

جامعة قاصدي مرباح ورقلة

كلية الرياضيات وعلوم المادة

قسم الفيزياء



مذكرة

ماستر أكاديمي

مجال: علوم المادة

فرع: فيزياء

تخصص: فيزياء الإشعاعات

من إعداد الطالبتين:

رحيم نجاة طاجين شمس الضحى

بعنوان:

حساب تراكيز الجسيمات المحايدة والأيونات لخليط الغاز  
 $SiH_4/O_2$  في البلازما المقترنة بالحث (ICP)

نوقشت بتاريخ:

2022/06/16

أمام أعضاء لجنة المناقشة المكونة من:

رئيسا	جامعة ورقلة	أستاذ محاضر (ب)	لمقدم سومية
ممتحنا	جامعة ورقلة	أستاذ محاضر (ب)	بله زكية
مشرفا	جامعة ورقلة	أستاذ تعليم عال	خلفاوي فتحي

الموسم الجامعي: 2022/2021



## اهداء

إلى من رضاهما غايتي وطموحي واللدان علماني  
كيف يكون الصبر طريقا للنجاح هما السند والقُدوة  
والداي أطال الله في عمرهما وحفظهما لي يارب.  
رفقاء البيت الطاهر الأنيق أشقائي مصطفى، مراد،  
ياسين، عبد الغفور، رضوان، عادل وشقيقاتي لبني  
وزكية وأولاد أختي عبد البصير، إسحاق، عبد الجواد،  
شهرة زاد حفظهم الله ورعاهم،  
والى كل الأشخاص الذين أحمل لهم المحبة والتقدير  
والى كل العائلة كبيرا وصغيرا.

نجاة رحيم






## اهداء

الحمد لله الحمد لله احمده وأشكره كثيرا على توفيقى  
في مسيرتي الدراسية، وأشكر كل من كان له  
يد في مشاركتي، أبدأ بوالداي أبي أهدي لك هذه الشهادة  
لأنك دعمتني معنويا وماديا كثيرا، أمي بفضل دعائك  
ورضائك الدائم ماكنت نجحت والى أخواتي طه بدر الكمال،  
زينة الحياة، قصي، وأتمنى أن يسيرو على مساري والى  
رفيق دربي الذي دعمني وساندني  
والى أعز صديقاتي أمنية خرفي، رحمة لبسيس  
والى كل افراد عائلتي كبيرا وصغير

طاجين شمس الضحى



## كلمة شكر والتقدير

الحمد لله الذي بنعمته تتم الصالحات والصلاة والسلام على رسوله الكريم

ومن تبعه بإحسان إلى يوم الدين. نشكر رب العباد العلي القدير شكرا جزيلًا

طيبًا مباركا فيه الذي أنارنا بالعلم، وأكرمنا بالتقوى، وأنعم علينا بالعافية،

وأناز طريقنا ووقفنا وأعاننا في إتمام هذه الدراسة وتقديمها على الشكل

الذي هي عليه اليوم، له الحمد والشكر وهو الرحمان المستعان.

نتقدم بجزيل الشكر والتقدير والعرفان للأستاذ الدكتور فتحى خلفاوي على إشرافه

على هذا العمل، فله أخلص التحية وأعظم التقدير على كل ما قدمه لنا من توجيهات

وإرشادات وعلى كل ما خصنا به من جهد ووقت طوال إشرافه على هذه الدراسة.

كما نتقدم بالامتنان والعرفان للأساتذة الكرام أعضاء لجنة المناقشة الموقرة

نشكر الأستاذة لمقدم سومية أستاذة محاضرة (ب) بجامعة قاصدي مرباح ورقلة

لقبولها مناقشة المذكرة. كما لا ننسى أن نتقدم بجزيل الشكر للأستاذة بلة زكية أستاذة محاضرة (ب)

بجامعة قاصدي مرباح ورقلة.

نتقدم أيضا بكلمة شكر وامتنان إلى كل أعضاء فرق البحث بمخبر الاشعاع

والبلازما وفيزياء السطوح بقسم الفيزياء كلية الرياضيات وعلوم المادة جامعة

قاصدي مرباح ورقلة. كما لانسى أن نشكر فريق المتواجد في الحاضنة الجامعية

والى كل من ساهم ومد لنا العون حتى و لو بكلمة

و الى كل من ساهم في إنجاز هذا العمل المتواضع، جزاهم الله خير الجزاء

إلى كل هؤلاء نقول شكرا جزيلًا لكم

## فهرس المحتويات

i	الإهداء .....
ii	التشكرات.....
V	فهرس المحتويات .....
viii	قائمة الأشكال والجداول .....
1	المقدمة العامة.....
<b>الفصل الأول: عموميات حول البلازما المقترنة بالحث ICP.</b>	
3	1 نظرة عامة حول البلازما وخصائصها .....
3	1.1 تعريف البلازما .....
3	2.1 تعريف البلازما الباردة.....
4	3.1 درجة التأين .....
4	4.1 درجة حرارة الالكترن .....
5	5.1 تعريف ببعض المقادير الفيزيائية.....
5	1.5.1 ردد البلازما .....
6	2.5.1 طول ديبيي.....
6	3.5.1 توزيع الجسيمات داخل البلازما .....
7	6.1 طرق توضع الطبقة الرقيقة .....
8	1.6.1 التوضع الكيميائي في الطور البخاري CVD .....
9	2.6.1 التوضع الفيزيائي في الطور البخاري PVD .....
10	7.1 البلازما المقترنة بالحث ICP .....
10	1.7.1 تعريف البلازما المقترنة بالحث ICP .....
10	2.7.1 مبدأ البلازما المقترنة بالحث ICP .....
11	3.7.1 تطور البلازما المقترنة بالحث ICP .....
12	8.1 نموذج الموائع .....
12	9.1 المعدلات الاساسية لنموذج الموائع .....

12	1.9.1 معادلة الاستمرارية .....
13	2.9.1 معادلة كمية الحركة .....
13	4.9.1 معادلة الطاقة .....
14	5.9.1 معادلة بواسون.....
<b>الفصل الثاني: نمذجة حساب تراكيز الجسيمات الحياضية والايونات في المفاعل ICP.</b>	
16	1 المقدمة .....
16	2. الظاهرة الفيزيائية.....
17	3 النموذج الرياضي .....
18	1.3 معادلة الاستمرارية .....
19	2.3 التفاعلات الكيميائية للجسيمات الحياضية والايونات .....
24	3.3 معامل الانتشار الثنائي $D_{ij}$ .....
25	4.3 معامل الانتشار $D_j$ .....
26	5.3 معامل الحركة للايونات .....
27	6.3 معامل الانتشار للايونات $D_j$ .....
28	4. النموذج العددي.....
28	1.4 المعدلات الاساسية لحساب تراكيز الجسيمات الحياضية والايونات .....
29	2.4 حساب كثافة الجسيمات الحياضية والايونات .....
29	1.2.4 حساب كثافة الجسيمات الحياضية .....
30	2.2.4 حساب كثافة الايونات .....
30	3.2.4 الشروط الحدية .....
31	4.2.4 الطريقة العددية لحل المصفوفة .....
32	3.4 التراكيز الاولية للجسيمات الحياضية والايونات .....

## الفصل الثالث: النتائج العددية ومناقشتها

38	.....مقدمة.
39	..... 2 درجة حرارة الغاز، الكثافة الالكترونية ودرجة حرارة الالكترونات
39	..... 1.2 درجة حرارة الغاز داخل البلازما المقترنة بالحث (ICP)
40	..... 2.2 الكثافة الالكترونات $n_e$ داخل البلازما المقترنة بالحث (ICP)
42	..... 3.2 درجة حرارة الالكترونات داخل البلازما المقترنة بالحث (ICP)
43	..... 3. معاملات ثابت التفاعلات الكيميائية مع الموضع $Z$
43	..... 4. حساب نسبة التراكيز الاولية لبعض الجسيمات داخل المفاعل
44	..... 5. حساب تراكيز بعض الجسيمات حسب عدد العمليات التكرارية
47	..... 6. تراكيز النهائية لبعض الجسيمات الحيادية
55	..... 7. تراكيز بعض الايونات
61	..... الخلاصة العامة والافاق
63	..... قائمة المراجع

## قائمة الأشكال والجداول

### قائمة الأشكال

الفصل الأول	
8	الشكل 1.1: مخطط بعض الطرق الفيزيائية والكيميائية لتوضع الطبقات .
11	الشكل 2.1: المجال المغناطيسي لترددات في المجال B والمجال الكهربائي لترددات الراديوية .
الفصل الثاني	
17	الشكل 1.2: مخطط لمفاعل ICP
33	الشكل 2.2: المنحنيات التراكيز للجسيمات الحياضية والأيونات لعمل المرجع [1].
36	الشكل 3.2: مخطط البرنامج العددي

الفصل الثالث	
39	الشكل 1.3(A): منحنى تغير درجة حرارة الغاز بدلالة البعد Z.
40	الشكل 1.3(B): منحنى تقارب كثير حدود لتغير درجة حرارة الغاز بدلالة البعد Z
41	الشكل 2.3(A): منحنى تغير الكثافة الالكترونية بدلالة البعد Z
41	الشكل 2.3(B): منحنى تقارب كثير حدود لتغير الكثافة الالكترونية بدلالة البعد Z
42	الشكل 3.3(A): منحنى تغير درجة الحرارة الالكترونية بدلالة البعد Z
42	الشكل 3.3(B): منحنى تقارب كثير حدود لتغير درجة حرارة الالكترونية بدلالة البعد Z
43	الشكل 4.3: معامل ثابت التفاعل الكيميائي $K_{reac}(19)$ بدلالة البعد Z
45	الشكل 5.3: منحنى تركيز $SiO_2$ غوص صايدل باستعمال طريقة التكرارية



45	الشكل 6.3: منحني تركيز H <sub>2</sub> غوص صايدل باستعمال طريقة التكرارية
46	الشكل 7.3: منحني تركيز SiH <sub>4</sub> غوص صايدل باستعمال طريقة التكرارية
46	الشكل 8.3: منحني تركيز O <sub>2</sub> غوص صايدل باستعمال طريقة التكرارية
47	الشكل 9.3: منحني تركيز الجذر SiH <sub>3</sub> بدلالة البعد z
48	الشكل 10.3: منحني تركيز الجذر SiH <sub>2</sub> بدلالة البعد z.
48	الشكل 11.3: منحني تركيز الجذر SiH بدلالة البعد z
49	الشكل 12.3: منحني تركيز الجذر SiH <sub>3</sub> O بدلالة البعد z
49	الشكل 13.3: منحني تركيز الجذر SiH <sub>2</sub> O بدلالة البعد z
50	الشكل 14.3: منحني تركيز الجذر SiHO بدلالة البعد z
50	الشكل 15.3: منحني تركيز الجذر SiO بدلالة البعد z
51	الشكل 16.3: منحني تركيز الجذر SiO <sub>2</sub> بدلالة البعد z
51	الشكل 17.3: منحني تركيز الجذر H <sub>2</sub> بدلالة البعد z
52	الشكل 18.3: منحني تركيز الجذر H بدلالة البعد z
52	الشكل 19.3: منحني تركيز الجذر SiH <sub>4</sub> بدلالة البعد z
53	الشكل 20.3: منحني تركيز الجذر O <sub>2</sub> بدلالة البعد z
56	الشكل 21.3: منحني تركيز الجذر SiH <sup>+</sup> بدلالة البعد z
57	الشكل 22.3: منحني تركيز الجذر SiH <sup>+</sup> بدلالة البعد z
57	الشكل 23.3: منحني تركيز الجذر Si <sup>+</sup> بدلالة البعد z
58	الشكل 24.3: منحني تركيز الجذر Si <sub>2</sub> H <sup>+</sup> بدلالة البعد z

## قائمة الجداول:

الفصل الثاني	
20	الجدول 1.2: التفاعلات الكيميائية وثوابت التفاعلات الكيميائية
25	الجدول 2.2: معاملات لينارد جونز لجميع الأنواع الموصوفة في النموذج.
27	الجدول 3.2: القيم العددية لثابت الاستقطاب للجسيمات الحيادية
33	الجدول 4.2: القيم التقديرية لتراكيز الجسيمات المستعملة في البرنامج العددي.
الفصل الثالث	
44	الجدول 1.3: بعض نسب التراكيز الأولية للجسيمات الحيادية
53	الجدول 2.3: ملاحظات منحنيات التراكيز الجزيئات والجذور
58	الجدول 3.3: ملاحظات منحنيات التراكيز الايونات

الْحَمْدُ لِلَّهِ الْمَلِكِ

## المقدمة العامة

ان للأغشية الرقيقة أثرا مهما في بحوث فيزياء الحالة الصلبة، إذ أن دراسة صفات المادة وهي على شكل أغشية رقيقة أثارت انتباه الفيزيائيين منذ النصف الثاني من القرن السابع عشر حيث أجريت العديد من البحوث في هذا المجال، ويطلق هذا الاسم لوصف طبقة أو عدة طبقات من ذرات المادة لا يتجاوز سمكها ميكرونا واحد.

دراسة الأغشية الرقيقة المباشرة وغير مباشرة فتحت مجالات عديدة من البحث العلمي في فيزياء الحالة الصلبة، والتي تقوم على ظواهر فريدة كسمك والشكل والتركيب لهذه الأغشية.

للحصول على ترسيب الأغشية الرقيقة يمكن أن نعتمد على طريقتي:

- الطور الكيميائي (ترسيب في الطور البخاري الكيميائي CVD).
- الطور الفيزيائي (ترسيب في الطور البخاري الفيزيائي PVD)

ويعد الترسيب في طور الكيميائي من أهم الطرق المستخدمة والمعروفة لترسيب الأغشية الرقيقة؛ وقد

نستعمل فيها وعلى وجه التحديد البلازما المقترنة بالحث *Inductively Coupled Plasma* (ICP)

سنهتم في عملنا هذا بحساب تراكيز الجسيمات الحياضية والأيونات المختلفة لخليط الغاز

(SiH<sub>4</sub>/O<sub>2</sub>) بجوار المحور في مفاعل أسطواني ثنائي البعد في البلازما المقترنة بالحث. نعتمد في عملنا على

بيانات أعمال [1] في الظروف الفيزيائية (S. (T<sub>gaz</sub>=380K , T<sub>e</sub>=4eV, P<sub>gaz</sub>=10mTorr) [1]

Tinck and A. Bogaerts(2012) حيث قاما بدراسة خصائص الغاز (SiH<sub>4</sub>/O<sub>2</sub>/Ar) في

البلازما المقترنة بالحث (ICP)، وكيف تتفاعل مع الركيزة من السيليكون (رقاقة) حيث أنه من أكثر أنواع

إستعمالا في الأغشية الرقيقة.

ويندرج هذا العمل ضمن محاور نشاطات مخبر الإشعاع والبلازما وفيزياء السطوح، وهو مواصلة

لعمل مذكرة الماستر للطالبة A.Bahaz (2021)[2]. إكتفت الطالبة بهاز بحساب تراكيز الجسيمات

الحيادية لخليط الغاز ( $\text{SiH}_4/\text{O}_2$ ).

يتلخص عمل هذه المذكرة في ثلاث فصول وخلاصة عامة:

- الفصل الأول نقدم فيه عموميات حول البلازما من مفاهيم ومقادير فيزيائية وتطرقنا الى تقنية توضع الطبقات الرقيقة، وأيضاً مفهوم ومبدأ البلازما المقترنة بالحث (ICP)، والمعادلات الأساسية لنموذج الموائع.
- في الفصل الثاني نذكر بالظاهرة الفيزيائية للمفاعل ونقوم فيه باختيار المعادلة الأولى لنموذج الموائع وهي المعادلة الاستمرارية؛ ثم نقدم أهم المعادلات والخطوات للمعالجة الرياضية والعديدية المستخدمة في حساب تراكيز الجسيمات الحيادية والأيونات في المفاعل.
- الفصل الثالث والأخير نقدم فيه أهم النتائج المتحصل عليها من الحساب باستخدام برنامج الحساب العددي بلغة Fortran77، ونبين فيه تأثير الشروط الحدية والحلول الابتدائية على تقارب الحلول.
- تختتم المذكرة بخلاصة عامة حول مختلف النتائج وآفاق مقترحة.

# **الفصل الأول:**

**عموميات حول البلازما المقترنة  
بالحث. ICP**

## الفصل الأول:

### عموميات حول البلازما المقترنة بالحث (ICP)

#### 1. نظرة عامة حول البلازما وخصائصها

##### 1.1. تعريف البلازما [5,4,3]

تشتهر المادة بحالاتها الثلاثة صلبة وسائلة وغازية في درجة حرارتها العادية، وهذا لا يمنع لوجود الحالة الرابعة للمادة، والتي اكتشفت في العقود الأخيرة إلا أنها تشكل في الواقع أكثر حالات المادة شيوعاً في الكون، حيث تم إدخالها في العلم الفيزيائي من العالم الأمريكي I.Langmuir سنة 1928. وهي عبارة عن الحالة الأيونية للمادة، و تكون في درجة حرارة عالية من التأين، حيث تكون نسبة عالية من الذرات المادة الموجودة بشكل ايونات موجبة مع الالكترونات السالبة منفصلة عنها، ويمكن ان تتكون البلازما في الحالات الاخرى مثل: الحالة الصلبة (أشباه الموصلات)، السائلة (محاليل الكترولينية)، والغازية (طبقة الايونوسفير).

##### 1.2. تعريف البلازما الباردة [4,5,7,6]

البلازما الباردة أو البلازما الخارجة عن التوازن الديناميكي الحراري، والتي تنشأ عن طريق التفريغ الكهربائي بواسطة تيار مستمر (DC)، أو الأمواج الراديوية، أو يتم الحصول عليها أيضاً في المفاعلات البلازما، حيث تكون البلازما محصورة مغناطيسياً أو عن طريق الاقتران الاستقرائي مع النظام. وغالبا ما تكون متأينة جزئياً (ضعيفة التأين) بين  $10^{-6}$  و  $10^{-4}$  وتتراوح درجة حرارتها بين مئات إلى عدة آلاف من الدرجات المئوية وبطاقة حركية مقدارها (1eV). ويطلق عليها اسم التفريغ في الغازات وهي النوع المستخدم في اغلب البحوث العلمية.

### 3.1. درجة التأين [8]

تمثل درجة التأين إحدى معايير تصنيف البلازما، وتعرف بأنها النسبة بين كثافة الجسيمات

المشحونة (الكاتونات، ايونات) والكثافة الكلية للبلازما وتعطي بالعلاقة الآتية:

$$\alpha = \frac{n_{e.i}}{n_{e.i} + n_N}$$

$n_{e.i}$ : الكثافة العددية للجسيمات المشحونة (الكاتونات، ايونات)

$n_N$ : الكثافة العددية للجسيمات المحايدة

بما أن درجة التأين في الغازات الضعيفة تتراوح بين  $10^{-6}$  و  $10^{-4}$  تحقق العلاقة التالية  $\alpha < \alpha_0$

$\alpha_0$ : القيمة الحرجة لدرجة التأين، بحيث تظهر أفعال البلازما

### 1. 4. درجة الحرارة الإلكترونية والأيونية [8]

تأخذ درجة الحرارة الإلكترونية  $T_e$  دوراً هاماً في تحديد الظواهر التي تحدث في البلازما مقترنة

بدرجة حرارة الجسيمات الأخرى (الايونات، الجسيمات المحايدة)، التي تقارب درجة حرارة الغرفة نظراً

لكثافتهما المتقاربة، وتكون الطاقة الحركية المتوسطة للجسيمات مع طاقة التحريض الحراري متساوية في

نظام متوازن ترموديناميكي حيث درجة حرارة الإلكترونات تحقق المعادلة الآتية:

$$E_c = \frac{1}{2} m_e \langle V \rangle^2 = \frac{2}{3} K_B T_e \quad (1.1)$$

$E_c$ : الطاقة الحركية.

$m_e$ : كتلة الإلكترون.

$V$ : سرعة الإلكترون.

$T_e$ : درجة حرارة الإلكترونات.



$K_B$ : ثابت بولتزمان.

## 1. 5. التعريف ببعض المقادير الفيزيائية في البلازما

### 1.5.1. تردد البلازما $w_{p,e,i}$ [9]

ان وجود الالكترونات ضمن المجالات الكهروستاتيكية للأيونات الموجبة في البلازما، ومن خلال حركة سيل الالكترونات والايونات، سوف يؤدي إلى حدوث اهتزازات في البلازما نتيجة لوجود القوى الكهروستاتيكية العاملة بين الشحنات الموجبة والسالبة، والتي تحاول إعادة البلازما إلى وضع الاستقرار عند التأثير بأي مؤثر يحاول الإخلال بهذا الاستقرار.

فعند تصادم الجسيمات المشحونة مع الذرات المتعادلة يؤدي الى تذبذب الجسيمات المشحونة بتردد معين، يعتمد على القوى الهيدروديناميكية والكهرومغناطيسية الموجودة. وهذا التردد يعطى بالعلاقة التالية:

$$w_{p,e,i} = \sqrt{\frac{N_{e,i} q_{e,i}^2}{m_{e,i} \epsilon_0}} \quad (2.1)$$

$$W_{pe} = 5.64 \times 10^4 \sqrt{N_e (cm^{-3})} \quad (3.1)$$

$$W_{pi} = 0.02334 \times Z^{3/2} \times W_{pe} \quad (4.1)$$

$W_p$ : تردد البلازما

$N_{e,i}$ : الكثافة الالكترونية أو الأيونية الابتدائية قبل حدوث الاضطراب

$q_e$ : شحنة الإلكترون ( $1.6 \times 10^{-19} C$ )

$q_i$ : شحنة الايون  $Z e$

$\epsilon_0$ : السماحية الكهربائية في الفراغ وتقدر ( $8.58 \times 10^{-12} F.m^{-1}$ )

$$m_e: \text{كتلة الإلكترون} (9.109 \times 10^{-31} K_g)$$

### 1. 2.5. طول ديبياي $\lambda_D$ [9]

يمثل طول ديبياي مقياس لمسافة حجب البلازما، ويعرف على أنه المسافة التي يتم من خلالها معادلة المجال الكهربائي الناتج عن الجسم المشحون بواسطة التأثير الناتج عن فصل الشحنات الموجبة والشحنات السالبة عن بعضهما.

ويعطى بالعلاقة التالية:

$$\lambda_D = \frac{\sqrt{\epsilon_0 K_B T}}{\sqrt{q_e^2 N_e}} \quad (5.1)$$

$$\lambda_D = 6.9 \sqrt{\frac{T_e(K)}{N_e(Cm^{-3})}} \quad (6.1)$$

$$V_{Debye} = \frac{q_j}{4\pi\epsilon_0 r} \exp\left(-\frac{r}{\lambda_D}\right) \quad (7.1)$$

$N_e$ : الكثافة الإلكترونية

### 1. 3.5. توزيع الجسيمات داخل البلازما [8]

يخضع توزيع كثافة الجسيمات أو ما تسمى بعدد الجسيمات  $N$  لكل صنف (أيونات، الكترولونات، الجسيمات المحايدة) المتواجدة داخل حجم معين للعبارات الإحصائية، تدعى بدوال التوزيع. تصف دوال التوزيع عدد الجسيمات في اللحظة  $t$  و الموضع بين  $r$  و  $r+dr$  حيث  $f$  دالة للزمن و الموضع و السرعة

$$f \equiv (t, r, v) \quad (8.1)$$

إذا كان الغاز في حالة الاتزان الترموديناميكي في درجة حرارة  $T$  وتفاعل بين الجسيمات مهمل أمام الطاقة الحركية، فإن الجسيمات تخضع لتوزيع ماكسويل- بولتزمان الذي يصف توزيع السرعات  $V$ ، والذي يعبر عنه بالعلاقة التالية:

$$f = \sqrt[3]{\frac{m}{2\pi K_B T}} \exp\left(-\frac{mv^2}{2K_B T}\right) \quad (9.1)$$

$m$ : كتلة الجسيم

$T$ : درجة الحرارة

ويحقق هذا التوزيع في كامل الحجم الذي يشغله العلاقة الآتية :

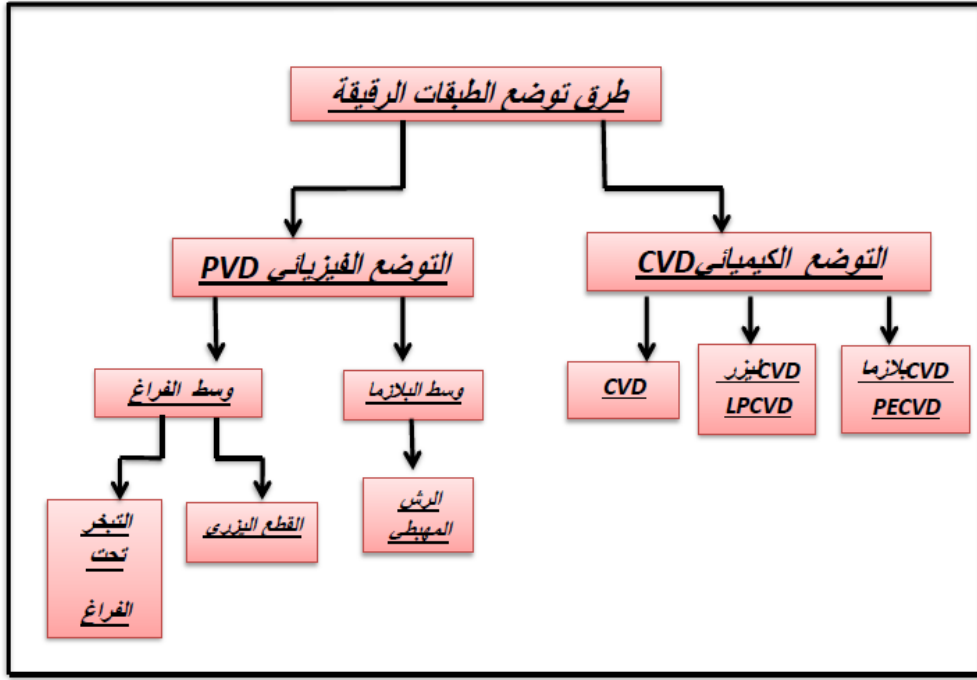
$$\int_{R^3} f(v) dV = 1 \quad (10.1)$$

## 1. 6. طرق توضع الطبقات الرقيقة

نسمي طبقة رقيقة أو الأغشية الرقيقة كل شريحة ذات سمك مجهري. تصنف تقنيات التوضع بالطور البخاري التي تستخدم في توضع الطبقات الرقيقة في الفراغ وعند ضغط منخفض بطريقتين هما [10][11]:

- طريقة التوضع الفيزيائي في الطور البخاري PVD
- طريقة التوضع الكيميائي في الطور البخاري CVD

يوضح الشكل 1.1 بعض النماذج للطريقتين.



الشكل 1.1: مخطط بعض الطرق الفيزيائية والكيميائية لتوضع الطبقات [8].

### 1.6.1. طرق التوضع الفيزيائي في الطور البخاري (PVD) [10]

طريقة التوضع الفيزيائي في الطور البخاري تتمثل في ترسب تحت الضغط المنخفض لبخار مادة

معينة على المسند. حسب طريقة الحصول على البخار وطريقة ترسبه نميز ثلاث تقنيات:

- التبخير الحراري تحت الفراغ.
- الترسيب الأيوني.
- الرش المهبطي.

طريقة (PVD) لها مميزات معتبرة، الشرائح فيها كثيفة، التقنية سهلة المراقبة وليست ملوثة.

### 2.6.1. طرق التوضع الكيميائي في الطور البخاري CVD [7، 12]

هي طرق تسمح بتكوين طبقات رقيقة صلبة غير متطايرة على الركيزة عن طريق التفاعلات

الكيميائية المتفاعلة حيث يتم إدخال الغازات في المفاعل وتحلل وتتفاعل عند درجة حرارة معينة لتشكيل

الطبقة المراد الحصول عليها. بعدها يتم نقل المواد المتفاعلة الى الركائز عن طريق الحمل الحراري او

الانتشار، حيث تحدث هذه التفاعلات الكيميائية في الطور الغازي وتسمى أيضا بالتفاعلات المتجانسة.

يوجد عدة طرق لتوضع الكيميائي في الطور البخاري منها:

- توضع (CVD) تحت الضغط الجوي (PACVD).
- توضع (CVD) باستعمال الليزر (LCVD).
- توضع (CVD) تحت الضغط المنخفض (LPCVD).
- توضع (CVD) بواسطة سلك ساخن (HWCVD).
- توضع (CVD) بوجود الفوتونات (Photo-CVD).
- توضع (CVD) المدعم بالبلازما (PECVD).

تمثل دراسة التوضع الطبقات الرقيقة بطرق CVD و PVD احدى إهتمامات فرق البحث

لمخبر الإشعاع والبلازما وفيزياء السطوح. تطرقت أعمال بابا حني [13،7] الى تراكيز خليط غازي

SiH<sub>4</sub>/H<sub>2</sub> في وسط PECVD. وتطرقت أعمال بلة الى الخصائص الكهربائية في وسط مغنطروني

[14،10]. كما تم إستعمال مختلف معادلات و وسائل النمذجة العددية في مذكرات الماجستير

والماستر [17،16،15،2] لحساب تراكيز أو درجة الحرارة أو الخصائص الكهربائية في أوساط مماثلة.

في وسط بلازما مقترنة بالحث، تم حساب [2] التراكيز لجسيمات حيادية لوسط غازي

(SiH<sub>4</sub>/O<sub>2</sub>). ويعتبر عمل هذه المذكرة مواصلة لهذا العمل .

## 1.7. البلازما المقترنة بالحث ICP

### 1.7.1. تعريف البلازما المقترنة بالحث ICP [18]

البلازما المقترنة بالحث هي نوع من مصادر البلازما حيث يتم فيها توفير الطاقة عن طريق

التيارات الكهربائية التي يتم إنتاجها عن طريق الحث الكهرومغناطيسي، أي طريق المجالات المغناطيسية

المتغيرة بمرور الوقت. كما انها تقنية تحليلية تستخدم للكشف عن المعادن، وهدفها الاساسي هو جعل العناصر تنبعث منها اطوال موجية مميزة.

### 2.7.1. مبدأ البلازما المقترنة بالحث ICP [19]

يلعب المجال المغناطيسي الناتج عن تيار التردد اللاسلكي (RF) دورا هاما في البلازما المقترنة بالحث ICP، الذي يتم إنشاؤه داخل غرفة البلازما عن طريق تطبيق طاقة التردد اللاسلكي على لفة مستوية من خلال النافذة العازلة.

آلية امتصاص الطاقة الرئيسية في البلازما المقترنة بالحث ICP هي التسخين بفعل جول، حيث تتصادم الالكترونات المتسارعة بواسطة الحقل  $E$  مرات عديدة مع الجسيمات الأخرى، ومن الممكن أن تتحرق هذه الالكترونات العمق تحت نافذة عازلة وتستقبل طاقة تحت المجال الكهرومغناطيسي، عندما يكون التردد الزاوي  $w$  اكبر بكثير من تردد الاصطدام  $V$  ويعطى بالعلاقة الآتية :

$$\delta = \frac{C}{Wp_e} \quad (11.1)$$

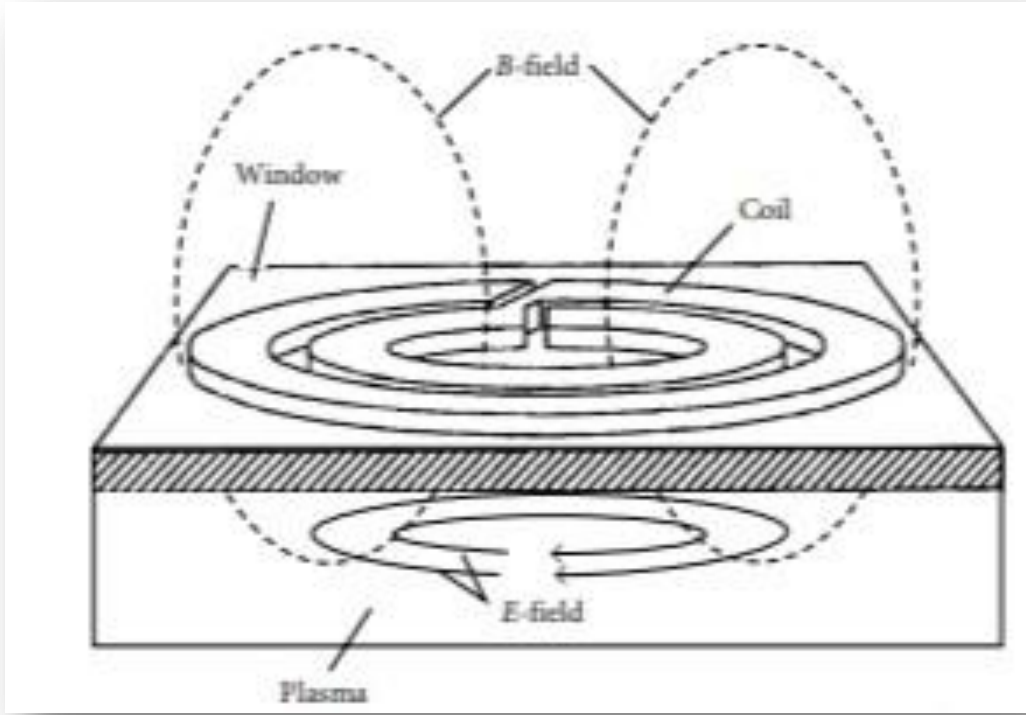
$C$  : سرعة الضوء.

$Wp_e$  : تردد البلازما الالكتروني

وهذا يؤدي الي انخفاض الجهد ويكون يساوي الحقل الكهربائي  $E$  وسرعة انجراف الإلكترون (حركة

الإلكترون) تساوي  $E\mu_e$  وتعطى قوة التسخين العلاقة الآتية:

$$P_j = en_e\mu_e E^2 \quad (12.1)$$



الشكل 2.2: المجال المغناطيسي للترددات في المجال B والمجال الكهربائي للترددات الراديوية (المجال الالكتروني).

### 3.7.1. تطور البلازما المقترنة بالحث ICP [19]

تم استخدام البلازما المقترنة بالحث لأول مرة كالبلازما حرارية في مجال الطلاء، قبل استخدامها في معالجة أشباه الموصلات، يمكن توليد البلازما الحرارية (أكثر من 10000K) داخل أنبوب كوارتز مبرد بالماء، عن طريق توفير طاقة التردد اللاسلكي للفة المرتبة حول الأنبوب بعد حقن البلازما بالغاز، مما يؤدي إلى ترسيب طبق رقيقة. تم استخدام أيضا هذا النوع من البلازما في مجال التحليل الطيفي للانبعاثات الضوئية.

بالنسبة لعملية الطلاء، البلازما المقترنة بالحث عبارة عن شعلة تعمل عند ضغوط تبلغ 1000Pa أو أكثر وبقطر يتراوح من عدة mm إلى cm. البلازما المقترنة بالحث لها علاقة أيضا

بمعالجة الأغشية الرقيقة التي تتعامل مع رقائق اشباه الموصلات بأقطار تزيد عن 100مم تتطلب ضغط من 0.1 الى 100باسكال.

## 1. 8. نموذج الموائع [8]

يقوم هذا النوع من النماذج بدراسة بلازما التفريغ (الباردة) لتحديد الكثافة والسرعة المتوسطة والطاقة للجسيمات المشحونة، عن طريقة جملة من المعدلات التي تصف التغيرات الموضعية والزمنية لهذه القيم.

## 1.9.1. المعادلات الأساسية لنموذج الموائع

### 1.9.1.1. معادلة الاستمرارية [20]

تمثل معادلة الاستمرارية العزم الاول لمعادلة بولتزمان، وتعبّر عن كثافة الجسيمات لكل نوع من

أنواع البلازما وتكتب بالصيغة الآتية :

$$\frac{\partial n_{e,i,n}}{\partial t} + \nabla \cdot J_{e,i,n} = S_{e,i,n} \quad (13.1)$$

$$J_{e,i,n} = \pm \mu_{e,i,n} n_{e,i,n} E - D_{e,i,n} \nabla n_{e,i,n} \quad (14.1)$$

$n_{e,i,n}$  : الكثافة الأيونية أو الالكترونية أو الجسيمات المحايدة.

$D_{e,i,n}$  : معامل الانتشار للجسيمات ( الالكترونات، الايونات، الجسيمات المحايدة)

$\mu_{e,i,n}$  : معامل الحركة للالكترونات و الايونات؛ من اجل الجسيمات المحايدة يصبح معامل الحركة

مساوي للصفر. الإشارة (+) من اجل الايونات موجبة الشحنة، والإشارة (-) من اجل الالكترونات

والايونات سالبة الشحنة.

$J_{e,i,n}$  : كثافة التدفق الحالي للجسيمات (الالكترونات، الايونات، الجسيمات المحايدة)

$S_{e,i,n}$  : مصدر الأنواع ويشمل إنتاج واستهلاك الجنس أو النوع المعني.



E: المجال الكهربائي.

### 2.9.1. معادلة كمية الحركة [8]

وهي المعادلة العزم الثاني لمعادلة بولتزمان التي تعبر عن السرعة وتعطى بالصيغة الآتية:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} (n_{e,i} m_{e,i} \langle \vec{V} \rangle + \vec{\nabla} (n_{n,i} m_{e,i} \langle \vec{V} \vec{V} \rangle) \\ = -\vec{\nabla} \vec{P} + n_{e,i} \vec{f} - n_{e,i} m_{e,i} \langle \vec{V} \rangle v m_{e,i} \end{aligned} \quad (15.1)$$

حيث:

$m_{e,i}$ : كتلة الجسيمات المشحونة

$\langle \vec{V} \rangle$ : السرعة المتوسطة للجسيمات المشحونة

$v_m$ : تردد تصادم الجسيمات

P: الضغط الجوي يأخذ القيمة  $P = nK_B T$

T: درجة حرارة الجسيمات

### 3.9.1. معادلة الطاقة [8]

تمثل معادلة الطاقة العزم الثالث لمعادلة بولتزمان، والتي تعبر عن الطاقة المتوسطة للالكترونات

وتكتب بالصيغة الرياضية الآتية:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} (n, m \langle \vec{V} \rangle / 2) \\ + \vec{\nabla} \cdot (nm \langle \vec{V}^2 \vec{V} \rangle + \vec{\nabla} \cdot \vec{V} \cdot P + \vec{\nabla} \vec{Q} - nF \langle \vec{V} \rangle) \\ = R_{em} \end{aligned} \quad (16.1)$$

$\vec{Q}$ : شعاع النقل الحراري و يعطى كالتالي :

$$\vec{Q} = nm \langle \vec{V}^2 \cdot V \rangle / 2 \quad (17.1)$$

$R_{e,m}$  : لطاقة الضائعة بفعل التصادمات

$$\langle E \rangle = m \langle \vec{V}^2 \rangle / 2 = m(\vec{V}^2 + \langle \vec{V}_t^2 \rangle) / 2 \quad (18.1)$$

$$q = mm \langle \vec{V}^2 \rangle \frac{\nabla}{2} + \vec{V} p \vec{Q} = \vec{J} \langle E \rangle + \vec{V} P + \vec{Q} \quad (19.1)$$

$q$  : شعاع التدفق الكلي

### 4.9.1 معادلة بواسون [21]

يتم حل هذه المعدلات السابقة (معادلة الاستمرارية، معادلة كمية الحركة، معادلة الطاقة) لجميع

انواع البلازما مع معادلة بواسون، من اجل الحصول على توزيع المجال الكهربائي.

$$\Delta E = \frac{e}{\varepsilon} [n_+ - n_- - n_e] \quad (20.1)$$

$n_+, n_-$  : كثافة الكلية الايونات الموجبة والسالبة

$n_e$  : كثافة الالكترونات.

$n_{ion}$  : كثافة الايونات

## **الفصل الثاني:**

**نمذجة حساب تراكيز الجسيمات  
الحيادية والأيونات في المفاعل  
(ICP)**

## الفصل الثاني:

### نمذجة حساب تراكيز الجسيمات الحيدرية والأيونات في المفاعل (ICP)

#### 1. المقدمة

سنقوم في هذا الفصل بنمذجة دراسة خليط غازي ( $\text{SiH}_4/\text{O}_2$ ) لمفاعل البلازما (ICP) المستعملة في توضع الطبقات الرقيقة. وذلك بإقتراح نموذج لمعالجة عددية بنموذج الرياضي المتمثل في المعادلات الاستمرارية بتطبيق طريقة الفروق المنتهية وخوارزمية غوص صايدل التكرارية بهدف حساب تراكيز الجسيمات الحيدرية والأيونات في المفاعل. بالاستعانة بعمل S. Tinck and A. Bogaerts [1] (2012) وبانجاز برنامج بلغة الفورتران 77 لحل هذه المعادلات.

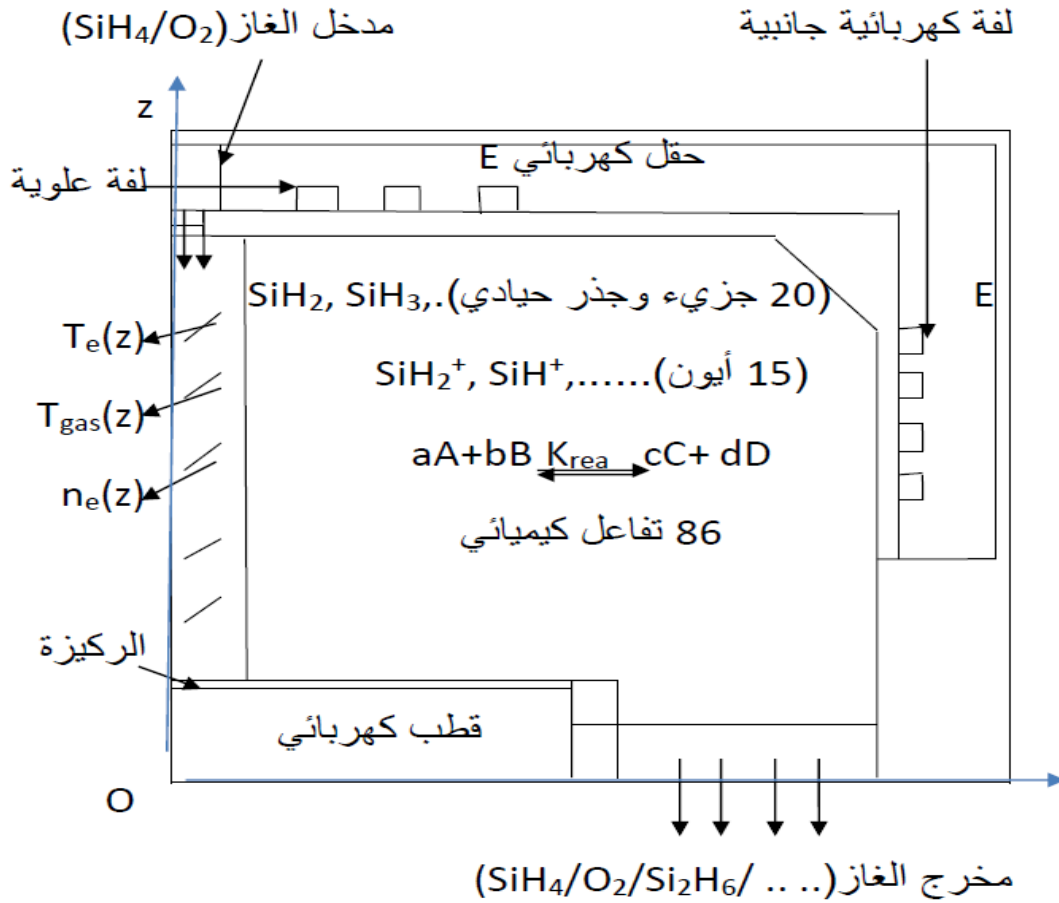
#### 2. . الظاهرة الفيزيائية

بهدف حساب تراكيز كل من الجسيمات الحيدرية والأيونات لخليط ( $\text{SiH}_4/\text{O}_2$ ) لتوضع او ترسيب الطبقات الرقيقة في البلازما (ICP). نقترح نمذجة حساب لمفاعل في نظام مستقر وذلك بدراسة الخصائص على طول المحور Z لمفاعل اسطواني. نركز في عملنا هذا على 20 جسيم حيدري، 15 ايون، 85 تفاعل كيميائي داخل المفاعل. نأخذ بعين الاعتبار الشروط التي استخدمها S. Tinck and A. Bogaerts [1] (2012).

- تردد التشغيل 13.56Mhz.
- ضغط الغاز 10mTorr.
- يتكون الغاز  $\text{SiH}_4$  بنسبة 54%،  $\text{O}_2$  بنسبة 46%.
- الجسيمات الحيدرية الداخلة في التفاعل هي:  $\text{SiH}_2\text{O}$ ،  $\text{SiH}_3\text{O}$ ،  $\text{SiH}$ ،  $\text{SiH}_2$ ،  $\text{SiH}_3$ ،  $\text{Si}_2\text{H}_6$ ،  $\text{O}$ ،  $\text{H}$ ،  $\text{H}_2$ ،  $\text{OH}$ ،  $\text{H}_2\text{O}$ ،  $\text{SiO}_2$ ،  $\text{SiO}$ ،  $\text{Si}_3\text{H}_8$ ،  $\text{SiHO}$ ،  $\text{O}_2$ ،  $\text{SiH}_4$ ،  $\text{Si}_2\text{H}_4$ ،  $\text{Si}$ ،  $\text{Si}_2\text{H}_5$ .

- الايونات هي:  $SiH_7^+$  ،  $Si_2H_2^+$  ،  $Si^+$  ،  $Si_2H^+$  ،  $SiH_3^+$  ،  $SiH_2^+$  ،  $SiH^+$  ،  $O^+$  ،  $O^-$  ،  $H_2^+$  ،  $SiO_2^+$  ،  $O_2^+$  ،  $Si_4H_6^+$  ،  $Si_3H_4^+$  ،  $Si_3H_6^+$

يوضح الشكل 2. 1 مخطط لمفاعل ICP المقترح للدراسة.



الشكل 2. 1: مخطط لمفاعل ICP

### 3. . النمذج الرياضي:

نحن مهتمون بدراسة غاز  $(SiH_4/O_2)$  المستعمل في توضع الطبقة الرقيقة داخل مفاعل بهدف

تحديد الخصائص أو الكثافة الايونية ، كثافة الجسيمات المحايدة باستعمال المعادلات الاستمرارية لكثافات

الجسيمات.

### 1.3. معادلة الاستمرارية [10]

المعادلة الاستمرارية لحساب تراكيز لجسيم الحيادي والأيون k كالاتي:

$$\frac{\partial C^k}{\partial t} + \vec{\nabla}(-D^k \nabla C^k + \mu^k C^k E) = S^k \quad (1.2)$$

في نظام مستقر ( $\frac{\partial C^k}{\partial t} = 0$ )

$$\vec{\nabla}(-D^k \nabla C^k + \mu^k C^k E) = S^k \quad (2.2)$$

نقوم باشتقاق الحد الأول للحصول على كثافة الجسيمات الحيادية:

$$\nabla(-D^k \nabla C^k) = -\frac{\partial D^k}{\partial z} \frac{\partial C^k}{\partial z} - D^k \frac{\partial^2 C^k}{\partial z^2} = S^k \quad (3.2)$$

باهمال الطرف الأول ( $\frac{\partial D^k}{\partial z} = 0$ ) (بافتراض تغير ببطء مع الموضع لمعامل الإنتشار  $D^k$ )  
نتحصل على الشكل التالي:

$$\nabla(-D^k \nabla C^k) = -D^k \frac{\partial^2 C^k}{\partial z^2} = S^k \quad (4.2)$$

في الأخير نشتق الحدين للحصول على كثافة الأيونات:

$$\begin{aligned} & \vec{\nabla}(-D^k \nabla C^k + \mu^k C^k E) \\ &= -\frac{\partial D^k}{\partial z} \frac{\partial C^k}{\partial z} - D^k \frac{\partial^2 C^k}{\partial z^2} + \mu^k E \frac{\partial C^k}{\partial z} + C^k E \frac{\partial \mu^k}{\partial z} \\ &+ C^k \mu^k \frac{\partial E}{\partial z} = S^k \end{aligned} \quad (5.2)$$

نفترض أيضا أن:  $(\frac{\partial \mu^k}{\partial z}) = 0$  ,  $(\frac{\partial D^k}{\partial z}) = 0$

نتحصل على:

$$\begin{aligned} & \vec{\nabla}(-D^k \nabla C^k + \mu^k C^k E) \\ &= -D^k \frac{\partial^2 C^k}{\partial z^2} + \mu^k E \frac{\partial C^k}{\partial z} + C^k \mu^k \frac{\partial E}{\partial z} = S^k \end{aligned} \quad (6.2)$$

$$S^k = + \sum_{k_{\text{reac}}^{\text{prod}}} k_{\text{reac}(k',k'')} C_j^{k'} C_j^{k''} - \sum_{k_{\text{reac}}^{\text{cons}}} k_{\text{reac}(k,k')} C_j^k C_j^{k'} \quad (7.2)$$

تكتب الصيغة العامة لثابت التفاعل الكيميائي  $K_{\text{reac}}$  كالاتي [2]

$$K_{\text{reac}} = AT^B \exp\left(-\frac{E_a}{k_B T}\right) \quad (8.2)$$

$k, k'$  : ثوابت متعلقة بتقييم الجسيم المتفاعل.

$E_a$  : طاقة التنشيط

$k_B$  : ثابت بولتزمان.

$T$  : درجة حرارة التفاعل.

$D^k$  : معامل الانتشار للأنواع  $k$ .

$C^k$  : تركيز كل جزئي أو جذر أو أيون  $k$ .

$S^k$  : معدل الاستهلاك والانتاج في وحدة الحجم.

$K_{\text{reac}}^{\text{cons}}, K_{\text{reac}}^{\text{prod}}$  : ثوابت التفاعل الكيميائي الاستهلاك والانتاج للأنواع الكيميائية.

### 2.3. التفاعلات الكيميائية للجسيمات الحيدرية والأيونات:

لقد اخترنا لدراسة 85 تفاعل كيميائي بين الجسيمات الحيدرية والأيونات.

لقد اخذنا الثوابت المستخدمة من المراجع التالية:

• مقال: (Kushner 1988) [22]. (S. Tinck and A. Bogaerts[1]2012)

• موقع **NIST** المعهد الوطني للمعايير القياسية والتكنولوجيا في الولايات المتحدة الأمريكية حيث

استنبطنا من خلاله بعض الثوابت الخاصة بالتفاعلات الكيميائية للغاز.

باعتماد على موقعي الواب:

[23] <http://kinetics.nist.gov/kinetics/index.jsp>

[24] <http://udfa.ajmarkwick.net/index.php>

يبين الجدول 2 . 1 التفاعلات الكيميائية وثوابت التفاعلات الكيميائية  $K_{\text{reac}}$  المستعملة في الحساب.

جدول 2. 1: التفاعلات الكيميائية وثوابت التفاعلات الكيميائية  $K_{\text{reac}}$ .

المرجع	ثابت التفاعلات الكيميائية ( $cm^3/s$ )	التفاعلات الكيميائية	الرقم
[22]	$k_1 = 1.59 \times 10^{-10}$	$SiH_4+e \longrightarrow SiH_3+H+e$	01
[22]	$k_2 = 1.87 \times 10^{-10}$	$SiH_4+e \longrightarrow SiH_2+H+H+e$	02
[22]	$k_3 = 9.34 \times 10^{-12}$	$SiH_4+e \longrightarrow SiH+H_2+H+e$	03
[1]	$k_4 = 2.68 \times 10^{-12}$	$SiH_4+H \longrightarrow SiH_3+H_2$	04
[1]	$k_5 = 1 \times 10^{-10}$	$SiH_3+H \longrightarrow SiH_2+H_2$	05
[1]	$k_6 = 7 \times 10^{-12}$	$SiH_3+SiH_3 \longrightarrow SiH_2+H_2$	06
[25]	$k_7 = 2 \times 10^{-13}$	$SiH_2+H_2 \longrightarrow SiH_4$	07
[1]	$k_8 = 2.36 \times 10^{-10} \times \exp\left(\frac{-3266.3}{R \times T_{gaz}}\right)$	$SiO+O_2 \longrightarrow SiO_2+O$	08
[25]	$k_9 = 7.96 \times 10^{-13}$	$SiH_2+H \longrightarrow SiH+H_2$	09
[1]	$k_{10} = 1.1 \times 10^{-12}$	$SiH_2+H \longrightarrow SiH_3$	10
[1]	$k_{11} = 1.98 \times 10^{-12}$	$SiH+H_2 \longrightarrow SiH_3$	11
[1]	$k_{12} = 5 \times 10^{-11}$	$SiH+SiH_4 \longrightarrow SiH_2+SiH_3$	12
[1]	$k_{13} = 2.40 \times 10^{-11}$	$O+OH \longrightarrow H+O_2$	13
[1]	$k_{14} = 2.20 \times 10^{-10}$	$O^*+H_2O \longrightarrow OH+OH$	14
[1]	$k_{15} = 7.70 \times 10^{-12}$	$OH+H_2 \longrightarrow H_2O+H$	15
[1]	$k_{16} = 1.48 \times 10^{-10}$	$OH+H \longrightarrow O+H_2$	16
[1]	$k_{17} = 3.44 \times 10^{-10}$	$O+H_2 \longrightarrow OH+H$	17
[1]	$k_{18} = 6.98 \times 10^{-12}$	$SiH_4+O \longrightarrow SiH_3+OH$	18



[1]	$k_{19} = 1.40 \times 10^{-11} \exp\left(\frac{-50.3}{R \times T_{gaz}}\right)$	$\text{SiH}_4 + \text{OH} \longrightarrow \text{SiH}_3 + \text{H}_2\text{O}$	19
[1]	$k_{20} = 3 \times 10^{-12}$	$\text{SiH}_4 + \text{O}_2 \longrightarrow \text{SiH}_3\text{O} + \text{OH}$	20
[1]	$k_{21} = 2.16 \times 10^{-10} \exp\left(\frac{-1000}{R \times T_{gaz}}\right)$	$\text{SiH}_3 + \text{O} \longrightarrow \text{SiH}_2\text{O} + \text{H}$	21
[1]	$k_{22} = 6.56 \times 10^{-12}$	$e + \text{H}_2\text{O} \longrightarrow \text{O}^- + \text{H}_2$	22
[22]	$k_{23} = 8.31 \times 10^{-12}$	$\text{SiH}_3 + \text{OH} \longrightarrow \text{SiH}_2\text{O} + \text{H}_2$	23
[22]	$k_{24} = 6.3 \times 10^{-12}$	$\text{SiH}_3 + \text{O}_2 \longrightarrow \text{SiH}_2\text{O} + \text{OH}$	24
[22]	$k_{25} = 6.3 \times 10^{-12}$	$\text{SiH}_3 + \text{O}_2 \longrightarrow \text{SiH}_3\text{O} + \text{O}$	25
[1]	$k_{26} = 3.75 \times 10^{-12}$	$\text{SiH}_2 + \text{O}_2 \longrightarrow \text{SiH}_2\text{O} + \text{O}$	26
[26]	$k_{27} = 3.75 \times 10^{-12}$	$\text{SiH}_2 + \text{O}_2 \longrightarrow \text{SiHO} + \text{OH}$	27
[1]	$k_{28} = 8.5 \times 10^{-11}$	$\text{SiH} + \text{O}_2 \longrightarrow \text{SiO} + \text{OH}$	28
[1]	$k_{29} = 8.5 \times 10^{-11}$	$\text{SiH} + \text{O}_2 \longrightarrow \text{SiO}_2 + \text{H}$	29
[26]	$k_{30} = 10^{-12}$	$\text{SiH}_3\text{O} + \text{O} \longrightarrow \text{SiH}_2\text{O} + \text{OH}$	30
[26]	$k_{31} = 10^{-12}$	$\text{SiH}_3\text{O} + \text{OH} \longrightarrow \text{SiH}_2\text{O} + \text{H}_2\text{O}$	31
[26]	$k_{32} = 5.48 \times 10^{-10} \exp\left(\frac{-5276.4}{R \times T_{gaz}}\right)$	$\text{SiH}_2\text{O} + \text{H} \longrightarrow \text{SiHO} + \text{OH}$	32
[1]	$k_{33} = 2.99 \times 10^{-11} \exp\left(\frac{-1547.7}{R \times T_{gaz}}\right)$	$\text{SiH}_2\text{O} + \text{O} \longrightarrow \text{SiHO} + \text{OH}$	33
[1]	$k_{34} = 1.25 \times 10^{-11} \exp\left(\frac{-85.4}{R \times T_{gaz}}\right)$	$\text{SiH}_2\text{O} + \text{O} \longrightarrow \text{SiHO} + \text{H}_2\text{O}$	34
[1]	$k_{35} = 3.32 \times 10^{-10}$	$\text{SiHO} + \text{H} \longrightarrow \text{SiO} + \text{H}_2$	35
[1]	$k_{36} = 1.66 \times 10^{-10}$	$\text{SiHO} + \text{O} \longrightarrow \text{SiO} + \text{OH}$	36
[1]	$k_{36} = 1.66 \times 10^{-10}$	$\text{SiHO} + \text{OH} \longrightarrow \text{SiO} + \text{H}_2\text{O}$	37

[1]	$k_{38} = 6.65 \times 10^{-12} \exp\left(\frac{-2864.3}{R \times T_{gaz}}\right)$	$\text{SiO} + \text{OH} \longrightarrow \text{SiO}_2 + \text{H}$	38
[1]	$k_{39} = 4.49 \times 10^{-12}$	$\text{H}_2 + e \longrightarrow \text{H} + \text{H} + e$	39
[1]	$k_{40} = 1.E-10$	$\text{O}_2 + e \longrightarrow \text{O} + \text{O} + e$	40
[1]	$k_{41} = 3 \times 10^{-10}$	$\text{SiH}_4 + \text{O} \longrightarrow \text{SiH}_3 + \text{OH}$	41
[1]	$k_{42} = 1.07 \times 10^{-9}$	$\text{SiH}_2^+ + \text{SiH}_4 \longrightarrow \text{SiH}_3^+ + \text{SiH}_3$	42
[1]	$k_{43} = 6 \times 10^{-11}$	$\text{SiH}^+ + \text{SiH}_4 \longrightarrow \text{SiH}_3^+ + \text{SiH}_2$	43
[1]	$k_{44} = 10^{-11}$	$\text{SiH}^+ + \text{SiH}_4 \longrightarrow \text{SiH}_2^+ + \text{SiH}_3$	44
[1]	$k_{45} = 5 \times 10^{-11}$	$\text{SiH} + \text{SiH}_4 \longrightarrow \text{SiH}_2 + \text{SiH}_3$	45
[1]	$k_{46} = 1.69 \times 10^{-7}$	$e + \text{SiH}_2^+ \longrightarrow \text{SiH} + \text{H}$	46
[1]	$k_{47} = 1.67 \times 10^{-7}$	$e + \text{SiH}_3^+ \longrightarrow \text{SiH}_2 + \text{H}$	47
[1]	$k_{48} = 8.5 \times 10^{-11}$	$\text{SiH} + \text{O}_2 \text{SiO} \longrightarrow \text{OH}$	48
[1]	$k_{49} = 1.E-8$	$e + \text{SiO}_2 \longrightarrow \text{SiO}_2^+ + 2e$	49
[1]	$k_{51} = 10^{-7} * T^{0.5}$	$\text{SiO}_2^+ + \text{O}^- \longrightarrow \text{SiO}_2 + \text{O}$	50
[1]	$k_{52} = 10^{-11}$	$\text{SiH}_4 + \text{Si}_2\text{H}_4 \longrightarrow \text{Si}_3\text{H}_8$	51
[22]	$k_{53} = 1.2 \times 10^{-10}$	$\text{Si}_2\text{H}_6 + \text{SiH}_2 \longrightarrow \text{Si}_3\text{H}_8$	52
[22]	$k_{54} = 5 \times 10^{-13}$	$\text{SiH}_4 + \text{Si}_2\text{H}_5 \longrightarrow \text{Si}_2\text{H}_6 + \text{SiH}_3$	53
[22]	$k_{55} = 10^{-12}$	$\text{Si}_2\text{H}_6 + \text{SiH}_3 \longrightarrow \text{SiH}_4 + \text{Si}_2\text{H}_5$	54
[22]	$k_{56} = 5 \times 10^6 (S^{-1})$	$\text{Si}_2\text{H}_6 \text{Si}_2\text{H}_4 + \text{H}_2$	55
[22]	$k_{57} = 10^{-11}$	$\text{SiH} + \text{Si}_3\text{H}_8 \longrightarrow \text{Si}_4\text{H}_9$	56
[22]	$k_{58} = 10^{-11}$	$\text{SiH}_3 + \text{Si}_3\text{H}_8 \text{Si}_4\text{H}_9 + \text{H}_2$	57
[22]	$k_{59} = 0.13 \times 10^{-10}$	$\text{SiH}_3^+ + \text{SiH}_4 \longrightarrow \text{Si}_2\text{H}^+ + \text{H}_2 + 2\text{H}_2$	58
[22]	$k_{60} = 10^{-11}$	$\text{SiH}_2^+ + \text{Si}_3\text{H}_8 \longrightarrow \text{Si}_4\text{H}_8^+ + \text{H}_2$	59
[22]	$k_{61} = 3.76 \times 10^{-11}$	$\text{Si}_2\text{H}_2^+ + \text{SiH}_4 \longrightarrow \text{Si}_3\text{H}_6^+$	60

[22]	$k_{62} = 1.7 \times 10^{-10}$	$\text{Si}_3\text{H}_4^+ + \text{SiH}_4 \longrightarrow \text{Si}_4\text{H}_6^+ + \text{H}_2$	61
[22]	$k_{63} = 2 \times 10^{-10}$	$\text{O}^+ + \text{SiH}_4 \longrightarrow \text{SiH}_2^+ + \text{H}_2 + \text{O}$	62
[22]	$k_{64} = 2 \times 10^{-10}$	$\text{O}_2^+ + \text{SiH}_4 \longrightarrow \text{SiH}_2^+ + \text{H}_2 + \text{O}_2$	63
[1]	$k_{65} = 5 \times 10^{-7}$	$\text{SiH}_3^+ + \text{SiH}^+ \longrightarrow \text{SiH}_3 + \text{SiH}$	64
[1]	$k_{66} = 5 \times 10^{-7}$	$\text{SiH}_3^+ + \text{SiH}_3^+ \longrightarrow \text{SiH}_3 + \text{SiH}_3$	65
[1]	$k_{67} = 6.98 \times 10^{-12}$	$\text{SiH}_4 + \text{OSiH}_3^+ \longrightarrow \text{OH}$	66
[1]	$k_{68} = 5.2 \times 10^{-11}$	$\text{Si}_3\text{H}_4^+ + \text{SiH}_4 \longrightarrow \text{Si}_4\text{H}_6^+ + \text{H}_2$	67
[1]	$k_{69} = 10^{-13}$	$\text{Si}_4\text{H}_6^+ + \text{SiH}_4 \longrightarrow \text{Si}_5\text{H}_{10}^+$	68
[22]	$k_{70} = 3.20 \times 10^{-11}$	$\text{Si}_2\text{H}_2^+ + \text{SiH}_4 \longrightarrow \text{Si}_3\text{H}_4^+ + \text{H}_2$	69
[22]	$k_{71} = 3.10 \times 10^{-10}$	$\text{Si}_2\text{H}^+ + \text{SiH}_4 \rightleftharpoons \text{Si}_2\text{H}_2^+ + \text{H}_2 + \text{H}_2$	70
[22]	$k_{72} = 5 \times 10^{-11}$	$\text{Si}_2\text{H}_7^+ + \text{SiH}_4 \longrightarrow \text{Si}_3\text{H}_6^+ + 2\text{H}_2 + \text{H}$	71
[22]	$k_{73} = 5.8 \times 10^{-10}$	$\text{Si}_2\text{H}_6^+ + \text{Si}_2\text{H}_6 \longrightarrow \text{Si}_2\text{H}_7^+ + \text{Si}_2\text{H}_5$	72
[1]	$k_{74} = 2.20 \times 10^{-7}$	$\text{Si}^+ + \text{SiH}_4 \longrightarrow \text{SiH}^+ + \text{H} + \text{H}_2 + \text{Si}$	73
[1]	$k_{75} = 3.66 \times 10^{-11}$	$\text{H}_2^+ + \text{SiH}_4 \longrightarrow \text{Si}^+ + \text{H}_2 + \text{H}_2 + \text{H}_2$	74
[1]	$k_{76} = 2 \times 10^{-11}$	$\text{O}^+ + \text{O}_2 \longrightarrow \text{O} + \text{O}_2^+$	75
[22]	$k_{77} = 1.69 \times 10^7$	$e + \text{Si}_3\text{H}_6^+ \longrightarrow \text{Si}_2\text{H}_4 + \text{SiH}_2$	76
[22]	$k_{78} = 1.69 \times 10^{-7}$	$e + \text{SiH}^+ \longrightarrow \text{Si} + \text{H}$	77
[1]	$k_{79} = 5.33 \times 10^{-12}$	$\text{SiH}_4 + \text{Si} \longrightarrow \text{SiH}_2 + \text{SiH}_2$	78
[1]	$k_{80} = 6.59 \times 10^{-12}$	$\text{Si} + \text{H}_2 \longrightarrow \text{SiH}_2$	79
[1]	$k_{81} = 2.20 \times 10^{-10}$	$\text{Si}^+ + \text{SiH}_4 \longrightarrow \text{SiH}_2^+ + \text{H}_2 + \text{Si}$	80
[1]	$k_{82} = 6.50 \times 10^{-10}$	$\text{Si}^+ + \text{SiH}_4 \longrightarrow \text{SiH}_3^+ + \text{H} + \text{Si}$	81
[1]	$k_{83} = 10^7$	$\text{SiH}_3^+ + \text{Si}^+ \longrightarrow \text{SiH}_3 + \text{Si}$	82
[1]	$k_{84} = 3 \times 10^{-10}$	$\text{Si} + \text{SiH}_4 \longrightarrow \text{SiH} + \text{SiH}_3$	83
[22]	$k_{85} = 2.32 \times 10^{-11}$	$e + \text{H}_2 \longrightarrow \text{H}_2^+ + 2e$	84

[22]	$k_{86} = 7.10 \times 10^{-11} \times T^{0.5} \exp\left(\frac{-17}{R \times T_{gaz}}\right)$	$e + O_2 \longrightarrow O^+ + O + e$	85
------	--	---------------------------------------	----

### 3.3. معامل الانتشار الثنائي $D_{ij}$ للجسيمات الحادية

معامل الانتشار يطلق على عملية تسوية التوزيع الاتزاني للتركيز داخل البلازما [14].

تكتب معاملات الانتشار الثنائي للجسيمين  $i$  و  $j$  بالصيغة الآتية [27، 28]

$$D_{ij} = \frac{3k_b T_{gaz} \sqrt{4\pi k_b T_{gaz} / 2m_{ij}}}{16p_{tot} \pi \sigma_{ij}^2 \Omega_D(T^*)} \left( \frac{m^2}{s} \right) \quad (9.2)$$

حيث الكتلة المختزلة بين الجسيمين بوحدة  $(uma)$   $m_{ij} = m_i m_j / m_i + m_j$

$$T^* = \frac{T_{gaz}}{\epsilon_{ij}}$$

$\sigma_{ij}$ : نصف قطر التصادم الثنائي  $(A^\circ)$ .

$\epsilon_{ij}$ : الطاقة المرتبطة بالرابطه الكيميائية بوحدة (K).

$T_{gaz}$ : درجة حرارة الغاز (K).

$p_{tot}$ : الضغط الكلي للغاز (Pa).

حيث:

$$\sigma_{ij} = (\sigma_i + \sigma_j) / 2 \quad ; \quad \epsilon_{ij} = \sqrt{\epsilon_i \epsilon_j}$$

$$\Omega_D(T^*) = \frac{A}{T^* B} + \frac{C}{e^{DT^*}} + \frac{E}{e^{FT^*}} + \frac{G}{e^{HT^*}}$$

لدينا الثوابت:

A=1.06036, B=0.15610, C=0.19300, D=0.47635, E=1.03587,

F=1.52996, G=1.76474, H=3.89411.

### 4.3. معامل الانتشار $D_j$ للجسيمات المحايدة [21]

معامل الانتشار  $D_j$  في الوسط الحيادي  $i$  نحصل عليها من خلال معامل الانتشار  $D_{ij}$  بالعلاقة الآتية:

$$\frac{P_{tot}}{D_j} = \sum_{i=\text{الحياد بالوسط}} \frac{p_i}{D_{ij}} \quad (10.2)$$

$p_i$ : الضغط الجزئي للغاز في وسط حيادي.

ثوابت لينارد جونز هي:

جدول 2. 2: معاملات لينارد جونز لجميع الأنواع الموصوفة في النموذج.

المرجع	$\epsilon_i(k)$	$\sigma_i(A^\circ)$	الجزئيات والجذور
[29]	170.3	3.943	SiH <sub>3</sub>
[29]	133.1	3.803	SiH <sub>2</sub>
[29]	95.8	3.662	SiH
قيم تقريبية	417	3.69	SiH <sub>3</sub> O
قيم تقريبية	498	3.59	SiH <sub>2</sub> O
قيم تقريبية	498	3.59	SiHO
[29]	331.2	5.562	Si <sub>3</sub> H <sub>8</sub>
قيم تقريبية	498	3.59	SiO
قيم تقريبية	498	3.59	SiO <sub>2</sub>
قيم تقريبية	535.21	2.673	H <sub>2</sub> O
قيم تقريبية	281.27	3.111	OH
[29]	59.7	2.827	H <sub>2</sub>
[29]	37.0	2.708	H
قيم تقريبية	57.91	3.064	O

[29]	230.0	4.42	Si <sub>2</sub> H <sub>6</sub>
[29]	306.9	4.717	Si <sub>2</sub> H <sub>5</sub>
[29]	312.6	4.601	Si <sub>2</sub> H <sub>4</sub>
[29]	3036.0	2.910	Si
[29]	207.6	4.084	SiH <sub>4</sub>
قيم تقريبية	121.1	3.407	O <sub>2</sub>

### 5.3. معامل الحركة $\mu_{ij}$ للأيونات [21]

يمكن حساب معامل الحركة للأيونات في خليط الغاز بطريقة ماثلة لمعاملات الانتشار للأنواع

المحايدة, أولاً نحسب معامل الحركة الثنائي  $\mu_{ij}$  للأيون  $j$  في كل وسط حيدري  $i$  باستخدام العلاقة الآتية:

$$\mu_{ij} = 0.514 \frac{T_{gaz}}{p_{tot} \sqrt{m_{ij} \alpha_i}} \left( \frac{m^2}{Vs} \right) \quad (11.2)$$

$m_{ij}$ : الكتلة المختزلة بوحدة uma.

$\alpha_i$ : معامل قابلية استقطاب الغاز ( $A^{\circ 3}$ ).

$p_{tot}$ : الضغط الكلي بوحدة الباسكال (Pa).

نحصل على معامل الحركة الايوني  $\mu_j$  من خلال معامل الحركة الثنائي بالعلاقة  $\mu_{ij}$  في وسط حيدري

بالعلاقة الآتية:

$$\frac{p_{tot}}{\mu_j} = \sum_{i=\text{حيادي جسيم}} \frac{p_i}{\mu_{ij}} \quad (12.2)$$

يمثل الجدول 3.2 التالي ثوابت استقطابية الغاز

جدول 2.3: القيم العددية لثابت الاستقطاب للجسيمات الحيدرية

المرجع	$\alpha_i (A^{\circ 3})$	الجزيئات والجدور
قيم تقريبية	4	SiH <sub>3</sub>
قيم تقريبية	4	SiH <sub>2</sub>
قيم تقريبية	4	SiH
قيم تقريبية	4	SiH <sub>3</sub> O
قيم تقريبية	4	SiH <sub>2</sub> O
قيم تقريبية	4	SiHO
قيم تقريبية	4	Si <sub>3</sub> H <sub>8</sub>
قيم تقريبية	4	SiO
قيم تقريبية	4	SiO <sub>2</sub>
[30]	1.501	H <sub>2</sub> O
قيم تقريبية	4	OH
[29]	0.805	H <sub>2</sub>
[29]	0.667	H
[30]	0.802	O
[29]	8.47	Si <sub>2</sub> H <sub>6</sub>
قيم تقريبية	4	Si <sub>2</sub> H <sub>5</sub>
قيم تقريبية	4	Si <sub>2</sub> H <sub>4</sub>
[29]	5.38	Si
[29]	4.62	SiH <sub>4</sub>
[30]	1.562	O <sub>2</sub>

### 6.3. معامل الانتشار للأيونات $D_j$ [21]

للحصول على معامل الانتشار للأيونات في خليط الغاز الكلي نستخدم علاقة أينشتاين الآتية:

$$D_j = \frac{k_b T_{ion}}{e} \mu_j \quad (13.2)$$

$T_{ion}$ : درجة حرارة الأيون.

$\mu_j$ : معامل الحركة الأيونات.

### 4. النموذج العددي

إن الحل التحليلي لجملة معادلات تفاضلية بغرض إيجاد الصيغة الرياضية للمقادير الفيزيائية يكون

عملياً صعباً، لهذا نلجأ إلى الطرق العددية التي تهدف إلى إيجاد قيمة المقادير الفيزيائية عند كل نقطة من

الفضاء وعند كل لحظة زمنية كطريقة الفروق المنتهية و الحجم المنتهية والعناصر المنتهية.

ونظراً لما تمتاز به الفروق المنتهية من سهولة وسرعة في الحل اخترناها طريقة لحل معادلاتنا والتي

تعتمد كما هو متفق عليه على الخطوات الرياضية الآتية [14]:

- تجزئة مجال المحاكاة.
- تقريب المشتقات الجزئية بالفروق المنتهية.
- تحديد الشروط الحدية والشروط الابتدائية (للمسائل متعلقة بالزمن).



#### 1.4. المعادلات الأساسية لحساب تراكيز الجسيمات الحيادية والايونات

نقوم أولاً بتجزئة مجال المحاكاة. لتكن  $Z_{max}$  القيمة العظمى لإرتفاع المفاعل من سطح الركيزة

الى مدخل الغاز وليكن  $j_{max}$  عدد العقد أو النقاط للحساب العددي، نعرف البعد المتساوي  $\Delta z$  بين

نقطتين متتاليتين ب:

$$\Delta z = Z_{max} / (j_{max} - 1)$$

نطبق تعبيرات المشتقات الجزئية للنشر تايلور وفقاً لـ  $z$  من أجل كل إنتقال عنصري  $\Delta z$  او  $h$

ب:

$$f(z + h) = f(z) + \frac{h}{1!} f'(z) + \frac{h^2}{2!} f''(z) + \dots (*)$$

$$f(z - h) = f(z) - \frac{h}{1!} f'(z) + \frac{h^2}{2!} f''(z) + \dots (**)$$

بطرح المعادلتين (\*) و (\*\*) نتحصل على تعريف المشتق الأول:

$$f'(z) = \frac{f(z + h) - f(z - h)}{2h}$$

بجمع المعادلتين (\*) و (\*\*) نتحصل على تعريف المشتق الثاني:

$$f''(z) = \frac{f(z + h) + f(z - h) - 2f(z)}{h^2}$$

تأخذ المعادلة الرياضية لتراكيز كل جسيم وأيون الشكل الأتية عند النقطة  $j$ :

$$A_{(j-1,j)} C_{j-1}^k + A_{(j,j)} C_j^k + A_{(j+1,j)} C_{j+1}^k = B_j \quad (14.2)$$

$$j = 2, j_{max} - 1$$

تمثل المعادلة الرياضية السابقة للتراكيز نظام معادلات خطية مرتبطة على شكل جداء مصفوفات

( $AX=B$ ). يمثل شعاع (أو المصفوفة العمود)  $X$  التراكيز المطلوب حسابها.

## 2.4. حساب كثافة الجسيمات الحيدرية و كثافة الأيونات

### 1.2.4. حساب كثافة الجسيمات الحيدرية

من خلال طريقة الفروق المنتهية لتعريف المشتق الأول والمشتق الثاني نتحصل على عناصر المصفوفة التالية (AX=B) بالنسبة للجسيمات الحيدرية.

$$A_{(j-1,j)} = -1$$

$$A_{(j,j)} = 2 + \frac{\Delta z^2}{D_j^k} \sum_{\substack{\text{cons} \\ k_{\text{reac}}}} k_{\text{reac}(k,k')} C_j^{k'}$$

$$A_{(j+1,j)} = -1$$

$$B(j) = \frac{\Delta z^2}{D_j^k} \sum_{\substack{\text{prod} \\ k_{\text{reac}}}} k_{\text{reac}(k',k'')} C_j^{k'} C_j^{k''}$$

### 2.2.4. حساب كثافة الأيونات

وبنفس الطريقة تمثل عناصر المصفوفات بالصيغة (AX=B) بالنسبة للأيونات:

$$A_{(j-1,j)} = -\frac{D_j^k}{\Delta z^2} - \frac{\mu_j^k E_j}{2\Delta z}$$

$$A_{(j,j)} = \frac{2D_j^k}{\Delta z^2} + \frac{\mu_j^k}{2\Delta z} (E_{j+1} - E_{j-1}) + \sum_{\substack{\text{cons} \\ k_{\text{reac}}}} k_{\text{reac}(k,k')} C_j^{k'}$$

$$A_{(j+1,j)} = -\frac{D_j^k}{\Delta z^2} + \frac{\mu_j^k E_j}{2\Delta z}$$

$$B_j = \sum_{\substack{\text{prod} \\ k_{\text{reac}}}} k_{\text{reac}(k',k'')} C_j^{k'} C_j^{k''}$$

### 3.2.4. الشروط الحدية

على مستوى سطح الركيزة وعند مخرج المفاعل تم إعتقاد تغيير بطيء لمقادير تراكيز مختلف

العناصر. وتصبح الشروط الحدية المستخدمة في الحساب العددي كالاتي:

$$\frac{\partial f}{\partial z}=0 \quad ; \quad z=0$$

والذي يمكن ترجمته على النحو الآتي في نظام المصفوفات:

$$1. C_1^k + (-1.)C_2^k = 0 \quad ; \quad j = 1$$

$$A(1,1)=1. ; A(1,2)=-1. ; B(1)=0.$$

على مستوى سطح العلوي للمفاعل وعند مدخل الغاز تم إعتقاد تغيير بطيء لمقادير تراكيز

لأغلب العناصر. الشروط الحدية المستخدمة في الحساب العددي وبإستعمال المصفوفات كالاتي:

$$\frac{\partial f}{\partial z}=0 \quad ; \quad z=z_{max}$$

$$-1. C_{j_{max}-1}^k + 1. C_{j_{max}}^k = 0 \quad ; \quad j = j_{max}$$

$$A(j_{max},j_{max}-1)=-1. ; A(j_{max},j_{max})=1. ; B(j_{max})=0.$$

على مستوى سطح العلوي للمفاعل وعند مدخل الغاز تم إعتقاد القيم الأولية للغاز

الداخل بالنسبة للعنصرين  $SiH_4$  و  $O_2$ . الشروط الحدية المستخدمة في الحساب العددي

وبإستعمال المصفوفات كالاتي:

$$f = C_{j_{max}}^{k0} \quad ; \quad z=z_{max}$$

$$0 * C_{j_{max}-1}^k + 1. C_{j_{max}}^k = C_{j_{max}}^{k0} ; \quad j = j_{max}$$

$$A(j_{max},j_{max}-1)=0. ; A(j_{max},j_{max})=1. ; B(j_{max})=C_{j_{max}}^{k0}$$

#### 4.2.4 الطريقة العددية لحل مصفوفة

بالنسبة للحساب العددي نطبق طريقة غوص صايدل التكرارية حيث هي الطريقة المثلى لحل

المسألة. بالنسبة لغوص صايدل لدينا  $X^{\circ}$  حلا أوليا لتراكيز؛ ويكون الحل عند تكرار (p+1) هو [13]:

$$X_1^{(p+1)} = (-\sum_{j=2}^n a_{1j}X_j^{(p+1)} + b_1)/a_{11} \quad (15.2)$$

$$X_m^{(p+1)} = \frac{-\sum_{j=1}^{m-1} a_{mj}X_j^{(p+1)} - \sum_{j=m+1}^n a_{mj}X_j^{(p)} + b_m}{a_{mm}} \quad (16.2)$$

$$X_n^{(p+1)} = \frac{-\sum_{j=1}^{n-1} a_{nj}X_j^{(p+1)} + b_n}{a_{nn}} \quad (17.2)$$

يسمح لنا الشكل الثلاثي الأقطار للمصفوفات  $A$ ، في حالتنا المختلفة، بالحصول على تعبيرات أبسط

للمتغيرات  $X_m^p$ .

هذه العلاقات تجعل من الممكن حساب قيم المتغيرات بالتقريب المتتالي. نوقف الحساب عندما نصل الى تغييرات

صغيرة بين القيم المتتالية للمتغيرات  $X_m^p$ . هذه الطريقة التكرارية مناسبة بشكل خاص لحل الأنظمة التي بها عدد

كبير من المقادير المجهولة.

#### 3.4. التراكيز الأولية للجسيمات الحيادية والايونات [1]

لإدخال الحلول الأولية للتراكيز الأولية للجسيمات الحيادية والأيونات لخوارزمية غوص -

صايدل لإعتمدنا نتائج أعمال مرجع [1]

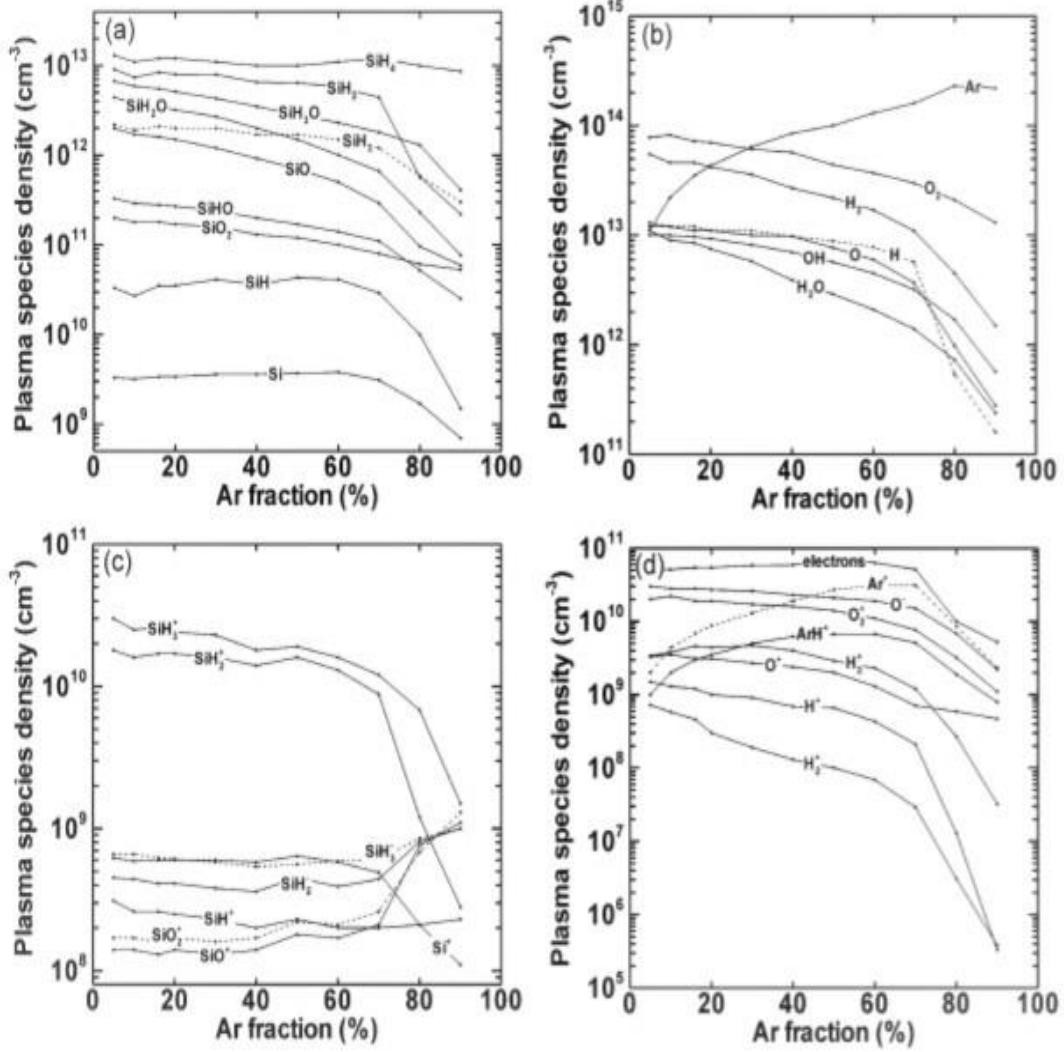
في المرجع المذكور، تم إستعمال الخليط الغازي ( $\text{SiH}_4/\text{O}_2/\text{Ar}$ ) بنسب متغيرة.

قمنا أولاً بأخذ قيم التراكيز المناسبة ل صفر بالمئة (0%) من غاز Ar لأنه ليس من الغاز

المدرّوس عندنا. يبين الشكل 2..2 منحنيات التراكيز للجسيمات الحيادية والأيونات لعمل المرجع [1].

يمثل الجدول 2. 4 القيم التقديرية لتراكيز الجسيمات المستعملة في برنامجنا العددي مستوحاة من نفس

المرجع السابق.



الشكل 2. 2: المنحنيات التراكيز للجسيمات المحايدة والأيونات لعمل المرجع [1].

الجدول 2. 4: : القيم التقديرية لتراكيز الجسيمات المستعملة في البرنامج العددي.

التركيز $C^k$	جسيم $k$	التركيز $C^k$	جسيم $k$
$1.5 \times 10^{13}$	SiH <sub>4</sub>	$2.1 \times 10^{12}$	SiH <sub>3</sub>
$8 \times 10^{13}$	O <sub>2</sub>	$9 \times 10^{12}$	SiH <sub>2</sub>
$3.1 \times 10^9$	SiH <sup>+</sup>	$3.5 \times 10^{10}$	SiH
$1.9 \times 10^{10}$	SiH <sub>2</sub> <sup>+</sup>	$6.8 \times 10^{12}$	SiH <sub>3</sub> O

$3 \times 10^{10}$	$\text{SiH}_3^+$	$4.8 \times 10^{12}$	$\text{SiH}_2\text{O}$
$5.2 \times 10^9$	$\text{Si}_2\text{H}^+$	$3.5 \times 10^{11}$	$\text{SiHO}$
$6 \times 10^9$	$\text{Si}^+$	$2.5 \times 10^{11}$	$\text{Si}_3\text{H}_8$
$5 \times 10^9$	$\text{Si}_2\text{H}_2^+$	$2.5 \times 10^{12}$	$\text{SiO}$
$5.9 \times 10^9$	$\text{Si}_2\text{H}_7^+$	$2 \times 10^{11}$	$\text{SiO}_2$
$3.5 \times 10^{10}$	$\text{Si}_3\text{H}_4^+$	$1.3 \times 10^{13}$	$\text{H}_2\text{O}$
$4.2 \times 10^{10}$	$\text{Si}_3\text{H}_6^+$	$10^{13}$	$\text{OH}$
$1.5 \times 10^8$	$\text{Si}_4\text{H}_6^+$	$5.5 \times 10^{13}$	$\text{H}_2$
$2 \times 10^{10}$	$\text{O}_2^+$	$1.4 \times 10^{13}$	$\text{H}$
$1.8 \times 10^9$	$\text{SiO}_2^+$	$1.3 \times 10^{13}$	$\text{O}$
$1.7 \times 10^8$	$\text{H}_2^+$	$1.5 \times 10^{10}$	$\text{Si}_2\text{H}_6$
$3.5 \times 10^9$	$\text{O}^+$	$3 \times 10^9$	$\text{Si}_2\text{H}_5$
$3 \times 10^{10}$	$\text{O}^-$	$2 \times 10^8$	$\text{Si}_2\text{H}_4$
		$3.5 \times 10^9$	$\text{Si}$

عملنا ثانيا على أخذ التراكيز الاولية للجسيمات الحيدرية مساوية لـ  $1/1000$  من قيم تراكيز

المرجع حتى تكون القيم صغيرة جدا بالنسبة للقيم المطلوبة. يسمح هذا الإختيار بالوصول التدريجي لقيم

الكثافة والتراكيز عند التوازن.

بالنسبة للجسيمات المشحونة قمنا بتصحيح قيم التراكيز الاولية للأيونات بإعتماد ان الشحنة

الكلية الموجبة والسالبة داخل المفاعل تكون معدومة. للتذكير أن الايونات تحمل شحنات موجبة بإستثناء

الجسيم او الأيون الأخير رقم 35 يحمل شحنة سالبة. يسمح هذا الاختيار بأن يكون مشتق الحقل الكهربائي معدوما عند بداية الحساب العددي.

بالنسبة للتركيز الأولي لجزيء  $\text{SiH}_4$  ولجزيء  $\text{O}_2$  اعتمدنا التوزيع الأولي للغاز عند مدخل

المفاعل حسب النسب 56 بالمئة و 46 بالمئة على التوالي.

#### 4.4. مخطط برنامج الحساب

لقد أنجزنا برنامجا عدديا بلغة الفورتران 77 لحساب تراكيز الجسيمات الحيادية والأيونات في

المفاعل (ICP).

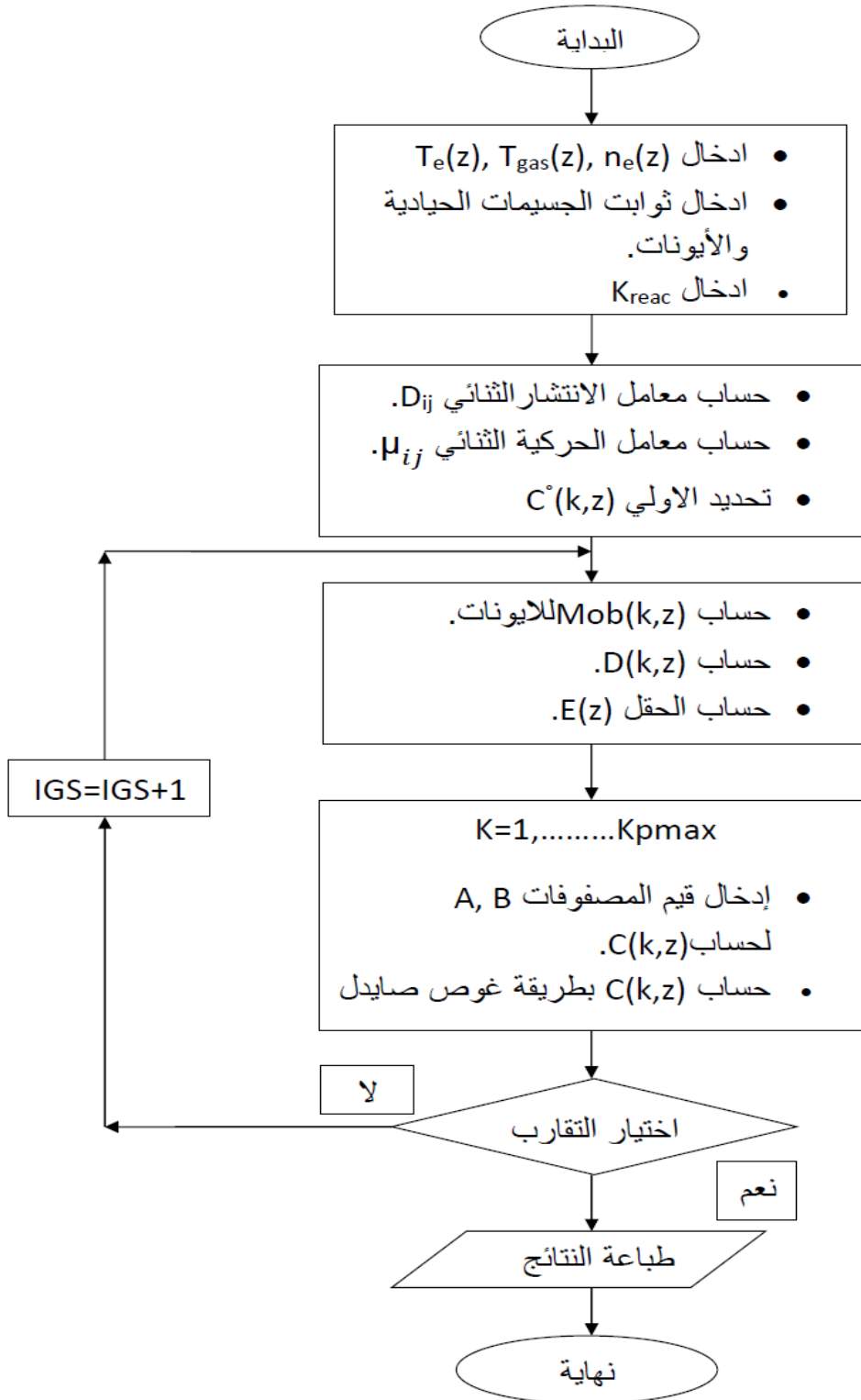
من أجل حساب سريع لقيم التقارب، يمكن القيام بحساب تراكيز الجسيمات الحيادية مع اعتماد

قيم التراكيز للأيونات ثابتة وهي المقادير الأولية لتراكيز الأيونات. ثم نقوم بعدها بحساب التراكيز

الجسيمات الحيادية والأيونات مع بعضها البعض. هذه الطريقة تقلل من الزمن المطلوب للحساب العددي

ولا تقلل من قيم النتائج النهائية للحساب.

يتم الحساب العددي لبرنامجنا وفقا للمخطط العام الموضح في الشكل 2. 3.



الشكل 2. 3: مخطط البرنامج العددي



## الفصل الثالث:

النتائج العددية ومناقشتها.

## الفصل الثالث: النتائج العددية ومناقشتها.

### 1. مقدمة

سنعرض في هذا الفصل النتائج المختلفة للنمذجة العددية لحساب تراكيز الجسيمات المحايدة

والأيونات لخليط الغاز ( $\text{SiH}_4/\text{O}_2$ ) في البلازما المقترنة بالحث (ICP) باستعمال بيانات S. Tinck

[1] and A. Bogaerts (2012). الشروط العامة للحساب كالاتي:

- تردد التشغيل 13.56Mhz.
- ضغط الغاز 10mTorr..
- درجة حرارة الالكترونات  $T_e=4\text{eV}$
- درجة حرارة الغاز  $T_{\text{gaz}}=380\text{K}$
- يتكون الغاز  $\text{SiH}_4$  بنسبة 54%،  $\text{O}_2$  بنسبة 46%.
- الجسيمات المحايدة الداخلة في التفاعل هي:  $\text{SiH}_3\text{O}$ ،  $\text{SiH}$ ،  $\text{SiH}_2$ ،  $\text{SiH}_3$
- $\text{Si}_2\text{H}_6$ ،  $\text{O}$ ،  $\text{H}$ ،  $\text{H}_2$ ،  $\text{HO}$ ،  $\text{H}_2\text{O}$ ،  $\text{SiO}_2$ ،  $\text{SiO}$ ،  $\text{Si}_3\text{H}_8$ ،  $\text{SiHO}$ ،  $\text{SiH}_2\text{O}$
- $\text{O}_2$ ،  $\text{SiH}_4$ ،  $\text{Si}$ ،  $\text{Si}_2\text{H}_5$ ،  $\text{Si}_2\text{H}_4$
- الأيونات:  $\text{Si}_2\text{H}_7^+$ ،  $\text{Si}_2\text{H}_2^+$ ،  $\text{Si}^+$ ،  $\text{Si}_2\text{H}^+$ ،  $\text{SiH}_3^+$ ،  $\text{SiH}_2^+$ ،  $\text{SiH}^+$
- $\text{O}^+$ ،  $\text{H}_2^+$ ،  $\text{SiO}_2^+$ ،  $\text{O}_2^+$ ،  $\text{Si}_4\text{H}_6^+$ ،  $\text{Si}_3\text{H}_6^+$ ،  $\text{Si}_3\text{H}_4^+$
- 85 تفاعل كيميائي.

## 2. درجة حرارة الغاز، الكثافة الالكترونية و درجة حرارة الإلكترون

نستخدم القيم التجريبية للكثافة الالكترونية ودرجة الحرارة الالكترونات، درجة حرارة الغاز وفقا

للمحور  $Z$ . القيم العددية تم استخلاصها من مذكرة الطالبة [2] A.Bahaz

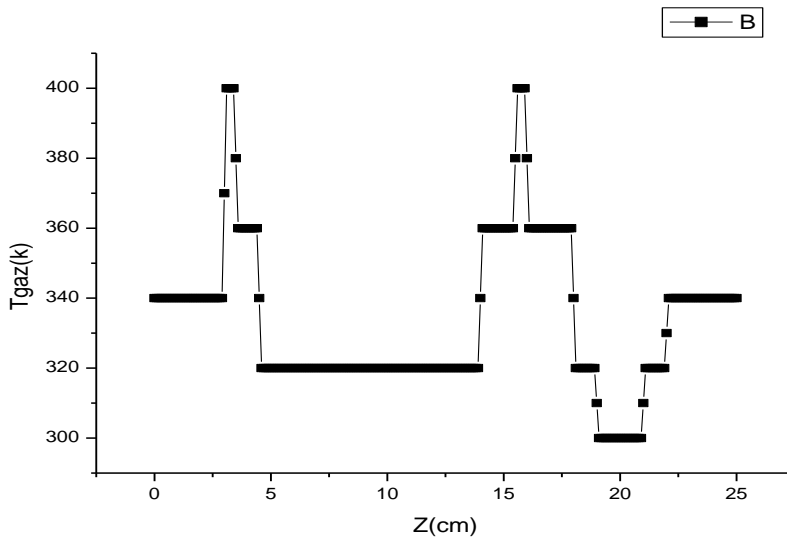
باستعمال البرمجية ORIGIN، قمنا بإيجاد دوال كثير حدود من الدرجة السادسة مقارنة

(Interpolation polynomiale) لتغير نفس المقادير السابقة بدلالة البعد  $Z$ . الغرض من هذا

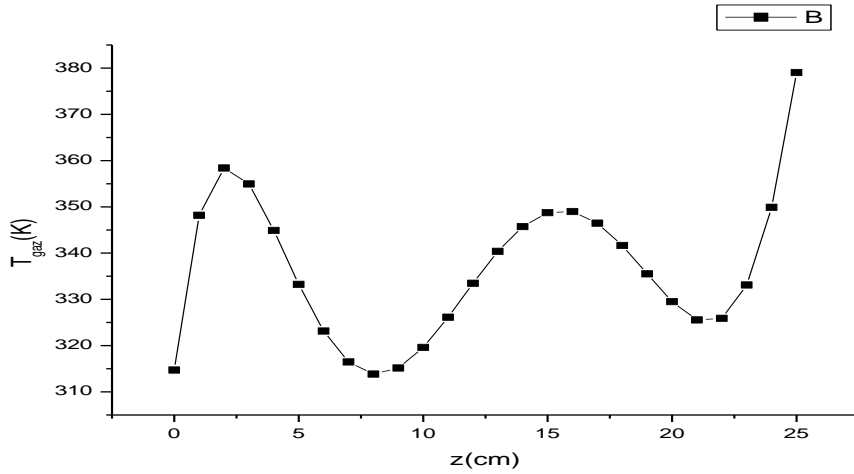
التقريب هو الحصول على منحنى خالي من الرؤوس الحادة لتغير المقادير بدلالة البعد  $Z$ .

### 1.2. درجة حرارة الغاز داخل البلازما المقترنة بالحث (ICP)

يوضح الشكلين 1 (A) و 1 (B) تغير درجة حرارة الغاز بدلالة  $Z$ .



الشكل 1.3 (A): منحنى تغير درجة حرارة الغاز  $T_{gaz}$  بدلالة البعد  $Z$  [2].



الشكل 1.3(B): منحنى تقارب كثير حدود لتغير درجة حرارة الغاز  $T_{gaz}$  بدلالة البعد  $z$

## 2.2. كثافة الإلكترونات $n_e$ داخل البلازما المترنة بالحث (ICP)

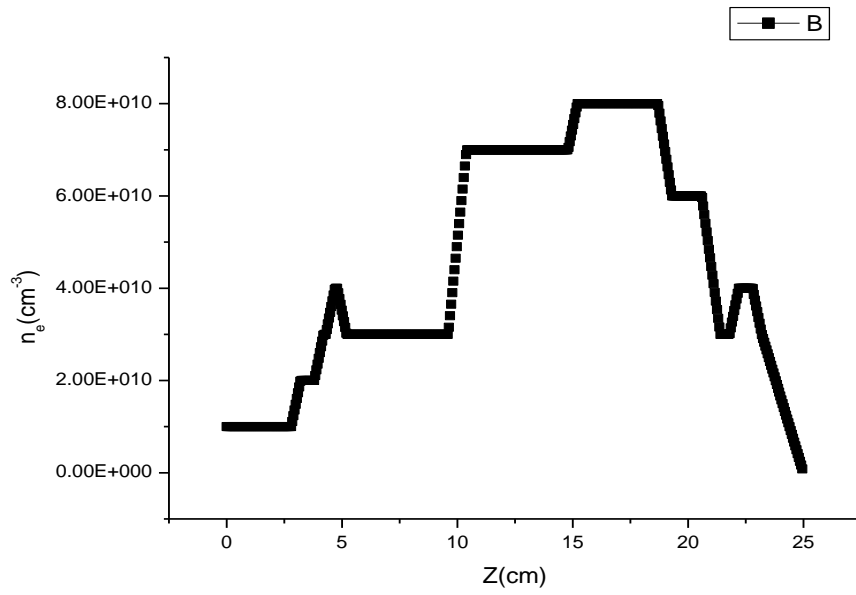
نعلم جيدا أن الكثافة الإلكترونية تلعب دورا مهما في تغيير الكثير من المقادير داخل الوسط

البلازما ICP. فتفاعل الإلكترون مع جزيء  $SiH_4$  (التفاعل 1 و 2 و 3) ومع جزيء  $O_2$  (لتفاعل

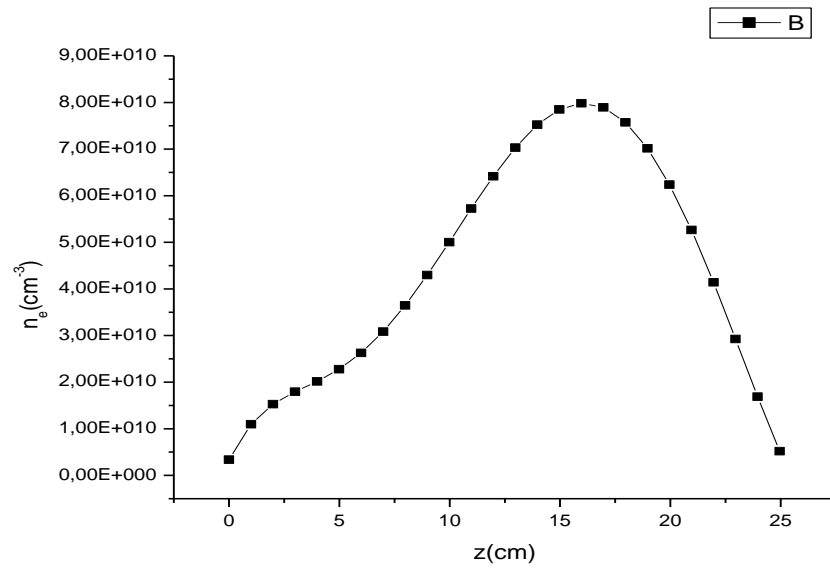
40 و 49) تشكل التفاعل الرئيس لإنتاج أولى الجذور في الوسط. باقي التفاعلات الكيميائية تأتي تباعا

لإنتاج أو إستهلاك باقي الجذور والأيونات.

يوضح الشكلين 2 (A) و 2 (B) تغير الكثافة الإلكترونية بدلالة  $z$ .



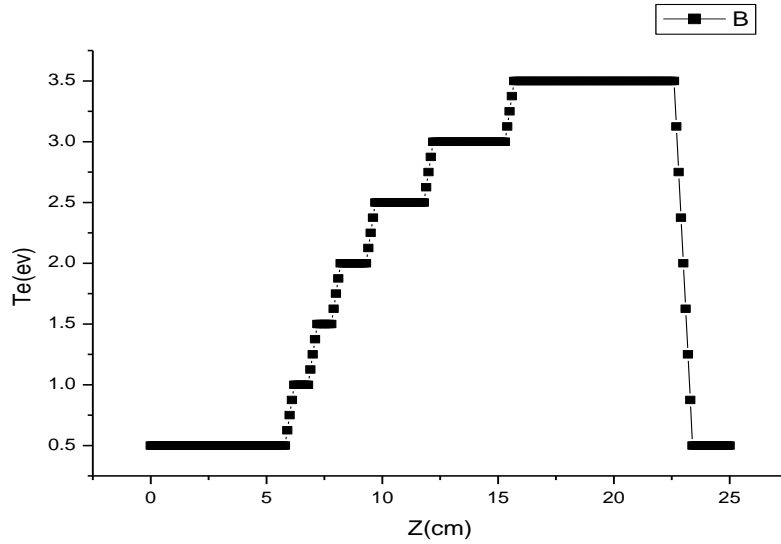
الشكل 2.3 (A): منحنى تغير كثافة الإلكترون  $n_e$  بدلالة البعد  $Z$  [2].



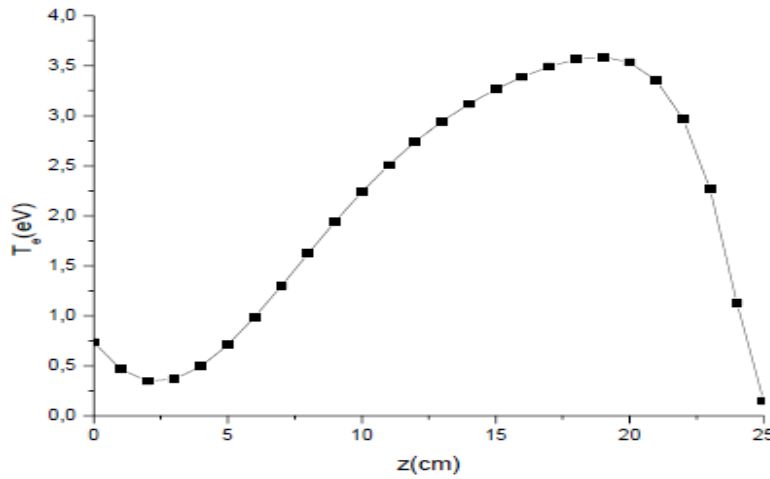
الشكل 2.3 (B): منحنى تقارب كثير حدود لكثافة الإلكترون  $n_e$  بدلالة البعد  $Z$

### 2.3. درجة حرارة الالكترونات داخل البلازما المقترنة بالحث (ICP)

يوضح الشكلين 3 (A) و 3 (B) تغير درجة حرارة الالكترونات بدلالة  $z$ .



الشكل 3.3(A): منحنى تغيرات درجة حرارة الالكترونات بدلالة البعد  $z$ .



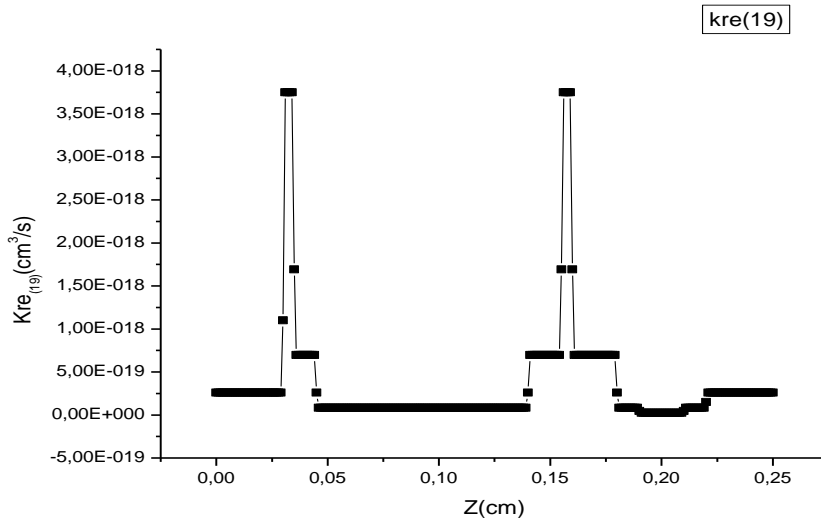
الشكل 3.3(B): منحنى تقارب كثير حدود لتغيرات درجة حرارة الالكترونات بدلالة البعد  $z$ .

### 3. معامل ثابت التفاعلات الكيميائية مع الموضع Z

نقدم في هذا العنوان تغير معدل الثابت لبعض التفاعلات الكيميائية مع البعد Z في المفاعل؛ حيث

لاحظنا:

- بعض المعادلات ثابتة مثل:  $(K_{reac}(3), K_{reac}(2), K_{reac}(1) \dots)$
- بعض المعادلات كانت معدومة مثل  $(K_{reac}(8), K_{reac}(22), K_{reac}(33) \dots)$
- باستثناء المعادلة  $K_{reac}(19)$  كانت متغيرة بالنسبة الى الموضع كما موضح في الشكل 4.3. حيث يبين الشكل تغير حاد في بعض النقاط .



الشكل 4.3: معامل ثابت التفاعل الكيميائي  $K_{reac}(19)$  بدلالة Z.

### 3. حساب نسبة التراكيز اولية بعض الجسيمات الحياضية داخل المفاعل ICP

لحساب نسبة التركيز الاولية لبعض الجسيمات الحياضية لأصول واحدة داخل المفاعل ICP

اعتمدنا على العلاقة التالية :

$$R = \frac{C_{Kre}}{\sum C'_K} \quad (1.3)$$

يوضح الجدول 1.3 بعض نسب التراكيز الأولية لبعض الجسيمات الحيادية لأصول واحدة. من خلال حساب التراكيز الأولية  $SiH_2$ ،  $SiH_3$ ،  $SiH$  لاحظنا ان نسبة  $C_{SiH3}$  كبير بكثير مقارنة بالنسبة ل  $C_{SiH2}$  و  $C_{SiH}$ . وكذلك نفس الملاحظة بالنسبة ل  $SiHO$ ،  $SiH_2O$ ،  $SiH_3O$  لاحظنا  $SiH_2O$  اكبر.

الجدول 1.3: بعض نسب التركيز الأولية لبعض الجسيمات الحيادية لأصول واحدة

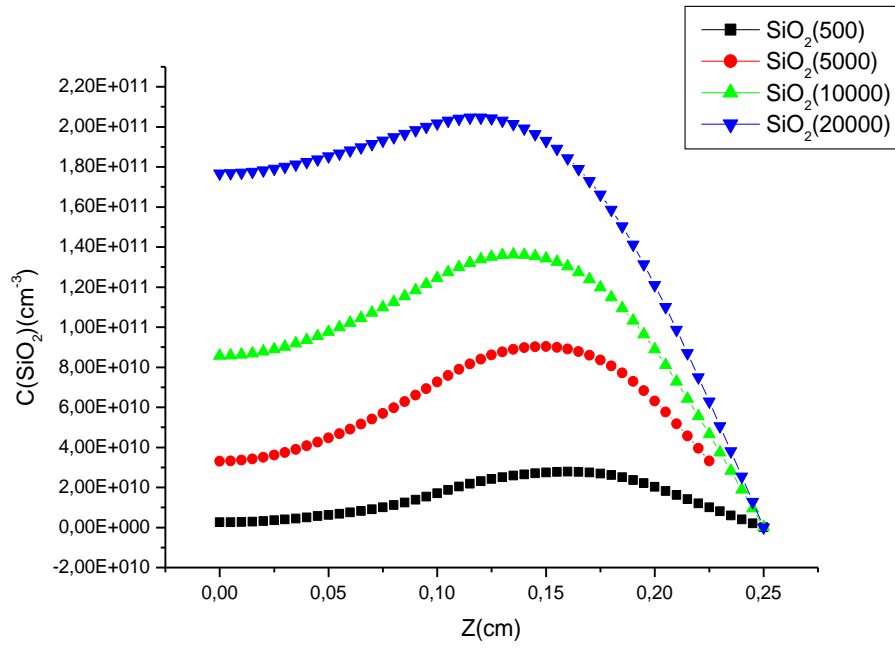
92%	$C_{SiH3} = 507807 \times 10^{12}$	$K_{\text{reac}}(1)$
7.5%	$C_{SiH2} = 4.6687 \times 10^{11}$	$K_{\text{reac}}(2)$
0.5%	$C_{SiH} = 3.2109 \times 10^9$	$K_{\text{reac}}(3)$
0.5%	$C_{SiH3O} = 1.681202 \times 10^9$	$K_{\text{reac}}(25)$
92%	$C_{SiH2o} = 5.020072 \times 10^{13}$	$K_{\text{reac}}(26)$
7.5%	$C_{SiHo} = 2.797445 \times 10^{11}$	$K_{\text{reac}}(30)$

#### 4. حساب تراكيز بعض الجسيمات الحيادية حسب عدد العمليات التكرارية

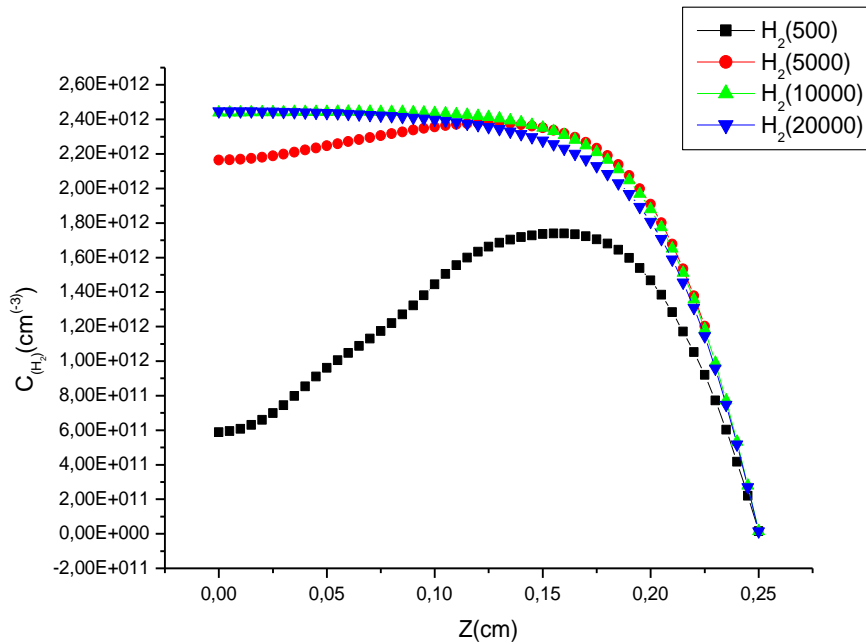
تبين الاشكال 5 و 6 و 7 تغير منحنيات بعض الجسيمات حسب عدد العمليات التكرارية

(500، 5000، 10000، 20000) لخوارزمية غوص - صايدل.

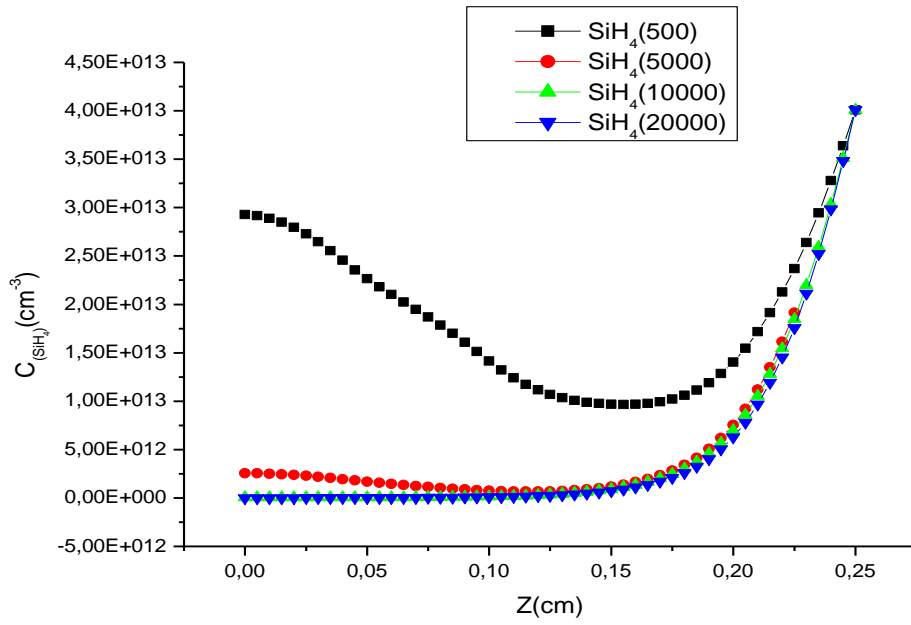




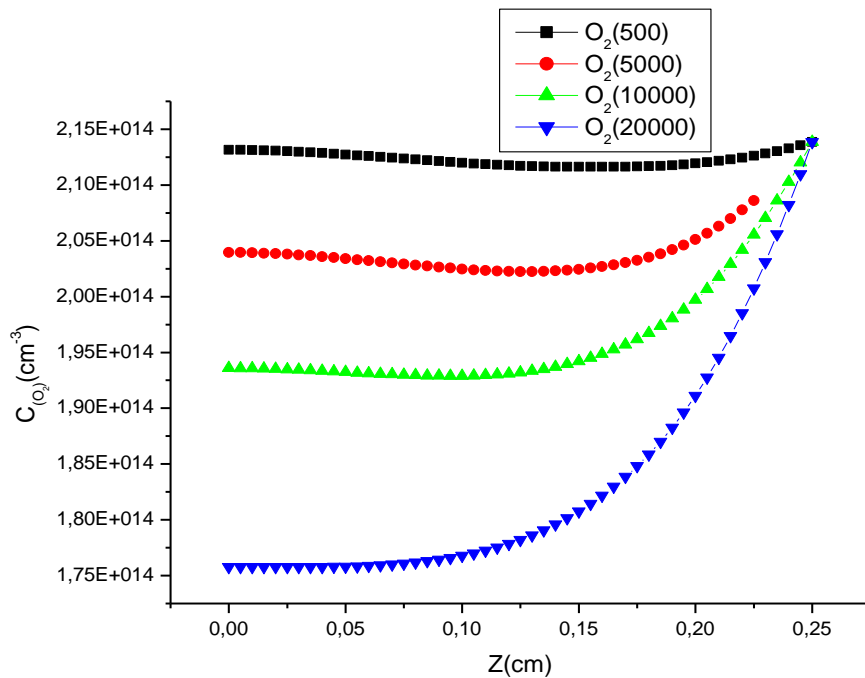
الشكل 5.3: منحنى تراكيز الجذر  $\text{SiO}_2$  باستعمال طريقة غوص صايدل التكرارية



الشكل 6.3: منحنى تراكيز الجذر  $\text{H}_2$  باستعمال طريقة غوص صايدل التكرارية



الشكل 7.3: منحنى تراكيز الجذر  $\text{SiH}_4$  باستعمال طريقة غوص صايدل التكرارية



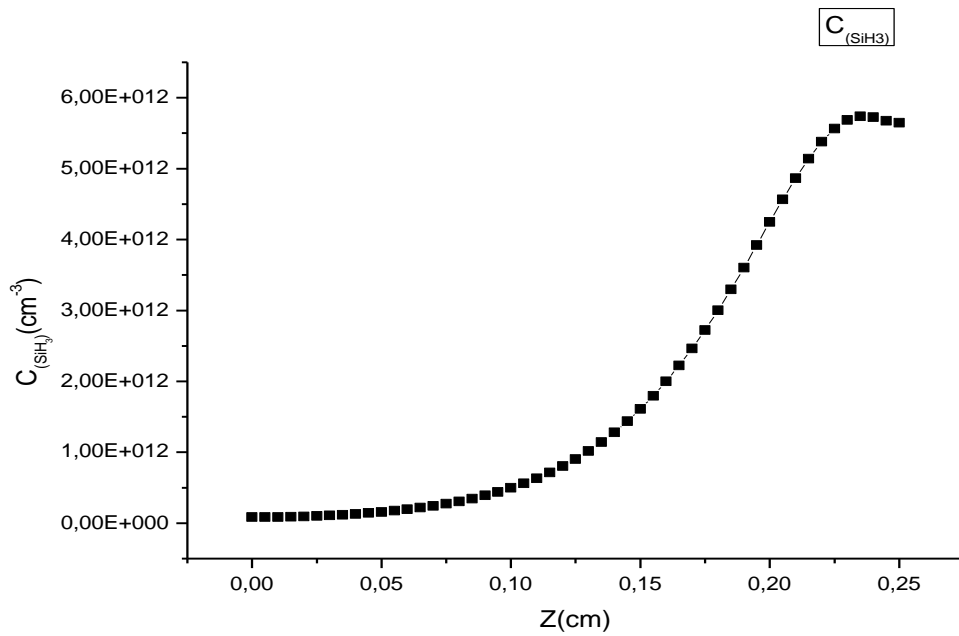
الشكل 8.3: منحنى تراكيز الجذر  $\text{O}_2$  باستعمال طريقة غوص صايدل التكرارية

لاحظنا من خلال المنحنيات السابقة ان كلما تزداد القيمة التكرارية تزداد احتمالية الوصول الى القيم اصح للتراكيز (تقارب الدوال المتغيرة). قيم التراكيز عند المدخل المفاعل تتغير بشكل ضئيل حسب عدد القيم التكرارية؛ وعند الركيزة تتغير هذه القيم بشكل كبير.

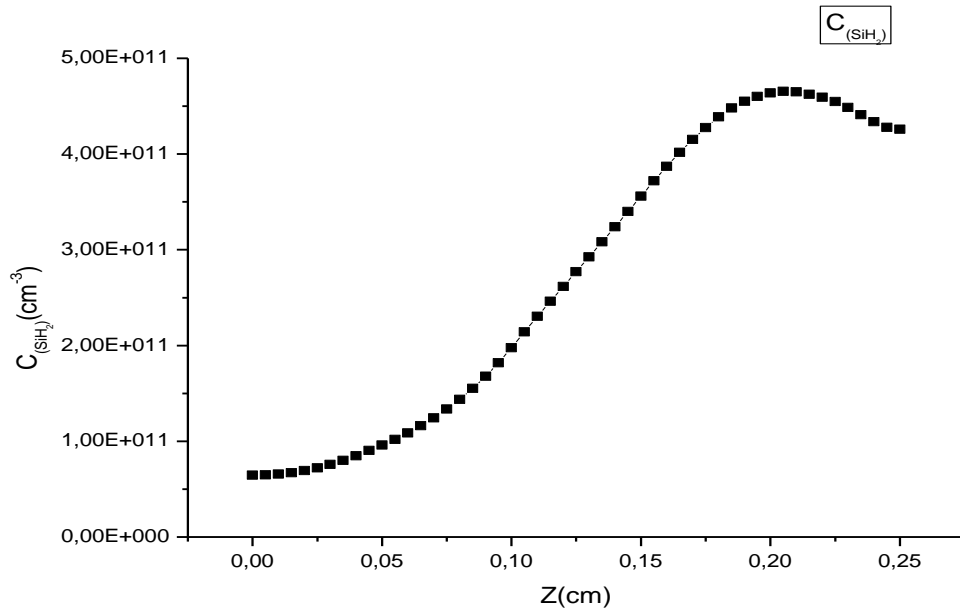
### 5. تراكيز النهائية لبعض الجسيمات الحياضية

تبين الاشكالمن 9 الى 20 تغير بعض تراكيز النهائية للجسيمات الحياضية من اجل القيمة

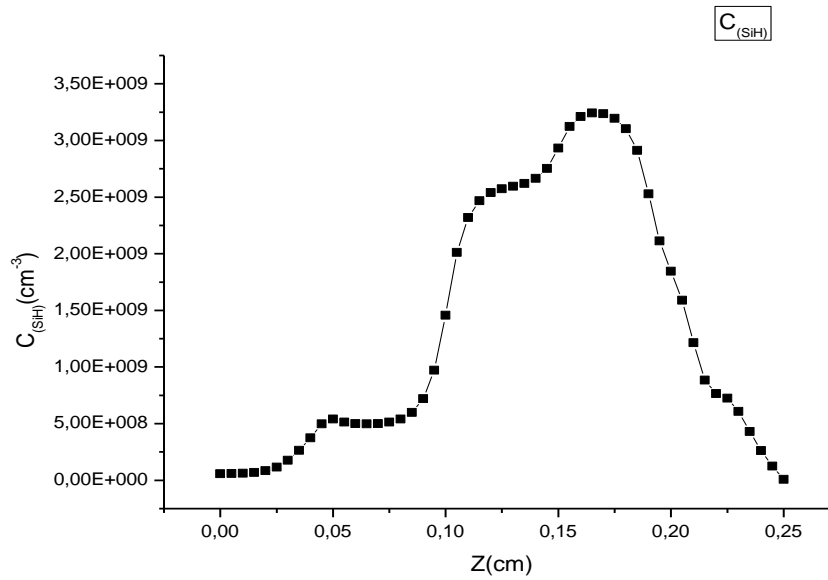
$$K_{gsmax}=20000 \text{ التكرارية}$$



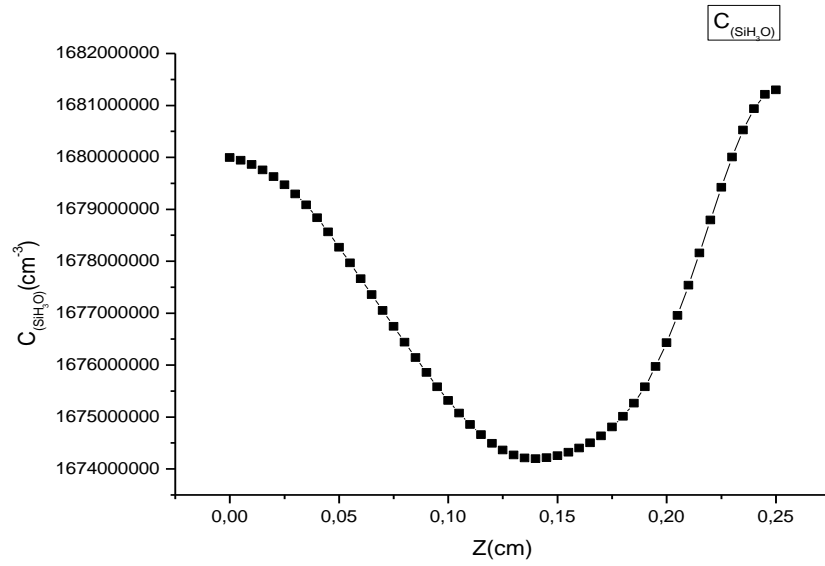
الشكل 9.3: منحنى تراكيز الجذر SiH<sub>3</sub> بدلالة الموضع Z .



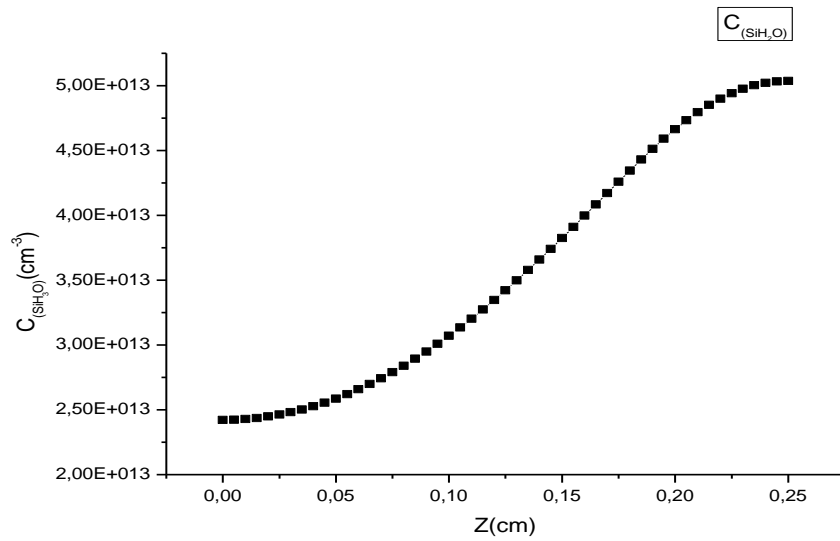
الشكل 10.3: منحنى تركيز الجذر SiH<sub>2</sub>



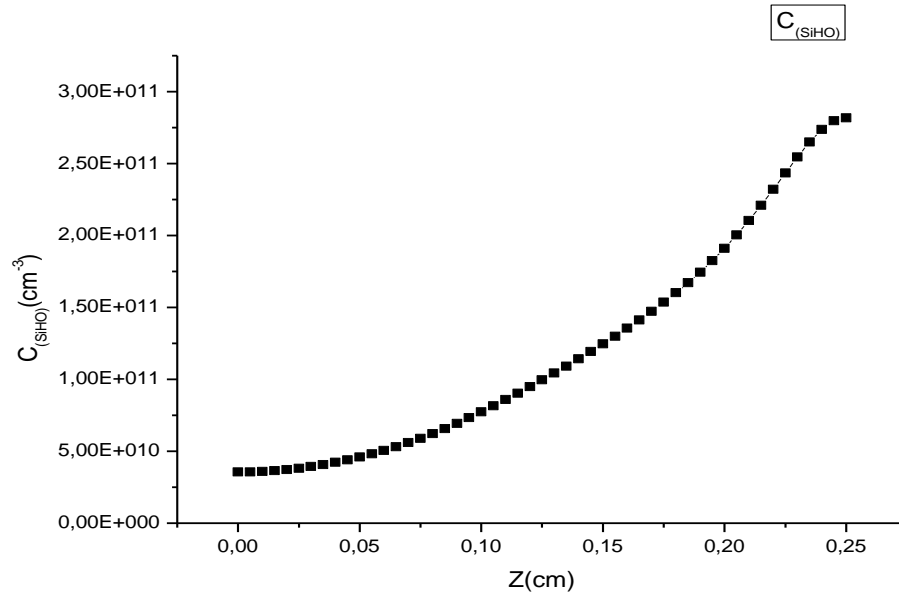
الشكل 11.3: منحنى تركيز الجذر SiH



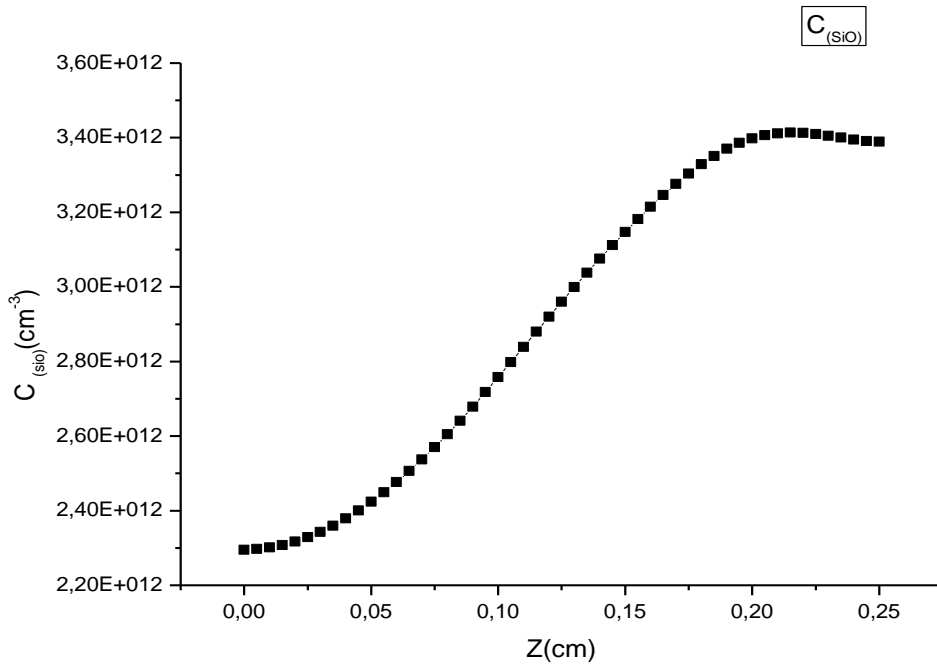
الشكل 12.3 : منحنى تركيز الجذر  $\text{SiH}_3\text{O}$



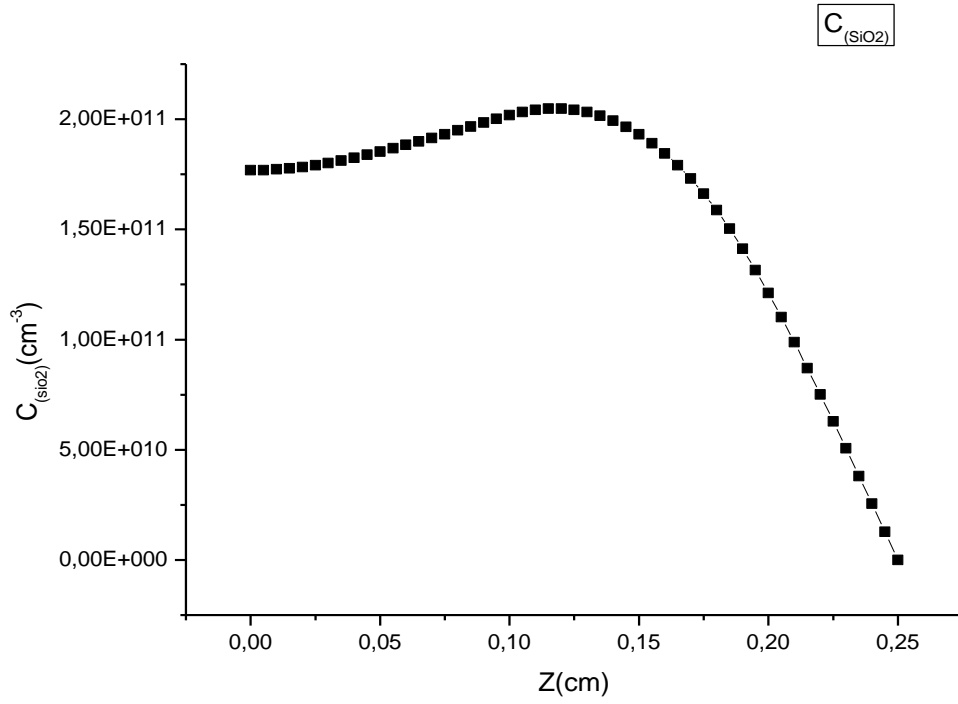
الشكل 13.3 : منحنى تراكيز الجذر  $\text{SiH}_2\text{O}$ .



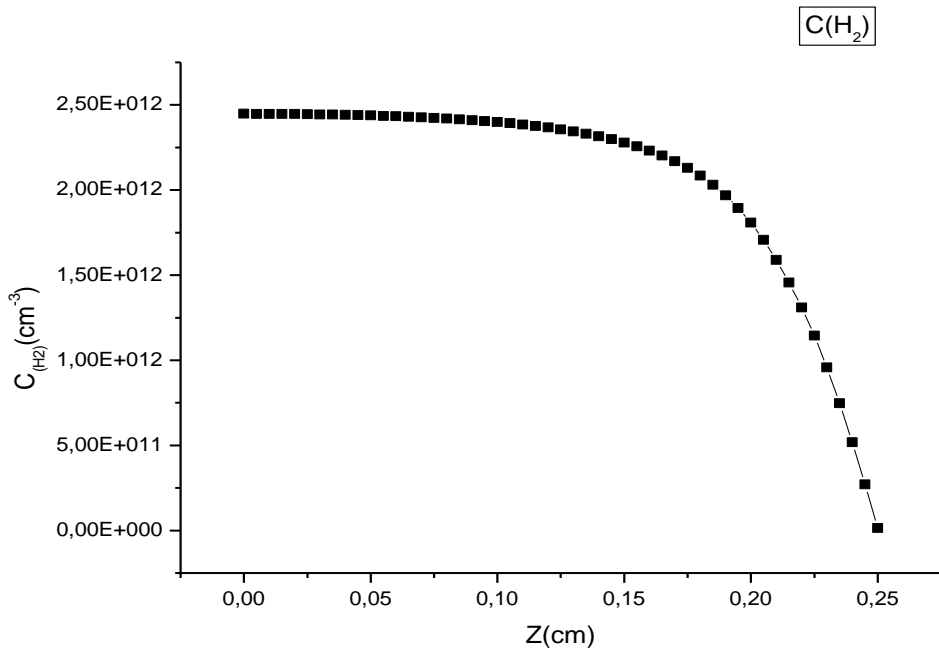
الشكل 3.14: منحنى تركيز الجذر SiHO



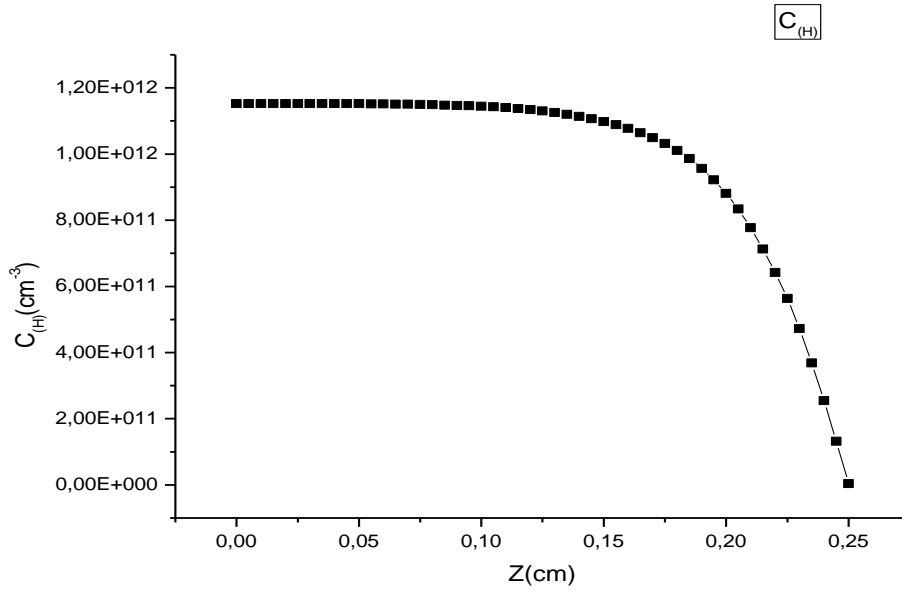
الشكل 3.15: منحنى تركيز الجذر SiO



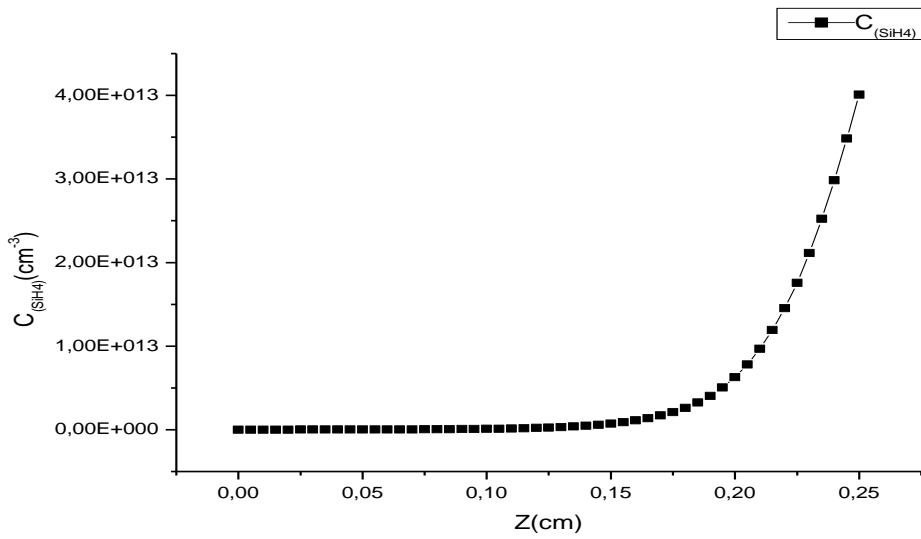
الشكل 3.16: منحنى تركيز الجذر  $\text{SiO}_2$



الشكل 3.17: منحنى تركيز الجذر H

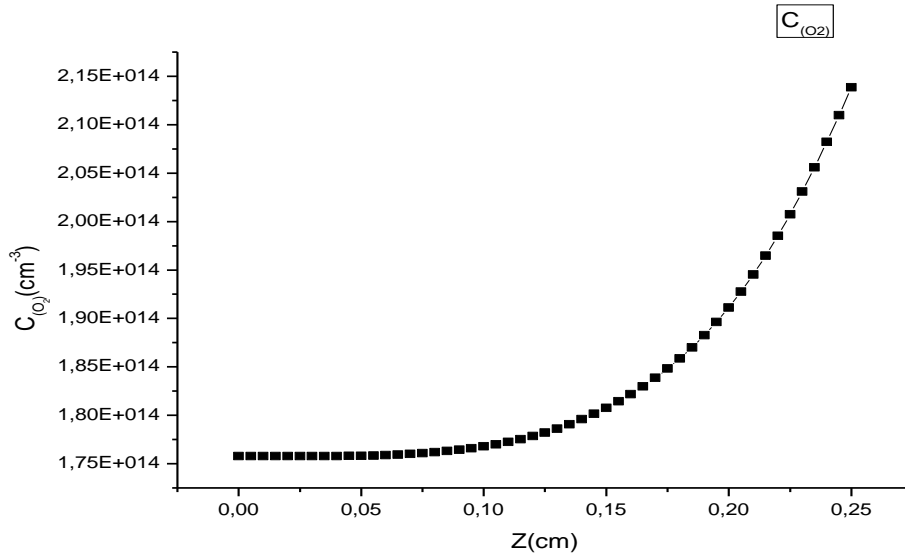


الشكل 18.3 : منحنى تركيز الجذر H



الشكل 19.3 : منحنى تركيز الجذر  $\text{SiH}_4$





الشكل 20.3 : منحني تركيز الجذر O<sub>2</sub>

يوضح الجدول 2.3- مقارنة لتراكيز بعض الجسيمات الحياضية بين مدخل المفاعل والركيزة مع

أعمال (S.Tinck and A. Bogaerts (2012)

جدول 2.3: ملاحظات منحنيات التراكيز للجزيئات والجذور

الملاحظات	قيمة التركيز عند الركيزة (cm <sup>-3</sup> )	قيمة التركيز عند المدخل المفاعل (cm <sup>-3</sup> )	الشكل
نسبة التركيز عند المدخل اكبر مقرنة عند الركيزة. بالنسبة الي المرجع [1] مقارنة الي قيمة التركيز في وسط المفاعل 1.2 × 10 <sup>12</sup>	1.2 × 10 <sup>11</sup>	6 × 10 <sup>12</sup>	الشكل 9.3
نسبة التركيز عند المدخل اكبر مقرنة عند الركيزة. بالنسبة الي المرجع [1] اكبر من قيمة التركيز المتحصلعليها 9. × 10 <sup>12</sup>	6.62 × 10 <sup>10</sup>	5 × 10 <sup>11</sup>	الشكل 10.3
نسبة التركيز عند المدخل اكبر مقرنة عند الركيزة. بالنسبة الي المرجع [1] اكبر من قيمة المتحصل عليها 3.5 × 10 <sup>10</sup>	8.015 × 10 <sup>7</sup>	6.18 × 10 <sup>7</sup>	الشكل 11.3

نسبة التركيز عند المدخل اصغر مقرنة عند الركيزة . بالنسبة الي المرجع [1] اكبر من قيمة المتحصل عليها $6.8 \times 10^{12}$	$1.679 \times 10^9$	$1.68 \times 10^9$	الشكل 12.3
نسبة التركيز عند المدخل اكبر مقرنة عند الركيزة . بالنسبة الي المرجع [1] اصغر من قيمة المتحصل عليها $4.8 \times 10^{12}$	$2.43 \times 10^{13}$	$5.04 \times 10^{13}$	الشكل 13.3
نسبة التركيز عند المدخل اكبر مقرنة عند الركيزة . بالنسبة الي المرجع [1] اكبر من قيمة المتوصل اليها $3.5 \times 10^{11}$	$4.43 \times 10^{10}$	$2.78 \times 10^{11}$	الشكل 14.3
نسبة التركيز عند المدخل اكبر مقرنة عند الركيزة . بالنسبة الي المرجع [1] اصغر من قيمة المتحصل عليها $2.5 \times 10^{12}$	$2.29 \times 10^{12}$	$3.41 \times 10^{12}$	الشكل 15.3
نسبة التركيز عند المدخل اصغر مقرنة عند الركيزة . بالنسبة الي المرجع [1] اكبر من قيمة المتحصل عليها $1.77 \times 10^{11}$	$1.77 \times 10^{11}$	$2.66 \times 10^8$	الشكل 16.3
نسبة التركيز عند المدخل اصغر مقرنة عند الركيزة . بالنسبة الي المرجع [1] اكبر من قيمة المتحصل عليها $5.5 \times 10^{13}$	$2.44 \times 10^{12}$	$1.108 \times 10^{10}$	الشكل 17.3
نسبة التركيز عند المدخل اصغر مقرنة عند الركيزة . بالنسبة الي المرجع [1] اكبر من قيمة المتحصل عليها $1.4 \times 10^{13}$	$1.16 \times 10^{12}$	$2.81 \times 10^{10}$	الشكل 18.3
نسبة التركيز عند المدخل اكبر مقرنة عند الركيزة . بالنسبة الي المرجع [1] اصغر من قيمة المتحصل عليها $1.5 \times 10^{13}$	$5.02 \times 10^{11}$	$4.03 \times 10^{13}$	الشكل 19.3
نسبة التركيز عند المدخل اكبر مقرنة عند الركيزة . بالنسبة الي المرجع [1] مقارنة الي قيمة التركيز في وسط المفاعل $8 \times 10^{13}$	$1.76 \times 10^{11}$	$2.13 \times 10^{14}$	الشكل 20.3

وبشكل عام يوجد تباين في منحنيات التراكيز للجسيمات الحيادية. بعض المنحنيات قريب من نتائج المرجع [1] وبعض الآخر غير ذلك. قمنا ببعض الحسابات على مستوى الشروط الحدية إلا أنه ربما يجب دراسات مجهرية على مستوى مدخل المفاعل أو على مستوى الركيزة.

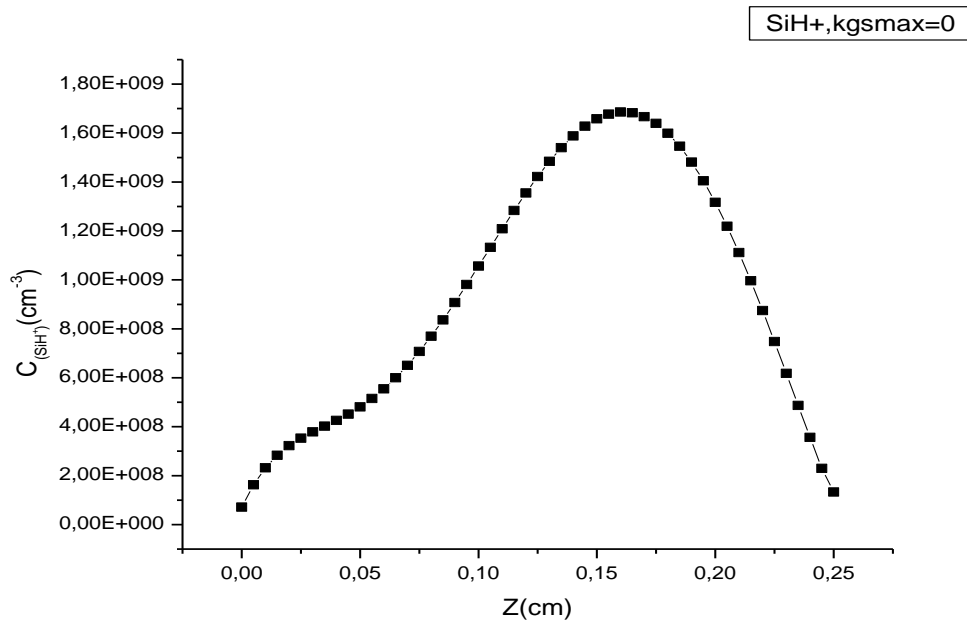
## 7. تراكيز لبعض الأيونات

تبين الأشكال من 21 الى 24 تغير تراكيز بعض الأيونات داخل المفاعل مع الموضع  $Z$ . تم حساب التقارب حسب القيم التكرارية لغوص -صايدل kgsmax. مع الاسف لم تتمكن من الحصول على التقارب في الدوال عكس ما كان يبدو ممكنا للجزيئات الحيادية. قمنا أولاً بالحساب العددي باستعمال صيغ ومعطيات  $N_e(z)$  و  $T_e(z)$  و  $T_{gaz}(z)$  المبينة في الأشكال 1 (A) و 2 (A) و 3 (A) إلا اننا لم نجد تقارب دوال

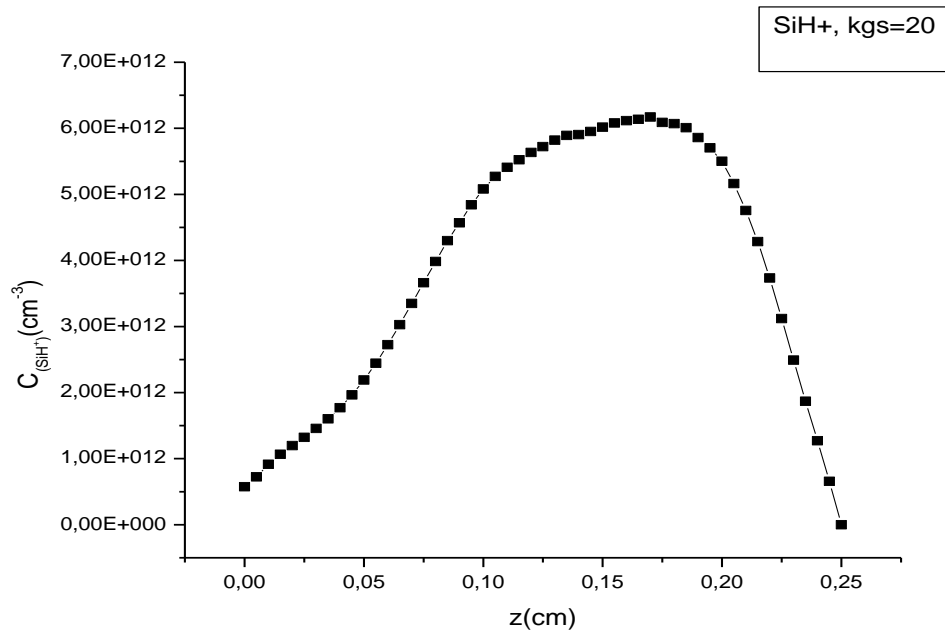
تغير التراكيز لبعض الأيونات مما يؤثر على باقي نتائج الأيونات. أرجعنا سبب عدم التقارب إلى التغيير السريع و وجود رؤوس حادة في صيغ  $N_e(z)$  و  $T_e(z)$  و  $T_{gaz}(z)$ . قمنا ثانياً بالحساب العددي باستعمال صيغ ومعطيات  $N_e(z)$  و  $T_e(z)$  و  $T_{gaz}(z)$  المبينة في الأشكال 1 (B) و 2 (B) و 3 (B)، حيث تغير الدوال (كثير حدود من الدرجة السادسة) مستمرا وليس حادا. إلا اننا لم نجد تقارب لبعض الجسيمات مما يؤثر على باقي نتائج الأيونات. قمنا ثالثاً بتصحيح قيم التراكيز المتحصل عليها باستعمال تصحيح بالحفاظ على الشحنة الكهربائية الكلية الموجبة والسالبة في المفاعل إلا أننا لم نجد تقارب في قيم التراكيز للأيونات.

إختبار التقارب كان دائما سلبيا بالنسبة للأيونات، ربما يعود السبب لوجود معامل الحركية من جهة و تأثير الحقل الكهربائي ومشتق الحقل الكهربائي خاصة (في صيغ  $A(iz,iz-1)$  و  $A(iz,iz+1)$ ).

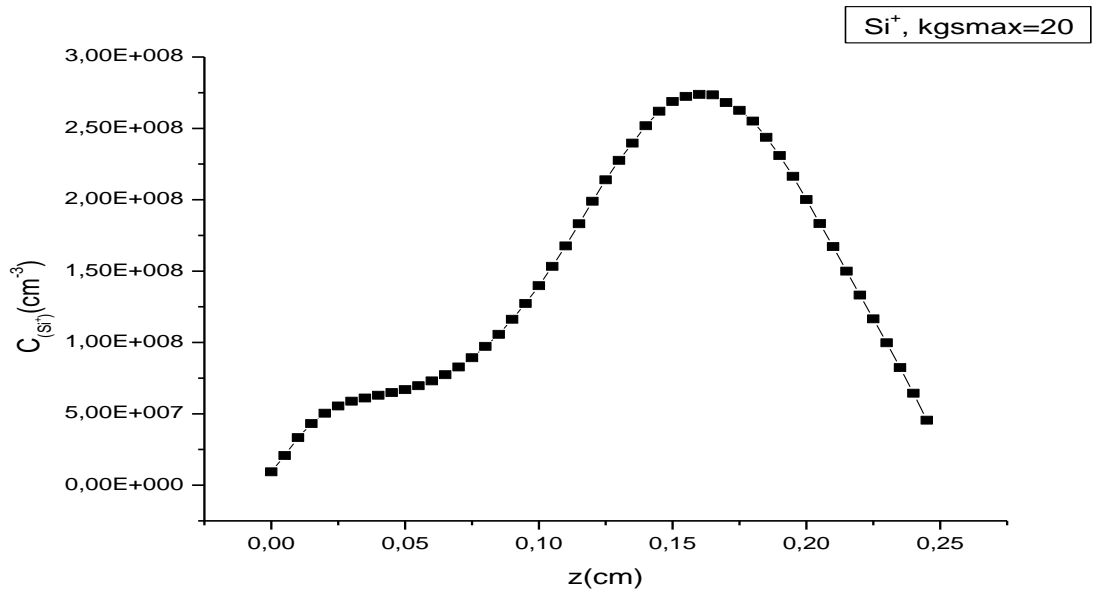
قد يكون التغير الحاد لبعض معاملات التفاعل الكيميائي تأثيرا سلبيا على تقارب الدوال (الشكل 4 لتغير معامل ثابت التفاعل الكيميائي  $(K_{reac}(19))$ . وقد تكون أسباب أخرى كقيم الثوابت الفيزيائية للجسيمات او لطريقة الحساب العددي في حد ذاتها.



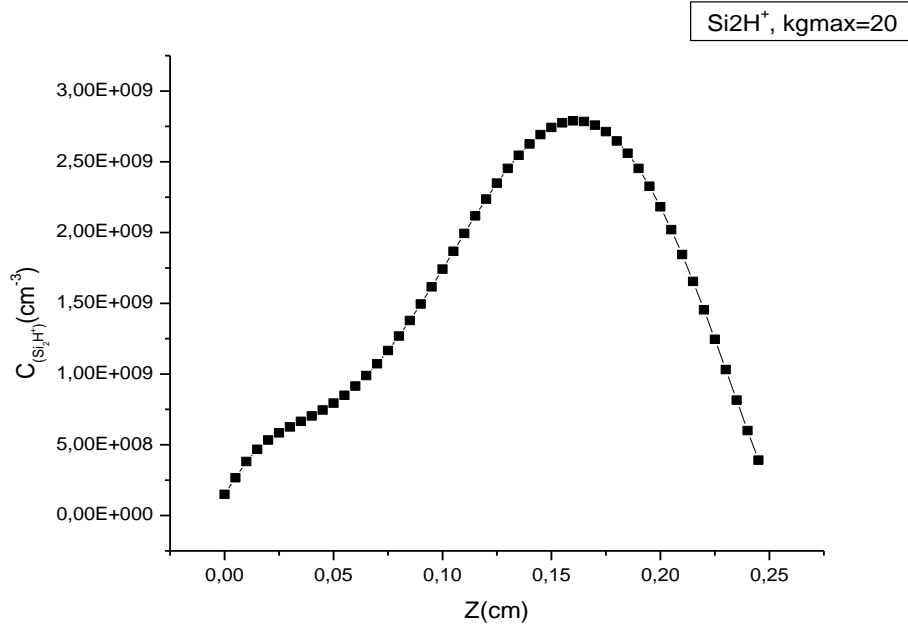
الشكل 21.3: منحنى تغير تركيز الأيون  $SiH^+$  بدلالة الموضع  $Z$ .



الشكل 22.3: منحنتغير تركيز الأيون SiH<sup>+</sup> بدلالة الموضع z.



الشكل 23.3: تغير تركيز الأيون Si<sup>+</sup> بدلالة الموضع z.



الشكل 24.3: منحنى تغير تركيز الأيون  $Si_2H^+$  بدلالة الموضع Z

يوضح الجدول 2.3 مقارنة لتراكيز بعض الايونات بين مدخل المفاعل والركيزة مع Tinck and

S.A. Bogaerts (2012)

جدول 3.3: ملاحظات منحنيات التراكيز للأيونات

الملاحظات	قيمة التركيز عند الركيزة ( $cm^{-3}$ )	قيمة التركيز عند مدخل المفاعل ( $cm^{-3}$ )	$Kgmax$	الشكل
نسبة التركيز عند المدخل اصغر مقرنة عند الركيزة. بالنسبة الي المراجع [1] أكبر من قيمة المتحصل عليها $3.1 \times 10^9$	$6.54 \times 10^8$	$1.29 \times 10^8$	$Kgmax= 0$	الشكل 21.3

نسبة التركيز عند المدخلاصغر مقرنة عند الركيزة .بالنسبة الي المرجع [1] اصغر من قيمة المتحصل عليها $3.1 \times 10^9$	$6.13 \times 10^{11}$	$6.38 \times 10^{10}$	Kgmax= 20	الشكل 22.3
نسبة التركيز عند المدخل أكبر مقرنة عند الركيزة .بالنسبة الي المرجع [1] أكبر من قيمة المتحصل عليها $6 \times 10^9$	$7.5 \times 10^6$	$5.06 \times 10^7$	Kgmax= 20	الشكل 23.3
نسبة التركيز عند المدخل أكبر مقرنة عند الركيزة .بالنسبة الي المرجع [1] أكبر من قيمة المتحصل عليها $5.2 \times 10^9$	$1.42 \times 10^8$	$3.95 \times 10^8$	Kgmax= 20	الشكل 24.3

الخلاصة العامة

والآفاق



## الخلاصة العامة والآفاق

تستعمل الطبقات الرقيقة في العديد من المجالات خاصة الالكترونييات الدقيقة باستخدام مصادر البلازما مثل (ICP) عالية الكثافة ومنخفضة الضغط. تساهم هذه المصادر في تحسين الترسيب.

في مذكرتنا هذه قمنا بدراسة خليط غازي ( $\text{SiH}_4/\text{O}_2$ ) في البلازما المقترنة بالحث (ICP) ويتم تغذيته بواسطة مصدر توتر ترددات الراديو (RF)، حيث نطبق عليه قوة التردد اللاسلكي 13.56Hz في المفاعل. اقترحنا النسب الأولية للخليط 54% من  $\text{SiH}_4$ ، 46% من  $\text{O}_2$ ، لقد أخذنا 86 تفاعل كيميائي بين الجسيمات الحيادية والأيونات. معطيات المسألة هي نفسها تلك لأعمال Tinck\_Bogaerts[1] بالنسبة للمفاعل وبالنسبة للضروف الفيزيائية  $(P_{\text{gaz}}=10\text{mTorr}, T_{\text{gaz}}=380\text{K}, T_e=4\text{ev})$ .

إقترحنا عدد الجسيمات الحيادية 20 بين جزيء وجذر، وهي:  $\text{SiH}_2$  ،  $\text{SiH}_3$  ،  $\text{H}$  ،  $\text{H}_2$  ،  $\text{OH}$  ،  $\text{H}_2\text{O}$  ،  $\text{SiO}_2$  ،  $\text{SiO}$  ،  $\text{Si}_3\text{H}_8$  ،  $\text{SiHO}$  ،  $\text{SiH}_2\text{O}$  ،  $\text{SiH}_3\text{O}$  ،  $\text{SiH}$  ،  $\text{O}$  ،  $\text{Si}_2\text{H}_5$  ،  $\text{Si}_2\text{H}_6$  ،  $\text{Si}$  ،  $\text{Si}_2\text{H}_4$  ،  $\text{SiH}_4$  ،  $\text{O}_2$  . أما عدد الأيونات فهو 15:  $\text{SiH}^+$  ،  $\text{Si}_4\text{H}_6^+$  ،  $\text{Si}_3\text{H}_4^+$  ،  $\text{Si}_3\text{H}_6^+$  ،  $\text{Si}_2\text{H}_7^+$  ،  $\text{Si}_2\text{H}_2^+$  ،  $\text{Si}^+$  ،  $\text{Si}_2\text{H}^+$  ،  $\text{SiH}_3^+$  ،  $\text{SiH}_2^+$  ،  $\text{O}_2^+$  ،  $\text{SiO}_2^+$  ،  $\text{H}_2^+$  ،  $\text{O}^-$  ،  $\text{O}^+$  .

من أجل حساب تراكيز لمختلف الجسيمات الحيادية والأيونات عملنا على حل معادلة الاستمرارية لبعده واحد Z لمفاعل أسطواني في نظام مستقر. للمندجة العددية للمسألة قمنا بتطبيق طريقة الفروق المنتهية وخوارزمية غوص صايدل التكرارية. الفصل الثاني من المذكرة بين خطوات النمذجة وخطط البرنامج العددي.

الفصل الثالث بين نتائج الحساب العددي. قمنا بحساب تراكيز الجسيمات الحيادية و دراسة تقارب الدوال حسب قيم غوص صايدل التكرارية أو حسب الشروط الحدية. من أجل عدد القيم التكرارية 20000 قمنا بمقارنة بعض النتائج مع نتائج بهاز [2] ونتائج [1] Tinck&Bogaerts. كانت النتائج متباينة بين المتوافقة والغير المتوافقة.

محاولة حساب تراكيز الأيونات، بين صعوبة في تقارب الدوال رغم محاولات تجنب أسباب التباعد بإستعمال تقريب دوال كثير حدود من الدرجة السادسة.

إن ما أنجزناه في مذكرتنا هذه دفعنا الى طرح اقتراحات أخرى لتطبيق نموذج الموائع على بلازما المقترنة بالحث ICP. من هذه المقترحات مايلي:

- النظر في الشروط الحدية من جديد لإيجاد حل لتقارب الحلول التكرارية،
- دراسة مجهرية على مستوى مدخل المفاعل وعلى مستوى الركيزة،
- دراسة شاملة للجسيمات الحيادية والأيونات والإلكترونات وفي في شروط مغايرة ،
- دراسة نموذج الموائع لمفاعل مماثل في نظام متغير مع الزمن و/أو في بعدين أو أكثر،
- دراسة غاز ( $\text{SiH}_4/\text{O}_2$ ) أو خليط غازي آخر في نوع آخر من المفاعلات.

# قائمة المراجع

## قائمة المراجع

[1] S. Tinck and A. Bogaerts; "Modeling SiH<sub>4</sub>/O<sub>2</sub>/Ar Inductively Coupled Plasmas Used for Filling of Microtrenches in Shallow Trench Isolation (STI)"; Plasma Processes and Polymers, Vol. 9,N° 5,pp 1-18, 2012.

[2] A. Bahaz; "Calculation of concentrations of neutral particles in SiH<sub>4</sub>/O<sub>2</sub> gas mixture in Inductively Coupled Plasma (ICP)"; Mémoire de Master, Université de Ouargla, Juin 2021.

[3] و. أحمد عبد العزيز؛ "كتاب فيزياء البلازما"؛ الطبعة الأولى 2004 مدار النشر والتوزيع، عمان.

[4] G. Fischer; "Reactive ion etching of crystalline silicon plasma nanotexturing of Silicon for photovoltaic applications: Tailoring plasma surface interactions for improved light management plasma ph"; Thèse de Doctorat ;Université Paris Saclay, Novembre 2018.

[5] S. Q Xiao and S. Xu; " Plasma-aided fabrication in Si-based photovoltaic applications: an overview"; J. Phys. D: Appl. Phys. 44 174033 (12pp), 2011.

[6] ب. بحسين صالح ربيع؛ "كتاب أساسيات في فيزياء البلازما"؛ مطبعة الرائد جامعة بابل. بغداد

2009

[7] O. Babahani; "Simulation numérique par la méthode de Monte Carlo de la déposition de couches minces par procédés CVD"; Thèse de Doctorat, Université de Ouargla, Novembre 2013.

[8] س. عبيد؛ "دراسة في ثلاث أبعاد للمقادير الكهربائية في جهاز الرش المهبطي المغنطوني باستعمال

طريقة الحجم المنتهية"؛ مذكرة ماجستير، جامعة قاصدي مرباح ورقلة، 2012.

[9] M. Moisan and J. Pelletier; "Physique des plasmas collisionnels application aux décharges hautes fréquences"; EDP Sciences, France, 2006.

[10] ز. بلة؛ " نمذجة لخصائص كهربائية، موضعية وزمنية، لبلازما الأروغون والحساب العددي لمسبار

لانجمير داخل جهاز رش مهبطي مغنطوني مغدى بنظام RF"؛ رسالة دكتوراه، جامعة ورقلة، جوان

.2020

- [11] L. Kroely; "Process and material challenges in the high rate deposition of microcrystalline silicon thin films and solar cells by Matrix Distributed Electron Cyclotron Resonance plasma"; Thèse de doctorat, Ecole Polytechnique Paris Tech, 2010.
- [12] O. Kebaili; "Contribution à l'étude par la simulation numérique de Dynamique Moléculaire de la croissance des couches minces par procédé PECVD"; Mémoire de Magister, Université de Ouargla, Septembre 2013.
- [13] O. Babahani; "Contribution à l'étude des plasmas lors de déposition sur couches minces par procédés CVD"; Mémoire de Magister, Université de Ouargla, Mai 2004.
- [14] ز.بلبة ؛ "الدراسة التشخيصية بالمحاكاة العددية لمسبار كهربائي ساكن في رش مهبطي"؛ مذكرة ماجستير, جامعة ورقلة، ماي 2007.
- [15] S. Kobbi; "Etude des mélanges gazeux pour le calcul des propriétés électriques de plasmas à plusieurs composantes ioniques dans un pulvérisateur cathodique en régime RF"; Mémoire de Master, Université de Ouargla, Juin 2017.
- [16] س. برقوق؛ "دراسة عددية لغاز الأرجون عند توضع الطبقات الرقيقة بواسطة تقنية الرنين السيكلوتروني PECVD\_ECR"؛ مذكرة ماستر، جامعة ورقلة، جوان 2019.
- [17] و. رقاودة؛ "دراسة الخصائص الكهربائية لبلازما غاز SF<sub>6</sub> في جهاز رش مهبطي متناوب RF"؛ مذكرة ماستر، جامعة ورقلة، أكتوبر 2020.
- [18] K. D. Mackenzie, J. W. Lee, and D. Johnson; "inductively-coupled plasma deposition of low temperature Silicon dioxide and Silicon nitride films for III-V applications ; Plasma-Therm. Vol. **99**, page 1-12, 1999.
- [19] T. Okumura; "Inductively Coupled Plasma sources and applications"; Physics Research International, Vol. pages 14, 2010.
- [20] Z. Ballah and F. Khelfaoui; "Numerical modeling of the electrical properties plasma argon in a RF magnetron sputtering and with Einstein's relation of electron diffusivity"; Journal of King Saud University, Vol. **1**, N° 3, pp: 1-8, 2018.
- [21] A. Bogaerts; "Effects of oxygen addition to argon glow discharges: A hybrid Monte Carlo-fluid modeling investigation"; Spectrochimica Acta B Part B, Vol. **64**, page 1266–1279, 2009.

- [22] M. J. Kushner; "A model for the discharge kinetics and plasma chemistry during plasma enhanced chemical vapor deposition of amorphous silicon"; J. Appl. Phys., Vol. **63**, 2532, 1988
- [23] NIST, Chemical Kinetics Database,  
<http://kinetics.nist.gov/kinetics/index.jsp>; consulted on: 20/05/2022.
- [24] UMIST RATE12 astrochemistry.net, <http://udfa.ajmarkwick.net/index.php> ;  
consulted on: 25/05/2022
- [25] Yu. E. Gorbachev; "Effect of oligomers on the growth of amorphous silicon films in a PECVD reactor"; Technical Physics, Vol. **51**, N° 6, pp. 733–733, 2006.
- [26] M. J. Kushner; "Plasma chemistry of He/O<sub>2</sub>/SiH<sub>4</sub> and He/N<sub>2</sub>O/SiH<sub>4</sub> mixtures for remote plasma-activated chemical-vapor deposition of silicon dioxide"; J. Appl. Phys., Vol. **74**, N° 1, pages 6538-6553, 1993.
- [27] D. Herrebout, A. Bogaert, M. Ya, R. Gijbels, W. Goedheer and E. Dekempeneer; "One-dimensional fluid model for an RF methane plasma of interest in deposition of diamond-like carbon layers"; Journal of Applied Physics, Vol. **90**, N° 2, pages 570-579, 2001.
- [28] O. Babahani and F. Khelfaoui; " Calcul des concentrations de molécules et de radicaux lors de déposition de couches minces a-Si:H par procédés PECVD"; AST, Vol. **4**, n°2, pp115 – 120, 2012.
- [29] J. Perrin, O. Leroy and M. C. Bordage; "Cross-Sections, Rate Constants and Transport Coefficients in Silane Plasma Chemistry"; Contributions to Plasma Physics, Vol. **36**, N° 1, pp: 3-49, 1996.
- [30] P. André, J. Aubreton, S. Clain, M. Dudeck, E. Duffour, M. F. Elchinger, B. Izrar, D. Rochette, R. Touzani and D. Vacher; "Transport coefficients in thermal plasma. Applications to Mars and Titan atmospheres"; Eur. Phys. J. D Vol. **57**, 227–234, 2010.

**ملخص:** تهتم دراستنا هاته بحساب تراكيز الجسيمات الحياضية و الأيونات لخليط الغاز  $\text{SiH}_4/\text{O}_2$  الذي يستعمل غالبا في توضع الطبقات الرقيقة بواسطة بلازما المقترنة بالحث (ICP). نركز في عملنا على 20 جسيم حياضي، 15 ايون، 85 تفاعل كيميائي داخل المفاعل بأخذ بعين الاعتبار الشروط التي استخدمها S. Tinck and A. Bogaerts (2012) ( $T_{\text{gaz}}=380\text{K}$ ,  $T_e=4\text{eV}$ ,  $P_{\text{gaz}}=10\text{mTorr}$ ). قمنا بانجاز برنامج عددي بلغة Fortran77 لحساب ثوابت التفاعلات الكيميائية و معاملات الانتشار ومعاملات الحركة والتراكيز لكل من الجسيمات الحياضية والأيونات. ويعتمد برنامجنا على نموذج الموائع (معادلة الاستمرارية) ومعادلة بواسون وطريقة الفروق المنتهية وخوارزمية غوص صايدل التكرارية.

**الكلمات المفتاحية:**  $\text{SiH}_4/\text{O}_2$ , ICP, تراكيز نموذج الموائع, معامل الانتشار, معامل الحركة, ثوابت التفاعلات الكيميائية, طريقة الفروق المنتهية, خوارزمية غوص صايدل.

**Résumé :** cette étude porte sur le calcul des concentrations de particules neutres et d'ions du mélange gazeux  $\text{SiH}_4/\text{O}_2$  souvent utilisé dans la pose de couches minces par plasma à couplage inductif ICP. Dans notre travail, nous nous concentrons sur 20 particules neutres, 15 ions, 85 réactions chimique à l'intérieur du réacteur, en tenant compte des conditions qu'il a utilisées S. Tink et A. Bogaerts ( $P_{\text{gaz}}=10\text{mTorr}$ ,  $T_e=4\text{eV}$ ,  $T_{\text{gaz}}=380\text{k}$ ). Nous avons implémenté un programme numérique en langage Fortran77 pour calculer les constantes de réaction chimique, le coefficients de diffusion, le coefficients mobilité et les concentrations pour chacune des particules neutres et des ions. Notre programme est basé sur le modèle fluide (équation de continuité), Université de Ouargla, équation de Poisson, la Méthode des Différences Finies et l'algorithme itératif de Gauss-Seidel.

**Mots clés :**  $\text{SiH}_4/\text{O}_2$ , ICP, concentrations, modèle fluide, coefficients de diffusion, coefficients de mobilité, constantes de réactions, Méthode des Différences Finies, algorithme de Gauss-Seidel.

**Abstract:** this study is concerned with calculating the concentrations of neutral particles and ions of the  $\text{SiH}_4/\text{O}_2$  gaz mixture that is of tear used in laying thin layers by inductively coupled plasma ICP. In our work, we focus on 20 neutral particles, 15 ions, chemical reactions inside the reactor, taking into account the conditions le used S. Tink and A. Bogaerts ( $P_{\text{gaz}}=10\text{mTorr}$ ,  $T_e=4\text{eV}$ ,  $T_{\text{gaz}}=380\text{k}$ ). we have implemented a numerical program in the langage of Fortran77 to calculated the chemical reaction constants, diffusion coefficient, kinetic coefficient and concentration for each of the neutral particles and ions. Our program is based on the fluid model (continuity equation), Poisson equation, Finite Differences Method and algorithm iterative of Gauss-Seidel.

**Key words:**  $\text{SiH}_4/\text{O}_2$ , ICP, concentrations, fluid model, diffusion coefficient, mobility coefficient, rate constants, Finite differences method, iterative algorithm of Gauss-Seidel.