

N° d'ordre :

N° de Série :

UNIVERSITE KASDI MERBAH OURGLA
FACULTE DES MATHIMATIQUES ET SCIENCES DE LA MATIERE
Département de Physique



Mémoire de Master Académique

Domaine : Science de la Matière

Filière : Physique

**Spécialité : Physique de Rayonnement et Spectroscopie et
Optoélectronique**

Présenté par : ABIA Amel

Thème :

***Simulation par la méthode de Monte Carlo
des collisions des particules
dans un pulvérisateur cathodique en régime DC***

Soutenu publiquement

Le : 02 / 06 / 2016

Devant le jury composé de :

Pr AIADI Kamel Eddine	Prof, UKM Ouargla	Président
Mr BENZHI Youcef	MAA, UKM Ouargla	Examineur
Mme BELLAH Zakia	MAA, UKM Ouargla	Examineur
Pr KHELFAOUI Fethi	Prof, UKM Ouargla	Rapporteur

Année Universitaire : 2015/2016

Dédicaces

Je dédie ce travail

A ma chère mère

A la mémoire de mon cher père

A la mémoire de mon cher frère

A la mémoire de ma chère sœur

*Et à toute personne qui m'est chère et qui m'a soutenu
durant la réalisation de ce mémoire.*

REMERCIEMENTS

Tout d'abord je tiens à remercier Dieu le tout puissant, de m'avoir permis d'arriver à ce niveau d'études, et aussi pour m'avoir donné beaucoup de patience et de courage.

J'adresse mes vifs remerciements à mon Encadreur Pr Fethi KHELFAOUI, pour m'avoir constamment guidé tout le long de mon projet et pour les précieux conseils qu'il m'a donnés, et pour sa serviabilité, sa disponibilité et ses conseils constructifs.

Je tiens à remercier, le président de jury Pr Kamel Eddine AYADI et l'examineur Monsieur Youcef BENZAHY; l'examinatrice Mme Zakia BELLAH pour l'honneur qu'ils m'ont fait en acceptant de juger ce travail.

Je remercie également tous les membres du Laboratoire de Rayonnement et Plasmas et Physique des Surfaces (LRPPS), où j'ai accompli ce travail, pour leurs aides et leurs conseils.

J'adresse aussi mes sincères reconnaissances à tous les enseignants de l'Université Kasdi Merbah Ouargla pour leurs aides, soutiens et leurs conseils, sans oublier tout le personnel administratif du département.

Merci à tous les collègues et à tout le personnel du laboratoire pour leur encouragement, en particulier : Nour, Khouloud, Hinda, Randa, Zohra, Zineb et Yasmina, Marwa.

Sommaire

Dédicaces	i
Remerciements	ii
Sommaire	iii
Liste des figures	vi
Liste des tableaux	vii
<u>INTRODUCTION GENERALE</u>	1
<u>CHAPITRE I: GENERALITES SUR LES INTERACTIONS PLASMA-SURFACE LORS DE LA PULVERISATION CATHODIQUE</u>	
I. 1Introduction	2
I.2Types de plasmas	3
I.2.1 Les Plasmas thermiques	3
I.2.2 les plasmas chauds	3
I.2.3 plasmas froids	3
I.3. Paramètres Physiques du Plasma	4
I.3.1 la longueur de Debye	4
I.3.2. Potentiel plasma	4
I.3.3. Densité	4
I.3.4. Fréquence du plasma	4
I.3.5. Degré d'ionisation	5
I.3.6. Libre parcours moyen	6
I.4.Les techniques utilisées pour déposer des couches minces	6
I.4.1. L'épitaxie	6
I.4.2. L'oxydation	7
I.4.3. Les dépôts chimiques en phase vapeur (CVD)	7
I.4.4. Les dépôts physiques en phase vapeur (PVD)	7
I.4.4.1 Méthodes d'évaporation	8
I.4.4.2 Méthodes de pulvérisation	8
I.4.4.2.1. Principe de la pulvérisation cathodique	8
I.4.4.3 Les choix des pulvérisations	10
I.4.4.3.1. Pulvérisation cathodique procédé diode DC	10
I.4.4.3.2. Pulvérisation cathodique procédé diode RF	10

I.4.4.3.3. Pulvérisateur magnétron	10
I.5. La théorie des collisions	11
I.5.1. Plasmas collisionnes	12
I.5.2 Les collisions dans un plasma froid	12
I.5.3 Les collisions élastiques	12
I.5.4 Les collisions inélastiques	13
I.5.5. Fréquence de collisions binaires dans les plasmas	13
I.6. Le Potentiel d'interaction entre les particules neutres et une surface	14
I.7. Groupes de potentiels d'interaction	15
I.7.1. Potentiels coulombiens écrantés	15
I.7.2. Exemples de potentiels écrantés	15

Chapitre II :Modélisation et Simulation numérique de Monte Carlo

II.1.Introduction	19
II.2. La simulation par la méthode de Monte Carlo	19
II.2.1. Avantages des techniques de simulation Monte Carlo	19
II.2.2. Méthode de simulation de Monte Carlo	20
II.3. Description de chambre de pulvérisation	20
II.3.1. La cible	20
II.3.2.Le plasma	21
II.4. Phénomène Physique	21
II.5. Modélisation Mathématique	21
II.5.1. Potentiel et champ électriques dans le réacteur	22
II.5.2. Liber parcours moyen	23
II.5.3. Potentiel d'interaction	24
II.5.4. Energie transférée lors des collisions	25
II.6. Principe du modèle de simulation de Monte Carlo	25
II.7. Programme par simulation de Monte Carlo l'interaction (plasma-surface)	26
II.8. Correction du facteur de Boltzmann	28
II.9. Organigramme pour le calcul des collisions 29

CHAPITRE III : RESULTATS ET DISCUSSION

III.1. Introduction	31
III.2. Distribution des vitesses pour la première phase de la simulation au niveau de h_1 :	31

III.2.1 Distribution des vitesses des ions d'argon au niveau de h_1 avant collision	31
III.2.1.1 Effet du potentiel appliqué ΔV	32
III.2.1.2 Effet du facteur de transfert f d'énergie cinétique	33
III.2.1.3. Effet de la variation de la forme du potentiel électrique	34
III.3. Distribution des vitesses des ions d'argon au niveau de h_1 après collisions	35
III.3.1 Effet du potentiel appliqué ΔV	35
III.3.2 Effet du facteur de transfert f d'énergie cinétique	36
III.3.3. Effet de la variation de la forme du potentiel électrique	37
III.4 Distribution de vitesse pour la deuxième phase de la simulation (entre h_1 et h_0)	38
III.4.1. Distribution de vitesse des ions d'argon au niveau de la surface (effet du potentiel d'interaction des ions avec la surface)	39
III.4.2. Effet de la variation de la forme du potentiel électrique	40
III.5. Simulation de la troisième phase : Interaction avec la surface	41
III.5.1. Distribution des vitesses des atomes de silicium éjectés	41
III.6. Rendement de pulvérisation	42
III.7. Correction du facteur de Boltzmann	43
<u>CONCLUSION GENERALE ET PERSPECTIVES</u>	45
<u>REFERENCES</u>	46
Résumé	

Liste des figures

Chapitre I : Généralités sur les interactions plasma-surface lors de la pulvérisation cathodique

Figure I.1. Répartition des plasmas en fonction de leur densité électronique n_e et de leur température électronique T_e	2
Figure. I.2. Techniques utilisées pour déposer des couches minces	7
Figure. I.3. Mécanisme de pulvérisation du matériau cible	9
Figure I.4. : Schéma du principe de la pulvérisation cathodique	9
Figure I.5. Représentation d'une décharge Radiofréquence avec couplage capacitif	10
Figure I.6. Schéma du principe de la pulvérisation magnétron	11
Figure. I.7.: Allure du potentiel	15

Chapitre II : Modélisation et Simulation numérique de Monte Carlo

Figure II.1 : Réseau de Structure cristalline 1X2	20
Figure. II.2 : Distribution de potentiel dans une décharge DC de l'argon	22
Figure. II.3 .Distribution de potentiel dans une décharge DC	23
Figure. II.4. Forme Gaussienne pour le choix des parcours aléatoires des ions	24
Figure. II.5. Potentiel Firsov- Molière	25
Figure. II.6. La cellule de simulation	26
Figure II.7: Organigramme pour le calcul des collisions du méthode monte Carlo	29

Chapitre III : Résultats et discussion

Figure III.1. : Distribution de vitesse F en fonction de w_i pour $\Delta V = 1500$ Volt	32
Figure III.2. : Variation des distributions de vitesse pour différentes valeurs du potentiel appliqué	32
Figure III.3. : Distribution de vitesse F en fonction de w_i pour $f=0.8$ et $f=0.5$	33
Figure III.4. : Distribution de vitesse F en fonction de $w_i=(v_i/v_0)$.	34
Figure III.5. : Distribution de vitesse F en fonction de $w_{i1}=(v_{trans}/v_0)$ pour $\Delta V=1500$ Volt	35
Figure III.6. : Distribution de vitesse F en fonction de $w_{i1}=(v_i/v_0)$ pour $\Delta V=500; 1000 ; 1500$ Volt	36
Figure III.7. : Distribution de vitesse F en fonction de $w_{i1}=(v_{trans}/v_0)$ pour $f=0.8$.et $f=0.5$	37
Figure III.8 Distribution de vitesse F on fonction $w_{i1}=(v_{trans}/v_0)$ pour différentes valeurs de h_2	38
Figure III.9. : Distribution de vitesse F en fonction de $w_{i2}=(v_f/v_0)$ pour $\square V=1500$ V	39
Figure. III.10: Variation des distributions de vitesse des ions d'argon suivant les valeurs du potentiel appliquée	39
Figure III.11 : Distributions des vitesses des ions d'argon suivant la forme du potentiel appliqué	40
Figure III.12.: Distribution de vitesse F en fonction de $w_{i3}=(v_{Si}/v_0)$ pour $\square V=1500$ V	41
Figure III.13.: Distribution de vitesse des atomes de silicium éjectés en fonction de $w_{i2}=(v_{Si}/v_0)$ pour différentes valeurs de la tension appliquée	42
Figure. III.14: Variation du nombre d'atome éjectés en fonction de la tension appliquée pour nombre total des ions d'argon incident égal à 10000	43

Liste des tableaux

Tableau III.1. : Vitesses les plus probables et largeurs des fonctions de distributions au niveau de h1 avant collisions	33
Tableau III.2. : Vitesses les plus probables et largeurs des fonctions de distributions au niveau de h1 avant collisions pour différentes valeurs du facteur f	34
Tableau III.3. : Vitesses les plus probables et largeurs des fonctions de distributions au niveau de h1 avant collisions pour différentes valeurs de h2	35
Tableau III.4. : Vitesses les plus probables et largeurs des fonctions de distributions au niveau de h1 après collisions pour trois valeurs du potentiel électrique appliqué	36
Tableau III.5. : Vitesses les plus probables et largeurs des fonctions de distributions au niveau de h1 après collisions	37
Tableau III.6 : Distributions des vitesses F en fonction de $w_1=(v_{trans}/v_0)$ pour différentes valeurs de h2.	38
Tableau III.7. : Vitesses les plus probables et largeurs des fonctions de distributions au niveau de h0	40
Tableau.III.8: Vitesses les plus probables et largeurs des fonctions de distributions suivant la forme du potentiel	41
Tableau III.9: Vitesses les plus probables et largeurs des fonctions de distributions au niveau de h ₀ des 'atomes de silicium	42
Tableau III.10: Variation du rendement de pulvérisateur en fonction de la tension appliquée (le nombre total des ions d'argon incident est 10000)	43



Introduction générale

Introduction générale

Les couches minces ont connu ces dernières décennies un développement remarquable dans plusieurs domaines et particulièrement en industrie électronique, fabrication des cellules solaires, des écrans plats et dans les emballages alimentaires.

Différents procédés se réalisent en dépôts physiques en phase vapeur (PVD), les dépôts par pulvérisation cathodique donnent des couches minces de très bonne qualité. Dans cette technique, un matériau cristallin, constituant la cathode du dispositif (la cible), est bombardé par un faisceau d'ions positifs d'un plasma de gaz rare comme l'argon. Sous l'effet de ce bombardement, des particules sont arrachées du matériau et vont se concentrer sur une plaque anodique, formant une couche mince non cristalline. Le milieu et les conditions de l'expérience sont ceux de plasmas froids.

Les applications industrielles des plasmas froids sont ici encore multiples, essentiellement dans le traitement des matériaux et des surfaces (pour l'amélioration de la dureté, pour la résistance à la corrosion, pour la biocompatibilité, en tribologie, en microélectronique.....).

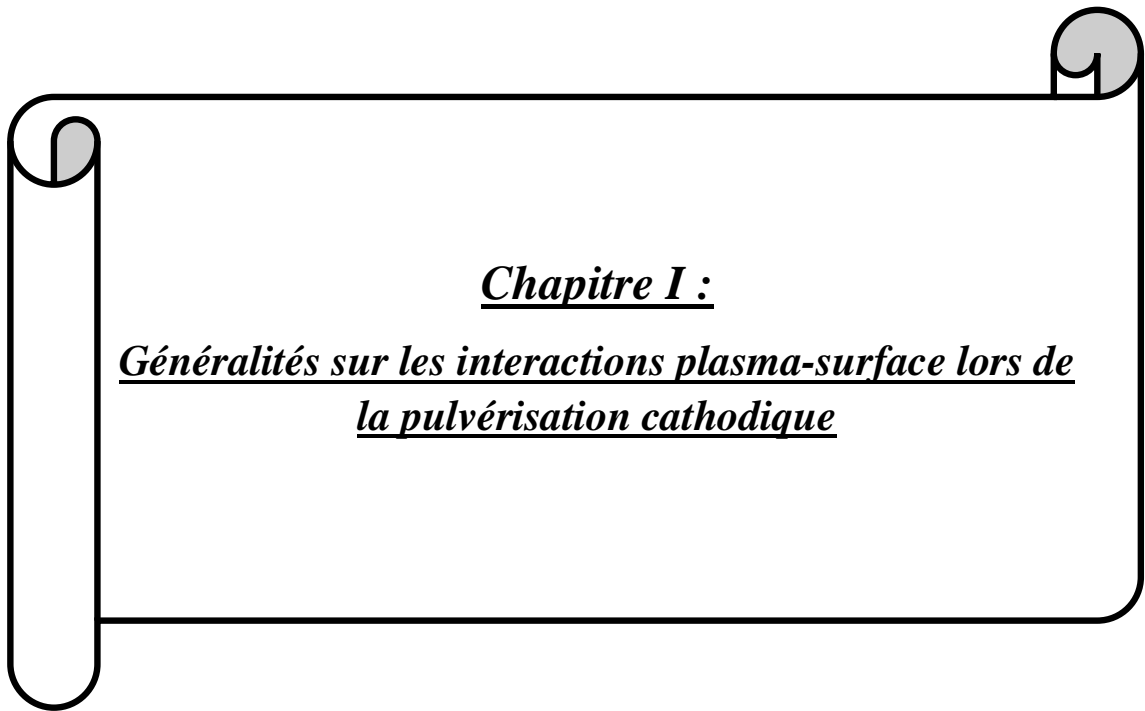
Dans ce contexte, se situe notre sujet. Ceci est une investigation, par simulation numérique, de l'interaction entre des ions d'un plasma froid (Ar^+) et la surface d'une cible en silicium, constituant la cathode, dans la chambre de déposition. La méthode de Monte Carlo semble adéquate pour modéliser le phénomène en question. Elle a l'avantage d'étudier les propriétés physiques stationnaires et non stationnaires. Cette technique peut reproduire, en plus de l'histoire des particules animées, certaines quantités largement exploitées dans le domaine technologique. La plupart de ces quantités, comme les rendements de pulvérisation, sont de nature statistique. La statistique est gagnée par répétition des trajectoires des mobiles. Ces résultats seraient obtenus selon les conditions expérimentales définies dans l'enceinte de pulvérisation [1].

Le premier chapitre de ce mémoire comprend des concepts sur : la génération de plasmas et les dépôts par PVD et CVD, la pulvérisation cathodique, les états de collisions d'un plasma, les potentiels d'interaction.

Le deuxième chapitre a été réservé à la présentation de la technique de simulation numérique pour l'étude du phénomène. Il comporte la formulation du problème, son analyse physique et mathématique et la description de la méthode de modélisation proprement dite. Il s'agit de la méthode de Monte Carlo. Nous nous sommes limités à l'interaction de collisions binaires entre ions incidents et atomes de la cible

En fin le troisième chapitre est consacré à la présentation de nos résultats et les discussions. On présente les propriétés statistiques du système étudié comme les distributions des vitesses. Nous présentons le lien entre les grandeurs statistiques et certaines quantités macroscopiques comme le rendement et le flux des particules pulvérisées.

Des conclusions générales et des perspectives sont présentées à la fin du mémoire.



Chapitre I :

**Généralités sur les interactions plasma-surface lors de
la pulvérisation cathodique**

Chapitre I :
Généralités sur les interactions plasma-surface
Lors de la pulvérisation cathodique

I.1. Introduction

Le plasma est souvent qualifié comme étant le quatrième état de la matière. Il représente dans l'univers 99% de la matière visible (étoiles, nébuleuses). C'est un état gazeux partiellement ou totalement ionisé. Sur terre, on le trouve naturellement sous la forme de flamme ou de foudre. Un milieu plasma peut également être généré artificiellement par l'homme avec à la clé de nombreuses applications énergétiques, médicales ou d'élaboration de matériaux. Les divers types de plasmas sont répartis en fonction de l'énergie et de la densité des électrons les constituants ce qui est illustré en Figure I.1.

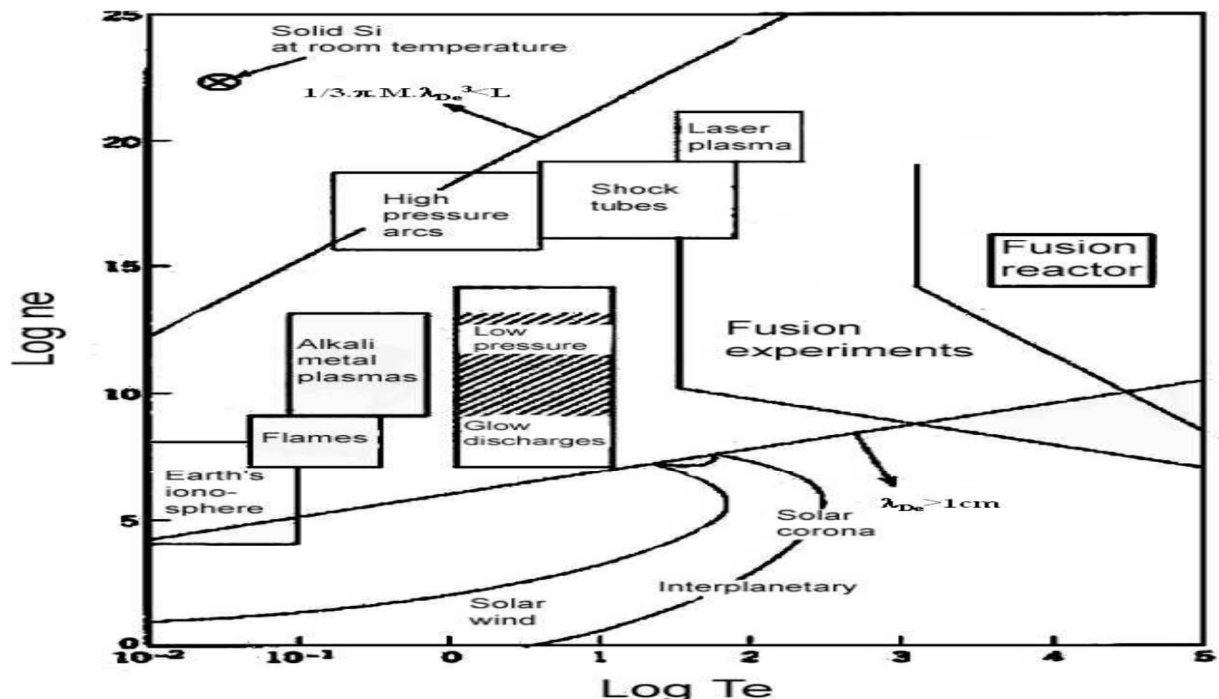


Figure I.1. : Répartition des plasmas en fonction de leur densité électronique N_e et de leur température électronique T_e .

I.2. Types de plasmas

Les plasmas peuvent être répartis suivant trois catégories : les Plasmas thermiques, les plasmas chauds et les plasmas froids.

I.2.1. Les Plasmas thermiques

Les plasmas thermiques peuvent atteindre des températures supérieures à $3 \cdot 10^3 \text{K}$. Dans ce type de plasma, la température des ions, des électrons et des particules neutres est $T \sim 10^4 \text{K}$. Le milieu est ionisé localement (équilibre thermique). Comme exemples, nous citons les arcs électriques et les torches.

I.2.2. Les plasmas chauds

Généralement ces milieux sont à l'équilibre thermodynamique. Ici, les électrons présentent une température identique à celle des ions ; c'est le cas du cœur des étoiles ou des plasmas de fusion obtenus dans les tokamaks (ITER). Ces plasmas sont généralement fortement ionisés.

I.2.3 Plasmas froids

En général ces plasmas constituent un milieu hors équilibre thermodynamique caractérisé par une différence de température conséquente entre les ions du plasma (500 à 1000 K) et les électrons 10^4 à 10^6 K. Dans l'industrie, les plasmas froids sont notamment employés à des fins de traitement de surface. Il est effectivement possible, grâce aux particules énergétiques (ions) ou aux particules neutres réactives, d'induire des modifications de surface afin d'en changer les propriétés comme par exemple modifier la mouillabilité d'un matériau, augmenter sa dureté ou rendre une surface isolante conductrice. A ces fins, de nombreux procédés ont été développés [2].

I.3. Paramètres physiques du plasma

I.3.1. La longueur de Debye

La longueur de Debye est la distance au-delà de laquelle les interactions coulombiennes entre particules chargées deviennent négligeables, ou en d'autres termes celles en dessous de laquelle on observe une séparation de charge significative. Elle s'exprime comme suit :

$$\lambda_D = \sqrt{\frac{\epsilon_0 K T_e}{n_e q^2}} \quad (1)$$

Où ϵ_0 est la permittivité du vide, K_B la constante de Boltzmann, T_e la température électronique, n_e la densité électronique et q la charge de l'électron. Pour un plasma d'Argon de densité électronique $n_e = 10^{10} m^{-3}$ et de température électronique $T_e = 2 eV$, les longueurs de Debye et les épaisseurs de gaines sont respectivement de 10 μm et 110 μm [2].

I.3.2. Potentiel plasma

Le potentiel électrostatique moyen dans le plasma est bien défini, il est à peu près constant dans le volume du plasma dans le cas d'une géométrie plan-plan. On peut le définir à partir de l'énergie nécessaire pour transporter une particule chargée depuis le plasma jusqu'au endroit où le potentiel est nul. D'une manière générale le potentiel plasma est supérieur par rapport aux parois qui l'entourent [3].

I.3.3. Densité

La densité n est définie comme le nombre de particules par unité de volume, et ce pour chaque espèce (électrons, ions, neutres). La neutralité du plasma implique $n_e = n_i$, en supposant que la densité d'ions négatifs est quasiment nulle [4].

I.3.4. Fréquence du plasma

Quand on provoque une perturbation locale dans un plasma, initialement neutre, de sa position d'équilibre en faisant apparaître un excès d'électrons suivant un plan d'une épaisseur infinitésimal, il va y avoir accumulation de charges qui génèrent un champ électrique qui

exercera une force de rappel sur les électrons en excès (revenir vers l'état d'équilibre de neutralité). Ces électrons mis en mouvement effectueront des oscillations autour d'une position d'équilibre moyenne avec une fréquence angulaire ω_{pe} donnée par [5] :

$$\omega_{pe} = \sqrt{\frac{n_{e0} \cdot q_e^2}{m_e \cdot \epsilon_0}} \quad (2)$$

ϵ_0 : Permittivité du vide = $8,8510^{-12}$ F. m^{-1}

m_e : Masse de l'électron.

q_e : Charge de l'électron = $1,6 \cdot 10^{-19}$ C.

n_{e0} : Densité électronique du plasma non perturbé.

La fréquence plasma électronique :

$f_{pe} = \frac{\omega_{pe}}{2\pi}$ En remplaçant ω_{pe} et les constantes par leur valeur en CGS:

$$f_{pe} = 9000 \sqrt{n_{e0}} \quad (2-1)$$

La fréquence plasma ionique:

$$f_{pi} = \frac{\omega_{pi}}{2\pi} \quad (2-2) [6]$$

I.3.5. Degré d'ionisation

Le degré d'ionisation nous permet de classer les plasmas, en plasmas faiblement ionisés (plasmas froids) ou fortement ionisés (plasmas chauds).

$$\alpha = \frac{n_{ei}}{n_{ei} + n_0} \quad (3)$$

n_0 : Densité des neutres.

n_{ei} Densité électronique et densité ionique.

Les plasmas utilisés pour les dépôts par PVD sont faiblement ionisés ($10^{-4} \leq \alpha \leq 10^{-6}$), le nombre de neutres étant très supérieur à celui des espèces chargées (ions, électrons) [7].

I.3.6. Libre parcours moyen

Le libre parcours moyen λ d'une espèce est un paramètre résultant de la théorie cinétique des gaz et exprimant la distance moyenne parcourue par cette espèce entre deux collisions, en considérant une particule immobile par rapport à l'autre et la section efficace indépendante de l'énergie des particules [8] :

$$\lambda_{ij} = \frac{1}{n_j \sigma_{ij}} \quad (4)$$

λ_{ij} : libre parcours moyen parcourue par la particule i entre deux collisions avec les particules j ;
 n_j : densité des particules j ; et σ_{ij} : section efficace de collisions entre des particules i et j.

Si l'on considère le modèle de boule de billard, considérant les particules comme des sphères rigides et les particules cibles comme étant immobiles, la section efficace d'une particule i peut se définir par l'équation suivante:

$$\sigma_{ij} = \pi(r_i + r_j)^2 \quad (4-1)$$

r_i et r_j rayon d'interaction des particules i et j

A partir de l'équation classique des gaz parfaits (approximation communément admise) l'équation, peut s'écrire :

$$\lambda_{ij} = \frac{k_b T_j}{P \pi (r_i + r_j)^2} \quad (5)$$

Où, K_B constante de Boltzmann ($J.K^{-1}$), T_j température des particules j, P pression [9].

I.4. Les techniques utilisées pour déposer des couches minces

Les techniques les plus utilisées pour déposer des couches minces sont : l'épitaxie, l'oxydation, les procédés PVD et les procédés CVD. Certains auteurs présentent ces techniques en deux grandes familles comme il est illustré par la figure I.2.

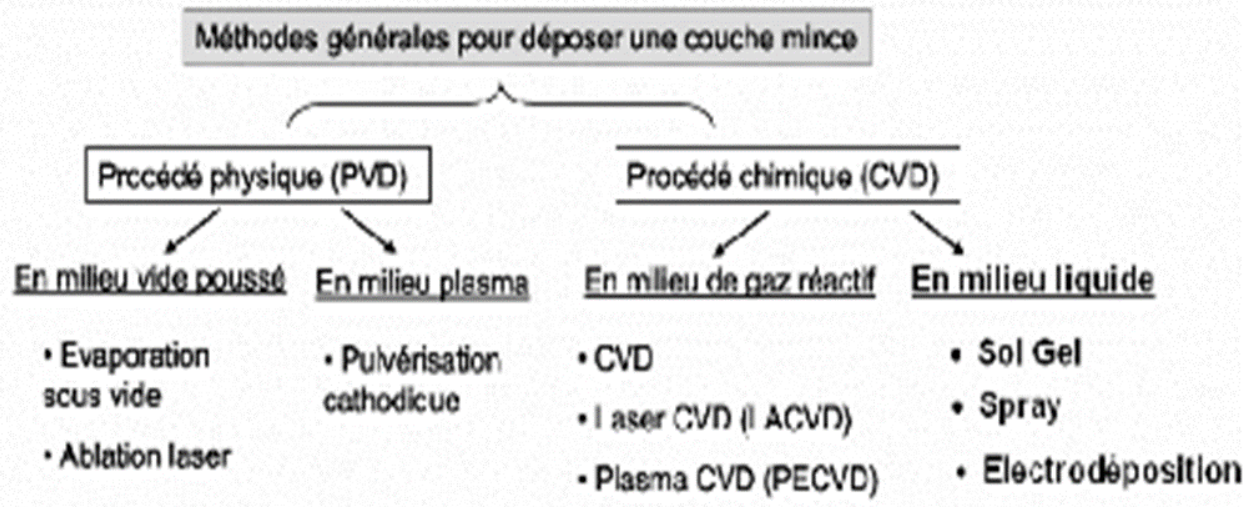


Figure I.2. : Techniques utilisées pour déposer des couches minces [10].

I.4.1. L'épitaxie

L'épitaxie, dépôt par couche atomique ALD (Atomic Layer Deposition) ou ALE (Atomic Layer Epitaxy) est la méthode la plus utilisée pour faire croître une couche cristalline de silicium sur un substrat de silicium, mais possédant un dopage ou une concentration en impureté différente; comme pour former des jonctions P-N dans le substrat. Les épaisseurs des couches épitaxiales varient entre 1 et 20 μm . Le silicium est chauffé à des hautes températures (plus de 800°C). Les vitesses de croissance sont de l'ordre de 0.2 à 1.5 μm par minute. Elles dépendent du gaz source et de la température du four.

I.4.2. L'oxydation

Les oxydes de silicium SiO_2 sont obtenus en faisant passer un flux d'oxygène O_2 à des températures élevées (850 à 1150°C) sur un substrat de silicium.

I.4.3. Les dépôts chimiques en phase vapeur (CVD)

Les dépôts chimiques en phase vapeur ou CVD (Chemical Vapour Deposition) sont des méthodes qui permettent de former des couches minces solides non volatiles sur un substrat, par

des réactions chimiques avec des gaz. Les gaz sont introduits dans un réacteur, ils se décomposent et réagissent à une température pour former le film voulu[11].

I.4.4. Les dépôts physiques en phase vapeur (PVD)

Les dépôts physiques en phase vapeur ou PVD (Physical VaporDeposition) peuvent être obtenus par des méthodes de pulvérisation ou par des méthodes d'évaporation.

I.4.4.1. Méthodes d'évaporation

Ce type de déposition fait appel au chauffage local d'une cible constituée du matériau à évaporer à une température suffisante pour obtenir une vapeur. La vapeur se condense sur le substrat. Le chauffage du matériau à évaporer s'effectue en faisant traverser un courant électrique à travers un filament constitué par le dit matériau.

I.4.4.2. Méthodes de pulvérisation

Dans la déposition de ce type, on considère une cible constituée du matériau à déposer, que l'on bombarde par un flux d'ions inertes (Argon, Hélium, ...) dans une chambre à vide [7-10]. Les particules de matériau ainsi extraites sont alors éjectées et déposées sur le substrat [12].

I.4.4.2.1. Principe de la pulvérisation cathodique

Lorsqu'une particule lourde, atome ou ion, ayant une énergie supérieure à l'énergie de cohésion d'un solide, bombarde ce dernier, elle est capable de provoquer des déplacements d'atomes et d'initier des collisions en cascades. L'une des conséquences est l'éjection d'atomes provenant des premières couches atomiques du solide, Cette éjection d'atomes constitue le phénomène de pulvérisation. Les particules énergétiques utilisées sont essentiellement des ions car on peut leur communiquer facilement de l'énergie en les accélérant dans un champ électrique.

Dans la pratique, une décharge est amorcée entre le matériau à pulvériser polarisé négativement par rapport à la masse et le substrat relié à la masse. Le matériau à pulvériser est appelé cible et joue le rôle de cathode. Le gaz de décharge est généralement de l'argon. Ce gaz

ionisé qui contient principalement des atomes neutres Ar, des ions Ar^+ et des électrons est appelé plasma.

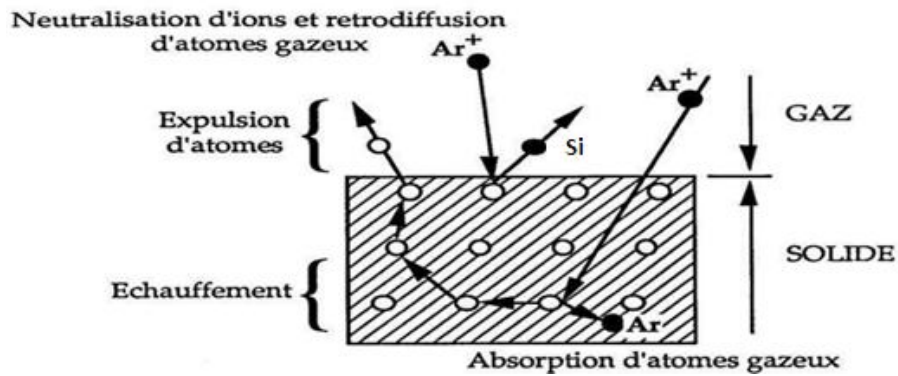


Figure I.3: Mécanisme de pulvérisation du matériau cible.

La cible subit le bombardement des ions positifs Ar^+ , Une partie d'entre eux est réfléchié mais la plupart transfèrent leur énergie au matériau à pulvériser. Ces ions provoquent non seulement l'émission d'électrons secondaires qui entretiennent la décharge en ionisant les molécules de gaz rencontrées sur leur parcours, mais aussi l'éjection d'atomes qui vont traverser le plasma avant de se condenser sur un substrat pour former la couche mince.

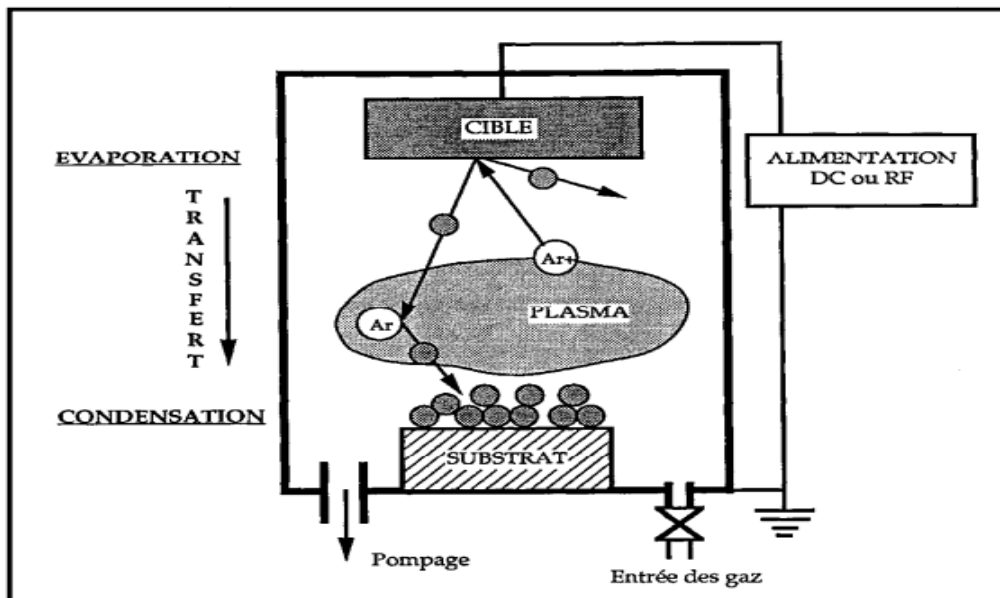


Figure I.4. : Schéma du principe de la pulvérisation cathodique [13].

I.4.4.3. Les choix des pulvérisations

I.4.4.3.1. Pulvérisation cathodique procédé diode DC

Le procédé diode DC permet de déposer tous les matériaux conducteurs (métaux alliages) Il y a compris certains matériaux faiblement conducteurs tels que carbone, silicium, germanium ou carbure de silicium la tension appliquée entre les électrodes dans ce mode est continue.

I.4.4.3.2. Pulvérisation cathodique procédé diode RF

L'utilisation de la tension alternative RF est apparue dans les systèmes DC pour pulvériser les matériaux diélectriques, car ceux-ci ne peuvent écouler les charges électriques apportées sur la cible par les ions, En effet pendant l'alternance négative, la cathode attire les ions du plasma qui la pulvérisent, en la chargeant positivement, cette charge va être neutralisée par les électrons attirés vers la cible lors de l'alternance positive[14].

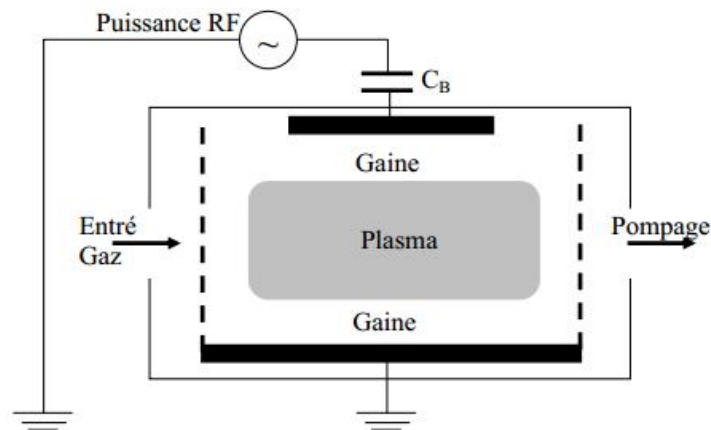


Figure I.5. Représentation d'une décharge Radiofréquence avec couplage capacitif[3].

I.4.4.3.3. Pulvérisateur magnétron

Dans le dispositif de pulvérisation cathodique magnétron ; un champ magnétique est concentré au voisinage de la cible et orienté, de manière à ce que les lignes de champ soient parallèles à la surface bombardée par les ions. Les électrons secondaires émis sous l'effet de l'impact des ions sont piégés devant la cible et augmentent considérablement la densité ionique

de la zone de plasma située devant le matériau à pulvériser. Il en résulte une diminution considérable du bombardement électronique du substrat, donc de son échauffement [15].

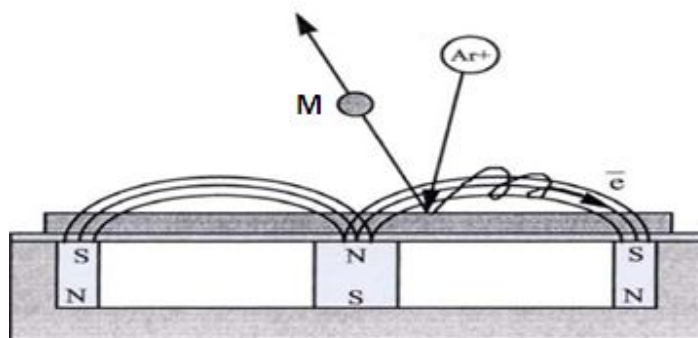


Figure I.6. : Schéma du principe de la pulvérisation magnétron[3].

I.5. La théorie des collisions

La théorie des collisions suppose que pour qu'une réaction se produise, les molécules des réactifs doivent entrer en collision. La théorie des collisions est une théorie liée à la théorie cinétique des gaz, elle explique qualitativement comment se produisent les réactions chimiques élémentaires en phase gazeuse. Elle rend compte de la dépendance de leur vitesse avec la concentration.

Seulement une fraction des collisions (collisions efficaces) se traduisent par la transformation effective des réactifs en produits. Cela est dû au fait que seulement une partie des molécules ont la bonne orientation au moment de l'impact pour rompre les liaisons existantes et une énergie suffisante pour former des produits. L'énergie cinétique des espèces entrant en collision doit être suffisante pour passer la barrière d'énergie minimale pour que la réaction puisse se produire. Cette énergie minimale est appelée énergie d'activation.

I.5.1. Plasmas collisionnels

Lorsque le libre parcours moyen des particules chargées (électrons ou ions) est faible devant les dimensions caractéristiques des plasmas, les espèces subissent de nombreuses collisions avant de ressentir toute accélération significative. Dans ces conditions, on peut raisonnablement négliger les forces d'inertie devant les autres forces (friction, électromagnétiques et de pression), de sorte que l'équation de bilan de quantité de mouvement de l'espèce s'écrit[16].

I.5.2. Les collisions dans un plasma froid [11]:

Au sein d'un plasma froid, les collisions majoritaires sont des collisions binaires entre un électron et une autre particule (électron, ion, neutre...).

Un plasma froid contient des particules chargées et neutres qui donnent lieu à des collisions de diverses natures dans la phase gazeuse:

1/ Les collisions électron-molécule qui conduisent à l'excitation, à l'ionisation ou à la dissociation de la molécule ou encore à l'attachement de l'électron sur la molécule. Les collisions électron-ion conduisent à la recombinaison dissociative ou à l'attachement.

2/ Les collisions ion-ion conduisant généralement à la neutralisation de ceux-ci

3/ Les collisions ion-molécule

4/ Les collisions molécule-molécule conduisant à une réaction chimique ou à une relaxation.

On peut globalement classer ces collisions en deux types: les collisions élastiques et les collisions inélastiques.

I.5.3. Les collisions élastiques

Une collision élastique est une collision dans laquelle l'énergie translationnelle totale des molécules est conservée lors de cette collision.

Dans les collisions élastiques, il y a seulement déviation des particules, avec échange de quantité de mouvement et d'énergie cinétique. Pendant les collisions élastiques, il n'y a qu'échange d'énergie cinétique sans variation de l'énergie interne de chaque particule. Lors d'une collision élastique entre une particule légère (de masse m) et une particule lourde (de masse M) le transfert moyen d'énergie cinétique se fait dans un rapport qui entraîne les phénomènes de diffusion et de transfert d'énergie et de mouvement.

I.5.4. Les collisions inélastiques

Lorsqu'il y a des collisions inélastiques, celles-ci ont pour résultat de créer et de faire disparaître des particules. Dans ces collisions, il y a changement d'état interne d'au moins une des particules (excitation, désexcitation) et même éventuellement création ou destruction de particules (ionisation, dissociation, recombinaison, ...). Dans les collisions inélastiques (qui s'apparentent aux réactions chimiques), il y a non seulement échange de quantité de mouvement et d'énergie cinétique, mais aussi transformation d'énergie cinétique en énergie chimique et vice versa. Ces collisions assurent l'entretien et la réactivité du plasma au cours desquelles une partie de l'énergie cinétique initiale de la particule est convertie en énergie interne entraînant une excitation ou ionisation de la particule.

I.5.5. Fréquence de collisions binaires dans les plasmas

La théorie cinétique donne la fréquence des collisions par la relation:

$$Z = \sigma \bar{c}_{rel} \frac{N}{V} \quad (6)$$

N : Nombre de molécules dans un volume V .

σ : La section efficace géométrique de collisions $\sigma = \pi r^2$;

$r = (r_A + r_B)$ Où r_A et r_B sont les diamètres des molécules A et B entrant en collision.

$\bar{c} = \left[\frac{8K_B T}{\pi \mu} \right]$: Vitesse relative moyenne.

$\mu = \frac{m_A m_B}{m_A + m_B}$: La masse réduite des particules A et B ; où m_A et m_B sont les masses respectives des particules A et B.

La fréquence de collision entre les particules A et les particules ou les électrons B par unité de volume est Z_{AB} .

$$Z_{AB} = \sigma \left[\frac{8 K_B T}{\mu \pi} \right]^{1/2} [A][B] \quad (7)$$

Où, [A], [B], et σ sont les concentrations et la section efficace géométrique de collision.

Z_{AA} : Est le nombre de collisions entre A et B par unité de volume et par unité de temps. Dans le cas de molécules identiques de concentration [A] est donnée par l'équation. [11].

$$Z_{AA} = \sigma \left[\frac{8 K_B T}{\mu \pi} \right]^{1/2} [A]^2 \quad (8)$$

I.6. Le Potentiel d'interaction entre les particules neutres et une surface

Loin de la surface, l'énergie d'interaction d'une particule neutre avec des sites DB Si- ou Si-H, est négligeable. Arrivant près de la surface, l'énergie d'interaction de cette particule avec la surface devient importante. Le potentiel d'interaction (n, m) entre une particule neutre et une surface peut être exprimé par :

$$E(z) = \frac{A}{Z^n} + \frac{B}{Z^m} \quad (9)$$

Où z : la distance entre la particule et la surface, A et B sont des constantes [17].

Les interactions mutuelles, des atomes dans un matériau, sont calculables, lorsqu'on connaît la forme analytique du potentiel d'interaction entre eux, si r_0 est la distance d'équilibre entre atomes, l'énergie potentielle est constituée d'une partie attractive prépondérante si $r > r_0$, due à la liaison chimique et d'une partie répulsive prépondérante $r < r_0$, due à l'interaction des couches profondes. La figure I.7 présente l'allure de ce potentiel.

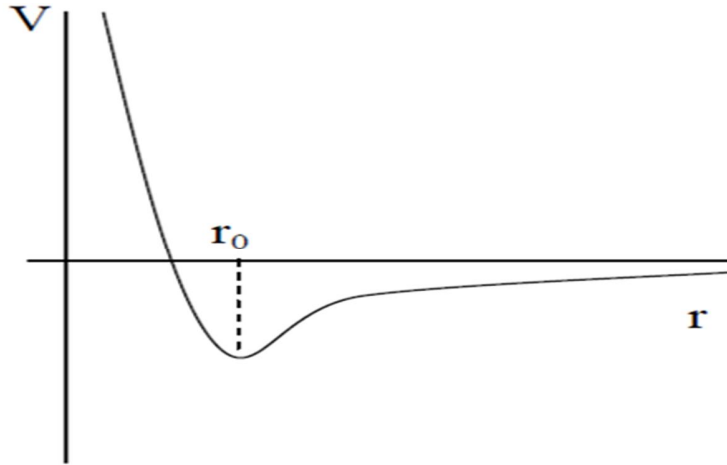


Figure. I.7.: Allure du potentiel d'interaction particules neutres - surfaces

I.7. Groupes de potentiels d'interaction :

I.7.1. Potentiels coulombiens écrantés :

Il existe plusieurs potentiels coulombiens qui peuvent être utilisés dans la simulation numérique, ces potentiels décrivent l'interaction coulombienne de Thomas-Fermi suivant l'équation [18] :

$$U(r) = \frac{z_1 z_2 e^2}{r} \Phi\left(\frac{r}{a}\right) \quad (10)$$

Où Z_1, Z_2 sont les nombres atomiques des deux atomes ; e est la charge d'électron ; r est la distance inter-atomique, a est un paramètre du potentiel et $\Phi(r)$ est la fonction d'écrantage.

I.7.2. Exemples de potentiels écrantés [14]

*Potentiel de Bohr

Pour un paramètre a , le potentiel de Bohr est utilisé pour les séparations inter-atomiques les plus larges :

$$U(r) = \frac{z_1 z_2 e^2}{r} \exp\left(\frac{r}{a}\right) \quad (11)$$

***Potentiel de Molière**

Il est utilisé à grande échelle, ce potentiel est valable pour cerner les interactions homogènes ou hétérogènes. Sa forme est :

$$U(r) = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{r} \left[0.35 e^{-0.3 \frac{r}{aF}} + 0.55 e^{-1.2 \frac{r}{aF}} + 0.1 e^{-0.6 \frac{r}{aF}} \right] \quad (12)$$

***Potentiel Kr-C**

Il est établi par Wilson et al. en prenant en compte les considérations de Günther qui a prouvé son efficacité [14] :

$$U(r) = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{r} \left[0.109045 e^{-0.278544 \frac{r}{a}} + 0.473674 e^{-0.637174 \frac{r}{a}} + 0.335381 e^{-1.919249 \frac{r}{a}} \right] \quad (13)$$

***Potentiel ZBL** : Il est défini pour un paramètre au :

$$au = 0.88543ab (Z_1^{0.23} + Z_2^{0.23})^{-1} \quad (14)$$

Sa forme est :

$$U(r) = \left[0.028171 e^{-0.20160 \frac{r}{au}} + 0.28022 e^{-4.4728 \frac{r}{au}} + 0.50986 e^{-0.94229 \frac{r}{au}} + 0.18175 e^{-3.1998 \frac{r}{au}} \right] \quad (15)$$

***Potentiel de Lenz et Jensen**

Il est défini par:

$$U(r) = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{r} \left[0.01018 e^{-0.206 \frac{r}{a}} + 0.2433 e^{\frac{r}{a}} + 0.7466 e^{-1.038 \frac{r}{a}} \right] \quad (16)$$

*** Potentiel de Born-Mayer**

Son expression est :

$$U(r) = A_{BM} \exp\left(\frac{r}{a_{AB}}\right) \quad (17)$$

Pour obtenir les coefficients, de potentiel de Born-Mayer, dans le cas d'une hétéro-interaction on peut prendre:

$$A_{BM} = \sqrt{A_{BB}A_{MM}} \quad (17-1)$$

$$a_{AM} = 2 \frac{a_{AA}a_{MM}}{a_{aa}+a_{MM}} \quad (17-2)$$

*Potentiels attractifs

Les potentiels attractifs fréquemment utilisés sont :

*Potentiel de Morse

$$U(r) = D \exp[-2a(r - r_0)] - 2D \exp[-a(r - r_0)] \quad (18)$$

*Potentiel de Lennard et Jones :

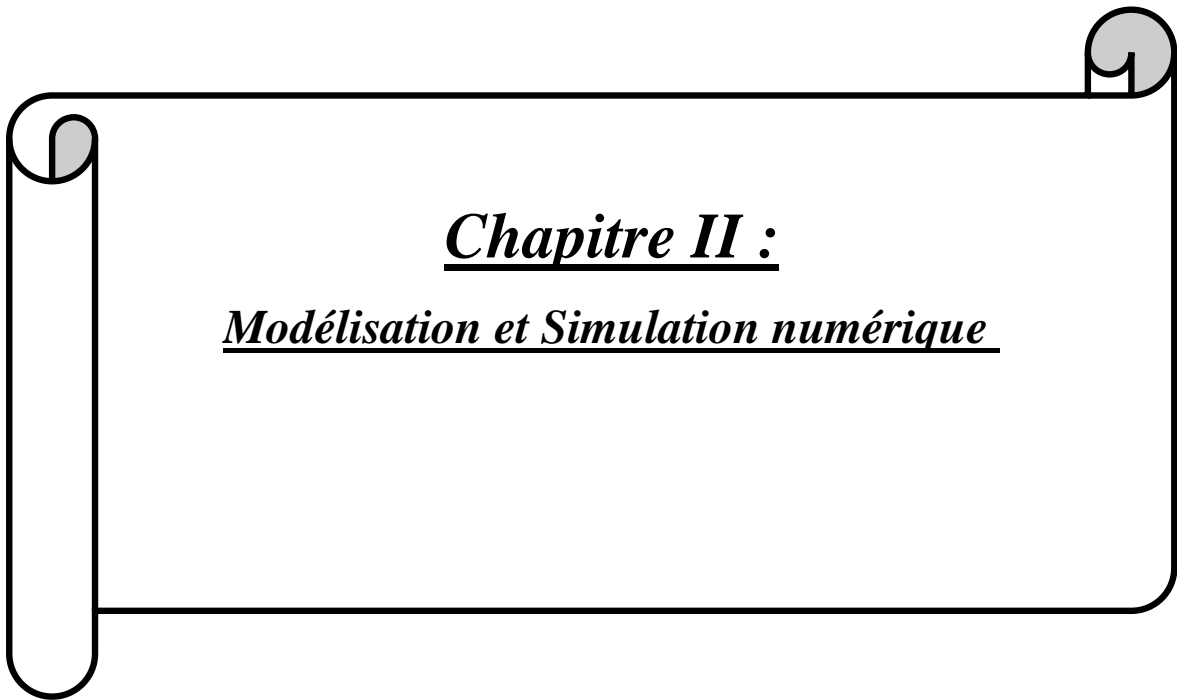
Le potentiel d'interaction radical-surface [17].

$$U(z) = \frac{(\pi \epsilon N r_0^3)}{3} \left[-\frac{1}{3} \left(\frac{r_0}{z} \right)^3 + \frac{1}{15} \left(\frac{r_0}{z} \right)^9 \right] \quad (19)$$

* Potentiels empiriques

Ils sont dérivés des énergies totales du réseau en accord avec les constantes élastiques et l'énergie de cohésion. Lamé et al. ont trouvé un modèle empirique se basant sur le modèle théorique développé par Daignes, sa forme est [14] :

$$U(r) = \left[(1 - \exp(-a(r - n)^2)) \left[C_0 + \frac{C_1 \cos \chi}{r^1 r^2} + \frac{S_1}{r^5} \sin \chi \right] + \sum_{i=0}^3 \frac{(-\beta r^2)^i}{r^{3-i}} + D \exp(-\gamma r) \right] \quad (20)$$



Chapitre II :
Modélisation et Simulation numérique

Chapitre II :

Modélisation et Simulation numérique de Monte Carlo

II.1. Introduction

Dans cette partie, nous proposons un modèle qui imite différents phénomènes et processus qui se passent dans un réacteur PVD. Le modèle se base sur la simulation par la méthode de Monte Carlo (MC).

Notre modèle simule l'interaction des ions d'argon avec une cible de dans un réacteur PVD lors de déposition d'une couche mince Si-H

II.2. La simulation par la méthode de Monte Carlo

Les deux principales techniques utilisées dans le domaine de la simulation en physique statistique de la matière condensée sont la Dynamique Moléculaire (DM) et la méthode Monte-Carlo (MC). Ces simulations reposent sur une description moléculaire en termes de positions et quantités de mouvement d'un ensemble de particules qui constituent le système.

La méthode de Monte-Carlo (MC) fut développée par Von Neuman, Ulam et Metropolis, à la fin de la seconde guerre mondiale, pour l'étude de la diffusion des neutrons dans un matériau fissile (son noyau peut subir une fission nucléaire sous l'effet d'un bombardement par des neutrons de toutes énergies (rapides ou lents) Historiquement, c'est la méthode de Monte Carlo, qui apparut la première en 1953 avec les travaux de Metropolis et al. (1953). La méthode consiste à faire évoluer successivement les déplacements des molécules de manière aléatoire en suivant une probabilité conditionnée par l'état thermodynamique du système considéré La méthode de Monte-Carlo permet l'estimation des moyennes de grandeurs physiques [19].

II.2.1. Avantages des techniques de simulation Monte Carlo

Le principal avantage de ces méthodes est de couvrir des échelles de temps et de taille plus grandes que les méthodes quantiques et la méthode de la Dynamique Moléculaire, tout en étant de faibles consommatrices de temps de calculs.

Les techniques Monte Carlo reflètent l'évolution exacte d'un système: à condition que la simulation soit réalisée de façon correcte et précise, le résultat final peut être comparé de façon directe à des expériences réelles et quelque fois peuvent être non distinguables.[20]

II.2.2. Méthode de simulation de Monte Carlo

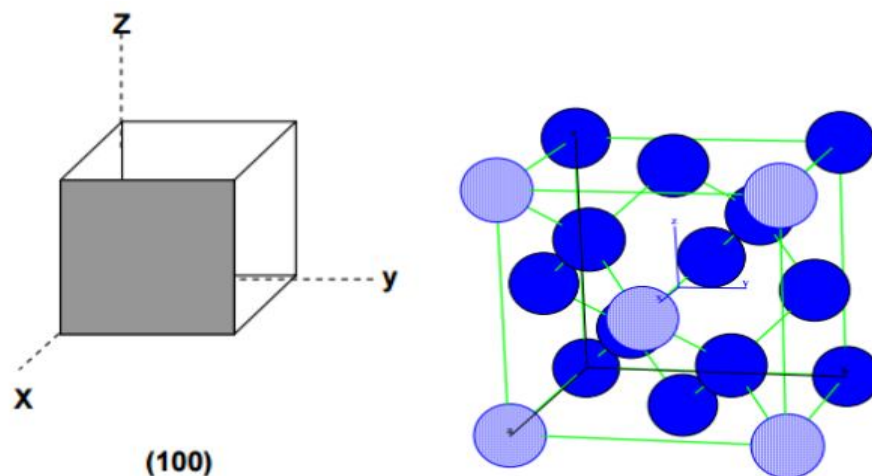
La résolution d'un problème de physique statistique par la méthode de Monte Carlo passe par les trois étapes suivantes :

- a) Définition du phénomène physique
- b) Définition du modèle mathématique
- c) Elaboration du modèle de simulation
 - Elaboration du modèle pour un cas simple et validation du modèle
 - Généralisation du modèle pour des cas complexes
 - Calcul et analyse des résultats [21].

II.3. Description de la chambre de pulvérisation

II.3.1.La cible

Le silicium est de structure cristallin de type diamant, ce caractère cristallin confère au réseau une symétrie et une périodicité laissant connaître toutes les des atomes dans la matrices ; sachant que l'empilement du cristal dans ce cas est de type AABBC. Ce genre d'empilement vient du fait que le réseau diamant est formé par deux réseaux CFC imbriqués.



FigureII.1 : Réseau de Structure cristalline 1X2 [22].

II.3.2. Le plasma :

Le plasma ionisé par décharge électrique. Si la décharge est faite en régime DC. La tension appliquée est comprise entre 0.5 et 5 KV. Cette énergie électrique ne sert pas uniquement pour l'ionisation mais elle permet aussi l'accélération des ions vers la cible.

Le plasma est formé de deux espèces l'hydrogène et l'argon. Dans notre étude, nous ne considérons seulement que les ions d'argon qui provoquent le bombardement de la cible.

II.4. Phénomène Physique

Il s'agit comme nous l'avons avancé de collisions binaires entre les ions d'argon d'un plasma froid et les atomes constituant la cible de silicium cristallisé.

Le type de plasma considéré est hors équilibre thermodynamique, de faibles densités (sa pression d'ordre de mbar) froid ($T_a \approx T_{\text{Macroscopique}}$) et formé de deux espèces qui sont l'argon (Ar) et l'hydrogène (H), l'argon sert à bombarder la cible et l'hydrogène sert à améliorer les caractéristiques des couches minces.

Au niveau du plasma les forces exercées sur l'ion bombardant sont :

- la force électrique issue de la tension donnée par le générateur et servant à l'accélération des particules bombardant la cible.
- Les ions d'argon subissent des collisions binaires suivant un libre parcours moyen obéissant à une certaine statistique
- la force engendrée par l'énergie thermique du plasma. Cette force est considérée faible devant l'énergie électrique (DC) conférée au dispositif.
- La force de l'interaction des ions avec la surface.

II.5. Modélisation Mathématique

Pour la modélisation mathématique, nous proposons une forme du potentiel électrique, une loi de distribution des libres parcours moyens, un processus de collisions et un potentiel d'interaction avec la surface.

II.5.1. Potentiel et champ électriques dans le réacteur

En général le potentiel électrique dans les expériences de pulvérisateur cathodique suit la forme présentée par la figure II.2. La figure est celle d'un potentiel du plasma à l'état stationnaire entre la cathode et l'anode obtenu à l'aide d'une simulation pour un gaz argon.

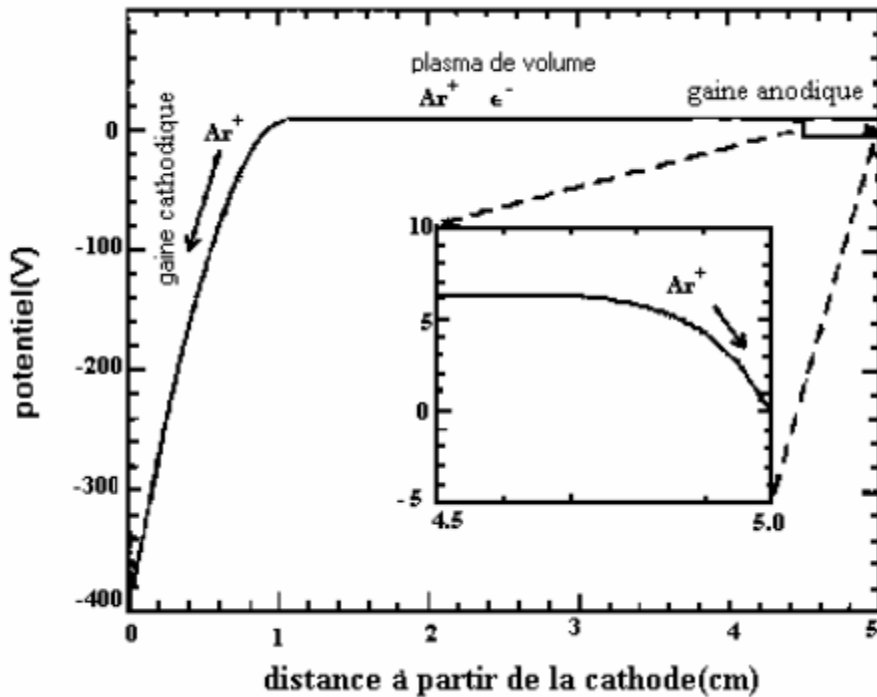


Figure II.2 : Distribution de potentiel dans une décharge DC de l'argon[23].

Nous avons proposée pour le potentiel $V(z)$ et le champ électrique E dans le réacteur les variations suivant la figure II.3. La première zone, près de la cathode, $z < h_2$ et une deuxième zone $h_2 < z < h_3$, où H est la distance inter-électrodes. Le champ électrique dans la première zone est E_2 , celui de la deuxième zone est E_1 . La définition de h_0 et h_1 sera présentée lors de la définition de la cellule de simulation.

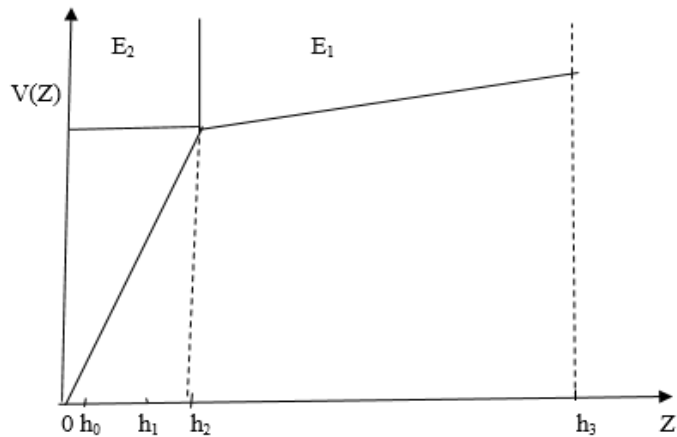


Figure II.3 .Distribution de potentiel dans une décharge DC

Pour : $h_2 < Z < h_3$ \longrightarrow $E = E_1 = \Delta V_1 / (h_3 - h_2)$ (21)

Pour : $Z < h_2$ $E = E_2 = \Delta V_2 / h_2$ (22)

Pour les applications numériques, nous allons prendre : $\Delta V_1 = 0.05 * \Delta V$, $\Delta V_2 = 0.95 * \Delta V$.

ΔV est la différence de potentielle entre les deux électrodes.

II.5.2. Libre parcours moyen

Soit λ_m le libre parcours moyen des collisions binaires libres entre ions :

$$\lambda_m = \frac{1}{n_i \sigma} \quad (23)$$

Nous allons choisir des parcours aléatoires des particules entre chaque deux collision successive. Soit $d\lambda_m$ le pas aléatoire choisi :

$$d\lambda_m = 2 \lambda_m X_{\text{Rand}} \quad (24)$$

Où X_{Rand} est un nombre aléatoire uniforme entre 0.0 et 1.0 ; il est généré par le compilateur de programmation.

$d\lambda_m$ est pris suivant une distribution gaussienne $g(x)$ [24] :

$$g(x) = \frac{1}{\beta \sqrt{\pi}} e^{-\left(\frac{x^2}{\beta^2}\right)} \quad (25)$$

Avec : $\beta = 0.5 \lambda_m$, $x = d\lambda_m - \lambda_m$

La figure II.4 présente une forme normalisée de $g(x)$.

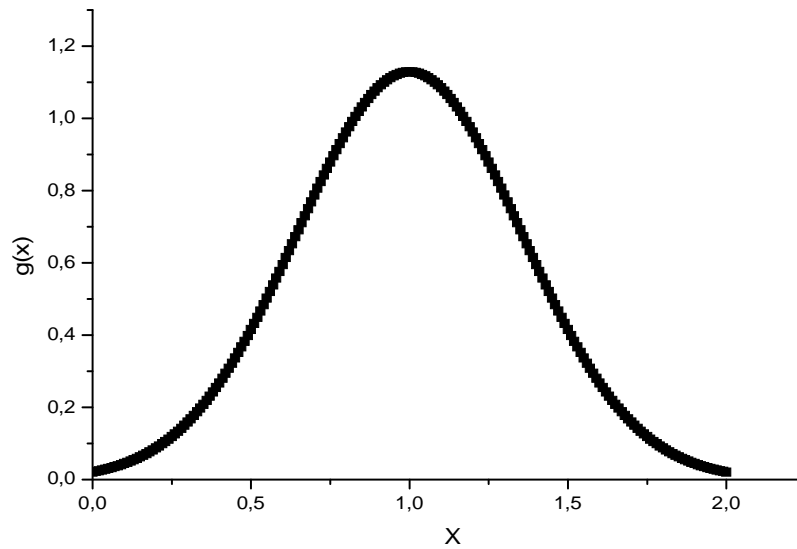


Figure II.4. Forme Gaussienne pour le choix des parcours aléatoires des ions

II.5.3. Potentiel d'interaction avec la surface :

On considère la collision binaire entre l'ion Ar^+ et l'atome Si de la cible (l'interaction hétérogène). On utilise le potentiel de Firsov-Molière, il est de type répulsif et il prend la forme suivante :

$$U(r) = \frac{A}{r} (0.35e^{-0.3\frac{r}{B}} + 0.55e^{-0.6\frac{r}{B}} + 0.1e^{-1.2\frac{r}{B}}) \quad r < r_c \quad (26)$$

Dans le cas de l'interaction entre l'ion d'argon et le silicium, $A=3628.8 \text{ eV/\AA}$, $B=0.1172 \text{ \AA}$ [14].

La figure II.5 présente le potentiel de Firsov-Molière utilisé.

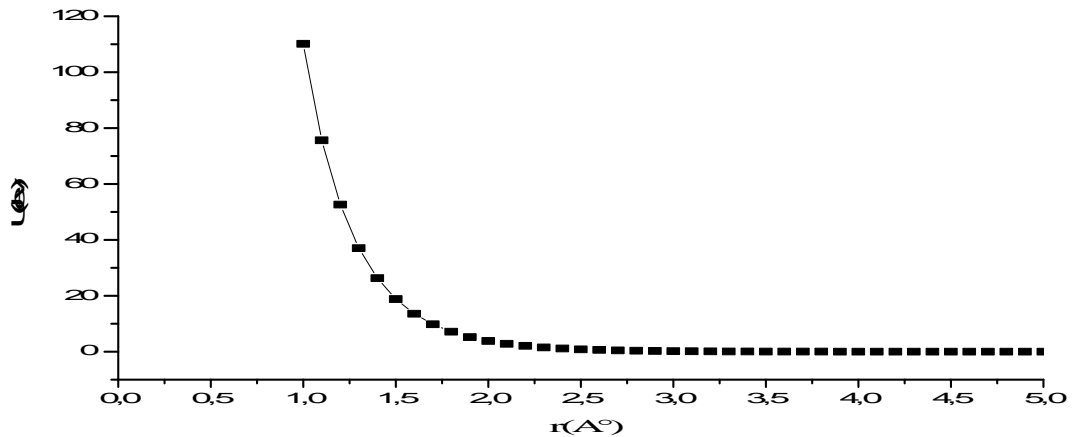


Figure II.5. : Potentiel de Firsov- Molière

II.5.4. Energie transférée lors des collisions

Lors des collisions binaires, le transfert d'énergie par collision élastique E_{trans} entre une particule de masse M_1 d'énergie E_{inc} et une particule de masse M_2 est au mieux [23]:

$$E_{trans} = f * E_{inc} \quad (28)$$

Où le paramètre f peut prendre l'expression approximative suivante : $f = \frac{4M_1M_2}{(M_1+M_2)^2}$

II.6. Principe du modèle de simulation de Monte Carlo [25]

Le principe général des modèles de simulation de Monte-Carlo (MC) prend le schéma suivant :

- a) Choix d'une configuration initiale qui répond à quelques propriétés physiques et thermodynamiques. L'énergie totale ou interne du système est E_i .
- b) Déplacement aléatoire infinitésimal d'une particule et calcul de la nouvelle énergie interne du système E_f . Ce déplacement est lié aux grandeurs physiques : échelle de temps et échelle de longueurs. Le système physique tend vers une minimisation de l'énergie interne du système avec une certaine fluctuation. Soit $\Delta E = E_f - E_i$.
- c) Si $\Delta E < 0$; la nouvelle configuration est retenue et les différentes moyennes peuvent être relevées.
- d) Si $\Delta E > 0$; la configuration n'est pas retenue et les différentes moyennes peuvent être relevées avec une probabilité Pr égale à :

$$Pr = \exp(-\Delta E / k_B T) ; \quad (29)$$

Où k_B est la constante de Boltzmann et T est la température.

II.7. Programme par simulation de Monte Carlo de l'interaction des ions d'argon avec la surface

Nous avons élaboré un programme en fortran 77 pour la simulation de Monte-Carlo de l'interaction plasma-surface. La surface de la cible de silicium est le plan (100).

Nous nous intéressons à l'étude des collisions binaires entre les ions d' Ar^+ mobiles et leurs distributions de vitesse dans la cellule de simulation. Nous nous intéressons aussi à l'interaction de ces ions avec la cible. Les étapes de cette simulation sont présentées ci-après.

❖ La cellule de simulation

L'idée principale de cette méthode est de créer un grand nombre de différentes configurations aléatoires dans une cellule de forme parallélépipédique. La figure II.7 présente la cellule MC.

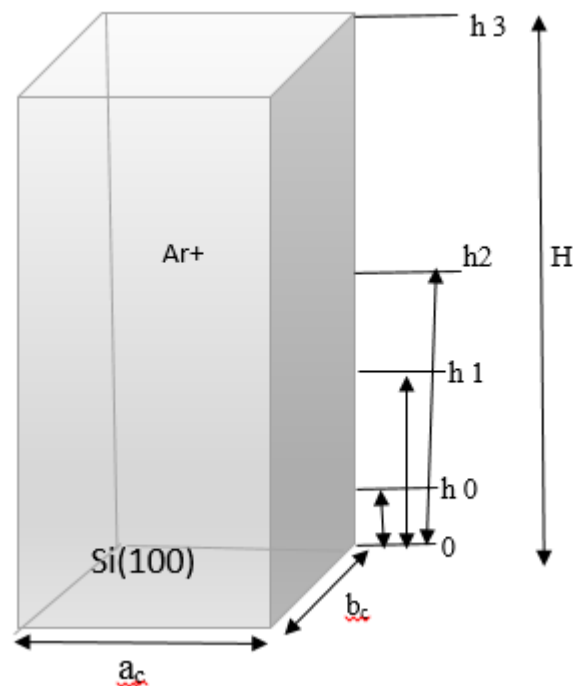


Figure II.6.: La cellule de simulation

Le choix des positions initiales de façon aléatoire est meilleur dans cette étape, puisque l'interaction se déroule au niveau du plasma. L'attribution des coordonnées cartésiennes ini-

tiales, aux ions (Ar^+) du plasma dans la cellule de dimension $a_c * b_c * H$, se fait par un générateur X_{Rand} .

Pour la cellule de simulation, on définit :

a_c, b_c : distance entre l'atomes de silicium.

h_3 : Distance cible-substrat (on prend $h_3 = 2 \text{ cm}$).

h_1 : distance à partir de laquelle il y a action du potentiel de Molière ($h_1 = 5 \text{ \AA}$).

h_0 : distance d'interaction de l'ion avec la surface de silicium ($h_0 = 0.5 \text{ \AA}$).

Les coordonnées initiales à trois dimensions (X, Y, Z) d'un ion sont données comme suit :

$$X_i(0) = a_c X_{\text{Rand}}$$

$$Y_i(0) = b_c X_{\text{Rand}}$$

$$Z_i(0) = (h_3 - h_1) X_{\text{Rand}}$$

La simulation pour une particule donnée se déroule en trois étapes principales.

1^{ère} étape :

1. Le choix de la position initiale de façon aléatoire au niveau du plasma. Les composantes de la vitesse initiale sont considérées nulles car l'énergie thermique est très faible devant l'énergie électrique due au champ électrique réacteur,
2. On donne un libre parcours moyen à l'ion suivant une distribution gaussienne,
3. L'ion rentre en collision avec un autre ion. On calcule l'énergie cinétique de l'ion incident avant et après collision. L'ion, suivant son énergie cinétique et suivant l'énergie élastique transférée peut avoir ou non un autre pas aléatoire et continuer son mouvement. Dans ce cas l'étape 1 est répétée, sinon l'ion est réfléchi. On relève les moyennes et les distributions des vitesses pour les ions arrivant au niveau de h_1 .

2^{ème} étape :

Cette deuxième étape concerne les ions arrivant à h_1 . Chaque ion peut se déplacer avec des pas aléatoires suivant une loi uniforme jusqu'à h_0 . Le pas typique dans cette phase est Z_0 , tel que :

$$Z_0 = (h_1 - h_0) / N \text{ où on prend : } N = 100$$

Dans cette étape l'ion subit l'action du champ électrique et l'action du potentiel dû à la surface. Pour chaque déplacement aléatoire, on calcule l'énergie cinétique de la particule E_c . Suivant la valeur de E_c , l'ion continue son mouvement ou bien il est réfléchi.

On relève les moyennes et les distributions des vitesses pour les ions arrivant au niveau de h_0 .

3^{ème} étape :

La troisième étape est destinée à l'étude de l'interaction de l'ion avec la cible de silicium. On calcule l'énergie cinétique de l'ion incident. L'atome de silicium peut être éjecté si l'énergie est suffisante pour casser la liaison de l'atome de silicium de la cible.

On relève les moyennes et les distributions des vitesses pour les ions d'argon et pour les atomes de silicium éjecté.

II.8. Correction du facteur de Boltzmann

Pour améliorer notre modèle de simulation de Monte Carlo, nous proposons l'utilisation du facteur de correction de Boltzmann.

Comme il a été mentionné au paragraphe II.6, on peut prendre les configurations aléatoires résultant de la variation d'énergie interne négative ($\Delta E = E_f - E_i$) avec la correction de Boltzmann. Soit E_c l'énergie cinétique de l'ion dans la phase h_1 à h_0 .

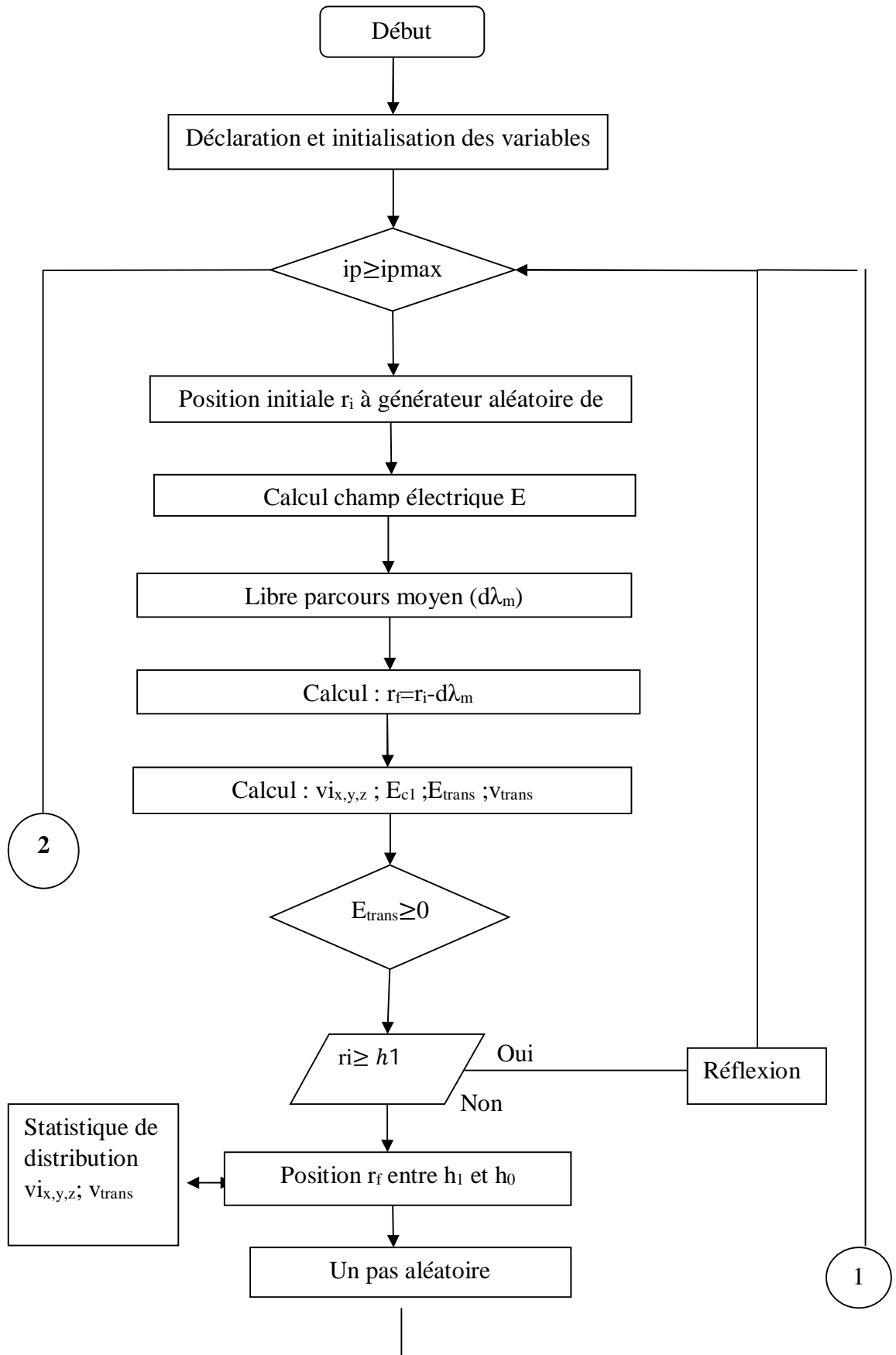
- a) Si $E_c > 0$, la nouvelle configuration est retenue et l'ion peut continuer normalement son mouvement vers la surface h_0 .
- b) Si $E_c < 0$; le mouvement de l'ion s'arrête et l'étude de la collision est retenu avec une probabilité Pr égale à :

$$Pr = \exp(-E_c / k_B T) ;$$

Où k_B est la constante de Boltzmann et T est la température.

- c) Si l'énergie interne dans ce cas est supérieure à l'énergie de la liaison du silicium, l'atome de silicium est éjecté, sinon il est réfléchi.

II.9. Organigramme pour le calcul des collisions



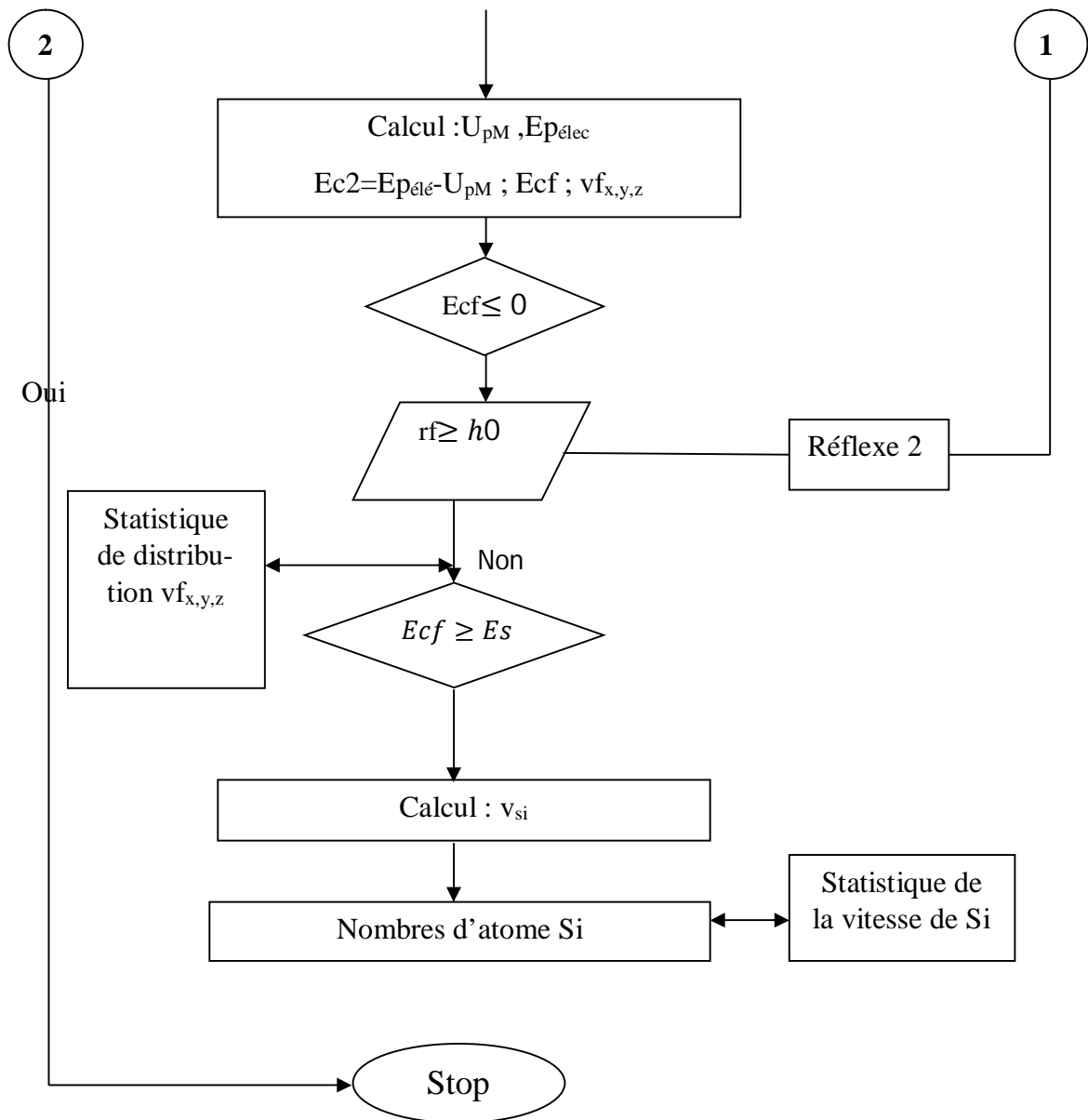
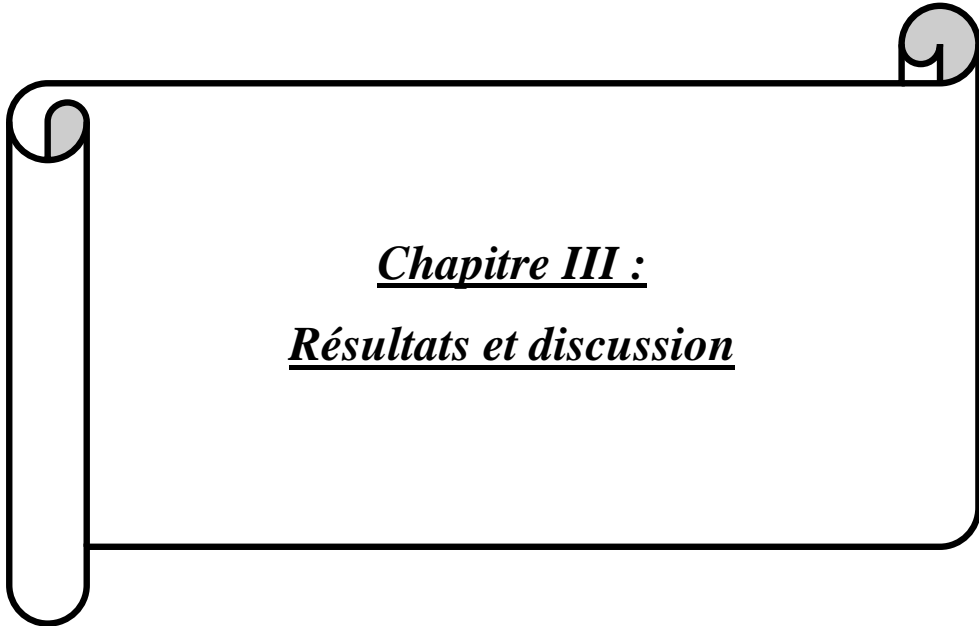


Figure II.7: Organigramme pour le calcul des collisions de la méthode Monte Carlo



Chapitre III :
Résultats et discussion

Chapitre III :**Résultats et discussion****III.1. Introduction**

Nous allons utiliser le modèle de simulation de Monte Carlo proposé au chapitre II pour l'étude des collisions des ions d'argon du plasma froids et leurs interactions avec la surface d'une cible de silicium dans un pulvérisateur cathodique. La surface de la cible est du type Si(100). Il est demandé de calculer le flux des atomes de silicium pulvérisés en modifiant à chaque fois la tension électrique du générateur DC.

Nous utilisons un générateur de nombre aléatoire pour donner des positions initiales aux ions dans la cellule. Les vitesses des ions incidents sont fonction du champ électrique appliqué et du potentiel d'interaction avec la surface. Dans chaque action, il faut retenir les configurations acceptables suivant les énergies mises en questions.

Nous allons établir la distribution des vitesses des ions d'argon du plasma froids avant et après collisions suivant les énergies incidentes et transférées. Nous calculons aussi les distributions des vitesses lors de l'interaction ions-surface de la cible.

Nous considérons en général les valeurs et les données suivantes :

$$h_0=0.5 \text{ \AA} \text{ et } 0.8 \text{ \AA} \quad , \quad h_1=0.5 \text{ \AA} \quad , \quad h_2=0.2h_3 ;$$

$$h_3= 2\text{cm} \quad \text{et} \quad \Delta V=500 \text{ V}, 1000 \text{ V}, 1500 \text{ V}$$

La température des ions est = 300K

Soit le coefficient de l'énergie transférée $f= 0.5$ (en général)

Nombre total de particules incidents =10 000 (en général)

III.2. Distribution des vitesses pour la première phase de la simulation au niveau de h_1 :

Nous étudions les mouvements des ions durant la première phase (pour $h_1 < z < h_3$).

III.2.1. Distribution des vitesses des ions d'argon au niveau de h_1 avant collision

La figure III.1 présente la distribution des vitesses des ions d'argon au niveau de h_1 avant les collisions et avant le transfert d'énergie à la particule cible.

On pose $w_i=V_i/V_0$ où V_i présente la vitesse de la particule incidente et w_i présente la vitesse réduite. V_0 est la vitesses unité définie . V^* présente la vitesse la plus probable de la distribution, Δw_i

présente la largeur de la distribution à mi-hauteur et F_{Max} présente la valeur maximale de la distribution pour V^* .

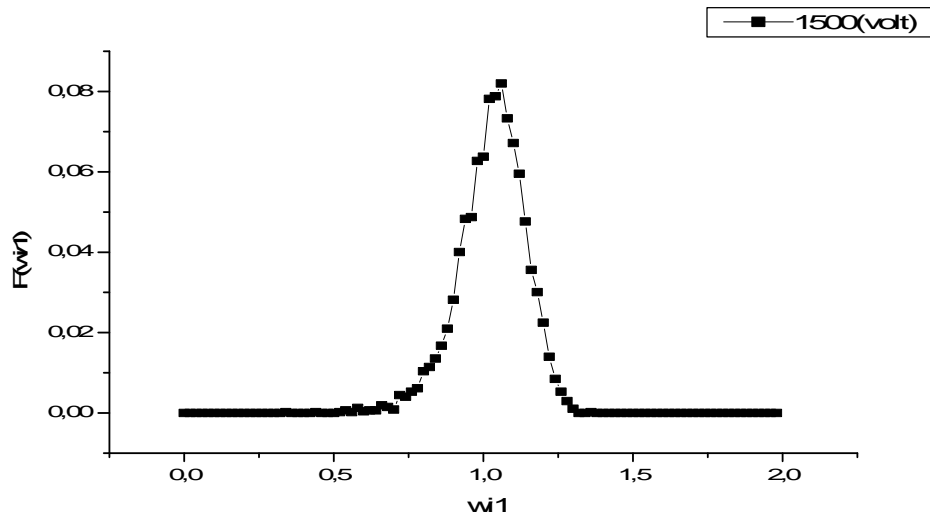


Figure III.1. : Distribution de vitesse F en fonction de w_i pour $\Delta V=1500$ Volt

III.2.1.1. Effet du potentiel appliqué ΔV

La figure III.2 présente la distribution des vitesses des ions d'argon au niveau de h1 avant les collisions et avant le transfert d'énergie à la particule cible pour différentes valeurs de ΔV . Les distributions sont superposables.

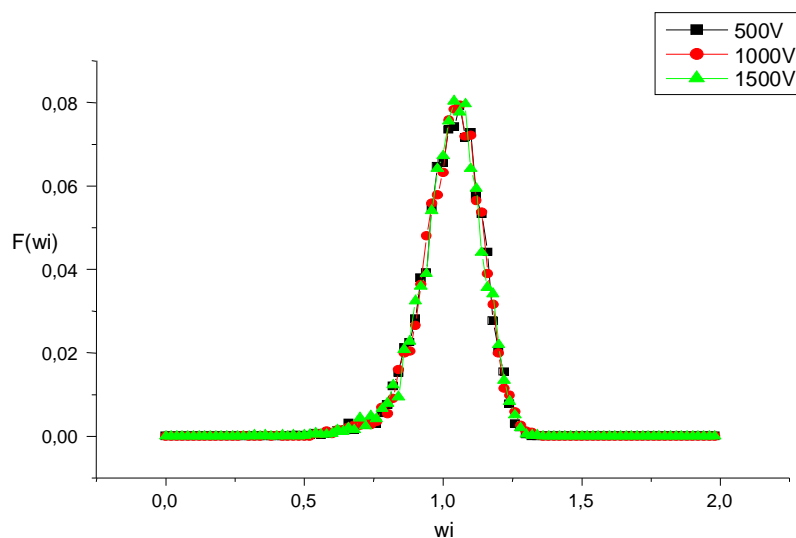


Figure III.2. : Variation des distributions de vitesse pour différentes valeurs du potentiel appliqué

Le tableau III.1 présente les vitesses les plus probables et les largeurs des fonctions de distribution des vitesses des ions incidents au niveau de h_1 avant collisions pour trois valeurs du potentiel électrique appliqué.

Tableau III.1. : Vitesses les plus probables et largeurs des fonctions de distributions au niveau de h_1 avant collisions

ΔV	500	1000	1500
Δw_i	0.24467	0.23211	0.23739
V^*	1.03607	1.07894	1.06639
F_{Max}	0.080286	0.08163	0.08269

III.2.1.2 Effet du facteur de transfert f d'énergie cinétique:

Dans ce cas on prend les conditions suivantes pour la simulation :

$$\Delta V = 1500 \text{ Volt}; h_2 = 0.2 * h_3; f = 0.8.$$

La figure III.3 présente la distribution des vitesses F en fonction de $w_{i1} = (v_i/v_0)$ pour $f = 0.8$.

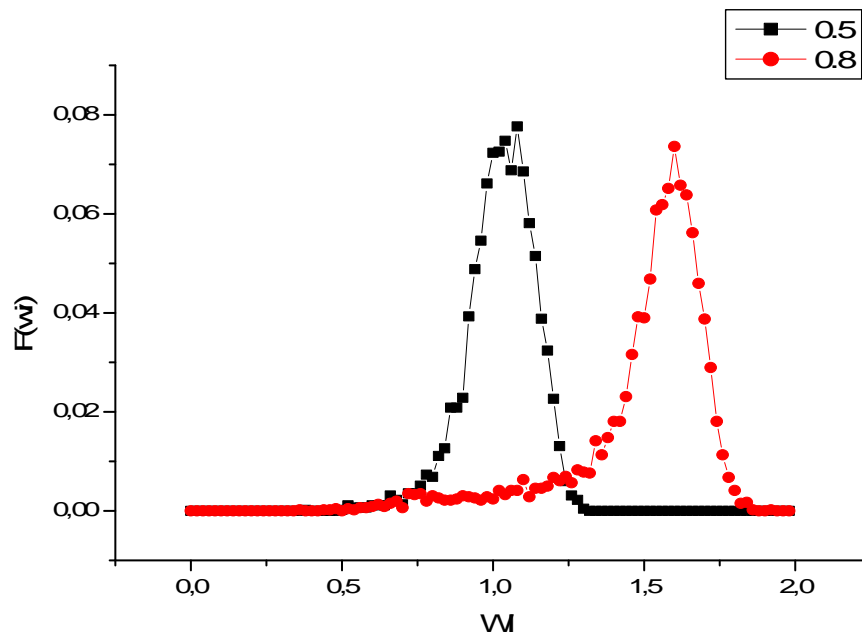


Figure III.3. : Distribution de vitesse F en fonction de w pour $f = 0.8$ et $f = 0.5$

Le tableau III.2. présente les vitesses les plus probables et les largeurs des fonctions de distribution des vitesses des ions incidents au niveau de h_1 avant collisions pour le coefficient de l'énergie transféré $f = 0.8$

Tableau III.2.: Vitesses les plus probables et largeurs des fonctions de distributions au niveau de h_1 avant collisions pour différentes valeurs du facteur f

f	Δw_i	V^*	F_{Max}
0,5	0.23739	1.06639	0.07769
0.8	0.20702	1.6163	0.076090

Remarque:

On remarque que la valeur maximale V^* de la vitesse la plus probable augmente lorsque le facteur f augmente. Dans ces conditions l'augmentation est de 34%

III.2.1.3. Effet de la variation de la forme du potentiel électrique

On se propose l'étude de l'effet de la forme du potentiel électrique entre les deux électrodes. La forme proposée est celle du chapitre II.5.1, On fait les calculs pour $h_2=0.15 \cdot h_3$ et $h_2=0.95 \cdot h_3$.

On prend : $\Delta V=1500$; $f=0.5$.

La figure III.4 présente les distributions correspondantes. Les deux distributions sont pratiquement superposables.

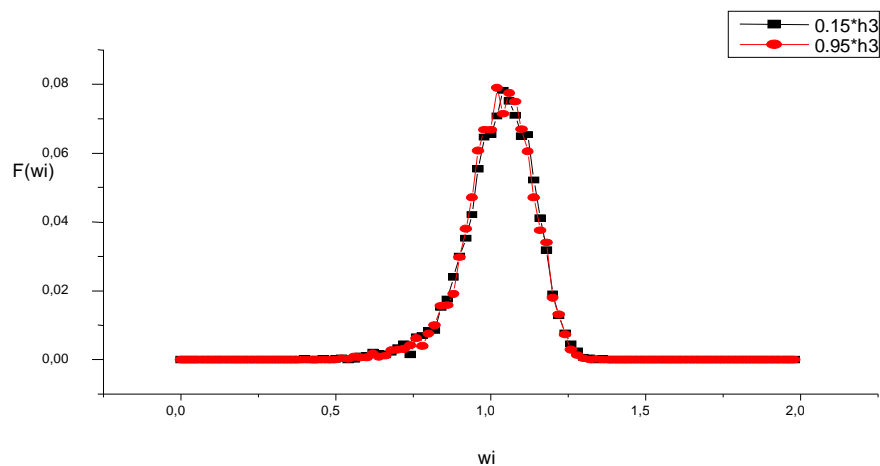


Figure III.4. : Distribution de vitesse en fonction de $w_i=(v_i/v_0)$.

Le tableau III.3. présente les vitesses les plus probables et les largeurs des fonctions de distribution des vitesses des ions incidents au niveau de h_1 avant collisions pour différentes

valeurs de la distance h2. Les valeurs du tableau confirment que les deux distributions sont superposables.

Tableau III.3. : Vitesses les plus probables et largeurs des fonctions de distributions au niveau de h₁ avant collisions pour différentes valeurs de h2.

h ₂	Δwi	V*	F _{Max}
0.15 * h ₃	0.23839	1.01725	0.078938
0.95 * h ₃	0.23212	1.036072	0.077928

III.3. Distribution des vitesses des ions d'argon au niveau de h₁ après collisions

La figure III.5. présente la distribution des vitesses des ions d'argon au niveau de h₁ après les collisions et après le transfert d'énergie à la particule cible.

$w_{i1} = v_{trans}/V_0$ où v_{trans} présente la vitesse de la particule incidente après transfert d'énergie et w_{i1} présente la vitesse réduite correspondante.

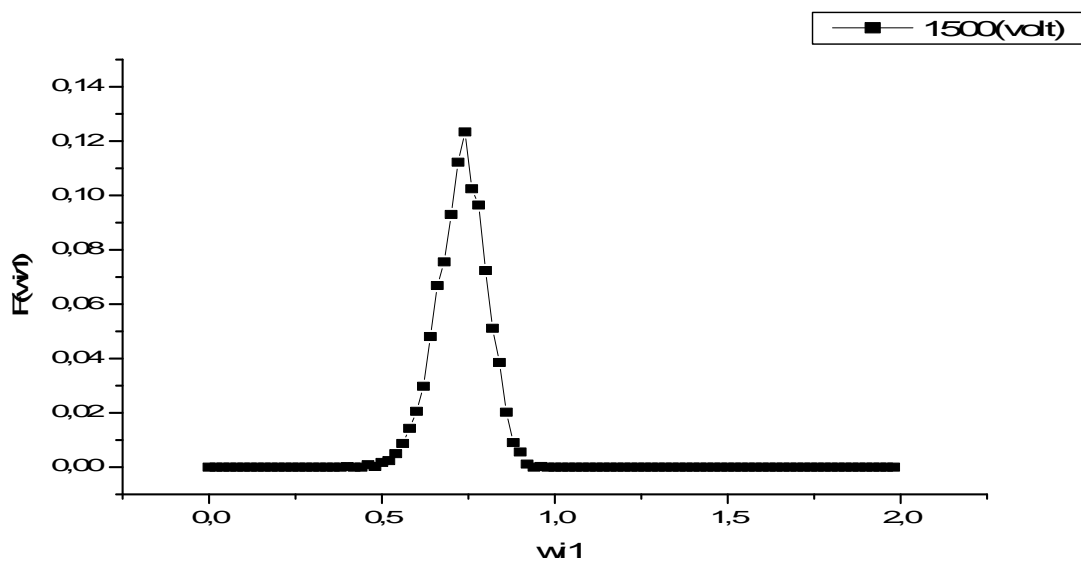


Figure III.5. : Distribution de vitesse F en fonction de $w_{i1} = (v_{trans}/V_0)$ pour $\Delta V = 1500$ Volt

III.3.1 Effet du potentiel appliqué ΔV

La figure III.6: présente la distribution de vitesse F en fonction de $w_{i1} = (v_{trans}/V_0)$ pour différentes valeurs du potentiel appliqué $\Delta V = 500; 1000; 1500$ Volt.

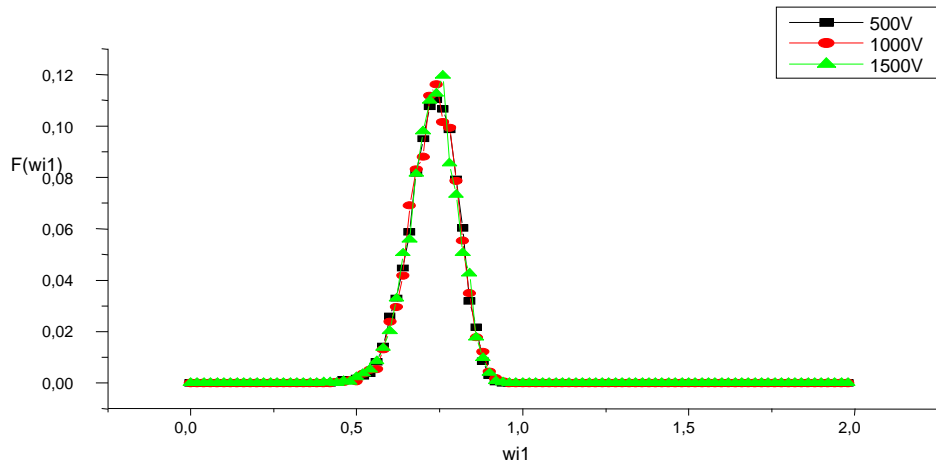


Figure III.6.: Distribution de vitesse F en fonction de $w_{i1}=(v_i/v_0)$ pour $\Delta V=500; 1000 ; 1500$ Volt

Le tableau III.4 présente les vitesses les plus probables et les largeurs des fonctions de distribution des vitesses des ions incidents au niveau de h_1 après collisions pour trois valeurs du potentiel électrique appliqué.

Table III.4. : Vitesses les plus probables et largeurs des fonctions de distributions au niveau de h_1 après collisions pour trois valeurs du potentiel électrique appliqué.

ΔV	500	1000	1500
Δw_{i1}	0.175656	0.123107	0.16939
V^*	0.73494	0.754809	0.731806
F_{Max}	0.116400	0.117815	0.134438

III.3.2 Effet du facteur de transfert f d'énergie cinétique

Dans ce on prend les conditions suivantes pour la simulation :

$$\Delta V=1500 \text{ Volt}; h_2=0.2 \cdot h_3.$$

La figure III.7 présente la distribution de vitesse des ions en fonction de $w_{i1}=(v_{trans}/v_0)$ pour deux valeurs différentes du coefficient de l'énergie transféré f (f=0.8.et f=0.5).

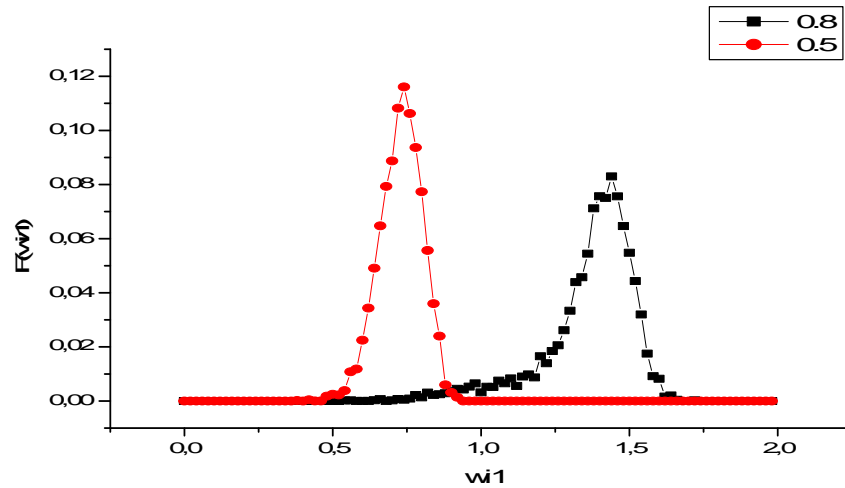


Figure III.7. : Distribution de vitesse F en fonction de $w_{i1}=(v_{trans}/v_0)$ pour $f=0.8$.et $f=0.5$

Le tableau III.5. Présente les vitesses les plus probables et les largeurs des fonctions de distribution des vitesses des ions incidents au niveau de h_1 après collisions pour les coefficients de l'énergie transféré $f= 0.8$ et $f = 0.5$.

Tableau III.5. : Vitesses les plus probables et largeurs des fonctions de distributions au niveau de h_1 après collisions

f	Δw_{i1}	V^*	F_{Max}
0.5	0.16939	0.731806	0.114438
0.8	0.21958	1.41666	0.078938

Remarque:

On remarque que la vitesse la plus probable V^* augmente lorsque le facteur faugmente. Dans ces conditions l'augmentation est de 48%.

III.3.3. Effet de la variation de la forme du potentiel électrique

Dans cette section, on étudie l'effet de la forme du potentiel électrique entre les deux électrodes. D'après la forme proposée dans le chapitre II.5.1, on fait les calculs pour d'autres valeurs de h_2 ($h_2=0.95 \cdot h_3$ et $h_2=0.15 \cdot h_3$).

On prend : $\Delta V=1500$; $f=0.5$.

Le tableau III.6 présente les distributions des vitesses F en fonction de $w_{i1}=(v_{trans}/v_0)$.

Tableau III.6: Distributions des vitesses F en fonction de $w_{i1}=(v_{trans}/v_0)$ pour différentes valeurs de h_2 .

h_2	Δw_{i1}	V^*	F_{Max}
$0.15 \cdot h_3$	0.20076	1.39784	0.084126
$0.95 \cdot h_3$	0.20076	1.44176	0.079275

La figure III.8 : distributions des vitesses F en fonction de $w_{i1}=(v_{trans}/v_0)$. Les deux distributions sont pratiquement superposables.

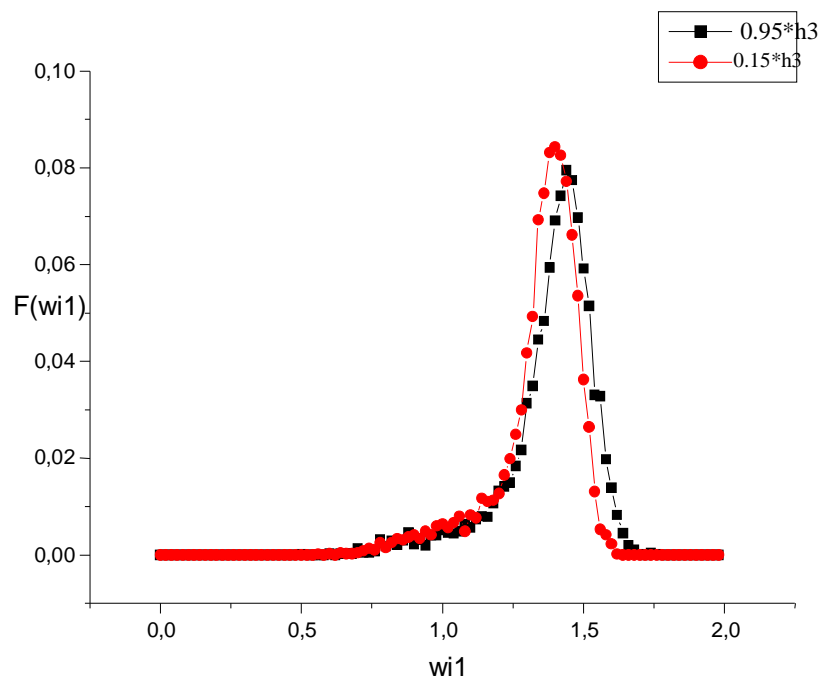


Figure III.8. : Distribution de vitesse F en fonction $w_{i1}=(v_{trans}/v_0)$ pour différentes valeurs de h_2 .

III.4. Distribution des vitesses pour la deuxième phase de la simulation (entre h_1 et h_0)

La figure III.9 présente la distribution des vitesses des ions d'argon entre h_1 et h_0 .

$w_{i2}=V_f/V_0$ où v_f présente la vitesse de la particule incidente et w_{i1} présente la vitesse réduite. V_0 est la vitesse unité définie au chapitre II. V^* présente la vitesse la plus probable de la distribution, Δw_{i2} présente la largeur de la distribution à mi-hauteur et F_{Max} présente la valeur maximale de la distribution pour V^* .

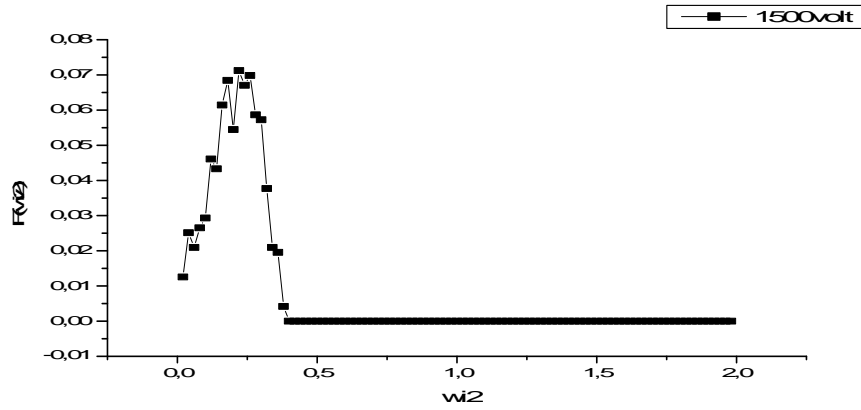


Figure III.9. : Distribution de vitesse F en fonction de $w_{i2}=(V_i/v_0)$ pour $\Delta V=1500V$

III.4.1. Distribution de vitesse des ions d'argon au niveau de la surface (effet du potentiel d'interaction des ions avec la surface).

Nous étudions l'effet du potentiel appliqué pour les conditions suivantes ΔV ;

$$f=0.5; h_2=0.2 * h_3.$$

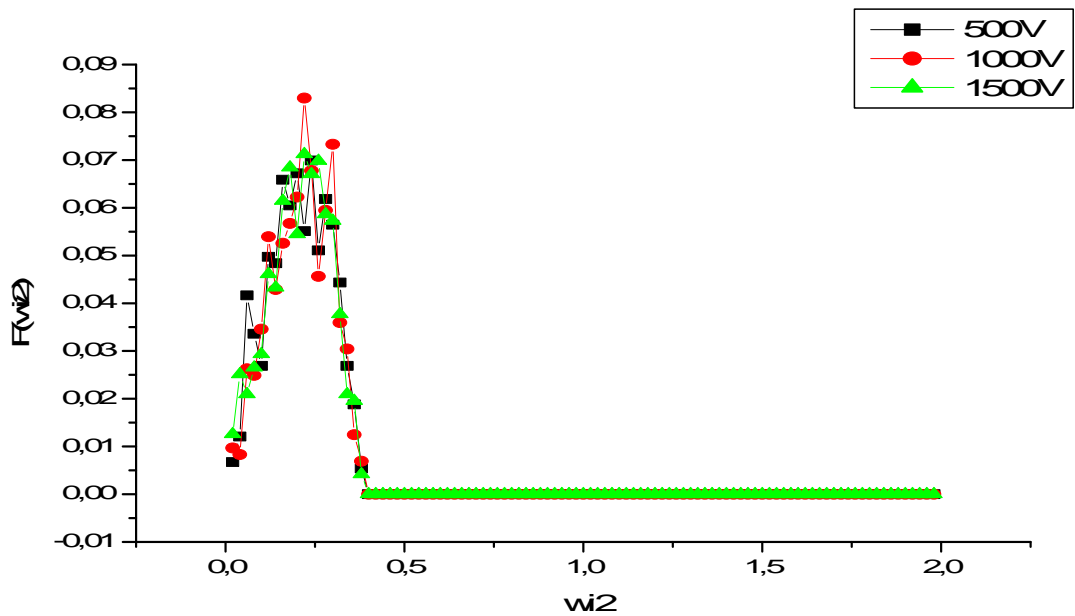


Figure III.10: Variation des distributions de vitesse des ions d'argon suivant les valeurs du potentiel appliquée

Le tableau III.7 présente les vitesses les plus probables et les largeurs des fonctions de distribution des vitesses des ions incidents au niveau de h_0 pour trois valeurs du potentiel électrique appliqué.

Tableau III.7. : Vitesses les plus probables et largeurs des fonctions de distributions au niveau de h_0

ΔV	500	1000	1500
Δw_{i2}	0.2251	0.21104	0,21807
V^*	0.23106	0.21266	0.21266
F_{Max}	0.070102	0.082921	0.071207

III.4.2. Effet de la variation de la forme du potentiel électrique

Nous étudions l'effet de la forme du potentiel électrique entre les deux électrodes. D'après la forme proposée dans le chapitre II.5.1, on fait les calculs pour $h_2=0.95 \cdot h_3$ et $h_2=0.15 \cdot h_3$.

On prend : $\Delta V=1500$; $f=0.5$

La figure III.11 distributions des vitesses F . Les trois distributions sont pratiquement superposables.

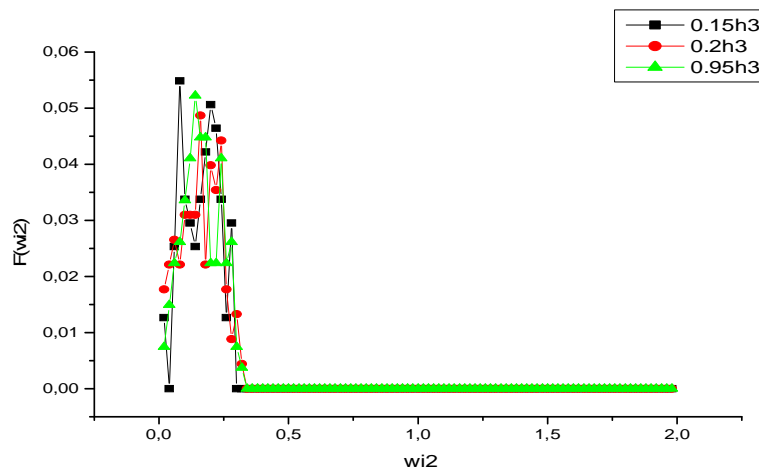


Figure III.11: Distributions des vitesses des ions d'argon suivant la forme du potentiel appliqué.

Le tableau III.8 présente les vitesses les plus probables et les largeurs des fonctions de distributions suivant la forme du potentiel pour trois valeurs différentes de la distance h_2 en fonction de h_3 .

Tableau.III.8: Vitesses les plus probables et largeurs des fonctions de distributions suivant la forme du potentiel

h_2	Δw_{12}	V^*	F_{Max}
$0.95 * h_3$	0.20075	0.12327	0.024299
$0.2 * h_3$	0.200749	0.19960	0.022452
$0.15 * h_3$	0.04392	0.15679	0.031498

III.5. Simulation de la troisième phase : Interaction avec la surface

La figure III.12 présente la distribution des vitesses des ions d'argon au niveau de h_0 .

$w_{i3} = V_{Si}/V_0$ où v_{Si} présente la vitesse de la particule incidente et w_{i1} présente la vitesse réduite. V_0 est la vitesses unité définie au chapitre II. V^* présente la vitesse la plus probable de la distribution, Δw_{i3} présente la largeur de la distribution à mi-hauteur et F_{max} présente la valeur maximale de la distribution pour V^* .

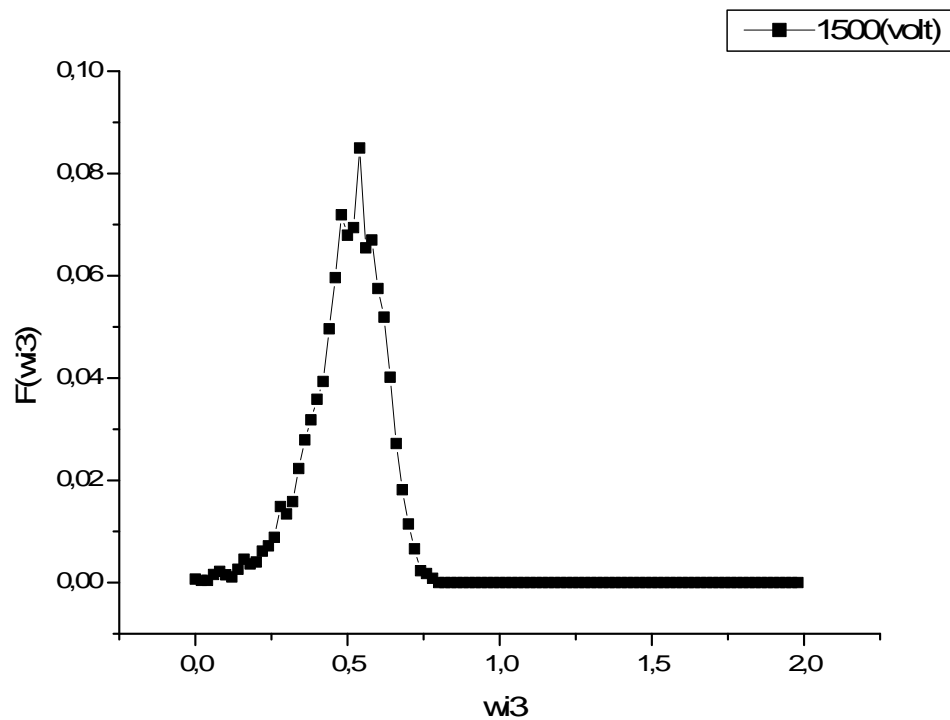


Figure III.12. : Distribution de vitesse F en fonction de $w_{i3} = (v_{Si}/v_0)$ pour $\Delta V = 1500V$

III.5.1. Distribution des vitesses des atomes de silicium éjectés

La figure III.13 présente la distribution de vitesse des atomes de silicium éjectés en fonction de $w_{i2}=(v_{Si}/v_0)$ pour différentes valeurs de la tension appliquée.

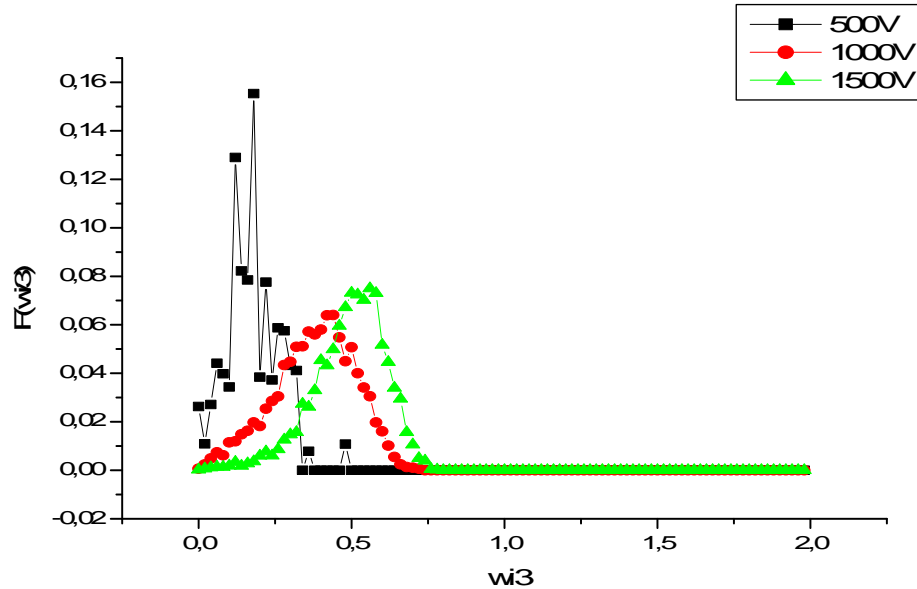


Figure III.13.: Distribution de vitesse des atomes de silicium éjectés en fonction de $w_{i2}=(v_{Si}/v_0)$ pour différentes valeurs de la tension appliquée

Le tableau III.9 présente les vitesses les plus probables et les largeurs des fonctions de distribution des vitesses des 'atomes de silicium au niveau de h_0 pour trois valeurs du potentiel électrique appliqué.

Tableau III.9: Vitesses les plus probables et largeurs des fonctions de distributions au niveau de h_0 des 'atomes de silicium

ΔV	500	1000	1500
Δw_{i3}	0.225851	0.27604	0.253039
V^*	0.17532	0.41708	0.47139
F_{Max}	0.15582	0.06702	0.085296

III.6. Rendement de pulvérisation

Le tableau III.10 présente la variation du rendement pulvérisation en fonction de la tension appliquée, le nombre total des ions d'argon incident est 10000. La figure III.14 présente cette variation.

Le rendement de pulvérisation est défini telle que :

$$\text{Rendement} = \frac{N_{Si}}{N_{\text{particules total}}}$$

Tableau.III.10: Variation du rendement de pulvérisateur en fonction de la tension appliquée (le nombre total des ions d'argon incident est 10000).

$\Delta V(\text{Volt})$	Nombre de réflexion	Nombre d'atomes éjectés N_{Si}	Nombre de collisions	rendement
500	4423	136	25	0.013
600	3743	869	23	0.086
700	2656	1932	21	0.193
800	1741	2881	19	0.288
900	1057	3545	18	0.354
1000	694	3898	18	0.389
1100	529	4038	18	0.408
1200	365	4180	17	0.418
1300	310	4312	17	0.431
1400	210	4332	17	0.433
1500	200	4377	17	0.437

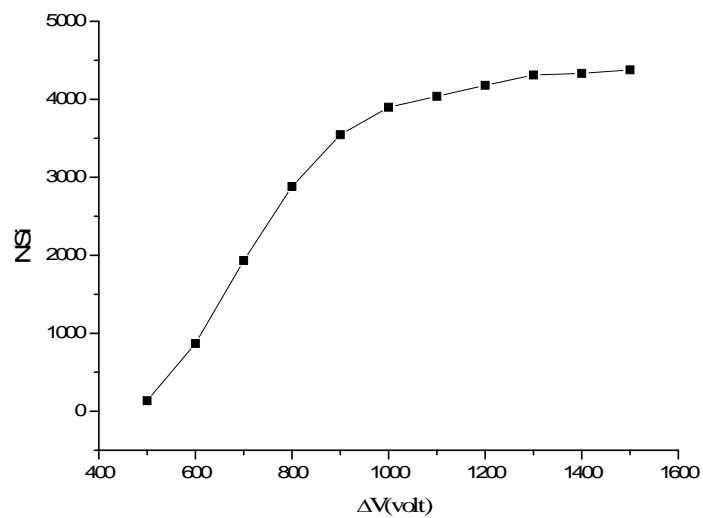


Figure III.14: Variation du nombre d'atome éjectés en fonction de la tension appliquée pour nombre total des ions d'argon incident égal à 10000

Remarque:

- ❖ Il y a augmentation du nombre d'atomes de silicium éjectés avec la tension appliquée. Pour les grandes valeurs de la tension, il ya saturation du rendement (45%).
- ❖ Le nombre moyen de collisions des ions dans la première phase diminue avec l'augmentation de la tension appliqué.

III.7. Correction du facteur de Boltzmann

Pour améliorer notre modèle de simulation de Monte Carlo, nous proposons l'utilisation du facteur de correction de Boltzmann. Cette étape n'a pas été finalisée correctement pour ce mémoire

Conclusion générale et perspectives

Le procédé de pulvérisation cathodique est une méthode qui permet de réaliser des couches minces avec une grande vitesse et avec un rendement considérable. L'amélioration de ces couches minces nécessite la connaissance des paramètres et la compréhension des phénomènes du plasma utilisé et les conditions expérimentales.

Dans ce mémoire de Master, nous nous intéressons à l'interaction entre les ions d'un plasma froid de décharge en régime DC dans la chambre de déposition. La méthode de Monte Carlo, comme technique de simulation, permet l'étude des phénomènes en question. Elle a l'avantage d'étudier les propriétés physiques stationnaires et non stationnaires. Dans cette étude nous nous intéressons particulièrement aux collisions binaires entre les particules du plasma et entre les ions d'argon avec la cible.

Nous avons présenté la technique de simulation numérique de Monte Carlo pour l'étude du phénomène. Elle comporte la formulation du problème, son analyse physique et mathématique et la description de la méthode de modélisation. Nous avons proposé des déplacements aléatoires suivant une distribution gaussienne pour les ions incidents d'argon. Pour l'interaction avec la surface nous avons proposé le potentiel de Molière.

- ❖ Nous avons calculé distributions des vitesses des ions incidents et les grandeurs statistiques de certaines quantités macroscopiques comme le rendement et le flux des particules pulvérisées. L'influence de différents paramètres (potentiel électrique appliqué, coefficient d'énergie transférée, forme du potentiel électrique, etc. ...) sur les différentes distributions et grandeurs statistiques est étudiée, on remarque que les distributions sont pratiquement superposables, il y a saturation du rendement (45%).

Pour les perspectives nous proposons :

- Etude de la simulation pour des vitesses à trois directions et calcul des distributions angulaires.
- Etude plus avancée de l'effet de correction de Boltzmann.
- Etude plus avancée des collisions binaires des ions entre eux et des collisions en cascade avec la cible.

Références

- [1] E. Baronne and B. Graves ; Molecular dynamics simulations of plasma-surfaces chemistry ; Plasma Sources Sci. Technol. Vol. **5**, pp 187-192 (1996)
- [2] I. Guesmi ;’’ Dépôt de couches minces de cuivre sur substrats polymère de formes complexes par pulvérisation cathodique magnétron avec ionisation de la vapeur’’ ; Thèse de doctorat; Université Paris Sud – XI ; (2012).
- [3] D. Benyoucef ;’’ Modélisation particulaire et multidimensionnelle des décharges hors équilibre à basse pression excitées par champs électromagnétiques’’; Thèse de Doctorat ; Université de Toulouse, (2011).
- [4] C. Tendero ; ‘’ Torche plasma micro-onde à la pression atmosphérique : application au traitement de surfaces métalliques’’, Thèse de doctorat, Université de Limoges (2005).
- [5] R. Fitzpatrick ; ‘’Introduction to Plasma Physics’’, PHY380L, spring, the University of Texas, pp 6-11, (1998).
- [6] H. O. Kebaili ; ‘’Contribution à l’étude par la simulation numérique de Dynamique Moléculaire de la croissance des couches minces par procédé PECVD’’ ; Mémoire Magister ; Université de Ouargla (2013).
- [7] J. L. Delcroix et A. Bers ; " Physique des plasmas 1"; Inter Editions, Paris (1994).
- [8] P. Aubreton ;’’Simulation de la méthode de Monte Carlo des phénomènes physiques intervenant dans l’élaboration de films réalisés par co-évaporation par faisceaux d’électrons’’ ; Thèse doctorat ; Université de Limoges (2005)
- [9] I. Sabelle Savin de La Clause ;’’Dépôt organosilicie par plasma froid basse pression et pression atmosphérique sur substrats microstructures ‘’; Thèse de doctorat; Université de Toulouse ‘Paul Sabatier –Toulouse III ; (2008).
- [10] Site web : www.memoireonline.com ; Consulté le 10 février 2016

- [11] O. Babahani ; “Simulation numérique par la méthode de Monte Carlo de la déposition de couches minces par procédés CVD “; Thèse doctorat, Université de Ouargla, (2013).
- [12] O. Babahani ;”Contribution à l’étude des plasmas lors de déposition sur couches minces par procédés CVD” ; Mémoire de Magister, Université de Ouargla, (2004).
- [13] F. Oudrhiri Hassani ; “Couches minces d’oxydes spinelles et de nanocomposites spinelle-CuO à propriétés semi-conductrices destinées à la réalisation de capteur de gaz” ; Thèse de doctorat; Université de Toulouse, (2009).
- [14] Y. Benzahi ; “Simulation numérique par la dynamique moléculaire de l’interaction plasma-surface lors de déposition des couches minces; Mémoire de magister” ; Université de Ouargla ; (2003).
- [15] E. Ferkousa Zaatr ; “Etude de la micro dureté des outils de coupe par pulvérisation magnétron” ; Thèse de doctorats ; Université Mentouri Constantine; (2002).
- [16] J. -L. Raimbault ;”Introduction à la Physique des Plasmas”, Université Paris-Sud 11, 2012 – 2013 .
- [17] C. E. Chiteur;" Physico-chimie des surfaces l’adsorption gaz-solide et liquide-solide"; Office des Publications Universitaires, Alger (2004).
- [18] W.D.Wilson, L.G. Haggmark, J.P. Biersak; Phys. Vol. **15**, 2458, (1977).
- [19] M. P. Allen and D. J. Tildesley ; Computer Simulation of Liquids ; CLARENDON PRESS-OXFORD (1987).
- [20] H. Khachab ; Modélisation de croissance épitaxiale par jets moléculaires (MBE) avec la méthode de monte de Monte Carlo Cinétique (KMC) ; Thèse de Doctorat; Université de Tlemcen, (2010).
- [21] J. Pierre Hansen and Jan R. Mc Donald ; Theory of Simple liquids ; LONDON (1976).
- [22] J. J. Rousseau et A. Gibaud ; cristallographie géométrique et radiocristallographie ; Paris, 2000, 2007.

[23] M. Mojtahedzadeh Larijani ; ‘‘Mise au point d’un procédé de CVD activé par filaments chauds et plasma de décharge pour la nucléation du diamant. Etudes paramétrique et cinétique’’; Thèse de Doctorat; Institut de Physique et de Chimie des Matériaux de Strasbourg, (ANNEE).

[24] F. Khelfaoui ; 'Spectroscopie et profils de raies spectrales' ; Cours de Master Phys. de Rayonnement ; Université de Ouargla (2012).

[25] F. Khelfaoui ; 'Méthodes et Simulations Numériques / Chapitre II', Cours de Magister ; Université de Ouargla, (2006-2007).

ملخص :

من اجل توضع الطبقات الرقيقة بطريقة PVD. اقترحنا نموذج محاكاة لمونتي كارلو للتصادمات الثنائية للجزيئات أثناء عملية الرش المهبطي بنظام DC. باستعمال لغة الفورتران و اختيار كمون موليير لتفاعل بلازما - سطح ' قمنا بحساب توزيع السرعات بتأثير التصادم قبل وصول الايونات الى السطح و عند الهدف و توزيع السرعات لذرات السيليسيوم المقذولة واحصاء الايونات الممتصة والمنعكسة و احصاء مردود الرش. كما قمنا بدراسة تأثير مختلف عوامل (الكمون الكهربائي - معامل تبادل الطاقة - شكل الكمون الكهربائي) على دوال التوزيع و المقادير الاحصائية.

الكلمات المفتاحية: توضع ' طبقات الرقيقة ' سيليسيوم ' طريقة مونتي كارلو ' تصادمات ثنائية ' محاكاة عديدة

Résumé :

Pour l'étude de la déposition de couches minces par procédé PVD, nous avons proposé la simulation de Monte Carlo des collisions binaires entre particules dans un pulvérisateur cathodique en régime DC. En utilisant le langage de Fortran et en utilisant le potentiel de Molière pour l'interaction plasma-surface, nous avons calculé plusieurs grandeurs statistiques. Les distributions des vitesses calculées sont celles des ions d'argon près de la surface et au niveau de la surface ainsi que celle des atomes de silicium éjectés. La statistique sur le rendement de pulvérisation est calculée. L'influence de différents paramètres (potentiel électrique appliqué, coefficient d'énergie transférée, forme du potentiel électrique, etc. ...) sur les différentes distributions et grandeurs statistiques est étudiée.

Mots clés: déposition, couches minces, silicium, méthode Monte Carlo, collisions binaires, simulation numérique.

Summary:

For the study of the deposition of thin films by PVD process, we proposed the Monte Carlo simulation of binary collisions between particles in a sputter in DC regime. Using the FORTRAN language and using the Molière potential for plasma surface- interaction, we calculated several statistical quantities. Distributions calculated speeds are those of the argon ions near the surface and at the surface as well as the ejected silicon atoms. Statistics on spray performance is calculated. The influence of various parameters (applied electrical potential, energy coefficient transferred shape of the electric potential, etc ...) on different distributions and statistical quantities is studied.

Keywords: deposition, thin film silicon, Monte Carlo method, binary collisions