

جامعة قاصدي مرباح ورقلة

كلية الرياضيات وعلوم المادة

قسم الفيزياء

رقم الترتيب :

رقم التسلسلي:



مذكرة

ماستر أكاديمي

مجال : علوم المادة

فرع : فيزياء

تخصص : فيزياء الإشعاعات

من إعداد الطالبتين:

يخلف فاطمة الزهراء بن حبيرش شفاء

بعنوان:

حساب تراكيز الجسيمات الحيدانية والأيونات لخليط الغاز
(SiH_4/O_2) في البلازما المقترنة بالحث (ICP) بمعالجة الشروط الحدية
والحلول الأولية

نوقشت بتاريخ:

2023 / 06 / 22

أمام أعضاء لجنة المناقشة المكونة من:

بن مبروك الأزهر	أستاذ تعليم عال	جامعة ورقلة	رئيسا
بن طويلة عمر	أستاذ محاضر (أ)	جامعة ورقلة	ممتحنا
خلفاوي فتحي	أستاذ تعليم عال	جامعة ورقلة	مشرفا
بللة زكية	أستاذ محاضر (ب)	جامعة ورقلة	مساعد مشرف

الموسم الجامعي: 2023/2022

إهداء

إلى من كان لي سنداً و عوناً عند الشدائد طوال عمري إلى الرجل الأبرز في حياتي

أبي العزيز

إلى القلب المعطاء والصدر الحاني

أمي الحبيبة

إلى كبيرة المقام ذات السيرة العطرة

جدتي الغالية

إلى من شد الله بهم عضدي فكانوا خير معين

إخواني وأخواتي

إلى كل من ساعدني ولو بحرف في حياتي الدراسية...

إلى هؤلاء جميعاً أهديكم هذا العمل

يخلف فاطمة الزهراء

إهداء

بسم الله الرحمن الرحيم

وصلى الله على صاحب الشفاعة سيدنا محمد النبي الكريم وعلى آله
وصحبه الميامين ومن تبعهم بإحسان الى يوم الدين وبعد.

الحمد لله الذي وفقنا لتتميم هذه الخطوة في مسيرتنا الدراسية بمذكرتنا هذه
ثمرة الجهد والنجاح بفضلته تعالى مهداة الى الوالدين الكريمين حفظهما الله
وأدامهما نورا لدربي.

الى من يذكرهم القلب قبل أن يكتب القلم الى من قاسموني حلو الحياة ومرها
تحت سقف واحد أخواتي والى كل من ساهم في إتمام هذا البحث.

الى أحسن من عرفني بهم القدر الأصدقاء القدامى وأصدقاء الدراسة الى
كل من لم يدركهم قلبي أقول لهم بعدتم ولم يبعد عن القلب حبكم وأنتم في
الفؤاد حضور.

أرجو أن يكون بحثنا هذا خالصا لوجه الله وأن تكون فيه فائدة وأن يغفر الله
لنا زلاتنا ويثبتنا على ما وفقنا اليه ويعلمنا ويكتبنا مع طلبة العلم اتباعا لسنة
نبيه الكريم عليه أفضل الصلاة والسلام.

بن حيرش شفاء

شكر وتقدير

الحمد لله رب العالمين والصلاة والسلام على أشرف الأنبياء والمرسلين سيدنا محمد وعلى آله وصحبه ومن تبعهم بإحسان الى يوم الدين وبعد ...

نشكر الله تعالى على فضله حيث أتاح لنا انجاز هذا العمل بفضلته فله الحمد والشكر وهو الرحمان المستعان.

ثم نشكر أولئك الأخيار الذين مدوا لنا يد المساعدة خلال هذه الفترة وفي مقدمتهم البروفسور **فتحي خلفاوي** استاذ تعليم عالي بجامعة ورقلة المشرف على عملنا هذا الذي لم يدخر جهدا في مساعدتنا فله أخلص التحية وأعظم التقدير على كل ما قدمه لنا من نصائح وإرشادات ووقت طوال فترة مسيرنا.

كما نتقدم بالشكر والعرفان للأستاذة الكرام أعضاء لجنة المناقشة الموقرة:

نشكر الأستاذ **بن مبروك الأزهر** استاذ تعليم عالي بجامعة ورقلة لقبوله ترأس لجنة المناقشة، كما نتقدم بجزيل الشكر للأستاذ **بن طويلة عمر** استاذ محاضر (أ) بجامعة ورقلة لقبوله مناقشة المذكرة، كما لا ننسى ان نتقدم بشكر خاص للأستاذة مساعدة المشرف **بلة زكية** استاذ محاضر (ب) بجامعة ورقلة.

كما نتقدم بشكر جزيل لكل عمال مخبر الاشعاع والبلازما وفيزياء السطوح (L.R.R.P.S)، ولكل عمال الحاضنة الجامعية لحسن استقبالهم لنا.

والشكر موصول الى كل معلم أفادنا بعلمه من أولى المراحل الدراسية حتى هذه اللحظة.

كما نشكر كل من مد لنا يد العون من قريب أو بعيد والى كل من ساهم في انجاز هذا العمل المتواضع جزاهم الله خير الجزاء

وفي الأخير لا يسعنا إلا أن ندعو الله عز وجل أن يرزقنا السداد والرشاد والعفاف والغنى وأن يجعلنا هداة مهتدين.

فهرس المحتويات

الصفحة	المحتويات
I	الإهداء
II	التشكرات
V	فهرس المحتويات
vIII	قائمة الأشكال والجدول
1	المقدمة العامة
<u>الفصل الأول: عموميات حول البلازما المقترنة بالحث ICP</u>	
3	I. نظرة عامة حول البلازما وخصائصها
3	1.I. تعريف البلازما
3	2.I. خصائص البلازما
4	3.I. تعريف البلازما الباردة
4	4.I. تعريف ببعض المقادير الفيزيائية
4	1.4.I تردد البلازما $\omega_{p,e,i}$
5	2.4.I طول ديبياي λ_D
6	3.4.I توزيع الجسيمات داخل البلازما
7	5.I الأغشية الرقيقة
7	1.5.I تعريف الأغشية الرقيقة
7	6.I طرق توضع الطبقات الرقيقة

7	1.6.I طرق التوضع الفيزيائي في الطور البخاري (PVD)
8	2.6.I طرق التوضع الكيميائي في الطور البخاري (CVD).....
8	3.6.I تطبيقات الاغشية الرقيقة.....
9	7.I البلازما المقترنة بالحث ICP
9	1.7.I تعريف البلازما المقترنة بالحث ICP.....
9	2.7.I مبدأ البلازما المقترنة بالحث ICP
11	3.7.I تطور البلازما المقترنة بالحث ICP.....
11	8.I نموذج الموائع.....
12	9.I المعادلات الأساسية لنموذج الموائع
12	1.9.I معادلة الاستمرارية.....
13	2.9.I معادلة كمية الحركة
13	3.9.I معادلة الطاقة.....
14	4.9.I معادلة بواسون.....
<p>الفصل الثاني : نمذجة حساب تراكيز الجسيمات الحيدية والأيونات في</p> <p><u>مفاعل (ICP) بمعالجة الشروط الحدية والحلول الأولية.</u></p>	
16	1. II المقدمة.....
16	2. II الظاهرة الفيزيائية.....
18	3. II النموذج الرياضي
18	1.3. II معادلة الاستمرارية.....
20	2.3. II التفاعلات الكيميائية للجسيمات الحيدية والأيونات

23 II 3.3. معامل الانتشار الثنائي D_{ij} للجسيمات الحيادية
24 II 4.3. معامل الانتشار D_j للجسيمات المحايدة
25 II 5.3. معامل الحركة الثنائي للأيونات
26 II 6.3. معامل الانتشار D_j للأيونات
26 II 4. النموذج العددي
27 II 1.4. المعادلات الأساسية لحساب تراكيز الجسيمات الحيادية والأيونات
28 II 5. حساب كثافة الجسيمات الحيادية و الأيونات
28 II 1.5. حساب كثافة الجسيمات الحيادية
28 II 2.5. حساب كثافة الأيونات
29 II 3.5. الشروط الحدية
33 II 4.5. الطريقة العددية لحل مصفوفة
34 II 6. التراكيز الأولية للجسيمات الحيادية والأيونات
37 II 7. مخطط برنامج الحساب
الفصل الثالث: النتائج العددية ومناقشتها	
40 III 1. مقدمة
41 III 2. درجة حرارة الغاز و الكثافة الالكترونية و درجة حرارة الإلكترون
41 III 1.2. درجة حرارة الغاز T_{gaz}
42 III 2.2. كثافة الإلكترونات n_e
42 III 3.2. درجة حرارة الإلكترون T_e
43 III 3. تغيرات ثابت التفاعلات الكيميائية مع البعد z ودرجة حرارة الغاز T_{gaz}
45 III 4. نتائج الطريقة الأولى

45	1.4.III. منحنيات التقارب لتراكيز بعض الجسيمات الحياضية والأيونات.....
48	5.III. تراكيز بعض الجسيمات الحياضية والأيونات.....
52	6.III. مقارنة نتائج الطريقة الأولى مع نتائج صاحب التجربة.....
53	7.III. نتائج الطريقة الثانية.....
53	1.7.III. منحنيات التقارب لتراكيز بعض الجسيمات الحياضية والأيونات.....
55	8.III. تراكيز بعض الجسيمات الحياضية والأيونات.....
57	1.8.III. مقارنة نتائج الطريقة الثانية مع نتائج صاحب التجربة.....
58	9.III. مقارنة النتائج بين الطريقتين.....
61	10.III. نسبة تراكيز بعض الجسيمات الحياضية والأيونات من التركيز الابتدائي.....
62	11.III. تطبيقات النتائج.....
65	الخلاصة العامة والآفاق.....
68	قائمة المراجع.....

قائمة الأشكال والجداول

قائمة الأشكال:

الصفحة	الشكل
الفصل الأول	
8	الشكل (1.1): مخطط توزيع الطبقات الرقيقة لبعض الطرق الفيزيائية والكيميائية.....
10	الشكل (2.1): المجال المغناطيسي للترددات الراديوية B والمجال الكهربائي للترددات الراديوية E داخل غرفة البلازما.....
الفصل الثاني	
17	الشكل (1.2): مخطط لمفاعل (ICP).....
42	الشكل (2.2): منحنيات التراكيز الخاصة بصاحب التجربة
38	الشكل (3.2): مخطط البرنامج العددي.....
الفصل الثالث	
41	الشكل (1.3): تغيرات درجة حرارة الغاز T_{gaz} بدلالة البعد z
42	الشكل (2.3): تغيرات كثافة الإلكترونات n_e بدلالة البعد z
42	الشكل (3.3): تغيرات درجة حرارة الإلكترون T_e بدلالة البعد z
43	الشكل (4.3): تغيرات معامل ثابت التفاعلات الكيميائية رقم 32 و 36 و 37 بدلالة z
44	الشكل (5.3): تغيرات معامل ثابت التفاعلات الكيميائية رقم 25 و 30 و 63 بدلالة z
44	الشكل (6.3): تغيرات معامل ثابت التفاعلات الكيميائية رقم 32 و 36 و 37 بدلالة درجة حرارة الغاز T_{gaz}
45	الشكل (7.3): تغيرات معامل ثابت التفاعلات الكيميائية رقم 25 و 30 و 63 بدلالة درجة حرارة الغاز T_{gaz}
46	الشكل (8.3): منحنى تقارب تركيز الجذر SiH_3

46	الشكل (9.3): منحى تقارب تركيز الجذر Si_2H_3
47	الشكل (10.3): منحى تقارب تركيز الأيون SiH_3^+
47	الشكل (12.3): منحى تغيرات تركيز الجسيمات SiH_3 و SiH_2 و SiH_3O و SiO و SiH_2O بدلالة البعد z
48	الشكل (12.3): منحى تغيرات تركيز الجذور SiH_3 و SiH_2 و SiH بدلالة البعد z ...
48	الشكل (13.3): منحى تغيرات تركيز الجسيمات O و OH و H و H_2O بدلالة البعد z
49	الشكل (14.3): منحى تغيرات تركيز الجسيمات Si_2H_6 , Si_2H_5 , Si_2H_3 بدلالة البعد z
49	الشكل (15.3): منحى تغيرات تركيز جميع الأيونات بدلالة البعد z
50	الشكل (16.3): منحى تغيرات تركيز الأيون SiH_3^+ بدلالة البعد z
50	الشكل (17.3): منحى تغيرات تركيز الأيون SiH^+ بدلالة البعد z
51	الشكل (18.3): منحى تغيرات تركيز الأيون H^+ بدلالة البعد z
53	الشكل (19.3): منحى تقارب تركيز الجذر SiH_3
54	الشكل (20.3): منحى تقارب تركيز الجذر O
54	الشكل (21.3): منحى تقارب تركيز الأيون SiH_2^+
55	الشكل (22.3): منحى تغيرات تركيز الجذور SiH_3 و SiH_2 و SiH بدلالة البعد z
55	الشكل (23.3): منحى تغيرات تركيز الجذور OH و H_2O بدلالة البعد z
56	الشكل (24.3): منحى تغيرات تركيز الجذور O^+ و O_2^+ بدلالة البعد z
56	الشكل (25.3): منحى تغيرات تركيز الجذور H^+ و H_2^+ و H_3^+ بدلالة البعد z
59	الشكل (26.3): منحى تغيرات تركيز الجذر SiH_3 في طريقتي الادخال 1 و 2 بدلالة البعد z
60	الشكل (27.3): منحى تغيرات تركيز الجذر OH في طريقتي الادخال 1 و 2 بدلالة البعد z
60	الشكل (28.3): منحى تغيرات تركيز الجذر SiH^+ في طريقتي الادخال 1 و 2 بدلالة البعد z

قائمة الجداول:

الصفحة	الجدول
الفصل الثاني	
20	الجدول (1.2): التفاعلات الكيميائية و ثوابت التفاعلات الكيميائية.....
24	الجدول(2.2): ثوابت لينارد جونز لمختلف الجذور.....
25	الجدول (3.2): ثوابت استقطابية الغاز.....
35	الجدول (4.2): القيم التقديرية لتراكيز الجسيمات المستعملة في البرنامج العددي.....
الفصل الثالث	
52	الجدول (1.3) : مقارنة لتراكيز بعض الجسيمات الحياضية والأيونات مع صاحب التجربة ،ن.رحيم وش.طاجين (2022).....
57	الجدول (2.3) مقارنة لتراكيز بعض الجسيمات الحياضية والأيونات مع المجرى.....
58	الجدول (3.3): مقارنة النتائج المتحصل عليها من الطريقتين مع نتائج صاحب التجربة
61	الجدول (4.3) نسبة تراكيز بعض الجسيمات الحياضية والأيونات من التركيز الابتدائي في مناطق مختلفة في المفاعل.....
62	الجدول(5.3): الضغط بجوار الركيزة باستخدام التراكيز المتحصل عليها من الطريقتين.....
63	الجدول(6.3): تدفق الجسيمات التي تصطدم بالسطح.....

المقدمة العامة

المقدمة العامة

ان دراسة الطبقات الرقيقة جذبت اهتمام الفيزيائيين منذ النصف الثاني من القرن السابع عشر حيث أجريت العديد من البحوث المهمة في هذا المجال والتي اقترنت بأسماء مثل (Boyle) و (Hook) ومن الجانب النظري العالم (Drude)، يستخدم مصطلح الطبقات الرقيقة لوصف طبقة او عدة طبقات من ذرات المادة التي لا يتجاوز سمكها المايكرون الواحد وقد قام العديد من الباحثين بدراسة الخواص الضوئية لأنصاف النواقل على هيئة طبقات رقيقة محضرة بطرق مختلفة.

يوجد الكثير من الطرق لتحضير الأغشية الرقيقة يمكن تقسيمها الى قسمين:

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

ويعد الترسيب في الطور الكيميائي من أهم الطرق المستخدمة والمعروفة لترسيب الأغشية الرقيقة وقد نستعمل فيها على وجه التحديد البلازما المقترنة بالحث (Inductively Coupled Plasma) ICP

سنهتم في دراستنا هذه بحساب تراكيز الجسيمات الحياضية والأيونات لخليط الغاز (SiH_4/O_2) بجوار المحور z في مفاعل أسطواناني ثنائي البعد في البلازما المقترنة بالحث (ICP) وذلك بمعالجة الشروط الحدية والحلول الأولية.

اعتمدنا في عملنا على بيانات أعمال [1] S. Tinck and A. Bogaerts (2012) في الظروف الفيزيائية :

✓ ضغط الغاز 10mTorr

✓ $T_{\text{gaz}} = 380 \text{ K}$

✓ $T_e = 4 \text{ eV}$

حيث قاما بدراسة خصائص الغاز ($\text{SiH}_4/\text{O}_2/\text{Ar}$) في البلازما المقترنة بالحث (ICP) وكيفية التفاعل مع الركيزة من السيليكون.

تم هذا العمل ضمن محاور نشاطات مخبر الاشعاع والبلازما وفيزياء السطوح وهو مواصلة لعمل مذكرتي الماجستير للطالبات:

A. Bahaz(2021) [2] و ن.رحيم و ش. طاجين (2022) [3]. قامت الطالبة Bahaz في عملها بحساب تراكيز الجسيمات الحيدرية، بينما اهتمت الطالبات رحيم وطاجين بحساب تراكيز الجسيمات الحيدرية والأيونات. ركزنا في عملنا على معالجة الشروط الحدية والحلول الأولية لمحاولة الوصول الى نتائج أكثر دقة.

يتلخص عمل هذه المذكرة في ثلاث فصول وخلاصة عامة:

❖ في الفصل الأول نقدم فيه عموميات حول البلازما من مفاهيم ومقادير فيزيائية ثم تطرقنا الى تقنية توضع الطبقات الرقيقة وأيضا مفهوم ومبدأ عمل البلازما المقترنة بالحث (ICP) والمعادلات الأساسية لنموذج الموائع.

❖ في الفصل الثاني نشرح الظروف المعتمدة في الظاهرة الفيزيائية، مع شرح أهم المعادلات المستخدمة في النموذج الرياضي؛ لإجراء الحساب العددي تم الاعتماد على خوارزمية غوص-صايدل التكرارية وطريقة الفروق المنتهية التي ركزنا فيها بشكل رئيسي على معالجة الشروط الحدية والحلول الأولية.

❖ في الفصل الثالث والأخير نقدم فيه أهم النتائج المتحصل عليها من الحساب باستخدام برنامج الحساب العددي بلغة Fortran، ونبين فيه تأثير الشروط الحدية والحلول الابتدائية على تقارب الحلول.

❖ نختم المذكرة بخلاصة عامة حول مختلف النتائج والآفاق المقترحة.

الفصل الأول :

عموميات حول البلازما
المقترنة بالحث (ICP)

الفصل الأول

عموميات حول البلازما المقترنة بالحث (ICP)

I. نظرة عامة حول البلازما وخصائصها

1.I. تعريف البلازما:

تمثل البلازما نسبة 99% من المادة الكونية بين النجوم والمجرات من حيث الكتلة والحجم كما أن بعضا من الكواكب تشكل البلازما أغلب مادتها.

البلازما هي الحالة الرابعة للمادة تمتاز عن غيرها من الحالات بالطاقة الهائلة التي تمتلكها وهي عبارة عن وسط غازي متأين يحوي عددا كبيرا وكافيا من الجسيمات المشحونة سلبيا (إلكترونات وأيونات سالبة) والجسيمات المشحونة إيجابيا (أيونات موجبة) والجسيمات المحايدة هذا الوسط يحجب نفسه الكتروستاتيكا عند مسافة صغيرة [4].

2.I. خصائص البلازما:

للبلازما خصائص مختلفة جدا وكتصنيف أول يمكن أن يكون كدالة لكثافة الشحنات ودرجة حرارة الإلكترون.

يمكن تصنيف البلازما حسب درجة الحرارة وكثافة الإلكترونات على سبيل المثال البلازما بين النجوم لها كثافة منخفضة للغاية (حوالي $10^6 \text{ electron.m}^{-3}$) ودرجة حرارة منخفضة (حوالي 10^3 K) على الجانب الآخر من النوى النجمية توجد درجة حرارة عالية (تقريبا 10^7 K) عالية الكثافة (حوالي $10^{28} \text{ electron.m}^{-3}$) بينما البلازما الاصطناعية عادة ما تكون درجة الحرارة منخفضة (باستثناء بلازما الاندماج) ولكن بكثافة عالية من حوالي 10^{16} الكترون لكل متر مكعب لتفريغ الوهج حتى 10^{24} الكترون لكل متر مكعب للبلازما الحرارية مثل الأقواس الكهربائية [5].

3.I. تعريف البلازما الباردة:

البلازما الباردة أو البلازما التفاعلية هي البلازما الناشئة عن التفريغ الكهربائي بواسطة تيار كهربائي مستمر (DC) أو الأمواج الراديوية (RF)، أمواج الميكروويف (MW) تحت ضغط منخفض [6].

تمتاز البلازما الباردة بدرجة تأين ضعيفة ودرجة حرارة الأيونات والجسيمات المحايدة منخفضة قريبة من درجة حرارة الغرفة بعكس الإلكترونات التي تمتلك درجة حرارة عالية (10^4 - 10^5 K) [7].

لدراسة البلازما الباردة نستعين ببعض الخصائص الكهربائية تسمح بتفسير ودراسة الظواهر الفيزيائية على مستوى البلازما كدرجة التأين وكمون ديبياي ودرجة الحرارة الإلكترونية تردد البلازما وغيرها.

4.I. التعريف ببعض المقادير الفيزيائية:**1.4.I تردد البلازما $\omega_{p,e,i}$:**

هو تردد مرتبط بالحركة الاهتزازية الكولومية للجسيمات المشحونة داخل البلازما نتيجة لإزاحتها عن وضع الاتزان بسبب اضطرابات خارجية إلا أنها سرعان ما تعود إلى حالة الاتزان.

يعطى تردد البلازما بالنسبة للإلكترونات والأيونات بالعلاقة التالية [8]:

✓ بالنسبة للإلكترونات:

$$\omega_{p,e} = \sqrt{\frac{4\pi e^2 n_e}{m_e}} = 5.64 \times 10^4 \sqrt{n_e (cm^{-3})} \quad (I.1)$$

حيث:

$\omega_{p,e}$: تردد البلازما بالنسبة للإلكترونات

n_e : الكثافة الإلكترونية.

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

✓ بالنسبة للأيونات:

$$\omega_{p,i} = \sqrt{\frac{4\pi(Ze)^2 n_i}{m_i}} \quad (I.2)$$

$$\omega_{p,i} = 0.02334 \times z^{\frac{3}{2}} \times \omega_{p,e} (\text{rad. s}^{-1}) \quad (I.3)$$

 $\omega_{p,i}$: تردد البلازما للأيونات. n_i : الكثافة الأيونية. m_i : كتلة الأيون. ze : شحنة الأيون.**2.4.I. طول ديبي λ_D :**

طول ديبي هو المسافة التي يحدث عندها حجب للفعل الكموني الناتج للجسيمة المشحونة (الكترونات أو أيونات) داخل البلازما. يدعى هذا الكمون بكمون ديبي ويعطى بالعلاقة التالية [9]:

$$v_{debye} = \frac{q_j}{4\pi\epsilon_0 r} \exp\left(-\frac{r}{\lambda_D}\right) \quad (I.4)$$

$$\lambda_D = \sqrt{\frac{\epsilon_0 K_B T}{q_e^2 n_e}} \quad (I.5)$$

$$\lambda_D = 6.9 \sqrt{\frac{T_e(K)}{n_e(\text{cm}^{-3})}} \quad (I.6)$$

 n_e : الكثافة الإلكترونية. T_e : درجة حرارة الإلكترونات. K_B : ثابت بولتزمان. λ_D : طول ديبي.

3.4.I. توزيع الجسيمات داخل البلازما :

في لحظة معينة، تتميز حركة جزيء غازي بشعاع الموضع \vec{r} وشعاع السرعة \vec{v} ، تمثل شعاع الموضع بنقطة في الفضاء الاعتيادي وشعاع السرعة بنقطة في فضاء السرعات، في كل من هذين الفضاءين نعتبر حجمين عنصريين

$dv = dv_x dv_y dv_z$ و $dr = dx dy dz$ يتمركزان على التوالي حول النقطتين ذات الاحداثيات (x, y, z) و (v_x, v_y, v_z) نعرف dn بأنه عدد جزيئات الغاز اين تكون النقاط الممثلة للموضع داخل dr وللسرعات داخل dv بالعلاقة التالية [10]:

$$dn = f(\mathbf{v}, \mathbf{r}, t) dr dv \quad (\text{I.7})$$

$f(\mathbf{v}, \mathbf{r}, t)$ تدعى دالة توزيع السرعات، ويمكن ان تكون.

$$\checkmark \text{ مستقرة، اذا كانت لا تتعلق بـ } t \text{ اي } \left(\frac{df}{dt}\right) = 0.$$

$$\checkmark \text{ متجانسة، اذا كانت لا تتعلق بـ } r$$

$$\checkmark \text{ موحدة الخواص، اذا كانت لا تتعلق بطويلة } \vec{v} \text{ وباتجاهه.}$$

اذا كانت البلازما في حالة توازن ترموديناميكي تأخذ دالة توزيع سرعات الإلكترونات شكل ماكسويل الذي يعبر عن تصادم الإلكترونات ببعضها أثناء حركتها الحرارية العشوائية:

$$f = n_e \sqrt{\frac{m_e}{2\pi K_B T_e}} \exp\left(-\frac{m_e v^2}{2K_B T_e}\right) \quad (\text{I.8})$$

حيث:

K_B : ثابت بولتزمان

T_e : درجة حرارة الالكترونات

m_e : كتلة الإلكترون.

V_e : السرعة الانسحابية للإلكترون

ويحقق هذا التوزيع في كامل الحجم الذي يشغله العلاقة الآتية:

$$\int_{R^3} f(\mathbf{v}) dV = 1 \quad (\text{I.9})$$

5.I. الأغشية الرقيقة**1.5.I. تعريف الأغشية الرقيقة:**

الغشاء الرقيق هو عبارة عن رقاقة من مادة لها سمك صغير جدا (ميكرو متر الى نانو متر) معدل ترسب على الركيزة من أجل تزويدها بخصائص كيميائية أو فيزيائية محددة وهي أيضا عبارة عن تنظيم لعناصر المواد في بعدين حيث يكون البعد الثالث صغيرا [11].

6.I. طرق توضع الطبقات الرقيقة :

نسمى 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 [12]:

1.6.I. طرق التوضع الفيزيائي في الطور البخاري (PVD):

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 [13].

- ✓ التبخير الحراري تحت الفراغ
- ✓ الترسيب الايوني
- ✓ الرش المهبطي

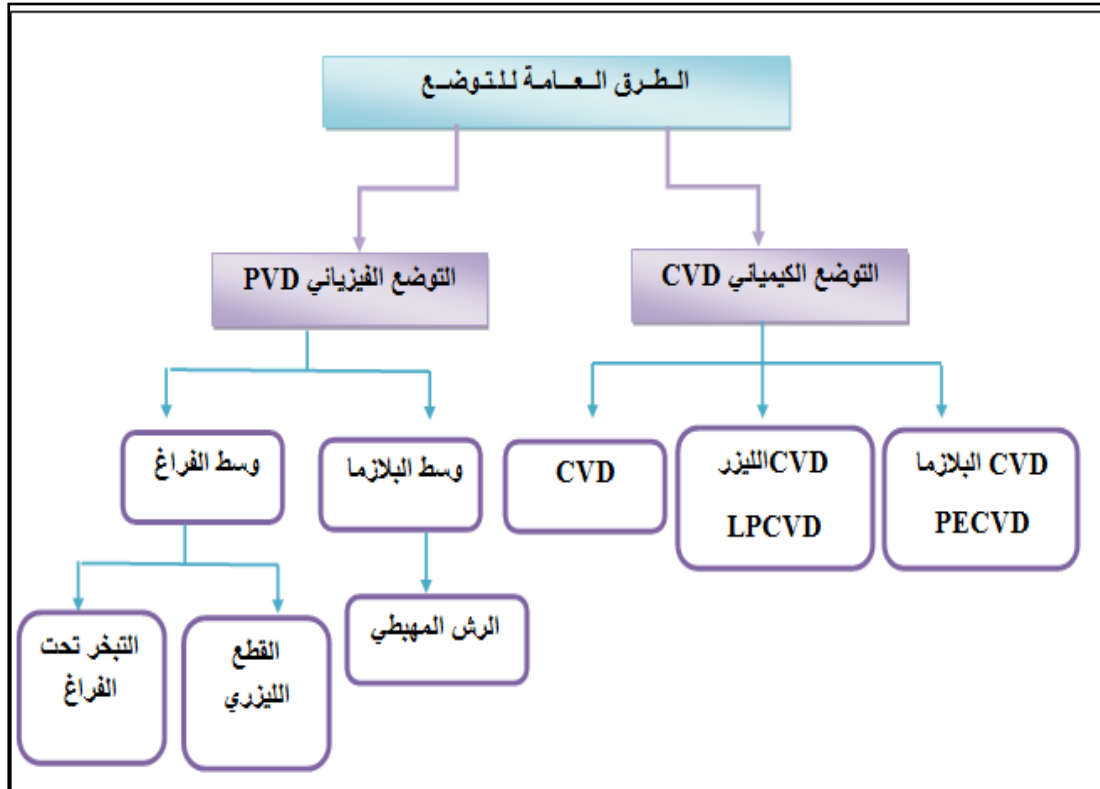
2.6.I طرق التوضع الكيميائي في الطور البخاري (CVD) :

هي عبارة عن طريقة تتفاعل فيها مكونات الغاز لتكوين شريحة صلبة فوق مساحة تعرف بالمسند، وهي طريقة تستخدم منذ عدة سنوات في قطاعات النشاط المتقدمة كإلكترونيك وعلم الطيران والزخرفة ... [12].

حيث تتدخل في هذه الطريقة عدة وسائط كالضغط ودرجة الحرارة والبلازما... الخ وهذا ما يميز تصنيفها الى عدة أصناف [14].

- ✓ 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)

يوضح الشكل (1.1) بعض النماذج للطريقتين:



الشكل (1.1): مخطط توضع الطبقات الرقيقة لبعض الطرق الفيزيائية

والكيميائي.

3.6.I. تطبيقات الأغشية الرقيقة:

- تستخدم الأغشية الرقيقة في العديد من المجالات نذكر منها :
- ✓ الطلاءات البصرية (طلاء مانع للانعكاس)
 - ✓ أجهزة اشباه الموصلات الالكترونية
 - ✓ تستخدم الأغشية الرقيقة الكهربائية الحديدية كذاكرة للحاسوب
 - ✓ الخلايا الشمسية

7.I. البلازما المقترنة بالحث ICP:**1.7.I. تعريف البلازما المقترنة بالحث ICP:**

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 عن طريق المجالات المغناطيسية المتغيرة بمرور الوقت، كما أنها تقنية تحليلية تستخدم للكشف عن المعادن وهدفها الأساسي هو جعل العناصر التي تنبعث منها أطوال موجية مميزة [16].

2.7.I. مبدأ البلازما المقترنة بالحث ICP:

يلعب الحقل الكهرومغناطيسي الناتج عن تيار التردد اللاسلكي (RF) دوراً مهماً في البلازما المقترنة بالحث ICP، يوضح الشكل (2.1) المجال المغناطيسي RF (الحقل B) والمجال الكهربائي RF (الحقل E) الذي تم إنشاؤه داخل غرفة البلازما عن طريق تطبيق طاقة التردد اللاسلكي على لفة مستوية من خلال النافذة العازلة.

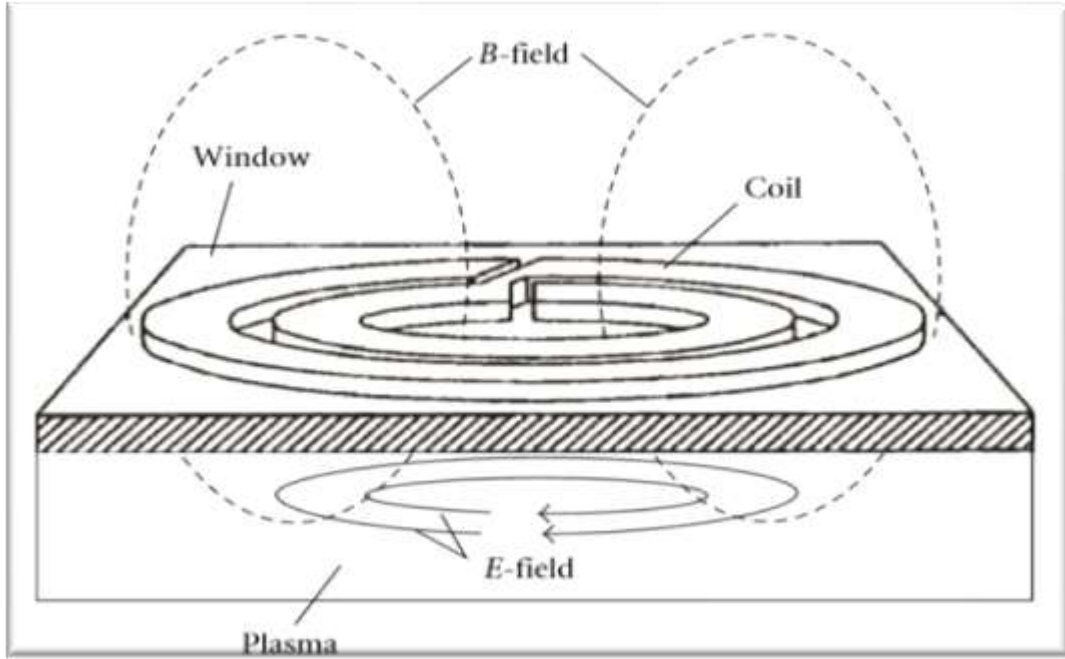
آلية امتصاص الطاقة الرئيسية في البلازما المقترنة بالحث ICP هي التسخين بفعل جول، حيث تتصادم الإلكترونات المتسارعة بواسطة الحقل الإلكتروني E عدة مرات مع الجسيمات الأخرى، انخفاض الجهد لكل وحدة طول يساوي الحقل الكهربائي E وسرعة انجراف الإلكترون تساوي $E\mu_e$ لذلك يتم التعبير عن قوة التسخين بالعلاقة التالية [17]:

$$P_j = en_e\mu_e E^2 \quad (\text{I. 10})$$

e: شحنة الإلكترون

n_e : كثافة الإلكترونات

μ_e : تنقل أو حركة الإلكترونات



الشكل (2.1): المجال المغناطيسي للترددات الراديوية B والمجال الكهربائي للترددات الراديوية E داخل غرفة البلازما.

ومن الممكن أن تخترق الإلكترونات العمق تحت نافذة عازلة وتستقبل طاقة تحت المجال الكهرومغناطيسي ، عندما يكون التردد الزاوي w أكبر بكثير من تردد الاصطدام ν ويعطى بالعلاقة التالية:

$$\delta = \frac{c}{w_{pe}} \quad (I.11)$$

c : سرعة الضوء.

w_{pe} : تردد البلازما الإلكترونية.

3.7.I. تطور البلازما المقترنة بالحث ICP:

تم استخدام البلازما المقترنة بالحث لأول مرة كالبلازما حرارية في مجال الطلاء، قبل بدء استخدامها في معالجة أشباه الموصلات، يتم 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 الى ترسيب طبقة رقيقة تم استخدام هذا النوع من البلازما في مجال الانبعاث البصري الطيفي.

البلازما المقترنة بالحث عبارة عن شعلة تعمل عند ضغط بقوة 1000pa أو أكثر وبقطر نموذجي من عدة mm الى cm. ولها علاقة أيضا بمعالجة الأغشية الرقيقة التي تتعامل مع أشباه الموصلات بأقطار تزيد عن 100mm تتطلب ضغط من (0.1 الى 100 pa) [17].

8.I. نموذج الموائع:

لدراسة بلازما التفريغ الكهربائي بنموذج الموائع نهتم بتحديد القيم المتوسطة لبعض المقادير الفيزيائية الخاصة بالجسيمات المشحونة كالكتافة، السرعة المتوسطة والطاقة المتوسطة.

نموذج الموائع هو عبارة عن جملة معادلات تفاضلية لاشتقاق جزئية تحدد بالعزوم الثلاثة لمعادلة بولتزمان حيث تمثل الكثافة بمعادلة الاستمرارية، السرعة المتوسطة بمعادلة حفظ كمية الحركة بينما الطاقة المتوسطة للإلكترونات بمعادلة حفظ الطاقة حيث يتم حل جملة هذه المعادلات بطرق عددية مختلفة طريقة الفروق المنتهية، طريقة العناصر المنتهية و الحجوم المنتهية [18].

9.I المعادلات الأساسية لنموذج الموائع1.9.I معادلة الاستمرارية :

تمثل معادلة الاستمرارية العزم الأول لمعادلة بولتزمان وتعبر عن كثافة الجسيمات لكل نوع من أنواع البلازما وتكتب بالصيغة التالية [19]:

$$\frac{\partial n_{e,i,n}}{\partial t} + \nabla \cdot J_{e,i,n} = S_{e,i,n} \quad (\text{I.12})$$

$$J_{e,i,n} = \pm \mu_{e,i} n_{e,i,n} \mathbf{E} - D_{e,i,n} \nabla n_{e,i,n} \quad (\text{I.13})$$

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

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

$\mu_{e,i,n}$: معامل الحركية للالكترونات والايونات من أجل الجسيمات المحايدة يصبح معامل الحركية مساوي للصفر للإشارة (+) من أجل الايونات موجبة الشحنة والإشارة (-) من أجل الالكترونات والأيونات سالبة الشحنة.

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

المحايدة)

$S_{e,i,n}$: مصدر الأنواع ويشمل انتاج و استهلاك الجنس أو النوع المعني.

E : المجال الكهربائي.

2.9.I. معادلة كمية الحركة :

تمثل هذه المعادلة العزم الثاني لمعادلة بولتزمان والتي تعبر عن السرعة المتوسطة وتكتب على الشكل التالي: [20]

$$\frac{d}{dt}(n_{e,i} m_{e,i} \langle \vec{V} \rangle) + \vec{\nabla} \cdot (n_{e,i} m_{e,i} \langle \vec{V} \vec{V} \rangle) \quad (\text{I.14})$$

$$= -\vec{\nabla} P + n_{e,i} \vec{f} - n_{e,i} m_{e,i} \langle \vec{V} \rangle v m_{e,i}$$

$m_{e,i}$: كتلة الجسيمات المشحونة

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

v_m : تردد تصادم الجسيمات

$P = n k_B T$: الضغط الجوي يأخذ القيمة

T : درجة حرارة الجسيمات

3.9.I. معادلة الطاقة :

تمثل معادلة الطاقة العزم الثالث لمعادلة بولتزمان والتي تعبر عن الطاقة المتوسطة للالكترونات وتكتب بالصيغة التالية [21]:

$$\frac{d(n \langle \varepsilon \rangle)}{dt} + \vec{\nabla} \cdot \vec{q} - n \vec{F} \cdot \vec{V} = R_{em} \quad (\text{I.15})$$

R_{em} : الطاقة الضائعة بفعل التصادمات

\vec{q} : شعاع التدفق الكلي

ε : الطاقة الحرارية

4.9.I. معادلة بواسون:

يتم حل هذه المعادلات السابقة (معادلة الاستمرارية، معادلة كمية الحركة، معادلة الطاقة) لجميع أنواع البلازما مع معادلة بواسون من أجل الحصول على توزيع المجال الكهربائي [22].

$$\Delta E = \frac{e[n_+ - n_- - n_e]}{\epsilon} \quad (\text{I.16})$$

n_+, n_- : الكثافة الكلية للأيونات الموجبة و السالبة.

n_e : كثافة الإلكترونات.

n_{ion} : كثافة الأيونات.

الفصل الثاني :

نمذجة حساب تراكم مختلف
الجسيمات في المفاعل (ICP)

الفصل الثاني

نمذجة حساب تراكيز الجسيمات الحيادية والأيونات في مفاعل (ICP) بمعالجة الشروط الحدية والحلول الأولية.

II . 1. المقدمة:

في هذا الفصل سنقوم بدراسة خليط الغاز (SiH_4/O_2) لمفاعل البلازما المقترنة بالحث (ICP) المستعمل في توضع الطبقات الرقيقة وذلك باقتراح نموذج لمعالجة عددية بنموذج رياضي المتمثل في معادلات الاستمرارية بتطبيق طريقة الفروق المنتهية وخوارزمية غوص صايدل التكرارية بهدف حساب تراكيز الجسيمات الحيادية و الأيونات في المفاعل بمعالجة الشروط الحدية والحلول الأولية، وذلك بالاستعانة بعمل [1] S.Tinck and A.Bogaerts(2012) وبإنجاز برنامج بلغة Fortran لحل هذه المعادلات.

يندرج هذا العمل ضمن محاور نشاطات مخبر الإشعاع والبلازما وفيزياء السطوح، وهو امتداد لعمل مذكرات الماستر الخاصة بالطالبات:

[2] A. Bahaz (2021) ،ن.رحيم وش. طاجين (2022) [3]

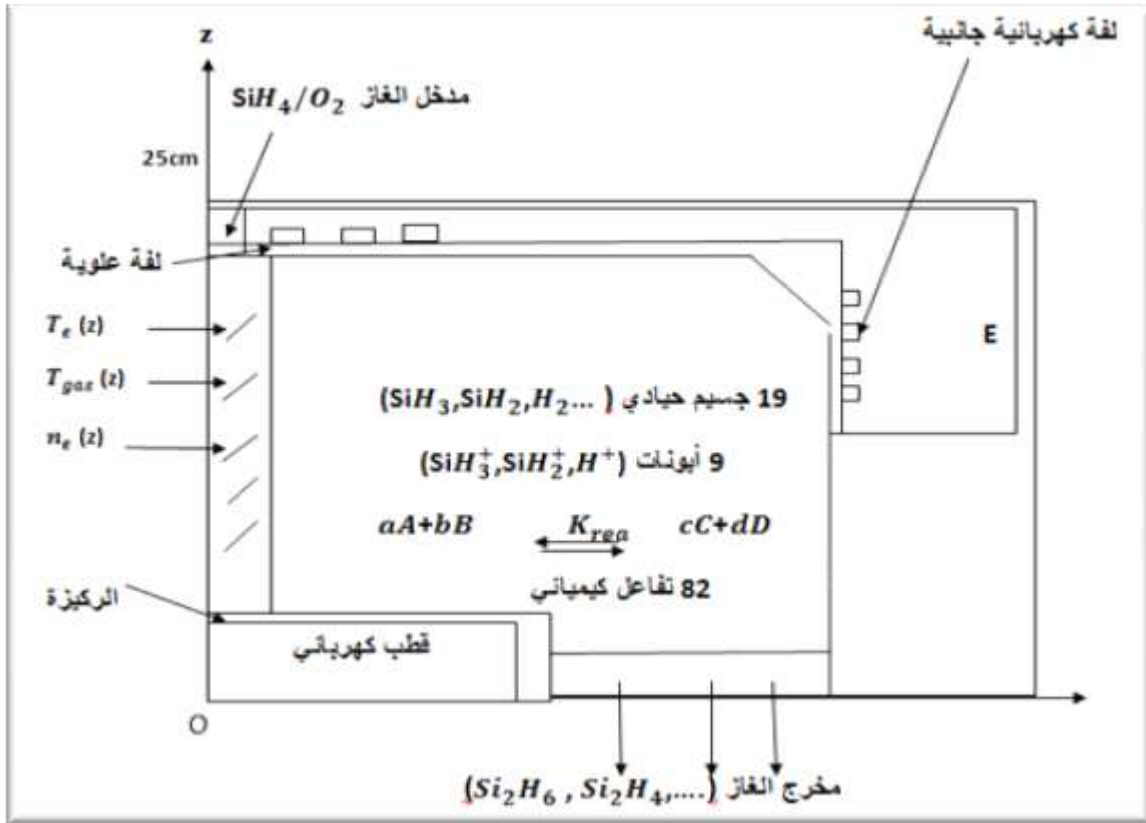
II . 2. الظاهرة الفيزيائية:

بهدف حساب تراكيز كل من الجسيمات الحيادية والأيونات لخليط الغاز SiH_4/O_2 المستعمل في توضع الطبقات الرقيقة في البلازما المقترنة بالحث (ICP) نقترح نمذجة حساب للمفاعل في نظام مستقر، وذلك بدراسة الخصائص للغاز على طول المحور Z للمفاعل الأسطواني نركز في عملنا على 19 جسيم حيادي و 9 أيونات و 82 تفاعل كيميائي داخل المفاعل. نأخذ بعين الاعتبار الشروط التي استخدمها [1] S .Tinck and A . Bogaerts(2012)

- ✓ تردد التشغيل 13.56MHZ
- ✓ ضغط الغاز 10mTorr
- ✓ درجة الحرارة للجدار والركيزة 60°c
- ✓ التركيز الابتدائي للخليط: $2.8 \times 10^{20} \text{ m}^{-3}$

- ✓ يتكون الغاز SiH_4 بنسبة 54% من التركيز الابتدائي و O_2 بنسبة 46% من التركيز الابتدائي.
- ✓ الجسيمات المحايدة الداخلة في التفاعل: SiH_3 , H , SiH_2 , SiH , H_2 , O , OH , H_2O , SiH_3O , SiH_2O , SiHO , SiO , SiO_2 , Si_2H_5 , Si_2H_3 , Si_2H_4 , Si_2H_6 , SiH_4 , O
- ✓ الأيونات: SiH_3^+ , SiH_2^+ , SiH^+ , H^+ , H_2^+ , H_3^+ , O^+ , O_2^+ , SiO_2^+

يوضح الشكل (1.2) مخطط لمفاعل ICP المقترح للدراسة.



الشكل (1.2) : مخطط لمفاعل (ICP)

II.3. النموذج الرياضي:

يهتم عملنا بحساب تراكيز الجسيمات الحيدانية والأيونات لخليط الغاز SiH_4/O_2 المستعمل في توضع الطبقات الرقيقة بواسطة البلازما المقترنة بالحث (ICP) بمعالجة الشروط الحدية والحلول الأولية وذلك بالاعتماد على معادلة الاستمرارية.

II.1.3. معادلة الاستمرارية :

تعتبر المعادلة الأساسية اللازمة لحساب تراكيز الجسيمات الحيدانية والأيونات يتم استعمالها بالشكل التالي [23]:

$$\frac{\partial C^K}{\partial t} + \nabla(-D_{n,i,e}^k \nabla C^K + \mu_i^k C_i^k E) = S^K \quad (\text{II.1})$$

في النظام المستقر وبافتراض ان معامل الانتشار D^K ومعامل الحركة μ_i^k يتغيران ببطء نجد:

$$\begin{aligned} \nabla(-D^K \nabla C^K + \mu_i^k C_i^k E) &= -D^K \frac{\partial^2 C^K}{\partial Z^2} + \mu_i^k E \frac{\partial C_i^k}{\partial Z} + \mu_i^k C_i^k \frac{\partial E}{\partial Z} \\ &= S^K \end{aligned} \quad (\text{II.2})$$

بحيث:

$$S^K = + \sum_{K_{\text{reac}}^{\text{prod}}} K_{\text{reac}(K',K'')} C_j^{K'} C_j^{K''} - \sum_{K_{\text{reac}}^{\text{cons}}} K_{\text{reac}(K,K')} C_j^K C_j^{K'}$$

تكتب الصيغة العامة لثابت التفاعل الكيميائي كالتالي:

$$K_{reac} = AT^B \exp \left(-\frac{E_a}{K_B T} \right) \quad (II.3)$$

K, K' : ثوابت متعلقة بالجسيمات المتفاعلة

E_a : طاقة التنشيط

K_B : ثابت بولتزمان

T : درجة حرارة التفاعل (K)

D^K : معامل الانتشار للنوع K

C^K : تركيز كل جزئي أو جذر أو أيون K

S^K : معدل الاستهلاك والإنتاج في وحدة الحجم

$K_{reac}^{prod}, K_{reac}^{cons}$: ثوابت التفاعل الكيميائي للاستهلاك والإنتاج للأنواع الكيميائية.

II 2.3. التفاعلات الكيميائية للجسيمات المحايدة والأيونات:

قمنا بالاعتماد على 82 تفاعل كيميائي بين الجسيمات المحايدة والأيونات.

يوضح الجدول (1.2) التالي التفاعلات الكيميائية وثوابت التفاعلات الكيميائية المستعملة في الحساب.

المرجع	ثابت التفاعل الكيميائي (cm^3/s)	التفاعلات الكيميائية	الرقم
24	$K_1 = 1.59 \times 10^{-10}$	$\text{SiH}_4 + e \rightarrow \text{SiH}_3 + \text{H} + e$	01
24	$K_2 = 1.87 \times 10^{-11}$	$\text{SiH}_4 + e \rightarrow \text{SiH}_2 + \text{H} + \text{H} + e$	02
24	$K_3 = 9.34 \times 10^{-12}$	$\text{SiH}_4 + e \rightarrow \text{SiH} + \text{H}_2 + \text{H} + e$	03
1	$K_4 = 2.68 \times 10^{-12}$	$\text{SiH}_4 + \text{H} \rightarrow \text{SiH}_3 + \text{H}_2$	04
24	$K_5 = 1 \times 10^{-10}$	$\text{SiH}_3 + \text{H} \rightarrow \text{SiH}_2 + \text{H}_2$	05
1	$K_6 = 7 \times 10^{-12}$	$\text{SiH}_3 + \text{SiH}_3 \rightarrow \text{SiH}_2 + \text{SiH}_4$	06
1	$K_7 = 2 \times 10^{-13}$	$\text{SiH}_2 + \text{H}_2 \rightarrow \text{SiH}_4$	07
1	$K_8 = 1.11 \times 10^{-12}$	$\text{SiH}_2 + \text{H} \rightarrow \text{SiH}_3$	08
1	$K_9 = 7.96 \times 10^{-13}$	$\text{SiH}_2 + \text{H} \rightarrow \text{SiH} + \text{H}_2$	09
1	$K_{10} = 5 \times 10^{-11}$	$\text{SiH} + \text{SiH}_4 \rightarrow \text{SiH}_2 + \text{SiH}_3$	10
1	$K_{11} = 2.4 \times 10^{-11}$	$\text{O} + \text{OH} \rightarrow \text{H} + \text{O}_2$	11
1	$K_{12} = 1.48 \times 10^{-10}$	$\text{OH} + \text{H} \rightarrow \text{O} + \text{H}_2$	12
1	$K_{13} = 7.70 \times 10^{-12}$	$\text{OH} + \text{H}_2 \rightarrow \text{H}_2\text{O} + \text{H}$	13
1	$K_{14} = 6.98 \times 10^{-12}$	$\text{SiH}_4 + \text{O} \rightarrow \text{SiH}_3 + \text{OH}$	14
1	$K_{15} = 1.40 \times 10^{-11} \times \exp\left(\frac{-50.3}{R \times T}\right)$	$\text{SiH}_4 + \text{OH} \rightarrow \text{SiH}_3 + \text{H}_2\text{O}$	15
24	$K_{16} = 5 \times 10^{12} \times \exp\left(\frac{-52.2}{R \times T}\right)$	$\text{SiH}_4 \rightarrow \text{SiH}_2 + \text{H}_2$	16
24	$K_{17} = 3.7 \times 10^{15} \times \exp\left(\frac{-93}{R \times T}\right)$	$\text{SiH}_4 \rightarrow \text{SiH}_3 + \text{H}$	17
1	$K_{18} = 3.44 \times 10^{-10}$	$\text{O} + \text{H}_2 \rightarrow \text{OH} + \text{H}$	18
24	$K_{19} = 4.49 \times 10^{-12}$	$\text{H}_2 + e \rightarrow \text{H} + \text{H} + e$	19
1	$K_{20} = 1 \times 10^{-10}$	$\text{O}_2 + e \rightarrow \text{O} + \text{O} + e$	20
1	$K_{21} = 3 \times 10^{-12}$	$\text{SiH}_4 + \text{O}_2 \rightarrow \text{SiH}_3\text{O} + \text{OH}$	21
1	$K_{22} = 8.31 \times 10^{-12}$	$\text{SiH}_3 + \text{OH} \rightarrow \text{SiH}_2\text{O} + \text{H}_2$	22
1	$K_{23} = 6.3 \times 10^{-12}$	$\text{SiH}_3 + \text{O}_2 \rightarrow \text{SiH}_3\text{O} + \text{O}$	23
1	$K_{24} = 6.3 \times 10^{-12}$	$\text{SiH}_3 + \text{O}_2 \rightarrow \text{SiH}_2\text{O} + \text{OH}$	24

1	$K_{25} = 2.16 \times 10^{-10} \times \exp\left(\frac{-1000}{R \times T}\right)$	$\text{SiH}_3 + \text{O} \rightarrow \text{SiH}_2\text{O} + \text{H}$	25
1	$K_{26} = 3.75 \times 10^{-12}$	$\text{SiH}_2 + \text{O}_2 \rightarrow \text{SiH}_2\text{O} + \text{O}$	26
1	$K_{27} = 3.75 \times 10^{-12}$	$\text{SiH}_2 + \text{O}_2 \rightarrow \text{SiHO} + \text{OH}$	27
1	$K_{28} = 8.5 \times 10^{-11}$	$\text{SiH} + \text{O}_2 \rightarrow \text{SiO} + \text{OH}$	28
1	$K_{29} = 1 \times 10^{-12}$	$\text{SiH}_3\text{O} + \text{O} \rightarrow \text{SiH}_2\text{O} + \text{OH}$	29
1	$K_{30} = 5.48 \times 10^{-10} \times \exp\left(\frac{-5276.4}{R \times T}\right)$	$\text{SiH}_2\text{O} + \text{H} \rightarrow \text{SiHO} + \text{H}_2$	30
1	$K_{31} = 1.25 \times 10^{-11} \times \exp\left(\frac{-85.4}{R \times T}\right)$	$\text{SiH}_2\text{O} + \text{OH} \rightarrow \text{SiHO} + \text{H}_2\text{O}$	31
1	$K_{32} = 2.9910^{-11} \times \exp\left(\frac{-1547.7}{R \times T}\right)$	$\text{SiH}_2\text{O} + \text{O} \rightarrow \text{SiHO} + \text{OH}$	32
1	$K_{33} = 3.32 \times 10^{-10}$	$\text{SiHO} + \text{H} \rightarrow \text{SiO} + \text{H}_2$	33
1	$K_{34} = 1.66 \times 10^{-10}$	$\text{SiHO} + \text{O} \rightarrow \text{SiO} + \text{OH}$	34
1	$K_{35} = 1.66 \times 10^{-10}$	$\text{SiHO} + \text{OH} \rightarrow \text{SiO} + \text{H}_2\text{O}$	35
1	$K_{36} = 6.65 \times 10^{-12} \times \exp\left(\frac{-2864.3}{R \times T}\right)$	$\text{SiO} + \text{OH} \rightarrow \text{SiO}_2 + \text{H}$	36
1	$K_{37} = 2.36 \times 10^{-10} \times \exp\left(\frac{-3266.3}{R \times T}\right)$	$\text{SiO} + \text{O}_2 \rightarrow \text{SiO}_2 + \text{O}$	37
24	$K_{38} = 2.50 \times 10^{-12}$	$\text{SiH}_4 + \text{SiH} \rightarrow \text{Si}_2\text{H}_5$	38
24	$K_{39} = 1.70 \times 10^{-12}$	$\text{SiH}_4 + \text{SiH} \rightarrow \text{Si}_2\text{H}_3 + \text{H}_2$	39
24	$K_{40} = 1.78 \times 10^{-15}$	$\text{SiH}_4 + \text{SiH}_3 \rightarrow \text{Si}_2\text{H}_5 + \text{H}_2$	40
24	$K_{41} = 3.77 \times 10^{-13}$	$\text{SiH}_3 + \text{SiH}_2 \rightarrow \text{Si}_2\text{H}_5$	41
24	$K_{42} = 7.22 \times 10^{-13}$	$\text{SiH}_2 + \text{SiH} \rightarrow \text{Si}_2\text{H}_3$	42
24	$K_{43} = 5 \times 10^{-13}$	$\text{SiH}_4 + \text{Si}_2\text{H}_5 \rightarrow \text{Si}_2\text{H}_6 + \text{SiH}_3$	43
24	$K_{44} = 1.70 \times 10^{-12}$	$\text{Si}_2\text{H}_3 + \text{H}_2 \rightarrow \text{Si}_2\text{H}_5$	44
24	$K_{45} = 1 \times 10^{-12}$	$\text{SiH}_3 + \text{Si}_2\text{H}_6 \rightarrow \text{SiH}_4 + \text{Si}_2\text{H}_5$	45
24	$K_{46} = 1.11 \times 10^{-12}$	$\text{Si}_2\text{H}_6 + \text{H} \rightarrow \text{SiH}_3 + \text{SiH}_4$	46
24	$K_{47} = 2.16 \times 10^{-12}$	$\text{Si}_2\text{H}_6 + \text{H} \rightarrow \text{Si}_2\text{H}_5 + \text{H}_2$	47
24	$K_{48} = 2.86 \times 10^{-10}$	$e + \text{Si}_2\text{H}_6 \rightarrow \text{SiH}_4 + \text{SiH}_2 + e$	48
24	$K_{49} = 2.5 \times 10^{14} \times \exp\left(\frac{-52.2}{R \times T}\right)$	$\text{Si}_2\text{H}_6 \rightarrow \text{Si}_2\text{H}_4 + \text{H}_2$	49
24	$K_{50} = 3.56 \times 10^{-9}$	$\text{Si}_2\text{H}_4 + \text{H}_2 \rightarrow \text{SiH}_4 + \text{SiH}_2$	50
24	$K_{51} = 5.33 \times 10^{-13}$	$\text{Si}_2\text{H}_4 + \text{H}_2 \rightarrow \text{Si}_2\text{H}_6$	51

24	$K_{52}= 5.64 \times 10^{-12}$	$e + SiH_4 \rightarrow SiH_3^+ + H + 2e$	52
24	$K_{53}= 7.19 \times 10^{-12}$	$e + SiH_4 \rightarrow SiH_2^+ + H_2 + 2e$	53
24	$K_{54}= 1.39 \times 10^{-12}$	$e + SiH_4 \rightarrow SiH^+ + H_2 + H + 2e$	54
1	$K_{55}= 1.07 \times 10^{-9}$	$SiH_2^+ + SiH_4 \rightarrow SiH_3^+ + SiH_3$	55
1	$K_{56}= 1.01 \times 10^{-10}$	$SiH_2^+ + H_2 \rightarrow SiH_3^+ + H$	56
1	$K_{57}= 6 \times 10^{-11}$	$SiH^+ + SiH_4 \rightarrow SiH_3^+ + SiH_2$	57
1	$K_{58}= 1.84 \times 10^{-11}$	$SiH^+ + H_2 \rightarrow SiH_2^+ + H$	58
1	$K_{59}= 1.67 \times 10^{-7}$	$e + SiH_3^+ \rightarrow SiH_2 + H$	59
1	$K_{60}= 1.69 \times 10^{-7}$	$e + SiH_2^+ \rightarrow SiH + H$	60
24	$K_{61}= 2.32 \times 10^{-11}$	$e + H_2 \rightarrow H_2^+ + 2e$	61
24	$K_{62}= 2.62 \times 10^{-13}$	$e + H \rightarrow H^+ + e$	62
1	$K_{63}= 2 \times 10^{-9} \times \left(\frac{T_{gaz}}{298}\right)^{0.5}$	$H_2^+ + H_2 \rightarrow H_3^+ + H$	63
1	$K_{64}= 6.40 \times 10^{-10}$	$H_2^+ + H \rightarrow H_2 + H^+$	64
1	$K_{65}= 5 \times 10^{-10}$	$H^+ + SiH_4 \rightarrow SiH_3^+ + H_2$	65
1	$K_{66}= 3.66 \times 10^{-11}$	$H_2^+ + SiH_4 \rightarrow SiH^+ + H + H_2 + H_2$	66
1	$K_{67}= 6.59 \times 10^{-11}$	$H_2^+ + SiH_4 \rightarrow SiH_2^+ + H_2 + H_2$	67
24	$K_{68}= 6.23 \times 10^{-10}$	$SiH_4 + H_2^+ \rightarrow SiH_3^+ + H_2 + H$	68
1	$K_{69}= 1.83 \times 10^{-11}$	$SiH_4 + H_2^+ \rightarrow SiH_3 + H_3^+$	69
1	$K_{70}= 5.16 \times 10^{-10}$	$SiH_4 + H_3^+ \rightarrow SiH_3^+ + H_2 + H_2$	70
1	$K_{71}= 1.95 \times 10^{-10}$	$SiH^+ + SiH_4 \rightarrow SiH_2^+ + SiH_3$	71
1	$K_{72}= 5 \times 10^{-7}$	$SiH_3^+ + SiH^+ \rightarrow SiH_3 + SiH$	72
1	$K_{73}= 1 \times 10^{-7}$	$SiH_3^+ + H^+ \rightarrow SiH_3 + H$	73
1	$K_{74}= 1 \times 10^{-7}$	$SiH_3^+ + H_2^+ \rightarrow SiH_3 + H_2$	74
25	$K_{75}= 9 \times 10^{-16} \times T_e^2 \exp\left(\frac{-12.6}{T_e}\right)$	$e + O_2 \rightarrow O_2^+ + 2e$	75
25	$K_{76}= 5.3 \times 10^{-16} \times T_e^{0.9} \times \exp\left(\frac{-20}{T_e}\right)$	$e + O_2 \rightarrow O + O^+ + 2e$	76
25	$K_{77}= 2.2 \times 10^{-14} \times T_e^{0.5}$	$e + O_2^+ \rightarrow 2O$	77
25	$K_{78}= 9 \times 10^{-15} \times T_e^{0.7} \times \exp\left(\frac{-13.6}{T_e}\right)$	$e + O \rightarrow O^+ + 2e$	78

1	$K_{79} = 2 \times 10^{-11}$	$O^+ + O_2 \rightarrow O + O_2^+$	79
24	$K_{80} = 2 \times 10^{-10}$	$O^+ + SiH_4 \rightarrow SiH_2^+ + H_2 + O$	80
24	$K_{81} = 2 \times 10^{-10}$	$O_2^+ + SiH_4 \rightarrow SiH_2^+ + H_2 + O_2$	81
1	$K_{82} = 1 \times 10^{-8}$	$e + SiO_2 \rightarrow SiO_2^+ + 2e$	82

II 3.3. معامل الانتشار الثنائي D_{ij} للجسيمات الحيادية:

يعطى بالعلاقة التالية [26]:

$$D_{ij} = \frac{3K_b T_{gaz} \sqrt{2\pi K_b T_{gaz} / m_{ij}}}{16\pi P_{tot} \sigma_{ij}^2 \Omega_D(T^*)} \quad (II.4)$$

σ_{ij} : نصف قطر التصادم الثنائي

T_{gaz} : درجة حرارة الغاز (K)

K_b : ثابت بولتزمان

P_{tot} : الضغط الكلي للغاز (Pa)

ε_{ij} : الطاقة المرتبطة بالرابطه الكيميائية (K)

$$m_{ij} = m_i m_j / (m_i + m_j) , \quad T^* = \frac{T_{gaz}}{\varepsilon_{ij}}$$

$$\sigma_{ij} = (\sigma_i + \sigma_j) / 2 ; \quad \varepsilon_{ij} = \sqrt{\varepsilon_i \varepsilon_j}$$

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

لدينا الثوابت:

$$A=1.06036 , B=0.15610 , C=0.19300 , D=0.47635 , \\ E=1.03587 , F=1.52996 , G=1.76474 , H=3.89411.$$

II. 4.3. معامل الانتشار D_j للجسيمات المحايدة :

معامل الانتشار D_j في الوسط الحيادي i نحصل عليه من خلال معامل الانتشار D_{ij} بالعلاقة التالية [27]:

$$\frac{P_{tot}}{D_j} = \sum_i \frac{P_i}{D_{ij}} \quad (\text{II. 5})$$

p_i : الضغط الجزئي للغاز في وسط حيادي.

يوضح الجدول (2.2) ثوابت لينارد جونز لمختلف الجسيمات

جدول (2.2) : معاملات لينارد جونز لجميع الأنواع الموصوفة في النموذج

المرجع	ϵ_i (K)	σ_i (Å°)	الجزيئات	الرقم
28	170.3	3.943	SiH ₃	1
28	30	2.5	H	2
28	133.1	3.803	SiH ₂	3
28	95.8	3.662	SiH	4
25	59.7	2.827	H ₂	5
25	57.91	3.064	O	6
25	281.27	3.111	OH	7
25	535.21	2.673	H ₂ O	8
25	417	3.69	SiH ₃ O	9
25	498	3.59	SiH ₂ O	10
25	498	3.59	SiHO	11
25	498	3.59	SiO	12
25	498	3.59	SiO ₂	13
28	306.9	4.177	Si ₂ H ₅	14
28	318.2	4.494	Si ₂ H ₃	15
28	312	4.601	Si ₂ H ₄	16
28	230	4.42	Si ₂ H ₆	17
28	207.6	4.084	SiH ₄	18
25	121.1	3.407	O ₂	19

II 5.3. معامل الحركة الثنائي لأيونات :

يتم استخدام العلاقة التالية: [22]

$$\mu_{ij} = 0.514 \frac{T_{\text{gaz}}}{P_{\text{tot}} \sqrt{m_{ij}} \alpha_i} \quad (\text{II. 6})$$

m_{ij} : الكتلة المختزلة

α_i : معامل قابلية استقطاب الغاز.

P_{tot} : الضغط الكلي بوحدة (pa)

نحصل على معامل الحركة لأيونات من خلال معامل الحركة الثنائي في وسط حيادي من خلال العلاقة التالية :

$$\frac{P_{\text{tot}}}{\mu_j} = \sum_{i=\text{جسيم حيادي}} \frac{P_i}{\mu_{ij}} \quad (\text{II. 7})$$

يبين الجدول (3.2) ثوابت استقطابية الغاز

جدول (3.2): القيم العددية لثابت الاستقطاب للجسيمات الحادية

المرجع	α_i (\AA^3)	الجزيئات والجنور	الرقم
3	4	SiH ₃	01
3	0.667	H	02
3	4	SiH ₂	03
3	4	SiH	04
23	0.805	H ₂	05
3	0.802	O	06
3	1.47	OH	07
3	1.45	H ₂ O	08
3	4	SiH ₃ O	09
3	4	SiH ₂ O	10
3	4	SiHO	11
3	4	SiO	12
3	4	SiO ₂	13
3	4	Si ₂ H ₅	14
3	4	Si ₂ H ₃	15

3	4	Si ₂ H ₄	16
23	8.47	Si ₂ H ₆	17
23	4.62	SiH ₄	18
3	1.5812	O ₂	19

II. 6.3. معامل الانتشار D_j للأيونات :

نستخدم علاقة أينشتاين التالية: [22]

$$D_j = \frac{K_B T_{ion}}{e} \mu_j \quad (II. 8)$$

T_{ion} : درجة حرارة الأيون

μ_j : معامل الحركة للأيونات.

II. 4. النموذج العددي :

إن الحل التحليلي لجملة معادلات تفاضلية بغرض إيجاد الصيغة الرياضية للمقادير الفيزيائية يكون عمليا صعبا، لهذا نلجأ إلى الطرق العددية لأنها تهدف إلى إيجاد قيمة المقادير الفيزيائية عند كل نقطة من الفضاء كطريقة الفروق المنتهية و الحجوم المنتهية.

ونظرا لما تمتاز به الفروق المنتهية من سهولة وسرعة في الحل اخترناها كطريقة لحل معادلاتنا والتي تعتمد كما هو متفق عليه على الخطوات الرياضية الآتية: [18]

- ✓ تجزئة مجال المحاكاة
- ✓ تقريب المشتقات الجزئية بالفروق المنتهية
- ✓ تحديد الشروط الحدية والشروط الابتدائية

1.4.II. المعادلات الأساسية لحساب تراكيز الجسيمات الحياضية والأيونات:

لحساب تراكيز مختلف العناصر داخل المفاعل نقوم بالخطوات التالية:

- ✓ أولاً نقوم بتجزئة مجال المحاكاة بحيث تكون z_{max} القيمة العظمى لإرتفاع المفاعل من سطح الركيزة إلى مدخل الغاز، وليكن j_{max} عدد العقد أو النقاط للحساب العددي.
- ✓ نعرف البعد المتساوي Δz بين نقطتين متتاليتين بـ:

$$\Delta z = \frac{z_{max}}{(j_{max}-1)} \quad (II.9)$$

❖ نطبق تعبيرات المشتقات الجزئية لنشر تايلور وفقاً لـ z من أجل كل انتقال عنصري Δz أو h كما هو موضح :

$$f(z) = f(z \pm h) \pm \frac{h_1}{1!} f'(z) + \frac{h_2}{2!} f''(z) + \dots \quad (II.10)$$

تقريب المشتق الأول في طريقة الفروق المنتهية:

$$f'(z) = \frac{f(z+h) - f(z-h)}{2h} \quad (II.11)$$

تقريب المشتق الثاني في طريقة الفروق المنتهية:

$$f''(z) = \frac{f(z+h) + f(z-h) - 2f(z)}{h^2} \quad (II.12)$$

تأخذ المعادلة الرياضية لتركيز كل جسيم وأيون الشكل الآتي عند النقطة j :

$$A_{(j-1,j)} C_{j-1}^k + A_{(j,j)} C_j^k + A_{(j+1,j)} C_{j+1}^k = B_j \quad (II.13)$$

$$j = 2, j_{max}-1 \quad \text{بحيث:}$$

هذه المعادلة الرياضية متناسبة مع نظام معادلات خطية مرتبطة على شكل جداء مصفوفات ($AX=B$)

بحيث: X - يمثل التركيز المطلوب حسابه.

A, B - عبارة عن مصفوفات عمودية.

5.II. حساب كثافة الجسيمات المحايدة و الأيونات:

1.5.II. حساب كثافة الجسيمات المحايدة:

بالاعتماد على طريقة الفروق المنتهية لتعريف المشتق الثاني نتحصل على عناصر المصفوفة التالية ($AX=B$) بالنسبة للجسيمات المحايدة.

$$A_{(j-1,j)} = - \frac{D_j^k}{\Delta z^2} \quad (II.14)$$

$$A_{(j,j)} = \frac{2D_j^k}{\Delta z^2} + \sum_{\text{reac}}^{\text{cons}} K_{\text{reac}(k,k')} C_j^{k'} \quad (II.15)$$

$$A_{(j+1,j)} = - \frac{D_j^k}{\Delta z^2} \quad (II.16)$$

$$B_{(j)} = \sum_{\text{reac}}^{\text{proud}} K_{\text{reac}(k',k'')} C_j^{k'} C_j^{k''} \quad (II.17)$$

2.5.II. حساب كثافة الأيونات:

وبنفس الطريقة وبالاعتماد على تعريف المشتق الأول والثاني نتحصل على عناصر المصفوفات بالصيغة التالية ($AX=B$) بالنسبة للأيونات.

$$A_{(j-1,j)} = - \frac{D_j^k}{\Delta z^2} - \frac{\mu_j^k E_j}{2\Delta z} \quad (II.18)$$

$$A_{(j,j)} = \frac{2D_j^k}{\Delta z^2} + \frac{\mu_j^k}{2\Delta z} (E_{j+1} - E_{j-1}) + \sum_{\text{reac}}^{\text{cons}} K_{\text{reac}(k,k')} C_j^{k'} \quad (II.19)$$

$$A_{(j+1,j)} = - \frac{D_j^k}{\Delta z^2} + \frac{\mu_j^k E_j}{2\Delta z} \quad (II.20)$$

$$B_{(j)} = \sum_{\text{reac}}^{\text{proud}} K_{\text{reac}(k',k'')} C_j^{k'} C_j^{k''} \quad (II.21)$$

3.5.II. الشروط الحدية:

تم الاعتماد على الشروط الحدية في منطقتين من المفاعل (عند السطح العلوي والسفلي للمفاعل)

✓ على مستوى سطح الركيزة وعند مخرج المفاعل تم اعتماد النقطة النصف بين $j=1$ و $j=2$ ، وتصبح الشروط الحدية المستخدمة في الحساب العددي كالآتي:
❖ بالنسبة للجسيمات الحيدية:

$$\begin{aligned} & [\sum \frac{1}{4} K_{reac} (C_1^{k'} + C_2^{k'})]. C_1^k + [\sum \frac{1}{4} K_{reac} (C_1^{k'} + C_2^{k'})]. C_2^k \\ & = \sum \frac{1}{4} K_{reac} (C_1^{k'} + C_2^{k'}) (C_1^{k''} + C_2^{k''}) \end{aligned} \quad (II.22)$$

بحيث:

$$A_{(1,1)} = [\sum \frac{1}{4} K_{reac} (C_1^{k'} + C_2^{k'})] \quad (II.23)$$

$$A_{(1,2)} = [\sum \frac{1}{4} K_{reac} (C_1^{k'} + C_2^{k'})] \quad (II.24)$$

$$B_{(1)} = \sum \frac{1}{4} K_{reac} (C_1^{k'} + C_2^{k'}) (C_1^{k''} + C_2^{k''}) \quad (II.25)$$

❖ بالنسبة للأيونات:

$$[\frac{-E_1(\mu_1^k + \mu_2^k)}{2\Delta z} + \sum \frac{1}{4} K_{reac} (C_1^{k'} + C_2^{k'})]. C_1^k +$$

$$[\frac{-E_2(\mu_1^k + \mu_2^k)}{2\Delta z} + \sum \frac{1}{4} K_{reac} (C_1^{k'} + C_2^{k'})]. C_2^k =$$

$$\sum \frac{1}{4} K_{reac} (C_1^{k'} + C_2^{k'}) (C_1^{k''} + C_2^{k''}) \quad (II.26)$$

اي:

$$A_{(1,1)} = \left[\frac{-E_1(\mu_1^k + \mu_2^k)}{2\Delta z} + \sum \frac{1}{4} K_{reac} (C_1^{k'} + C_2^{k'}) \right] \quad (\text{II.27})$$

$$A_{(1,2)} = \left[\frac{E_2(\mu_1^k + \mu_2^k)}{2\Delta z} + \sum \frac{1}{4} K_{reac} (C_1^{k'} + C_2^{k'}) \right] \quad (\text{II.28})$$

$$B_{(1)} = \sum \frac{1}{4} K_{reac} (C_1^{k'} + C_2^{k'}) (C_1^{k''} + C_2^{k''}) \quad (\text{II.29})$$

✓ على مستوى السطح العلوي للمفاعل وعند مدخل الغاز اعتمدنا على طريقتين:

• الطريقة الأولى:

تم استعمال النقطة النصف بين $j=j_{max}$ و $j=j_{max}-1$ ، تصبح الشروط الحدية المستخدمة في الحساب العددي كالاتي:

❖ بالنسبة للجسيمات الحيادية:

$$\begin{aligned} & \left[\sum \frac{1}{4} K_{reac} (C_{j_{max}-1}^{k'} + C_{j_{max}}^{k'}) \right] \cdot C_{j_{max}-1}^k + \\ & \left[\sum \frac{1}{4} K_{reac} (C_{j_{max}-1}^{k'} + C_{j_{max}}^{k'}) \right] \cdot C_{j_{max}}^k = \\ & \sum \frac{1}{4} K_{reac} (C_{j_{max}-1}^{k'} + C_{j_{max}}^{k'}) (C_{j_{max}-1}^{k''} + C_{j_{max}}^{k''}) \end{aligned} \quad (\text{II.30})$$

اي:

$$A_{(j_{max}j_{max}-1)} = \left[\sum \frac{1}{4} K_{reac} (C_{j_{max}-1}^{k'} + C_{j_{max}}^{k'}) \right] \quad (\text{II.31})$$

$$A_{(j_{max}j_{max})} = \left[\sum \frac{1}{4} K_{reac} (C_{j_{max}-1}^{k'} + C_{j_{max}}^{k'}) \right] \quad (\text{II.32})$$

$$B_{(j_{max})} = \sum \frac{1}{4} K_{reac} (C_{j_{max}-1}^{k'} + C_{j_{max}}^{k'}) (C_{j_{max}-1}^{k''} + C_{j_{max}}^{k''}) \quad (\text{II.33})$$

❖ بالنسبة للأيونات:

$$\begin{aligned}
& \left[\frac{-E_1(\mu_{j_{max-1}}^k + \mu_{j_{max}}^k)}{2\Delta z} + \sum \frac{1}{4} K_{reac} (C_{j_{max-1}}^{k'} + C_{j_{max}}^{k'}) \right] \cdot C_{j_{max-1}}^k \\
& + \left[\frac{E_2(\mu_{j_{max-1}}^k + \mu_{j_{max}}^k)}{2\Delta z} + \sum \frac{1}{4} K_{reac} (C_{j_{max-1}}^{k'} + C_{j_{max}}^{k'}) \right] \cdot C_{j_{max}}^k = \\
& \sum \frac{1}{4} K_{reac} (C_{j_{max-1}}^{k'} + C_{j_{max}}^{k'}) (C_{j_{max-1}}^{k''} + C_{j_{max}}^{k''}) \quad (II.34)
\end{aligned}$$

اي:

$$\begin{aligned}
A_{(j_{max}, j_{max-1})} &= \left[\frac{-E_1(\mu_{j_{max-1}}^k + \mu_{j_{max}}^k)}{2\Delta z} + \right. \\
& \left. \sum \frac{1}{4} K_{reac} (C_{j_{max-1}}^{k'} + C_{j_{max}}^{k'}) \right] \quad (II.35)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
A_{(j_{max}, j_{max})} &= \left[\frac{E_2(\mu_{j_{max-1}}^k + \mu_{j_{max}}^k)}{2\Delta z} + \right. \\
& \left. \sum \frac{1}{4} K_{reac} (C_{j_{max-1}}^{k'} + C_{j_{max}}^{k'}) \right] \quad (II.36)
\end{aligned}$$

$$B_{(j_{max})} = \sum \frac{1}{4} K_{reac} (C_{j_{max-1}}^{k'} + C_{j_{max}}^{k'}) (C_{j_{max-1}}^{k''} + C_{j_{max}}^{k''})$$

● الطريقة الثانية:

قمنا بإدخال نسب ضعيفة للتراكيز الأولية لمختلف الجسيمات الحياضية بينما للأيونات قمنا باستخدام النقطة النصف بين $j=j_{max}$ و $j=j_{max-1}$ ، يكون الشكل المصفوفي كما هو موضح اسفله:

❖ بالنسبة للجسيمات الحياضية:

$$f = C_{j_{max}}^{k_0} \quad ; \quad Z = Z_{max}$$

$$A_{(j_{max}, j_{max-1})} = 0 \quad , \quad A_{(j_{max}, j_{max})} = 1 \quad , \quad B_{(j_{max})} C_{j_{max}}^{k_0} \quad (II.37)$$

❖ بالنسبة للأيونات:

$$\begin{aligned}
& \left[\frac{-E_1(\mu_{j_{max-1}}^k + \mu_{j_{max}}^k)}{2\Delta z} + \sum \frac{1}{4} K_{reac} (C_{j_{max-1}}^{k'} + C_{j_{max}}^{k'}) \right] \cdot C_{j_{max-1}}^k \\
& + \left[\frac{E_2(\mu_{j_{max-1}}^k + \mu_{j_{max}}^k)}{2\Delta z} + \sum \frac{1}{4} K_{reac} (C_{j_{max-1}}^{k'} + C_{j_{max}}^{k'}) \right] \cdot C_{j_{max}}^k = \\
& \sum \frac{1}{4} K_{reac} (C_{j_{max-1}}^{k'} + C_{j_{max}}^{k'}) (C_{j_{max-1}}^{k''} + C_{j_{max}}^{k''}) \quad (\text{II.38})
\end{aligned}$$

اي:

$$\begin{aligned}
A_{(j_{max}, j_{max-1})} &= \left[\frac{-E_1(\mu_{j_{max-1}}^k + \mu_{j_{max}}^k)}{2\Delta z} + \right. \\
& \left. \sum \frac{1}{4} K_{reac} (C_{j_{max-1}}^{k'} + C_{j_{max}}^{k'}) \right] \quad (\text{II.39})
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
A_{(j_{max}, j_{max})} &= \left[\frac{E_2(\mu_{j_{max-1}}^k + \mu_{j_{max}}^k)}{2\Delta z} + \right. \\
& \left. \sum \frac{1}{4} K_{reac} (C_{j_{max-1}}^{k'} + C_{j_{max}}^{k'}) \right] \quad (\text{II.40})
\end{aligned}$$

$$B_{(j_{max})} = \sum \frac{1}{4} K_{reac} (C_{j_{max-1}}^{k'} + C_{j_{max}}^{k'}) (C_{j_{max-1}}^{k''} + C_{j_{max}}^{k''})$$

✓ على مستوى السطح العلوي للمفاعل وعند مدخل الغاز تم اعتماد القيم الأولية للغاز الداخل بالنسبة للعنصرين SiH_4 و O_2

الشروط الحدية المستخدمة في الحساب العددي باستعمال المصفوفات كالاتي:

$$f = C_{j_{max}}^{k_0} \quad ; \quad Z = Z_{max}$$

$$A_{(j_{max}, j_{max-1})} = 0, \quad A_{(j_{max}, j_{max})} = 1, \quad B_{(j_{max})} C_{j_{max}}^{k_0} \quad (\text{II.41})$$

4.5.II. الطريقة العددية لحل مصفوفة:

لحل هذه المسألة عدديا نقوم بالاعتماد على طريقة غوص صايدل التكرارية بالنسبة لغوص صايدل لدينا X^0 حلا أوليا للتراكيز، ويكون الحل عند تكرار (p+1) هو:

$$X_1^{p+1} = \frac{(-\sum_{j=2}^n a_{1j}X_j^{p+1} + b_1)}{a_{11}} \quad (\text{II.42})$$

$$X_m^{p+1} = \frac{(-\sum_{j=1}^{m-1} a_{mj}X_j^{p+1} - \sum_{j=m+1}^n a_{mj}X_j^p + b_m)}{a_{mm}} \quad (\text{II.43})$$

$$X_n^{p+1} = \frac{(-\sum_{j=1}^{n-1} a_{nj}X_j^{p+1} + b_n)}{a_{nn}} \quad (\text{II.44})$$

يسمح لنا الشكل ثلاثي الأقطار للمصفوفات A ، في حالتنا المختلفة بالحصول على تعبيرات ابسط للمتغيرات X_n^p .

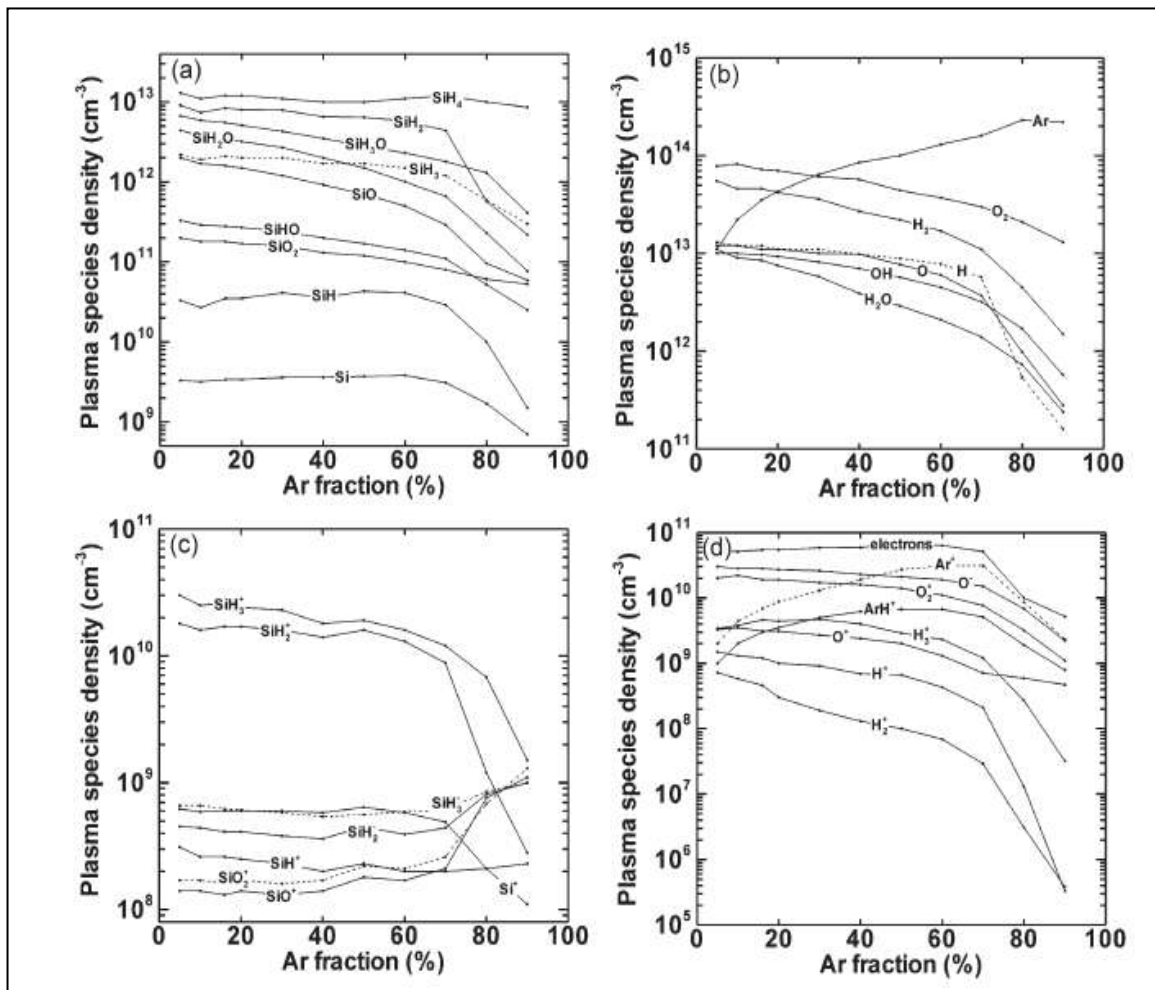
هذه العلاقات تجعل من الممكن حساب قيم المتغيرات بالتقريب المتتالي. نوقف الحساب عندما نصل الى تغييرات صغيرة بين القيم المتتالية للمتغيرات X_m^p هذه الطريقة التكرارية مناسبة بشكل خاص لحل الأنظمة التي بها عدد كبير من المقادير المجهولة.

6.II. التراكيز الأولية للجسيمات المحايدة والأيونات:

لإدخال التراكيز الأولية للجسيمات المحايدة والأيونات لخوارزمية غوص صايدل اعتمدنا على طريقتين :

❖ **الطريقة الأولى:** القراءة المباشرة من منحنيات المرجع الأصلي [1]

قمنا بقراءة القيم التقريبية للتراكيز من منحنيات S.Tinck and A. Bogaerts(2012) [1]، اخذنا القيم عند 0% من نسبة Ar لان دراستنا مقتصرة فقط على SiH₄ و O₂. نتائج هذه الطريقة سيتم مقارنتها مع نتائج ن.رحيم وش.طاجين (2022) [3] لاعتمادهم على نفس طريقة الادخال.



الشكل (2.2):منحنيات التراكيز الخاصة بصاحب التجربة [1]

يوضح الجدول (4.2) مختلف القيم التقريبية المقروءة من المنحنيات السابقة لمختلف الجسيمات والأيونات المستعملة في دراستنا.

الجدول (4.2): القيم التقديرية لتراكيز الجسيمات المستعملة في البرنامج العددي

SiH₃	H	SiH₂	SiH
2.1×10^{12}	1.4×10^{13}	9×10^{12}	3.5×10^{10}
H₂	O	OH	H₂O
5.5×10^{13}	1.3×10^{13}	10^{13}	1.3×10^{13}
SiH₃O	SiH₂O	SiHO	SiO
6.8×10^{12}	4.8×10^{12}	3.5×10^{11}	2.5×10^{12}
SiO₂	Si₂H₅	Si₂H₃	Si₂H₄
2×10^{11}	3×10^9	3.2×10^9	2×10^8
Si₂H₆	SiH₄	O₂	SiH₃⁺
1.3×10^{10}	1.5×10^{14}	1.28×10^{14}	3×10^{10}
SiH₂⁺	SiH⁺	H⁺	H₂⁺
1.9×10^{10}	13.1×10^9	1×10^9	1.7×10^8
H₃⁺	O⁺	O₂⁺	SiO₂⁺
2×10^9	3.5×10^9	2×10^{10}	1.8×10^9

❖ الطريقة الثانية :

حساب قيم تقريبية، أكثر دقة، في ظروف قريبة من حالة التوازن لتراكيز المتفاعلات والنواتج بحيث لا يعتمد فقط على عنصر واحد للإنتاج، استطعنا كتابة لكل جسيم وأيون معادلة من الشكل: $AX=B$ وهي معادلات خطية مرتبطة على شكل جداء مصفوفات حلها يكون بطريقة غوص-صايدل التكرارية. هذه الطريقة كانت تعقبا لما عملت عليه الطالبة (2021) A. Bahaz [2] التي قامت بالاعتماد على المعادلات الأقوى لحساب تراكيز النواتج فقط للجسيمات الحيادية.

❖ اخذنا بعين الاعتبار تدفق الغاز عند مدخل المفاعل المساوي لـ :

$$500\text{sccm} = 8,33333 \text{ cm}^3/\text{s}$$

❖ قمنا بحساب سرعة الغاز من خلال:

$$V = \frac{\text{التدفق}}{s} = \frac{8,3333}{\pi R^2} \text{ cm/s}$$

$$C_j^K \cdot V \cdot \Delta s = C_{j+1}^K \cdot V \cdot \Delta s + \left(\sum_{K_{\text{react}}^{\text{prod}}} K_{\text{react}(K, K'')} C_j^{K'} C_j^{K''} - \sum_{K_{\text{react}}^{\text{cons}}} K_{\text{react}(K, K')} C_j^K C_j^{K'} \right) \Delta z \cdot \Delta s \quad (\text{II.42})$$

$$- \sum_{K_{\text{react}}^{\text{prod}}} K_{\text{react}(K, K'')} C_j^{K'} C_j^{K''} + \left(\frac{V}{\Delta z} + \sum_{K_{\text{react}}^{\text{cons}}} K_{\text{react}(K, K')} C_j^{K'} \right) C_j^K = \frac{V}{\Delta z} \cdot C_{j+1}^K \quad (\text{II.43})$$

يمكن ترجمتها بالشكل التالي :

$$A_{(j,j)} \cdot C_j^{K'} + A_{(j,j)} \cdot C_j^K = B_{(j+1)} \quad (\text{II.44})$$

من اجل اتمام الحساب تحتاج هذه الطريقة الى ادخال شروط حدية على مستوى السطح العلوي والسفلي للمفاعل، قمنا بإدخالها على هذا النحو:

❖ على مستوى السطح العلوي للمفاعل:

بالنسبة للعنصرين SiH_4 و O_2 تم اعتماد القيم $C_{j_{\max}}^{k_0}$ الأولية للغاز الداخل.

اما بالنسبة لبقية العناصر قمنا بإدخال نسبة 10^{-10} من القيم التقريبية المستعملة في الطريقة الأولى كتراكيز أولية لمختلف الجسيمات والأيونات، بحيث يكون الشكل المصنوفي كما هو موضح اسفله :

$$f = C_{j_{\max}}^{k_0} ; Z = Z_{\max}$$

$$A_{(j_{\max}; j_{\max-1})} = 0. , A_{(j_{\max}; j_{\max})} = 1. , B_{(j_{\max})} C_{j_{\max}}^{k_0} \quad (\text{II.45})$$

❖ على مستوى السطح السفلي للمفاعل : قمنا بإعطاء قيمة التركيز عند $j=1$

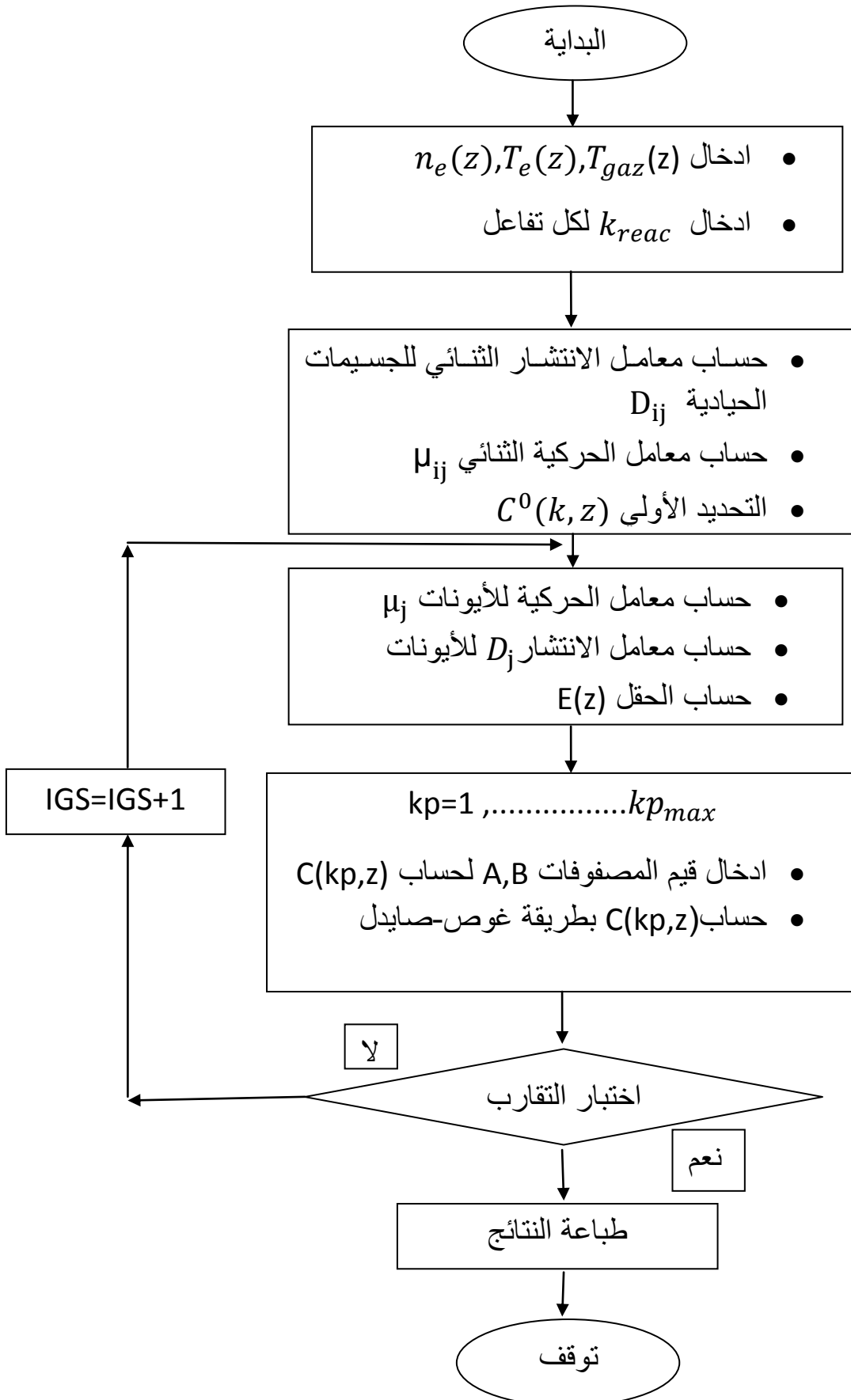
$$C_2^{k_0} = C_1^{k_0} \quad \text{بمعنى نفس القيمة عند } z=2$$

- عند اجراء الحساب لاحظنا ان تركيز SiH_3O كبير جدا (اكبر حتى من التركيز الابتدائي C_0) لهذا تحققنا من جميع المعادلات التي تم انتاجه فيها فوجدنا المعادلة رقم (21) المتمثلة في $\text{SiH}_4 + \text{O}_2 \rightarrow \text{SiH}_3\text{O} + \text{OH}$ التي لها ثابت تفاعل $K_{21} = 3 \times 10^{-12}$ وهذا الرقم يعتبر غير منطقي ،لذا قمنا بالبحث في مراجع مختلفة فوجدنا ان قيمته مساوية لـ $K_{21} = 3 \times 10^{-18}$ ، قمنا بتغييره فكانت النتائج اكثر منطقية.

7.II. مخطط برنامج الحساب:

قمنا بإنجاز برنامج عددي بلغة Fortran لحساب تراكيز الجسيمات الحيادية والأيونات في البلازما المقترنة بالحث (ICP) وذلك بمعالجة الشروط الحدية والحلول الأولية.

يتم الحساب العددي لبرنامجنا وفقا للمخطط العام الموضح في الشكل (2.3)



الشكل (3.2): مخطط البرنامج العددي

الفصل الثالث :
النتائج العددية ومناقشتها

الفصل الثالث: النتائج العددية ومناقشتها

1.III. مقدمة:

في هذا الفصل سنقوم بعرض مختلف النتائج للنمذجة العددية المستخدمة لحساب تراكيز الجسيمات الحيادية والأيونات لخليط الغاز (SiH_4/O_2) بجوار المحور z في مفاعل أسطواني ثنائي البعد في البلازما المقترنة بالحث (ICP) وذلك بمعالجة الشروط الحدية والحلول الأولية، تم الأخذ بعين الاعتبار الشروط التي استخدمها [1] S .Tinck and A . Bogaerts(2012)

- ✓ تردد التشغيل 13.56MHZ
- ✓ ضغط الغاز 10mTorr
- ✓ درجة الحرارة للجدار والركيزة 60°c
- ✓ التركيز الابتدائي للخليط: $2.8 \times 10^{20} \text{ m}^{-3}$
- ✓ يتكون الغاز SiH_4 بنسبة 54% من التركيز الابتدائي و O_2 بنسبة 46% من التركيز الابتدائي.

قمنا بالاعتماد في دراستنا على 19 جسيم حيادي و 9 أيونات و 82 تفاعل كيميائي داخل المفاعل.

- ✓ الجسيمات الحيادية الداخلة في التفاعل: SiH_3 , O_2 , H ; SiH_2 H_2O , OH , O , SiH_3O , Si_2H_6 , H_2 , Si_2H_3 , SiH_2O , SiHO , SiO , SiO_2 , SiH , SiH_4 , Si_2H_5 , Si_2H_4

- ✓ الأيونات: SiO_2^+ , O_2^+ , O^+ , H_3^+ , H_2^+ , H^+ , SiH^+ , SiH_2^+ , SiH_3^+
- ✓ 82 تفاعل كيميائي

هذا العمل هو امتداد لعمل مذكرات الماجستير الخاصة بالطالبات:

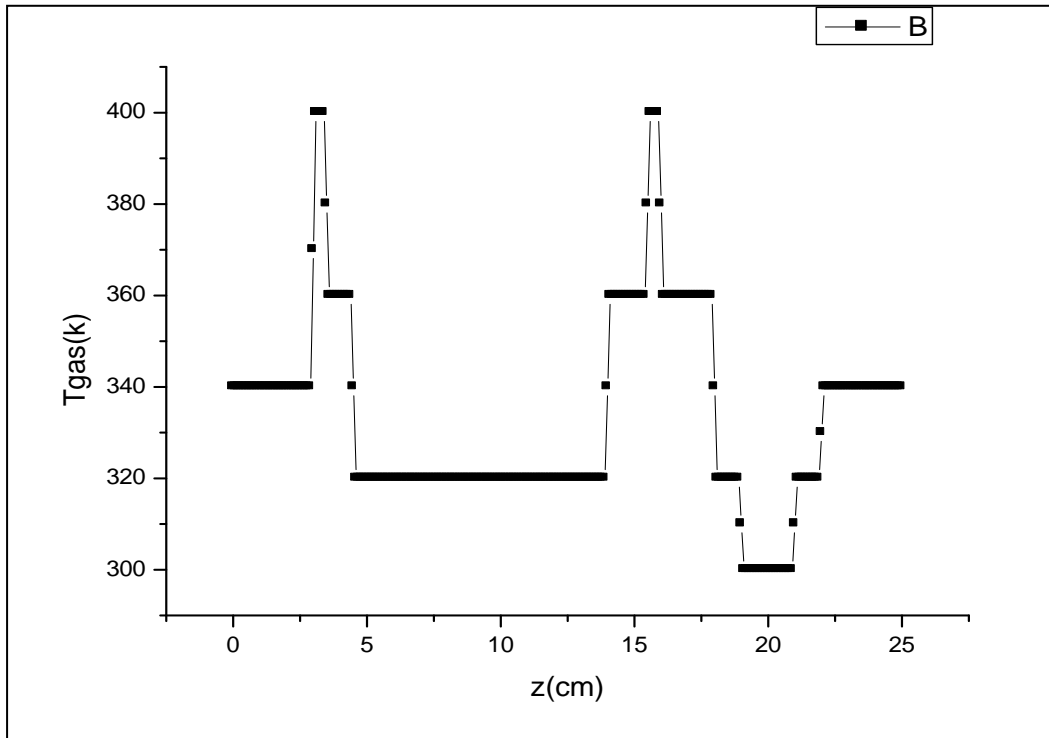
(2021) A. Bahaz [2]، ن.رحيم و ش. طاجين (2022) [3] حيث ركزنا في عملنا على معالجة الشروط الحدية والحلول الأولية لمحاولة الوصول الى نتائج أكثر دقة.

2.III. درجة حرارة الغاز و الكثافة الالكترونية و درجة حرارة الإلكترون:

بالاعتماد على القيم التجريبية للكثافة الالكترونية ودرجة الحرارة الالكترونات و درجة حرارة الغاز وفقا للمحور z ، بحيث تم استخلاص القيم العددية من مذكرة الطالبة [2] (2021) A. Bahaz التي بدورها قامت بقراءة قيم T_{gaz} و n_e و T_e على كل البعد z وذلك من خلال مخططات تم وضعها من طرف S. Tinck and [1] A . Bogaerts(2012)

1.2.III. درجة حرارة الغاز T_{gaz} :

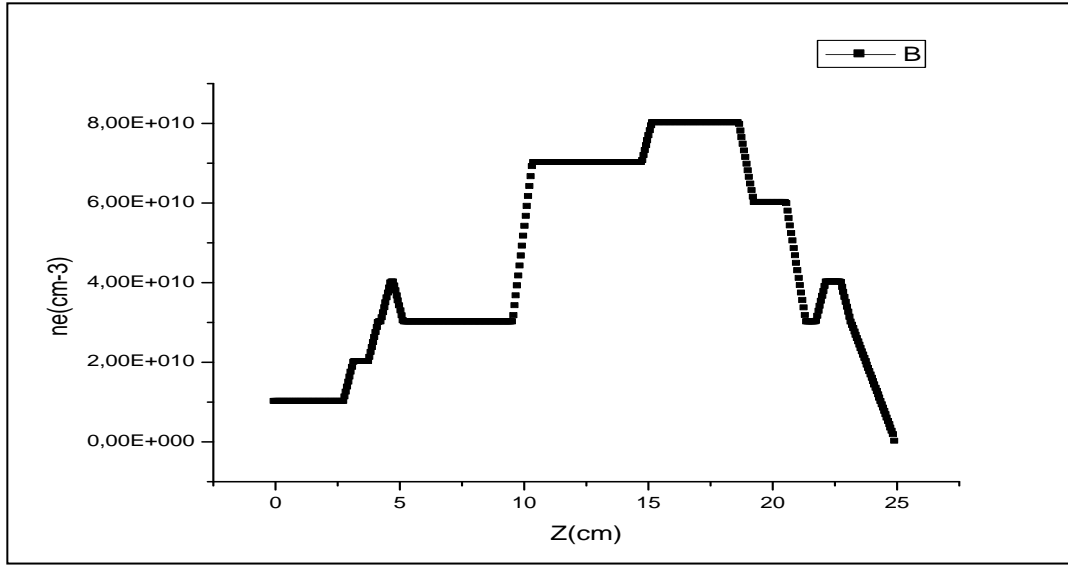
يوضح الشكل (1.3) تغيرات درجة حرارة الغاز بدلالة البعد z .



الشكل (1.3): تغيرات درجة حرارة الغاز T_{gaz} بدلالة البعد z .

2.2.III. كثافة الإلكترونات n_e :

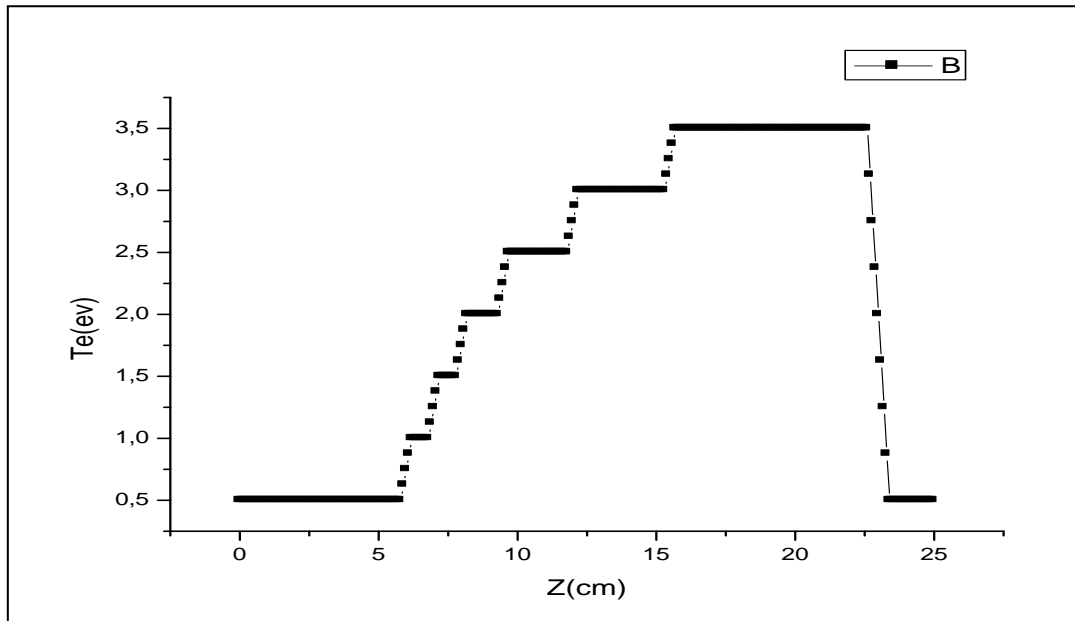
يوضح الشكل (2.3) تغيرات كثافة الإلكترونات بدلالة البعد Z



الشكل (2.3): تغيرات كثافة الإلكترونات n_e بدلالة البعد Z .

3.2.III. درجة حرارة الإلكترون T_e :

يوضح الشكل (3.3) تغيرات درجة حرارة الإلكترون بدلالة البعد Z



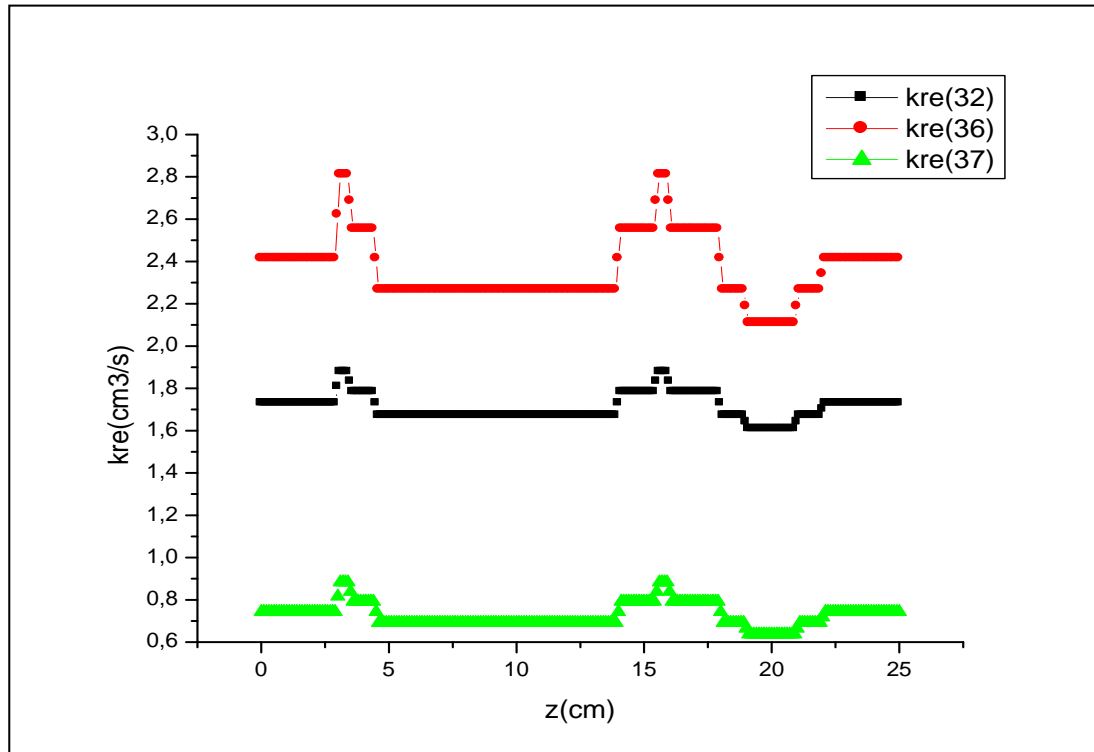
الشكل (3.3): تغيرات درجة حرارة الإلكترون T_e بدلالة البعد Z .

3.III. تغيرات ثابت التفاعلات الكيميائية مع البعد z ودرجة حرارة الغاز T_{gaz} :

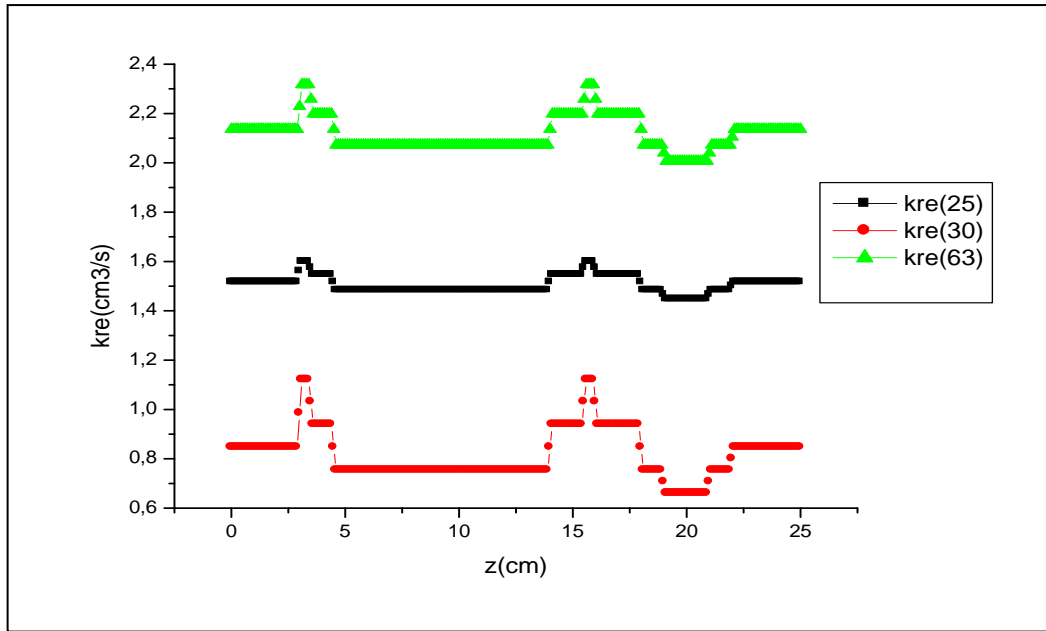
نقدم في هذا القسم تغيرات ثابت بعض التفاعلات الكيميائية مع البعد z ودرجة حرارة الغاز T_{gaz} في المفاعل.

يمكننا ان نلاحظ ان منحنيات ثوابت التفاعل المرسومة بدلالة درجة حرارة الغاز T_{gaz} تتغير بشكل خطي مع اختلاف الميل من تفاعل الى اخر ،بينما ثوابت التفاعل المرسومة بدلالة البعد z منحنياتها تتغير بشكل حاد في بعض النقاط.

❖ بدلالة البعد z :

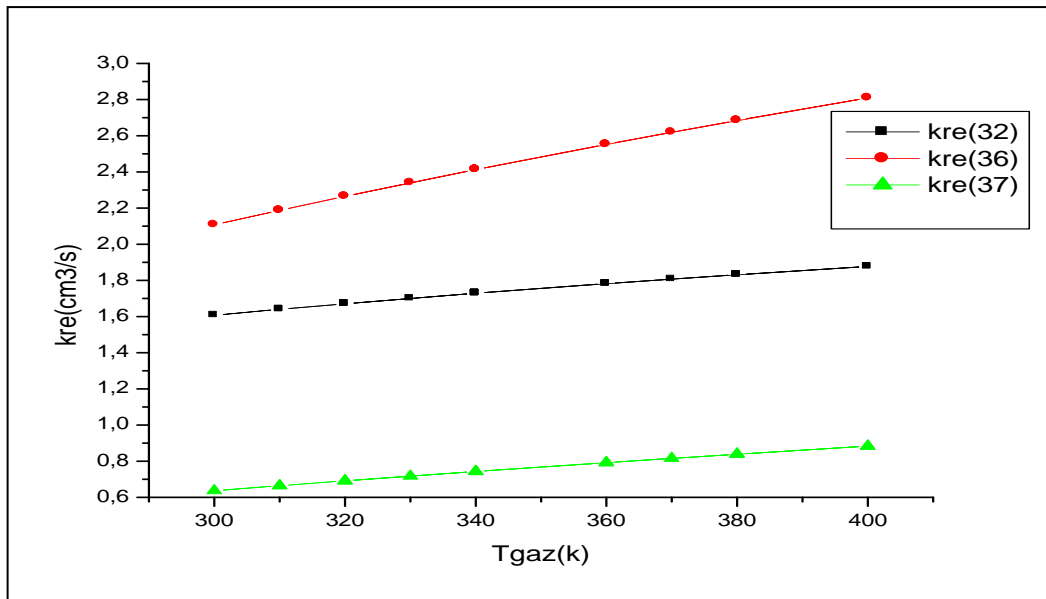


الشكل (4.3):تغيرات معامل ثابت التفاعلات الكيميائية رقم 32 و 36 و 37 بدلالة البعد z

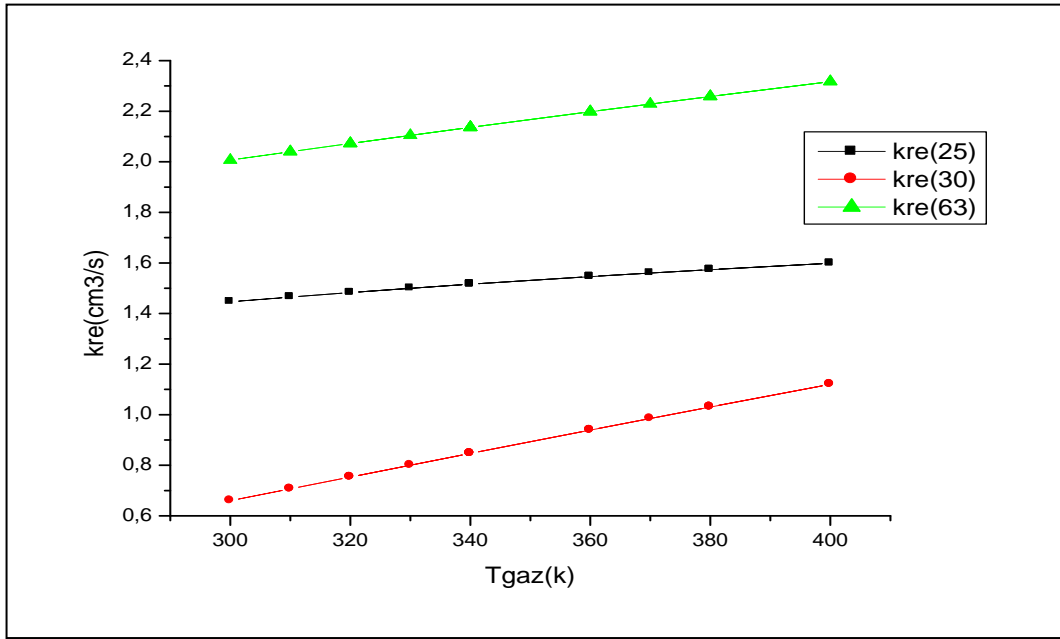


الشكل (5.3): تغيرات معامل ثابت التفاعلات الكيميائية رقم 25 و 30 و 63 بدلالة البعد z

❖ بدلالة درجة حرارة الغاز T_{gaz} :



الشكل (6.3): تغيرات معامل ثابت التفاعلات الكيميائية رقم 32 و 36 و 37 بدلالة درجة حرارة الغاز T_{gaz} .



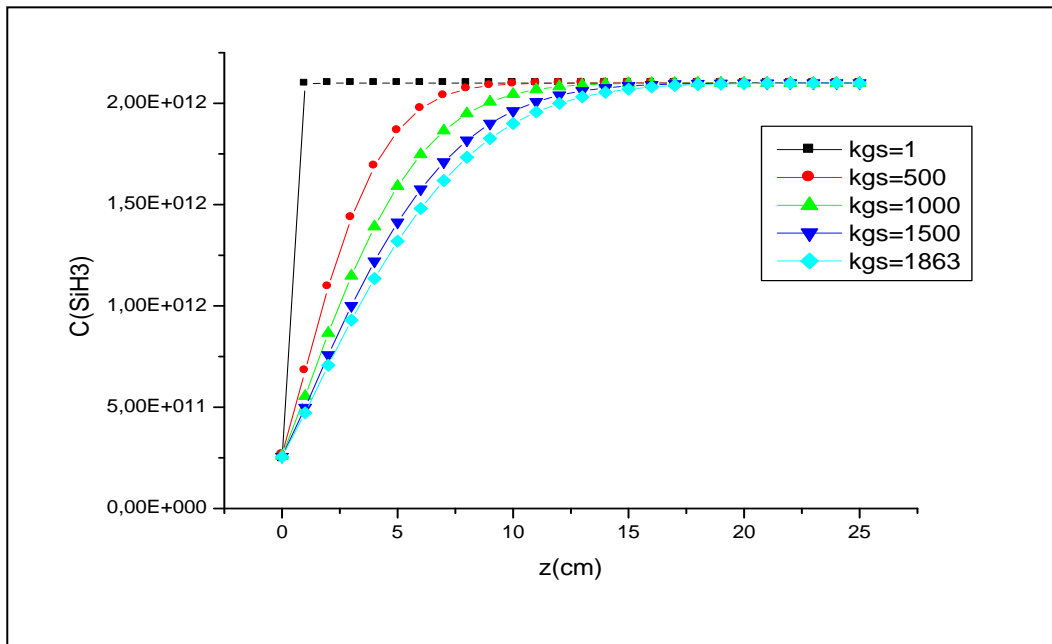
الشكل (7.3): تغيرات معامل ثابت التفاعلات الكيميائية رقم 25 و 30 و 63 بدلالة درجة حرارة الغاز T_{gaz}

4.III. نتائج الطريقة الأولى :

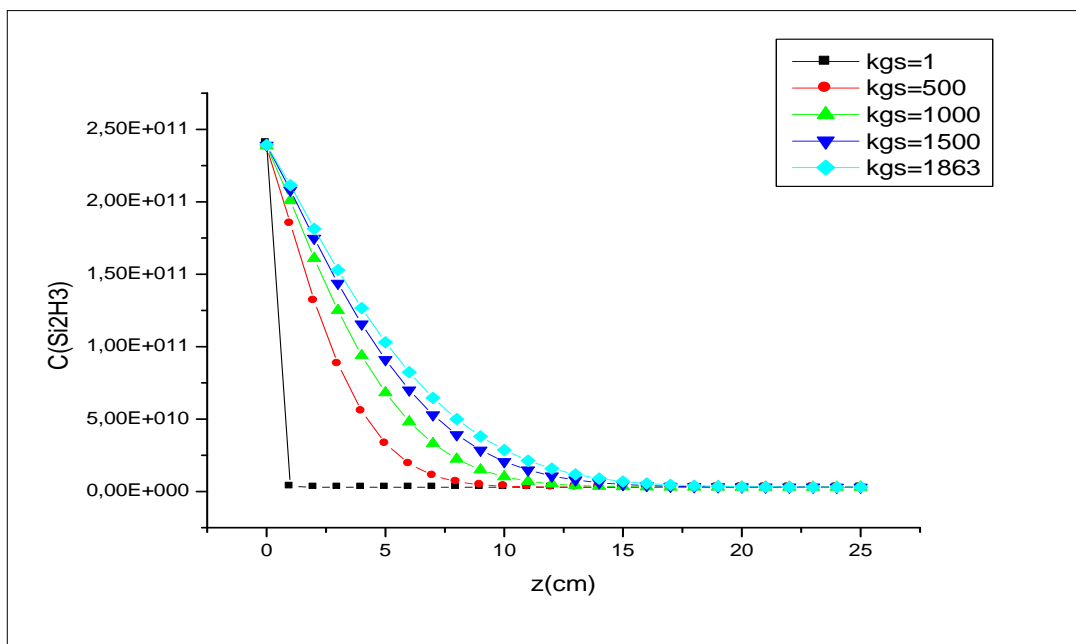
1.4.III. منحنيات التقارب لتراكيز بعض الجسيمات الحيدانية والأيونات:

✓ المنحنيات اسفله ناتجة عن طريقة الادخال الأولى للحلول الأولية (القراءة المباشرة من المنحنيات)

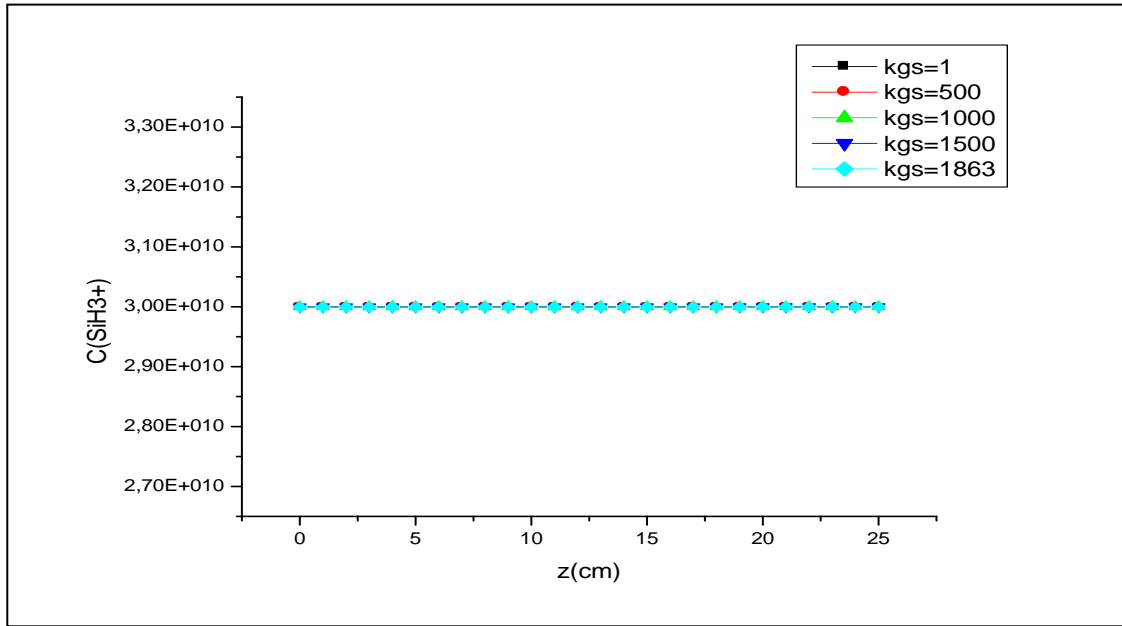
قمنا برسم منحنيات تقارب تراكيز الجسيمات الحيدانية والأيونات باستخدام العمليات التكرارية 1863، 1500، 1000، 500، 1، وكانت النتائج كما هي موضحة في الأشكال (8.3) و(9.3) و(10.3) و(11.3).



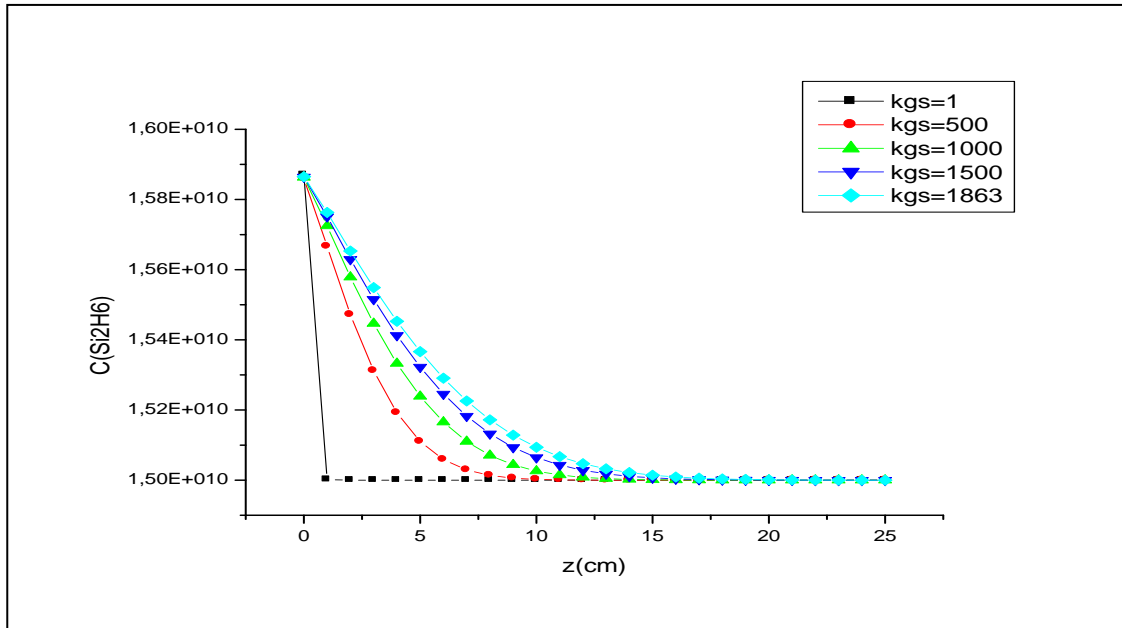
الشكل (8.3): منحنى تقارب تركيز الجسيم SiH₃



الشكل (9.3): منحنى تقارب تركيز الجسيم Si₂H₃



الشكل (10.3): منحنى تقارب تركيز الأيون SiH_3^+

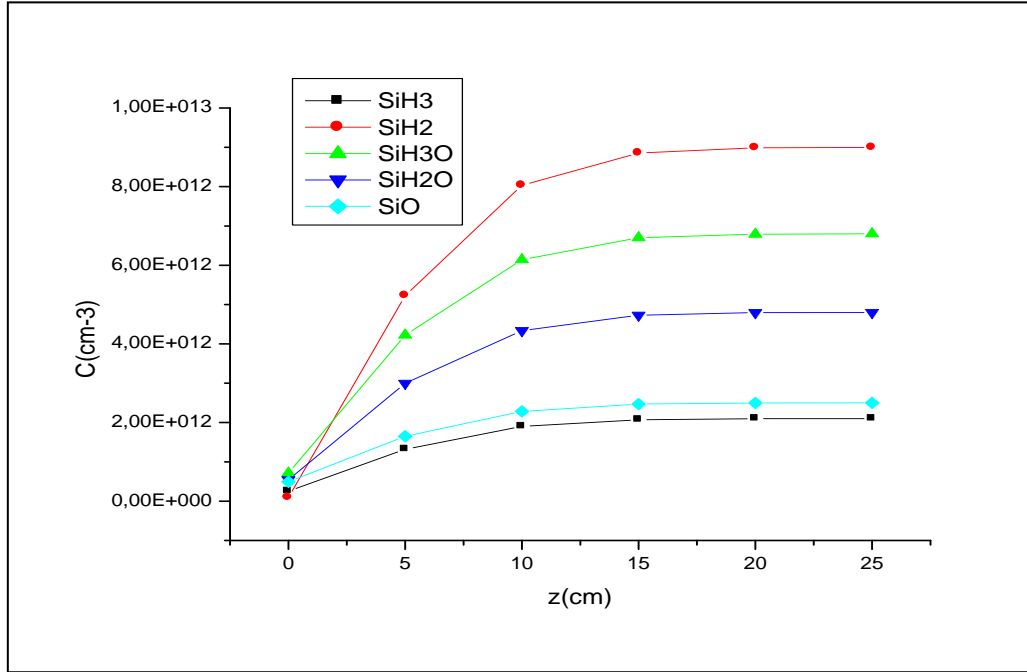


الشكل (11.3): منحنى تقارب تركيز الجذر Si_2H_6

❖ بعد ملاحظة منحنيات التقارب للجسيمات الحيادية والأيونات نجد انه بزيادة عدد العمليات التكرارية مع الحفاظ على نفس الانتقال من تكرار الى اخر، يزداد تقارب المنحنيات الى غاية الوصول الى انطباقها مع بعضها البعض عند العملية التكرارية 1863.

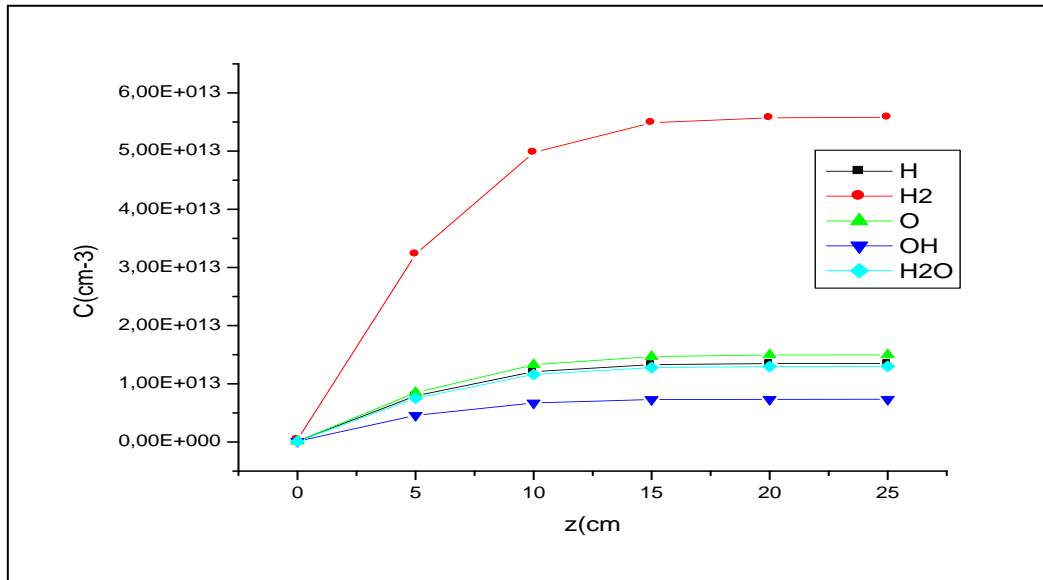
5.III. تراكيز بعض الجسيمات الحيادية والأيونات:

قمنا برسم منحنيات تغير تراكيز بعض الجسيمات الحيادية والأيونات بدلالة البعد z . الأشكال (12.3)، (13.3)، (14.3)، (15.3)، (16.3)، (17.3)، (18.3) توضح ذلك.



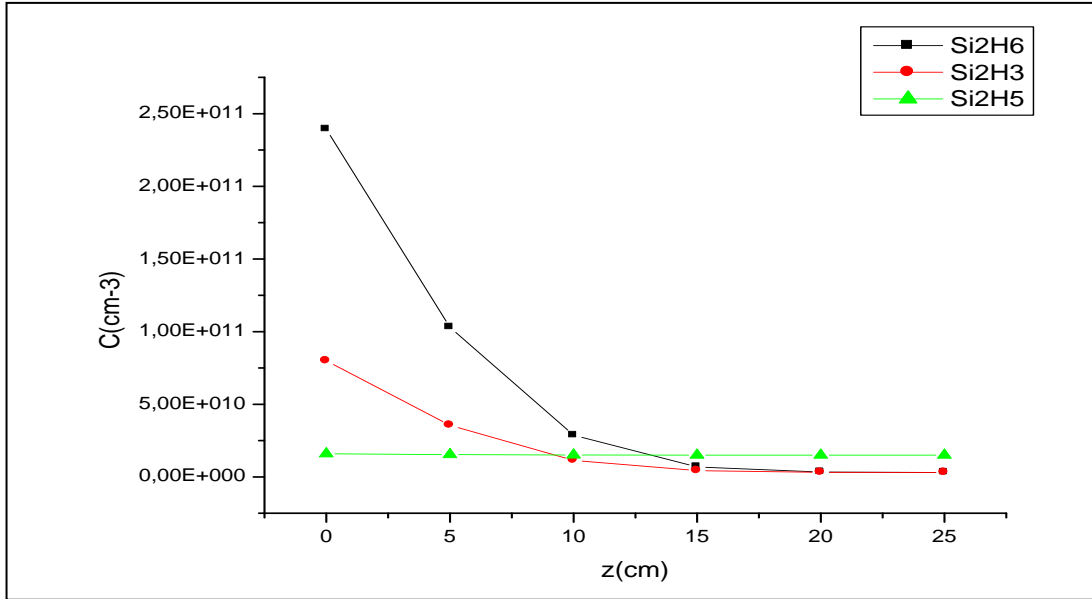
الشكل (12.3): منحنى تغيرات تركيز الجسيمات SiH_3 و SiH_2 و SiH_3O و

SiO و SiH_2O بدلالة البعد z

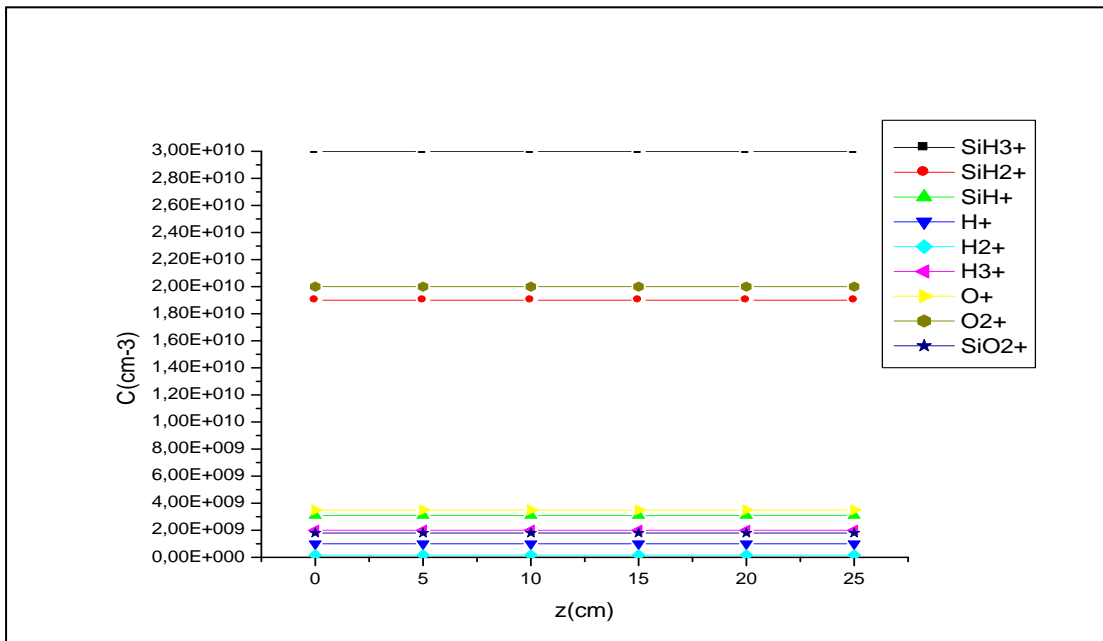


الشكل (13.3): منحنى تغيرات تركيز الجسيمات H_2O و H و OH و O بدلالة

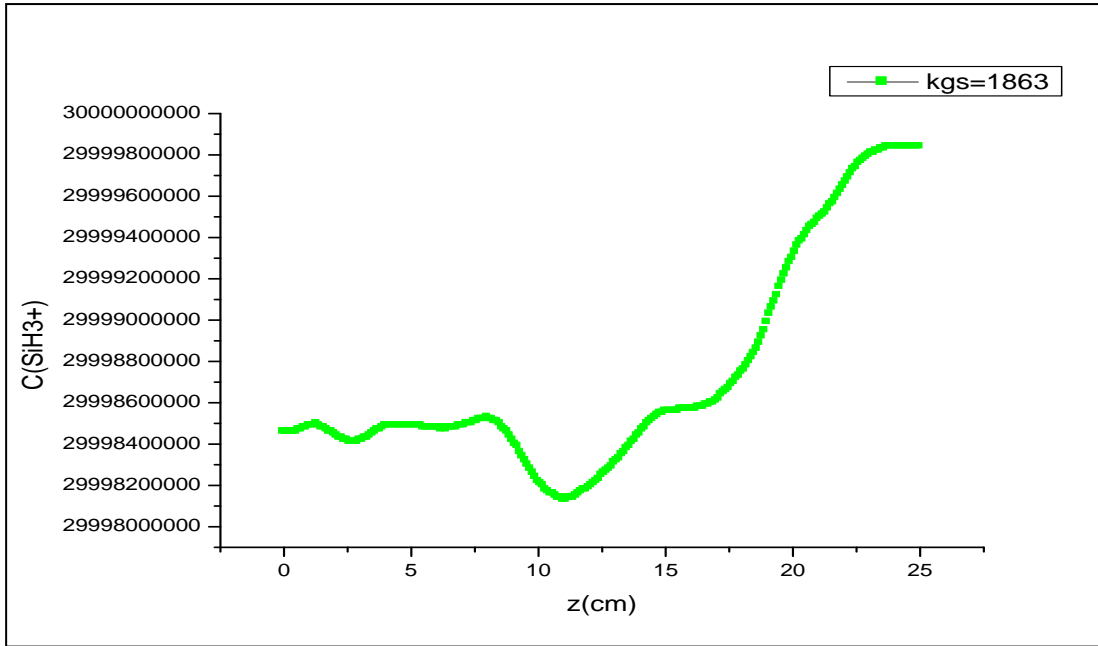
البعد z



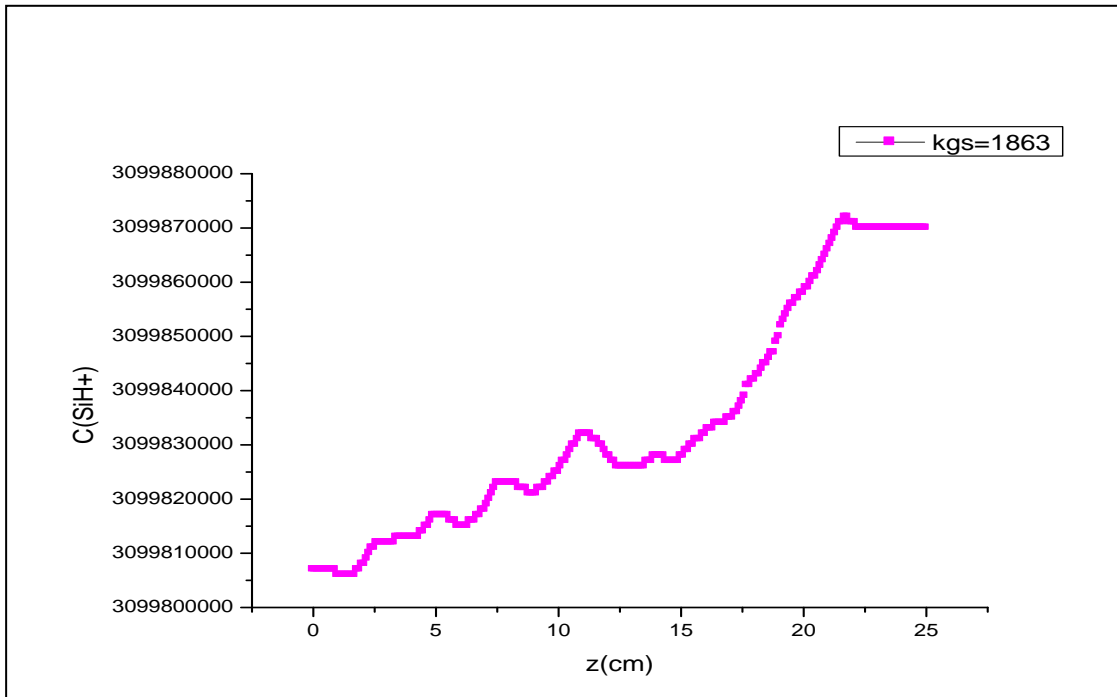
الشكل (14.3): منحنى تغيرات تركيز الجسيمات Si_2H_6 , Si_2H_5 , Si_2H_3 بدلالة البعد z



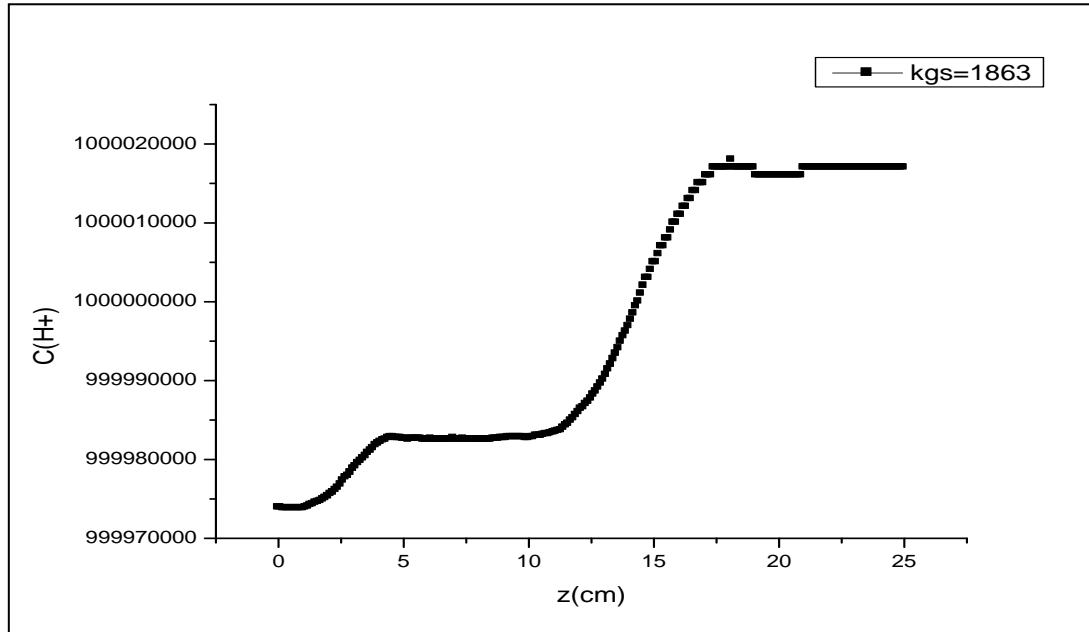
الشكل (15.3): منحنى تغيرات تركيز جميع الأيونات بدلالة البعد z



الشكل (16.3): منحنى تغيرات تركيز الأيون SiH_3^+ بدلالة البعد z



الشكل (17.3): منحنى تغيرات تركيز الأيون SiH^+ بدلالة البعد z



الشكل(18.3): منحنى تغيرات تركيز الأيون H^+ بدلالة البعد z

6.III. مقارنة نتائج الطريقة الأولى مع نتائج صاحب التجربة :

قمنا بمقارنة تراكيز بعض الجسيمات الحيدرية والأيونات المتحصل عليها مع نتائج (S.Tinck and A.Bogaerts(2012) [1]، نتائج ن.رحيم وش.طاجين (2022) [3]، بحيث اعتمدنا على قيم منتصف المفاعل للمقارنة بين مختلف النتائج.

يوضح الجدول (1.3) مقارنة لتراكيز بعض الجسيمات الحيدرية والأيونات مع

(S.Tinck and A . Bogaerts(2012) و ن.رحيم ،ش.طاجين (2022)

الجدول (1.3) : المقارنة لتراكيز بعض الجسيمات الحيدرية والأيونات مع صاحب التجربة ،ن.رحيم وش.طاجين (2022)

تراكيز مذكرة 2022 (cm^{-3})	تراكيز T and B (cm^{-3})	التركيز المتحصل عليه (cm^{-3})	منحنى الجزر
1.1×10^{12}	2.1×10^{12}	2.01×10^{12}	SiH ₃
3.2×10^{11}	9×10^{12}	8.6×10^{12}	SiH ₂
2.1×10^{11}	2×10^{11}	1.91×10^{11}	SiO ₂
1.67×10^9	6.8×10^{12}	6.52×10^{12}	SiH ₃ O
—	10^{13}	7.1×10^{12}	OH
2.4×10^{12}	1.4×10^{13}	1.3×10^{13}	H
3.2×10^{12}	2.5×10^{12}	2.4×10^{12}	SiO
—	3×10^{10}	2.99×10^{10}	SiH ₃ ⁺
1.5×10^9	3.1×10^9	3.09×10^9	SiH ⁺
—	1.7×10^8	1.69×10^8	H ₂ ⁺
—	2×10^{10}	1.99×10^{10}	O ₂ ⁺

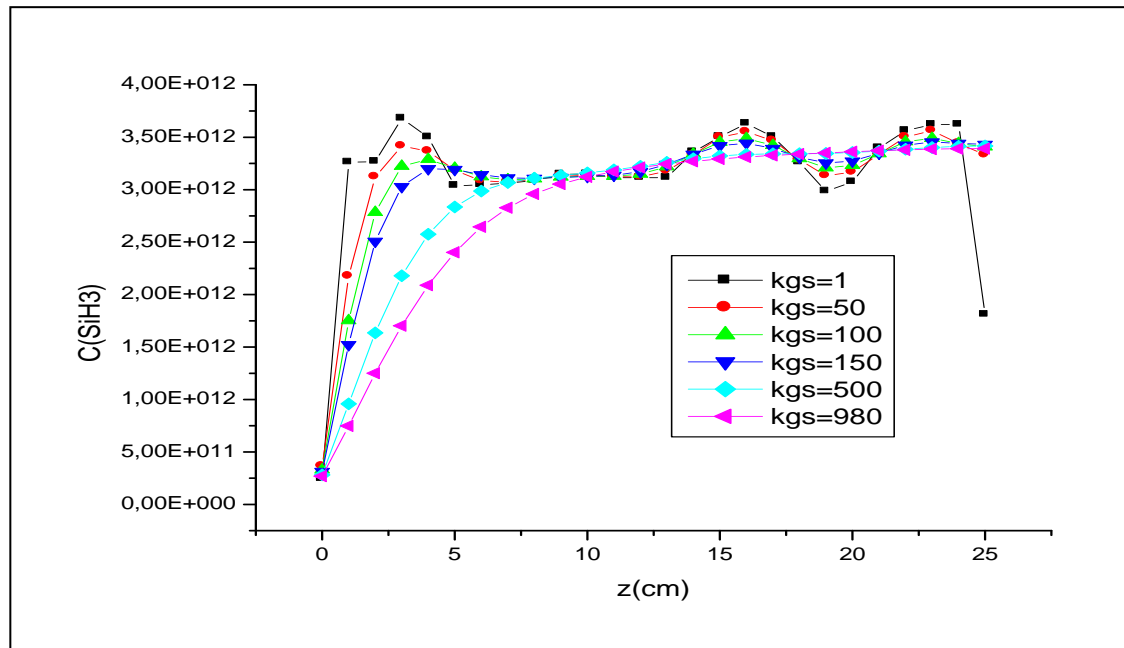
✓ بعد مقارنة مختلف تراكيز الجسيمات الحيدرية والأيونات في منتصف المفاعل مع نتائج (2012) S. Tinck and A. Bogaerts [1] لاحظنا وجود تقارب كبير بين النتائج لمختلف العناصر، بينما اثناء المقارنة مع ن. رحيم وش. طاجين (2022) [3] كانت نتائجنا احسن وأقرب الى صاحب التجربة منهم.

7.III. نتائج الطريقة الثانية:**1.7.III. منحنيات التقارب لتراكيز بعض الجسيمات الحادية والأيونات:**

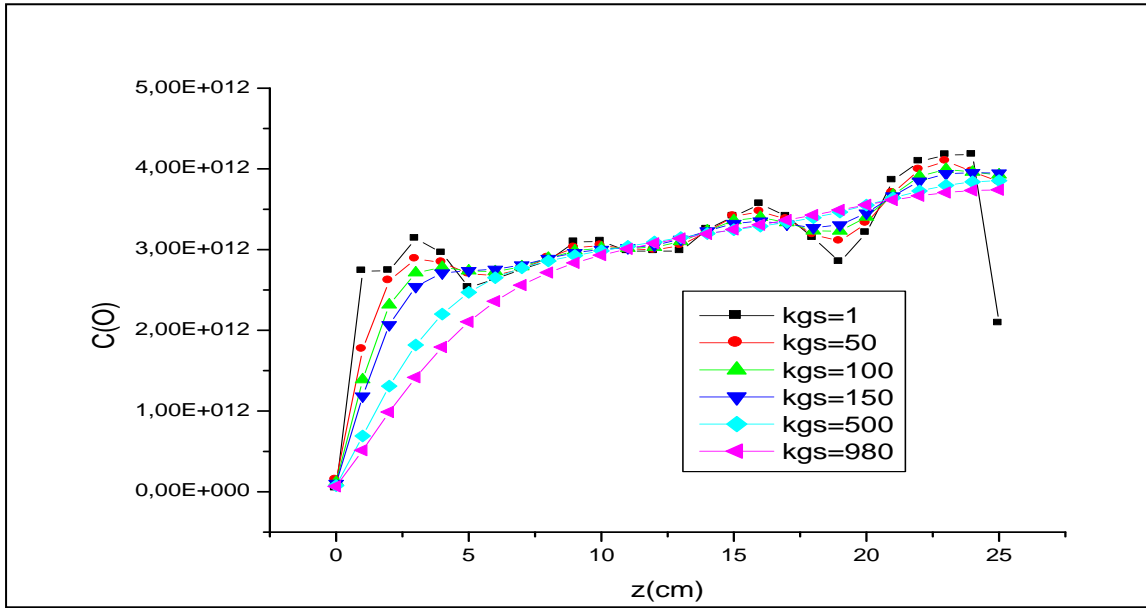
✓ المنحنيات اسفله ناتجة عن طريقة الادخال الثانية للحلول الأولية (استخدام طريقة غوص صايدل التكرارية لحساب التراكيز الأولية للجسيمات الحادية والأيونات)

قمنا برسم منحنيات تقارب تراكيز الجسيمات الحادية والأيونات باستخدام العمليات التكرارية 980، 500، 150، 100، 50، 1 وكانت النتائج كما هي موضحة في الأشكال (19.3) و(20.3) و(21.3)

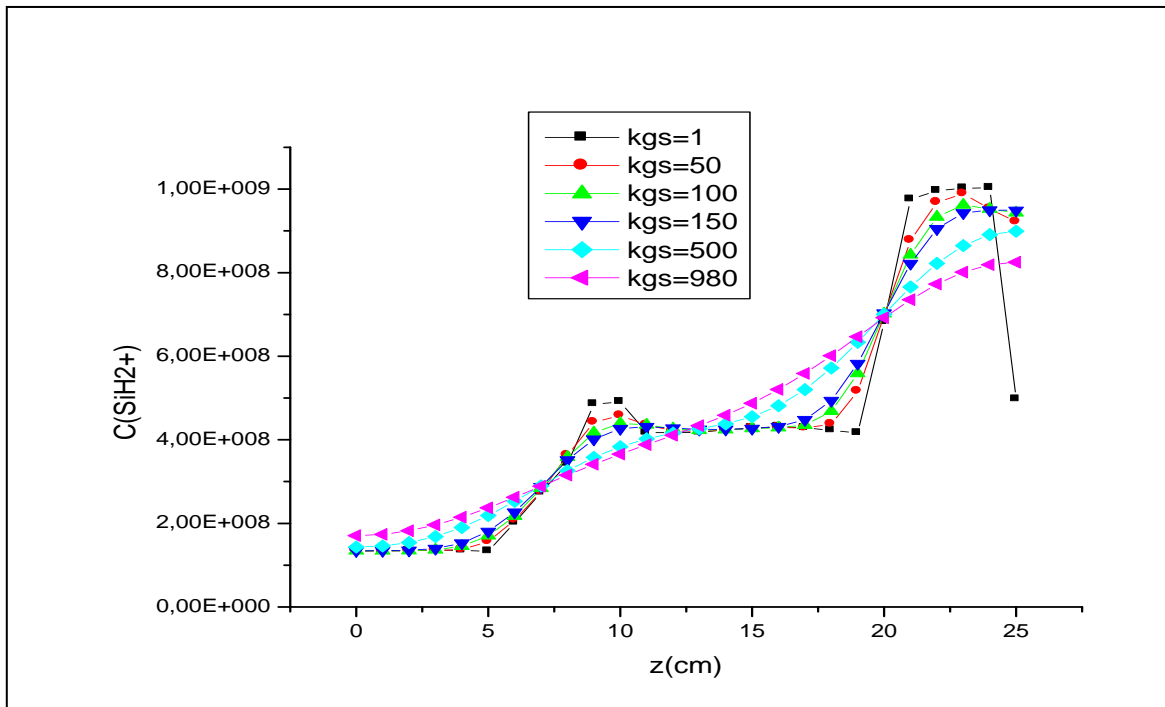
بإمكاننا ملاحظة ان المنحنيات تقترب من بعضها البعض كلما زادت عدد العمليات التكرارية الى غاية انطباقها على بعضها عند 980 تكرار.



الشكل (19.3): منحنى تقارب تركيز الجذر SiH_3



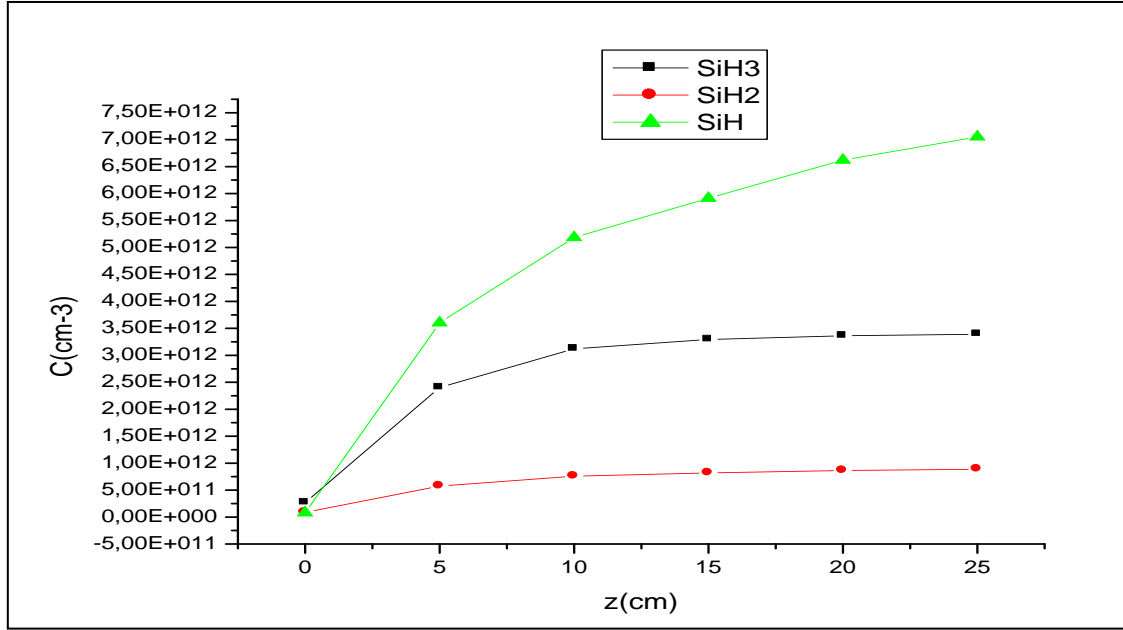
الشكل (20.3): منحنى تقارب تركيز الجذر O



الشكل (21.3): منحنى تقارب تركيز الأيون SiH_2^+

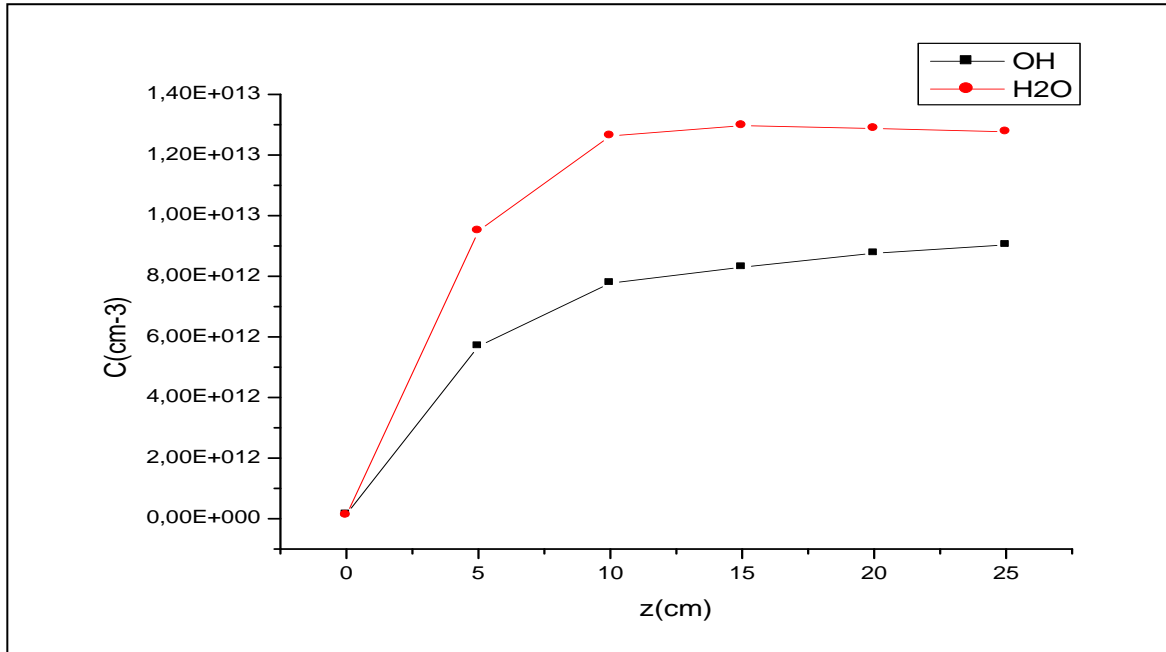
8.III. تراكيز بعض الجسيمات المحايدة والأيونات:

قمنا برسم منحنيات تغير تراكيز بعض الجسيمات المحايدة والأيونات بدلالة البعد z الأشكال (22.3)، (23.3)، (24.3)، (25.3) توضح ذلك:

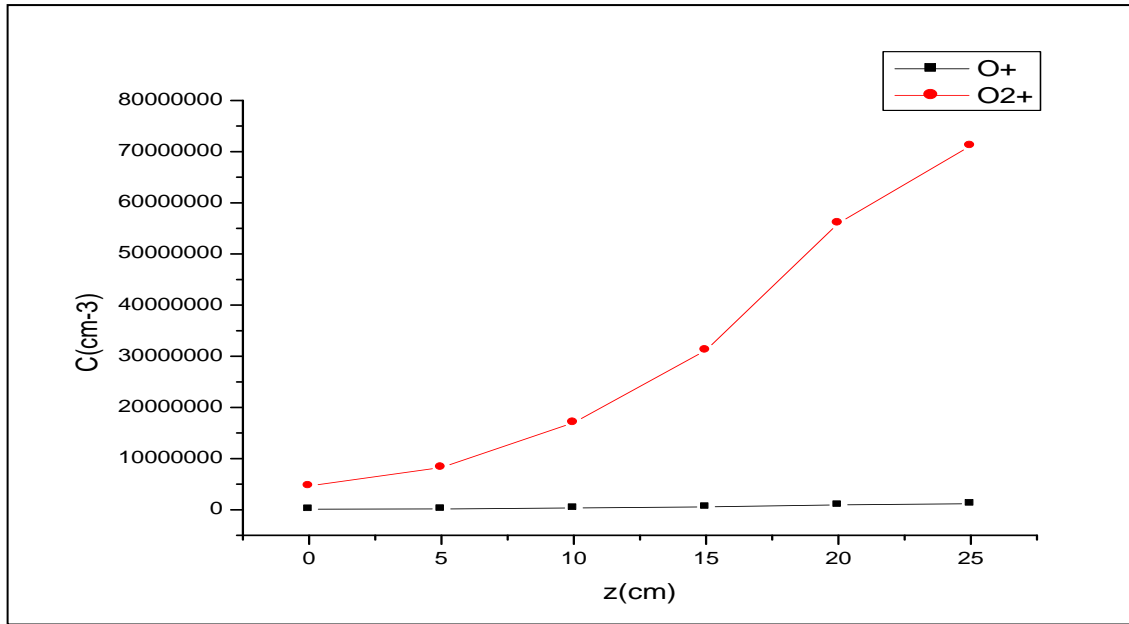


الشكل (22.3): منحنى تغيرات تركيز الجسيمات SiH_3 و SiH_2 و SiH بدلالة البعد

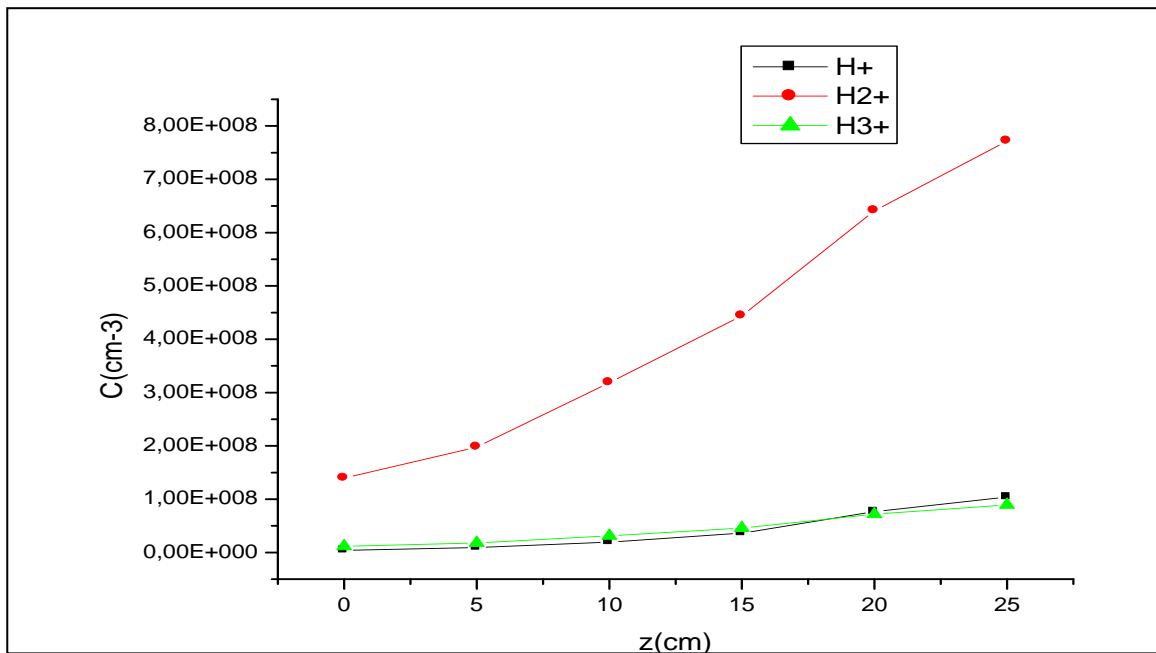
z



الشكل (23.3): منحنى تغيرات تركيز الجذور H_2O و OH بدلالة البعد z



الشكل(24.3): منحنى تغيرات تركيز الأيونات O⁺ و O₂⁺ بدلالة البعد z



الشكل(25.3): منحنى تغيرات تركيز الجذور H⁺ و H₂⁺ و H₃⁺ بدلالة البعد z

1.8.III. مقارنة نتائج الطريقة الثانية مع نتائج صاحب التجربة :

قمنا بمقارنة تراكيز بعض الجسيمات الحيادية والأيونات المتحصل عليها مع نتائج (A . Bogaerts and S .Tinck [1]، القيم المستخدمة في المقارنة مقروءة من منتصف المفاعل.

يوضح الجدول (2.3) مقارنة لتراكيز بعض الجسيمات الحيادية والأيونات مع

S .Tinck and A . Bogaerts(2012)

الجدول (2.3): مقارنة لتراكيز بعض الجسيمات الحيادية والأيونات مع S .Tinck and A . Bogaerts(2012)

تراكيز T and B (cm^{-3})	التركيز المتحصل عليه (cm^{-3})	منحنى الجذر
2.1×10^{12}	3.2×10^{12}	SiH ₃
9×10^{12}	5.5×10^{12}	SiH ₂
2×10^{11}	4.58×10^{10}	SiO ₂
6.8×10^{12}	1.56×10^{13}	SiH ₃ O
10^{13}	8.13×10^{12}	OH
1.4×10^{13}	2.88×10^{11}	H ₂
2.5×10^{12}	1.05×10^{12}	SiO
3×10^{10}	3.6×10^{10}	SiH ₃ ⁺
3.1×10^9	1.34×10^9	SiH ⁺
1.7×10^8	3.77×10^8	H ₂ ⁺
2×10^{10}	2.29×10^7	O ₂ ⁺

✓ بعد مقارنة مختلف تراكيز الجسيمات الحيادية والأيونات في منتصف المفاعل مع نتائج (A . Bogaerts and S .Tinck [1] لاحظنا وجود تقارب جيد في نتائج بعض العناصر، وتقارب نسبي في نتائج عناصر أخرى.

9.III. مقارنة النتائج بين الطريقتين :

قمنا بمقارنة النتائج المتحصل عليها من طريقتي الادخال للطول الأولية للتركيز مع نتائج (2012) S .Tinck and A . Bogaerts [1] لبعض الجسيمات الحياضية والأيونات

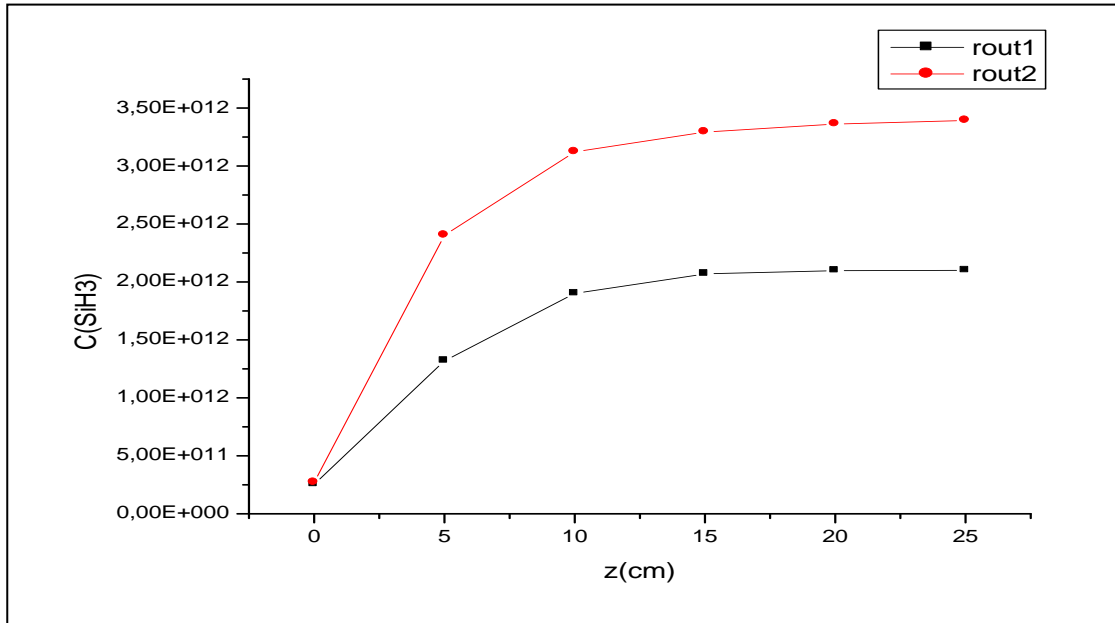
يوضح الجدول (3.3) مقارنة النتائج المتحصل عليها من الطريقتين مع نتائج S .Tinck and A . Bogaerts(2012)

الجدول (3.3): مقارنة النتائج المتحصل عليها من الطريقتين مع نتائج صاحب التجربة.

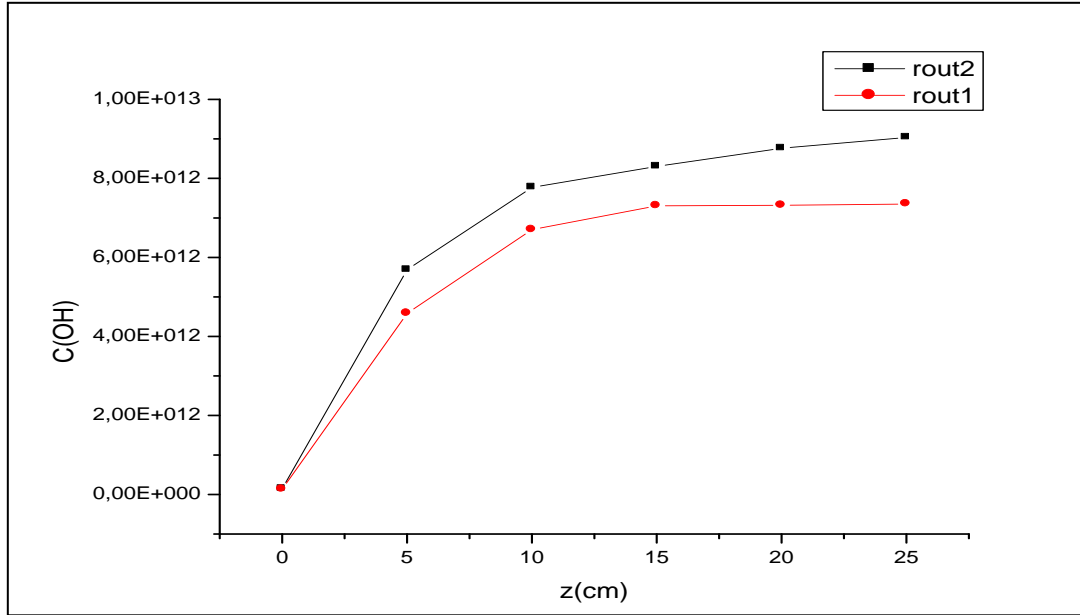
تراكيز الطريقة الثانية (cm^{-3})	تراكيز T and (cm^{-3})B	تراكيز الطريقة الأولى (cm^{-3})	منحنى الجذر
3.2×10^{12}	2.1×10^{12}	2.01×10^{12}	SiH ₃
5.5×10^{12}	9×10^{12}	8.6×10^{12}	SiH ₂
4.58×10^{10}	2×10^{11}	1.91×10^{11}	SiO ₂
1.56×10^{13}	6.8×10^{12}	6.52×10^{12}	SiH ₃ O
8.13×10^{12}	10^{13}	7.1×10^{12}	OH
7.9×10^{11}	1.4×10^{13}	1.3×10^{13}	H
1.05×10^{12}	2.5×10^{12}	2.4×10^{12}	SiO
3.6×10^{10}	3×10^{10}	2.99×10^{10}	SiH ₃ ⁺
1.34×10^9	3.1×10^9	3.09×10^9	SiH ⁺
3.77×10^8	1.7×10^8	1.69×10^8	H ₂ ⁺
2.29×10^7	2×10^{10}	1.99×10^{10}	O ₂ ⁺

بعد القيام بمقارنة النتيجتين المتحصل عليهما لمختلف الجسيمات والأيونات في منتصف المفاعل مع نتائج (2012) S .Tinck and A . Bogaerts [1]. لاحظنا ان قيم طريقة الإدخال الأولى أقرب الى صاحب التجربة من طريقة الإدخال الثانية. لكن بعد مقارنة معمقة لكيفية تغير التراكيز في عدة مناطق في المفاعل وخاصة على مستوى السطح العلوي والسفلي له، لاحظنا ان تراكيز العناصر تكون شبه ثابتة في النصف العلوي ثم تبدأ بالتغير شيئاً فشيئاً في النصف السفلي من المفاعل وهذا التغير نلاحظه كنتيجة لطريقة الإدخال الأولى بينما في الطريقة الثانية للإدخال يكون التغير في التراكيز من نقطة الى اخرى صغير ولكن محسوس سواء في النصف العلوي او السفلي للمفاعل.

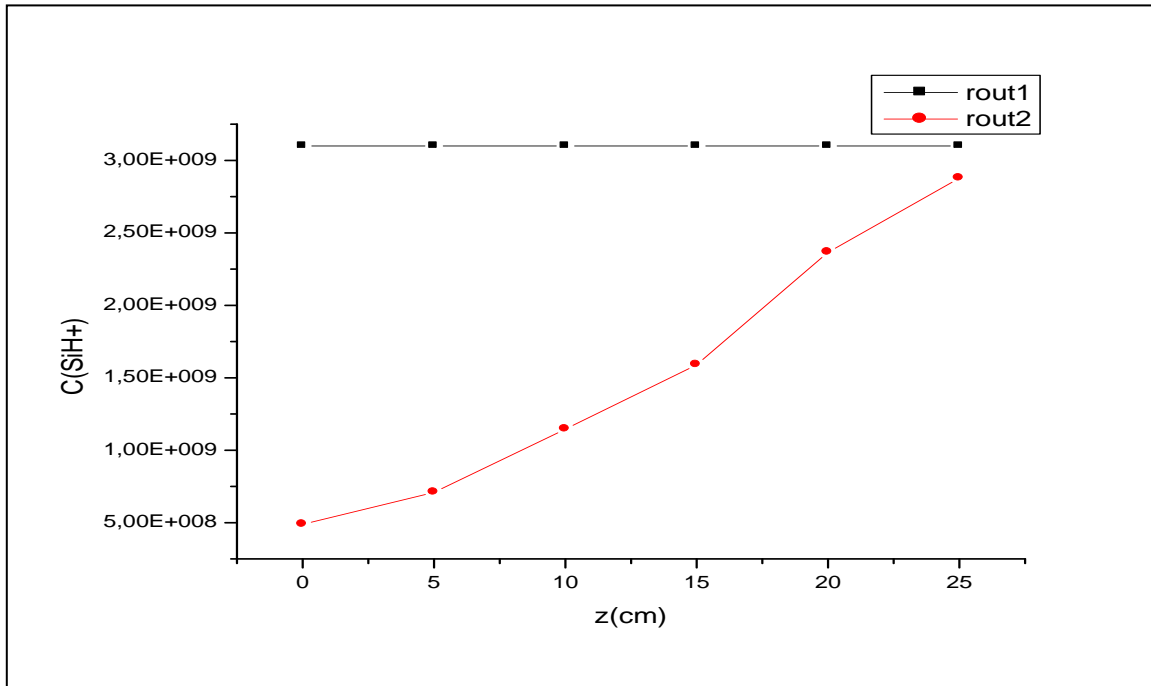
لتوضيح ذلك بشكل اكبر قمنا برسم تغيرات تراكيز بعض العناصر في الطريقتين الأولى والثانية للعمليات التكرارية 1863 و 980 على التوالي الأشكال (26.3) و(27.3) و(28.3) تبين ذلك.



الشكل(26.3): منحنى تغيرات تركيز الجذر SiH_3 في طريقتي الإدخال 1 و 2 بدلالة البعد z



الشكل(27.3): منحنى تغيرات تركيز الجذر OH في طريقتي الادخال 1 و 2 بدلالة البعد z



الشكل(28.3): منحنى تغيرات تركيز الجذر SiH+ في طريقتي الادخال 1 و 2 بدلالة البعد z

10.III. نسبة تراكيز بعض الجسيمات الحياضية والأيونات من التركيز الابتدائي :

قمنا بحساب نسبة تراكيز بعض الجسيمات الحياضية والأيونات من التركيز الابتدائي في مناطق مختلفة في المفاعل من خلال العلاقة التالية :

$$R = \frac{C_{iz}^k}{C_0} \quad (\text{III.1})$$

يوضح الجدول (4.3) نسبة تراكيز بعض الجسيمات الحياضية والأيونات من التركيز الابتدائي في مناطق مختلفة في المفاعل.

الجدول (4.3): نسبة تراكيز بعض الجسيمات الحياضية والأيونات من التركيز الابتدائي الكلي في مناطق مختلفة في المفاعل.

العناصر	مناطق المفاعل	بجوار السطح العلوي	وسط المفاعل	بجوار السطح السفلي
SiH ₃	1.2%	1.15%	0.09%	
SiH ₂	2.5%	1.98%	0.028%	
SiH	0.2%	0.1%	0.0086%	
H	0.3%	0.28%	0.031%	
O	1.3%	1.1%	0.02%	
OH	3.2%	2.8%	0.052%	
SiH ₃ ⁺	0.014%	0.029%	0.013%	
SiH ₂ ⁺	0.00029%	0.00014%	0.00006%	
O ⁺	4.22× 10 ⁻⁷ %	1.5× 10 ⁻⁷ %	3.6× 10 ⁻⁸ %	

11.III. تطبيقات النتائج :

✓ حساب الضغط الجزئي بجوار الركييزة

أول تطبيق استخدمنا فيه النتائج المتحصل عليها هو حساب الضغط الجزئي لكل جسيم حيادي وأيون بجوار الركييزة بحيث استخدمنا العلاقة التالية :

$$P_k(z) = C_k(z) \cdot R \cdot T_{gaz}(z) \quad (III.2)$$

بعد ذلك قمنا بحساب الضغط الكلي بجوار الركييزة وذلك من خلال العلاقة التالية :

$$P_{tot}(z) = \sum P_k(z) = P_1(z) + P_2(z) + \dots + P_{28}(z) \quad (III.3)$$

يوضح الجدول (5.3) الضغط بجوار الركييزة باستخدام التراكيز المتحصل عليها من الطريقتين.

الجدول (5.3): الضغط بجوار الركييزة باستخدام التراكيز المتحصل عليها من الطريقتين

نتائج الطرق الضغط بجوار الركييزة	باستعمال نتائج الطريقة الاولى	باستعمال نتائج الطريقة الثانية
بوحددة (pa)	0.0261	1.32
نسبته من الضغط الابتدائي	1.95%	99%

✓ حساب نسبة توضع الطبقة الرقيقة من SiO₂

باستغلال الضغط الكلي المحسوب بجوار الركييزة وبهدف حساب نسبة توضع طبقة رقيقة من SiO₂ قمنا بالاستعانة بمعادلة Hertz- Knudsen [29] وذلك لحساب تدفق الجسيمات التي تصطدم بالسطح :

$$\varphi = \frac{P}{\sqrt{2\pi \cdot k_B \cdot m_k \cdot T}} \quad (III.4)$$

p: الضغط عند الركيزة

T: درجة حرارة الركيزة

k_B : ثابت بولتزمان

m_K : كتلة الجزيئة

يوضح الجدول (6.3) تدفق الجسيمات التي تصطدم بالسطح

الجدول(6.3): تدفق الجسيمات التي تصطدم بالسطح

باستعمال نتائج الطريقة الثانية	باستعمال نتائج الطريقة الاولى	الطريقة المعتمدة
		تدفق الجسيمات
1.82×10^{-3}	3.61×10^{-5}	بوحددة $\text{mol}^2/\text{g. m}^3$

الخلاصة العامة والآفاق

الخلاصة العامة والآفاق

على الرغم من أن تقنية الأغشية الرقيقة معروفة منذ قرن إلا أنها لم تدخل حيز التطبيق العلمي إلا منذ أربعة عقود مضت حيث أن اهتمام العلماء بتقنية الأغشية الرقيقة أتاح فرص تطورها بشكل كبير.

في مذكرتنا هذه قمنا بدراسة خليط الغاز (SiH_4/O_2) في البلازما المقترنة بالحث (ICP) تم تغذيته بواسطة مصدر توتر ترددات الراديو (RF) قيمته 13.56 M HZ في المفاعل.

اقترحنا النسب الأولية للخليط 54% من SiH_4 و 46% من O_2 ، كذلك قمنا باختبار 82 تفاعل كيميائي بين الجسيمات الحيدرية والأيونات. اعتمدنا على نفس المعطيات الخاصة بـ (S. Tinck and A. Bogaerts (2012) لكل من ($T_{\text{gaz}}=380 \text{ K}$, $T_e=4 \text{ eV}$, $P_{\text{gaz}}=10 \text{ mTorr}$)

تم اختيار عدد الجسيمات الحيدرية 19 بين جزيء وجذر وهي: SiH_3 , H , SiH_2 , SiH , H_2 , O , OH , H_2O , SiH_3O , SiH_2O , SiHO , SiO , SiO_2 , Si_2H_5 , Si_2H_3 , Si_2H_4 , Si_2H_6 , SiH_4 , O_2

أما عدد الأيونات فهو 9 : SiH_3^+ , SiH_2^+ , SiH^+ , H^+ , H_2^+ , H_3^+ , O^+ , O_2^+ , SiO_2^+

من أجل حساب التراكيز لمختلف الجسيمات الحيدرية والأيونات عملنا على حل معادلة الاستمرارية لبعده واحد z لمفاعل أسطواني في نظام مستقر، أما بالنسبة للنمذجة العددية قمنا بتطبيق طريقة الفروق المنتهية وخوارزمية غوص صايدل التكرارية، بحيث ركزنا بشكل أساسي على معالجة الشروط الحدية والحلول الأولية. الفصل الثاني للمذكرة يوضح ذلك مع مخطط البرنامج العددي.

في الفصل الثالث قمنا بعرض مختلف النتائج للنمذجة العددية المستخدمة لحساب تراكيز الجسيمات الحيدرية والأيونات لخليط الغاز (SiH_4/O_2)، كما قمنا بدراسة تقارب الدوال حسب قيم غوص صايدل التكرارية، لاحظنا تقارب المنحنيات من بعضها البعض الى غاية انطباقها من اجل 1863 عملية تكرارية وذلك كنتيجة للطريقة الاولى لإدخال الحلول الأولية للتراكيز (القراءة المباشرة من المنحنى). أما بالنسبة للطريقة الثانية (استخدام طريقة غوص صايدل التكرارية لحساب التراكيز

الأولية) لاحظنا انه بزيادة عدد العمليات التكرارية يزداد تقارب المنحنيات من بعضها البعض الى غاية انطباقها عند 980 عملية تكرارية.

قمنا بمقارنة قيم التراكيز لمختلف الجسيمات والأيونات مع قيم A. Bogaerts (2012) و S. Tinck and (2012) وكانت النتائج جد متقاربة ، ثم قمنا بالمقارنة مع نتائج [2] A. Bahaz (2021) ، ن. رحيم و ش. طاجين (2022) [3]

بالرغم من كل ما تطرقنا له في هذا العمل لدراسة البلازما المقترنة بالحث ICP إلا أن الاقتراحات تبقى مفتوحة لمجال البحث حيث يمكن:

- ✓ القيام بنفس الدراسة ولكن في نظام ذو بعدين z و r او في نظام مستقل أو غير مستقل عن الزمن؛
- ✓ دراسة شاملة للجسيمات الحيدية والأيونات و الإلكترونات؛
- ✓ دراسة خليط غازي اخر في مفاعل مختلف؛
- ✓ دراسة مجهرية على مستوى مدخل و مخرج المفاعل؛
- ✓ استعمال لغة برمجة مخالفة مثل Python, Matlab لدراسة هذه الظاهرة او ظاهرة مختلفة.

قائمة المراجع

قائمة المراجع

- [1] S. Tinck and A. Bogaerts; "Modeling (SiH₄/O₂/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 (SiH₄/O₂) gas mixture in Inductively Coupled Plasma (ICP)"; Mémoire de Master, Université de Ouargla, Juin 2021.
- [3] ن. رحيم، ش. طاجين، "حساب تراكيز الجسيمات المحايدة والأيونات لخليط الغاز SiH₄/O₂ في البلازما المقترنة بالحث (ICP)", جامعة قاصدي مرباح ورقلة، جوان 2022.
- [4] J. L. Delcroix and A. Bers; "Physique des Plasmas"; Ed. CNRS, Paris, 1994.
- [5] G. Fischer; "Reactive ion etching of crystalline silicon plasma nanotexturing of Silicon for photovoltaic applications: Tailoring plasmasurface interactions for improved light management plasma physics; Thèse de doctorat; Université Paris Saclay, 2018.
- [6] O. Babahani; "Contribution à l'étude des Plasmas lors de déposition sur couches minces par procédés CVD"; Mémoire de Magister, Université Kasdi Merbah Ouargla, 2004.
- [7] F. Bouanaka; "Contribution à la Modélisation des Plasmas de Dépôt Basse Pression"; Thèse de doctorat, Université Constantine 1, 2013.
- [8] R. Fitzpatrick; "Introduction To plasma physics "; The Institute For Fusion studies; The University of Texas At Astin, 1998.
- [9] S. Ichimgru; "Basic principles of plasma physics "; w. A. Benjamin INC, 1973.

[10] ز. بلة، " نمذجة لخصائص كهربائية، موضعية وزمنية، لبلازما الارغون والحساب العددي لمسبار لانجمير داخل جهاز رش مهبطي مغنطروني مغدى بنظام RF "، رسالة دكتوراه، جوان 2020.

[11] F. J. Yusta, M. L. Hitchman and S. H. Shamlan; "CVD preparation and characterization of tin dioxide films for electrochemical applications"; J. Mater. Chem., Vol. 7, p1421, 1997 .

[12] Y.mei Jiang; Pulvérisation cathodique assistée par ordinateur; Doctorat en Science, Université de Paris Xi d'Orsay (1992).

[13] Y. Benzahi; Simulation numérique par la dynamique moléculaire de l'interaction de plasma- surface lors de déposition sur couches minces; Mémoire de magister, Université de Ouargla (2003).

[14] 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.

[15] س. عبيد؛ "دراسة في ثلاث أبعاد للمقادير الكهربائية في جهاز الرش المهبطي المغنطروني باستعمال طريقة الحجوم المنتهية"؛ مذكرة ماجستير، جامعة قاصدي مرباح ورقلة، 2012.

[16] 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.

[17] T. Okumura; "Inductively Coupled Plasma sources and applications"; Physics Research International, Vol. pages 14, 2010.

[18] ز. بلة "الدراسة التشخيصية بالمحاكاة العددية لمسبار كهربائي ساكن في الرش المهبطي" مذكرة ماجستير، جامعة قاصدي مرباح ورقلة، 2007

[19] A. V. Phelps; "The Diffusion of Charged Particles in Collisional Plasmas: Free and Ambipolar Diffusion at Low and Moderate Pressures", J. Res. Natl. Inst. Stand. Technol, Vol. 95, N° 407, pp: 407-431, 1990.

[20] P. Dimitris. Lymberopoulos and D. J. Economou; " Two-Dimensional Self-Consistent Radio Frequency Plasma Simulations Relevant to the Gaseous Electronics Conference RF Reference Cell " ; J. Res. Natl. Inst. Stand. Technol. Vol.100, 473.(1995)

- [21] E. Gogolidesa; et E. H. Sawin ; “Continuum modeling of radio-frequency glow discharges. I. Theory and results for electropositive and electronegative gases”; J. Appl. Phys, Vol. **72** (9); 3988-4000.(1992)
- [22] 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.
- [23] G. J. Nienhuisa and W. J. Goedheer; "A self-consistent fluid model for radio-f requency discharges in SiH₄–H₂ compared to experiments"; Journal of applied physics, Vol. **82**, no. 5, pp 2060-2071, 1997.
- [24] 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.
- [25] W. Z. Jia, R. Q. Liu, X. F. Wang, X. M. Liu, Y. H. Song and Y. N. Wang; ”Two-dimensional fluid simulation of a radio frequency capacitively coupled plasma in SiH₄/N₂/O₂”; Physics of Plasmas, Vol. **25**, No. 9, pp: 093501-1-093501-17, 2003.
- [26] H. ElWelly, H. Abdel Mohsen and F. ElTokhi; “Numerical study of particles generation and flow in SiH₄/H₂ discharge”; The Egyptian Int. J. of Eng. Sci. and Technology, Vol. **16**, N° 1, pp 92-93, 2013.
- [27] D. Herrebout, A. Bogaerts, M. Yan and R. Gijbels; “Onedimensional fluid model for an RF methane plasma of interest in deposition of diamond-like carbon layers”; Journal of Applied Physics"; Vol. **90**, pp 570-578 2001.
- [28] 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.
- [29] Kolasinski KW (ed) (2012) Surface science: foundations of catalysis and nanoscience. Wiley, USA.

ملخص: تهتم دراستنا على حساب تراكيز الجسيمات الحيدرية والأيونات لخليط الغاز SiH_4/O_2 المستعمل في توضع الطبقات الرقيقة للبلازما المقترنة بالحث (ICP) وذلك بمعالجة الشروط الحدية والحلول الأولية، قمنا بالاعتماد على المعطيات الخاصة بأعمال (S. Tinck and A. Bogaerts (2012)) لكل من (T_e, T_{gaz}, n_e) . إختارنا في عملنا على 19 جسيم حيدري و 9 أيونات و 82 تفاعل كيميائي داخل المفاعل. قمنا أيضا بإنجاز برنامج عددي بلغة Fortran لحساب معامل الانتشار ومعامل الحركة والتراكيز لكل من الجسيمات الحيدرية والأيونات. يعتمد برنامجنا على نموذج الموائع (معادلة الاستمرارية) وطريقة الفروق المنتهية وخوارزمية غوص-صايدل التكرارية. حصلنا على تراكيز مختلف العناصر والتي كانت متوافقة مع نتائج S. Tinck and A. Bogaerts (2012)

الكلمات المفتاحية: SiH_4/O_2 ، ICP، تراكيز، معامل الانتشار، معامل الحركة، ثوابت التفاعلات الكيميائية، نموذج الموائع، طريقة الفروق المنتهية، خوارزمية غوص-صايدل.

Résumé : Notre étude s'intéresse au calcul des concentrations de particules neutres et d'ions pour le mélange gazeux SiH_4/O_2 utilisé dans le dépôt de couches minces par Plasma à Couplage Inductif (ICP) en traitant les conditions aux limites et les solutions initiales. Nous nous sommes appuyés sur les données du travail de S. Tink et A. Bogaerts (T_e, T_{gaz}, n_e). Dans notre travail, nous avons choisi 19 particules neutres, 9 ions et 82 réactions chimiques à l'intérieur du réacteur. Nous avons également élaboré un programme numérique en langage Fortran pour calculer le coefficient de diffusion, le mobilité et les concentrations pour chacune des particules neutres et ions. Notre programme est basé sur le modèle fluide (équation de continuité) la méthode des différences finies et l'algorithme itératif de Gauss-Seidel. Nous avons obtenu les différentes concentrations des molécules ; elles sont en bon accord avec les résultats de S. Tinck and A. Bogaerts.

Mots clés : SiH_4/O_2 , ICP, Concentrations, Coefficients de Diffusion, coefficients de mobilité, Constantes de réaction, modèle fluide, Méthode des Différences Finies, Algorithme de Gauss-Seidel.

Abstract: Our study is based on calculating the concentrations of neutral particles and ions for the SiH_4/O_2 gas mixture used in the deposition of thin layers by Inductively Coupled Plasma (ICP) by treating the boundary conditions and initial solutions. We relied on data on S. Tink and A. Bogaerts work for each of (T_e, T_{gaz}, n_e) . In our work, we chosed 19 neutral particles, 9 ions and 82 chemical reactions inside the reactor. We also elaborated a numerical program in Fortran language to calculate the diffusion coefficient, kinetic coefficient, and concentrations for each of the neutral particles and ions. Our program is based on the fluid model (continuity equation) finite difference method and Gauss-Seidel iterative algorithm. We obtained different concentrations of particles which correspond with the results of S. Tinck and A. Bogaerts.

Key words: SiH_4/O_2 , ICP, Concentrations, Diffusion Coefficient, mobility coefficient, rate constants, Fluid model, Finite differences method, iterative algorithm of Gauss-Seidel.