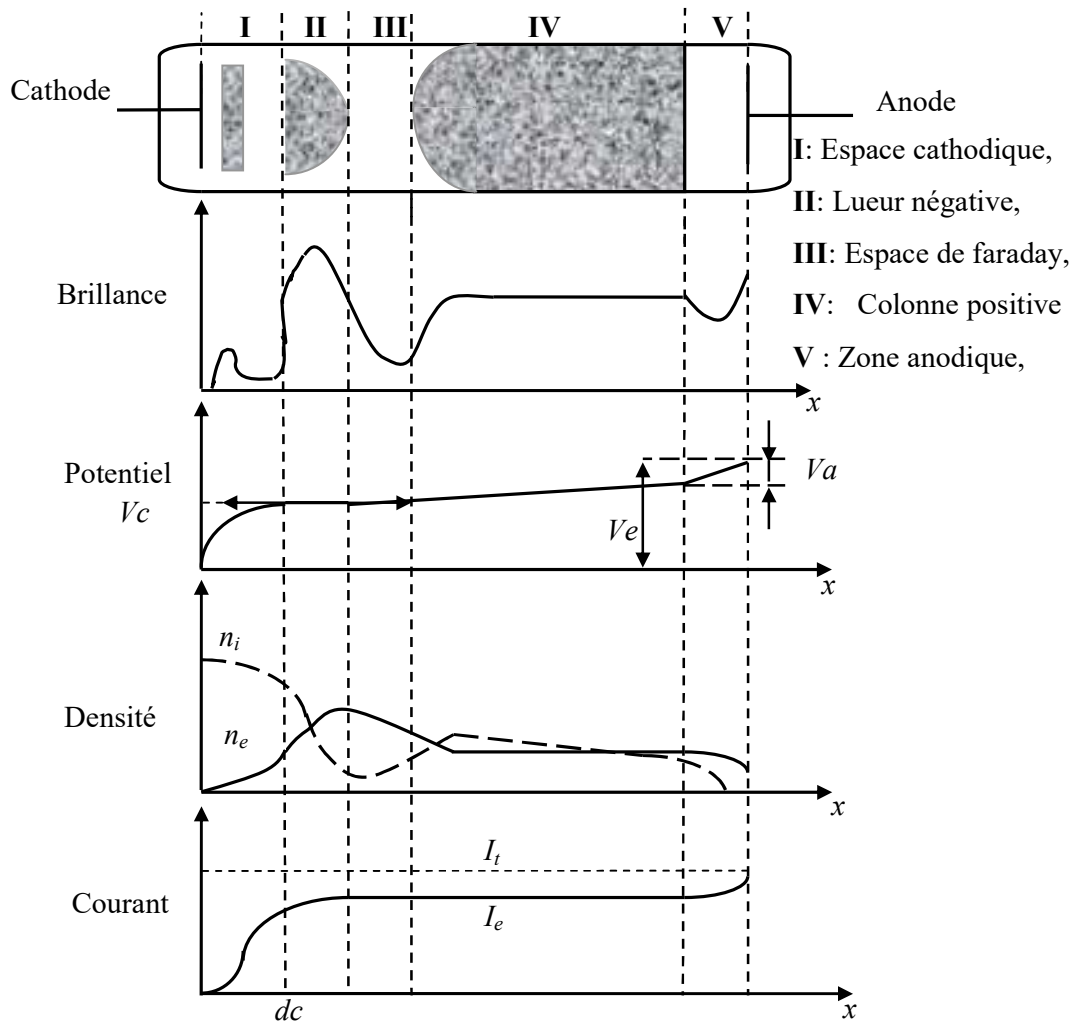


Fig. I-15: Propriétés principales d'une décharge Luminescente ( Delcroix [1])

### **I.9. Conclusion**

L'intérêt industriel du plasma artificiel se traduit par une grande variété d'applications, grâce à leurs propriétés spécifiques. Les décharges électriques permettent en effet de créer un plasma par le transfert d'énergie d'électrons vers un gaz grâce à une source continue (DC), radiofréquence (RF) ou microonde ( $\mu\text{O}$ ). Les décharges radiofréquences seront l'objet des deux derniers chapitres. Dans ce chapitre, après avoir défini le plasma, on a énuméré les différents paramètres qui permettent de le décrire. Ensuite, on a détaillé les différents processus physicochimiques qui se produisent dans le volume du plasma ainsi qu'à la surface du matériau traité, on a aussi présenté la notion des sections efficaces compte tenue de leurs importances dans les phénomènes qui se déroulent dans le plasma. Dans ce chapitre, on a donné un rappel sur la fonction de distribution FDEE ainsi que les valeurs moyennes qu'on peut les calculés à partir de cette fonction. Après, le détail de différents processus collisionnels dans le plasma, on a terminé ce chapitre par l'analyse de la courbe caractéristique courant-tension ainsi que les propriétés principales d'une décharge lumineuse en montrant les différentes zones ayant lieu dans le tube à décharge.

**Référence:**

- [1] J. L. Delcroix and A. Bers, "*physique des plasmas*," Tome 1, Paris, 1994.
- [2] M. A. Lieberman and A. J. Lichtenberg, "Principles of plasma discharges and materials processing", Second edition, New York: Wiley, 1994.
- [3] J.B. Hastel and M. A. D. Phill, "Physics of Atomic collision," second edition, Ed., Butterworths, London, 1972.
- [4] B. Brunetti, G. Liuti, E. Luzzati, F. Pirani, F. J. Vecchiocattivi, "Study of the interactions of atomic and molecular oxygen with O<sub>2</sub> and N<sub>2</sub> by scattering data," *J. Chem. Phys.*, vol. 74, no.12, pp. 6734-6741, 1981.
- [5] D. Benyoucef and M. Yousfi, "Ar<sup>+</sup>/Ar, O<sub>2</sub><sup>+</sup>/O<sub>2</sub> and N<sub>2</sub><sup>+</sup>/N<sub>2</sub> Elastic Momentum Collision Cross Sections: Calculation and Validation Using the Semi-Classical Model," *Plasma Science and Technology*, vol.16, no.6, p.588, 2014.
- [6] A. A. Abrahamson, "Born-Mayer-Type interatomic potential for neutral ground gaseous-state atoms with Z=2 to Z=105," *Phys. Rev.* Vol.178, no.1, p. 76, 76, 1969.
- [7] P. Morse, "Diatomic Molecules According to the Wave Mechanics. II. Vibrational Levels," *Phys. Rev.*, vol. 34, no.1, p. 57, 1929.
- [8] E. A. Mason, H. O'Hara H and F. J. Smith, "Mobilities of polyatomic ions in gases: core model," *J. Phys. B: Atom Molec. Phys.*, vol.5, no.2, p. 169, 1972.
- [9] A. Hennad, "Cinétique des ions dans les gaz moléculaires par simulations de Monte Carlo classique et optimisée: détermination des données de base dans l'air," Thèse de l'université de Toulouse, 19996.
- [10] M. Yousfi, A. Hennad, O. Eichwald, "Improved Monte Carlo method for ion transport in ion-molecule asymmetric systems at high electric fields," *J. Appl. Phys.*, vol. 84, no 1, pp. 107-114, 1998.
- [11] A. Alkaa, "Etude des fonctions de distribution des électrons dans les plasmas froids composés de mélanges de gaz rares avec des vapeurs métalliques ou des gaz électronégatifs," thèse université Paul Sabatier, 1991.
- [12] J. M. Meek, and J. D. Craggs, "Electrical breakdown of gases," Oxford, 1953.
- [13] L. B. Loeb, "Electrical breakdown of gases with steady or direct current impulse Potentials," *Encyclopedia of Physics*, Berlin, 1956.
- [14] M. J. Druyvesteyn, F. M. Penning, "The Mechanism of Electrical Discharges in Gases of Low Pressure," *Rev. Mod. Phys.*, vol.12, no.2, p. 87, 1940.
- [15] J. M. Meek, J. D. Craggs, "Gas discharge physics," Berlin, 1991.
- [16] J. S. Townsend, "Electricity in Gases," Clarendon Press, Oxford, 1915.

## **CHAPITRE: II**

# **APERÇU THEORIQUE SUR LES PLASMAS DE DECHARGE**

## II.1. Introduction

Les Modèles fluide de décharge dans les gaz décrivent le transport des électrons, des ions et éventuellement d'autres espèces de particules réactives par les premiers moments de l'équation de Boltzmann (BE), l'équation de continuité, l'équation de quantité de mouvement et l'équation d'énergie, généralement uniquement pour les électrons. Chacune de ces équations contient des coefficients de transport qui sont des données d'entrées pour le modèle fluide [1–4]. Les coefficients de transport peuvent être assez spécifiques pour les conditions de décharge. En particulier, les coefficients concernant les électrons dépendent de la fonction de distribution des énergies électroniques (FDEE), qui en générale n'est pas Maxwellienne. Les coefficients de transport d'électrons ont été mesurés et tabulés sous forme de fonction du champ électrique réduit  $E/N$  (rapport de l'intensité du champ électrique à la densité des neutres) [5].

La fonction de distribution des énergies électroniques et les coefficients électroniques pour des conditions de décharge données peuvent être calculés à partir des données fondamentales (sections efficaces de collision) en résolvant l'équation de Boltzmann pour les électrons [6]. Une approche courante consiste à résoudre l'équation de Boltzmann pour une série de valeurs de champ électrique réduit et à mettre les coefficients résultants dans des tableaux en fonction du champ réduit ou en fonction de l'énergie électronique moyenne, puis les interpoler afin de les utiliser dans les modèles fluides. Dans le cas d'une décharge à l'équilibre au champ local, l'équation d'énergie électronique n'est pas importante dans le modèle et les coefficients de transport sont fonction du champ réduit, mais dans le cas d'une décharge hors équilibre au champ local (équilibre en énergie électronique locale), ces coefficients doivent être fonction de l'énergie moyenne des électrons. Les solveurs de l'équation de Boltzmann sont généralement basés sur des techniques développées au cours des années 1970 et 1980 [7–16]. Les objectifs de ces solveurs sont les suivant :

- ✓ résolution valable sur une large gamme de conditions de décharge, champ électrique réduit, degré d'ionisation, composition du gaz, et fréquence du champ.
- ✓ les coefficients de transport calculés devraient correspondre aux quantités mesurées dans les expériences.
- ✓ les erreurs dans les coefficients de transport calculés ne doivent pas limiter la précision du modèle de fluide.

✓ la solution doit être rapide et fiable sans ajouter des paramètres d'ajustement.

Aujourd'hui, il existe plusieurs solveurs qui sont souvent utilisés et cités par les auteurs dans le domaine de la modélisation fluide des décharges ; on mentionne notamment ELENDIF [13] et BOLSIG+ [17], mais il en existe bien d'autres.

## II.2. Résolution de l'Équation de Boltzmann et Dérivation des Coefficients de Transport

### II.2.1. Simplification de l'équation de Boltzmann

L'équation de Boltzmann pour un ensemble d'électrons dans un gaz ionisé est donnée par l'équation suivante :

$$\frac{\partial f_e}{\partial t} = \mathbf{v} \cdot \nabla f_e - \frac{e}{m_e} \mathbf{E} \cdot \nabla_{\mathbf{v}} f_e = C[f_e] \quad (\text{II-1})$$

où  $f_e$  est la fonction de distribution des électrons dans l'espace de phase à six dimensions,  $\mathbf{v}$  est le vecteur de vitesse,  $e$  est la charge élémentaire,  $m_e$  la masse de l'électron,  $\mathbf{E}$  est le vecteur du champ électrique,  $\nabla_{\mathbf{v}}$  est l'opérateur de gradient de vitesse et  $C$  le taux changement de  $f_e$  dû aux collisions. La résolution nécessite à des simplifications radicales où le champ électrique et les probabilités de collision sont considérées uniformes dans l'espace, au moins à l'échelle du libre parcours moyen. Dans cette condition, la fonction  $f_e$  est alors symétrique dans l'espace de vitesse autour de la direction du champ électrique, et dans l'espace peut varier uniquement dans la direction du champ. Cette simplification permet d'utiliser les coordonnées sphériques dans l'espace de vitesse où l'équation précédente devienne comme suit :

$$\frac{\partial f_e}{\partial t} + v \cos \theta \frac{\partial f_e}{\partial z} - \frac{e}{m_e} E \left( \cos \theta \frac{\partial f_e}{\partial v} + \frac{\sin^2 \theta}{v} \frac{\partial f_e}{\partial \cos \theta} \right) = C[f_e] \quad (\text{II-2})$$

Où  $v$  est le module de la vitesse,  $\theta$  est l'angle entre la vitesse et la direction du champ,  $E$  est le module du champ électrique et  $z$  est la position le long de cette direction. La fonction de distribution d'électrons  $f_e$  dans l'équation (2) dépend de quatre coordonnées :  $v, \theta, t$  et  $z$ . La dépendance  $\theta$  peut être simplifiée par l'approximation à deux termes, et pour la dépendance temporelle, nous ne considérons le cas d'état stable où le champ électrique et la fonction de distribution des électrons sont stationnaires. La variation spatiale et temporelle de  $f_e$  est due seulement à la production ou à la perte d'électrons par suite d'ionisation ou d'attachement.



### II.2.2.Approximation à deux termes

Une approche courante pour résoudre l'équation (II-2) consiste à développer  $f_e$  en termes de polynômes de Legendre de  $\cos\theta$  (expansion des harmoniques sphériques), puis à construire à partir de l'équation (II-2) un ensemble d'équations pour les coefficients d'expansion. Pour obtenir des résultats de haute précision, six termes d'expansion ou plus sont nécessaires [15], mais dans de nombreux cas, une approximation à deux termes donne déjà des résultats utiles [18, 19]. Bien que l'on cherche que l'approximation échoue pour les valeurs élevées de  $E/N$  lorsque la plupart des collisions sont inélastiques et que  $f_e$  devient fortement anisotrope [20], les erreurs des coefficients de transport sont acceptables pour la modélisation fluide de décharges. Par l'utilisation de cette approximation, la fonction de distribution peut être exprimée comme suit :

$$f_e(v, \cos\theta, z, t) = f_{e,0}(v, z, t) + f_{e,1}(v, z, t) \cos\theta \quad (\text{II-3})$$

où  $f_{e,0}$  est la partie isotrope de  $f_e$  et  $f_{e,1}$  est une perturbation anisotrope. Notez que  $\theta$  est défini par rapport à la direction du champ, donc  $f_1$  est négatif ; ceci diffère de certains autres textes où  $\theta$  est défini par rapport à la vitesse de dérive des électrons et dans ce cas  $f_{e,1}$  est positif,  $f_e$  est normalisé comme suit:

$$\iiint_{\mathbf{v}} f_e d\mathbf{v}^3 = 4\pi \int_0^\infty f_{e,0} v^2 dv = n_e(z, t) \quad (\text{II-4})$$

Où  $n_e$  est la densité des électrons. En substituant l'équation (II-3) dans l'équation (II-2) et en intégrant sur  $\cos\theta$  on obtient :

$$\frac{\partial f_{e,1} f_{e,1}}{\partial t} + \frac{\gamma}{3} \left[ \sqrt{\varepsilon} \frac{\partial f_{e,1}}{\partial z} - \frac{1}{\sqrt{\varepsilon}} \frac{\partial}{\partial \varepsilon} (\varepsilon E f_{e,1}) \right] = C_0 \quad (\text{II-5})$$

$$\frac{\partial f_{e,1}}{\partial t} + \gamma \sqrt{\varepsilon} \left[ \frac{\partial f_{e,0}}{\partial z} - E \frac{\partial f_{e,0}}{\partial \varepsilon} \right] = -N \sigma_m \sqrt{\varepsilon} f_{e,1}$$

où  $\gamma = (2e/m_e)^{1/2}$  est une constante et  $\varepsilon = (v/\gamma)^2$  est l'énergie électronique en eV,  $\sigma_m$  est la section efficace totale du transfert de la quantité du mouvement, et  $N$  est la densité totale des neutres.

$$\sigma_m = \sum_k P_k \sigma_k \quad (\text{II-6})$$

Où  $P_k$  est la fraction molaire de l'espèce cible du processus de collision ; se rendre compte que le gaz peut être un mélange de différentes espèces, y compris des états excités. Pour les collisions

élastiques,  $\sigma_k$  est la section efficace effective de transfert de quantité du mouvement [21], en tenant compte de l'anisotropie possible de la diffusion élastique. Pour les collisions inélastiques,  $\sigma_k$  est la section efficace totale, en supposant que toute la quantité de mouvement est perdue dans la collision, c'est-à-dire que la vitesse électronique restante après la collision est diffusée de manière isotrope.

### **II.2.3. Croissance de la densité électronique**

L'équation (II-5) est simplifiée en faisant des hypothèses sur la dépendance temporelle et spatiale de  $f_{e,0}$  et  $f_{e,1}$ . En général,  $f_e$  ne peut pas être constant dans le temps et dans l'espace parce que certains processus de collision (ionisation, attachement) ne conservent pas le nombre total d'électrons. Des travaux antérieurs [18, 21–23] ont proposé une technique simple pour décrire approximativement les effets de la production nette d'électrons par des techniques expérimentales. Pour séparer la dépendance énergétique à la dépendance temporelle on considère que :

$$f_{e,0,1}(\varepsilon, z, t) = \frac{1}{2\pi\gamma^3} F_{e,0,1}(\varepsilon) n_e(z, t) \quad (\text{II-7})$$

La fonction de distribution d'énergie  $F_{e,0,1}$  est constante dans le temps et dans l'espace et normalisée par:

$$\int_0^{\infty} \sqrt{\varepsilon} F_{e,0}(\varepsilon) d\varepsilon = 1 \quad (\text{II-8})$$

La dépendance temporelle ou spatiale de la densité électronique  $n_e$  est maintenant liée au taux net de production d'électrons. Pour cela, on considère deux cas simples correspondant à des techniques expérimentales spécifiques. La plupart des décharges ressemblent à au moins un de ces cas.

#### ***Croissance temporelle exponentielle sans dépendance spatiale***

Ce cas correspond aux expériences de l'état pulsé de Townsend [11], où la croissance temporelle de la densité des électrons est égale à la fréquence nette de production ( $\nu_i$ ) donnée par l'équation suivante :

$$\frac{1}{n_e} \frac{\partial n_e}{\partial t} = \bar{v}_i = N \gamma \left( \sum_{ki} p_{ki} \sigma_{ki} - \sum_{ka} p_{ka} \sigma_{ka} \right) \varepsilon F_{e,0} d\varepsilon \quad (\text{II-9})$$

Où la somme est sur les processus d'ionisation ( $k_i$ ) et d'attachement ( $k_a$ ). La partie anisotrope de l'équation (II-5) devient :

$$\begin{aligned} F_{e,1} &= \frac{E}{N} \frac{1}{\bar{\sigma}_m} \frac{\partial F_{e,0}}{\partial \varepsilon} \\ \bar{\sigma}_m &= \sigma_m + \frac{\bar{v}_i}{N \gamma \sqrt{\varepsilon}} \end{aligned} \quad (\text{II-10})$$

En substituant cela dans la partie isotrope de l'équation (II-5), on trouve :

$$-\frac{\gamma}{3} \frac{\partial}{\partial \varepsilon} \left[ \left( \frac{E}{N} \right)^2 \frac{\varepsilon}{\bar{\sigma}_m} \frac{\partial F_{e,0}}{\partial \varepsilon} \right] = \tilde{C}_0 + \tilde{R} \quad (\text{II-11})$$

Où le terme de collision est donné par les relations suivantes :

$$\begin{aligned} \tilde{C}_0 &= 2\pi\gamma^3 \sqrt{\varepsilon} \frac{C_0}{N n_e} \\ \tilde{R} &= -\frac{\bar{v}_i}{N} \sqrt{\varepsilon} F_0 \end{aligned} \quad (\text{II-12})$$

S'assure que  $F_{e,0}$  reste normalisé à l'unité dans le cas de la production nette d'électrons. Des travaux antérieurs [22] ont interprété ce terme comme l'énergie nécessaire pour chauffer les électrons secondaires jusqu'à l'énergie électronique moyenne.

### ***Croissance spatiale exponentielle sans dépendance temporelle***

Ce cas correspond aux expériences de l'état stationnaire de Townsend [11]. La vitesse de dérive des électrons est dans le sens inverse du champ électrique, leur flux et leur densité augmentent de manière exponentielle avec un taux de croissance spatial constant  $\alpha$  (premier coefficient de Townsend), qui est lié à la production nette d'électrons :

$$\alpha = -\frac{1}{n_e} \frac{\partial n_e}{\partial z} = -\frac{\bar{v}_i}{\omega} \quad (\text{II-13})$$

où la vitesse moyenne  $W$  est déterminée par  $F_{e,1}$  constante dans l'espace négative. En utilisant l'expression de  $\alpha$ , la partie anisotrope de l'équation (II-5) devient :

$$F_{e,1} = -\frac{1}{\sigma_m} \left( \frac{E}{N} \frac{\partial F_{e,0}}{\partial \varepsilon} + \frac{\alpha}{N} F_{e,0} \right) \quad (\text{II-14})$$

Finalemment la partie isotrope de l'équation (II-5) peut encore être écrite sous la forme :

$$-\frac{\gamma}{3} \frac{\partial}{\partial \varepsilon} \left[ \left( \frac{E}{N} \right)^2 \frac{\varepsilon}{\sigma_m} \frac{\partial F_{e,0}}{\partial \varepsilon} \right] = 2\pi\gamma^3 \sqrt{\varepsilon} \frac{C_0}{Nn} + \frac{\alpha}{N} \frac{\gamma}{3} \left[ \frac{\varepsilon}{\sigma_m} \left( 2 \frac{E}{N} \frac{\partial F_{e,0}}{\partial \varepsilon} \frac{\alpha}{N} F_0 \right) + \frac{E}{N} F_{e,0} \frac{\partial}{\partial \varepsilon} \left( \frac{\varepsilon}{\sigma_m} \right) \right] \quad (\text{II-15})$$

La valeur de  $\alpha$  peut être obtenue par la combinaison des équations (II-13) et l'équation (II-14) :

$$W = -\frac{1}{3} \gamma \int_0^{\infty} F_{e,1} \varepsilon d\varepsilon = -\mu E + \alpha D = -\frac{\bar{v}i}{\alpha} \quad (\text{II-16})$$

Cela conduit à:

$$\alpha = \frac{1}{2D_e} \left( \mu_e E - \sqrt{(\mu_e E)^2 - 4D_e \bar{v}i} \right) \quad (\text{II-17})$$

Où  $\mu_e$  et  $D_e$  représentent la mobilité et le coefficient de diffusion respectivement.

#### II.2.4. Champs à haute fréquence

On garde la même approche (champ électrique reste constant dans le temps à l'échelle de libre parcours) [18], et on utilise la notation complexe du champ électrique.

$$E(t) = E_0 e^{j\omega t} \quad (\text{II-18})$$

Dans ce cas, l'approximation à deux termes peut être exprimée comme suit :

$$f_e(\nu, \cos \theta, z, t) = f_{e,0}(\nu, z, t) + f_{e,1}(\nu, z, t) \cos \theta \quad (\text{II-19})$$

où la variation temporelle de  $f_{e,0}$  et  $f_{e,1}$  sont lentes en comparaison avec l'oscillation du champ électrique. Cette dernière approche est valable si l'énergie électronique perdue durant un cycle du champ électrique reste faible. Pour les collisions élastiques, cela implique que la fréquence du champ doit être beaucoup plus grande que la fréquence de transfert de la quantité du mouvement, c.-à-d. que :

$$\frac{\omega}{N} \gg \left( \frac{2m}{M} \right) \sigma_m \gamma \sqrt{\varepsilon} \quad (\text{II-20})$$

Une limite de fréquence liée aux collisions inélastiques est plus difficile à estimer. En pratique l'approximation est raisonnable pour les fréquences de champ dans la gamme de GHz (décharges

microondes). Cette approximation conduit à la composante anisotrope de la fonction de distribution des énergies électroniques suivante :

$$F_{e,1} = \frac{E_0}{N} \frac{\tilde{\sigma}_m - jq}{\tilde{\sigma}_m^2 + q^2} \frac{\partial F_0}{\partial \varepsilon} \quad (\text{II-21})$$

avec:

$$\tilde{\sigma}_m = \sigma_m + \frac{\overline{v_i}}{N\gamma\sqrt{\varepsilon}} \quad (\text{II-22})$$

$$q = \frac{\omega}{N\gamma\sqrt{\varepsilon}}$$

En substituant ceci dans l'expression de la partie isotrope de la fonction de distribution des énergies électroniques et en faisant la moyenne de l'absorption d'énergie sur un cycle, on obtient la relation suivante :

$$-\frac{\gamma}{3} \frac{\partial}{\partial \varepsilon} \left( \left( \frac{E_0}{N} \right)^2 \frac{\tilde{\sigma}_m \varepsilon}{2(\tilde{\sigma}_m^2 + q^2)} \frac{\partial F_0}{\partial \varepsilon} \right) = \square C_0 + \square R \quad (\text{II-23})$$

### II.2.5. Termes de collision

Le terme de collision contient le terme qui est composé par la contribution de tous les différents processus de collision  $k$  avec des particules neutres du gaz, ainsi les collisions électron-électron :

$$\tilde{C}_0 = \sum_k \tilde{C}_{0,k} + \tilde{C}_{0,e} \quad (\text{II-24})$$

#### *Collisions élastiques*

L'effet des collisions élastiques avec les neutres du gaz peut être exprimé par la relation suivante [19]:

$$\tilde{C}_{0,elastique} = \gamma P_k \frac{2m\partial}{M_k \partial \varepsilon} \left[ \varepsilon^2 \sigma_k \left( F_0 + \frac{k_B T}{e} \frac{\partial F_0}{\partial \varepsilon} \right) \right] \quad (\text{II-25})$$

Où  $M_k$ ,  $T$  sont la masse des particules cibles et leur température respectivement. Le premier terme représente l'énergie cinétique perdue aux particules cibles et le second terme est l'énergie thermique gagnée à partir des particules cibles. Ce dernier plus important qu'à très faible champ réduit  $E/N$ .

### ***Excitation et Désexcitation***

Les collisions d'excitation et de désexcitation provoquent une perte (excitation) ou un gain d'énergie discret (désexcitation), éliminant en permanence les électrons de la distribution d'énergie et les réinsérant ailleurs [18] :

$$\tilde{C}_{0, inélastique} = -\gamma P_k \left[ \varepsilon \sigma_k(\varepsilon) F_{e,0}(\varepsilon) - (\varepsilon + \varepsilon_k) \sigma_k(\varepsilon + \varepsilon_k) F_{e,0}(\varepsilon + \varepsilon_k) \right] \quad (\text{II-26})$$

Où  $\varepsilon_k$  est l'énergie seuil de l'excitation, elle est négative pour la désexcitation.

### ***Ionisation***

L'effet de l'ionisation dépend de la façon dont l'énergie restante est distribuée par les deux électrons après l'ionisation. Pour certains gaz, la section efficace différentielle peuvent être trouvée pour la distribution d'énergie, cette distribution est non équitable si l'énergie restante est grande [26]. On considère seulement les deux cas limitatifs de partage d'énergie égal et zéro.

Dans le premier cas, on a:

$$\tilde{C}_{0, ionisation} = -\gamma P_k \left[ \varepsilon \sigma_k(\varepsilon) F_{e,0}(\varepsilon) - 2(2\varepsilon + \varepsilon_k) \sigma_k(2\varepsilon + \varepsilon_k) F_{e,0}(2\varepsilon + \varepsilon_k) \right] \quad (\text{II- 27})$$

Le facteur 2 montre que les électrons secondaires étant insérés à la même énergie que les électrons primaires.

Dans le deuxième cas où l'électron primaire prend toute l'énergie restante (zéro partage) on a:

$$\begin{aligned} \tilde{C}_{0, ionisation} = & -\gamma P_k \left[ \varepsilon \sigma_k(\varepsilon) F_{e,0}(\varepsilon) - (\varepsilon + \varepsilon_k) \sigma_k(\varepsilon + \varepsilon_k) F_{e,0}(\varepsilon + \varepsilon_k) \right] \\ & + \delta(\varepsilon) \gamma P_k \int_0^\infty u \sigma_k(u) F_{e,0}(u) du \end{aligned} \quad (\text{II-28})$$

Où  $\delta$  est la fonction delta de Dirac.

### ***Attachement***

L'attachement élimine simplement les électrons de la distribution d'énergie :

$$\tilde{C}_{0, attachement} = -\gamma P_k \varepsilon \sigma_k(\varepsilon) F_{e,0}(\varepsilon) \quad (\text{II-29})$$

### Collisions électron-électron

Pour une distribution isotrope des électrons, le terme de collision électron-électron est donné par la relation suivante [9]:

$$C_{0,e}^{\square} = a \frac{n}{N} \left[ 3\varepsilon^{1/2} F_{e,0}^2 + 2\varepsilon^{3/2} \frac{\partial \psi}{\partial \varepsilon} \frac{\partial}{\partial \varepsilon} \left( \varepsilon^{1/2} \frac{\partial F_{e,0}}{\partial \varepsilon} \right) + \psi \frac{\partial F_{e,0}}{\partial \varepsilon} \right] \quad (\text{II-30})$$

avec:

$$\begin{aligned} \psi &= 3A_1 - \frac{A_2}{\varepsilon} + 2\varepsilon^{1/2} A_3 \\ A_1 &= \int_0^{\varepsilon} u^2 F_{e,0}(u) du, A_2 = \int_0^{\varepsilon} u^3 F_{e,0}(u) du, A_3 = \int_{\varepsilon}^{\infty} F_{e,0}(u) du \\ a &= \frac{e^2 \gamma}{24\pi \varepsilon_0^2} \ln \Lambda, k_B T_e = \frac{2}{3} e A_2(\infty), \Lambda = \frac{12\pi (\varepsilon_0 k_B T_e)^{3/2}}{e^3 n^{1/2}} \end{aligned} \quad (\text{II-31})$$

Cela donne :

$$C_{0,e}^{\square} = a \frac{n}{N} \frac{\partial}{\partial \varepsilon} \left[ 3A_1 F_{e,0} + 2 \left( A_2 + \varepsilon^{3/2} A_3 \right) \frac{\partial F_{e,0}}{\partial \varepsilon} \right] \quad (\text{II-32})$$

Qui exprime le terme de collision électron-électron en tant que divergence du flux d'électrons dans l'espace d'énergie. Le premier terme du flux représente le refroidissement par collisions avec électrons le plus froid ( $A_1$  est la fraction d'électrons qui ont des énergies inférieure à  $\varepsilon$ ) et le deuxième terme est le chauffage (diffusion vers les énergies supérieures). Ces deux termes s'annulent pour une distribution maxwellienne.

### II.2.6. Équation de la Fonction de Distribution des Énergies Électroniques

En combinant les équations précédentes, on trouve une équation  $F_{e,0}$  qui ressemble à une équation de continuité convection-diffusion dans l'espace énergétique :

$$\frac{\partial}{\partial \varepsilon} \left( \overset{\square}{W} F_0 - \overset{\square}{D} \frac{\partial F_{e,0}}{\partial \varepsilon} \right) = \overset{\square}{S} \quad (\text{II-33})$$

avec:

$$\begin{aligned} \overset{\square}{D} &= \frac{\gamma}{3} \left( \frac{E}{N} \right)^2 \frac{\varepsilon}{\sigma_m} + \frac{\gamma k_B T}{e} \varepsilon^2 \sigma_{\varepsilon} + 2a \frac{n}{N} \left( A_2 + \varepsilon^{2/3} A_3 \right) \\ \overset{\square}{W} &= -\gamma \varepsilon^2 \sigma_{\varepsilon} - 3a \frac{n}{N} A_1, \sigma_{\varepsilon} = \sum_{k=\text{élastique}} \frac{2m}{M_k} P_k \sigma_k, \overset{\square}{S} = \sum_{k=\text{inélastique}}^{k=\text{élastique}} C_{0,k}^{\square} + G \end{aligned} \quad (\text{II-34})$$

La partie de l'équation (II-33) représente la divergence du flux d'électrons dans l'espace d'énergie. Ce flux a alors une partie de convection avec une vitesse d'écoulement négative  $\bar{W}$  représentant le refroidissement par collisions élastiques avec particules qui ont des faibles énergies (neutres ou électrons), et une partie de diffusion avec le coefficient de diffusion  $\bar{D}$  représentant l'échauffement par le champ électrique et par les collisions élastiques avec les particules plus énergétiques.

### II.2.7. Solution numérique de l'équation de FDEE

L'équation de la fonction de distribution des énergies électroniques est discrétisée sur les nœuds d'un réseau dans l'espace d'énergie, constituant en une série d'intervalles d'énergie. Ces intervalles sont numérotés  $i = 1, 2, \dots$ , où l'indice  $i$  fait référence au centre de l'intervalle  $i$ , les indices  $i + 1/2$  et  $i - 1/2$  représentent les nœuds de cet intervalle. La fonction de distribution  $F_{e,0}$  est définie aux centres des intervalles. Pour chaque intervalle  $i$  on obtient une équation linéaire reliant la valeur locale  $F_{e,0}^i$ , en intégrant l'équation différentielle sur la cellule.

$$\left[ \bar{W} F_0 - \bar{D} \frac{\partial F_0}{\partial \varepsilon} \right]_{i+1/2} - \left[ \bar{W} F_0 - \bar{D} \frac{\partial F_0}{\partial \varepsilon} \right]_{i-1/2} = \int_{\varepsilon_{i-1/2}}^{\varepsilon_{i+1/2}} S d\varepsilon \quad (\text{II-35})$$

Le côté gauche de l'équation est discrétisé par le schéma exponentiel de *Scharfetter et Gummel* [27] couramment utilisé pour les problèmes de convection-diffusion :

$$\begin{aligned} \left[ \bar{W} F_0 - \bar{D} \frac{\partial F_0}{\partial \varepsilon} \right]_{i+1/2} &= \frac{\bar{W}_{i+1/2} F_{e,0}^i}{1 - \exp(-z_{i+1/2})} + \frac{\bar{W}_{i+1/2} F_{e,0}^{i+1}}{1 - \exp(z_{i+1/2})} \\ \left[ \bar{W} F_0 - \bar{D} \frac{\partial F_0}{\partial \varepsilon} \right]_{i-1/2} &= \frac{\bar{W}_{i-1/2} F_{e,0}^{i-1}}{1 - \exp(-z_{i-1/2})} + \frac{\bar{W}_{i-1/2} F_{e,0}^i}{1 - \exp(z_{i-1/2})} \end{aligned} \quad (\text{II-36})$$

avec:

$$\begin{aligned} z_{i+1/2} &= \frac{\bar{W}_{i+1/2}}{\bar{D}_{i+1/2}} (\varepsilon_{i+1} - \varepsilon_i) \\ z_{i-1/2} &= \frac{\bar{W}_{i-1/2}}{\bar{D}_{i-1/2}} (\varepsilon_i - \varepsilon_{i-1}) \end{aligned} \quad (\text{II-37})$$

Le terme de collision inélastiques du côté droit est non local en énergie mais linéaire en  $F_{e,0}$ , il peut être discrétisé comme suit:



$$\int_{\varepsilon_{i-1/2}}^{\varepsilon_{i+1/2}} S d\varepsilon \equiv -P^i F_{e,0}^i + \sum_j Q_j^i F_{e,0}^j \quad (\text{II-38})$$

avec:

$$P^i = \sum_{inelastique} \gamma P_k \int_{\varepsilon_{i-1/2}}^{\varepsilon_{i+1/2}} \varepsilon \sigma_k \exp[(\varepsilon_i - \varepsilon)g_i] d\varepsilon \quad (\text{II-39})$$

$$Q_j^i = \sum_{inelastique} \gamma P_k \int_{\varepsilon_1}^{\varepsilon_2} \varepsilon \sigma_k \exp[(\varepsilon_j - \varepsilon)g_j] d\varepsilon$$

où l'intervalle  $[\varepsilon_1, \varepsilon_2]$  est le chevauchement de la cellule  $j$  et de la cellule  $i$  décalé par le seuil d'énergie  $\varepsilon_k$ .

$$\begin{aligned} \varepsilon_1 &= \min \left\{ \max(\varepsilon_{i-1/2} + \varepsilon_k, \varepsilon_{j-1/2}), \varepsilon_{j+1/2} \right\} \\ \varepsilon_2 &= \min \left\{ \max(\varepsilon_{i+1/2} + \varepsilon_k, \varepsilon_{j-1/2}), \varepsilon_{j+1/2} \right\} \end{aligned} \quad (\text{II-40})$$

Les facteurs exponentiels dans les intégrales de  $P$  et de  $Q$  imposent que  $F_{e,0}$  doit être exponentielle par partie, avec une pente logarithmique locale estimée comme suit:

$$g_i = \frac{1}{\varepsilon_{i+1} - \varepsilon_{i-1}} \ln \left( \frac{F_{e,0}^{i+1}}{F_{e,0}^{i-1}} \right) \quad (\text{II-41})$$

Cette technique nécessite des itérations mais converge extrêmement rapide. Les intégrales de  $P$  et de  $Q$  sont calculées exactement, en supposant que les sections efficaces de collision soient linéaires entre les points spécifiés par l'utilisateur dans un tableau de section efficace en fonction de l'énergie des électrons.

Comme conditions aux limites, on considère qu'il n'y a pas de flux dans l'espace d'énergie à zéro énergie plus les conditions de normalisations.

### **II.2.8. Coefficients de transport et taux des réactions du modèle fluide**

Afin de trouver le meilleur moyen de calculer les coefficients de transport et les taux des réactions à partir de la fonction de distribution des énergies électroniques  $F_{e,0}$ , il est nécessaire de faire le lien entre la formulation de l'équation de Boltzmann en deux termes et les équations du modèle fluide.

### *Transport des électrons*

L'équation de continuité des électrons peut être obtenue à partir de l'équation de la partie isotrope de la fonction de distribution en  $\varepsilon^{1/2}$  et en intégrant sur tout l'intervalle d'énergie.

$$\frac{\partial n_e}{\partial t} + \frac{\partial \Gamma}{\partial z} = S \quad (\text{II-42})$$

Où  $S$  est la source de la production nette des électrons, et le flux des électrons peut être exprimé comme suit :

$$\Gamma = n_e W = n \frac{\gamma}{3} \int_0^{\infty} \varepsilon F_1 d\varepsilon = -\mu_e E n_e - \frac{\partial (D_e n_e)}{\partial z} \quad (\text{II-43})$$

Où la mobilité réduite ( $\mu_e N$ ) et le coefficient de diffusion réduit ( $D_e N$ ) des électrons peuvent être calculés à partir des relations suivantes :

$$\begin{aligned} \mu_e N &= -\frac{\gamma}{3} \int_0^{\infty} \frac{\varepsilon}{\tilde{\sigma}_m} \frac{\partial F_{e,0}}{\partial \varepsilon} d\varepsilon \\ D_e N &= \frac{\gamma}{3} \int_0^{\infty} \frac{\varepsilon}{\tilde{\sigma}_m} F_{e,0} d\varepsilon \end{aligned} \quad (\text{II-44})$$

### *Transport d'énergie électronique*

Similaire à la dérivation de l'équation de continuité des électrons, l'équation de l'énergie électronique est obtenue à partir de l'équation de la partie isotrope de la fonction de distribution en  $\varepsilon^{3/2}$  et en intégrant sur tout l'intervalle d'énergie.

$$\frac{\partial n_\varepsilon}{\partial t} + \frac{\partial \Gamma_\varepsilon}{\partial z} + E \Gamma_\varepsilon = S_\varepsilon \quad (\text{II-45})$$

Où  $S_\varepsilon$  est l'énergie totale transférée la densité d'énergie  $n_\varepsilon$  et son flux  $\Gamma_\varepsilon$  sont donné par :

$$n_\varepsilon = n_e \int_0^{\infty} \varepsilon^{3/2} F_{e,0} d\varepsilon \equiv n_e \bar{\varepsilon} \quad (\text{II-46})$$

$$\Gamma_\varepsilon = n_e \frac{\gamma}{3} \int_0^{\infty} \varepsilon^2 F_{e,1} d\varepsilon = -\mu_\varepsilon E n_\varepsilon - \frac{\partial (D_\varepsilon n_\varepsilon)}{\partial z}$$

Où  $\bar{\varepsilon}$  est l'énergie électronique moyenne en électronvolts. La mobilité de l'énergie  $\mu_\varepsilon N$  et le coefficient de diffusion d'énergie réduit  $D_\varepsilon N$  sont définis par :

$$\mu_{\varepsilon} N = -\frac{\gamma}{3\varepsilon} \int_0^{\infty} \frac{\varepsilon^2}{\tilde{\sigma}_m} \frac{\partial F_{e,0}}{\partial \varepsilon} d\varepsilon \quad (\text{II-47})$$

$$D_{\varepsilon} N = \frac{\gamma}{3\varepsilon} \int_0^{\infty} \frac{\varepsilon^2}{\tilde{\sigma}_m} F_{e,0} d\varepsilon$$

### ***Termes sources et taux des réactions***

Différents coefficients peuvent être définis afin de calculer les vitesses de réaction apparaissant dans les termes sources des équations du modèle fluide. Le plus simple consiste à définir des taux des réactions (en unités de volume par temps).

$$k_k = \gamma \int_0^{\infty} \varepsilon \sigma_k F_{e,0} d\varepsilon \quad (\text{II-48})$$

À partir duquel la vitesse de réaction pour le processus de collision  $k$  est obtenue par la multiplication de la densité des électrons et la densité de l'espèce cible. On peut définir les coefficients de Townsend  $\alpha k_k$  (en unités de longueur inverse) tels que :

$$R_k = k_k P_k N n_e = \alpha_k P_k |\Gamma| \quad (\text{II-49})$$

### **II.3. Sections efficaces**

Les électrons sont l'espèce primordiale qui véhicule l'énergie dans un gaz producteur de plasma. La connaissance de sections efficaces électron-neutre fiables est donc importante pour décrire avec précision la cinétique électronique dans les plasmas à basse température, ce qui confère une crédibilité accrue aux résultats de la modélisation.

Le projet LXCat [1] permettant de collecter, d'afficher et de télécharger des sections efficaces d'électrons et d'ions pour les collisions binaires. Les jeux de sections efficaces cohérents sont ceux capables de reproduire les valeurs mesurées des coefficients de transport lorsqu'ils sont utilisés comme données d'entrée pour évaluer la fonction de distribution d'énergie électronique (FDEE) à partir d'un solveur de l'équation de Boltzmann ou d'un code Monte Carlo. La stratégie la plus populaire pour déterminer un jeu complet et cohérent de sections efficaces utilise un processus itératif pour effectuer des ajustements éclairés sur une compilation initiale de données, comme suit :

- ✓ un ensemble de sections efficaces est collecté à partir de la littérature
- ✓ les sections efficaces sont utilisées comme données d'entrée pour calculer les FDEE et pour évaluer les coefficients de transport d'électrons.
- ✓ les valeurs des sections efficaces sont ajustées, afin d'améliorer la concordance entre les valeurs des coefficients de transport calculées et les valeurs mesurées.

Dans ce qui suit on donne les jeux complets des sections efficaces de l'Hydrogène et de différents gaz rares utilisés dans ce travail.

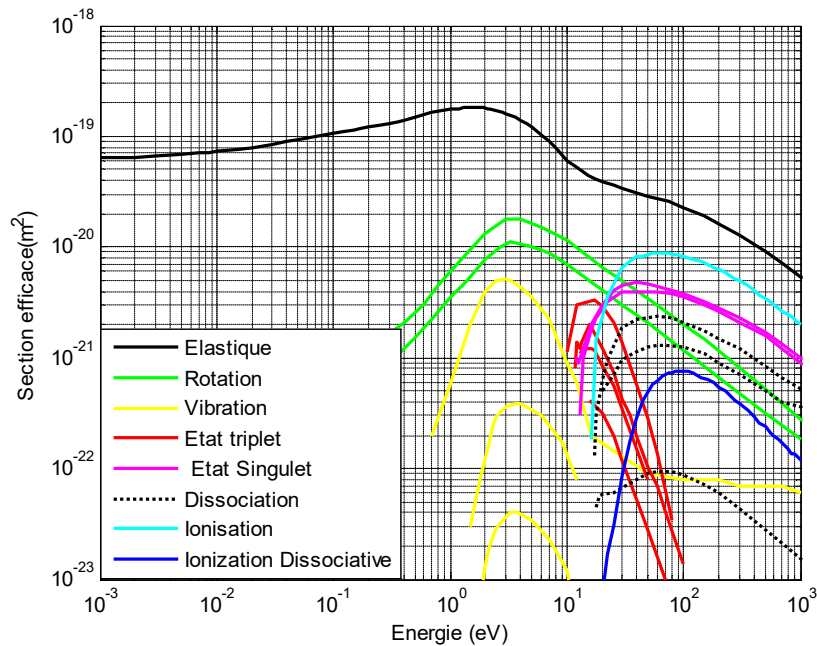
### II.3.1. Hydrogène

Le nom Hydrogène vient des deux mots : *Hydro* = eau, et *gène* = générateur, donc le mot hydrogène signifie " générateur d'eau ", c'est l'élément le plus abondant dans l'univers, c'est le carburant du soleil, Jupiter est constitué de 99,8% d'hydrogène et d'hélium. L'hydrogène est un gaz diatomique, tient la première place dans la classification de Mendeleïev, il possède la plus simple structure atomique (un proton dans son noyau et un électron dans son atome).

L'hydrogène est le principal constituant du soleil et de la plupart des étoiles (dont l'énergie provient de la fusion thermonucléaire de cet hydrogène), et de la matière interstellaire ou intergalactique. C'est un composant majeur des planètes géantes, sous forme métallique au cœur de Jupiter et de Saturne, et sous la forme de dihydrogène solide, liquide ou gazeux dans leurs couches plus externes et dans les autres planètes géantes. Sur Terre il est surtout présent à l'état d'eau liquide, solide (glace) ou gazeuse (vapeur d'eau), mais il se trouve aussi dans les émanations de certains volcans sous forme  $H_2$  et de méthane  $CH_4$ . L'hydrogène moléculaire se trouve en deux formes d'isomères : para-hydrogène et ortho-hydrogène. Le para-hydrogène est dans un état d'énergie inférieur à celui de l'ortho-hydrogène. A la température ambiante et l'équilibre thermique, l'hydrogène se compose d'environ 75% d'ortho-hydrogène et 25% de para-hydrogène. La forme pure para-hydrogène peut être obtenue à des températures très basses, mais il est impossible d'obtenir un échantillon contenant plus de 75% d'ortho-hydrogène à des températures élevées.

Les collisions électroniques principales possibles avec la molécule de l'Hydrogène sont les suivantes [28]:

- ✓ Élastique :  $e + H_2 \rightarrow e + H_2$
- ✓ Rotation:  $e + H_2 \rightarrow e + H_2 (j_{0-2})$
- ✓ Rotation:  $e + H_2 \rightarrow e + H_2 (j_{1-3})$
- ✓ Vibration :  $e + H_2 \rightarrow e + H_2 (v_1)$
- ✓ Vibration :  $e + H_2 \rightarrow e + H_2 (v_2)$
- ✓ Vibration :  $e + H_2 \rightarrow e + H_2 (v_3)$
- ✓ Excitation :  $e + H_2 \rightarrow e + H_2^*$  (singulet)
- ✓ Excitation :  $e + H_2 \rightarrow e + H_2^*$  (triplet)  $\rightarrow e + H+H$
- ✓ Dissociation :  $e + H_2 \rightarrow e + H+H (n=2)$
- ✓ Dissociation :  $e + H_2 \rightarrow e + H+H (n=3)$
- ✓ Ionisation :  $e + H_2 \rightarrow e + e + H_2^+$
- ✓ Ionisation :  $e + H_2 \rightarrow 2e + H+ H^+$



*Fig. II-1: Jeu complet des sections efficaces de collision électron-molécule d'Hydrogène*

### II.3.2. Hélium

L'hélium fait partie des premiers éléments apparus après le Big Bang et fût le premier découvert hors de notre atmosphère. Il faudra cependant attendre 1868 et l'astronome Norman

Lockyer pour en identifier les raies spectrales émises par le soleil. C'est également de là que viendra son nom du grec *Hélios*, signifiant Soleil. Les collisions électroniques principales possibles considérées avec l'atome de l'Hélium sont les suivantes [28]:

- ✓ Élastique :  $e + \text{He} \rightarrow e + \text{He}$
- ✓ Excitation:  $e + \text{He} \rightarrow e + \text{He}^*$
- ✓ Ionisation:  $e + \text{He} \rightarrow 2e + \text{He}^+$

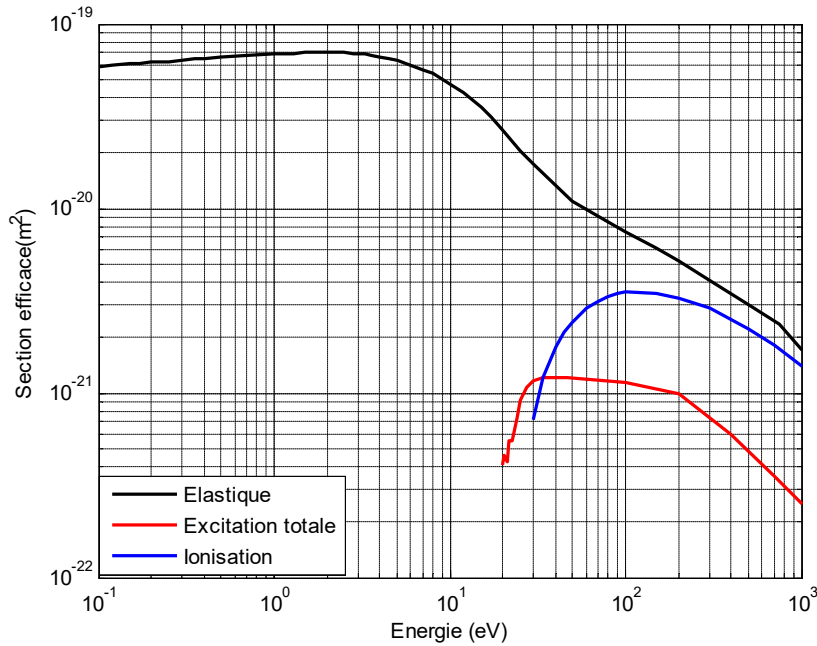


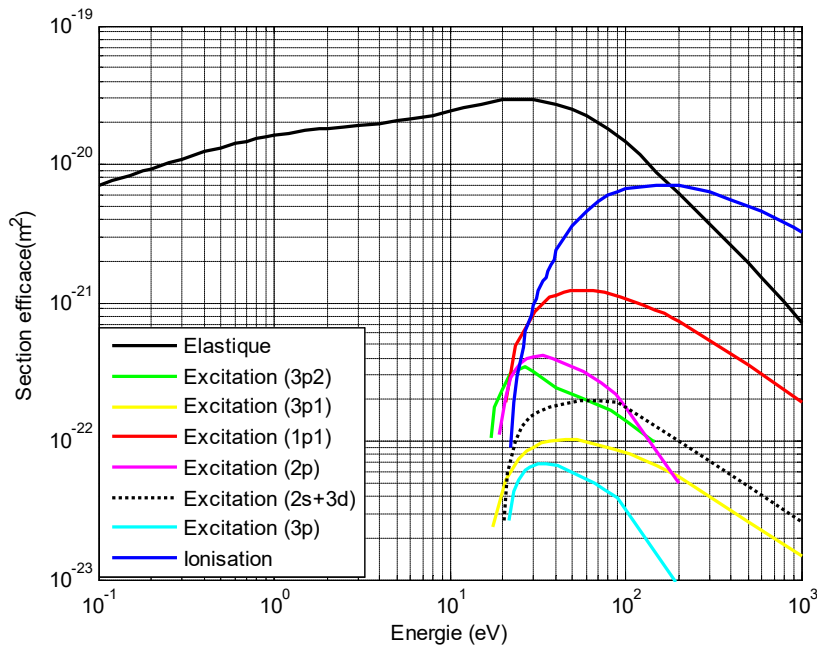
Fig. II-2: Jeu complet des sections efficaces de collision électron-atome d'Hélium

### II.3.3. Néon

Le néon est un gaz atmosphérique rare et il est non-toxique et chimiquement inerte. Bien que le néon est le quatrième élément le plus abondant dans l'univers, seulement 0,0018% de l'atmosphère terrestre est du néon. Le néon a la décharge la plus intense aux tensions et aux courants normaux que tous les gaz rares. La couleur rougeâtre-orange que le néon émet dans les lampes au néon est largement répandue pour faire annoncer des signes. Le néon est également employé génériquement pour ces types de lumières quand en réalité beaucoup d'autres gaz sont employés pour produire différentes couleurs de lumière. D'autres utilisations de néon incluent les

indicateurs, les intercepteurs de foudre, les tubes à haute tension et les tubes de télévision. Le néon et l'Hélium sont employés pour faire un type du laser de gaz. Les collisions électroniques principales possibles considérées avec l'atome du Néon sont les suivantes [28]:

- ✓ Élastique :  $e + \text{Ne} \rightarrow e + \text{Ne}$
- ✓ Excitation :  $e + \text{Ne} \rightarrow e + \text{Ne}^*$
- ✓ Ionisation :  $e + \text{Ne} \rightarrow 2e + \text{Ne}^+$

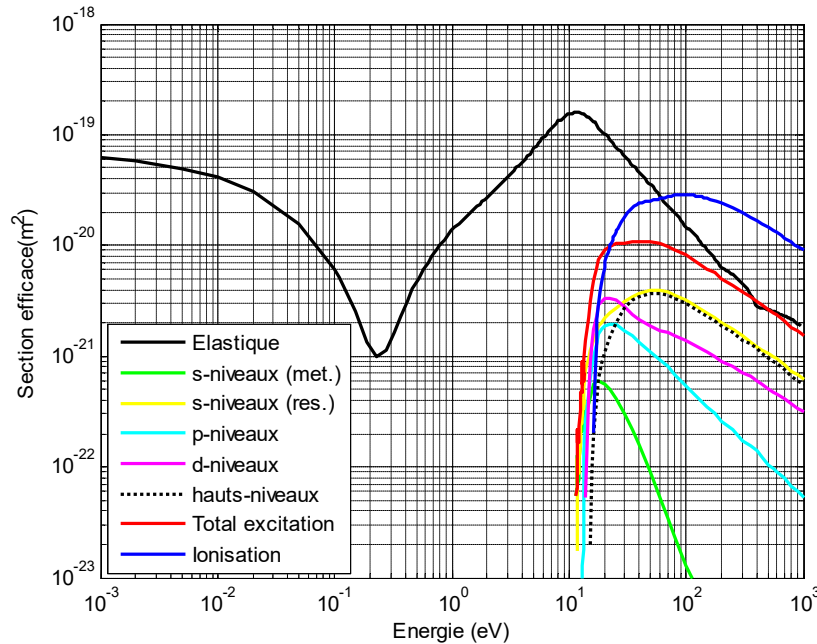


*Fig. II-3: Jeu complet des sections efficaces de collision électron-atome du Néon*

### II.3.4. Argon

Cet élément a été découvert par deux savants britanniques Lord Raleigh et Sir William Ramsay en 1894. L'origine du nom qui lui a été attribué vient du mot Grec « Argos » qui signifie inerte. L'argon est un gaz présent dans l'air à 0,934% [33]. Comme gaz inerte, l'argon est employé en chimie fine, dans les extincteurs, le soudage à l'arc TIG et certains vitrages isolants. On l'utilise aussi pour la conservation de la viande. L'argon ne réagit pas avec le filament d'une lampe à incandescence, même s'il est porté à très haute température. Les collisions électroniques principales possibles dans l'argon sont les suivantes [28]:

- ✓ Élastique :  $e + \text{Ar} \rightarrow e + \text{Ar}$
- ✓ Excitation :  $e + \text{Ar} \rightarrow e + \text{Ar}^*$
- ✓ Ionisation :  $e + \text{Ar} \rightarrow 2e + \text{Ar}^+$



*Fig. II-4: Jeu complet des sections efficaces de collision électron-atome d'Argon*

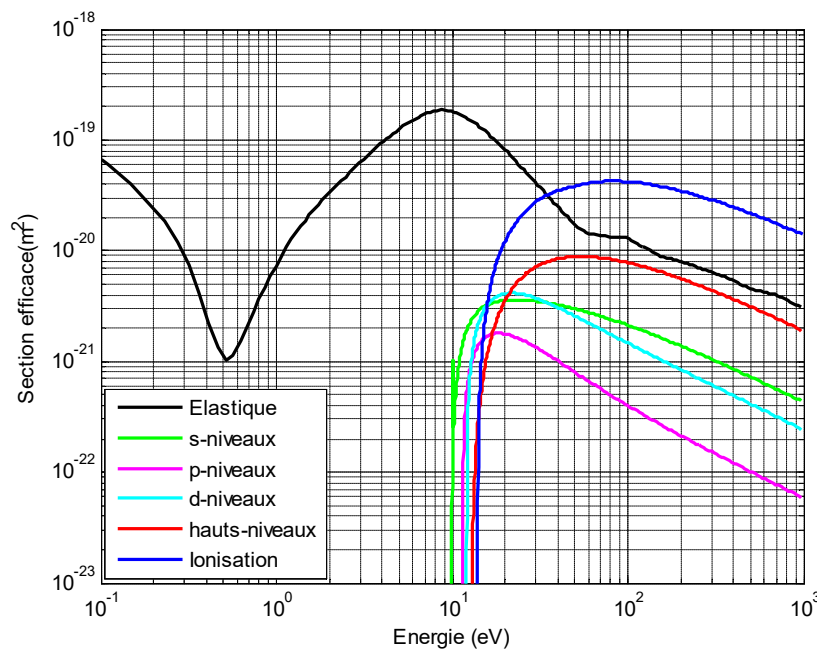
### II.3.5. Krypton

Le nom krypton vient du grec kryptos qui signifie caché, car on a eu bien de la peine à le trouver dans l'air. Il y a moins d'un milligramme de krypton par kilogramme d'air. Le krypton a été découvert en 1898 par Ramsay, qui a constaté qu'après avoir laissé s'évaporer plusieurs litres d'air liquide, il restait quelques milligrammes d'un gaz lourd liquéfié, bouillant à  $-152^{\circ}\text{C}$ , et dont la masse molaire était voisine de 80. De plus, soumis à une décharge électrique, il émet une lumière dont le spectre est caractérisé par deux raies très brillantes dans l'orange et le vert. On l'utilise comme gaz de remplissage des ampoules électriques à haute performance, où il entre en concurrence avec les halogènes. Il sert aussi à équiper les phares ou les systèmes stroboscopiques signalant les aéroports vus d'avion. Une décharge électrique établie dans un tube rempli de krypton produit une lumière dont l'une des composantes orangées possède une longueur d'onde définie avec une précision à nulle autre pareille. L'emploi de la radiation du krypton, et plus



précisément de son isotope 86, permettait de définir le mètre avec une précision 1000 fois plus élevée. L'Union Internationale de Physique a donc choisi d'abandonner la référence au mètre étalon en 1960. Les collisions électroniques principales possibles dans le Krypton sont les suivantes [28]:

- ✓ Élastique :  $e + \text{Kr} \rightarrow e + \text{Kr}$
- ✓ Excitation :  $e + \text{Kr} \rightarrow e + \text{Kr}^*$
- ✓ Ionisation :  $e + \text{Kr} \rightarrow 2e + \text{Kr}^+$



*Fig. II-5: Jeu complet des sections efficaces de collision électron-atome de Krypton*

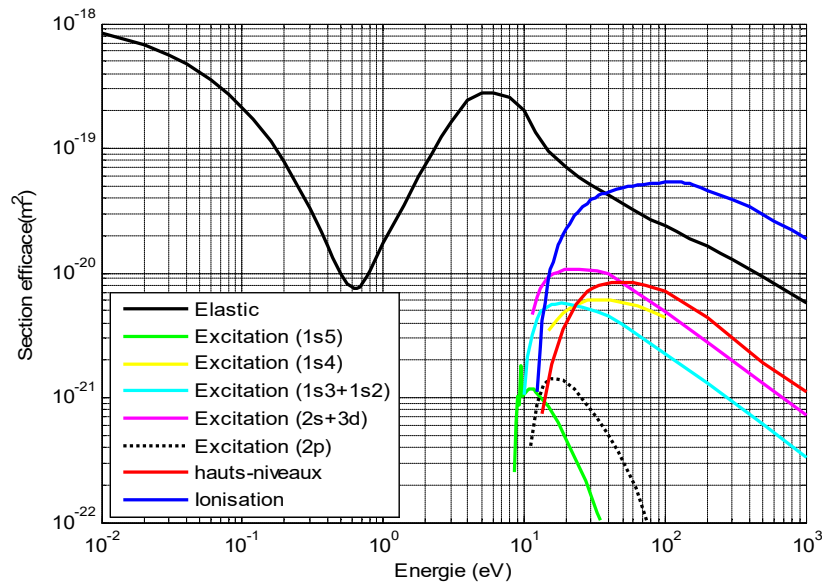
### II.3.6. Xénon

Le xénon a été découvert par Ramsay et Travers en 1898, peu de temps après le Krypton et le Néon, qu'ils ont également mis en évidence. Il présente la particularité d'être le gaz rare le plus rare (et donc le plus cher) derrière l'Argon, ce dernier n'ayant que des isotopes radioactifs. Il est incolore et inodore. Il émet une lumière bleutée ou violette quand il est sollicité dans une lampe à décharge. Cet élément présente un état métallique sous une pression au-delà de plusieurs giga pascals. Le xénon est retrouvé dans les lampes à décharge. Il permet en effet de produire une

lumière proche de celle du soleil à midi. Ces lampes équipent aussi depuis peu certains phares d'automobiles, à la lumière légèrement bleutée.

Un mélange de xénon et de néon est employé dans les cellules des écrans plasmas. Au sein des moteurs ioniques dans le domaine spatial, c'est le xénon qu'est le plus couramment utilisé. Le xénon est aussi employé en imagerie médicale et parfois en anesthésie. Les collisions électroniques principales possibles dans le Krypton sont les suivantes [28]:

- ✓ Élastique :  $e + \text{Xe} \rightarrow e + \text{Xe}$
- ✓ Excitation :  $e + \text{Xe} \rightarrow e + \text{Xe}^*$
- ✓ Ionisation :  $e + \text{Xe} \rightarrow 2e + \text{Xe}^+$



*Fig. II-6: Jeu complet des sections efficaces de collision électron-atome de Xénon*

## II.4. Coefficients de transport dans les mélanges Hydrogène/gaz rares

### II.4.1. Mélange Hydrogène/Hélium H<sub>2</sub>/He

Les figures suivantes montrent la mobilité, l'énergie caractéristique, et le coefficient d'ionisation dans le mélange H<sub>2</sub>/He en fonction du champ réduit  $E/N$ .

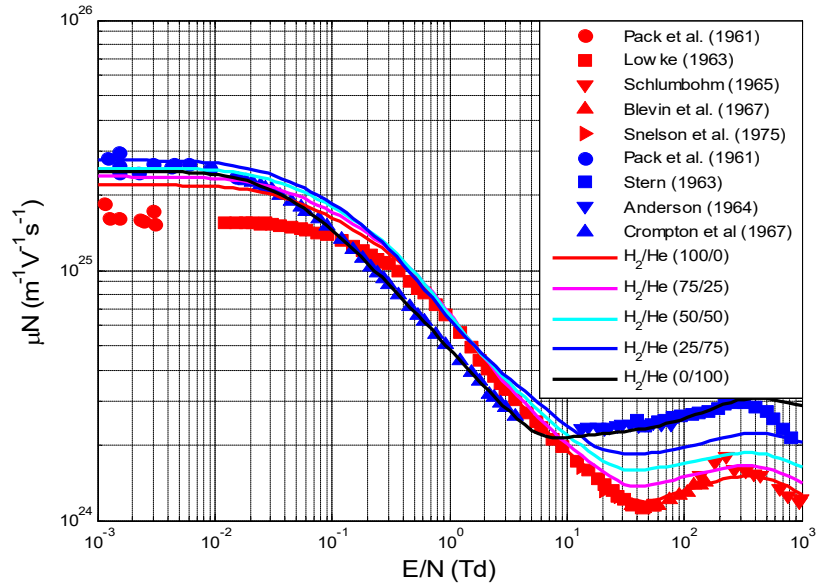


Fig. II-7: Comparaison entre la mobilité réduite calculée et les données de mesure (symboles rouges pour l'hydrogène pur et symboles bleus pour le néon pur [29-35]), les lignes continues représentent la mobilité calculée dans le mélange ( $H_2/He$ ),

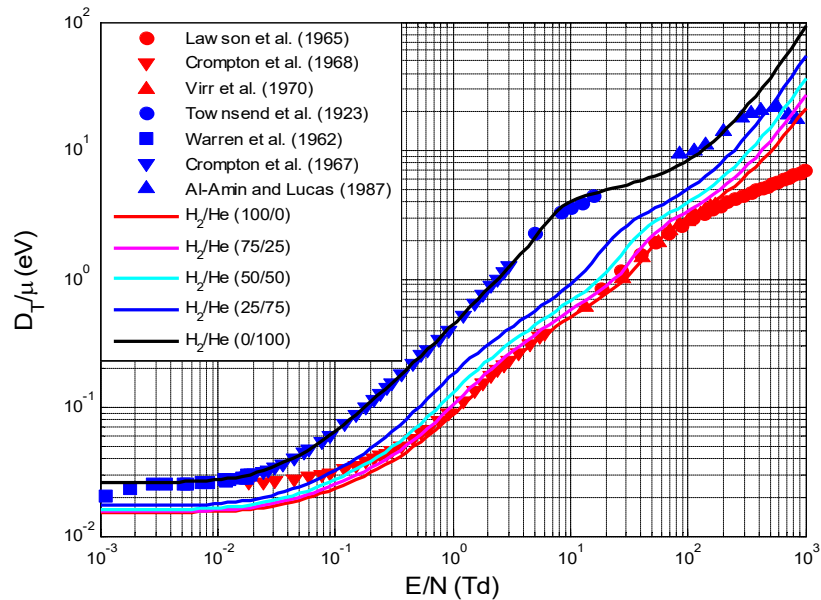
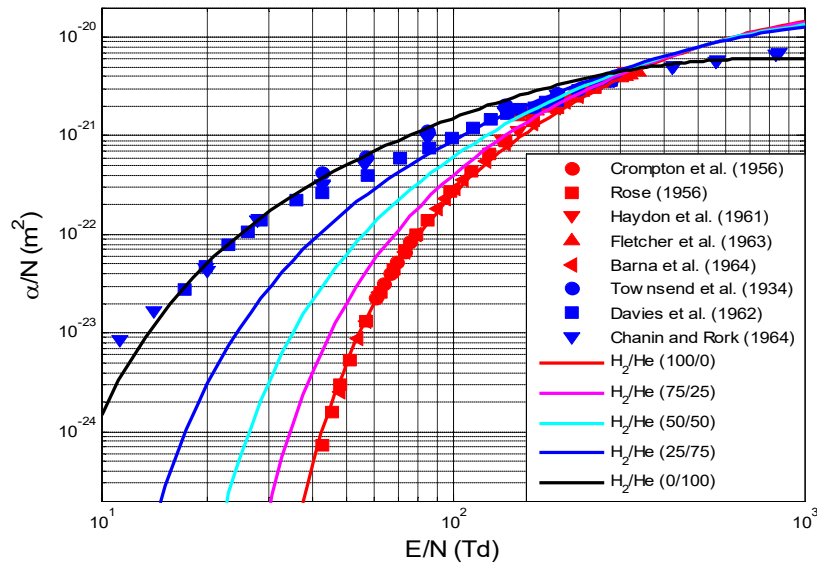


Fig. II-8: Comparaison entre l'énergie caractéristique calculée et les données de mesure (symboles rouges pour l'hydrogène pur et symboles bleus pour le néon pur [36-41]), les lignes continues représentent l'énergie caractéristique calculée dans le mélange ( $H_2/He$ )



*Fig. II-9: Comparaison entre le coefficient d'ionisation calculé et les données de mesure (symboles rouges pour l'hydrogène pur et symboles bleus pour le néon pur [42-49]), les lignes continues représentent les coefficients d'ionisation calculés dans le mélange ( $\text{H}_2/\text{He}$ )*

Les résultats de calcul de la mobilité des électrons, de leur énergie caractéristique, et leur coefficient d'ionisation dans le mélange  $\text{H}_2/\text{He}$  en fonction du champ réduit  $E/N$  sont comparés aux mesures disponibles dans la littérature (cas de l'hydrogène pur et cas de l'hélium pur) et illustrés sur les figures Fig. II-7, Fig. II-8, et Fig. II-9, respectivement. Les calculs sont en très bon accord avec les mesures à l'exception de la mobilité réduite des électrons dans l'hydrogène pour des champs réduits faibles ( $E/N < 0.3$  Td) qui présente un écart. Ce dernier est dû à la négligence des collisions super-élastiques avec les isomères de la molécule de l'hydrogène, on note qu'à la température ambiante, l'hydrogène gazeux normal contient 75% d'ortho-hydrogène ( $j=1, 3$ ) et 25% de para-hydrogène ( $j=0, 2$ ), et la collision d'un électron avec  $\text{H}_2(j=1, 2, 3)$  permet à l'électron de gagner une énergie supplémentaire et par suite provoque une diminution à la mobilité réduite et une augmentation à la diffusion (énergie caractéristique).

#### **II.4.2. Mélange Hydrogène Néon $\text{H}_2/\text{Ne}$**

Les figures suivantes montrent la mobilité, l'énergie caractéristique, et le coefficient d'ionisation dans le mélange  $\text{H}_2/\text{Ne}$  en fonction du champ réduit  $E/N$ .

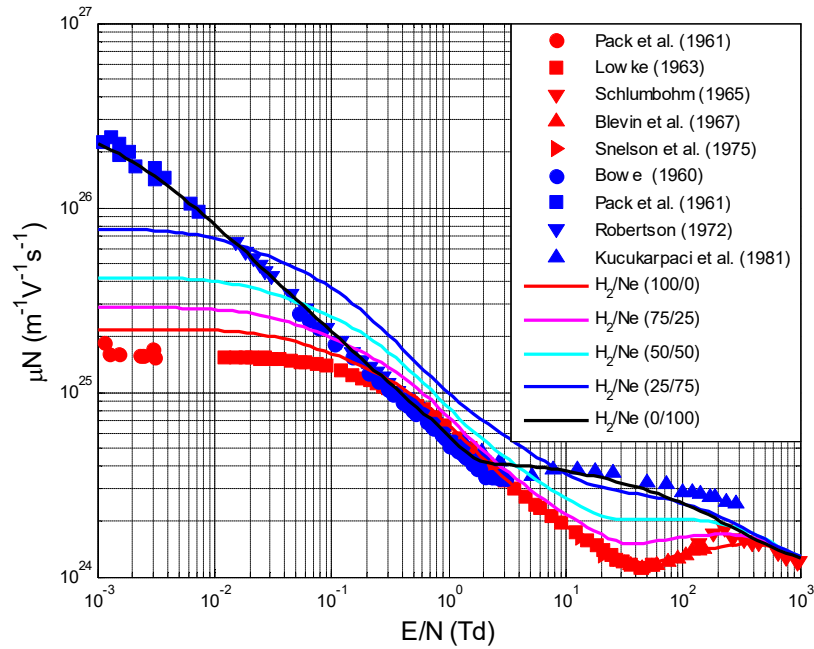


Fig. II-10: Comparaison entre la mobilité réduite calculée et les données de mesure (symboles rouges pour l'hydrogène pur et symboles bleus pour le néon pur [29-33], [29], [50-52]), les lignes continues représentent la motilité calculée dans le mélange ( $\text{H}_2/\text{Ne}$ ).

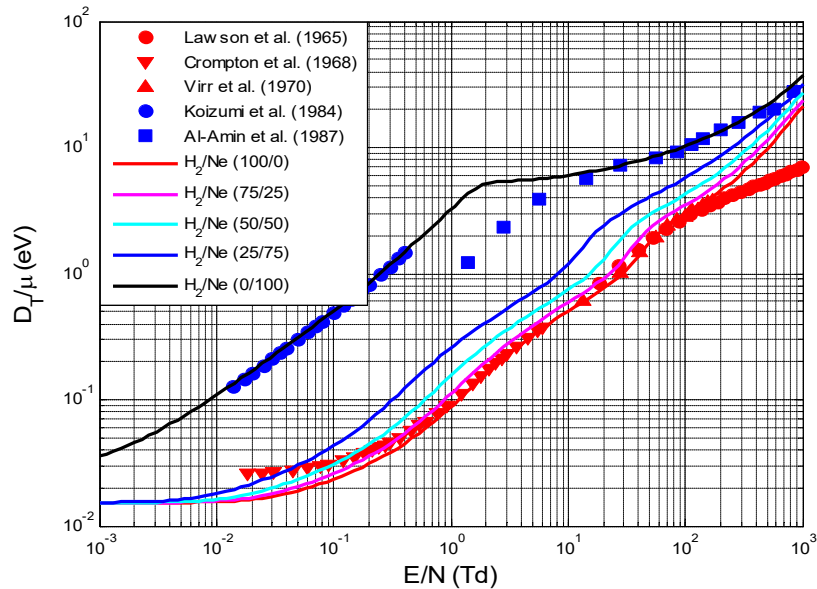
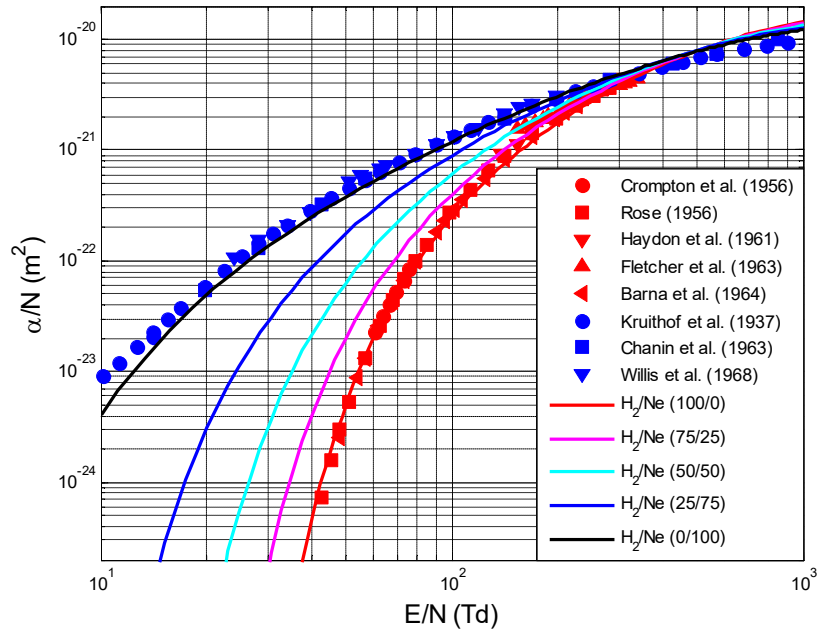


Fig. II-11: Comparaison entre l'énergie caractéristique calculée et les données de mesure (symboles rouges pour l'hydrogène pur et symboles bleus pour le néon pur [36-38], [41], [53]), les lignes continues représentent l'énergie caractéristique calculée dans le mélange ( $\text{H}_2/\text{Ne}$ ).



*Fig. II-12: Comparaison entre le coefficient d'ionisation calculé et les données de mesure (symboles rouges pour l'hydrogène pur et symboles bleus pour le néon pur [42-46], [54-56]), les lignes continues représentant les coefficients d'ionisation calculés dans le mélange ( $\text{H}_2/\text{Ne}$ )*

Les résultats de calcul de la mobilité des électrons, de leur énergie caractéristique et du coefficient d'ionisation dans le mélange  $\text{H}_2/\text{Ne}$  en fonction du champ réduit  $E/N$  dans les conditions indiquées sur les figures ; Fig. II-10, Fig. II-11, et Fig. II-12 obtenus dans le cas du Néon pur et dans le cas de l'Hydrogène pur sont en très bon accord avec les données de mesure.

Pour les champs électriques réduits faibles, la mobilité des électrons, l'énergie caractéristique ainsi que le coefficient d'ionisation diminuent avec l'augmentant du pourcentage de l'hydrogène, cela peut être expliqué par le grand nombre des états d'excitation de la molécule de l'Hydrogène par des faibles énergies électroniques (états de rotation, états de vibration et états d'excitation). Durant ces collisions inélastiques avec la molécule d'hydrogène, les électrons perdent leurs énergies gagnées par leurs mouvements dans le champ électrique.

### II.4.3. Mélange Hydrogène Argon $\text{H}_2/\text{Ar}$

Les figures suivantes montrent la mobilité, l'énergie caractéristique et le coefficient d'ionisation dans le mélange  $\text{H}_2/\text{Ar}$  en fonction du champ réduit  $E/N$ .

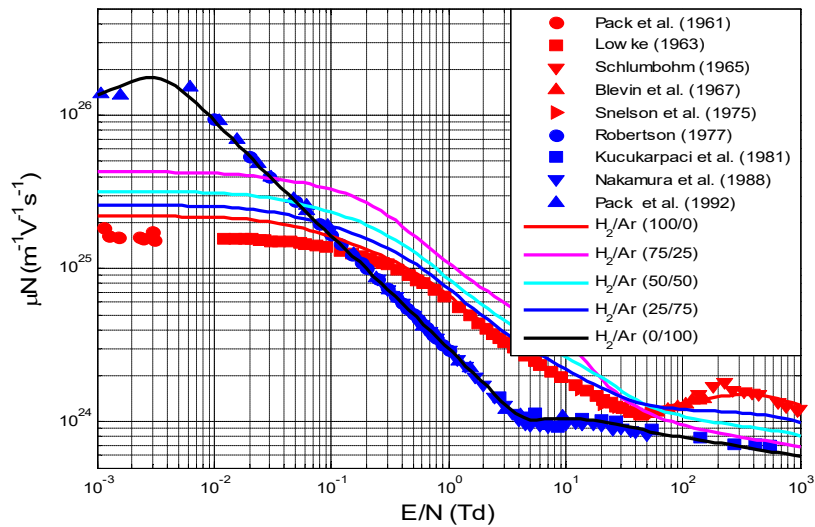


Fig. II-13. Comparaison entre la mobilité réduite calculée et les données de mesure (symboles rouges pour l'hydrogène pur et symboles bleus pour l'argon pur [29-33], [57-60]), les lignes continues représentent la motilité calculée dans le mélange ( $\text{H}_2/\text{Ar}$ )

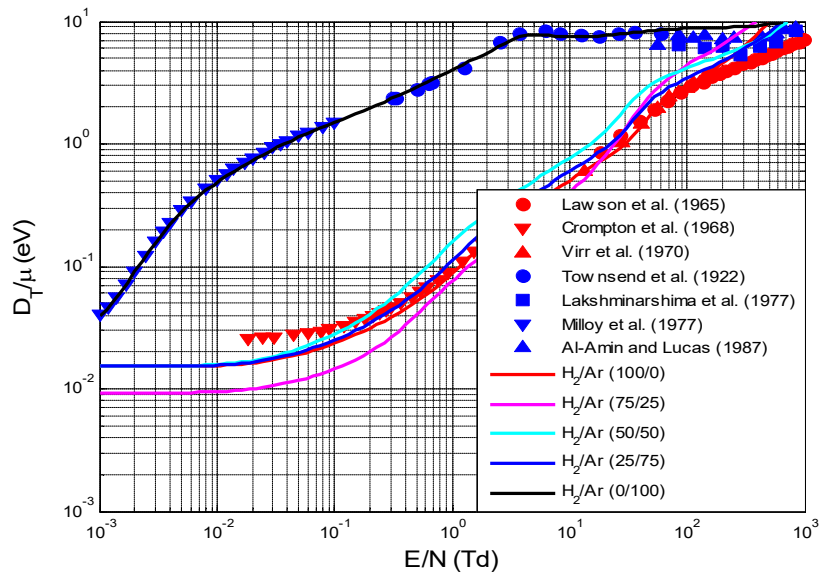
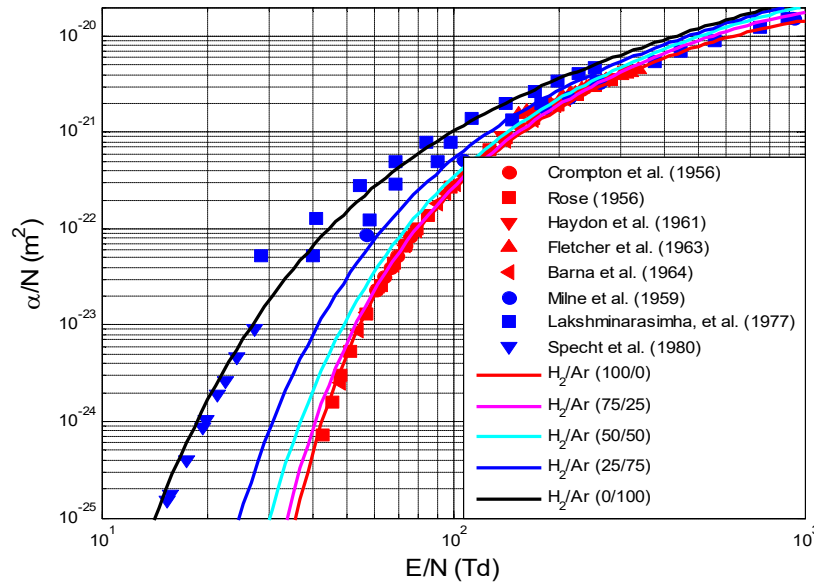


Fig. II-14: Comparaison entre l'énergie caractéristique calculée et les données de mesure (symboles rouges pour l'hydrogène pur et symboles bleus pour l'argon pur [36-38], [41], [61-63]), les lignes continues représentent l'énergie caractéristique calculée dans le mélange ( $\text{H}_2/\text{Ar}$ )



*Fig. II-15: Comparaison entre le coefficient d'ionisation calculé et les données de mesure (symboles rouges pour l'hydrogène pur et symboles bleus pour l'argon pur [42-46], [62,64,65]), les lignes continues représentent les coefficients d'ionisation calculés dans le mélange ( $H_2/Ar$ )*

En raison de nombreuses données proposées dans la littérature sur les sections efficaces d'argon, on a choisi le jeu optimal de sections efficaces en comparant les coefficients de transport calculés à partir de ces sections efficaces avec les mesures expérimentales disponibles dans la littérature.

Les figures (Fig. II-13, Fig. II-14, et Fig. II-15) montrent la variation de la mobilité réduite des électrons, leur coefficient de diffusion (énergie caractéristique), et leur coefficient d'ionisation en fonction du champ réduit ( $E/N$ ) dans les différents mélanges de  $H_2/Ar$ . Pour l'argon pur, les résultats de calcul sont en excellent accord avec les mesures, où la mobilité réduite présente un pic pour un champ réduit de 0.03 Td à cause du minimum de Ramsauer-Townsend à 0.2 eV (voir Fig. II-4), à cette énergie le gaz d'argon devient presque transparent par rapport aux électrons.

#### **II.4.4. Mélange Hydrogène Krypton He/Kr**

Les figures suivantes montrent la mobilité, l'énergie caractéristique et le coefficient d'ionisation dans le mélange  $H_2/Kr$  en fonction du champ réduit  $E/N$ .



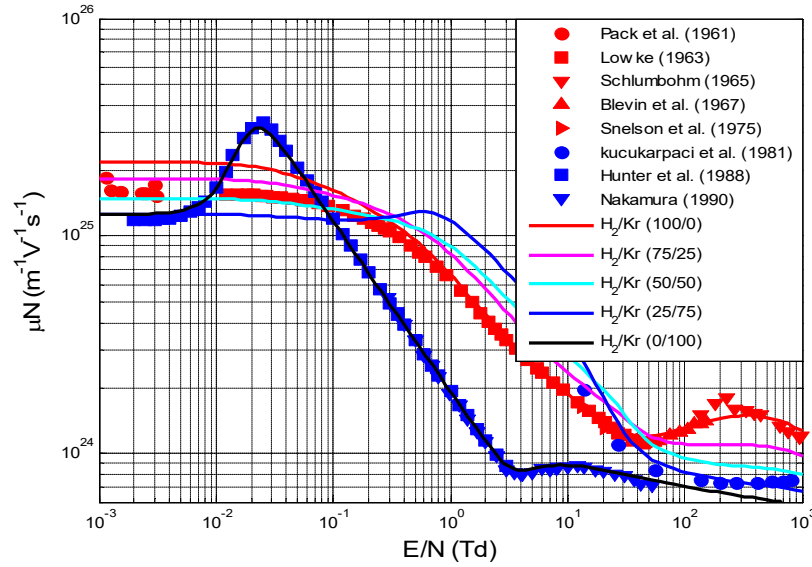


Fig. II-16: Comparaison entre la mobilité réduite calculée et les données de mesure (symboles rouges pour l'hydrogène pur et symboles bleus pour le krypton pur [29-33], [58,66,67]), les lignes continues représentant la motilité calculée dans le mélange ( $\text{H}_2/\text{Kr}$ )

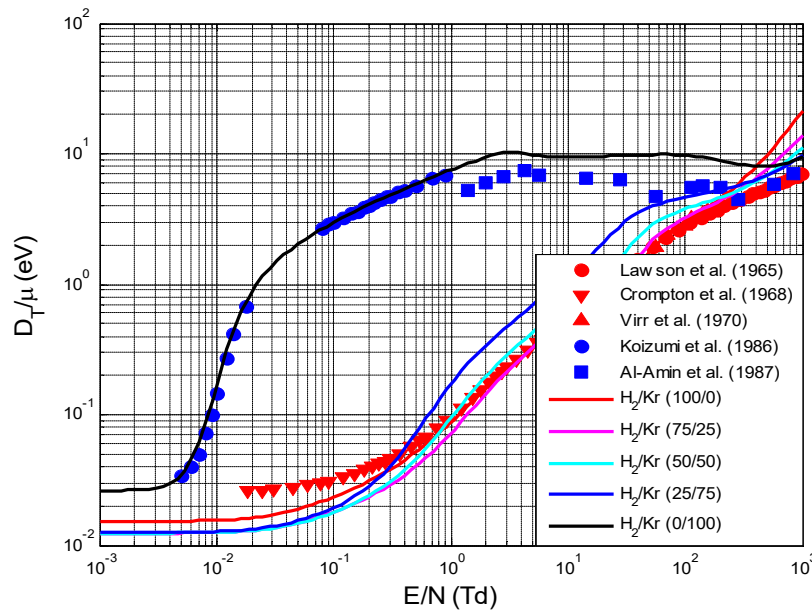
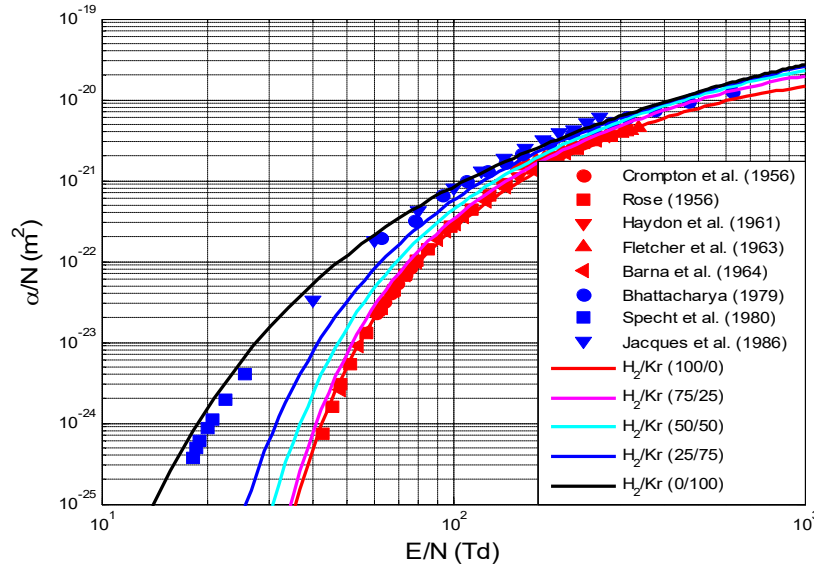


Fig. II-17: Comparaison entre l'énergie caractéristique calculée et les données de mesure (symboles rouges pour l'hydrogène pur et symboles bleus pour le krypton pur [36-38], [41,53]), les lignes continues représentant l'énergie caractéristique calculée dans le mélange ( $\text{H}_2/\text{Kr}$ )



*Fig. II-18: Comparaison entre le coefficient d'ionisation calculé et les mesures (symboles rouges pour l'hydrogène pur et symboles bleus pour le krypton pur [42-46], [65,68,69]), les lignes continues représentent les coefficients d'ionisation calculés dans le mélange ( $\text{H}_2/\text{Kr}$ )*

Les résultats de calcul de la mobilité réduite des électrons, de leur énergie caractéristique, et de leur coefficient d'ionisation dans le mélange  $\text{Kr}/\text{H}_2$  obtenus en fonction du champ réduit  $E/N$  (Fig. II-16, Fig. II-17, et Fig. II-18) sont en très bon accord avec les données de mesure dans le cas du Krypton pur et dans le cas de l'Hydrogène pur. Pour les champs électriques réduits faibles, l'énergie caractéristique, et le coefficient d'ionisation diminuent avec l'augmentation du pourcentage de l'hydrogène, et cela peut être expliqué par le grand nombre de collisions inélastiques avec la molécule de l'Hydrogène (rotation, vibration, et excitation). Par contre, la mobilité réduite des électrons augmente avec l'augmentation du pourcentage d'hydrogène, à l'exception pour des champs réduits compris entre  $10^{-2}$  (Td) et  $10^{-1}$  (Td), où la mobilité réduite présente un pic de  $3 \times 10^{25} \text{ m}^{-1} \text{ V}^{-1} \text{ s}^{-1}$  à cause du minimum de Ramsauer-Townsend qui est  $10^{-21} \text{ m}^2$  à énergie électronique de 0.5eV (voir Fig. II-5).

#### II.4.5. Mélange Hydrogène Xénon $\text{H}_2/\text{Xe}$

Les figures suivantes montrent la mobilité, l'énergie caractéristique, et le coefficient d'ionisation dans le mélange  $\text{H}_2/\text{Xe}$  en fonction du champ réduit  $E/N$ .

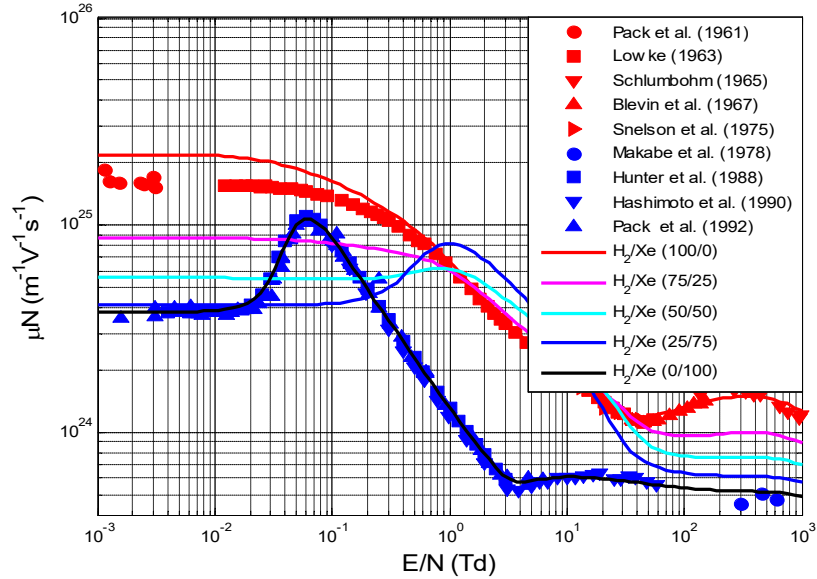


Fig. II-19: Comparaison entre la mobilité réduite calculée et les données de mesure (symboles rouges pour l'hydrogène pur et symboles bleus pour le xénon pur [29-33], [60,66,70,71]), les lignes continues représentent la mobilité calculée dans le mélange (H<sub>2</sub>/Xe)

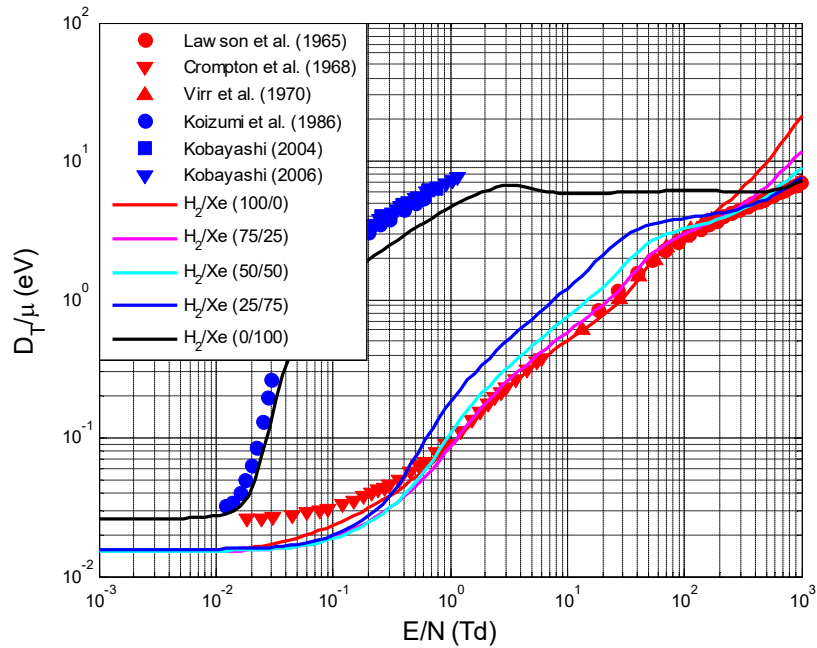
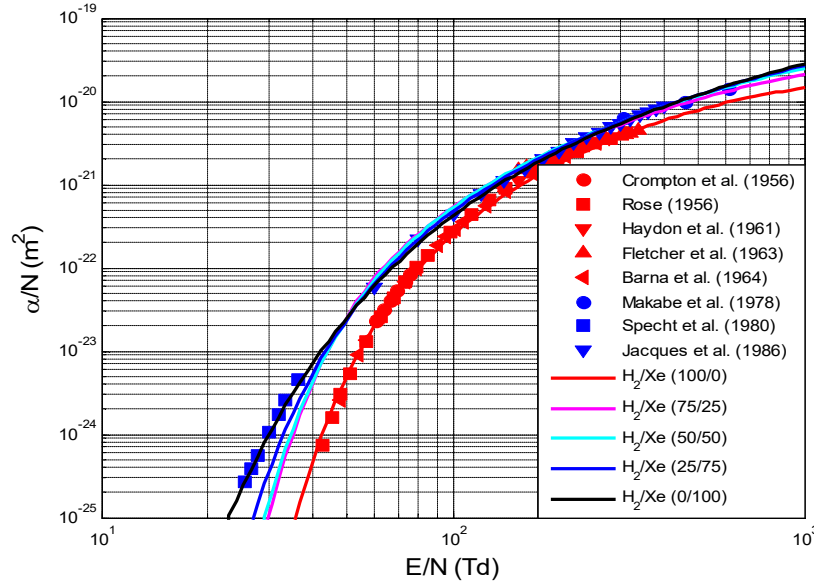


Fig. II-20: Comparaison entre l'énergie caractéristique calculée et les données de mesure (symboles rouges pour l'hydrogène pur et symboles bleus pour le xénon pur [36-38], [53,72,73]), les lignes continues représentent l'énergie caractéristique calculée dans le mélange (H<sub>2</sub>/Xe)



*Fig. II-21: Comparaison entre les coefficients d'ionisation calculés et les données de mesure (symboles rouges pour l'hydrogène pur et symboles bleus pour le xénon pur[42-46],[65,69,70]), les lignes continues représentant les coefficients d'ionisation calculés dans le mélange ( $\text{H}_2/\text{Xe}$ )*

Dans les figures (Fig. II-19, Fig. 20, et Fig. II-21) on montre les résultats de calcul de la mobilité réduite des électrons, leur coefficient de diffusion, et leur coefficient d'ionisation en fonction du champ réduit dans le mélange  $\text{H}_2/\text{Xe}$ . Le Xénon est comme l'argon et le Krypton présente un minimum de Ramsauer-Townsend (voir Fig. II-6), et ce minimum provoque un pic dans la mobilité réduite à un champ réduit de 0.06 Td.

### II.5. Courbe de Paschen

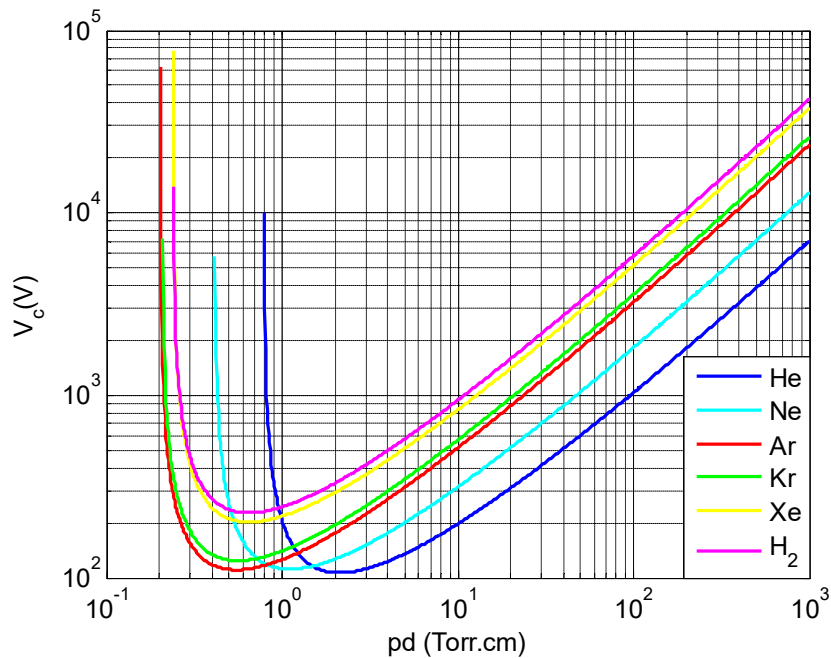
Parmi les paramètres du choix d'un gaz tampon pour une application donnée dans l'industrie est la tension de claquage, cette tension est donnée par une courbe appelée courbe de Paschen (elle donne la tension de claquage en fonction du produit  $p \times d$ , avec  $p$ : est la pression du gaz et  $d$ : est la distance entre les électrodes). La tension de claquage ( $V_c$ ) doit vérifier la condition donnée par l'équation (I-53), ou le coefficient d'ionisation  $\alpha$  (appelé aussi premier coefficient de Townsend), il est interpolé généralement par une équation de la forme suivante :

$$\alpha = p.A.e^{-\frac{B}{E/p}} \quad (\text{II-50})$$

Avec  $A$ , et  $B$  sont les coefficients de l'interpolation. Maintenant, on remplace le coefficient d'ionisation par son expression dans l'équation de la condition de claquage (Eq.I-53) avec  $E=V_c/d$ , on trouve facilement l'équation de la courbe de Paschen:

$$V_c(pd) = \frac{B \cdot pd}{\log(A \cdot pd) - \log\left[\log\left(1 + \frac{1}{\gamma}\right)\right]} \quad (\text{II-51})$$

Il est important de noter que le coefficient d'émission électronique secondaire  $\gamma$  (second coefficient de Townsend) se change selon la nature de l'ion qui bombarde la cathode et selon l'état et le travail de sortie du métal de l'électrode. La figure II-21 montre la variation de la tension de claquage en fonction de  $p \times d$  dans l'hélium, le néon, l'argon, le krypton, le xénon, et l'hydrogène dans le cas des électrodes en cuivre, la figure montre que l'argon a les conditions de claquage optimal (tension de claquage et produit  $p \times d$ ) en comparaison avec les autres gaz rares, plus de ça, l'argon est présent dans l'air avec un pourcentage d'environ de 1%. Alors, de ces raisons, l'argon est le gaz le plus utilisé comme un gaz tampon dans les plasmas de décharge dans les différents domaines industriels.



*Fig. II-22: Variation de la tension de claquage en fonction du produit (courbe de Paschen) dans les gaz rares et l'hydrogène pour une cathode de cuivre*

## II.6. Conclusion

Dans ce chapitre on a présenté les principales caractéristiques de transport des électrons dans une décharge électrique ; comme la mobilité électronique, l'énergie caractéristique et le coefficient d'ionisation. On a commencé par une formulation mathématique simplifiée de l'équation de Boltzmann (approximation à deux termes), en tenant compte des équations de croissances de la densité électronique et les termes de collision. Puis, on a donné la discrétisation en différences finies en utilisant le schéma exponentiel de *Scharfetter et Gummel*, qui est couramment utilisé pour résoudre les problèmes de convection-diffusion. Les jeux de section efficace pour  $H_2$ ,  $H_e$ , Ne, Ar,  $K_r$ , et  $X_e$  montrés dans ce chapitre sont choisis de manière à reproduire les coefficients de transport. L'utilité de ce travail est de calculer les coefficients de transport dans les différents mélanges de  $H_2$ /gaz rares, qui n'existent plus dans la littérature.

Le calcul des coefficients de transport effectué par le solveur de l'équation de Boltzmann à deux termes donne des résultats fidèles aux mesures, pour des champs électriques réduits de  $10^{-3}$  à  $10^2$  Td dans les gaz pur, et cela pour des températures de 300  $^0K$ . À faible  $E/N$ , l'accord ne peut être obtenu que l'osque en prene les transitions inélastiques par paliers et super élastiques entre les niveaux de rotation considérés.

Le calcul de la tension de claquage en fonction de  $p \times d$  dans l'hélium, le néon, l'argon, le krypton, le xénon, et l'hydrogène dans le cas des électrodes en cuivre montre que l'argon a les conditions de claquage optimal (tension de claquage et produit  $p \times d$ ) en comparaison avec les autres gaz rares. Alors, pour cette raison, l'argon est le gaz le plus utilisé comme un gaz tampon dans les plasmas de décharge dans les différents domaines industriels.

## Références de Chapitre II

- [1]: J. H. Ingold, J. H., "Moment method applied to gaseous electronics," *Physical Review A*, vol. 40, no. 7, p. 3855, 1989.
- [2]: D. B. Graves, and K. F. Jensen, "A continuum model of DC and RF discharges," *IEEE Transactions on plasma science*, vol. 14, no. 2, pp. 78-91, 1986.
- [3]: J. P. Boeuf, "Numerical model of rf glow discharges," *Physical review A*, vol. 36, no. 6, p. 2782, 1987.
- [4]: A. Salabas, G. Gousset, and L. L. Alves, "Two-dimensional fluid modelling of charged particle transport in radio-frequency capacitively coupled discharges," *Plasma Sources Science and Technology*, vol. 11, no. 4, p. 448, 2002.
- [5]: J. Dutton, "A survey of electron swarm data," *Journal of Physical and Chemical Reference Data*, vol. 4, no. 3, pp. 577-856, 1975.
- [6]: L. S. Frost and A. V. Phelps, "Rotational excitation and momentum transfer cross sections for electrons in H<sub>2</sub> and N<sub>2</sub> from transport coefficients," *Physical Review*, vol. 127, no. 5, p. 1621, 1962.
- [7]: J. Wilhelm, and R. Winkler, "Convergence questions in calculating velocity distribution function of electrons of Lorentz plasma in homogenous, stationary electrical field," *Annalen Der Physik*, vol. 23, no. 1-2, p. 28, 1969.
- [8]: R. Winkler *et al.*, "Fundamentals of a Technique for Determining Electron Distribution Functions by Multi-Term Even-Order Expansion in Legendre Polynomials 1.Theory," *Beiträgeaus der Plasmaphysik*, vol. 24, no. 6, pp. 657-674, 1984.
- [9]: S. D. Rockwood, "Elastic and inelastic cross sections for electron-Hg scattering from Hg transport data," *Physical Review A*, vol. 8, no. 5, p. 2348, 1973.
- [10]: P. E. Luft, JILA Information Center Report No. 14 University of Colorado, 1975.
- [11]: H. Tagashira, Y. Sakai, and S. Sakamoto, "The development of electron avalanches in argon at high E/N values. II. Boltzmann equation analysis," *Journal of Physics D: Applied Physics*, vol. 10, no. 7, p. 1051, 1977.
- [12]: W. L. Morgan, JILA Information Center Report No. 19 University of Colorado, 1979.
- [13]: W. L. Morgan, and B. M. Penetrante, "ELENDF: A time-dependent Boltzmann solver for partially ionized plasmas," *Computer Physics Communications*, vol. 58, no. 1-2, pp. 127-152, 1990.

- [14]: S. L. Lin, R. E. Robson, and E. A. Mason, "Moment theory of electron drift and diffusion in neutral gases in an electrostatic field," *The Journal of Chemical Physics*, vol. 71, no. 8, pp. 3483-3498, 1979.
- [15]: L. C. Pitchford, S. V. O'Neil, and J. R. Rumble Jr, "Extended Boltzmann analysis of electron swarm experiments," *Physical Review A*, vol. 23, no. 1, p.294, 1981.
- [16]: P. Seguret *al.*, "The application of a modified form of the SN method to the calculation of swarm parameters of electrons in a weakly ionised equilibrium medium," *Journal of Computational Physics*, vol. 50, no. 1, pp. 116-137, 1983.
- [17]: <https://www.bolsig.laplace.univ-tlse.fr/> consulté 30 aout 2019
- [18]: T. Holstein, "Energy distribution of electrons in high frequency gas discharges," *Physical Review*, vol. 70, no. 5-6, p. 367, 1946.
- [19]: W. P. Allis, *Handbuch der Physik* S Flugge (Berlin:Springer), p. 383, 1956.
- [20]: P. William, "Semidivergence of the Legendre expansion of the Boltzmann equation," *Physical Review A*, vol. 26, no. 3, p. 1704, 1982.
- [21]: V. Phelps and L. C. Pitchford, "Anisotropic scattering of electrons by N<sub>2</sub> and its effect on electron transport," *Physical Review A*, vol. 31, no. 5, p. 2932, 1985.
- [22]: W. R. L. Thomas, "The determination of the total excitation cross section in neon by comparison of theoretical and experimental values of Townsend's primary ionization coefficient," *Journal of Physics B: Atomic and Molecular Physics*, vol. 2, no. 5, p. 551, 1969.
- [23]: H. Brunet and P. Vincent, "Predicted electron transport coefficients at high E/N values. I. Hydrogen," *Journal of Applied Physics*, vol. 50, no. 7, pp. 4700-4707, 1979.
- [24]: J. Wilhelm and R. Winkler, "Progress in the kinetic description of non-stationary behaviour of the electron ensemble in non-isothermal plasmas," *Le Journal de Physique Colloques*, vol. 40, no. C7, p. C7-251, 1979.
- [25]: D. McDonald, *Microwave Breakdown in Gases* (London: Oxford University Press), 1953.
- [26]: B. Opal, W. K. Peterson, and E. C. Beaty, "Measurements of secondary electron spectra produced by electron impact ionization of a number of simple gases," *The Journal of Chemical Physics*, vol. 55, no. 8, pp. 4100-4106, 1971.
- [27]: L. Scharfetter and H. K. Gummel, "Large-signal analysis of a silicon read diode oscillator," *IEEE Transactions on electron devices*, vol. 16, no. 1, pp. 64-77, 1969.
- [28]: <https://nl.lxcat.net/contributors/> consulté le 30 aout 2019.



- [29]: J. L. Pack and A. V. Phelps, "Drift velocities of slow electrons in helium, neon, argon, hydrogen, and nitrogen," *Physical Review*, vol. 121, no. 3, p. 798, 1961.
- [30]: Lowke, John James, "The drift velocity of electrons in hydrogen and nitrogen," *Australian Journal of Physics*, vol. 16, no. 1, pp. 115-135, 1963.
- [31]: H. Schlumbohm, "Messung der Driftgeschwindigkeiten von Elektronen und positiven Ionen in Gasen," *Zeitschrift für Physik*, vol. 182, no. 3, pp. 317-327, 1965.
- [32]: H. A. Blevin, and M. Z. Hasan, "The measurement of electron drift velocities," *Australian Journal of Physics*, vol. 20, no. 6, pp. 735-740, 1967.
- [33]: R. A. Snelson, "Measurements of the longitudinal diffusion coefficient and the drift velocity for electron swarms in hydrogen and nitrogen using a time-of-flight technique," *Proceedings of the Institution of Electrical Engineers*, vol. 122, no. 3, IET, 1975.
- [34]: Stern, in Proceedings of the sixth International Conference on Ionization Phenomena in Gases, Paris, 8-13 July 1963.
- [35]: J. M. Anderson, "Hall effect and electron drift velocities in the plasma of the positive column," *The Physics of Fluids*, vol. 7, no. 9, pp. 1517-1526, 1964.
- [35]: R. W. Crompton, M. T. Elford, and R. L. Jory, "The momentum transfer cross section for electrons in helium," *Australian Journal of Physics*, vol. 20, no. 4, pp. 369-400, 1967.
- [36]: P. A. Lawson, and J. Lucas, "Electron diffusion in hydrogen at high electric fields and low gas pressures: II." *British Journal of Applied Physics*, vol. 16, no. 12, p. 1813, 1965.
- [37]: R. W. Crompton, M. T. Elford and A. I. McIntosh, "Electron transport coefficients in hydrogen and deuterium," *Australian Journal of Physics*, vol. 21, no. 1, pp. 43-64, 1968.
- [38]: L.E. Virr, J. Lucas, N. Kontoleon, "1st Int. Conf. Gas Discharges," London, 1, 530, 1970.
- [39]: J. S. Townsend and V. A. Bailey, "LXXIII. Motion of electrons in helium," *The London, Edinburgh, and Dublin Philosophical Magazine and Journal of Science*, vol. 46, no. 274, pp. 657-664, 1923.
- [40]: R. W. Warren, and J. H. Parker Jr., "Ratio of the Diffusion Coefficient to the Mobility Coefficient for Electrons in He, Ar, N<sub>2</sub>, H<sub>2</sub>, D<sub>2</sub>, CO, and CO<sub>2</sub> at Low Temperatures and Low E/p," *Physical Review*, vol. 128, no. 6, p. 2661, 1962.
- [41]: S. A. J. Al-Amin and J. Lucas, "Time of flight measurements of the ratio of radial diffusion coefficient and mobility for electron swarms in helium, argon, neon and krypton at high E/N," *Journal of Physics D: Applied Physics*, vol. 20, no. 12, p. 1590, 1987.
- [42]: R. W. Crompton, J. Dutton, S. C. Haydon, *Proc. Phys. Soc. London*, vol. 69, p. 2-13, 1956.

- [43]: J. D. Rose, "Townsend ionization coefficient for hydrogen and deuterium," *Physical Review*, vol. 104, no. 2, p. 273, 1956.
- [44]: S. C. Haydon, and A. G. Robertson, "Pre-breakdown ionization in hydrogen at low pressures," *Proceedings of the Physical Society*, vol. 78, no. 1, p. 92, 1961.
- [45]: J. Fletcher, D. E. Davies, "Proceedings of the Sixth International Conference on Ionization Phenomena in Gases," Paris, 8-13 July, 1963.
- [46]: S. F. Barna Jr., D. Edelson, and K. B. McAfee Jr., "First Townsend ionization coefficients in hydrogen and deuterium," *Journal of Applied Physics*, vol. 35, no. 9, pp. 2781-2782, 1964.
- [47]: J. S. Townsend and S. P. MacCallum, "LVII. Ionization by collision in helium," *The London, Edinburgh, and Dublin Philosophical Magazine and Journal of Science*, vol. 17, no. 113, pp. 678-698, 1934.
- [48]: D. Davies, F. Kenneth, J. Llewellyn Jones, and C. G. Morgan, "Primary ionization coefficient of helium," *Proceedings of the Physical Society*, vol. 80, no. 4, p. 898, 1962.
- [49]: L. M. Chanin and G. D. Rork, "Experimental determinations of the first Townsend ionization coefficient in helium," *Physical Review*, vol. 133, no. 4A, p. 1005, 1964.
- [50]: J. C. Bowe, "Drift velocity of electrons in nitrogen, helium, neon, argon, krypton, and xenon," *Physical Review*, vol. 117, no. 6, p. 1411, 1960.
- [51]: A. G. Robertson, "The momentum transfer cross section for low energy electrons in neon," *Journal of Physics B: Atomic and Molecular Physics*, vol. 5, no. 3, p. 648, 1972.
- [52]: H. N. Kucukarpaci, H. T. Saelee, and J. Lucas, "Electron swarm parameters in helium and neon," *Journal of Physics D: Applied Physics*, vol. 14, no. 1, p. 9, 1981.
- [53]: T. Koizumi, E. Shirakawa, and I. Ogawa, "Momentum transfer cross sections for low-energy electrons in krypton and xenon from characteristic energies," *Journal of Physics B: Atomic and Molecular Physics*, vol. 19, no. 15, p. 2331, 1986.
- [54]: A. A. Kruithof, and F. M. Penning, "Determination of the Townsend Ionization coefficient  $\alpha$  for mixtures of neon and argon," *Physica*, vol. 4, no. 6, pp. 430-449, 1937.
- [55]: L. M. Chanin, and G. D. Rork, "Measurements of the first Townsend ionization coefficient in neon and hydrogen," *Physical Review*, vol. 132, no. 6, p. 2547, 1963.
- [56]: B. A. Willis and C. G. Morgan, "Primary ionization coefficient of neon," *Journal of Physics D: Applied Physics*, vol. 1, no. 9, p. 1219, 1968.

- [57]: A. G. Robertson, "Drift velocities of low energy electrons in argon at 293 and 90 K," *Australian Journal of Physics*, vol. 30, no. 1, pp. 39-50, 1977.
- [58]: H. N. Kucukarpaci and J. Lucas, "Electron swarm parameters in argon and krypton," *Journal of Physics D: Applied Physics*, vol. 14, no. 11, p. 2001, 1981.
- [59]: Y. Nakamura and M. Kurachi, "Electron transport parameters in argon and its momentum transfer cross section," *Journal of Physics D: Applied Physics*, vol. 21, no. 5, p. 718, 1988.
- [60]: J. L. Pack *et al.*, "Longitudinal electron diffusion coefficients in gases: Noble gases," *Journal of applied physics*, vol. 71, no. 11, pp. 5363-5371, 1992.
- [61]: J. S. Townsend and V. A. Bailey, "XCIV. The motion of electrons in argon and in hydrogen," *The London, Edinburgh, and Dublin Philosophical Magazine and Journal of Science*, vol. 44, no. 263, pp.1033-1052, 1922.
- [62]: C. S. Lakshminarasimha and J. Lucas, "The ratio of radial diffusion coefficient to mobility for electrons in helium, argon, air, methane and nitric oxide," *Journal of Physics D: Applied Physics*, vol. 10, no. 3, pp. 313, 1977.
- [63]: H. B. Milloy and R. W. Crompton, "The ratio of the lateral diffusion coefficient to mobility for electrons in argon at 294 K," *Australian Journal of Physics*, vol. 30, no. 1, pp. 51-60, 1977.
- [64]: Davies, D. E., and J. G. C. Milne, "First ionization coefficients in hydrogen, neon, and argon," *British Journal of Applied Physics*, vol. 10, no 7, p. 301, 1959.
- [65]: L.T. Specht, S. A. Lawton, and T. A. DeTemple, "Electron ionization and excitation coefficients for argon, krypton, and xenon in the low E/N region," *Journal of Applied Physics*, vol. 51, no. 1, pp.166-170, 1980.
- [66]: S.R. Hunter, J. G. Carter, and L. G. Christophorou, "Low-energy electron drift and scattering in krypton and xenon," *Physical Review A*, vol. 38, no. 11, p. 5539, 1988.
- [67]: Y. Nakamura "Electron swarm parameters in krypton and its momentum transfer cross sections," *Nonequilibrium Effects in Ion and Electron Transport*, Springer, Boston, MA, P. 363-365, 1990.
- [68]: A. K. Bhattacharya, "Measurement of Townsend ionization coefficients and the breakdown potentials for the Penning mixtures of Ne and Kr," *Journal of Applied Physics*, vol. 50, no. 10, pp. 6207-6210, 1979.
- [69]: L. Jacques *et al.*, "Experimental determination of the primary and secondary ionization coefficients in krypton and xenon," *Journal of Physics D: Applied Physics*, vol. 19, no. 9, p.1731, 1986.

- [70]: T. Makabe, Toshiaki, and T. Mori, "Experimental and theoretical analysis of the electron energy distribution functions in Townsend discharges in xenon," *Journal of Physics B: Atomic and Molecular Physics*, vol. 11, no. 21, p. 3785, 1978.
- [71]: T. Hashimoto and Y. Nakamura, Paper of Gas Discharge Technical Committee (Japan, Tokyo,). ED-90-61, 1990.
- [72]: S. Kobayashi *et al.*, "Ratio of transverse diffusion coefficient to mobility of electrons in high-pressure xenon," *Japanese journal of applied physics*, vol. 43, no. 8R, p. 5568, 2004.
- [73]: S. Kobayashi *et al.*, "Ratio of transverse diffusion coefficient to mobility of electrons in high-pressure xenon and xenon doped with hydrogen," *Japanese journal of applied physics*, vol. 45, no. 10R, p. 7894, 2006.

## **CHAPITRE: III**

# **MODELISATION D'UNE DECHARGE RADIOFREQUENCE A COUPLAGE CAPACITIF DANS LE MELANGE HYDROGENE/ARGON**

### **III.1. Introduction**

Plusieurs applications industrielles font intervenir des procédés par plasmas froids. Ces plasmas jouent un rôle important en micro et nanotechnologies, pour le traitement de surfaces (dépôt et gravure), la fabrication de circuits intégrés ainsi que dans le domaine de la dépollution, la stérilisation ex.... Le coût croissant des réacteurs justifie de plus en plus les investissements dans la compréhension des plasmas. Cette compréhension passe nécessairement par la simulation et la conception de codes numériques en raison de la complexité des phénomènes physicochimiques qui interviennent dans les réacteurs à plasma.

Ce chapitre est dédié à l'étude de la décharge électrique, créée dans un réacteur radiofréquence (RF) par procédé plasma à basse pression. Il est composé de trois parties : la première est consacrée à la présentation de la décharge radiofréquence. Elle permet de rappeler les notions fondamentales et les principales caractéristiques concernant les décharges capacitives, la seconde partie fait la synthèse des différents modèles mis en œuvre dans l'établissement des principales équations mathématiques et des différentes méthodes de résolution, et la troisième partie est réservée aux résultats obtenus pour un mélange Hydrogène/Argon, pour différentes valeurs du pourcentage d'Argon.

### **III.2. Les réacteurs radiofréquences**

Les réacteurs à plasmas industriels peuvent être alimentés en courant continu [1,2,3], ou en courant alternatif à basse, haute (radiofréquence) ou très haute fréquence (micro-onde) [5,6]. L'application d'une source radiofréquence produit un champ électrique et/ou électromagnétique qui permet de créer un plasma dont les ions et les radicaux sont produits par collisions des électrons avec le gaz. Les décharges amorcées de cette façon ont été étudiées pour de nombreuses géométries et différents gaz plasmagènes. On peut citer ici, les réacteurs à couplage capacitif, où une tension radiofréquence appliquée au gaz entre deux électrodes planes et parallèles donne naissance à un champ électrique agissant sur les charges dans l'espace inter-électrodes [6]. Cette configuration est proche de celle des décharges en excitation continue (DC) où une tension est appliquée entre une anode et une cathode, mais elle contient une capacité de blocage pour bloquer la composante continue du courant. La figure II.1 montre un schéma simplifié d'un réacteur radiofréquence à couplage capacitif.

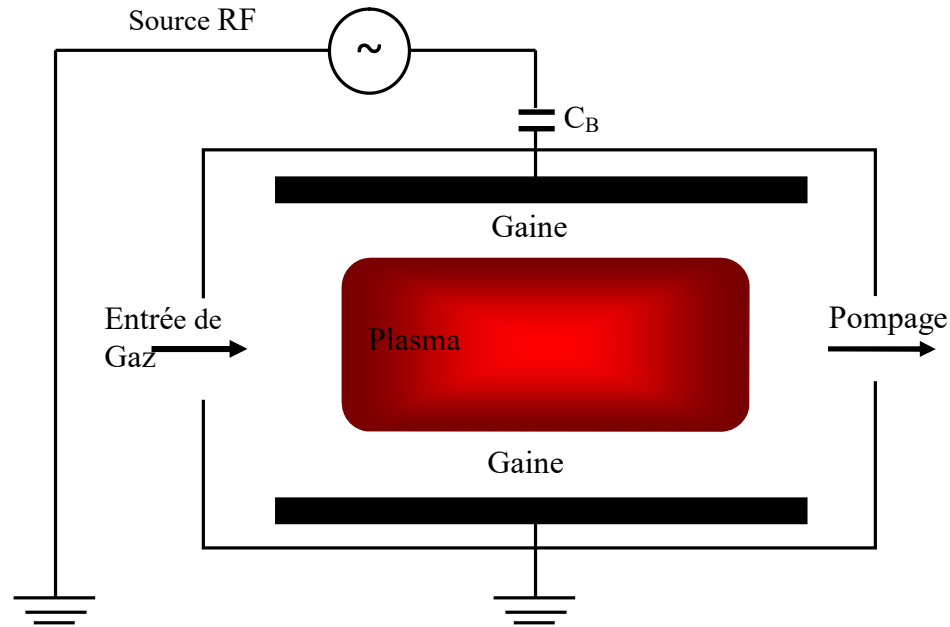


Fig. III-1 : Schéma simplifié d'un réacteur à couplage capacitif

Il s'agit de chambres aux géométries plus ou moins complexes dans lesquelles les gaz sont injectés, qui disposent d'un système de génération des plasmas et d'un ou plusieurs porte-substrat sur lesquels sont disposées les galettes de silicium brutes. Les gaz sont injectés et évacués en continu par des systèmes de pompes. Les gaz sont injectés entre deux ou plusieurs électrodes soumises à une tension radiofréquence, souvent 13.56 MHz. Le champ électrique produit accélère les électrons très mobiles. Le plasma est créé et maintenu à l'aide des collisions entre les électrons et les neutres. Les pertes électroniques aux parois du réacteur sont compensées par la création d'électrons à l'aide du bombardement ionique. Les pressions utilisées sont assez élevées ( $> 100$  mTorr) afin de créer une densité d'ions positifs suffisantes. Les substrats sont disposés sur l'une ou l'autre des électrodes. Pour d'augmenter la densité ionique sans toucher aux pressions ou aux tensions, il est possible de placer des électro-aimants autour du réacteur [7-10]. Le principe est de produire un champ magnétique dont l'effet est de piéger les électrons dans le plasma et d'augmenter ainsi le nombre de collisions avec les neutres, ce qui permet d'obtenir des densités d'ions positives plus élevées pour des tensions radiofréquences plus faibles. Un autre problème important qui a conduit au développement d'autres types de réacteur est le couplage entre le flux d'ions et l'énergie de bombardement de ces ions au substrat. En effet, en augmentant la tension aux bornes des électrodes, une densité plus importante d'ions est créée. Mais cela a aussi pour effet d'augmenter l'énergie de bombardement des ions aux parois. Toutes ces sources utilisent

des génératrices micro-ondes pour produire le plasma ainsi que des aimants pour confiner les électrons et augmenter la densité du plasma. Les substrats sont placés sur une électrode indépendante disposant de son propre générateur de tension. On parvient ainsi à découpler la génération du plasma du bombardement ionique. De plus, leur modélisation, nécessaire pour leur amélioration, est compliquée à cause du fort couplage entre les équations de Maxwell (source micro-onde) et les équations de transport [1]. En contrepartie, l'uniformité du plasma est moins bonne que dans le cas des réacteurs capacitifs. Dans les années 1990, l'uniformité restait suffisante (sur des diamètres de 20 cm) pour favoriser l'émergence de ce type de réacteur. Seulement, dans la mesure où l'industrie a introduit des substrats de diamètres de plus en plus importants, le manque d'uniformité est devenu plus problématique. Pendant quelques années, les réacteurs de type inductif ont cohabité avec les réacteurs de type capacitif et leurs améliorations. Les réacteurs radiofréquences sont largement utilisés pour le traitement de surface dans les industries de haute technologie comme la microélectronique, la fabrication d'écrans plats ou l'optoélectronique [11]. Les réacteurs à couplage capacitif et à couplage inductif doivent répondre à des exigences sans cesse accrues (fortes vitesses de gravure ou de dépôt, anisotropie, sélectivité, uniformité, etc.).

### **III.2.1. Description de décharge radiofréquence à couplage capacitif**

Une décharge à couplage capacitif se compose de deux électrodes planes et parallèles (circulaires) séparées d'une distance de quelques centimètres et placées dans une enceinte sous vide, dans laquelle est introduit un gaz ou un mélange gazeux sous faible pression [12,13]. Il peut s'agir de gaz inertes comme l'argon (Ar) ou l'hélium (He) ou autre comme ( $H_2$ ) ou un autre gaz, et cela dépend de l'application.

Pour générer la décharge, l'une des électrodes est connectée à une source radiofréquence (RF), tandis que l'autre est reliée à la masse. Une capacité de blocage sépare l'alimentation RF de l'électrode. Sur l'une des électrodes se trouve le substrat (plaque de verre ou plaquette de silicium) à traiter. Le substrat est recouvert d'une couche mince que l'on cherche à déposer ou à graver. Selon la composition du mélange gazeux utilisé, une variété de matériaux peut être déposée. Il peut s'agir d'oxydes (silice ou alumine) ou de carbures, de conducteurs comme le cuivre ou l'aluminium ou bien de semi-conducteurs tel le silicium ou le germanium [14]. Pour



graver un matériau, il faut former des produits volatils par réaction des atomes de la surface avec certains réactifs présents dans le plasma.

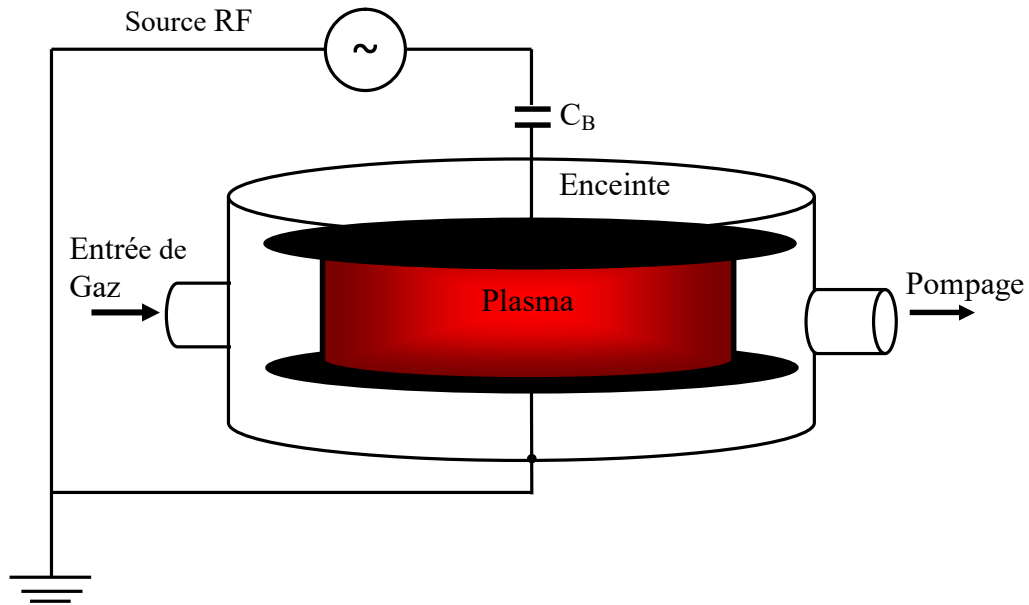


Fig. III-2 : Schéma d'un réacteur à couplage capacitif utilisé pour le traitement de surfaces

### III.2.2.Principe de fonctionnement

Lorsqu'on applique entre les deux électrodes, du réacteur de la figure (III.2), une tension radiofréquence  $V(t) = V_0 \sin(\omega t)$  ( $V_0$  est de l'ordre de quelques centaines à quelques milliers de volts) [15,16], on obtient un régime de fonctionnement qui dépend de la pulsation  $\omega$ . Lorsque l'on fait varier celle-ci à partir de zéro, on obtient d'abord un comportement d'une décharge continue (DC) inversée à chaque demi-période. Le maintien de la décharge est assuré par le processus d'électrons secondaires. Pour des fréquences plus élevées ( $f \sim \text{MHz}$ ), le système change ensuite progressivement vers une situation dans laquelle l'émission secondaire n'est pas nécessaire à l'amorçage de la décharge. Dans ce cas, la majorité des électrons oscille et maintient la décharge en gagnant, de façon cumulative entre les collisions successives sur les neutres, l'énergie cinétique nécessaire à l'ionisation. Le champ électrique est celui qui assure l'équilibre entre l'ionisation et les pertes par recombinaison en volume ou sur les parois limitant la décharge [15,16]. Puisque la tension radiofréquence est constante dans tout le circuit, il est convenable de la saisir comme paramètre de contrôle, et les autres paramètres macroscopiques ajustables qui assurent le fonctionnement des décharges radiofréquences sont :

- la fréquence d'excitation ;
- la composition du mélange de gaz ;
- la pression (ou la densité du gaz  $N$ ) du réacteur ;
- le flux gazeux ;
- la géométrie et la dimension du réacteur ;
- la nature des électrodes et la distance inter-électrodes ;
- le chauffage ou le refroidissement des électrodes (du substrat).

### III.2.3. Les décharges asymétriques: la tension d'auto-polarisation

Dans le cas général, les décharges radiofréquences couplées capacitivement présentent des configurations asymétriques [17,18]. En fonction des dimensions des électrodes, il est possible d'augmenter l'énergie de bombardement des ions traversant les gaines de champ électrique, et par conséquent d'améliorer la pulvérisation du matériau.

L'aire de la surface de la cathode  $C$  polarisée en RF est minimisée par rapport à celle de l'anode  $A$  qui est reliée à la masse. L'électrode portée au potentiel RF est séparée du générateur par une capacité de blocage de sorte qu'aucun courant de conduction ne s'écoule de l'électrode vers le plasma et vice versa [7]. La tension appliquée à la cathode peut être décrite par une sinusoïde  $V_{rf}(t) = V_0 \sin(\omega_{rf}t)$ , avec :  $\omega_{rf} = 2\pi f_{rf}$ .

Néanmoins, le potentiel de la cathode  $V_C$  ne peut se résumer à la seule tension appliquée  $V_{rf}$ . Dans le cas d'une décharge capacitive asymétrique, une composante continue  $V_{DC}$ , appelée tension d'auto-polarisation, s'ajoute à la composante  $V_{rf}$  oscillante à  $f_{rf}$  et la décale vers des valeurs négatives. L'équation suivante présente l'expression du potentiel  $V_C$  [19]:

$$V_C(t) = V_{rf}(t) + V_{DC} = V_0 \sin(\omega_{rf}t) + V_{DC} \quad (\text{III-1})$$

La tension d'auto-polarisation apparaît uniquement lorsque les surfaces des électrodes sont différentes elle est positive lorsque la surface de l'électrode alimentée est supérieure à celle reliée à la masse. Elle est négative pour la situation inverse et nulle lorsque les électrodes ont la même surface [19]. On a alors le choix entre placer le substrat à traiter sur l'électrode RF ou sur l'électrode reliée à la masse, suivant la manière dont on veut attirer les ions énergétiques (bombardement ionique).

Dans les bâtis de gravure ionique réactive, le substrat est placé sur l'électrode RF et dans les bâtis de dépôt par pulvérisation en RF, le substrat est sur l'électrode reliée à la masse, cependant, la cible est sur l'électrode RF où l'énergie de bombardement ionique est maximale. Dans ces deux cas, la pression est d'environ 7.5 mTorr pour minimiser les collisions des ions dans les gaines. En dépôt chimique en phase vapeur ou en gravure plasma à plus haute pression (75 à 750 mTorr), le substrat est en général placé sur l'électrode portée à la masse [20].

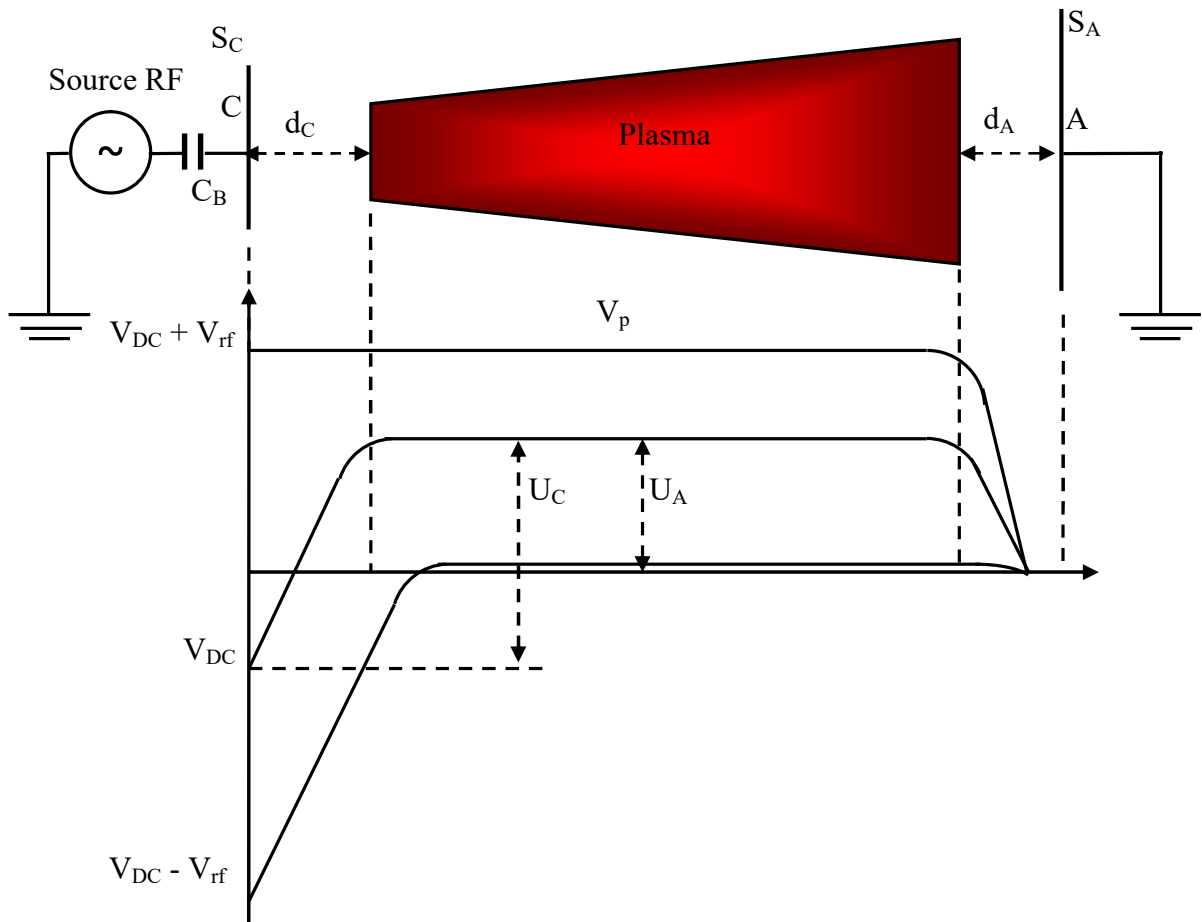


Fig. III-3: Oscillations, dans le temps, du potentiel entre les deux électrodes, pour une configuration asymétrique, d'une décharge RF à couplage capacitif.

Compte tenu de la grande différence de mobilité des deux types de particules (électrons et ions), le courant électronique traversant la cathode au cours d'une période RF sera plus important que le courant ionique. Cette différence de courant se traduit par l'accumulation de charges électroniques sur l'armature de la capacité de blocage. Puisque aucune charge ne peut s'écouler dans la capacité, la surface de l'électrode sera portée à un potentiel moyen négatif par rapport au plasma.

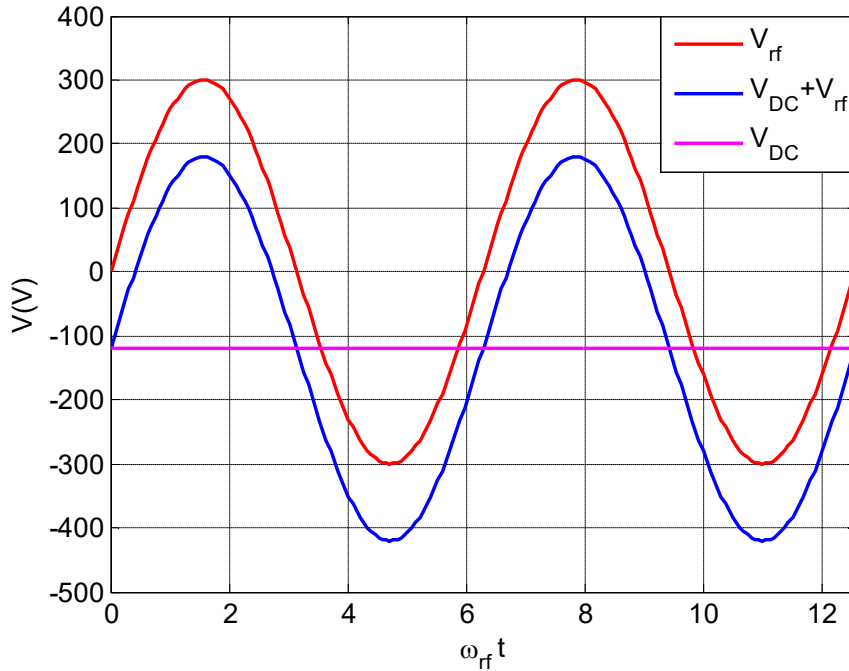


Fig. III-4: Tension radiofréquence  $V_{rf}$  et tension de la cathode  $V_C$

Lorsque la pulsation  $\omega_{rf}$  est grande devant  $\omega_{pi}$ , les gaines (cathodique et anodique) ont un comportement essentiellement capacitif ( $RC \rightarrow \infty$ ). Leurs impédances sont alors assimilables à celle d'un condensateur plan dont les expressions sont données par :

$$C_A = \frac{\epsilon_0 A_A}{d_A} \quad (III-2)$$

$$C_C = \frac{\epsilon_0 A_C}{d_C}$$

Où  $C_A$ ,  $C_C$  : capacité de la gaine respectivement anodique et cathodique,  $A_A$ ,  $A_C$  : l'aire respectivement de l'anode et de la cathode,  $d_A$  et  $d_C$  : L'épaisseur moyenne de la gaine respectivement anodique et cathodique. Les tensions moyennes aux bornes des gaines anodique ( $\bar{U}_A$ ) et cathodique ( $\bar{U}_C$ ) valent alors respectivement :

$$\bar{U}_A = V_A - V_P = \frac{I}{C_A \omega_{rf}} \quad (III-3)$$

$$\bar{U}_C = V_C - V_P = \frac{I}{C_C \omega_{rf}}$$

où  $I$  est le courant et  $V_P$  désigne le potentiel plasma moyen. Ce potentiel est toujours au-dessus du potentiel de l'électrode la plus positive. La tension d'auto-polarisation  $V_{DC}$  peut donc s'exprimer de la manière suivante :

$$V_{DC} = \left( 1 - \left( \frac{A_A}{A_C} \right)^n \right) \times V_p \quad (\text{III-4})$$

$n$  : dépendant de la pression, sa valeur est comprise entre 1.3 et 4 [20,21]. La tension d'auto-polarisation varie avec de nombreux paramètres comme la pression, la fréquence d'excitation et la puissance radiofréquence.

### III.2.4. Circuits électriques équivalents

La décharge peut être décrite sous la forme d'un circuit électrique dont les éléments dépendent de paramètres tels que la pulsation  $\omega$ , la surface des électrodes, la densité et la taille du plasma. Le modèle le plus simple a été développé par Godyaket Lieberman [21,22] dans le cas d'une gaine homogène où  $n_i = n$  et  $n_e = 0$ .

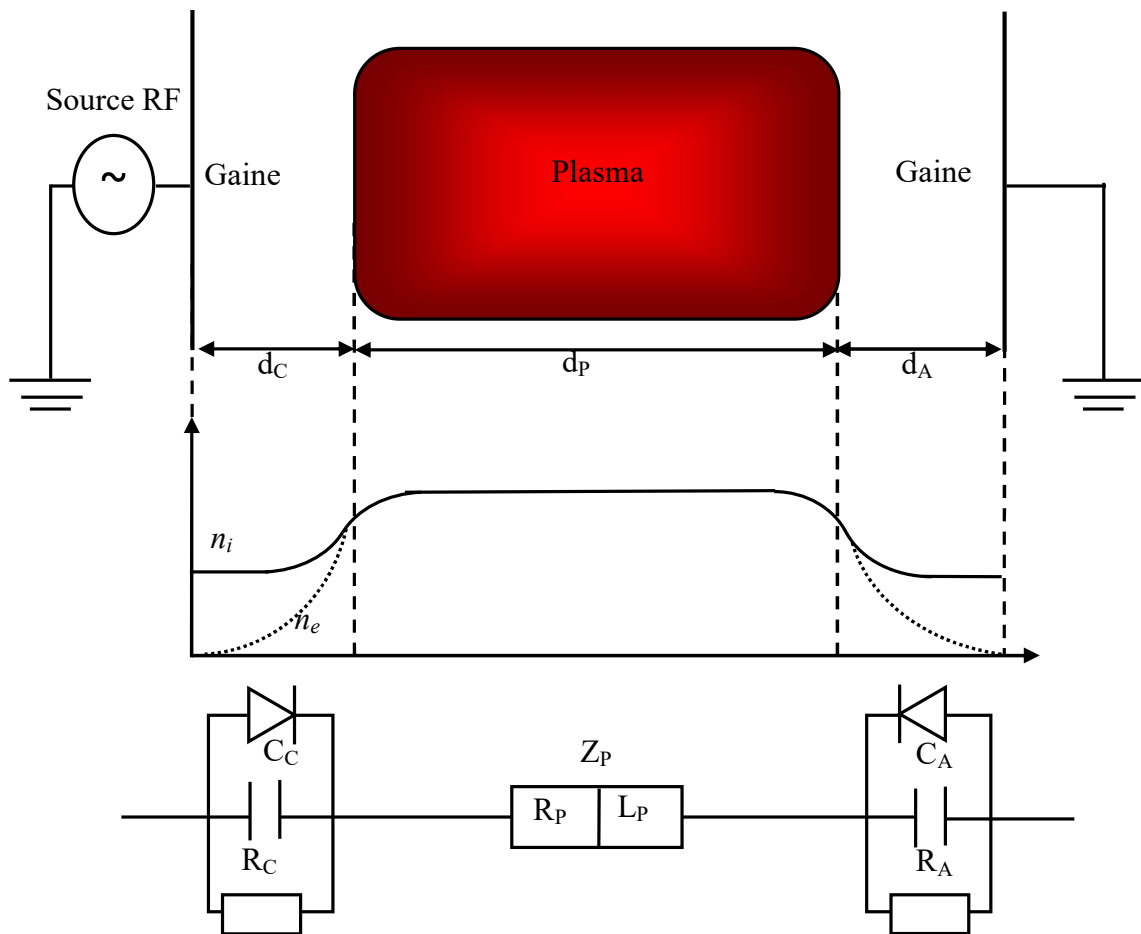


Fig. III-5: modèle d'une décharge capacitive symétrique avec son circuit électrique équivalent

Dans les décharges radiofréquences symétriques capacitives on distinguera trois zones entre deux électrodes coplanaires; une zone centrale plasma(colonne positive) d'épaisseur  $d_p$  où règne une quasi neutralité électrique et une densité plasma  $n$  et deux autres zones près des électrodes (gaines) de charge d'espace positive. Ces gaines sont caractérisées par des épaisseurs  $d_C$  pour la cathode, et  $d_A$  pour l'anode, où :  $d = d_p(t) + d_C(t) + d_A(t)$  représentant l'espace inter-électrodes. Pour le schéma électrique équivalent de la décharge à couplage capacitif, on attribue au plasma une impédance  $Z_p$  à caractère résistif et inductif (équation III.5).

$$Y_p = \frac{1}{Z_p} = j\omega_{rf}C_p + \frac{1}{R_p + jL_p\omega_{rf}} = j\omega_{rf}C_p + \frac{1}{\frac{d_p m_e v_m}{n_e e^2 A_p} \left(1 + j \frac{\omega_{rf}}{v_m}\right)} \quad (\text{III-5})$$

où :  $v_m$  est la fréquence de collision électrons-neutres,  $A_p$  est l'aire de la section plasma perpendiculairement à l'axe inter-électrodes,  $L_p$  est l'inductance du plasma,  $R_p$  la résistance du plasma et  $Y_p$  l'admittance du plasma. L'impédance caractéristique  $Z_g$  d'une gaine ( $g = C, A$ ) peut être représentée par une capacité et une résistance en parallèle, avec une diode empêchant le potentiel plasma de descendre au-dessous du potentiel de l'électrode. Pour une pulsation  $\omega$  sont représenté par :

$$\begin{aligned} C_g &= \frac{\varepsilon_0 A_g}{d_g} \\ R_g &= \frac{V_g}{A_g J_i} \\ Z_g &= \frac{R_g}{1 + j\omega C_g} \end{aligned} \quad (\text{III-6})$$

où :  $d_g$  épaisseurs de gaine moyenne,  $A_g$  aires "effectives" des électrodes,  $R_g$  se déduisent des valeurs moyennes du potentiel  $V_g$ , de la densité moyenne de courant de conduction d'ions  $J_i$  à travers la gaine. Les paramètres ( $R_g$ ,  $C_g$  et  $Z_g$ ) de circuit électrique équivalent peuvent être déterminés par l'utilisant une méthode d'identification [23], et le rapport des courants de déplacement  $I_{depl}$  et de conduction  $I_{cond}$  pour des gaines non collisionnelles est exprimé par la loi de Child-Langmuir et le critère de Bhom [21]:

$$\frac{I_{depl}}{I_{cond}} = R_g C_g \omega_{rf} = \frac{V_g \varepsilon_0 \omega_{rf}}{J_i d_g} \approx \frac{1}{\sqrt{2}} \left( \frac{q v_g}{k T_e} \right)^{\frac{1}{4}} \left( \frac{\omega_{rf}}{\omega_{pi}} \right) \quad (\text{III-7})$$

Le courant circulant dans le plasma est donc un courant de conduction. En ce qui concerne la gaine de charge d'espace, la nature du courant dépend de la fréquence d'excitation:

- ✓ A basse fréquence  $\omega \ll \omega_{pi}$ , le courant de déplacement dans les gaines est faible devant le courant de conduction, dans ce cas la gaine est dite résistive ( $R_g C_g \ll 1$ ).
- ✓ A haute fréquence,  $\omega \gg \omega_{pi}$ , le courant dominant est le courant de déplacement, donc la gaine est essentiellement capacitive ( $R_g C_g \gg 1$ )

### III.2.5. Principaux mécanismes d'amorçage et d'entretien d'une décharge capacitive

On appelle l'entretien d'une décharge la compensation des pertes de particules chargées, électrons et ions, par des mécanismes de création par ionisation. La recombinaison électron-ion et la diffusion ambipolaire aux parois ou encore le phénomène d'attachement dans les gaz électronégatifs sont les principales origines des pertes de particules dans un plasma. Lorsque la création de particules chargées par ionisation par impact électronique compense les pertes, le plasma est dit auto-entretenu [24].

La production de nouvelles particules chargées a lieu si l'énergie cinétique de l'électron est supérieure au potentiel d'ionisation de l'atome pour que le transfert d'énergie de l'électron à l'atome permette l'ionisation. Dans le cas contraire, la collision pourra se traduire simplement par une excitation de l'atome. D'une manière générale, l'énergie cinétique de l'électron peut devenir insuffisante pour assurer de nouveaux processus d'ionisation. Il est donc nécessaire de fournir en permanence de l'énergie aux électrons du plasma. Dans une décharge RF à couplage capacitif, les électrons acquièrent leur énergie par des mécanismes de chauffage qui peuvent être collisionnels ou non-collisionnels [21,24].

Le chauffage ohmique ou collisionnel a lieu lorsque les électrons échangent de la quantité de mouvement par collision avec la population des neutres dans le plasma central. Le champ électrique dans le cœur du plasma est assez faible en comparaison avec le champ dans les gaines. Ce faible champ est suffisant pour "chauffer" les électrons, qui assurent une ionisation supplémentaire et compensent les pertes. Dans ces conditions le régime de colonne positive est similaire à un chauffage par effet Joule. La densité de puissance moyennée dans le temps, responsable du chauffage des électrons dans le plasma, s'écrit [21]:

$$P_{\Omega} = \frac{J^2 R_e}{2 \sigma_p} \quad (\text{III-8})$$

où  $J$  est la densité de courant et  $\sigma_p$  est la conductivité du plasma.

Le chauffage non collisionnel est un phénomène associé aux gaines, pour des pressions beaucoup plus faible, le libre parcours électronique étant supérieur à la longueur de la gaine. Si l'électron possède une vitesse initiale  $V_0$  qui se dirige vers la gaine et que celle-ci se dilate avec une vitesse  $V_g$ , l'électron réfléchi est accéléré par le champ électrique qui règne dans la gaine en expansion vers le plasma avec une vitesse  $V_0 + 2V_g$ . Ce régime est aussi qualifié de chauffage stochastique (ou mécanisme de collision électron-gaine) parce que les électrons peuvent gagner mais aussi perdre de l'énergie en fonction de leur vitesse par rapport à la gaine [21].

A pression plus grande, on parle de l'effet de surf ou waveriding [24, 25]. Les électrons qui parviennent du plasma vers la lisière de la gaine voient celle-ci se déplacer comme une vague. Certains d'entre eux vont être portés par cette vague et être renvoyés dans le plasma, par la gaine est de ce fait ils vont acquérir de l'énergie cinétique prise à la vague. Ils sont alors des agents d'ionisation très efficaces. L'effet de surf et le chauffage stochastique, sont liés au mouvement oscillatoire des gaines. L'ionisation qui en résulte, dans les deux cas, est localisée au voisinage de l'interface gaine plasma. La puissance totale absorbée par les électrons dans une décharge radiofréquence capacitive est donc la somme de deux puissances provenant de deux processus l'un collisionnel et l'autre non collisionnel, la puissance totale est donnée par :

$$P_{tot} = P_{stok} + P_{\Omega} \quad (\text{III-9})$$

### III.2.6. Décharge capacitive à double fréquence

Il y a plusieurs configurations, les fréquences peuvent être appliquées sur une seule électrode ou sur les deux électrodes séparément. Ces sources nécessitent deux générateurs de puissance RF et deux circuits de raccordement [26,27].

Ces décharges possèdent la particularité d'offrir a priori un contrôle indépendant entre le courant  $J_i$  et l'énergie  $E_i$  des ions. Le plasma sera excité par un signal de la forme :

$$A(t) = A_{bf} g(\omega_{bf} t) + A_{hf} g(\omega_{hf} t) \quad (\text{III-10})$$



où  $A(t)$  peut être soit la tension  $v$ , soit le courant  $I$ .  $g$  est une fonction trigonométrique du type cosinus ou sinus.  $bf$  et  $hf$  sont les indices désignant respectivement la basse et la haute fréquences  $\omega_{hf}$  et  $\omega_{bf}$  sont les pulsations d'excitation haute et basse fréquences.  $\omega_{hf}$  est une pulsation harmonique de la pulsation  $\omega_{bf}$  et leur rapport est typiquement supérieur à 10 [28].

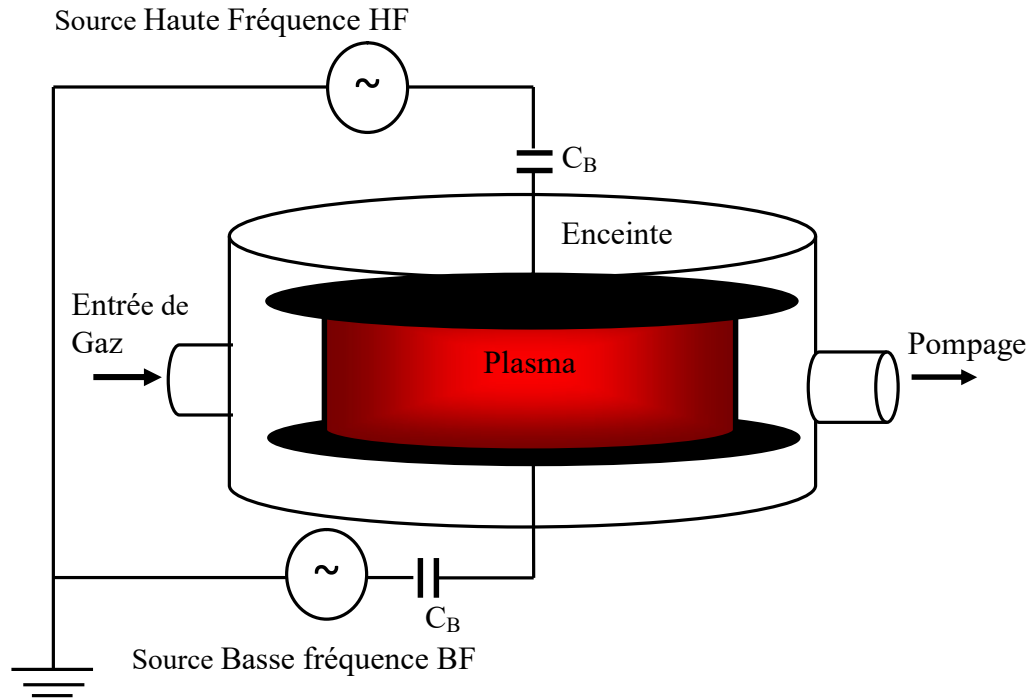


Fig.III-6: Excitation par double fréquence du plasma à couplage capacitif

L'utilisation d'une haute fréquence  $\omega_{hf}$  permettrait le contrôle de la densité électronique  $n_e$  du plasma et donc du courant ionique  $J_i$ , tandis qu'une basse fréquence  $\omega_{bf}$  permettrait de contrôler l'énergie des ions  $E_i$ . La condition d'indépendance entre l'énergie et le flux des ions se traduit au niveau des caractéristiques des sources par l'inégalité [28]:

$$\frac{\omega_{hf}^2}{\omega_{bf}^2} = \frac{V_{hf}}{V_{bf}} \gg 1 \quad (\text{III-11})$$

Une alternative à l'utilisation des sources double fréquence est l'augmentation de la fréquence d'excitation. En effet, plusieurs études [29,30] ont montré que l'utilisation des très hautes fréquences (VHF) (Fréquence supérieures à la fréquence habituelle de 13,56 MHz jusqu'à environ 120MHz), permettait d'obtenir des sources haute densité avec des ions de faible énergie, augmentant ainsi la vitesse des procédés sans endommager les substrats.

### **III.2.7.Limitations des décharges RF capacitives (Les réacteurs plasma à haute densité)**

L'inconvénient majeur du réacteur à couplage capacitif est que les substrats à traiter et les électrodes métalliques sont plongés dans le même environnement, qui est aussi le lieu de création des espèces énergétiques. En effet, le bombardement des électrodes par des ions très énergétiques et des neutres réactifs mène généralement à une érosion considérable de la surface. Les produits de réaction se retrouvent ainsi dans le plasma, ce qui représente une source importante de pollution.

Dans les décharges radiofréquences à couplage capacitive, les densités de particules chargées obtenues sont souvent faibles ( $10^8$  à  $10^{10}$   $\text{cm}^{-3}$ ), ce qui conduit à de faibles degrés de dissociation du gaz plasmagène. En conséquence, le coefficient d'ionisation est faible ce qui conduit à un flux d'ions faible. On peut toujours augmenter la puissance incidente pour augmenter le flux d'ions mais l'énergie des ions augmente également, ce qui peut provoquer des dégâts sur les échantillons.

Les limitations des plasmas radiofréquences à couplage capacitif ont favorisé de nouvelles générations de plasmas. Les diverses sources, qui ont été proposées, sont caractérisées par une pression de travail très basse et une densité de charge élevée, par rapport aux plasmas RF capacitifs. Elles sont appelées sources de plasma de haute densité HDP (High Density Plasma). Les différences fondamentales avec les plasmas à découplage capacitif CCP sont :

- ✓ Le plasma est entretenu par des ondes électromagnétiques radiofréquences ou microondes.
- ✓ Le couplage de ces ondes avec le plasma définit le type de réacteur soit les réacteurs RCE (résonance électronique cyclotronique), les réacteurs couplage inductif [31].
- ✓ Dans les sources HDP, Le couplage de l'énergie au plasma est plus efficace, il est effectué à plus basse pression pour augmenter le taux d'ionisation.
- ✓ Le substrat est éloigné de la zone de création du plasma pour limiter l'énergie des ions, et une polarisation peut être appliquée au substrat indépendamment de la polarisation de la source, pour contrôler l'énergie des ions séparément de leur flux.
- ✓ Possibilité d'augmenter le courant ionique sans augmenter l'énergie des ions pour pouvoir diminuer la température ou améliorer la qualité.

### **III.3.Modélisation des décharges radiofréquences**

La croissance incessante des applications des plasmas radiofréquences exige l'amélioration d'outils analytiques utilisés pour optimiser et interpréter ces processus. Pour cela, la modélisation numérique des plasmas de décharge électrique est considérée comme un outil très complémentaire à l'analyse expérimentale, pour d'optimisation de conception du réacteur plasma. Par conséquence, l'intérêt de modéliser un tel procédé réside essentiellement dans:

- ✓ Amélioration de la description et la compréhension des phénomènes physico-chimiques dans le milieu plasma pendant la phase de décharge, lorsque on applique les conditions aux limites pour les espèces considérées dans le modèle.
- ✓ Connaissance de l'effet des paramètres tel que la fréquence d'excitation, la puissance appliquée, la composition, le débit du gaz, la pression et la géométrie du réacteur sur les propriétés de la décharge RF.
- ✓ Le choix d'un outil de simulation pour la résolution numérique des équations du modèle, qui permet de produire une plateforme dont la flexibilité facilitera les évolutions futures du modèle.

Les principaux modèles destinés à simuler un plasma doivent être utilisés pour étudier le transport des particules chargées, la distribution spatiale des radicaux, le taux de dépôt, les épaisseurs des gaines, la dynamique de la gaine. On distingue, quatre types :

#### **III.3.1.Modèle de circuit électrique équivalent**

Afin de faire une simulation impérative des décharges en mode radiofréquence par la résolution d'un système d'équations non linéaire (équations de transport couplées avec les équations de Maxwell) nous pouvons résoudre le problème en utilisant une description en termes de circuit électrique équivalent [32]. Dans ces modèles, les différentes régions de la décharge (gaines et zone plasma) peuvent être représentés par des circuits électriques simples. La gaine, est représentée par une résistance, un condensateur et une diode en parallèle. Les valeurs des composants peuvent être estimées soit théoriquement ou mesurées expérimentalement ainsi que les propriétés utiles de la décharge. Cette approche est un peu basique et ne donne pas une perception détaillée des phénomènes complexes.

### III.3.2. Modèles cinétiques/ particulières / statiques

Le modèle cinétique est l'approche la plus précise est difficile à mettre en œuvre dans le cas des géométries multidimensionnelles. Elle permet de donner des solutions qui dépendent du temps et de l'espace par l'intégration directe de l'équation de Boltzmann :

$$\frac{\partial f_k}{\partial t} + \mathbf{v}_k \frac{\partial f_k}{\partial \mathbf{r}} + \frac{\mathbf{F}_k}{m_k} \frac{\partial f_k}{\partial \mathbf{v}_k} = \left( \frac{\partial f_k}{\partial t} \right)_{collisions} \quad (\text{III-12})$$

Il s'agit, dans ces modèles particuliers (Particule In Cell) [7-10] de faire évoluer les particules de type  $k$  (électrons et ions) sous l'action de champs électrique et/ou magnétique et déterminer leurs trajectoires dans l'espace des phases. Cela se fait en intégrant les équations de mouvement pour chaque particule de masse  $m_k$ , de charge  $q_k$  et de vitesse  $\mathbf{v}_k$ , sous l'effet des champs électrique  $\mathbf{E}$  et magnétique  $\mathbf{B}$  et en absence de collisions.

$$\mathbf{F}_k = m_k \frac{\partial \mathbf{v}_k}{\partial t} = q_k (\mathbf{E} + \mathbf{v}_k \times \mathbf{B}) \quad (\text{III-13})$$

En présence de collisions, on doit compléter la méthode PIC avec la méthode Monte-Carlo (MC). Le principe de la méthode est basé sur les probabilités, où les collisions sont des nombres aléatoires compris entre 0 et 1. La méthode (PIC-MCC) permet d'obtenir les grandeurs macroscopiques caractérisant le système étudié et d'établir un bilan statistique des particules, par opposition aux modèles fluides qui traitent le plasma comme un fluide homogène en le caractérisant par des grandeurs moyennes [1].

### III.3.3. Modèles hybrides

Les modèles hybrides les plus répandus sont ceux où l'on associe un modèle fluide à un code Monte Carlo. Ces modèles adoptent la technique MC pour modéliser les électrons hautement énergétiques, capables d'ioniser et d'exciter les particules lourdes et l'approche fluide pour gérer les électrons de faible énergie du plasma [3,33,34,35]. La méthode de type Monte Carlo peut aussi être utilisée pour obtenir les coefficients de transport des espèces du plasma qui sont ensuite employées dans un modèle fluide. On intégrant les deux méthodes, les modèles hybrides peuvent décrire des effets qui ne sont pas présent en compte par les modèles fluides et même d'acquérir des résultats similaires à ceux des modèles PIC mais le temps de calcul peut être d'un ordre de grandeur inférieur, ce qui rend ces modèles très intéressants [34].

### III.3.4. Modèles fluides

Le mouvement des espèces chargées dans un plasma faiblement ionisé doit être déterminé par l'utilisation de l'équation de Boltzmann ou le modèle particulaire. On peut également caractériser le plasma de décharge à partir des grandeurs moyennes. Le modèle de décharge où la description du transport des diverses espèces est décrit en termes de quantités hydrodynamiques moyennes est nommé modèle fluide [36]. Ces modèles résolvent les trois premiers moments de l'équation de Boltzmann dans l'espace et le temps. Ils décrivent le plasma en fonction des quantités macroscopiques tel que la densité, la vitesse moyenne et l'énergie moyenne,

L'équation d'équilibre de la densité  $n$  de particules comprend :

✓ Le premier moment de l'équation de Boltzmann qui représente l'équation de continuité qui décrit le transport des particules de densité  $n_k$ , de flux  $\Gamma_k = n_k \mathbf{v}_k$  (sous l'influence du champ électrique et des collisions),  $\mathbf{v}$  la vitesse moyenne et  $S$  le terme source (dû aux diverses réactions dans lesquelles les espèces sont produites ou perdues).

$$\frac{\partial n_k}{\partial t} + \nabla \cdot \Gamma_k = S_k \quad (\text{III-14})$$

✓ Le deuxième moment de l'équation de Boltzmann qui représente l'équation de transfert de la quantité du mouvement, est donné par :

$$\Gamma_k = \pm n_k \mu_k \mathbf{E} - D \nabla n_k \text{ avec } \mu_k = \frac{q_k}{m v_k} \text{ et } D_k = \frac{k_B T_k}{m v_k} \quad (\text{III-15})$$

$\pm$  indique le signe de la charge  $q_k$ ,  $\mu_k$ : représente la mobilité, et  $D_k$  le coefficient de diffusion. Ces deux coefficients ne sont pas indépendants mais reliés par la relation d'Einstein :

$$\frac{D_k}{\mu_k} = \frac{K_B T_k}{q_k} \quad (\text{III-16})$$

Le flux des particules se décompose en deux termes : l'un est lié au champ électrique  $E$ , il traduit la dérive des espèces soumises à un champ électrique si elles sont chargées ; l'autre est un terme de diffusion, il provient du gradient de densité. Le flux prend ainsi la forme d'une équation de dérive diffusion [33].

✓ Le troisième moment de l'équation de Boltzmann qui représente l'équation de transfert d'énergie des électrons est donné par :

$$\frac{\partial(n_\varepsilon)}{\partial t} + \nabla \cdot \Gamma_\varepsilon + \Gamma_\varepsilon \cdot \mathbf{E} = S_\varepsilon \quad \text{avec} \quad \Gamma_\varepsilon = n_\varepsilon \mu_\varepsilon \mathbf{E} - D_\varepsilon \nabla n_\varepsilon \quad (\text{III-17})$$

L'évolution de la densité d'énergie  $n_\varepsilon = n_e \varepsilon$  est due au transport de l'énergie dans le plasma, au chauffage par le transport de particules mobiles dans un champ électrique et de la variation de l'énergie d'une particule par collision avec une autre particule dans les réactions ( $S_\varepsilon$ ).

Le problème se ramène donc à résoudre simultanément les équations de la mécanique des fluides adaptées aux plasmas et les équations de Maxwell. Ce système d'équations est couplé avec l'équation de Poisson qui décrit l'apparition d'un champ sous l'effet de la séparation de charges positives et négatives. Ce potentiel vérifie l'équation :

$$\Delta V = -\frac{|e|}{\mu_0} \left( \sum_p n_p - \sum_n n_n - n_e \right) \quad (\text{III-18})$$

$$\mathbf{E} = -\nabla V$$

Avec  $n_p$  est la densité des ions positifs,  $n_n$  est la densité des ions négatifs, et  $n_e$  est la densité des électrons.

La nature du champ électrique dans les décharges continues dans l'équation du flux est constant, mais dans les décharges RF le champ électrique est variable dans le temps il est introduit dans l'équation du flux sous la forme  $E(t) = E_0 \sin(\omega_r t)$ .

### III.3.4.1. Mode de résolution et outils de simulation (Code plasma)

De plus en plus d'équations aux dérivées partielles interviennent dans la simulation de problèmes physiques très variés. Ces systèmes d'équations différentielles peuvent être résolus par plusieurs méthodes numériques telles que la méthode des éléments finis, la méthode des volumes finis et la méthode des différences finies. Il s'agit de discrétiser le domaine de calcul et de faire des approximations pour résoudre ces équations aux dérivées partielles. Le plasma est un milieu complexe dans lequel de nombreux phénomènes se présentent, sa compréhension nécessite la prise en compte d'un grand nombre de paramètres. Le tableau (III-1) représente les principales caractéristiques de certains codes utilisés pour la simulation des plasmas :

Tableau III-1 : Tableau récapitulatif sur les codes plasma [37]

		<b>COMSOL</b>	<b>ACE+</b>	<b>PLASIMO</b>	<b>PLASMATOR</b>
<b>Géométrie et méthode de résolution</b>	Dimension	1D, 2D, 3D	1D, 2D, 3D	2D	2D
	Résolution	Éléments finis	Volumes finis	Volumes finis	Différences finis
<b>Caractéristiques</b>	Temps	Régime transitoire et régime stationnaire			
	Fréquences	DC, RF, $\mu$ O	DC, RF, $\mu$ O	DC, RF, $\mu$ O	DC, RF, $\mu$ O
	Thermique (T) Hors équilibre (HE)	T, HE	T, HE	T, HE	HE
	Champ magnétique	OUI	OUI	OUI	OUI
	Écoulement	OUI	OUI	OUI	NON
	Rayonnement	OUI	OUI	OUI	NON
	Turbulence	OUI	OUI	OUI	NON
<b>Applications</b>		Semi-conducteurs, Biomédicales, ICP	Contrôle dépollution, traitement des métaux, ICP	Fibre optique, Lampes, ICP	ICP

#### III.4. Résultats Obtenus Dans un mélange Hydrogène/Argon

Il existe plusieurs approches de modélisation utilisées pour simuler les décharges électriques radiofréquences. Parmi ces modèles, le modèle fluide qui permet de résoudre l'équation de

Poisson et les trois premiers moments de l'équation de Boltzmann pour obtenir la densité, le flux et l'énergie de chaque espèce.

Plusieurs études numériques et expérimentales utilisent des gaz monoatomiques, tels que l'argon (Ar) et l'hélium (He), grâce à leurs réactions simples par rapport aux gaz réactifs tels que O<sub>2</sub>, CH<sub>4</sub> [6-10]. Les résultats suivants sont obtenus pour une décharge radiofréquence dans un mélange Hydrogène/Argon à une pression totale de 1 Torr, un espace inter-électrode de 3cm, une tension radiofréquence de 300V sous une fréquence de 13.56 MHz, et une température de 300 °K.

Les réactions considérées sont les suivantes:

Argon pur : (les sections efficaces sont celles illustrées dans le chapitre 2)

- ✓ Élastique :  $e + \text{Ar} \rightarrow e + \text{Ar}$
- ✓ Excitation :  $e + \text{Ar} \rightarrow e + \text{Ar}^*$
- ✓ Ionisation :  $e + \text{Ar} \rightarrow 2e + \text{Ar}^+$
- ✓ Super-élastique :  $e + \text{Ar}^* \rightarrow e + \text{Ar}$
- ✓ Ionisation :  $e + \text{Ar}^* \rightarrow 2e + \text{Ar}^+$
- ✓ Ionisation de penning :  $\text{Ar}^* + \text{Ar}^* \rightarrow e + \text{Ar} + \text{Ar}^+$
- ✓ Extinction métastable:  $\text{Ar}^* + \text{Ar} \rightarrow \text{Ar} + \text{Ar}$

Hydrogène pur: (les sections efficaces sont celles illustrées dans le chapitre 2)

- ✓ Élastique :  $e + \text{H}_2 \rightarrow e + \text{H}_2$
- ✓ Rotation:  $e + \text{H}_2 \rightarrow e + \text{H}_2(j_{0-2})$
- ✓ Rotation:  $e + \text{H}_2 \rightarrow e + \text{H}_2(j_{1-3})$
- ✓ Vibration:  $e + \text{H}_2 \rightarrow e + \text{H}_2(v_1)$
- ✓ Vibration:  $e + \text{H}_2 \rightarrow e + \text{H}_2(v_2)$
- ✓ Vibration:  $e + \text{H}_2 \rightarrow e + \text{H}_2(v_3)$
- ✓ Excitation:  $e + \text{H}_2 \rightarrow e + \text{H}_2^* (\textit{singlet})$
- ✓ Excitation:  $e + \text{H}_2 \rightarrow e + \text{H}_2^* (\textit{triplet}) \rightarrow e + \text{H} + \text{H}$
- ✓ Dissociation:  $e + \text{H}_2 \rightarrow e + \text{H} + \text{H} (n=2)$
- ✓ Dissociation:  $e + \text{H}_2 \rightarrow e + \text{H} + \text{H} (n=3)$



- ✓ Ionisation :  $e + H_2 \rightarrow e + e + H_2^+$
- ✓ Ionisation :  $e + H_2 \rightarrow 2e + H + H^+$
- ✓ Transfer de proton :  $H_2^+ + H_2 \rightarrow H_3^+ + H$
- ✓ Irréversible :  $H_2^+ + H \rightarrow H^+ + H_2$

### Mélange Hydrogène/Argon

- ✓ Transfer de l'atome H:  $Ar^+ + H_2 \rightarrow H + ArH^+$
- ✓ Transfer de charge asymétrique :  $Ar^+ + H_2 \rightarrow Ar + H_2^+$
- ✓ Transfer de proton :  $H_2^+ + Ar \rightarrow ArH^+ + H$
- ✓ Transfer de charge asymétrique :  $H_2^+ + Ar \rightarrow Ar^+ + H_2$
- ✓ Transfer de proton :  $H_3^+ + Ar \rightarrow ArH^+ + H_2$
- ✓ Transfer de proton :  $ArH^+ + H_2 \rightarrow H_3^+ + Ar$

Les figures suivantes montrent les résultats de simulation obtenus pour une décharge radiofréquence d'amplitude  $V_0=300V$ , de fréquence  $f_{rf}=13.56$  Mhz (la tension est appliquée à  $z=3cm$ ,  $V(t)=V_0 \sin(\omega_{rf}t)$ ), et sous une pression totale de 1Torr, et la distance inter-électrodes est de 3cm. La figure III-7 montre que les électrons arrivent à suivre quasi-instantanément les variations du champ électrique et cela dû à leur faible inertie. Au début du cycle RF, les électrons sont attirés vers l'électrode droite (momentanément une anode) donnant une charge d'espace négative qui réduit le champ électrique au voisinage de cette électrode et provoque la contraction de la gaine. Puis au cours de l'évolution du cycle RF, les électrons sont repoussés vers la région du plasma (centre de la décharge) laissant derrière eux une charge d'espace positive. L'apparition de la charge d'espace positive au voisinage de l'électrode (momentanément une cathode), conduit à l'augmentation du champ électrique à cette région provoquant l'expansion de la gaine.

Alors le mouvement des électrons couvrant et découvrant la charge d'espace positive dans les gaines est la base de la formation et l'oscillation des gaines. C'est un effet mutuel qui couple fortement le transport d'électrons et la variation du champ électrique.

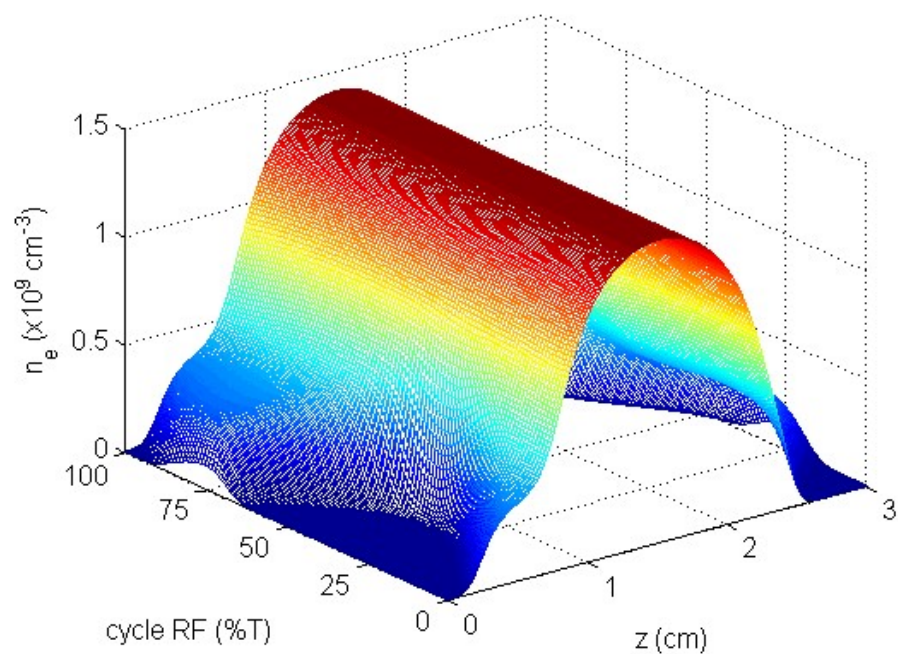


Fig.III-7: Variation spatiotemporelle de la densité électronique pour une décharge radiofréquence dans un mélange (80% $\text{H}_2$ /20%Ar)

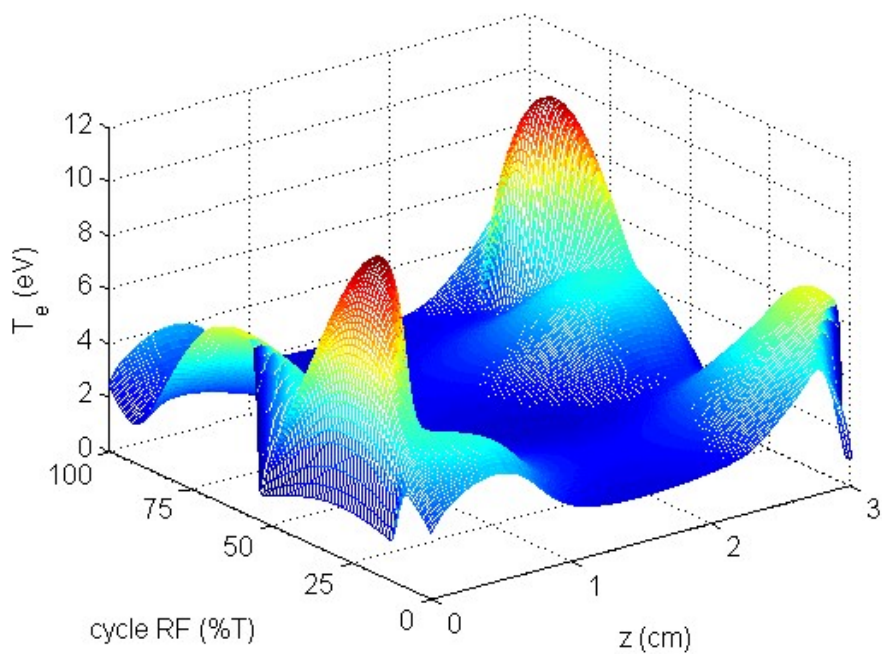


Fig.III-8: Variation spatiotemporelle de la Température électronique pour une décharge radiofréquence dans un mélange (80% $\text{H}_2$ /20%Ar)

La figure III-8 représente la variation spatiotemporelle de la température moyenne des électrons, cette température est importante dans les gaines particulièrement aux instants où la tension radiofréquence passe par ses extrêmes, elle atteint environ de 10eV. Le minimum est situé au centre de la décharge où il présente des petites oscillations durant le cycle, elle varie entre 1.7 et 2eV. La figure III-9 montre la variation spatiotemporelle du champ électrique. Il est très faible dans le plasma en raison de la neutralité électrique, alors qu'il est très élevé dans les gaines à cause de l'oscillation des électrons dans l'intervalle inter-électrode. Au niveau des électrodes, le champ électrique qui est par définition le gradient de potentiel suit, comme prévu, la variation sinusoïdale de la tension RF, mais avec un déphasage de  $\pi/2$ . La figure III-10, figure III-11, figure III-12, figure III-13, et figure III-14 montrent les variations spatiotemporelles des densités des ions  $\text{Ar}^+$ ,  $\text{ArH}^+$ ,  $\text{H}_3^+$ ,  $\text{H}_2^+$ , et  $\text{H}^+$ , respectivement. Contrairement aux électrons, les densités ioniques ne présentent pas des variations significatives durant le cycle RF à cause de leurs grandes inerties, alors ne suivent pas les variations instantanées du champ électrique. À 20% d'argons les ions dominants dans la décharge sont  $\text{H}_3^+$  et  $\text{ArH}^+$  respectivement, et cela à cause de la réaction  $\text{H}_2^+ + \text{H}_2 \Rightarrow \text{H}_3^+ + \text{H}$  pour  $\text{H}_3^+$ , et la réaction  $\text{Ar}^+ + \text{H}_2 \Rightarrow \text{ArH}^+ + \text{H}$  pour  $\text{ArH}^+$ .

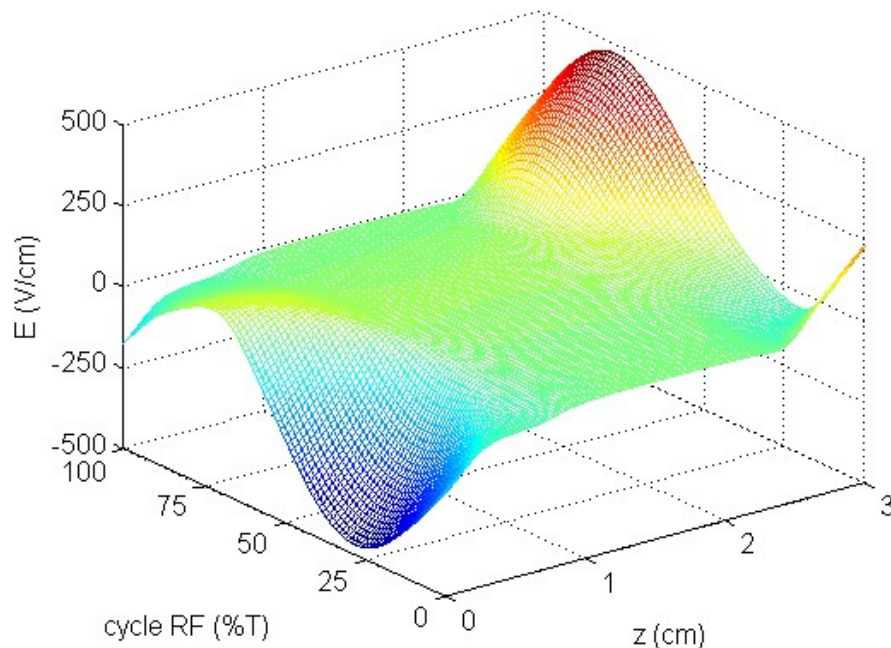


Fig.III-9: Variation spatiotemporelle du champ électrique pour une décharge radiofréquence dans un mélange (80% $\text{H}_2$ /20% $\text{Ar}$ )

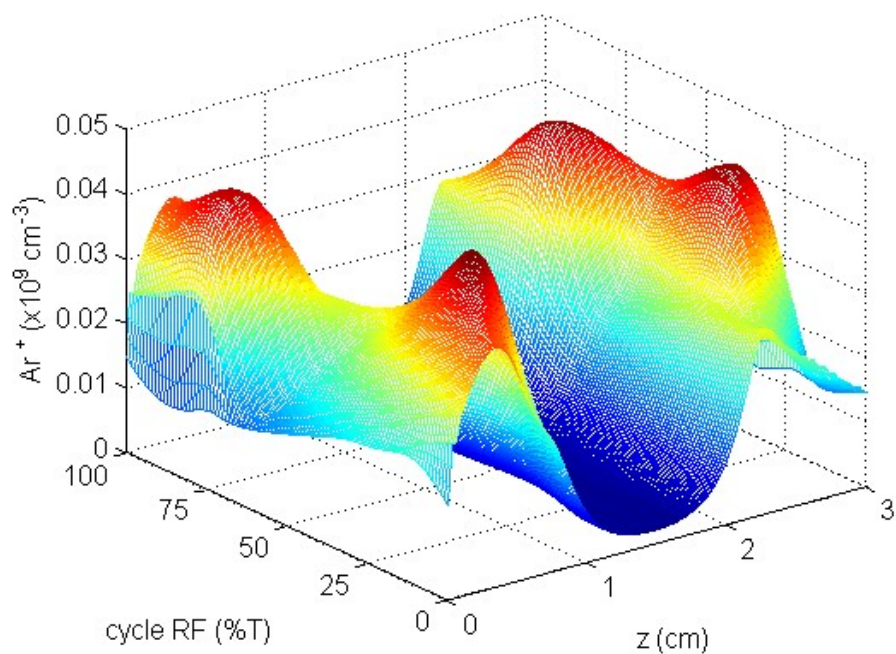


Fig.III-10: Variation spatiotemporelle de la densité des ions  $Ar^+$  pour une décharge radiofréquence dans un mélange (80% $H_2$ /20%Ar)

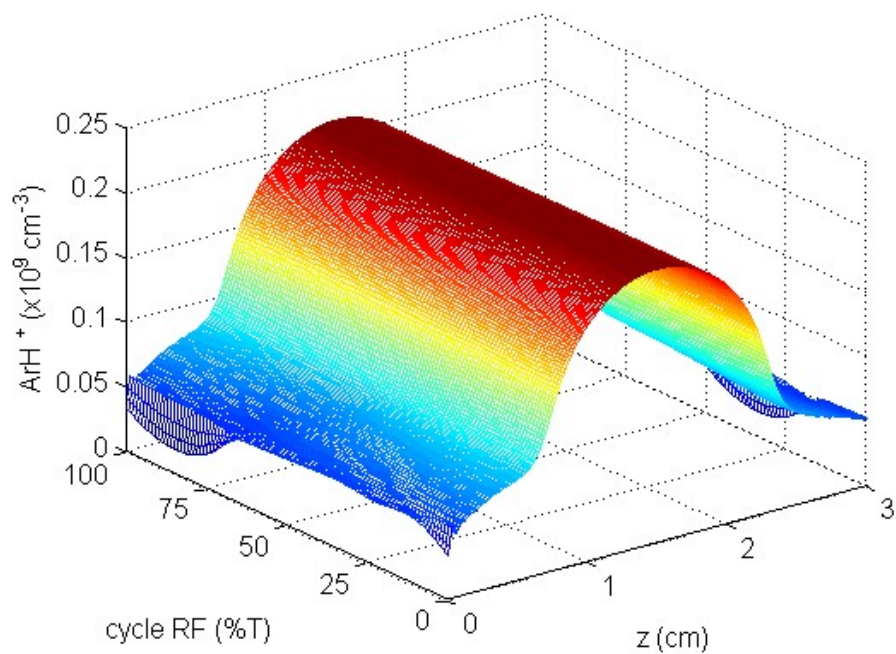


Fig.III-11: Variation spatiotemporelle de la densité des ions  $ArH^+$  pour une décharge radiofréquence dans un mélange (80% $H_2$ /20%Ar)

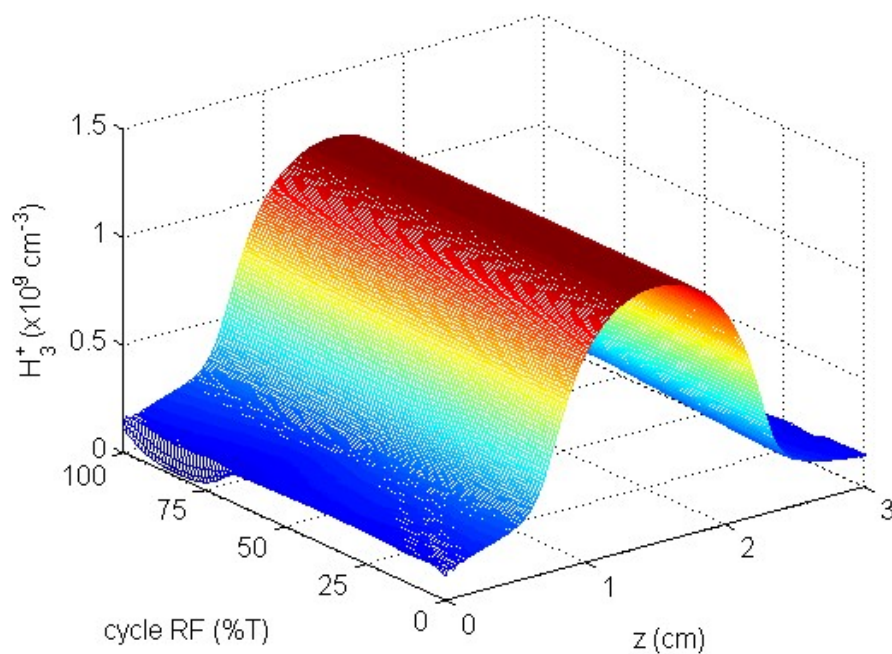


Fig.III-12: Variation spatio-temporelle de la densité des ions  $H_3^+$  pour une décharge radiofréquence dans un mélange (80% $H_2$ /20%Ar)

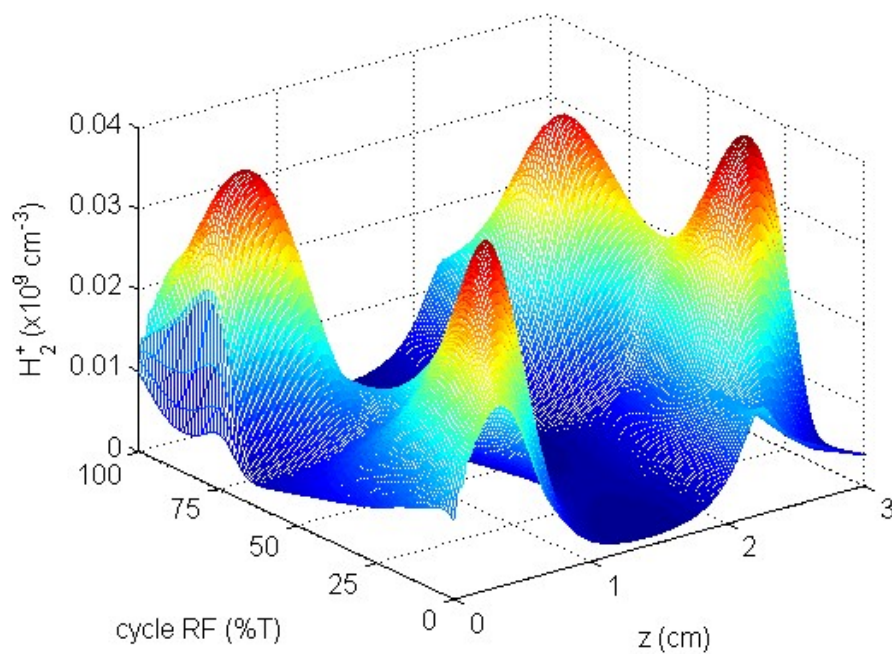
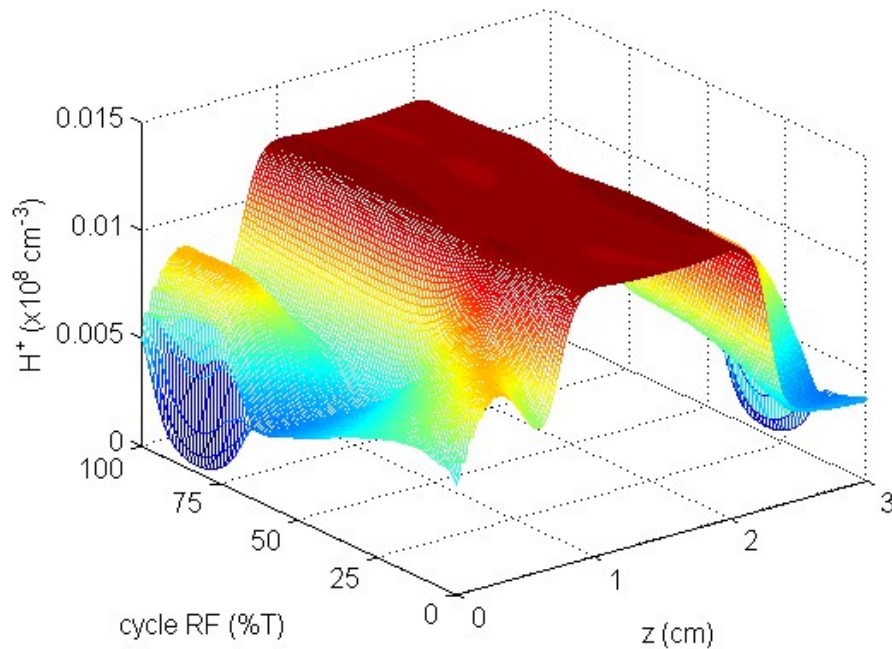


Fig. III-13: Variation spatio-temporelle de la densité des ions  $H_2^+$  pour une décharge radiofréquence dans un mélange (80% $H_2$ /20%Ar)



*Fig. III-14: Variation spatiotemporelle de la densité des ions  $H^+$  pour une décharge radiofréquence dans un mélange (80% $H_2$ /20% $Ar$ )*

La figure III-15 montre la variation spatiotemporelle de la densité des atomes d'hydrogène, cette dernière ne présente aucune variation durant le cycle radiofréquence. Le maximum est situé à lisière gaine-plasma où la température électronique est importante, sa valeur est  $9.5 \times 10^{11} \text{ cm}^{-3}$ , et le minimum est situé au centre de la décharge avec une valeur de  $6.2 \times 10^{11} \text{ cm}^{-3}$ . La variation spatiotemporelle de la densité des métastables d'argon est illustré sur la figure III-16, la même chose est remarquée, aucune variation durant le cycle radiofréquence, avec un maximum à lisière gaine-plasma de  $7.8 \times 10^{10} \text{ cm}^{-3}$ , et un minimum au centre de la décharge de  $1.64 \times 10^{10} \text{ cm}^{-3}$ . Dans la figure III-17 on montre la variation de la densité de différentes espèces chargées (électrons,  $Ar^+$ ,  $ArH^+$ ,  $H_3^+$ ,  $H_2^+$ , et  $H^+$ ) en fonction de  $Ar\%$  (de 0% à 100%). Pour l'Hydrogène pur (0% d'Argon), l'ion dominant est  $H_3^+$  et cela à cause de la réaction  $H_2^+ + H_2 \Rightarrow H_3^+ + H$ . avec l'augmentation du pourcentage de l'argon et à partir de 60%, l'ion dominant est le  $ArH^+$  à cause de la réaction  $Ar^+ + H_2 \Rightarrow ArH^+ + H$ , qu'elle est importante jusqu'au presque à 100% d'argon où l'ion unique est le  $Ar^+$ . Finalement, la figure III-18 montre la variation de la densité des atomes d'Hydrogène et les métastables d'Argon en fonction du pourcentage d'Argon, la densité des atomes diminue presque linéairement avec l'augmentation du pourcentage d'Argon, par contre la densité des métastables d'Argon augmente d'une manière exponentielle à partir de 80% d'Argon.

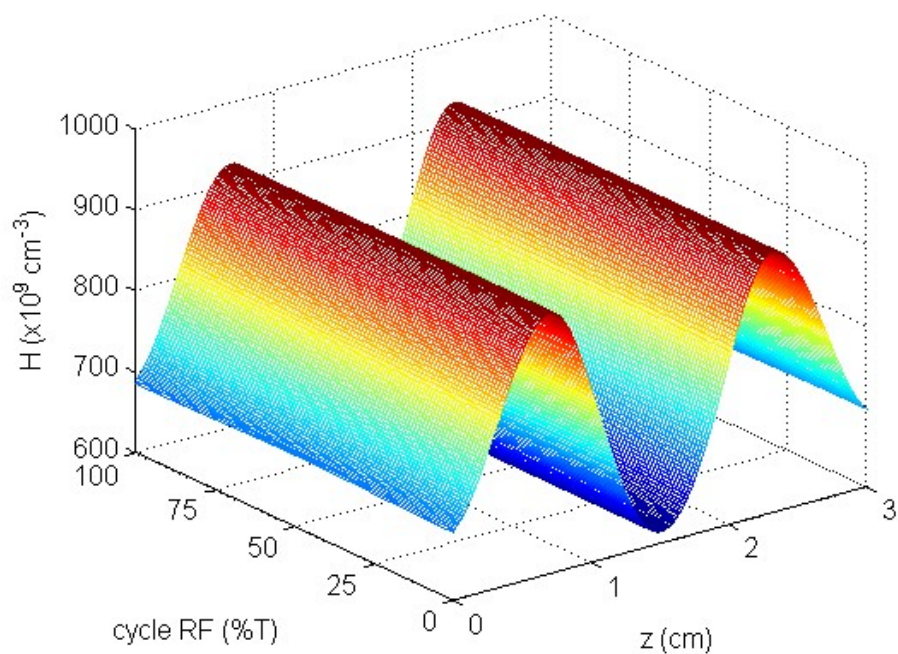


Fig.III-15: Variation spatiotemporelle de la densité des atomes d'hydrogène  $H$  pour une décharge radiofréquence dans un mélange (80% $H_2$ /20%Ar)

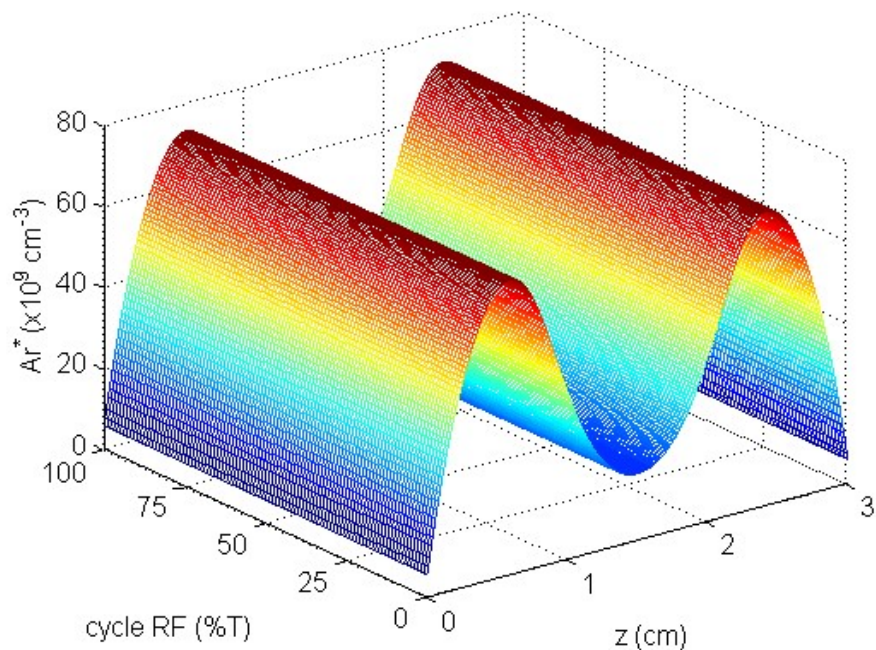


Fig. III-16: Variation spatiotemporelle de la densité des atomes métastables de l'argon  $Ar^*$  pour une décharge radiofréquence dans un mélange (80% $H_2$ /20%Ar)

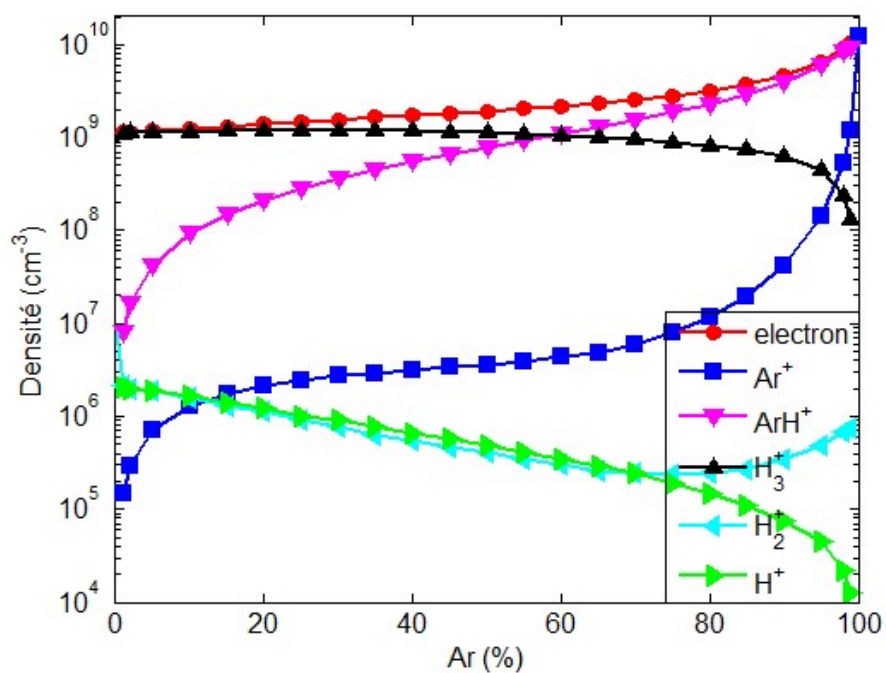


Fig. III-17: Variation de la densité des électrons,  $Ar^+$ ,  $ArH^+$ ,  $H_3^+$ ,  $H_2^+$ , et  $H^+$  en fonction du pourcentage d'Argon.

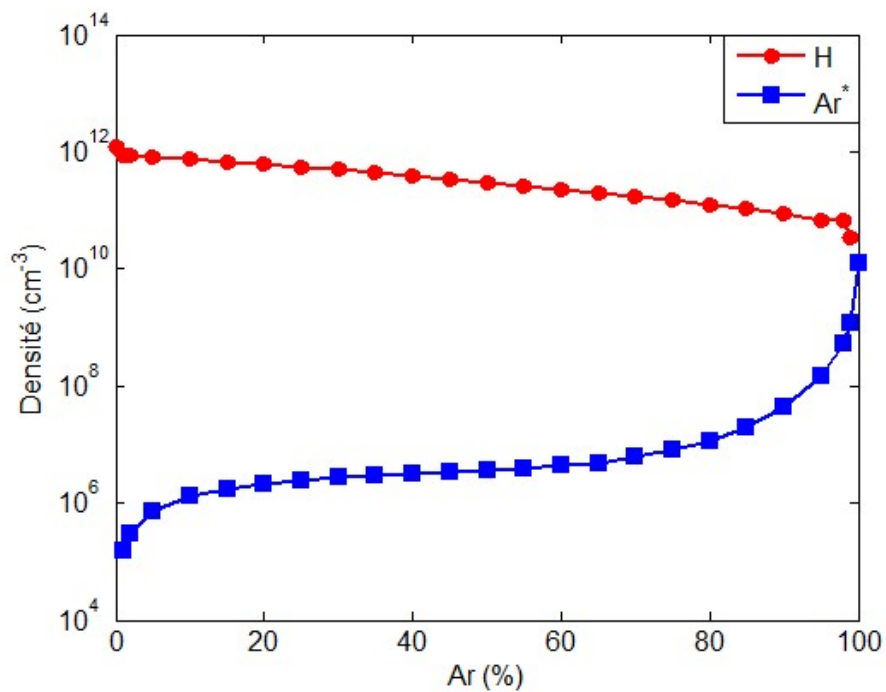


Fig. III-18: Variation de la densité des atomes d'Hydrogène et les métastables d'Argon en fonction du pourcentage d'Argon.



### III.5. Conclusion

Après un aperçu général sur les plasmas de décharge créée par des sources radiofréquences, où on a donné leurs caractéristiques principales et quelques notions théoriques relatives à la physique de ces plasmas, on a présenté les différents modèles généralement utilisés pour modéliser ces modèles. Enfin on a montré les résultats obtenus par un modèle fluide élaboré sur Comsol pour un mélange de 80% $H_2$ /10%Ar, ainsi l'évolution de la densité des électrons, la densité des atomes H, la densité des métastables d'argon, et la densité de différents ion en fonction du pourcentage de gaz d'argon.

Les résultats de simulation obtenus montrent que pour l'Hydrogène pur (0% d'Argon), les ions dominants sont les  $H_3^+$  où la quasi-totalité des ions  $H_2^+$  qui sont produits essentiellement par l'ionisation directe de la molécule d'hydrogène se transforment en  $H_3^+$  à travers la réaction  $H_2^+ + H_2 \Rightarrow H_3^+ + H$ . Les résultats montrent aussi que dans le mélange argon/hydrogène et qu'à partir de 60% d'argon, les ions dominants sont les  $ArH^+$  qu'ils sont produits essentiellement par la réaction  $Ar^+ + H_2 \Rightarrow ArH^+ + H$ . Ces ions restent dominants jusqu'au presque à 100% d'argon où l'ion unique est le  $Ar^+$ . Avec l'augmentation du pourcentage d'argon dans le mélange, la densité des atomes d'hydrogène qui sont produits par les collisions électroniques avec la molécule d'hydrogène diminue presque linéairement, par contre la densité des métastables d'Argon augmente d'une manière exponentielle à partir de 80% d'Argon.

**Références de chapitre III:**

- [1] H. Bahouh, S. Rebiaï, F. Bouanaka, S. Sahli, "Fluid Model Simulation of DC Glow Discharges," *Advanced Materials Research*, vol. 227, pp. 116-120, 2011.
- [2] F. Bouanaka, S. Rebiaï, "Pressure and Free Flight Time Effects on Glow Discharge Characteristics," *International Journal of Computer Applications*, vol. 72, no.1, pp. 3844, 2013.
- [3] A. Bogaerts, and R. Gijbels, "Hybrid Monte Carlo-fluid modeling network for an argon/hydrogen direct current glow discharge," *Spectrochimica Acta Part B: Atomic Spectroscopy*, vol.57, no.6, pp. 1071-1099, 2002.
- [4] S. Rebiaï, H. Bahouh, S. Sahli, "2-D Simulation of dual frequency capacitively coupled helium plasma, using COMSOL Multiphysics," *IEEE Trans. Dielectr. Electr. Insul*, vol. 20, no.5, pp. 1616-1624, 2013.
- [5] A. Berkane, S. Rebiaï, " Simulation d'une Décharge radio fréquence Dans l'Argon à Basse pression" *Séminaire International sur la Physique des Plasmas SIPP'2013*, UKM Ouargla, 2013.
- [6] T. Kimura and K. Ohe, "Pressure dependences of electron energy distribution and power dissipation in symmetrical RF helium discharges," *J. Phys. D Appl. Phys.*, vol. 27, no.7, pp.1465-1469, 1994.
- [7]: D. Benyoucef, "Modélisation particulière et multidimensionnelle des décharges hors équilibre à basse pression excitées par champs électromagnétiques," thèse université de Toulouse, Université Toulouse III-Paul Sabatier, 2011.
- [8]: D. Benyoucef, M. Yousfi, and BachirBelmadani, "Self-consistent particle modeling of radio frequency discharge in Ar/O<sub>2</sub> mixtures: Effects of crossed electric and magnetic fields and partial pressure," *Journal of Applied Physics*, vol. 109, no. 8, p. 083304, 2011.
- [9]: D. Benyoucef and M. Yousfi, "Particle modelling of low-pressure radio-frequency magnetron discharges including the effects of self-induced electromagnetic fields," *Plasma Sources Science and Technology*, vol.23, no. 4, p. 044007, 2014.
- [10]: D. Benyoucef and M. Yousfi, "Particle modelling of magnetically confined oxygen plasma in low pressure radio frequency discharge," *Physics of Plasmas*, vol. 22, no. 1, p. 013510, 2015.
- [11] M. Long, "Power Efficiency Oriented Optimal Design of High Density CCP and ICP Sources for Semiconductor RF Plasma Processing Equipment," *IEEE Transactions on Plasma Science*, vol. 34, no. 2, pp. 443-454, 2006.

- [12] Zoltan Donko, " Ion behavior in capacitively-coupled dual-frequency discharges," *Journal of Physics: Conference Series*, vol. 86, no. 1, p. 012011, 2007.
- [13] E.Neyts, M.Yan, A.Bogaerts, R.Gijbels, "PIC-MC simulation of an RF capacitively coupled Ar/H<sub>2</sub> discharge," *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research*, vol. 202, pp. 300-304, 2003.
- [14] D. Herrebout, A. Bogaerts, M. Yan, and R. Gijbels, " One-dimensional fluid model for an rf methane plasma of interest in deposition of diamond-like carbon layers," *J. Phys. D: Appl. Phys.*, vol. 90, No. 2, pp.570-579, 2001.
- [15] L. Therese, " Plasmas Radiofréquence Pour L'analyse Des Matériaux. Études expérimentale, analytique et numérique," Thèse de Doctorat de L'Université Toulouse III – Paul Sabatier, 2005.
- [16] 14 S. DINE, " Effet de la fréquence dans les décharges VHF sur les caractéristiques des plasmas utilisés pour le dépôt de silicium microcristallin," Thèse de Doctorat de Université Paris XI Orsay, 2006
- [17] Yinchang Du, and Yangfang Li, "Plasma Density Distribution in Asymmetric Geometry Capacitive Coupled Plasma Discharge System," *World Academy of Science, Engineering and Technology*, vol. 71, pp. 919-922, 2012.
- [18] W. Jiang, H.Wang, Z. Bi and Y.Wang, "Implicit and electrostatic particle-in-cell/Monte Carlo model in two-dimensional and axisymmetric geometry: II. Self-bias voltage effects in capacitively coupled plasmas," *Plasma Sources Sci. Technol.*, vol. 20, no. 9, pp, 2011.
- [19] P. Jérémy, "Analyses et comportements de particules créées dans un plasma radiofréquence basse pression en mélange méthane/azote," Thèse de Doctorat de l'Université d'Orleans, 2007.
- [20] A. M. Pointu, J. Perrin, J. Jolly, "Plasmas froids de décharge. Applications et diagnostic," *Technique de l'ingénieur*, D 2 835.
- [21] M. A. Lieberman, A. J. Lichtenberg, "Principles of plasma discharges and materials processing," John Wiley, New York, 2005.
- [22] A. H. Perret, " Effets de la fréquence d'excitation sur l'uniformité du plasma dans les réacteurs capacitifs grande surface," Thèse de Doctorat de l'École Polytechnique, France, 2004.
- [23]: M. Mostafaoui and Djilali Benyoucef, "Electrical model parameters identification of radiofrequency discharge in argon through 1D3V/PIC-MC model," *Plasma Science and Technology*, vol. 20, no.9, p. 095401, 2018.

- [24] A. Mezeghrane, "Caractérisation des plasmas froids d'hydrocarbures azote/méthane et argon/méthane : Application aux dépôts de couche minces," Thèse de Doctorat de l'Université de Tizi-ouzou, Algérie, 2010.
- [25] A. M. Pointu, J. Perrin, J. Jolly, "Plasmas froids de décharge. Propriétés électriques," *Technique de l'ingénieur*, D 2 830.
- [26] J. Schulze, A. Derzsi and Z. Donkó, "Electronheating and the electricalasymmetryeffect in dual-frequency capacitive CF<sub>4</sub>discharges," *Plasma Sources Sci. Technol.*, vol. 20, no. 4, p. 045008, 2011.
- [27] J. Schulze, Z. Donkó, E. Schungel and U. Czarnetzki, "Secondary electrons in dualfrequency capacitive radio frequency discharges," *Plasma Sources Sci. Technol.* vol. 20, no 4, p. 045007, 2011.
- [28] G.A. Curley, " The dynamics of the charged particles in a dual frequency capacitively coupled dielectric etch reactor," thèse de Doctorat de l'ÉcolePolytechnique, France, 2008.
- [29] W. Chen, K. Ogiwara, K. Koge, K. Tomita, K. Uchino and Y. Kawai, " Investigation of VHF Argon Plasma at High Pressure by Balanced Power Feeding Using Laser Thomson Scattering," *Engineering Sciences Reports*, Kyushu University, vol. 35 No. 1, pp. 6-11, 2013.
- [30] T.Yoshioka, Y. Tauchi, W. Oohara, O. Fukumasa, M. Murata, "Production and Control of VHF Excited Plasmas by Superposing Two Standing Waves," *J. Plasma Fusion Res. series*, vol. 8, pp. 784-788, 2009.
- [31] G. Franz, "Low Pressure Plasmas and Microstructuring Technology," ISBN 978-3540-85848-5, Springer Dordrecht Heidelberg London New York, 2009.
- [32] U. N. Pal, P. Gulati, N. Kumar, M. Kumar, M. S. Tyagi, B. L. Meena, A. K. Sharma, and R. Prakash, " Analysis of Discharge Parameters in Xenon-Filled Coaxial DBD Tube," *IEEE Transactions On Plasma Science*, vol. 39, no. 6, pp. 1475-1481, 2011.
- [33] D. P. Lymberopoulos and D. J. Economou, "Fluid simulations of glow discharge& Effect of metastable atoms in argon," *J. Appl. Phys.*, vol. 73, no. 8, pp. 3668-3679, 1993.
- [34] U. Kortshagen and B. G. Heil, "Kinetic Two-Dimensional Modeling of Inductively Coupled Plasmas Based on a Hybrid Kinetic Approach," *IEEE Transactions onPlasma Science*, vol. 27, no. 5, pp. 1297–1309, 1999.
- [35] U. Kortshagen and B. G. Heil, "Kinetic Two-Dimensional Modeling of InductivelyCoupled Plasmas Based on a Hybrid Kinetic Approach," *IEEE Transactions on plasma science*, vol. 27, no. 5, pp. 1297–1309, 1999.

- [36] D. Herrebout, A. Bogaerts, M. Yan, and R. Gijbels, "One-dimensional fluid model for an rf methane plasma of interest in deposition of diamond-like carbon layers," *J. Phys. D: Appl. Phys.*, vol. 90, no. 2, pp. 570-579, 2001.
- [37] K. Gadonna, "Torche à Plasma Micro-onde à la Pression Atmosphérique: Transfert Thermique," thèse de Docteur de l'Université Paris Sud – XI, 2012.

## **CHAPITRE: IV**

# **MODELISATION D'UNE DECHARGE RADIOFREQUENCE A COUPLAGE INDUCTIF DANS LE MELANGE HYDROGENE/ARGON**

### IV.1. Introduction

Dans les réacteurs plasmas à couplage inductif, les plasmas ne sont plus créés par des électrodes classiques mais par des bobines. Ils représentent une solution alternative pour la création des sources haute densité, dans lesquelles les densités plasma peuvent atteindre  $10^{13}\text{cm}^{-3}$ . Ces sources nécessitent l'utilisation des bobines pour la création des champs électromagnétiques variables (généralement dans la gamme radiofréquence). Les caractéristiques des plasmas ICP (Inductively Coupled Plasma) ont été étudiées par plusieurs auteurs [1,2]. Tous les réacteurs radiofréquences à couplage inductif contiennent un élément inductif placé à l'extérieur de la région où est généré le plasma. Il existe trois configurations principales. La première fonctionne avec une bobine de type solénoïde qui entoure le réacteur. La seconde configuration consiste à utiliser une bobine plate posée au sommet de la chambre d'injection des gaz. Une fenêtre diélectrique est généralement utilisée pour la séparation entre la bobine et le plasma. Des systèmes à plusieurs bobines concentriques au-dessus de fenêtres diélectriques en forme de dômes existent également [3]. L'objectif principal de ce chapitre est le développement d'un modèle fluide 2D en couplant les équations du plasma avec les équations d'électromagnétisme, l'équation de Navier-Stokes, et l'équation de la chaleur, afin de simuler une décharge radiofréquence à couplage inductif pour une configuration planaire dans le mélange Hydrogène/Argon.

### IV.2. Les réacteurs plasmas à couplage inductif

Les plasmas à couplage inductif constituent l'une des alternatives les plus utilisées pour pallier les problèmes de la limite de la densité du plasma, où on peut avoir une décharge à très basse en générant une faible puissance. La configuration plane appelée aussi TCP (transformer coupled plasma) semble plus attractive car elle peut traiter des plaquettes de silicium de plus grande surface à basse pression en conservant l'homogénéité du plasma en face du substrat (voir la figure IV-1). Par contre, la configuration cylindrique peut être employée facilement pour effectuer un traitement de surface ou la déposition par la technique PECVD (Plasma-Enhanced Chemical Vapor Deposition) à basse pression (de 7.5 à 75 mTorr) sur des échantillons plans de faible diamètre placés en aval (voir la figure IV-2) [5]. Pour ces configurations, le plasma est créé par action du champ magnétique RF. Le couplage inductif assure un fort taux d'ionisation à très

basse pression ( $\approx 4\text{mTorr}$ ). Le substrat peut être placé dans une chambre séparée située en dessous de la source. En pratique, le porte-substrat est alimenté par une source radiofréquence (RF) ou continue (DC) indépendante de la source d'alimentation, afin de contrôler indépendamment la tension de gaine.

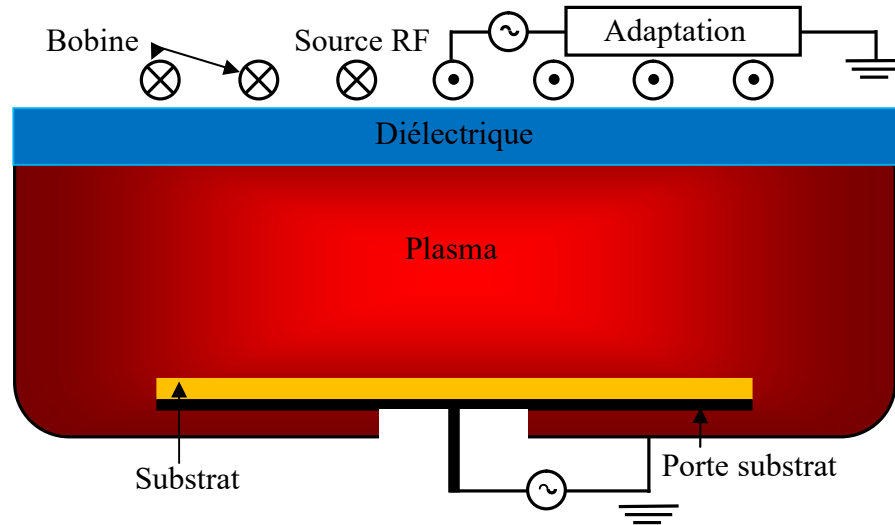


Fig. IV-1: Schématisation d'un réacteur inductif de type TCP avec configuration planaire

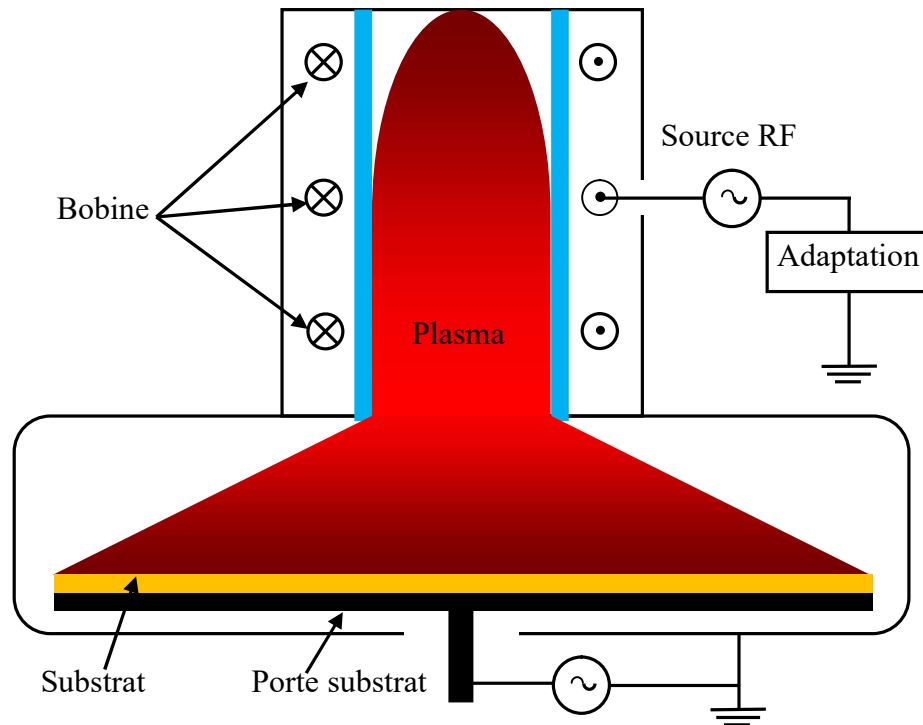


Fig. IV-2: Schématisation d'un réacteur inductif de type TCP avec configuration planaire



### IV.2.1. Principe de fonctionnement

Un réacteur TCP simple est une chambre cylindrique de rayon  $R$  et de hauteur  $h$  dans laquelle les gaz sont injectés. Ces sources sont entretenues à basse pression (entre 5 et 50 mTorr) par des champs électriques alternatifs externes, la gamme de fréquences est typiquement entre 1 et 100 MHz [6, 7]. Dans ces systèmes, une antenne séparée du plasma par une paroi diélectrique et reliée à une alimentation haute fréquence (généralement à 13.56 MHz). Le courant RF circulant dans l'antenne génère un champ magnétique  $B$  variable dans l'enceinte sous forme des lignes induites dans des boucles, un circuit d'adaptation est utilisé pour réduire l'impédance de la bobine et maximiser le couplage de celle-ci avec le plasma. Dans le but de limiter le couplage capacitif, une fenêtre diélectrique est placée entre le plasma et la bobine. Les gaz sont évacués par un système de pompage, en général une pompe primaire associée à une pompe turbo-moléculaire. Le courant injecté dans la bobine crée un champ magnétique (voir la figure IV-3) radiofréquence qui induit à son tour un champ électrique toroïdal dans une petite région appelée "épaisseur de peau" et située juste en-dessous de la fenêtre diélectrique (elle est motionnée par  $\delta$  dans la figure II-3). Dans cette zone, les électrons sont accélérés par le champ électrique et entrent en collisions avec les neutres, créant des ions et dissociant les molécules dans le cas d'un gaz moléculaire comme  $H_2$ ,  $O_2$ ,  $N_2$ ,  $CH_4$ , etc.

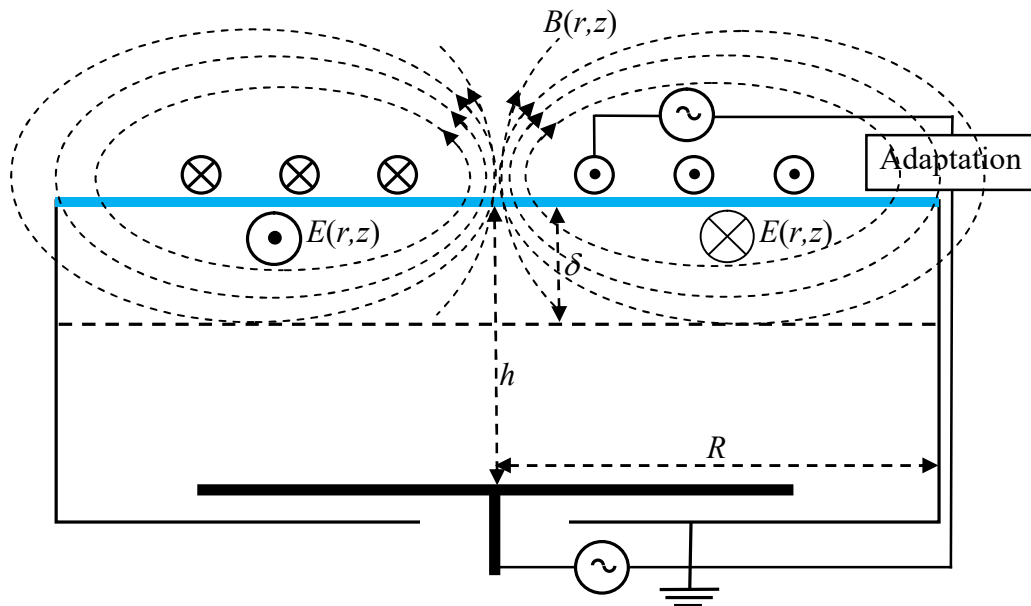


Figure IV-3: lignes de champ électromagnétique dans un réacteur planaire

Le champ magnétique variable induit un champ électrique  $E$  (selon la loi de Faraday), et par suite une densité de courant  $J$  azimutal dans le plasma à travers une fenêtre diélectrique ( $J=\sigma E$ ), ce champ  $E$  permet d'accélérer les électrons et transmet ainsi l'énergie nécessaire à l'entretien de la décharge. La détermination du champ électrique couplé au champ magnétique peut être obtenue par la résolution des équations de Maxwell. Le chauffage ohmique n'est cependant pas le seul processus possible dans les réacteurs à couplage inductif car il est possible de créer et maintenir un plasma en régime non collisionnel à très basse pression [4].

À très basse pression, le libre parcours moyen des électrons est de l'ordre de grandeur de l'épaisseur de peau. Lorsqu'un électron entre dans cette région de peau, tout près de la fenêtre diélectrique, il sera accéléré sous l'effet du champ électrique vers le cœur du plasma, puis il sera retourné, mais avec une énergie supérieure à celle qu'il avait avant d'entrer dans l'épaisseur de peau. Le régime inductif n'opère en réalité qu'à des puissances suffisamment élevées. Pour initier le plasma à basse puissance, le régime capacitif est primordial. Dans ce dernier régime, la bobine agit comme une électrode classique et génère le plasma de la même manière qu'un réacteur capacitif. Lorsque la puissance augmente, une transition entre le mode capacitif et inductif s'opère, donnant lieu à des instabilités. Bien qu'il soit nécessaire au démarrage du plasma, le régime capacitif peut provoquer l'apparition d'un champ électrique trop important aux parois des réacteurs. Le rôle des fenêtres diélectriques est de réduire cet effet capacitif. Le plasma créé au sein de l'épaisseur de peau diffuse ensuite dans le réacteur. Plus la pression est faible, plus les espèces chargées actives vont pouvoir se répandre loin. Un porte-substrat est généralement disposé au fond du réacteur. Une source radiofréquence peut servir à mettre sous tension le porte-substrat pour modifier le champ électrique de la gaine près de celui-ci, et de cette manière, il est possible de contrôler indépendamment la densité du plasma, le flux d'ions aux gaines et l'énergie de bombardement des ions.

Un plasma à couplage inductif ICP peut être généré en dirigeant l'énergie d'un générateur RF (typiquement 13.56 MHz) vers le gaz utilisé. Le principe du chauffage par courants de Foucault bien connu dans le chauffage des métaux, et il s'applique de la même façon aux gaz ionisés. Une bobine d'induction refroidie génère un flux magnétique variable dans le temps et coupe un conducteur (dans notre cas est le plasma), il peut entraîner une force électromotrice et une puissance induite. Les électrons rapides entrent en collision avec les atomes ou les molécules de

gaz et produisent une ionisation supplémentaire, ce qui engendre une augmentation sensible de la température. La conductivité électrique du plasma étant relativement élevée, alors le champ électromagnétique oscillant ne peut pénétrer plus loin dans le plasma, spécialement aux hautes fréquences. Ce phénomène est quantifié en introduisant la notion d'effet de peau [8]. Dans le plasma comme dans un métal chauffé par induction électromagnétique, les courants induits, qui circulent dans le sens opposé au courant primaire de l'inducteur, ils sont dans la coquille externe du conducteur. L'épaisseur de peau  $\delta$  qui est fonction de la fréquence a l'expression suivante:

$$\delta = -\frac{c}{\omega} \cdot \frac{1}{\sqrt{\text{Im}(\varepsilon_r)}} \quad (\text{IV-1})$$

où  $c$ ,  $\omega$ , et  $\text{Im}(\varepsilon_r)$ : sont respectivement, la vitesse de lumière, la pulsation de la source, et la partie imaginaire de la permittivité relative du plasma  $\varepsilon_r$ , où elle est exprimée comme suit:

$$\varepsilon_r = 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega(\omega - j\nu_m)} \approx -\frac{\omega_p^2}{\omega^2(1 - j\nu_m/\omega)} \quad (\text{IV-2})$$

avec  $\omega_p$ , et  $\nu_m$ : sont respectivement, la pulsation du plasma et la fréquence de collision de transfert de la quantité du mouvement. Selon le rapport  $\nu_m/\omega$ , l'épaisseur de peau peut être exprimé par les relations suivante:

$$\delta_p = \sqrt{\frac{m_e}{e^2 n_e \mu_0}} \quad \text{si } \frac{\nu_m}{\omega} \ll 1 \quad (\text{IV-3})$$

$$\delta_c = \delta_p \cdot \sqrt{\frac{2\nu_m}{\omega}} = \sqrt{\frac{2}{\mu_0 \sigma \omega}} \quad \text{si } \frac{\nu_m}{\omega} \gg 1$$

où  $\mu_0$  est la perméabilité du vide et  $\sigma = e^2 n_e / m_e \nu_m$  la conductivité du plasma.

Il existe une troisième situation [6] pour laquelle les électrons incidents sur une couche de peau d'épaisseur  $\delta_e$  satisfont à la condition suivante:

$$\frac{\nu_e}{2\delta_e} \gg \omega, \nu_m \quad (\text{IV-4})$$

où  $\nu_e$ : est la vitesse des électrons, Le temps d'interaction des électrons avec la couche de peau est court en comparaison avec la période RF ou avec le temps de collision. Par analogie avec le

chauffage sans collision sur une gaine capacitive, la fréquence de collision stochastique  $\nu_{stoc}$  peut être définie comme suit:

$$\nu_{stoc} = \frac{C_e \nu_e}{4\delta_e} \quad (IV-5)$$

où  $C_e$  est une quantité de l'ordre de 1 et qui dépend faiblement. Maintenant, on remplace  $\nu_m$  par  $\nu_{stoc}$  dans l'équation (IV-2) en tenant compte la condition  $\nu_{stoc} \gg \omega$ , on obtient:

$$\delta_e = \left( \frac{C_e \nu_e}{2\omega \delta_p} \right)^{\frac{1}{3}} \delta_p \quad (IV-6)$$

Pour les décharges typiques de traitement à basse pression, nous sommes généralement dans le régime pour lequel l'ordre des fréquences  $\omega \sim \nu_e / 2 \delta \geq \nu_m$  telle que la profondeur de la peau soit approximativement  $\delta_p$ .

#### IV.2.2. Régime de fonctionnement des plasmas à couplage inductif

Une décharge inductive réelle peut fonctionner en deux différents régimes principaux, ces deux régimes sont séparés par un régime intermédiaire:

Le régime haute puissance appelé régime inductif (H) : Pour des puissances plus importantes, un champ électrique azimuthal induit au-dessous de l'antenne qui est responsable de la génération du plasma. L'énergie absorbée par les électrons est importante ce qui mène à des densités de particules chargées beaucoup plus importantes que celles des décharges capacitatives. L'épaisseur de peau devient alors petite devant les dimensions de réacteurs  $\delta \ll R, h$  ( $R, h$ : sont respectivement le rayon et la hauteur du réacteur) et très grande devant l'épaisseur de la gaine. Le plasma est en régime haute densité, le couplage de l'énergie est en mode inductif et caractérisé par un potentiel de plasma relativement faible [10,11]. Dans ce régime de haute densité et pour un courant  $I_{rf}$  donné, on voit que la puissance totale absorbée par les électrons du plasma (chauffage inductif) décroît avec l'augmentation de la densité électronique :

$$P_{abs} \propto \frac{I_{rf}^2}{\sqrt{n_e}} \quad (IV-2)$$

Le régime basse puissance appelé régime capacitif (E) : A faible puissance, l'épaisseur de peau est très grande devant les dimensions du réacteur  $\delta \gg R, h$  et très petite devant la taille de la

gaine. Dans ce cas le champ électromagnétique induit n'est pas significativement absorbé dans le plasma, le couplage inductif est très peu efficace et le mécanisme de chauffage est similaire aux décharges à couplage capacitif. En raison de son origine à partir du champ électrostatique  $E$ , ce mode est appelé mode E. Dans le régime de faible densité électronique, la puissance absorbée est proportionnelle à la densité  $n_e$  [12,13].

$$P_{abs} \propto I_{rf}^2 n_e \quad (IV-3)$$

Le régime intermédiaire (E-H) est le saut entre les modes capacitif et inductif. La figure (IV-4) montre ces régime de fonctionnement dans le cas d'un mélange  $O_2/Ar$  (90%/10%) sous une pression totale de 10 mTorr. Elle montre clairement qu'à basse puissance radiofréquence, la densité électronique est faible, et alors le plasma fonctionne en régime capacitif (mode E). Lors de l'augmentation de la puissance de la source, le couplage entre la bobine et le plasma est plus efficace, et la décharge passe du régime capacitif au régime inductif de haute densité (mode H). Généralement, la prédominance d'un mode par rapport à l'autre dépend de plusieurs paramètres tels que la puissance RF appliquée, la pression dans le réacteur ou le gaz utilisé [14,15].

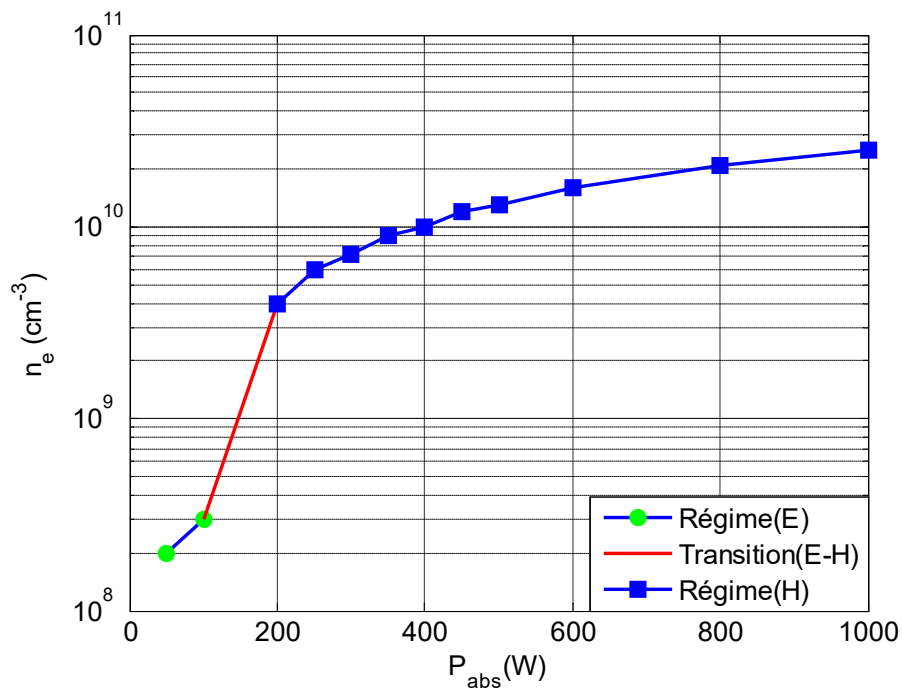


Fig. IV-4: Évolution de la densité électronique en fonction de la puissance dans un plasma  $O_2/Ar$  (90%-10%) dans un réacteur ICP pour une pression de 10 mTorr [16].

### IV.2.3. Circuits électriques équivalents

Chaque élément du circuit équivalent dépend de la caractéristique de la décharge et de la géométrie du réacteur. Dans le cas d'une géométrie de type plane couramment utilisée dans l'industrie (Fig. IV-1), [10,11]. La puissance transmise au plasma ne se fait pas seulement par le couplage inductif, mais également par le couplage capacitif, et dans ces conditions, il est très difficile de trouver un circuit électrique équivalent à la décharge. Par contre, dans le cas d'un couplage inductif pur, les paramètres du circuit électrique équivalent peuvent être facilement trouvés. Le courant  $I_p$  qui circule dans le plasma prend le sens inverse du courant d'excitation  $I_{rf}$ , et cela est semblable à un transformateur électrique. De ce fait, le couple bobine excitatrice et le plasma se comporte comme un transformateur dont la bobine représente le circuit primaire ( $L_a$ ,  $R_a$ ) et le plasma représente le circuit secondaire ( $L_p$ ,  $R_p$ ) d'un transformateur. Le couplage entre la bobine et le plasma est alors représenté par deux inductances couplées par une mutuelle  $M$ . (la figure IV-5) [10,11,16,17]. Pour le mode de fonctionnement capacitif, la puissance est couplée avec le plasma à travers le diélectrique de capacité  $C_d$  et la gaine en contact avec le diélectrique de capacité  $C_g$  et de résistance  $R_g$ .

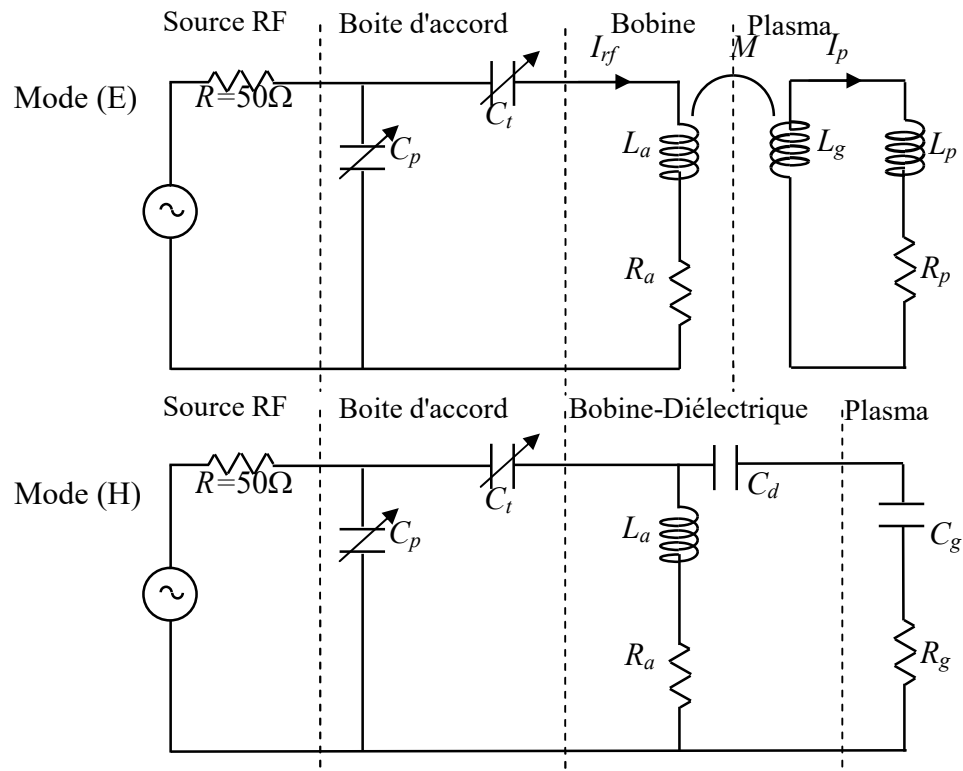


Fig. IV-5 : Modèle électrique équivalent du plasma inductif Mode (H) et Mode (E)

### IV.3. Description du modèle utilisé pour la simulation de la décharge à couplage inductif

Le réacteur considéré est de forme cylindrique et parfaitement axisymétrique. Il est constitué d'une chambre cylindrique en acier inoxydable avec un rayon intérieur de 80mm et hauteur de 75 mm. Une plaque de quartz de 10mm d'épaisseur est placée à l'extrémité supérieure de la chambre. La décharge est entretenue par la circulation du champ électrique provoqué par un champ magnétique variable, et cela à cause de la circulation d'un courant de haute fréquence (13.56 Mhz) dans une bobine montée à environ 5 mm au-dessus de la plaque de quartz. La bobine est parfaitement concentrique au centre de la chambre pour maintenir la symétrie de décharge. Le champ magnétique est considéré nul à une distance de 25 mm au-dessus de la bobine (blindage magnétique). Le cylindre d'acier est relié à la masse, et toutes les parois sont considérées à la température ambiante. La figure (IV-6) montre le schéma simplifié du réacteur à modéliser.

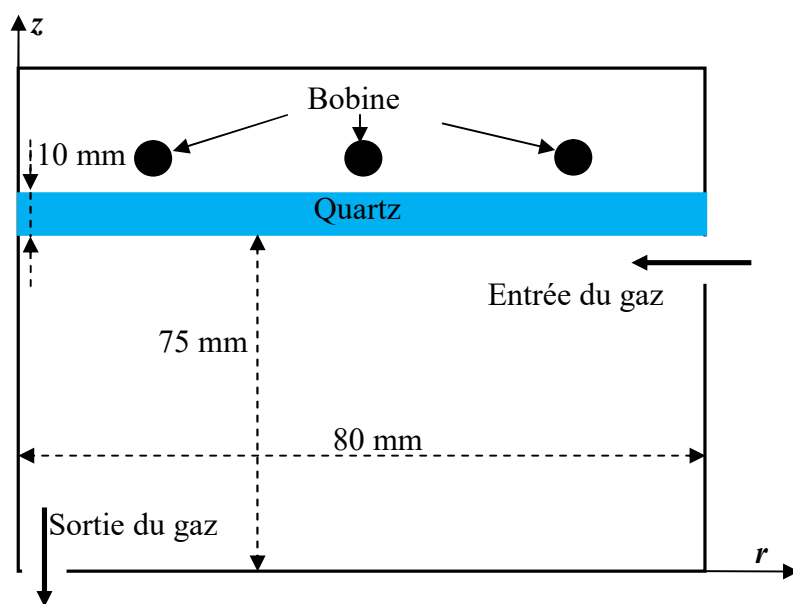


Fig. IV-6: Schéma simplifié du réacteur inductif à modéliser

Le modèle de la décharge à couplage inductif que l'on va détailler dans ce qui suit, fonctionne d'une manière autonome, dont le modèle fluide des espèces est associé aux équations électromagnétiques, pour calculer le champ électrique causé par la variation temporelle de l'induction magnétique de la bobine. Dans ce modèle on va prendre en considération l'écoulement du gaz, en utilisant l'équation de Navier-Stokes. Le chauffage du gaz dû aux collisions élastiques entre les électrons et les neutres est également pris en compte en utilisant l'équation de transfert de chaleur, pour connaître la répartition spatiale de la température.

### IV.3.1. Equations des espèces du plasma

Dans les modèles fluides, chaque espèce est traitée comme un fluide séparé pour satisfaire la conservation de masse sur tout le domaine de calcul. Pour les électrons, une distribution maxwellienne est considérée. Ceci est une hypothèse appropriée quand l'énergie électronique est inférieure à 15 eV à basse pression [18]. L'existence d'une queue haute énergie de la fonction de distribution d'énergie électronique (EEDF) provoquera un désaccord entre les prédictions du modèle et la pratique. Dans ces modèles les équations considérées sont: de continuité, de quantité de mouvement et d'énergie pour les électrons, tandis que pour les électrons seulement l'équation de continuité et de quantité de mouvement. L'ensemble de ces équations est fermé par l'équation de Poisson reliant la charge d'espace au potentiel électrostatique pour les décharges à couplage inductif. L'équation de continuité et de quantité de mouvement des électrons sont données par les relations suivantes:

$$\begin{aligned} \frac{\partial n_e}{\partial t} + \nabla \cdot \Gamma_e &= S_e \\ \frac{\partial \left( \frac{3}{2} n_e k_B T_e \right)}{\partial t} + \nabla \cdot \Gamma_\varepsilon + e \Gamma_e \cdot \mathbf{E} &= P_{ind} + W_e \end{aligned} \quad (IV-7)$$

où le flux des électrons est donné par la relation suivante:

$$\Gamma_e = -n_e \mu_e \mathbf{E} - \frac{1}{m_e \nu_{en}} \nabla (n_e k_B T_e) \quad (IV-8)$$

et le flux d'énergie des électrons est donné par la relation suivante:

$$\Gamma_\varepsilon = \frac{5}{2} \left[ \Gamma_e k_B T_e - \frac{n_e k_B T_e}{m_e \nu_{en}} \nabla (n_e k_B T_e) \right] \quad (IV-9)$$

ici,  $n_e$  est la densité électronique,  $m_e$  est la masse d'électron,  $\mu_e$  est la mobilité électronique,  $\nu_{en}$  est la fréquence de collision électron-neutre,  $T_e$  est la température électronique,  $\mathbf{E}$  est le vecteur du champ électrique, et  $k_B$  est la constante de Boltzmann, et  $S_e$  est le terme source d'électrons. Le terme  $P_{ind}$  est le terme de chauffage inductif moyenné sur une période et est obtenu à partir du modèle électromagnétique. Le terme  $W_e$  représente le transfert de masse et d'énergie aux électrons par des collisions avec une autre espèce de densité  $N_k$ , il est donné par la relation suivante:

$$W_e = \sum_k \sum_j k_{k,j} n_e N_k \Delta \varepsilon_{j,k} \quad (IV-10)$$



Les équations de continuité, de quantité de mouvement et d'énergie pour les ions sont données comme suit:

$$\begin{aligned} \frac{\partial n_i}{\partial t} + \nabla \cdot (n_i \mathbf{u}_i) &= S_i \\ \frac{\partial (n_i m_i \mathbf{u}_i)}{\partial t} + \nabla \cdot (n_i m_i \mathbf{u}_i \mathbf{u}_i) &= \nabla \cdot (n_i k_B T_i) + Z_i e n_i \mathbf{E} + \mathbf{M}_i \end{aligned} \quad (\text{IV-11})$$

ici,  $n_i$ ,  $\mathbf{u}_i$ ,  $S_i$ ,  $m_i$  et  $Z_i$  sont respectivement la densité, le vecteur vitesse, le terme source, la masse et la charge des ions;  $T_i$  est la température des ions, et  $\mathbf{M}_i$  représente le transfert par collision de la quantité de mouvement des ions aux espèces neutres. Le transport des neutres à l'état fondamental ou à l'état excité est gouverné par la seule équation suivante:

$$\frac{\partial n_*}{\partial t} + \nabla \cdot (-D_* \nabla n_*) = S_* \quad (\text{IV-12})$$

où  $n_*$ ,  $D_*$ , et  $S_*$  représentent respectivement la densité, le coefficient de diffusion, et le terme source du neutre. Le champ électrique dû à la charge d'espace dans le plasma et le champ électrique du couplage de puissance inductif sont traités séparément. Le potentiel électrostatique est obtenu en résolvant l'équation de Poisson:

$$\nabla^2 V = \frac{e}{\varepsilon_0} \left( n_e - \sum_i Z_i n_i \right) \quad (\text{IV-13})$$

où  $\varepsilon_0$  est la permittivité du vide et  $Z_i$  est la charge des ions.

### IV.3.2. Équations électromagnétiques pour le couplage inductif

Dans le cas du modèle de plasma à couplage inductif axisymétrique à deux dimensions, les équations du champ électromagnétique de Maxwell peuvent être réduites sous la forme du potentiel vecteur  $\mathbf{A}$  comme suit:

$$\frac{1}{\mu_0 \mu_r} \nabla^2 \mathbf{A} + \varepsilon_0 \varepsilon_r \omega_j^2 \mathbf{A} = -\mathbf{J} \quad (\text{IV-14})$$

où  $\mathbf{J}$  est la densité de courant dans la bobine, et bien que  $\mathbf{J}$  soit complexe,  $\text{Im}(\mathbf{J})$  pourrait être mis à zéro). La résolution de cette équation électromagnétique donne la distribution du potentiel vecteur  $\mathbf{A}$  dans tout le domaine du calcul, et seulement les valeurs obtenues dans le milieu plasma sont utiles pour le couplage avec l'équation de l'énergie électronique et dans le modèle à travers

le champ électrique et la valeur moyenne de la densité de puissance déposée dans le plasma. Ces deux grandeurs peuvent être calculées par les relations suivantes :

$$\begin{aligned}\mathbf{E} &= -\nabla V - \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} \\ P_{ind} &= \frac{1}{2} \text{Re}(\sigma_p) \omega_{rf}^2 |\mathbf{A}|^2\end{aligned}\tag{IV-15}$$

Où  $\sigma_p$  est la conductivité complexe du plasma, elle est donnée par l'expression suivante :

$$\sigma_p = \frac{n_e e^2}{m_e (\nu_{en} + j\omega_{rf})}\tag{IV-16}$$

Où  $m_e$  et  $\nu_{en}$  représentent respectivement la masse électronique et la fréquence effective de collision de transfert de quantité du mouvement. La constante diélectrique du plasma  $\varepsilon_p$  est obtenue à partir de la relation suivante :

$$\varepsilon_p = \varepsilon_0 \left( 1 - j \frac{\sigma_p}{\varepsilon_0 \omega_{rf}} \right)\tag{IV-17}$$

### IV.3.3. Équations de Navier-Stokes pour l'écoulement des neutres

Les neutres ont une influence importante sur la distribution du plasma à travers deux aspects: l'un est que la source/perte où le plasma génère ou dissipe est proportionnelle à la densité du gaz neutre; et l'autre est que la densité du gaz neutre peut modifier la fréquence de collision des électrons et d'autres particules. En considérant l'influence du gaz neutre et de la distribution de pression sur le plasma. Dans ce modèle le flux de gaz neutre est décrit par l'équation de Navier-Stokes incompressible.

$$\begin{aligned}\rho \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} - \nabla \eta (\nabla \mathbf{u} + (\nabla \mathbf{u})^T) + \rho \mathbf{u} \nabla \mathbf{u} + \nabla p &= \mathbf{F} \\ \nabla(\rho \mathbf{u}) &= 0\end{aligned}\tag{IV-18}$$

où  $\rho$ ,  $\eta$ , et  $\mathbf{u}$  représentent la densité du gaz, la viscosité dynamique et le vecteur vitesse, respectivement,  $p$  est la pression du gaz et  $\mathbf{F}$  est la force. Dans ce cas, la force est égale à zéro. Les conditions aux limites de l'entrée et de la sortie sont définies en fonction du type d'entrée de vitesse et de la sortie de pression, et la condition aux limites à la paroi est simplement définie avec la condition de Dirichlet, c'est-à-dire  $\mathbf{u} = 0$ .

#### IV.3.4. Équation de transfert de la chaleur

Généralement les décharges à basse pression sont caractérisées par le fait que la température de l'électron est beaucoup plus élevée que la température du gaz neutre à cause de la faible fréquence de collision, et cela apparaitre clairement dans les plasmas à couplage capacitif. Dans les plasmas à couplage inductif qui sont caractérisés par un degré d'ionisation et une fréquence de collision élevés, et par conséquent les neutres du gaz s'échauffent. Le refroidissement de ces neutres est causé par la réaction avec les parois du réacteur. Généralement la température dans le réacteur n'est pas uniforme, et cela par la suite influe sur la pression des neutres et la distribution du plasma. La conservation de l'énergie thermique dans le réacteur est gouvernée par l'équation de Fourier, cette équation est exprimée comme suit :

$$\rho C_p \frac{\partial T}{\partial t} + \rho C_p \mathbf{u} \nabla T + \nabla(-K \nabla T) = Q \quad (\text{IV-19})$$

Où  $T$  est la température, tandis que  $K$ ,  $C_p$  et  $Q$  sont respectivement la conductivité thermique, la capacité thermique spécifique à pression constante, et le terme source de la chaleur. Ce terme contient  $P_{ind}$  (chauffage inductif),  $Q_{elastique}$  (chauffage par collision élastique),  $Q_{inélastique}$  (chauffage par collision inélastique), et  $Q_{joule}$  (chauffage par effet de joule).

#### IV.3.5. Conditions aux limites

✓ *Potentiel électrique et potentiel magnétique*: les parois du réacteur sont considérées parfaitement conductrices et reliées à la masse, cela implique que le potentiel électrique et le potentiel magnétique vecteur sont nuls aux parois métalliques, au niveau de la paroi diélectrique, le potentiel électrique peut être obtenu en tenant compte de la condition suivante:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \sigma_s}{\partial t} &= \mathbf{n} \mathbf{J}_i + \mathbf{n} \mathbf{J}_e \\ -\mathbf{n}(\mathbf{D}_p - \mathbf{D}_d) &= \sigma_s \end{aligned} \quad (\text{IV-20})$$

avec  $\sigma_s$ ,  $\mathbf{n}$ ,  $\mathbf{J}_i$ ,  $\mathbf{J}_e$ ,  $\mathbf{D}_p$ , et  $\mathbf{D}_d$  sont respectivement, la charge accumulée sur la surface du diélectrique, la norme de la surface, la densité du courant ionique, la densité du courant électronique, le vecteur de déplacement électrique dans le coté plasma, et le vecteur de déplacement électrique dans le coté diélectrique.

✓ *Densité, flux et énergie des espèces*: Le flux d'électrons au niveau des parois et électrodes est obtenu en utilisant la condition au limite d'un flux maxwellien où:

$$\Gamma = \pm \frac{1}{4} n_e v_{e,th} e^{\frac{V}{k_B T_e}} \quad (IV-21)$$

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

où les signes  $\pm$  correspondent à la direction du flux d'électrons,  $V$  est le potentiel de la paroi,  $v_{e,th}$  est la vitesse thermique de l'électron. En ignorant la conduction thermique des électrons, le flux d'énergie vers les électrodes et les parois est donnée par:

$$\Gamma_\varepsilon = \frac{5}{2} n_e T_e \Gamma_e \quad (IV-22)$$

Les gradients; de densité d'ions et de vitesse sont mis à zéro aux limites, c'est-à-dire:

$$\nabla n_i = 0, \nabla v_i = 0 \quad (IV-23)$$

✓ *Température du gaz*: la température du gaz a une grande influence sur la cinétique de la décharge, pour savoir la répartition de cette température on doit résoudre l'équation de la chaleur, en tenant compte soit de la condition de Dirichlet (la température est considéré égale à la température ambiante) ou de la condition de Neumann (un transfert de flux vers l'air ambiant par convection).

✓ *Écoulement du gaz*: pour savoir la vitesse de l'écoulement des neutres et la répartition de la pression dans le réacteur, on doit résoudre l'équation de Navier-Stokes en tenant compte comme conditions aux limites, la vitesse du gaz à l'entrée du réacteur, vitesse nulle au niveau des parois et électrodes, et une pression constante au niveau de la sortie du réacteur.

#### IV.3.6. Paramètres d'entrée du modèle

Pour les électrons, la mobilité est calculée à partir de leur section efficace et le coefficient diffusion est calculé par la relation d'Einstein qui relie la mobilité au coefficient de diffusion.

La mobilité des ions est calculée par la relation de *Dalgarno* [19] en tenant un potentiel d'interaction de polarisation de longue portée, et le coefficient de diffusion est déterminé par la relation d'Einstein.

$$\mu_i = \frac{36}{\sqrt{\alpha_n m_r}} \cdot \frac{2.69 \times 10^{25}}{N} \quad (\text{IV-24})$$

$$\frac{D_i}{\mu_i} = \frac{k_B T_i}{q_i}$$

où  $N$  est la densité du gaz exprimé en  $[\text{m}^{-3}]$ ,  $q_i$  est la charge de l'ion,  $\mu_i$  est la mobilité exprimé en  $[\text{cm}^2 \text{V}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}]$ ,  $m_r$  est la masse réduite ion-neutre donnée en unité a.u.m,  $\alpha_n$  est la polarisabilité en fonction  $a_0^3$  ( $a_0$  est le rayon de Bohr),  $D_i$  est le coefficient de diffusion ionique,  $k_B$  est la constante du Boltzmann, et  $T_i$  est la température ionique. Le coefficient de diffusion des particules excitées est calculée en tenant compte un potentiel d'interaction de type *Lennard-Jones* [20].

$$D_* = 0.0018583 \sqrt{\frac{T^3}{m_r}} \cdot \frac{1}{p \sigma_{EN}^2 \Omega_D} \quad (\text{IV-25})$$

$$\Omega_D = \frac{1.06036}{\Psi^B} + \frac{0.193}{e^{D\Psi}} + \frac{1.03587}{e^{F\Psi}} + \frac{1.76464}{e^{H\Psi}}$$

$$\sigma_{EN} = \frac{\sigma_E + \sigma_N}{2}, \Psi = \frac{T_g}{\varepsilon_{EN}}, \varepsilon_{EN} = \sqrt{\varepsilon_E \varepsilon_N}$$

où  $T$  et  $p$  sont la température du gaz (en K) et la pression (en atm),  $m_r$  est la masse réduite (en kg),  $(\sigma_E, \varepsilon_E)$  et  $(\sigma_N, \varepsilon_N)$  sont respectivement les paramètres du potentiel de *Leonard-Jones* de la particule excité  $E$  et de la particule à l'état fondamental  $N$ .  $B=0.15610$ ,  $D=0.47635$ ,  $F=1.52996$ , and  $H=3.89411$ . Le taux de réaction avec les parois et les électrodes peut être calculé comme suit:

$$k_* = \frac{D_*}{\Lambda^2} \quad (\text{IV-26})$$

Pour un réacteur de Rayon  $R$  et de hauteur  $L$ , la longueur de diffusion effective  $\Lambda$  peut être exprimée à partir de la relation suivante :

$$\Lambda^2 = \left[ \left( \frac{\pi}{L} \right)^2 + \left( \frac{2.405}{R} \right)^2 \right]^{-1} \quad (\text{IV-26})$$

#### IV.4. Résultats et discussion

Les résultats illustrés dans ce chapitre sont obtenus pour un mélange composé de 80% d'hydrogène et 20% d'argon. Le réacteur est alimenté par une puissance de 350 W sous une fréquence de 13.56 Mhz. Le débit de mélange est considéré fixe à 35 sccm. La Figure (IV-17)

montre la variation spatiale de la vitesse de l'écoulement du gaz dans le réacteur. Cette vitesse est obtenue par la résolution de l'équation de Navier-Stokes, elle montre clairement que la vitesse est très importante à la sortie du réacteur qu'autres région à cause de rapprochement des lignes de vitesse à la sortie. D'après la mécanique de fluide on a  $v_1 s_1 = v_2 s_2$  ( $v_i$  : est la vitesse et  $s_i$  : est la section), c.-à-d. une diminution de section implique une augmentation de la vitesse. Dans la figure (IV-18) on montre le module du potentiel magnétique crée par la bobine, le champ électrique induit par la variation temporelle de ce potentiel est la source d'énergie qui sera récupérée par les électrons pour maintenir la décharge électrique. La répartition de la température dans le réacteur est illustrée dans la figure IV-19, elle est obtenue par la résolution de l'équation de transfert de la de chaleur (Eq.IV-19). La température est très importante au centre du réacteur (environ 700 K) qu'au voisinage des parois à cause de l'échange thermique avec le milieu extérieur de température ambiante ( $T=300K$ ). Ce milieu jeu le rôle de refroidissement du réacteur. La variation spatiale du potentiel électrique est illustrée sur la figure IV-10. Contrairement au décharge à couplage capacitif où le potentiel plasma est important, dans les décharges à couplage inductif le potentiel est faible (environ 20 V dans notre cas), car ce dernier est dû principalement à la présence de la charge d'espace. Le chauffage des électrons est dû principalement au champ électrique induit par la variation temporelle du potentiel magnétique vecteur, alors il est logique que le maximum de cette température est située dans la zone où ce potentiel est important comme il est montré sur la figure IV-11. Dans les décharges à coulage inductif, la densité électronique est très supérieur à celle dans les décharges à couplage capacitif à cause du confinement des électrons par le champ magnétique, dans nos conditions elle est de l'ordre de  $1.4 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$  (voir la figure IV-12). Les densités de différents ions:  $\text{Ar}^+$ ,  $\text{ArH}^+$ ,  $\text{H}_3^+$ ,  $\text{H}_2^+$ , et  $\text{H}^+$  sont respectivement illustrées dans les figures: Fig. IV-13, Fig. IV-14, Fig. IV-15, Fig. IV-16, et Fig. IV-17. La remarque principal dans les décharges inductif est que l'ion dominant est  $\text{Ar}^+$ , et cela montre que le taux de production de cet ion est supérieur au taux de perte dû à la réaction  $\text{Ar}^+ + \text{H}_2 \Rightarrow \text{ArH}^+ + \text{H}$ . La production de métastable d'argon  $\text{Ar}^*$  est dû à l'excitation directe de l'atome d'argon par les électrons, ce qui implique qu'ils ont la même répartition spatiale (voir la figure IV-18). La figure IV-19 montre que la densité des atomes d'hydrogène est importante au voisinage des parois que dans le milieu plasma, ce qui montre que le processus de production de H par les réactions avec les parois  $\text{H}_3^+ \Rightarrow \text{H}_2 + \text{H}$ ,  $\text{ArH}^+ \Rightarrow \text{Ar} + \text{H}$ , et  $\text{H}^+ \Rightarrow \text{H}$  est plus efficace que le processus de dissociation de la molécule d'hydrogène par impact électronique.

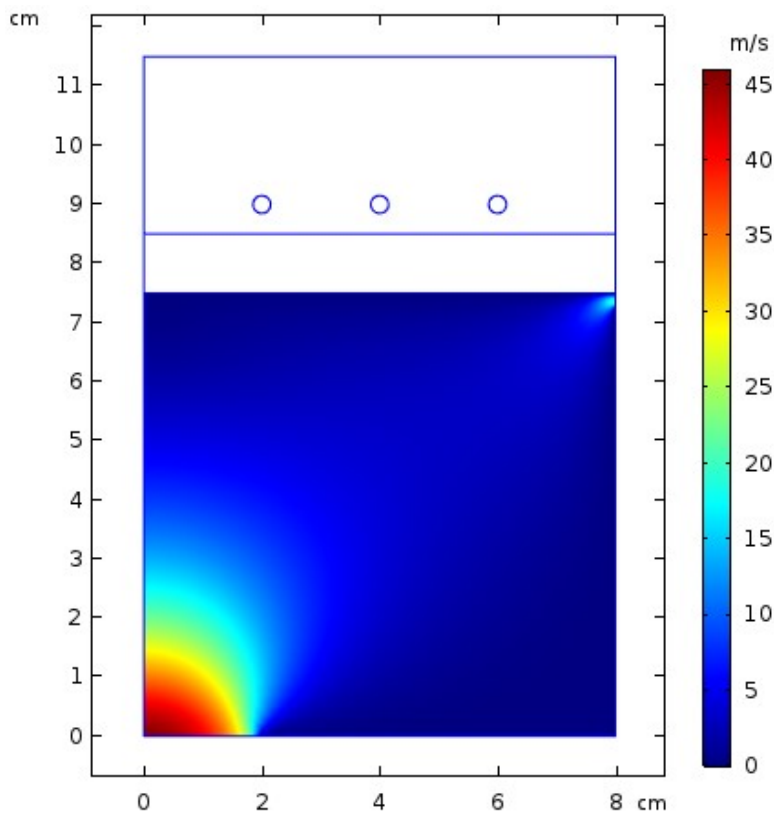


Fig. IV-7: Variation spatiale de la vitesse du gaz (unité [ $m.s^{-1}$ ])

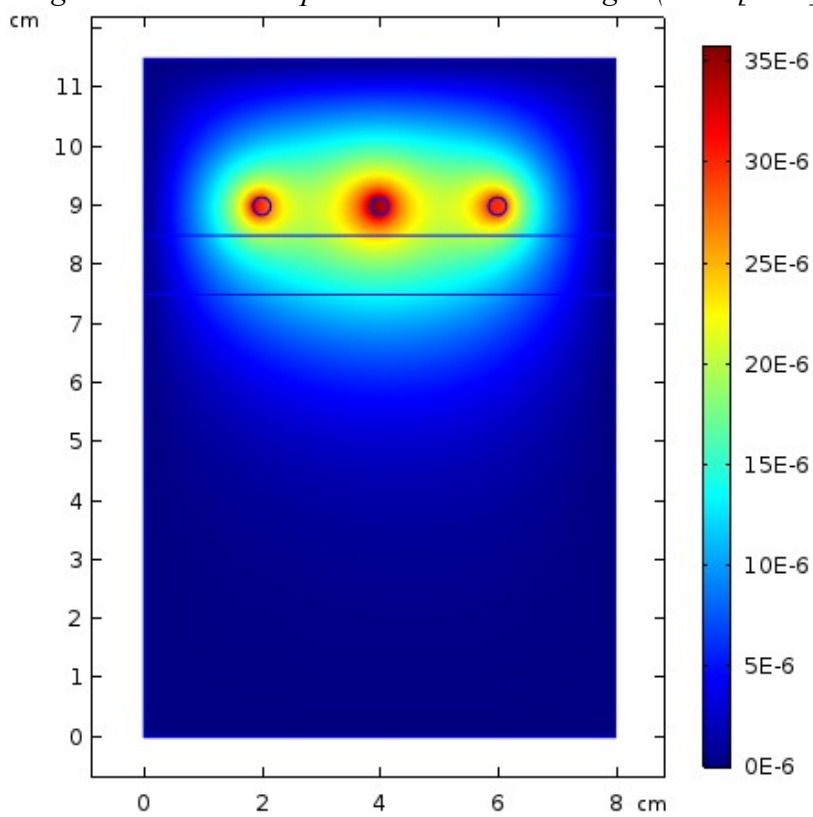


Fig. IV-8: Variation spatiale du potentiel magnétique vecteur (unité [ $V.m^{-1}.s^{-1}$ ])

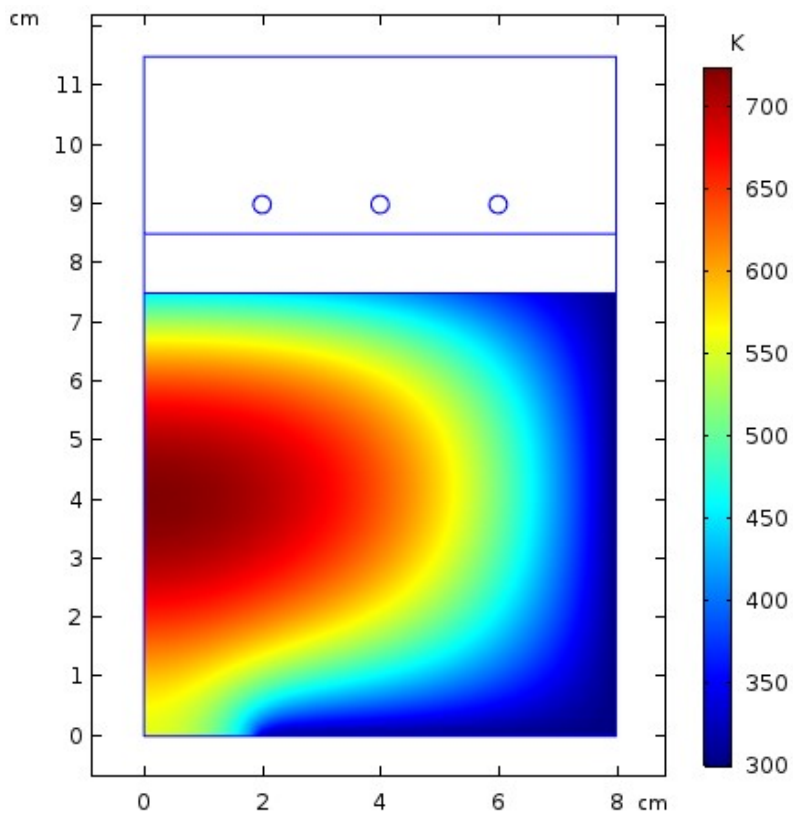


Fig. IV-9: Variation spatiale de la température du gaz (unité [K])

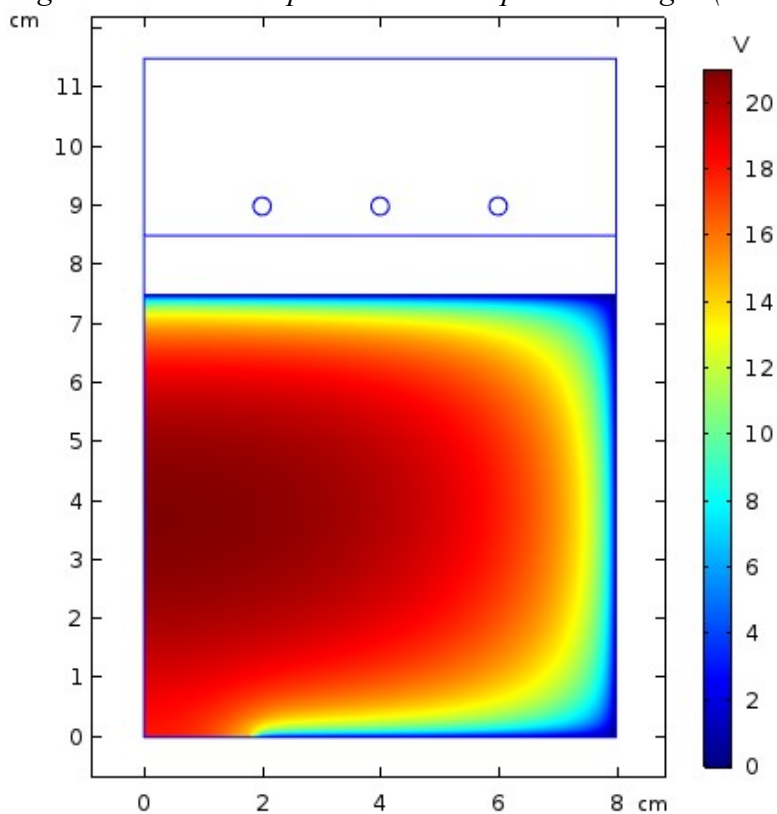


Fig. IV-10: Variation spatiale du potentiel électrique (unité [V])



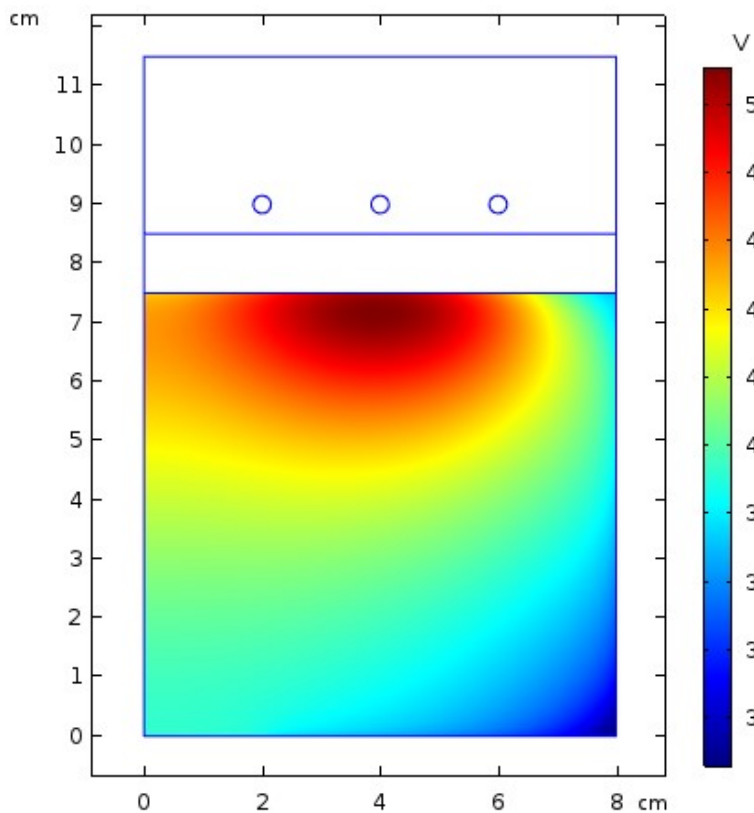


Fig. IV-11: Variation spatiale de l'énergie électronique moyenne (unité [eV])

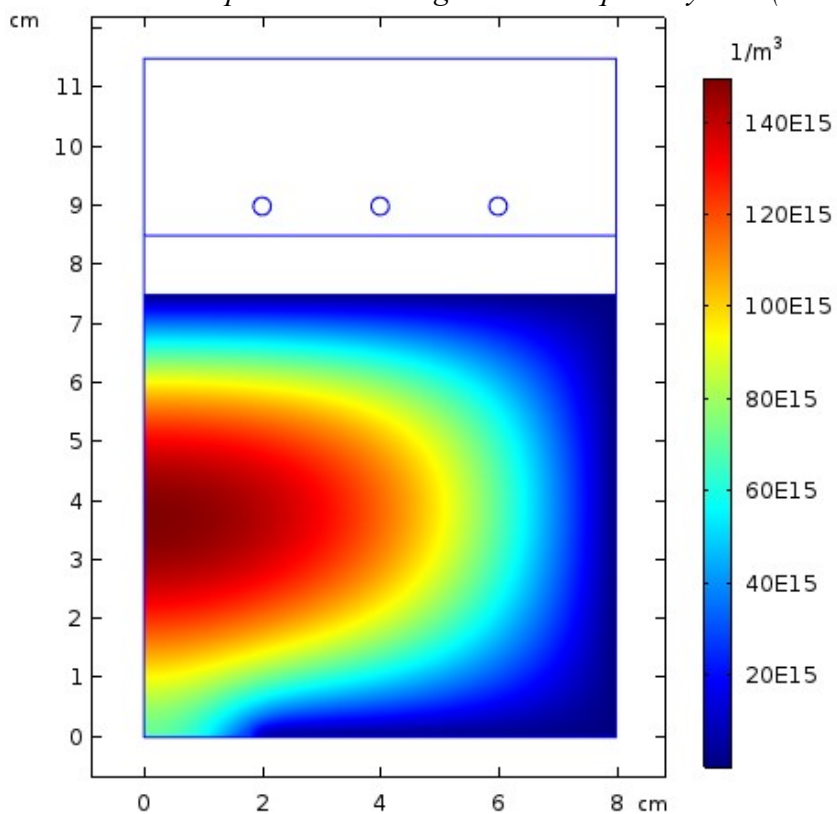


Fig. IV-12: Variation spatiale de la densité électronique (unité [ $m^{-3}$ ])

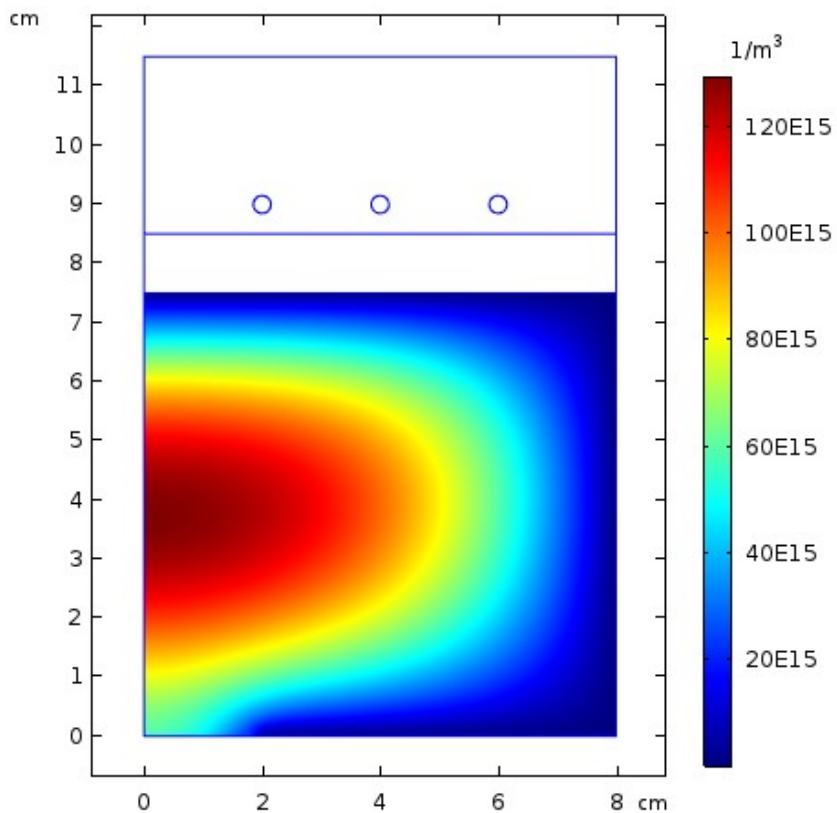


Fig. IV-13: Variation spatiale de la densité des ions  $Ar^+$  (unité [ $m^{-3}$ ])

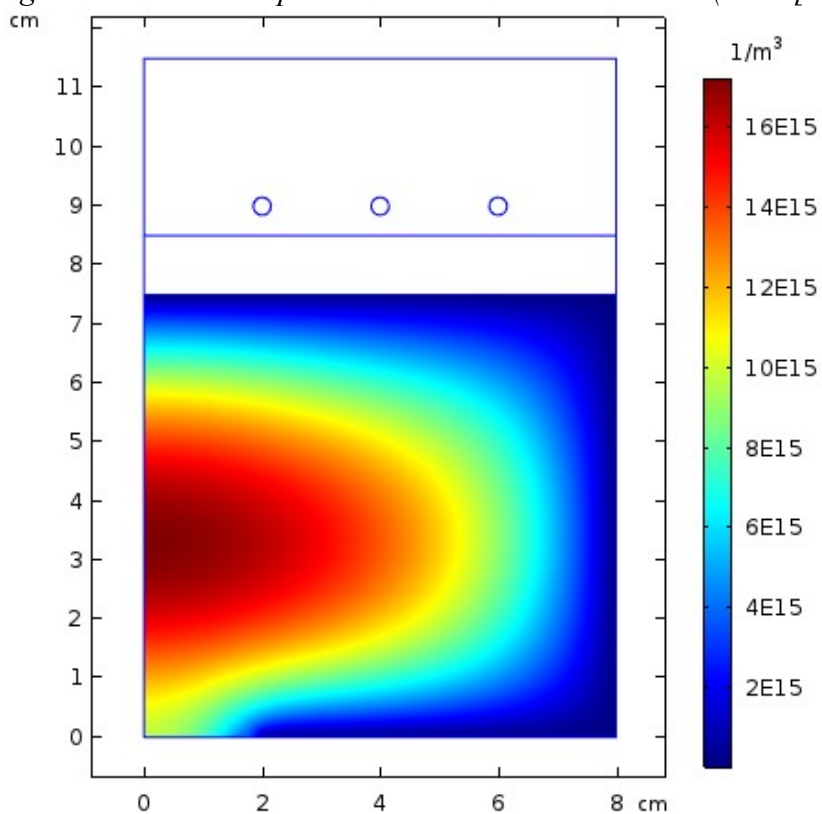


Fig. IV-14: Variation spatiale de la densité des ions  $ArH^+$  (unité [ $m^{-3}$ ])

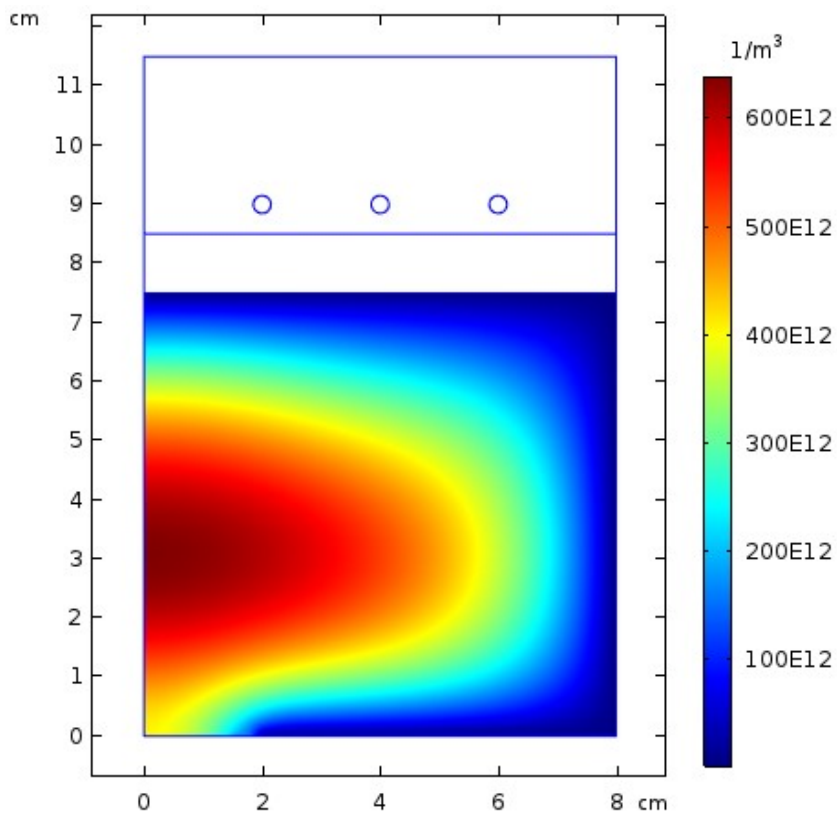


Fig. IV-15: Variation spatiale de la densité des ions  $H_3^+$  (unité [ $m^{-3}$ ])

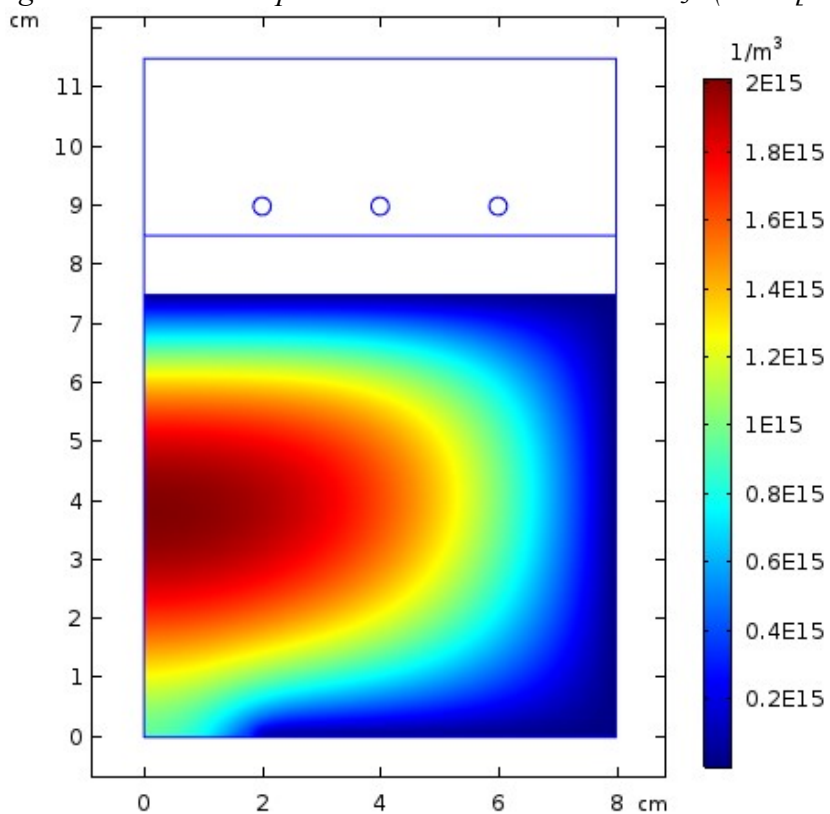


Fig. IV-16: Variation spatiale de la densité des ions  $H_2^+$  (unité [ $m^{-3}$ ])

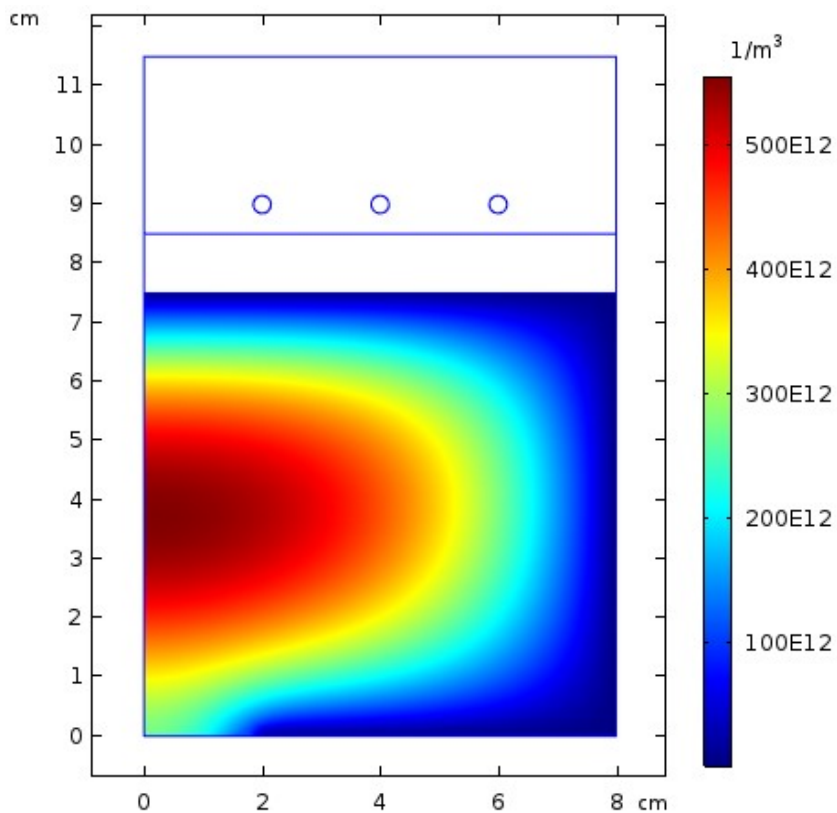


Fig. IV-17: Variation spatiale de la densité des ions H<sup>+</sup> (unité [m<sup>-3</sup>])

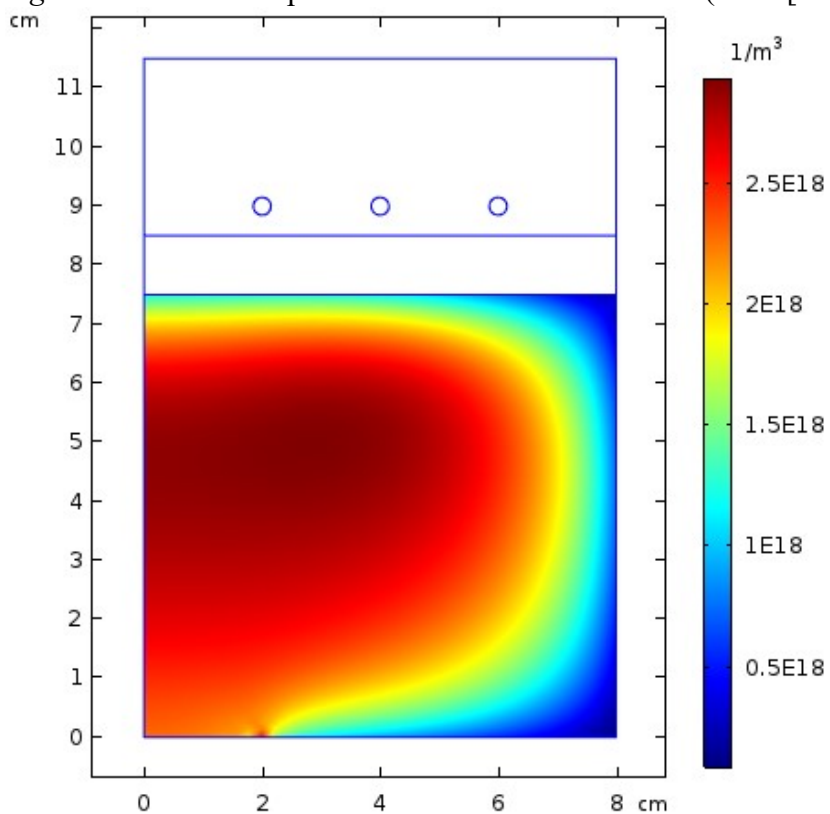


Fig. IV-18: Variation spatiale de la densité des métastable d'argon (unité [m<sup>-3</sup>])

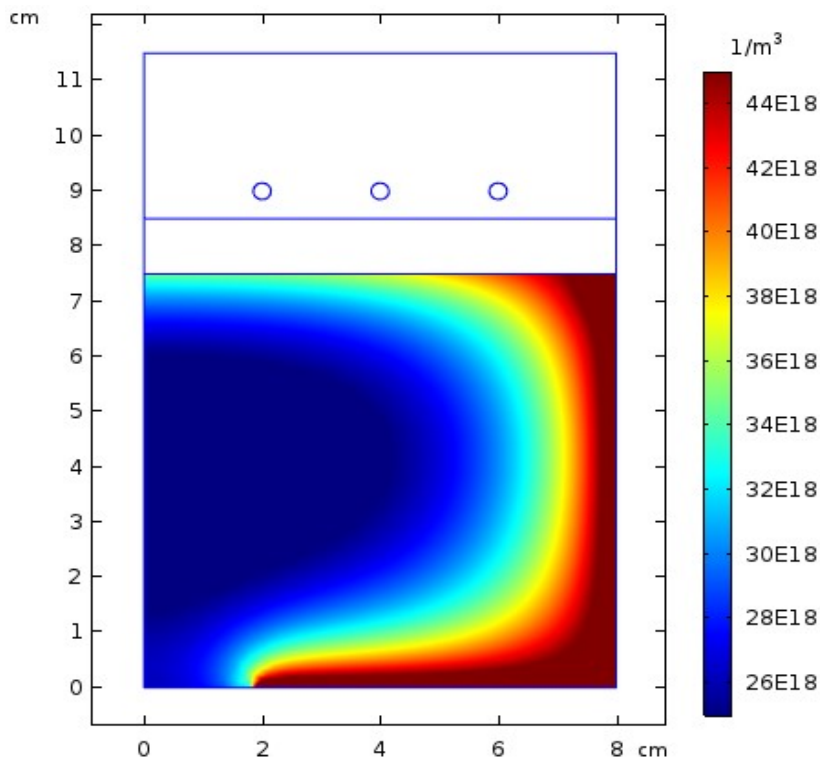


Fig. IV-19: Variation spatiale de la densité des atomes d'hydrogène (unité [ $\text{m}^{-3}$ ])

#### IV.5. Conclusion

Dans ce chapitre on a présenté le principe de fonctionnement des décharges radiofréquences à couplage inductif, où on a détaillé les différents modes de fonctionnement, mode (E) à basse puissance, mode (H) à haute puissance, et le mode intermédiaire (E-H). Pour assurer le fonctionnement inductif il faut utiliser la haute puissance, car à basse puissance le couplage devient capacitif. Les circuits électriques équivalents à chaque mode sont aussi représentés dans ce chapitre. Le modèle développé dans ce chapitre est élaboré sur Comsol qu'est basé sur la méthode des éléments finis.

Les résultats obtenus montrent que la température des plasmas à couplage inductif est très importante que ceux à couplage capacitif, mais avec un potentiel plasma très faible à cause de l'absence d'une source de potentiel, ce dernier est dû seulement à la présence de la charge d'espace. Ils montrent aussi que la densité électronique est très importante que dans les décharges à couplage capacitif, à cause du confinement des électrons par le champ magnétique. Ils montrent également que l'ion dominant est  $\text{Ar}^+$ , c.-à-d. que le taux de production de cet ion est supérieur au taux de perte dû à la réaction  $\text{Ar}^+ + \text{H}_2 \Rightarrow \text{ArH}^+ + \text{H}$ .

### Références de chapitre IV

- [1] A. M. Pointu, J. Perrin, J. Jolly, "Plasmas froids de décharge. Applications et diagnostic," *Technique de l'ingénieur*, D 2 835.
- [2] M. Mao, A. Bogaerts, "Investigating the plasma chemistry for the synthesis of carbon nanotubes/nanofibres in an inductively coupled plasma enhanced CVD system: the effect of different gas mixtures," *J. Phys. D: Appl. Phys.*, vol. 43, no. 20, p. 205201, 2010.
- [3] T. Okumura, "Inductively-coupled plasma sources and applications," *Physics Research International*, vol. 2010, 2011.
- [4] S. Takechi, S. Shinohara, "Role of electron thermal motion in evanescent electromagnetic wave structure of inductively coupled plasma," *Japanese journal of applied physics*, vol. 38, no. 2A, p. L148, 1999.
- [5] A. M. Pointu, J. Perrin, J. Jolly, "Plasmas froids de décharge. Applications et diagnostic," *Technique de l'ingénieur*, D 2 835.
- [6] M. A. Lieberman, A. J. Lichtenberg, "Principles of plasma discharges and materials processing," John Wiley & Sons, 2005.
- [7] Yang, Suidong, "Diagnostics and modelling of an inductively coupled RF low-pressure low-temperature plasma," PhD thesis, The Open University, 1998.
- [8] D. Herrebout, A. Bogaerts, M. Yan, and R. Gijbels, "One-dimensional fluid model for an rf methane plasma of interest in deposition of diamond-like carbon layers," *J. Phys. D: Appl. Phys.*, vol. 90, no. 2, pp. 570-579, 2001.
- [9] D. J. Economou, "Modeling and simulation of plasma etching reactors for microelectronics," *Thin Solid Films*, vol. 365, no. 2, pp. 348-367, 2000.
- [10] N. Plihon, "Stabilité et Structure Électronique d'une Décharge Inductive En Gaz Électronégatif," Thèse de Doctorat de l'École Polytechnique, France, 2006.
- [11] T. Kimura and K. Ohe, "Pressure dependences of electron energy distribution and power dissipation in symmetrical RF helium discharges," *Journal of Physics D: Appl. Phys.*, vol. 27, no. 7, p. 1465, 1994.
- [12] E. Despiau-Pujo, "Gravure des semi-conducteurs III-V par plasmas inductifs chlorés," thèse de l'école Polytechnique de Paris, 2009.
- [13] Pascal Chabert and Nicholas Braithwaite, "Physics Of Radio-Frequency Plasmas," Cambridge University Press, 2011.

- [14] P. Chabert, J.-L. Raimbault, P. Levif, and J.M. Rax, M. A. Lieberman, "Inductive Heating and E to H Transitions in Capacitive Discharges," *Physical review letters*, vol. 95, no. 20, p. 205001, 2005.
- [15] S. V. Singh, « Investigation of ICP RF discharges by means of a Langmuir probe », these Université de Bochum, 2004.
- [16] V. Raballand, "Gravure en plasma dense fluorocarbène de matériaux organosiliciés à faible constante diélectrique (SiOCH, SiOCH poreux). Etude d'un procédé de polarisation pulsée," thèse de Doctorat de l'université de Nantes, 2006.
- [17] G. Franz, "Low Pressure Plasmas and Microstructuring Technology," ISBN 978-3540-85848-5, Springer Dordrecht Heidelberg London New York, 2009.
- [18] C. Jia *et al.*, "Two-dimensional simulation of inductively coupled plasma based on COMSOL and comparison with experimental data," *Journal of Semiconductors*, vol.34, no.6, p. 066004, 2013.
- [19] B. M. Smirnov, Theory of gas discharge plasma, vol. 84. Cham: Springer, 2015.
- [20] Dias, António Miguel da Cruz Baptista, "Modeling of Low Pressure Plasmas in CH<sub>4</sub>-H<sub>2</sub> Mixtures," Master, Université de Lisbonne, 2012.

# **CONCLUSION GENERALE**



### Conclusion générale

L'objectif principal de cette thèse consiste à élaborer un modèle numérique qui permet la simulation de la répartition des différentes particules chargées (électrons, ions positifs et espèces neutres (métastables), du potentiel et du champ électrique et/ou magnétique le taux de réaction au sein d'un réacteur plasma froid hors équilibre thermodynamique crée par une décharge radiofréquence à couplage capacitif et à couplage inductif dans le mélange Hydrogène/gaz rare, où le gaz rare utilisé est l'argon.

Dans ce travail, Le modèle de simulation utilisé pour décrire le comportement du plasma est de type fluide auto-cohérent, il est basé sur la résolution des trois premiers moments de l'équation de Boltzmann, qui sont: les équations de continuité, de transfert de la quantité de mouvement, et l'équation d'énergie d'électrons. Ces moments sont couplés seulement avec l'équation de Poisson dans le cas d'une décharge radiofréquence unidimensionnelle (chapitre III) à couplage capacitif. Dans le cas d'une décharge radiofréquence bidimensionnelle (chapitre IV) à couplage inductif, en plus de l'équation de Poisson ils sont couplés avec les équations de Maxwell pour calculer le champ électrique induit par la variation temporelle du potentiel magnétique vecteur, avec l'équation de Navier-Stokes pour calculer la répartition de la vitesse du mélange dans le réacteur et par suite répartition du pression, et avec l'équation de chaleur pour calculer la distribution de la température du gaz. Cette dernière influe sur le comportement de la décharge à travers deux mécanismes; le premier mécanisme est l'effet de la température sur la distribution de la densité des neutres, et par suite le nombre de collision, le deuxième mécanisme est l'effet direct de la température sur les taux de réactions. Le modèle est élaboré sur l'environnement du logiciel Comsol Multiphysics qui se base sur la méthode des éléments finis pour la résolution de ces équations aux dérivées partielles.

Ce logiciel a l'avantage d'introduire les coefficients de transport et les taux des réactions électroniques sous forme des formules Amériques ou sous forme des tableaux en fonction du champ réduit ou de la température électronique, et ainsi d'introduire les coefficients de transports ionique soit sous forme des formules Amériques soit sous forme des tableaux en fonction du champ réduit ou la température ionique.

Dans les décharges électriques, les électrons ont l'effet majeur sur le comportement du plasma, donc le bon choix des coefficients de transport électronique est très important pour avoir des bons résultats de simulation. Pour ce but, on a réservé le chapitre II pour le calcul et la validation des coefficients de transport dans le cas d'Hydrogène et différents gaz rares, comme on a montré aussi à partir de la courbe de Paschen que parmi tous les gaz rares, l'argon est le gaz le plus répandu aux conditions optimales de décharge.

Les résultats de simulation obtenus dans le cas d'une décharge radiofréquence à couplage capacitif montrent que pour l'Hydrogène pur (0% d'Argon), les ions dominants sont les  $H_3^+$  où la quasi-totalité des ions  $H_2^+$  qui sont produits essentiellement par l'ionisation directe de la molécule d'hydrogène se transforment en  $H_3^+$  à travers la réaction  $H_2^+ + H_2 \Rightarrow H_3^+ + H$ . Les résultats montrent aussi que dans le mélange argon/hydrogène et qu'à partir de 60% d'argon, les ions dominants sont les  $ArH^+$  qu'ils sont produits essentiellement par la réaction  $Ar^+ + H_2 \Rightarrow ArH^+ + H$ . Ces ions restent dominants jusqu'au presque à 100% d'argon où l'ion unique est le  $Ar^+$ . Avec l'augmentation du pourcentage d'argon dans le mélange, la densité des atomes d'hydrogène qui sont produits par les collisions électroniques avec la molécule d'hydrogène diminue presque linéairement, par contre la densité des métastables d'Argon augmente d'une manière exponentielle à partir de 80% d'Argon.

Dans le cas d'une décharge radiofréquence dans le mélange 80% $H_2$ /20% $Ar$  pour une géométrie cylindrique (2D à cause de la symétrie de révolution), les résultats montrent que la température des plasmas à couplage inductif est très importante que ceux à couplage capacitif, mais avec un potentiel plasma très faible à cause de l'absence d'une source de potentiel, où ce dernier est dû seulement à la présence de la charge d'espace. Ils montrent aussi que la densité électronique est très importante que dans les décharges à couplage capacitif, à cause du confinement des électrons par le champ magnétique, comme ils montrent que l'ion dominant est  $Ar^+$ , c.-à-d. que le taux de production de cet ion est supérieur au taux de perte dû à la réaction  $Ar^+ + H_2 \Rightarrow ArH^+ + H$ .