

SIMULATION D'UNE DECHARGE LUMINESCENTE CONTINUE DANS UN GAZ PLASMA PAR LA METHODE DES VOLUMES FINIS

Amel BERKANE, Saida REBIAI et Salah SAHLI

*Laboratoire de Microsystèmes et Instrumentation, Université Mentouri de Constantine, Constantine,
Algérie*

E-mail: amel.berkane@yahoo.fr, s_rebiai@yahoo.fr

RÉSUMÉ : Le but du travail présenté dans cet article est une description d'une méthode numérique permettant la résolution des équations du plasma. Les équations utilisées dans cette étude sont les trois premiers moments de l'équation de transport de Boltzmann. Un modèle fluide est appliqué pour étudier les caractéristiques électriques d'un gaz plasma et contribuer à la compréhension du comportement de la décharge plasma en utilisant un schéma numérique de discrétisation, prenant en considération la discrétisation de l'équation de continuité (conservation de particules) pour les électrons et les ions et la discrétisation de l'équation de transfert de quantité de mouvement. Ces deux équations sont couplées avec l'équation de poisson pour la détermination du champ électrique responsable de la décharge plasma. Le modèle est établi en FORTRAN et les résultats de la simulation sont en accord avec la littérature.

MOTS-CLÉS : plasma, modèle fluide, schéma numérique, discrétisation

1. Introduction :

Les procédés de traitement de matériaux par plasma froid se sont développés ces dernières décennies, vu l'intérêt qu'ils accordent aux industries de la microélectronique telles que le nettoyage des surfaces de silicium et le dépôt de couches minces diélectriques pour la passivation des surfaces. Cette technologie intéresse des secteurs aussi divers que la micro électronique [1, 2, 3] tels que la métallurgie, l'industrie agroalimentaire, l'automobile, l'espace, le secteur médical etc. L'intérêt croissant de ces procédés vient du fait que l'activation électrique permet le traitement à des températures du gaz et surtout du substrat beaucoup plus basses que l'activation thermique classique. Le progrès de la connaissance scientifique et des ordinateurs a encore permis d'expliquer les phénomènes se déroulant en phase gazeuse dans un réacteur plasma. C'est en effet en couplant une approche théorique numérique et une approche expérimentale que nous serons à même de maîtriser un procédé aussi mystérieux sur bien des aspects. La structure de la décharge est complexe [4] et inclut un grand nombre de particules réactives et non réactives, ainsi que des neutres. Il existe différentes approches numériques permettant de décrire les différents composants du plasma : simulations de modèles analytiques [3], modèles fluides [4], Monte Carlo [5], particule in cell (PIC-MC) [6] et modèle hybride [7]. Tous ces modèles ont leurs avantages spécifiques et inconvénients et sont particulièrement utiles pour certaines conditions. Les modèles fluides sont particulièrement utiles pour décrire la chimie du plasma quand un grand nombre d'espèces différentes et de réactions est pris en considération [3]. Le modèle fluide est basé sur les trois premiers moments de l'équation de Boltzmann (équations de continuité de la densité de particules, densité de la vitesse et densité de l'énergie). Le transport est basé sur la diffusion et la dérive sous l'influence du champ électrique pour les particules chargées (ions, électrons). En outre, une équation d'énergie est incorporée pour les électrons. Les autres espèces du plasma (ions, radicaux, molécules et atomes) sont supposées être en équilibre

thermique, toutes ces équations sont associées à l'équation de Poisson pour obtenir la distribution du potentiel.

Les coefficients du transport (vitesse de déplacement, coefficient de diffusion et coefficient d'ionisation), lesquels sont impliqués dans ces équations, dépendent de la fonction de distribution en énergie de la vitesse locale inconnue et il est nécessaire de limiter le système d'équations par les quelques suppositions adéquates suivantes: la fonction de distribution de la vitesse locale dépend seulement du champ électrique local connu comme approximation du champ local. Cette approche est adéquate pour décrire le transport dans la région plasma. Dans ce travail un modèle fluide est proposé. Une méthode numérique, permettant de résoudre les équations le gouvernant, est décrite. Les études dans le cas de la décharge lumineuse continue sont données pour illustrer le modèle. L'analyse et la compréhension de la décharge fournissent une extension sur les décharges RF plus complexes.

2. Modèle

Le modèle présenté est basé sur les suppositions suivantes: (1) Dans la décharge, l'ionisation est restreinte aux molécules neutres du gaz. Les collisions électron-électron et électron-ion sont négligeables; (2) la distribution est maxwellienne; (3) la température de l'ion est prise égale à celle du gaz; (4) dans l'effort présent, seulement une ionisation est considérée. Les équations utilisées dans cette étude sont les trois premiers moments de l'équation de transport de Boltzmann qui s'écrit dans le cas général :

$$\frac{\partial f_p}{\partial t} + \vec{v}_p \cdot \vec{\nabla}_r f_p + \frac{\vec{F}_p}{m_p} \cdot \vec{\nabla}_v f_p = \frac{\delta f_p}{\delta t} \quad (1)$$

où \vec{v}_p est le champ des vitesses des particules chargées (électron et/ou ion), r est la coordonnée spatiale; F_p représente les forces extérieures appliquées à la particule p de masse m_p ; (f_p) est la fonction de distribution de la particule p dans l'espace des phases à six dimensions (x, y, z, v_x, v_y, v_z) dont l'intégration dans l'espace des vitesses permet d'accéder à la valeur moyenne de la densité d'espèces $n(r,t)$ présentes dans la décharge et de leur vitesse locale relative $v(r, t)$ (eq. 2,3).

$$n(\vec{r}, t) = \int_v f(\vec{r}, \vec{v}, t) dv \quad (2)$$

$$\vec{v}(\vec{r}, t) = \frac{\int \vec{v} \cdot f(\vec{r}, \vec{v}, t) \cdot d\vec{v}}{\int_v f(\vec{r}, \vec{v}, t) \cdot d\vec{v}} \quad (3)$$

Les équations de la continuité, de quantité de mouvement et d'énergie sont:

$$\frac{\partial n_e}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot (n_e \cdot \vec{v}_e) = S_e \quad (4)$$

$$\frac{\partial n_i}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot (n_i \cdot \vec{v}_i) = S_i \quad (5)$$

$$\frac{\partial n_e m v_e}{\partial t} + \nabla \cdot (n_e \cdot m v_e v_e) + \nabla p_e = -e E n_e - n_e m v_e v_m \quad (6)$$

$$\frac{\partial w_e}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot (v_e \cdot w_e) + \nabla \cdot (p_e v_e) + \nabla Q_e = -e E n_e v_e - n_e \sum_k \epsilon_k v_k \quad (7)$$

$$S_e = S_i = n_e \nu_i = KNn_e \quad (8)$$

K est le coefficient de taux de réactions

N est le nombre de molécules du gaz précurseur

$P_e = n_e k_B T_e$ (9) est la pression électronique

ν_m est la fréquence de collision avec les molécules du gaz

$$w_e = n_e \left(\frac{1}{2} m v_e^2 + \frac{3}{2} k_B T_e \right) \quad (10)$$

où w_e est l'énergie totale

L'équation de Poisson:

$$\nabla \vec{E} = -\Delta \phi = \frac{e}{\epsilon_0} (n_i - n_e) \quad (11)$$

Les équations (4) et(5) représentent respectivement les densités d'électrons et d'ions positifs. Les notations suivantes ont été utilisées $n_{e,i}$ respectivement: densité de l' électron et de l'ion, v ; vitesse de la particule, m ; masse de la particule, T ; la température de la particule, P ; pression partielle, ϕ ; le potentiel, ν_i ; la fréquence d'ionisation, w_e ; énergie totale de la particule, Q_e ; le flux de chaleur, ϵ_k ; l'énergie de collision entre électron et particule, ν_k ; la fréquence moyenne de la collision, e ; charge de la particule, ϵ_0 ; permittivité du vide et K ; la constante Boltzmann.

Le dernier terme dans les équations (4) et(5) représente le processus d'ionisation. Le flux de l'équation de la vitesse obtenu par l'approximation derive- diffusion est donné par:

$$\Gamma_p = \text{sgn}(q_p) \mu_p E n_p - D_p \nabla n_p \quad (12)$$

Le premier terme donne le flux dû au champ électrique (mouvement de dérive) et le deuxième représente le flux dû au gradient de concentration (diffusion).

Nous supposons que les coefficients de transport des particules chargées satisfont la relation d'Einstein [8]:

$$D = \frac{k_B T \mu}{e} \quad (13)$$

Le coefficient de diffusion de l'ion est calculé en fonction de la mobilité par la relation d'Einstein (Equation 13) où la température de l'ion est donnée par [8]:

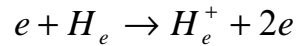
$$k_B T = k_B T_g + \frac{m + m_g}{5m + 3m_g} m_g (\mu E)^2 \quad (14)$$

T_g est la température du gaz ; m et m_g sont respectivement les masses de l'ion et de la particule du gaz. Les coefficients de transport de l'électron sont fonctions de l'énergie:

$$\mu_e = \mu_e(\bar{\epsilon}), D_e = D_e(\bar{\epsilon}) \quad (15)$$

$$k_B T_e = \frac{2}{3} \bar{\epsilon} \quad (16)$$

Dans le travail présenté, une décharge DC dans une atmosphère d'hélium est simulée. La réaction prise en considération dans la simulation est: [9]



L'énergie de seuil pour le processus d'ionisation étant de 24.58eV [9].

Cette réaction a été conçue pour décrire le comportement électrique des décharges microscopiques dans les mélanges hélium-hydrogène avec un pourcentage d'hydrogène inférieur à 5%.

L'ensemble des équations décrit précédemment a été résolu avec les conditions aux limites suivantes:

$\phi=0$ sur l'anode

$\phi = -250$ V sur la cathode.

Au niveau des électrodes la densité des particules chargée est considérée nulle. Le coefficient de l'émission secondaire est négligé.

Pour le temps $t = 0$ on a $n_e = n_i = 10^{10} \text{ cm}^{-3}$.

3. Méthode numérique

Dû aux problèmes de non linéarité et d'interdépendance des équations (4), (5), (11) et (12), le traitement de ces équations est un problème numérique difficile. Une solution monodimensionnelle est approchée. Dans le travail présent, les équations de continuité et de Poisson sont résolues avec une discrétisation par la méthode des volumes finis.

Dans les résultats présentés ci-dessous, les paramètres de transport ont été pris de la littérature [8]. Les coefficients de diffusion sont supposés constants tels que $D_e = 2.74 \times 10^4 \text{ cm}^2/\text{s}$ et $D_i = 3.029 \text{ cm}^2/\text{s}$. La pression est de 200 Torr et la température du gaz est supposée être constante et égale à 300 K.

4. Résultats

La figure1 présente le profil des variations spatiales de la densité des particules chargées dans un espace inter-électrodes très petit. La densité de l'ion augmente lentement depuis la cathode jusqu'à l'anode. Ce comportement peut être expliqué par la diffusion rapide de l'électron vers l'anode. La figure 2 montre le profil des espèces chargées pour différents pas du temps. Une bonne corrélation apparaît entre la distribution des espèces chargées et le profil du champ électrique. Cela est illustré sur la figure3.

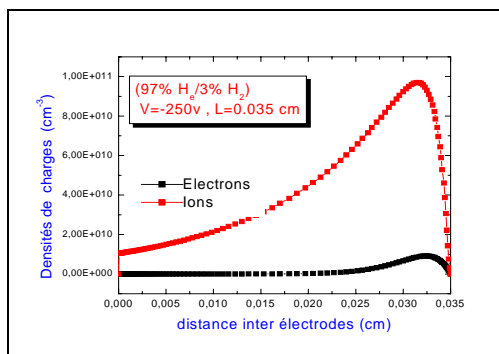


Fig.1: variation spatiale de la densité des particules chargées

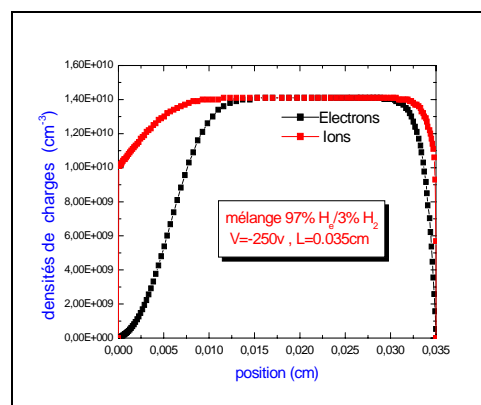


Fig.2: Variation spatiale de la densité des particules chargées avec la réduction du pas du temps.

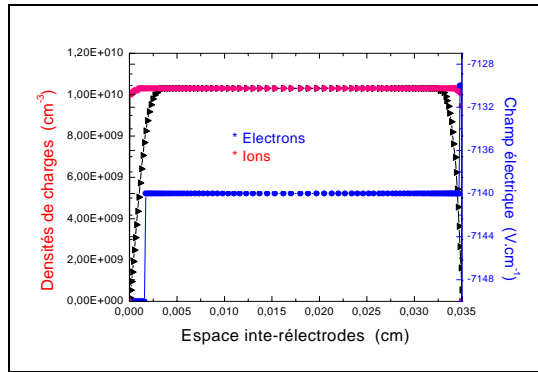


Fig.3: Corrélation entre la variation spatiale des particules chargées et le profil du champ électrique.

La figure 4 montre le profil de la densité des électrons dans le cas du mélange He / H₂ avec un taux d'hydrogène inférieur à 5 %.

Pour les figures 5, 6, 7,8 ; nous avons étudié la variation du champ électrique et du potentiel en fonction des différentes valeurs de la distance et de la pression. Les données pour la simulation sont prises de la littérature [10]. La distribution du champ électrique pour différentes valeurs de la pression est illustrée sur la figure 5. L'effet de l'espace inter-électrodes sur la variation du champ électrique est représenté sur La figure 6. Les figures 7 et 8 représentent l'effet de l'espace inter électrode et de la pression du gaz sur le potentiel.

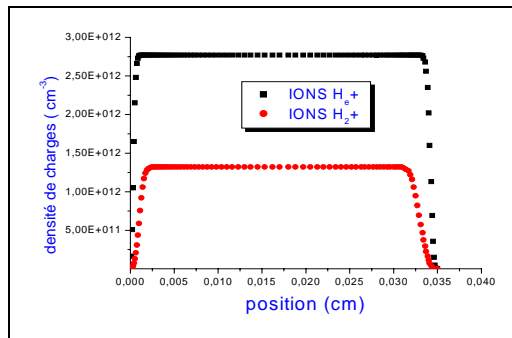


Fig. 4: profil des densités des ions Hydrogène et Hélium.

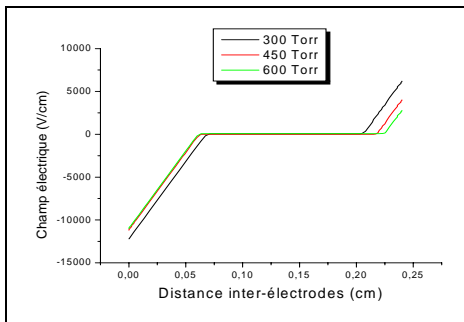


Fig.5 Profil du champ électrique pour différentes valeurs de pression.

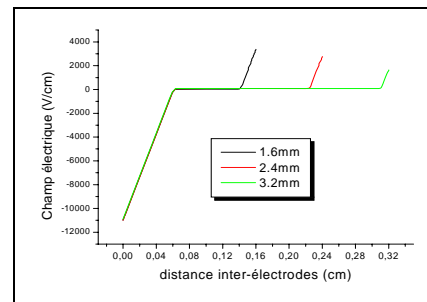


Fig.6 Profil du champ électrique pour différentes distances inter électrodes avec P=600Torr

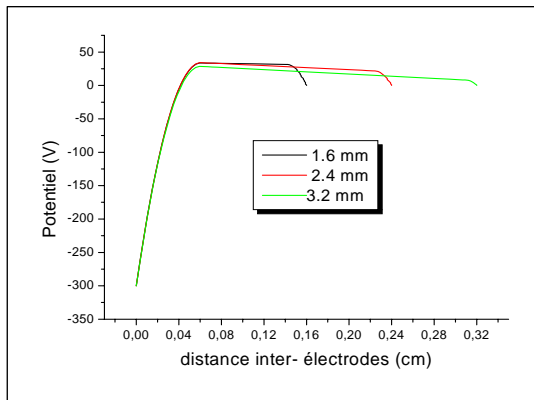


Fig.7 Profil du potentiel électrique pour différentes distances inter- électrodes, avec P=600Torr.

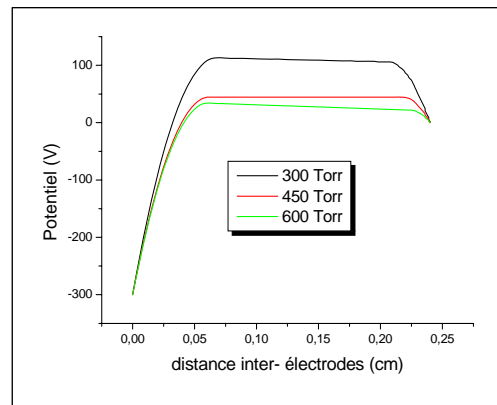


Fig.8 Profil du potentiel électrique pour différentes valeurs de pression du gaz.

Références

- [1]: J. P. Boeuf, "A Two-dimensional model of dc glow discharges," J. Appl. Phys. 63(5), 1 March 1988.
- [2]: M. Meyyappan and J. P. Kreskovsky, "Glow discharge simulation through solutions to the moments of the Boltzmann transport equation," J. Appl. Phys. 68(4), 15 August 1990.
- [3]: Annemie Bogaerts, Kathleen De Blecker, Ivan Kolev, Myriam Madani, "Modeling of gas discharge plasmas: What can we learn from it?" Surface & Coatings Technology 200 (2005) 62-67.
- [4]: J. P. Boeuf, "Numerical model of rf glow discharges," Physical Review A, Volume 36, Number 6, September 15, 1987.
- [5]: Phillip J. Stout and Mark J. Kushner, "Monte Carlo Simulation Of Surface Kinetics During Plasma Enhanced Chemical Vapour Deposition Of SiO₂ Using Oxygen / Tetraethoxysilane Chemistry," J. Vac. Sci. Technol. A 11(5), Sep/ Oct 1993.
- [6]: T. E. Nitschke and D. B. Graves, "A comparison of particle in cell and fluid model simulations of low- pressure radio frequency discharges," J. Appl. Phys. 76(10), 15 November 1994
- [7]: Han-Ming Wu, "Two dimensional hybrid model simulation and validation for radio frequency inductively coupled oxygen plasma," Plasma Sources Sci. Technol. 9 (2000) 347-352. Printed in the UK
- [8]: G. J. M. Hagelaar, F. J. de Hoogand, G. M. W. Kroesen, "Boundary conditions in fluid models of gaz discharges," Physical Review E. Volume 62, number1, July 2000, 1452-1454
- [9]: G. J. M. Hagelaar, G. M. W. Kroesen, "Modelling of the micro discharges in plasma addressed liquid crystal displays," J. Appl. Phys. Vol. 88, N° 5, 1 September 2000, 2252-2262
- [10]: Xiaohui Yuan and Laxminarayan L. Raja, IEEE Transactions on Plasma Science, VOL. 31, No. 4, August 2003