

N^o d'ordre :
N^o de série :

UNIVERSITE KASDI MERBAH OUARGLA
FACULTE DES MATHÉMATIQUES
ET DES SCIENCES DE LA MATIÈRE
Département de physique



Mémoire

MASTER ACADEMIQUE

Domaine : Sciences de la Matière

Filière : Physique

Spécialité : Rayonnement et Spectroscopie et Optoélectronique

Présenté par : HADJADJ Saida

Thème

*Calcul par la méthode de Monte Carlo des
probabilités de la réactivité à la surface lors de la
déposition d'une couche mince a-Si:H par le procédé
PECVD*

Soutenu publiquement

Le : 28 / 05 /2015

Devant le jury composé de :

Pr CHIHI Smail	Prof.	Président	UKM OUARGLA
Mme LEMKEDDEM Soumaya	MAA	Examineur	UKM OUARGLA
Dr BABA HANI Oumelkheir	MCB	Rapporteur	UKM OUARGLA
Pr KHELFAOUI Fethi	Prof.	Co-Encadreur	UKM OUARGLA

Année Universitaire : 2014/2015

Dédicaces

Je dédie le présent mémoire à :

*Ma mère, et mon père et mon mari qui m'ont
toujours soutenu affectivement et moralement,
à réaliser ce travail, ainsi que mes frères et
mes sœurs pour leur soutien,*

À toute ma famille et mes amies.

A eux, je dédie 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 Dr Oumelkheir BABAHANI et mon co-Encadreur Pr Fethi KHELFAOUI, pour m'avoir constamment guidé tout le long de mon projet et pour les précieux conseils qu'ils m'ont donné, et pour leurs serviabilités, leurs disponibilités et leurs conseils constructifs.

Je tiens à remercier, le président de jury Pr Smail CHIHI et l'examinatrice Mme Soumaya LEMKEDDEM pour l'honneur qu'ils m'ont fait en acceptant de juger ce travail.

Je remercie également tout 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, leurs 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 : Yasmina, Halima, Zineb, Nour, Faïza, Radia, Salima et Kanza.

SOMMAIRE

Dédicaces.....	I
Remerciements.....	Ii
Sommaire.....	Iii
Liste des figures.....	V
Liste des tableaux.....	Vi
Introduction générale.....	1
<u>CHAPITRE I : GENERALITES SUR LES COUCHES MINCES ET ENTERACTION</u>	
<u>PLASMA-SURFACE</u>	
I. Introduction.....	2
I.1 Définition d'une couche mince.....	2
I.2 Intérêt et caractéristique des couches minces.....	3
I.2.1 Méthodes générales de dépôt des couches minces	4
I.2.1.1 Dépôts physiques en phase vapeur (PVD).....	4
I.2.1.2 Dépôt chimique en phase vapeur (CVD).....	4
I.2.1.3 Les étapes de la déposition CVD.....	5
I.3 Silicium monocristallin	6
I.3.1 Le silicium amorphe hydrogéné	7
I.3.1.1 L'adsorption.....	7
I.3.2 L'adsorption chimique	7
I.3.3 L'adsorption physique	7
I.4 . La désorption.....	8
I.4.1 Les mécanismes de désorption	8
I.4.2 Mécanisme de Langmuir-Hinshelwood (LH).....	8
I.5 Mécanisme d'Eley-Rideal (ER).....	8
I.6 mécanisme de harris-kasemo	9
I.7 Description générale Dépôt chimique en phase vapeur assistés par plasma PECVD	9
I.7.1 La probabilité de réactivité à la surface (SFRP)	10
I.8 Le Potentiel d'interaction entre les particules neutre est une surface.....	11
I.8.1 Groupes de potentiels d'interaction	12
I.8.1 Potentiels coulombiens écrantés	12
I.8.2 Potentiels attractifs	13

I.9 La méthode de Monte Carlo (MC).....	14
I.9.1 Définition de la méthode de Monte Carlo.....	14
I.9.2 Avantages des techniques Monte Carlo.....	15
I.9.3 Algorithme de Monte Carlo Metropolis.....	15
<u>CHAPITRE II: MODELISATION NUMERIQUE</u>	
I Introduction.....	16
II.1 Définition du phénomène physique.....	16
II.2 Organigramme pour calculer les probabilités de réactivité sur site.....	18
II.3 Organigramme pour calcul les probabilité de la réactivité à la surface.....	20
<u>CHAPITRE III: RESULTATS ET DISCUSSION</u>	
III.1 Calcul des probabilités de la réactivité par procédé PECVD sur un site des radicaux SiH_x	22
III.2 .Calcul des probabilités de la réactivité à la surface des radicaux SiH_x par méthode MC.....	25
Conclusion générale et perspectives	34
Références	35
Résumé	

Liste des figures

Figure I.1 : Les étapes du procédé de fabrication de couches minces.....	3
Figure I.2 : Principe de l'évaporation thermique.....	4
Figure I.3 : Les étapes de déposition CVD	5
Figure I.4:Structure cristallographique du silicium monocristallin	6
Figure I.5: Représente un modèle de l'atome de silicium si le long du plan (111).....	6
Figure I.6 : Structure de silicium amorphe hydrogéné	7
FigureI.7: Réacteur de dépôt CVD assisté par plasma (PECVD).....	10
FigureI.8: Allure du potentiel.....	11
Figure II.1: Organigramme de calcul de la probabilité de réactivité sur un site.....	19
FigureII.2: Organigramme de calcul de la probabilité de réactivité à la surface	21
Figure III.1: Variation de probabilité P_s en fonction de la température du gaz pour (SiH_3) et une énergie d'activation $E_a = 0.09$ eV	22
Figure III.2 : Variation de probabilité P_γ en fonction de la température du gaz pour (SiH_3) et une énergie d'activation $E_a = 0.2$ eV.....	23
Figure III.3 : Variation de probabilité P_s (SiH_2 , SiH) en fonction de la température du gaz pour (SiH_2 , SiH) et une énergie d'activation $E_a = 0.1$ eV.....	23
Figure III.4 : Variation de probabilité P_s en fonction de la température du gaz pour(H) et une énergie d'activation $E_a = 0.1$ eV	24
Figure. III.5 : Variation de probabilité P_γ en fonction de la température du gaz pour (H) et une énergie d'activation $E_a = 0.1$ eV.....	24
Figure III.6: Résultats de simulation MC des probabilités de réactivité de SiH_3	25
Figure III.7 : Variation de la probabilité S de(SiH_3), en fonction de T , pour la densité électronique $n_e = 10^{18} m^{-3}$ et température électronique $T_e = 2.5eV$	25
Figure III.8 : Variation de la probabilité γ de (SiH_3) en fonction de T , pour $n_e = 10^{18} m^{-3}$ et $T_e = 2.5eV$	26
Figure III.9 : Variation de la probabilité β de (SiH_3) en fonction de T , pour $n_e = 10^{18} m^{-3}$ et $T_e = 2.5eV$	26
Figure III.10 : Variation de probabilité S de (SiH_2) en fonction de T , pour $n_e = 10^{18} m^{-3}$ et $T_e = 2.5eV$	27
Figure III.11 : Variation de probabilité γ de(SiH_2) en fonction de T , pour $n_e = 10^{18} m^{-3}$ et $T_e = 2.5eV$	27
Figure III.12 : Variation de probabilité β de (SiH_2) en fonction de T , pour $n_e = 10^{18} m^{-3}$ et $T_e = 2.5eV$	28
Figure III.13 : Variation de probabilité S de(SiH) en fonction de T , pour $n_e = 10^{18} m^{-3}$ et $T_e = 2.5eV$	28
Figure III.14 : Variation de probabilité γ de (SiH) en fonction de T , pour la $n_e = 10^{18} m^{-3}$ et $T_e = 2.5eV$	29
Figure III.15 : Variation de probabilité β de (SiH) en fonction de T , pour $n_e = 10^{18} m^{-3}$ et $T_e = 2.5eV$	29
Figure III.16 : Variation de probabilité S de (H) en fonction de T , pour $n_e = 10^{18} m^{-3}$ et $T_e = 2.5eV$	30
Figure. III.17 : Variation de probabilité γ de(H) en fonction de T , pour $n_e = 10^{18} m^{-3}$ et $T_e = 2.5eV$	30
Figure III.18 : Variation de probabilité β de(H) en fonction de T , pour $n_e = 10^{18} m^{-3}$ et $T_e = 2.5eV$	31
Figure III.19 : Variation de taux hydrogéné en fonction de la température, pour $n_e = 10^{18} m^{-3}$ et $T_e = 2.5eV$	31

Liste des tableaux

Tableau III.1 : Les valeurs des énergies d'activation des radicaux	22
Tableau III.2 : Les valeurs des probabilités de réactivité à la surface en fonction des températures électroniques, pour $T=300\text{K}$, $n_e = 1 \cdot 10^{15} \text{ m}^{-3}$	32
Tableau III.3 : Les valeurs des probabilités de réactivité à la surface en fonction des densités électroniques, pour $T=300\text{K}$, $T_e = 2.4\text{eV}$	32



Introduction générale

Introduction générale

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

Les couches minces peuvent être élaborées, entre autres, par des procédés chimiques en phase vapeur (Chemical Vapor Deposition ou CVD) ou par des procédés physiques en phase vapeur (Physical Vapor Deposition ou PVD) [1].

Le dépôt chimique en phase vapeur assisté par plasma (PECVD) (ou Plasma Enhanced Chemical Vapor Deposition) est l'une des techniques CVD.

Cette technique permet de déposer des couches minces homogènes de matériaux divers (polymères, céramiques, hybrides) avec une épaisseur contrôlée sur différents types de supports plus ou moins complexes. Les précurseurs utilisés pour le dépôt doivent cependant être gazeux et condensables en surface, ce qui nécessite l'emploi de précurseurs de faible masse moléculaire à forte pression de vapeur, par rapport à la technique de CVD classique qui utilise la température pour activer la réaction des précurseurs pendant le dépôt [2].

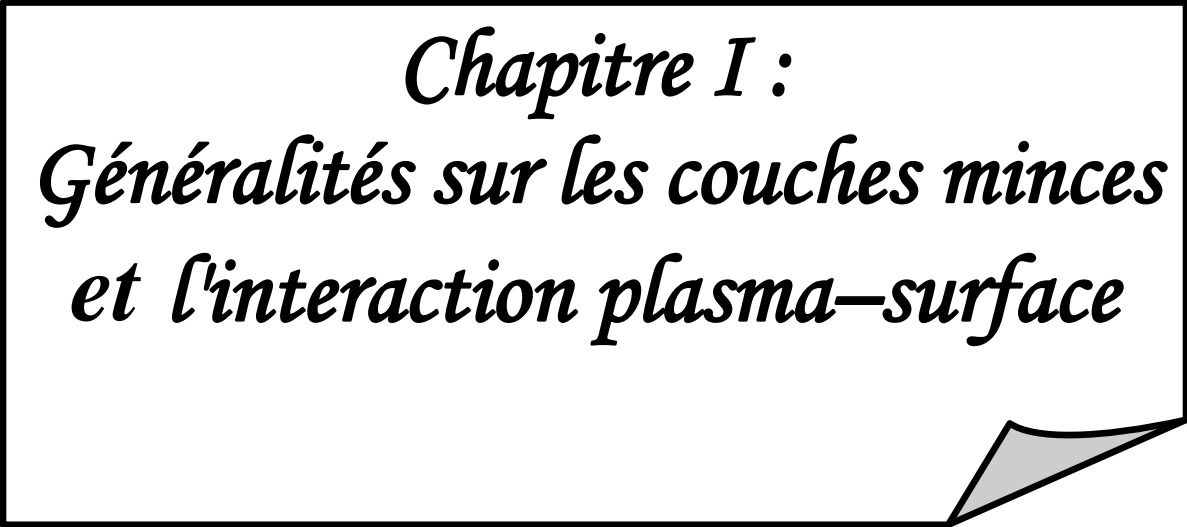
Dans ce travail nous nous intéressons au calcul des probabilités de réaction de radicaux SiH_3 , SiH_2 , SiH et H avec la surface lors de la déposition de couches minces (a-Si: H) par le procédé (PECVD). Le mélange utilisé est le SiH_4/H_2 .

Le premier chapitre est une présentation de la déposition par les procédés CVD, de la simulation Monte Carlo (MC) et des principaux et différents concepts. Dans le deuxième chapitre nous présentons la simulation numérique pour calculer les probabilités de réactivité sur site en cas de collage \mathbf{P}_s et en cas de recombinaison \mathbf{P}_γ et le calcul des probabilités de réactivité à la surface en cas de collage s , en cas de recombinaison γ et la probabilité de réactivité à la surface β . Nous utilisons la méthode de Monte Carlo. Nous utilisons le langage de programmation fortran.

Dans le troisième chapitre, nous présentons les principaux résultats obtenus par la simulation Monte Carlo de la déposition d'une couche (a-Si: H) par le procédé (PECVD). Nous calculons les probabilités de réactivité sur site et de réactivité à la surface.

Nous terminons ce mémoire par une conclusion générale et des perspectives.

Chapitre I :
Généralités sur les couches minces
et l'interaction plasma-surface



Chapitre I :

Généralités sur les couches minces et l'interaction plasma–surface

I. Introduction

Les couches minces sont utilisées dans un très grand nombre de domaines mais plus particulièrement en microélectronique (films conducteurs, isolants ou semi-conducteurs), en mécanique (dépôts de couches anticorrosion).

Ce chapitre une présentation des méthodes de déposition des couches minces par les procédés de déposition chimique en phase vapeur (Chemical Vapor Déposition ou CVD).

Nous présentons la déposition (PECVD) (Plasma Enhanced Chemical Vapor Déposition). Cette méthode est parmi les méthodes d'élaboration les plus utilisées pour la réalisation de couches minces

Les films de silicium amorphe Hydrogénée (a-Si:H) sont généralement préparés, à basse température, par dépôt chimique en phase vapeur assisté par plasma (PECVD) à partir du silane (SiH_4), ou à partir d'un mélange de Silane-Hydrogène (SiH_4/H_2) dans un réacteur (RF) de fréquence 13,56 MHz. Ces films jouent un rôle important dans la technologie des composantes photovoltaïques. Le substrat sur lequel on dépose la couche (a-Si:H) est le silicium monocristallin ou poly-cristallin, à cause de son coût économique.

I.1. Définition de la couche mince

Une couche mince est une fine pellicule d'un matériau déposée sur un autre matériau, appelé « substrat ». Le but de la couche mince est de donner des propriétés particulières à la surface de la pièce tout en bénéficiant des propriétés massives du substrat (en général : tenue mécanique), on utilise les couches minces dans:

- La métallisation de la surface, par exemple.
- En optique : dans les appareils photo, comme couche antireflet. Comme couche qui réfléchit la chaleur (infrarouges) et dans les casques de pompiers [3].

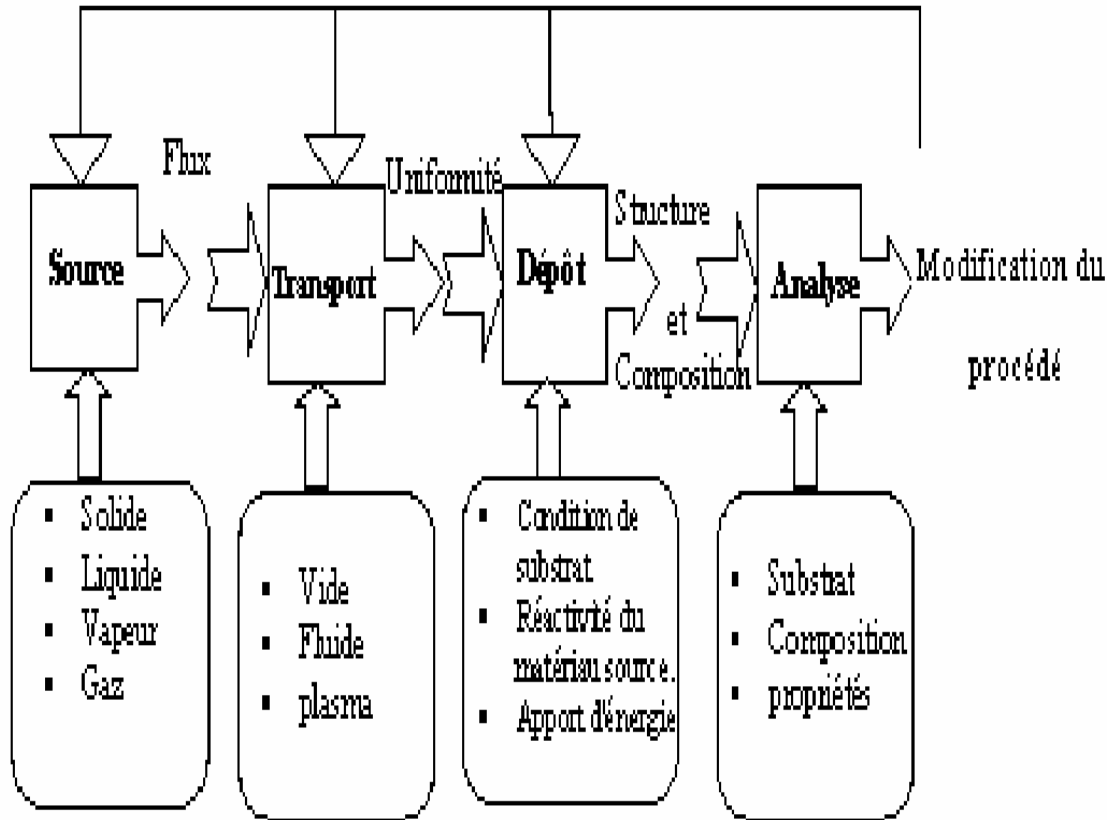


Figure I.1. : Les étapes du procédé de fabrication de couches minces [4]

I.2. Intérêt et caractéristiques des couches minces

L'intérêt accordé aux couches minces provient essentiellement de l'utilisation économique des matériaux en rapport avec les propriétés physiques et de la simplicité des technologies mise en œuvre pour leur réalisation (élaboration facile, peu coûteuse).

Une grande variété de matériaux est utilisée pour produire ces couches minces. Citons les métaux, alliages (possibilité de faire plusieurs alliages : binaires, ternaires, quaternaires), composés réfractaires (oxydes, nitrures, carbures), les composés intermétalliques et les polymères.

La seconde caractéristique essentielle d'une couche mince est : quelle que soit la procédure employée pour sa fabrication, une couche mince est toujours solidaire d'un support sur lequel elle est construite (même s'il arrive parfois que l'on sépare le film mince du support).

Par conséquent, il est impératif de tenir compte de ce fait majeur dans la conception, à savoir que le support influence très fortement les propriétés structurales de la couche qui y est déposée. Ainsi, une couche mince d'un même matériau, de même épaisseur, pourra avoir des propriétés physiques sensiblement différentes selon qu'elle sera déposée sur un substrat isolant amorphe tel le verre, ou un substrat monocristallin de silicium [5].

I.3. Méthodes générales de dépôt de couche mince

Les techniques les plus utilisées pour déposer des couches minces sont : l'épitanie, l'oxydation, les procédés PVD et les procédés CVD [6].

I.3.1. Dépôt physique en phase vapeur (PVD)

Le développement de la technologie de vide a progressé considérablement pendant les trois dernières décennies et cela a permis le développement des techniques de dépôt sous vide telles que les techniques de base de la PVD, (l'évaporation et la pulvérisation) sous toutes ses formes. Ces techniques de dépôt permettent l'obtention d'une large variété de matériaux à température de dépôt relativement basse ($< 500\text{ °C}$), par exemple, les films métalliques (Al, Cu, Ti...etc.) et leurs alliages, les films des métaux réfractaires (Mo, Ta, W,...etc.), les films d'oxydes (ZrO_2 , SiO_2 , Al_2O_3 , TiO_2 ,...etc.) et les films de nitrures, de siliciums, de carbures, de borures et de fluorures [7].

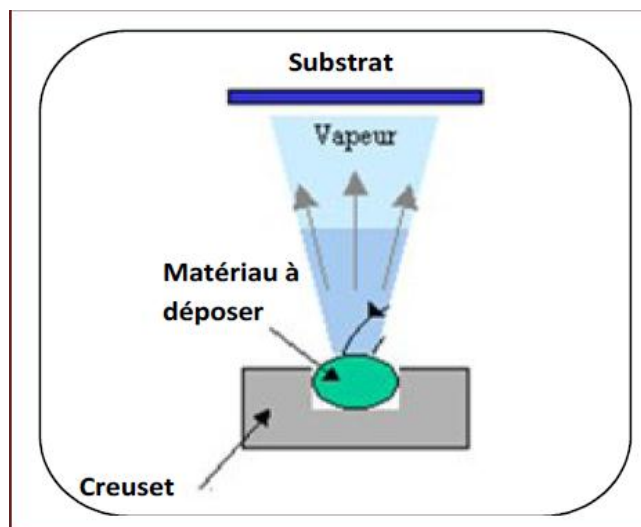
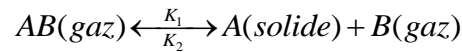


Figure I.2 : Principe de l'évaporation thermique [8]

I.3.2. Dépôt chimique en phase vapeur conventionnelle (CVD)

Le procédé CVD est utilisé pour déposer ou faire croître une couche de matériau solide sur un substrat à partir de gaz spécifiques par réaction chimique.

Cette technique consiste à mettre en contact un composé volatil du matériau (ou précurseur) avec la surface à recouvrir, en présence ou non d'autres gaz. On provoque alors une ou plusieurs réactions chimiques, donnant au moins un produit solide au niveau du substrat. Les autres produits de réaction doivent être gazeux afin d'être éliminés hors du réacteur [9].



Il existe plusieurs types de dépôt CVD :

- Le dépôt par LPCVD (Low Pressure Chemical Vapor Deposition) Ce dépôt s'effectue normalement au fur et à mesure à des températures de l'ordre de 500°C à 600°C [6].
- Le dépôt LCVD « Laser Enhanced Chemical Vapor Deposition » CVD assistée par Laser [1]
- Le dépôt PECVD « Plasma Enhanced Chemical Vapor Deposition » CVD assistée par Plasma [1].
- Dépôt chimique en phase vapeur par filament chaud HWCVD, ce dépôt s'effectue à l'aide d'un filament en tungstène porté à une température très élevée [10].

I.3.3 Les étapes de la déposition CVD

La déposition par les procédés CVD suit les étapes suivantes [1]:

- 1/- Diffusion du réactif vers la surface du substrat.
- 2/- L'adsorption du réactif.
- 3/- La réaction chimique.
- 4/- La désorption des gaz produits.
- 5/- Diffusion des gaz hors de la surface du substrat

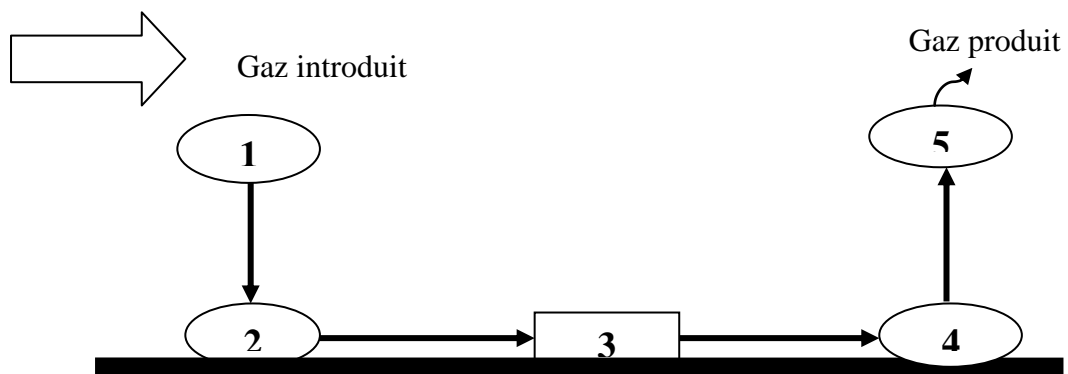


Figure I.3 : Les étapes de déposition CVD

I.4. Silicium monocristallin

La structure du silicium cristallin (**c-Si**) est telle que chaque atome de silicium est lié à quatre autres atomes, formant les sommets d'un tétraèdre régulier. L'inconvénient majeur lié à ce matériau est son coût de fabrication. En effet, son obtention nécessite un processus complexe de purification et d'épitaxie [11].

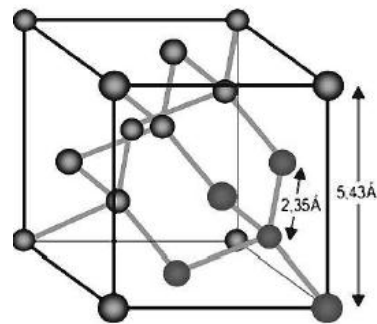
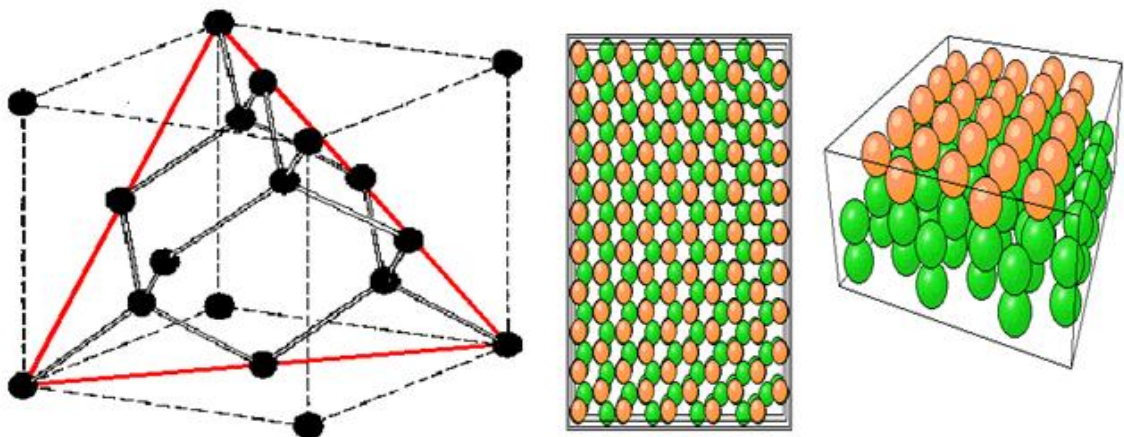


Figure I.4 : Structure cristallographique du silicium monocristallin
(Type diamant) [12]



La figure I.5 : Modèle de l'atome de silicium Si le long du plan (111) [13]

I.4.1 Le silicium amorphe hydrogéné

Le silicium amorphe hydrogéné (a-Si:H) est un matériau issu de la famille de semi-conducteurs. Cette forme de semi-conducteurs a été découverte vers le début des années soixante. Dans un premier temps elle n'était pas utilisable car elle avait beaucoup trop de défauts, mais vers la fin des années soixante, Chittick et al., observèrent qu'en déposant le silicium amorphe par un plasma de silane (SiH_4), plus de 99.9 % des défauts étaient saturés par l'hydrogène, ce qui rendait ce matériau utilisable comme semi-conducteur. Dès cette

découverte, il fit l'objet de recherches intensifiées. La recherche de nouvelles ressources énergétiques, ainsi que les nouvelles applications en font un matériau actuellement encore en pleine évolution [11].

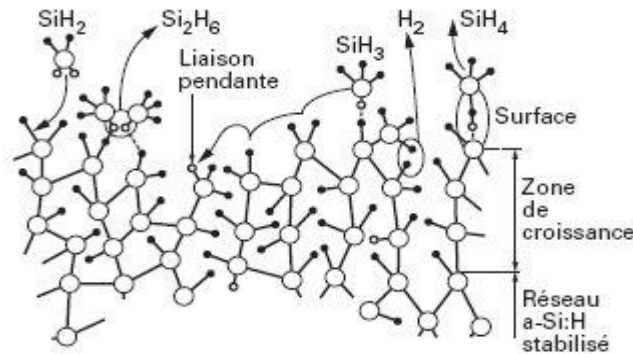


Figure I.6 : Structure de silicium amorphe hydrogéné [12]

I.5. L'adsorption

L'adsorption est un phénomène tout à fait général qui se produit chaque fois qu'un gaz ou un liquide est en contact avec un solide ; celui-ci est retenu par les atomes superficiels du solide et se concentre à sa surface.

I.5.1 L'adsorption chimique

L'adsorption chimique qui met en jeu un échange d'électrons entre la surface du solide et les molécules adsorbées - comme dans le cas d'une réaction chimique - modifie les propriétés du solide. L'énergie caractéristique (liaison chimique) est supérieure à 10 kcal/mol [14].

I.5.2 L'adsorption physique

L'adsorption physique ou adsorption de Van Der Waals est un phénomène réversible qui résulte des forces intermoléculaires d'attraction entre des molécules du solide et celles du substrat [15].

I.6. La désorption

La désorption représente le mécanisme inverse de l'adsorption où un atome initialement adsorbé peut retourner dans la phase gaz si son énergie cinétique lui permet de quitter le puits de potentiel atome/surface. L'énergie nécessaire à cette désorption est dans de nombreux cas relativement élevée (plusieurs eV).

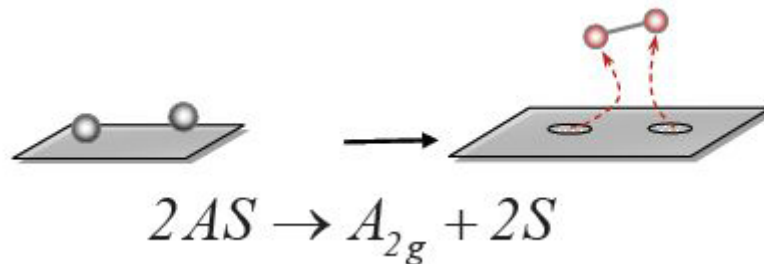
I.6.1 Les mécanismes de désorption

Quatre grands mécanismes peuvent être discernés : Mécanisme d'Eley-Rideal, Mécanisme de Langmuir-Hinshelwood (LH), Mécanisme de désorption induite par collision et mécanisme de Harris-Kasemo. Nous nous intéressons aux mécanismes les plus utilisés dans le dépôt PECVD [6].

I.6.1 .1 Mécanisme de Langmuir-Hinshelwood (LH)

Le mécanisme de réaction de surface le plus commun est celui où les réactants sont déjà adsorbés en surface, thermalisés et/ou ils entrent en collision pour former le produit de réaction. Ce mécanisme est connu sous le nom de Langmuir-Hinshelwood (LH), il est résulte de la combinaison de l'adsorption, de la diffusion et de la désorption.

La cinétique de ce type de réaction peut donc être relativement complexe. Même si en général une des étapes de la réaction est cinétiquement militante [15].

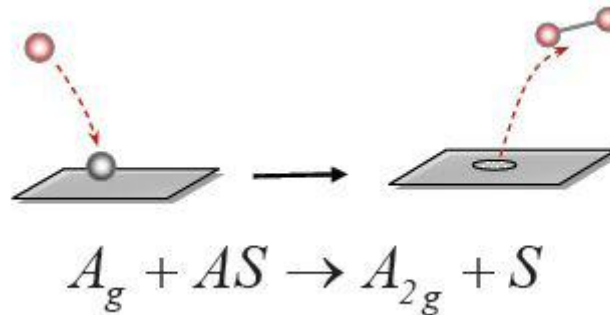


Recombinaison Langmuir-Hinshelwood [12]

I.6.1.2 Mécanisme d'Eley-Rideal (ER)

Une réaction de surface ne nécessite pas nécessairement que toutes les espèces réagissantes soient adsorbées en surface, une particule venant de la phase gazeuse peut entrer en collision avec un adsorbat et réagir directement avec celui-ci pour générer un produit qui s'échappe instantanément de la surface, ce mécanisme de réaction d'abstraction est

communément appelé mécanisme de Eley-Rideal (ER), il possède une expression de réaction relativement simple qui ne dépend que du taux de couverture de la surface et de la pression du réactant en phase gazeuse [16].



Recombinaison Eley-Rideal [12]

I.6. 1.3 Mécanisme de Harris-Kasemo

Dans les mécanismes précédemment évoqués les particules concernées sont en fait des réactants à la surface. Le processus de l'atome chaud, ou mécanisme de Harris-Kasemo est celui dans lequel on considère que l'un des réactants est parfaitement adsorbé alors que l'autre est partiellement accommodé à la surface dans un état précurseur [15].

I.7. Dépôt chimique en phase vapeur assistés par plasma PECVD

Cette technique permet de déposer des couches minces homogènes de matériaux divers (polymères, céramiques, hybrides) avec une épaisseur contrôlée sur différents types de supports plus ou moins complexes. Les précurseurs utilisés pour le dépôt doivent cependant être gazeux et condensables en surface.

Par rapport à la technique de CVD classique qui utilise la température pour activer la réaction des précurseurs pendant le dépôt PECVD s'appuie sur l'énergie d'un plasma créé par une décharge électrique entre deux électrodes en présence d'espèces gazeuses. Le plasma est partiellement ionisé (hors équilibre thermodynamique) et globalement neutre dans le cas d'un réacteur PECVD. Il est obtenu par les collisions entre les électrons libres issus de la décharge électrique et les molécules de gaz. Seuls les électrons sont portés à haute température ($> 10^4$ K) alors que les autres particules restent proches de la température ambiante.

L'ionisation du gaz conduit à l'obtention d'espèces chargées libres telles que des ions, radicaux libres, atomes et molécules neutres ou excités ainsi que des photons émis par désexcitation radiative [2].

En utilisant un plasma silane hydrogène SiH_4/H_2 , plusieurs réactions chimiques se produisent; plus de 89 réactions en phase gazeuse s'effectuent pour déposer une couche mince a:Si-H. [6] Les produits de ces réactions sont des hydrures de silicium qui réagissent à la surface du substrat porté à basse température. Les réactions chimiques de la phase gazeuse peuvent produire les radicaux SiH_3 , SiH_2 et H . Ces radicaux sont responsables de la croissance d'une couche mince a-Si:H par procédé PECVD sur un substrat de silicium qui peut être étudié par la simulation Monte Carlo (MC) [4].

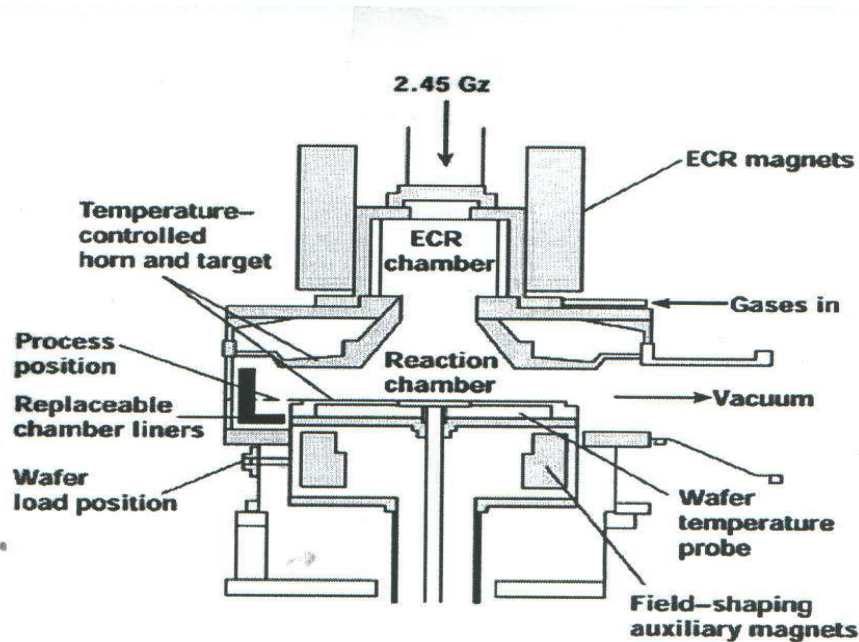
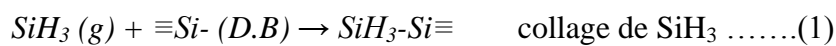


Figure I.7 : Réacteur de dépôt CVD assisté par plasma (PECVD) [1]

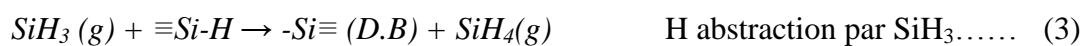
I.7.1. La probabilité de réactivité à la surface (SFRP)

La SFRP est donnée par $\beta = s + \gamma$ où "s" est la probabilité de collage et "γ" la probabilité de recombinaison.

Le collage sur une liaison pendante [17]



L'abstraction d'un atome d'hydrogène [1]



I.8. 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 (dangling bonds (D.B)) 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 :

$$E(z) = \frac{A}{Z^n} + \frac{B}{Z^m} \quad (5)$$

Où Z est la distance entre la particule et la surface, A et B sont des constantes. Nous avons utilisé le potentiel (3, 9) [18].

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

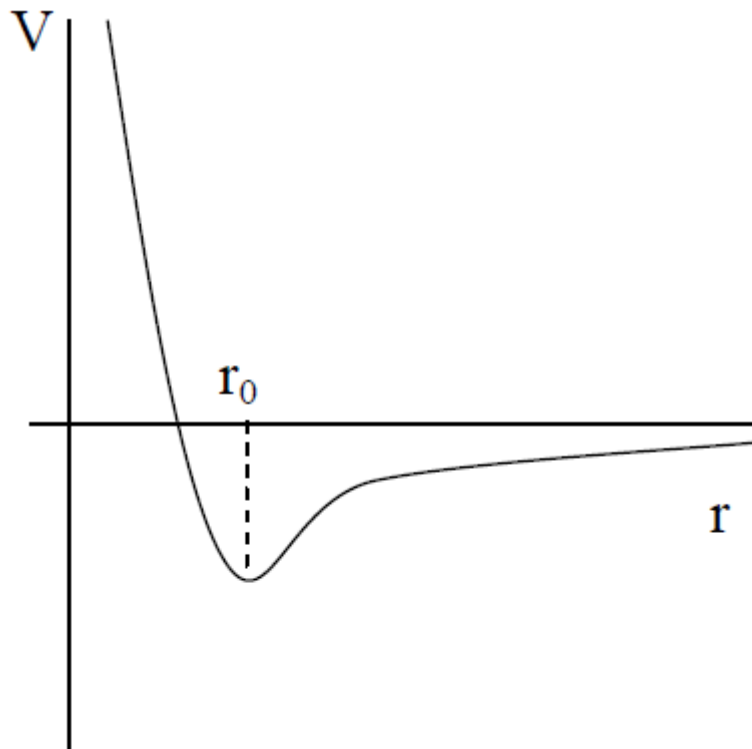


Figure. I.8 : Allure du potentiel

I.8.1. Groupes de potentiels d'interaction

I.8.1.1. 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 (6) [19].

$$U(r) = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{r} \phi\left(\frac{r}{a}\right) \dots (6)$$

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

Exemples de potentiels écrantés

*Potentiel de Bohr :

Il est utilisé pour les séparations inter-atomiques les plus larges :

$$U(r) = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{r} \exp\left(\frac{r}{a}\right) \dots (7)$$

*Potentiel de Molière

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

$$U(r) = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{r} \left[0.35 e^{-0.3 \frac{r}{aF}} + 0.55 e^{-1.2 \frac{r}{aF}} + 0.1 e^{-0.6 \frac{r}{aF}} \right] \dots (8)$$

*Potentiel Kr-C

Il est établi par Wilson et al en prenant en compte les considérations de Günther qui a prouvé son efficacité [20] :

$$U(r) = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{r} \left[0.109045 e^{-0.278544 \frac{r}{a}} + 0.473674 e^{-0.637174 \frac{r}{a}} + 0.335381 e^{-1.919249 \frac{r}{a}} \right] \dots (9)$$

*Potentiel ZBL

Il est défini par:

$$U(r) = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{r} \left[0.028171 e^{-0.20162 \frac{r}{aU}} + 0.28022 e^{-0.4029 \frac{r}{aU}} + 0.50986 e^{-0.94229 \frac{r}{aU}} + 0.18175 e^{-3.1998 \frac{r}{aU}} \right] \dots (11)$$

***Potentiel de Lenz et Jensen**

Il est défini par:

$$U(r) = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{r} \left[0.01018 e^{-0.206 \frac{r}{a}} + 0.2433 e^{-0.3876 \frac{r}{a}} + 0.7466 e^{-1.038 \frac{r}{a}} \right] \dots (12)$$

I.8.1.2. Potentiel de Born-Mayer

Son expression est :

$$U(r) = A_{BM} \exp\left(-\frac{r}{a_{AB}}\right) \dots (13)$$

Pour obtenir les coefficients, de potentiel de Born-Mayer, dans le cas d'une hétéro-interaction on peut prendre: [21]

$$A_{BM} = \sqrt{A_{BB} A_{MM}} \dots (14) \quad , \quad a_{AM} = 2 \frac{a_{AA}^* a_{MM}}{a_{AA}^* a_{MM}} \dots (15)$$

I.8.1.3. Quelques potentiels attractifs

Les potentiels attractifs fréquemment utilisés sont :

***Le potentiel de Morse :**

$$U(r) = D \exp[-2a(r - r_0)] - 2D \exp[-a(r - r_0)] \dots (16)$$

***Le potentiel de Lennard et Jones (3, 9):**

Le potentiel d'interaction radical-surface [18]

$$U(z) = \frac{(\pi \xi N r_0^3)}{3} \left[-\frac{1}{2} \left(\frac{r_0}{z}\right)^3 + \frac{1}{15} \left(\frac{r_0}{z}\right)^9 \right] \dots (17)$$

I.8.1.4. Les potentiels combinés

Les potentiels attractifs connus ne sont pas tous valables à étudier tous les matériaux. On peut utiliser une combinaison des potentiels de diverses familles, par exemple : le potentiel de Born-Mayer-Morse et le potentiel de Molière-Morse [19].

I.8.1.5. Potentiel empirique

Lame et al. ont trouvé un modèle empirique basant sur le modèle théorique développé par Dagens, sa forme est [22]:

$$U(r) = \left[1 - \exp(-a(r - n)^2) \right] \left[C_0 + \frac{C_1 \cos \chi}{r^2 r^3} + \frac{S_1 \sin \chi}{r^5} \right] + \sum_{i=0}^3 \frac{B \exp(-\beta r^2)}{r^{3-i}} + D \exp(-\gamma r) \dots (18)$$

I.9. La méthode de Monte Carlo (MC)

Von Neumann et Ulam ont inventé le terme "Monte Carlo". La méthode de simulation Monte Carlo 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 lentes) [12]. Cette simulation a été utilisée au cours de la seconde guerre mondiale en parallèle avec les recherches sur la bombe atomique qui a eu lieu en Inde en (1949) (article publié Stanislas Ulam).

Comte du Buffon (1777) est le première qui a utilisé les nombres aléatoires pour résoudre des problèmes mathématiques (Calcul de π).

La simulation MC de Laplace (1886) consiste à choisir des points aléatoires dans un rectangle pour calculer π .

En 1930, Fermi a utilisé une méthode de simulation MC basant sur le choix aléatoire pour calculer les propriétés de neutrons découverts.

I.9.1 Définition de la méthode de Monte Carlo

La simulation Monte Carlo se base sur une idée très simple qui est le choix aléatoire d'un ensemble de configurations. Cette simulation peut être utilisée dans [24] :

- *La Physique des particules.
- *La Théorie quantique des champs.
- *L'astrophysique.
- *La modélisation moléculaire.
- * Les problèmes d'optimisation.

Dans ce travail, la simulation MC consiste à choisir aléatoirement des particules dans le volume du réacteur et des sites à la surface de substrat puis on calcule les énergies d'interactions

I.9.2 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. Le caractère stochastique du Monte Carlo peut être discutable dans le sens où le nombre aléatoire nécessaire à la conduite d'une bonne simulation Monte Carlo est généré par un ordinateur, par conséquent de manière intrinsèquement déterministe! Cependant, l'utilisation de ces nombres pseudo-aléatoires présente un grand avantage : ils permettent de pouvoir reproduire exactement une même simulation à condition que les paramètres d'entrée restent inchangés d'une simulation à l'autre. Plus que tout autre argument, ces nombres aléatoires permettent de manière très précise de pouvoir sonder et étudier l'influence d'un seul paramètre sur un système.

I.9.3 Algorithme de Monte Carlo Metropolis

La méthode de Monte Carlo (MC) Metropolis a été introduite en physique de la matière condensée par Metropolis en 1953. L'algorithme de Monte-Carlo est très général :

- Elle peut s'appliquer à tout modèle pour lequel il est possible.
- Elle permet de faire des modifications aléatoires sur le modèle (en général à partir d'un nombre fini de variables continues ou discrètes qui sont changées de manière aléatoire)
- Elle permet d'associer une variation d'énergie à chacune de ces modifications. L'algorithme procède alors de la manière suivante :

– Soit une modification aléatoire qui transforme le modèle M_i en modèle M_{i+1} , associé à une variation d'énergie ΔE

– Si $\Delta E < 0$, la modification est acceptée.

– Si $\Delta E > 0$, la modification est acceptée avec la probabilité $P = e^{-\Delta E/KT}$, où T est la température de l'algorithme et k la constante de Boltzmann.

Il est facile de voir qu'une fois un état stationnaire atteint, la distribution des états générés $\{M_i\}$ correspond à une distribution de Boltzmann [23].

Chapitre II:

Modélisation Numérique



Chapitre II : Modélisation Numérique

I. Introduction

Dans ce travail, nous nous intéressons au calcul des probabilités de réactivité sur site en cas de collage P_s et en cas de la recombinaison P_γ . Nous allons calculer les probabilités de réactivité à la surface en cas de collage s , de recombinaison γ et la réactivité à la surface β lors de déposition d'une couche mince (a-Si:H) par le procédé (PECVD). Nous allons utiliser la méthode de simulation Monte Carlo.

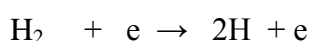
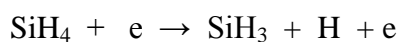
II.1 Définition du phénomène physique

Le gaz introduit dans le réacteur est un mélange gazeux ($\text{SiH}_4 / \text{H}_2$). La dissociation du mélange s'effectue à l'aide des électrons du plasma. Les espèces chimiques résultantes sont les molécules (SiH_4 , H_2 et Si_2H_6) et les radicaux (SiH_3 , SiH_2 , SiH , H). Ces espèces interviennent dans de nombreuses réactions chimiques qui se produisent dans le volume du réacteur et près de la surface du substrat. Ces dernières réactions chimiques sont responsables de la croissance de la couche mince.

a- Dans le volume du réacteur

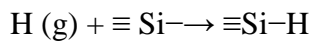
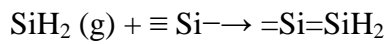
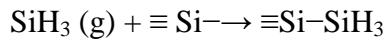
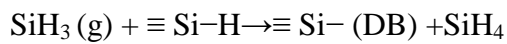
L'idée principale de la méthode de Monte Carlo est de créer un grand nombre de configurations aléatoires. Dans chaque configuration nous choisissons une particule aléatoire dans le volume du réacteur. Les particules se produisent après des collisions binaires et des réactions chimiques.

Quelques réactions chimiques en phase gazeuse [25]

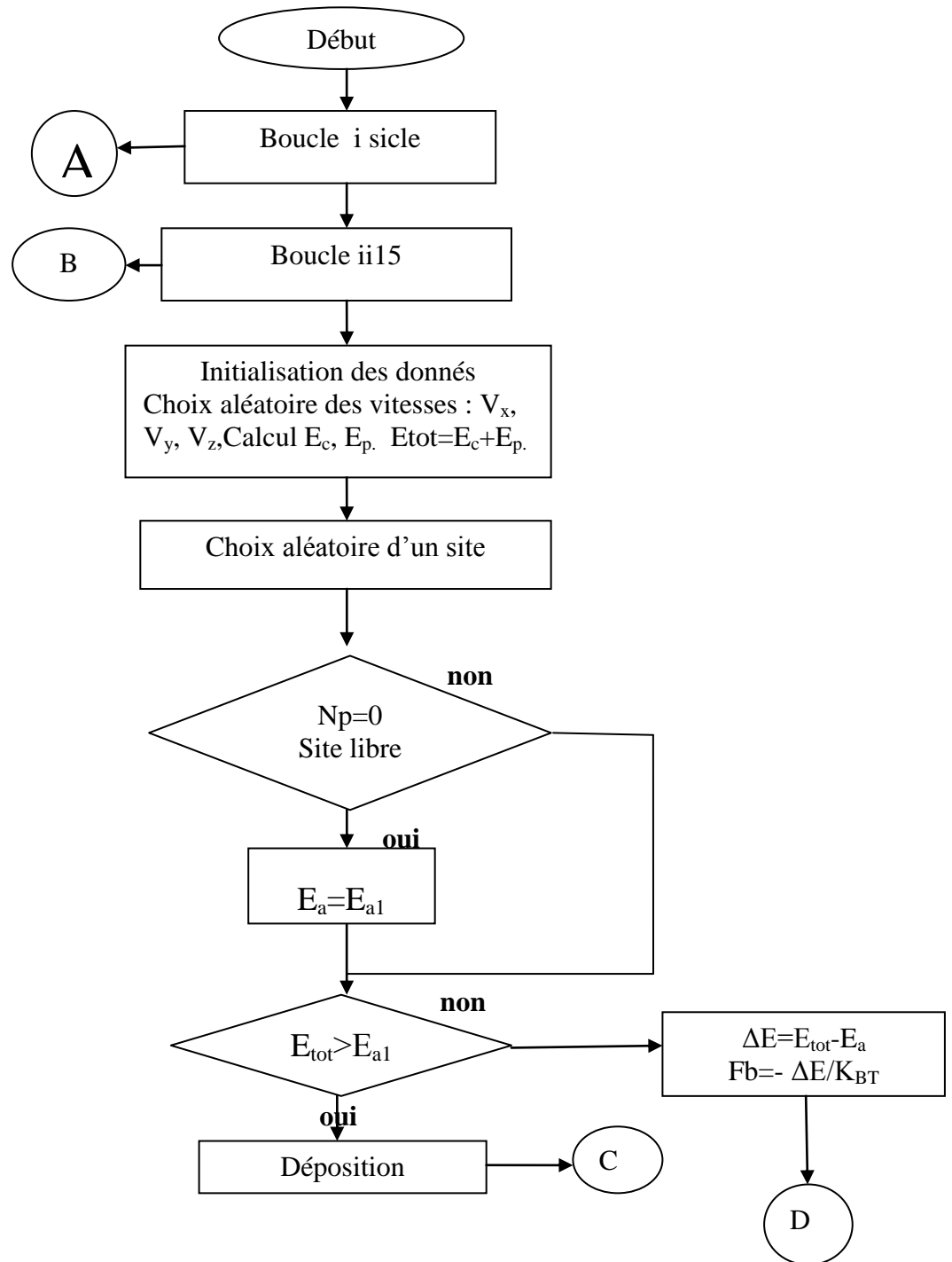


b- A la surface

Les collisions entre les radicaux et les sites modifient la surface. Chaque particule K réagit avec un des sites libre ou occupé. Si le site est libre la particule réagit par la probabilité de collage $P_{s,k}$. Elle réagit selon la probabilité de recombinaison $P_{r,k}$, si le site est occupé. Nous choisissons un site aléatoire qui va réagir avec la particule K choisis dans le volume. Par conséquent le taux des sites occupés ou hydrogénés varie.

Quelques réactions chimiques à la surface [12]Collage de H sur DBCollage de SiH₂ sur DBCollage de SiH₃ sur DBAbstraction de H- par le radical SiH₃

II.2 Organigramme pour le calcul des probabilités de réactivité sur site



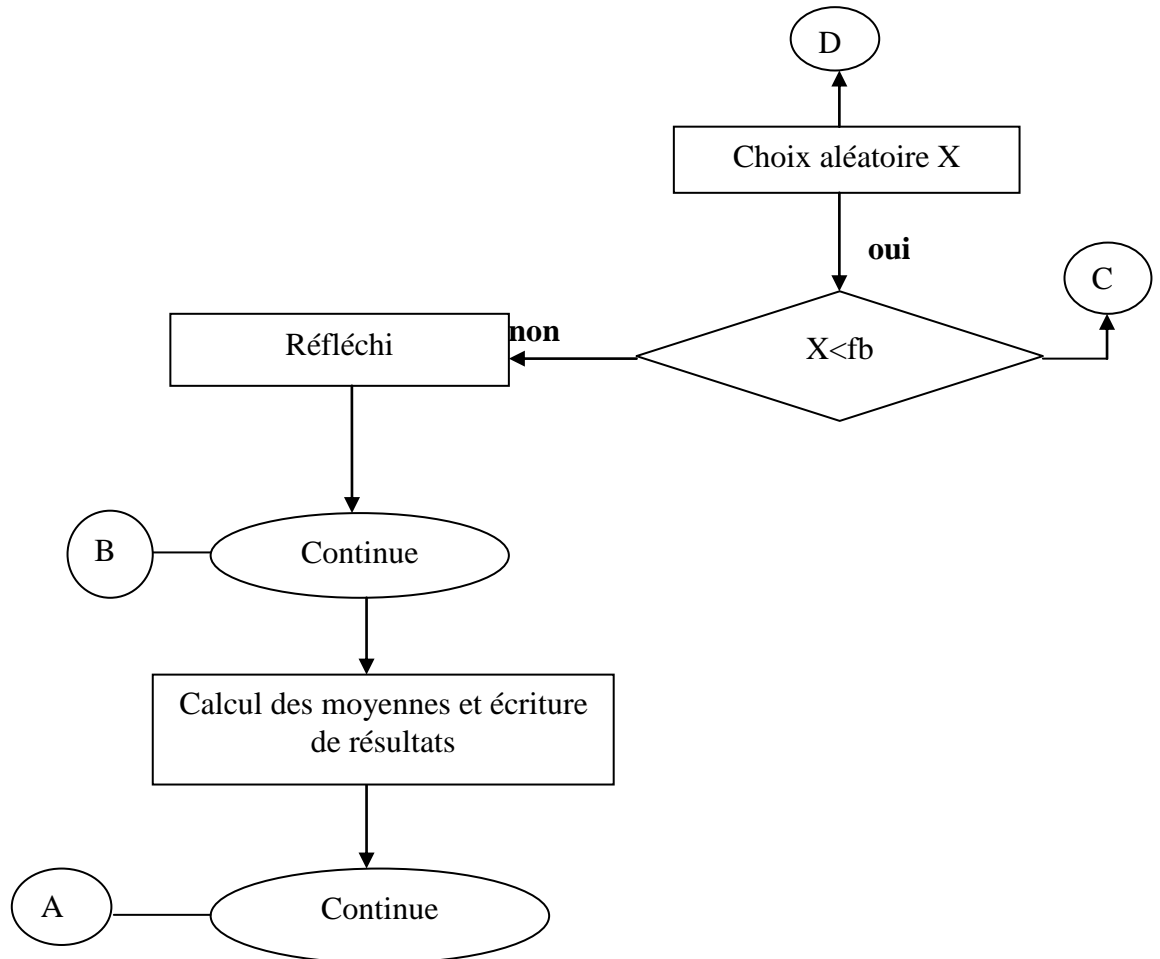
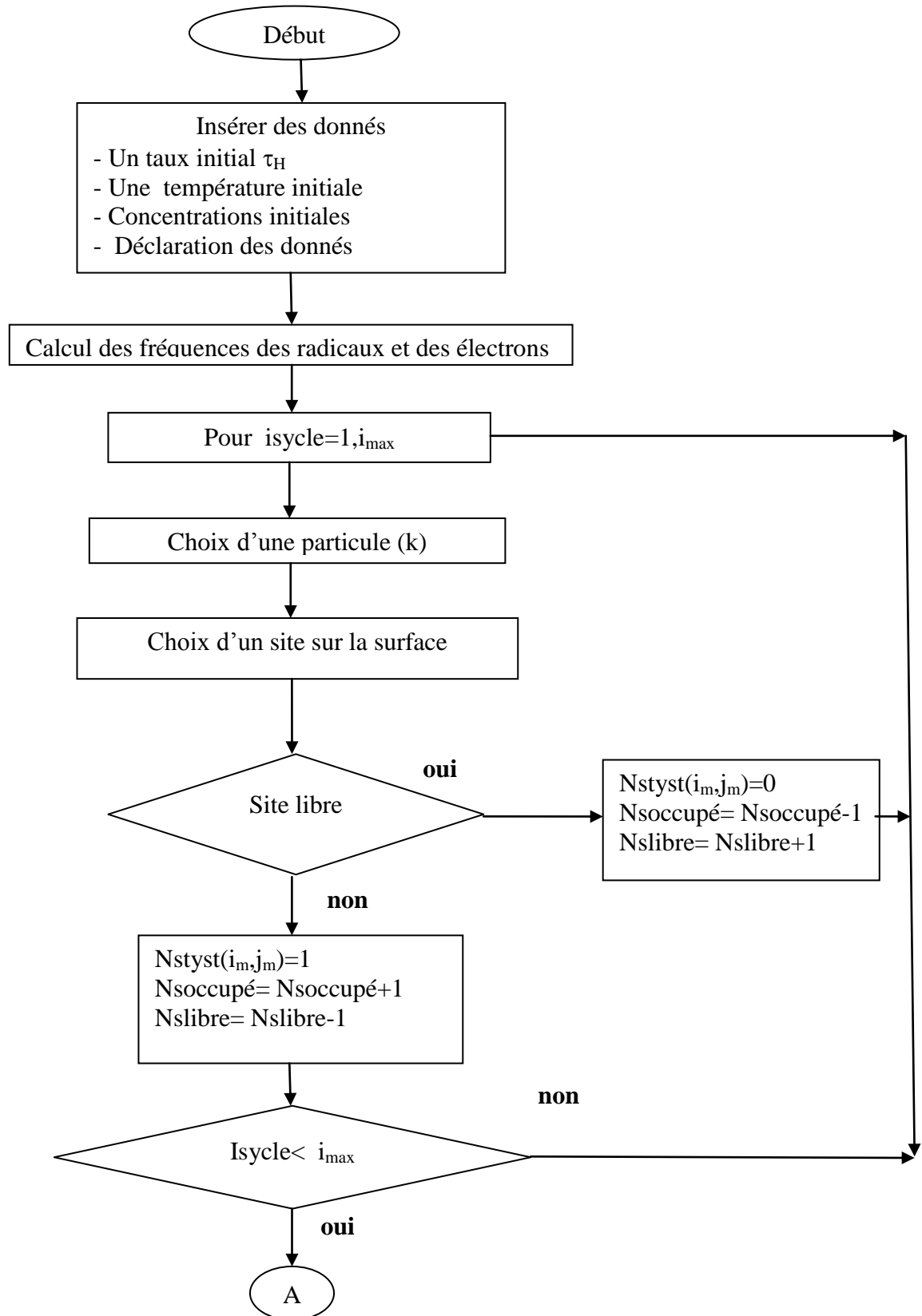


Figure II.1 : Organigramme de calcul de la probabilité de réactivité sur un site

II.3 Organigramme pour le calcul des probabilités de la réactivité à la surface



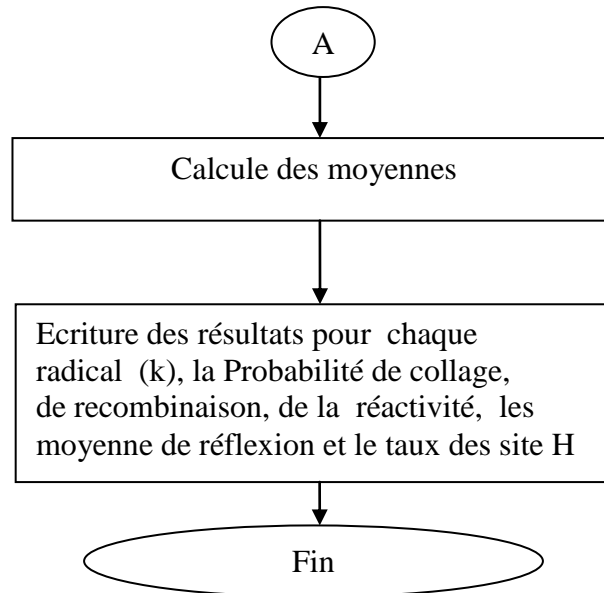


Figure II.2 : Organigramme de calcul de la probabilité de réactivité à la surface

Chapitre III :
Résultats et Discussion

Chapitre III : Résultats et Discussion

Dans cette partie, nous présentons les principaux résultats obtenus par la simulation Monte Carlo lors de la déposition d'une couche a-Si : H par procédé PECVD.

III.1 Calcul des probabilités de la réactivité par procédé PECVD sur un site des radicaux SiH_x

pour calculer Les probabilités P_s et P_γ , pour les radicaux (SiH_x). Les énergies d'activation des radicaux sont citées dans le tableau1.

La probabilité P_s et P_γ pour les radicaux SiH_3 varient en fonction de la température T_g comme le montrent les figures III.1 et III.2. successivement :

Tableau III.1 : Les valeurs des énergies d'activation des radicaux

Ea(eV)	SiH_3	SiH_2	SiH	H
P_s	0.09	0.1	0.1	0.1
P_γ	0.2	0	0	0.1

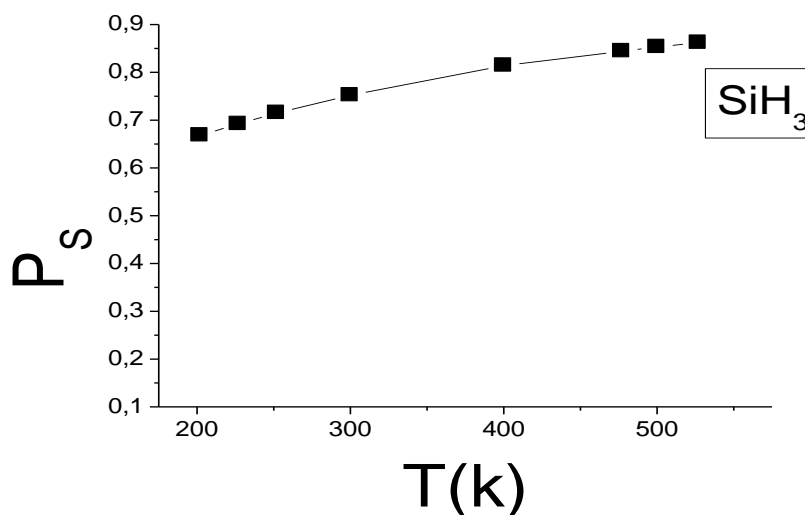


Figure III.1 : Variation de probabilité P_s en fonction de la température du gaz pour (SiH_3) et une énergie d'activation $E_a = 0.09$ eV

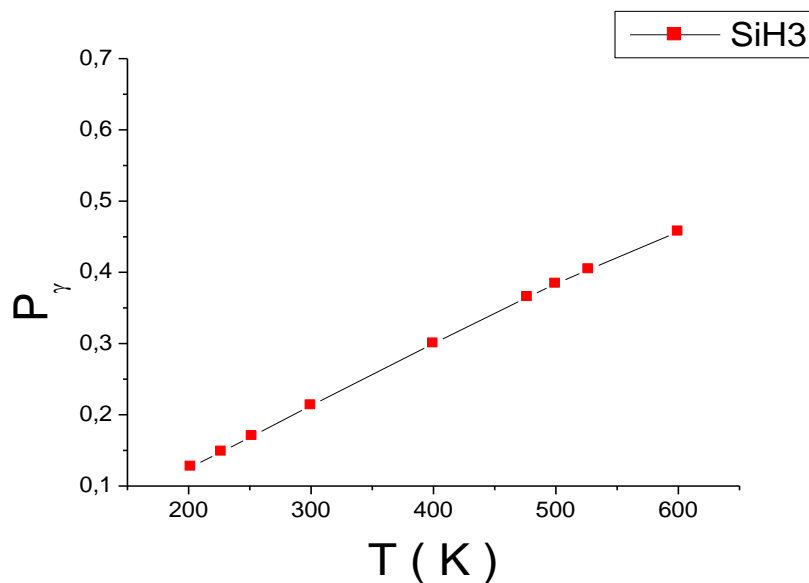


Figure III.2 : Variation de probabilité P_γ en fonction de la température du gaz pour (SiH_3) et une énergie d'activation $E_a = 0.2 \text{ eV}$

Les résultats de calcul de P_s pour SiH_2 et SiH sont comme le montre la figure III.3.

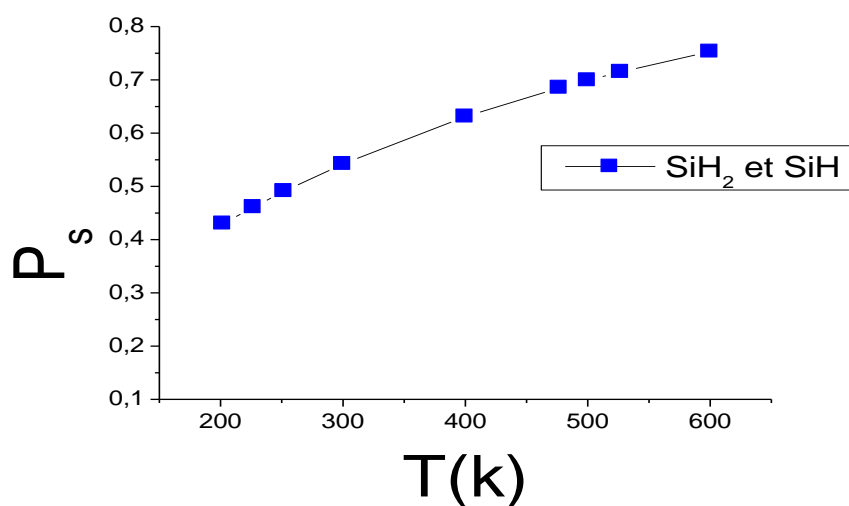


Figure III.3 : Variation de probabilité P_s (SiH_2 , SiH) en fonction de la température du gaz pour (SiH_2 , SiH) et une énergie d'activation $E_a = 0.1 \text{ eV}$

Puisque l'énergie d'activation en cas de recombinaison et nulle la probabilité P_γ pour (SiH_2 , SiH) est égale à 1.

Les résultats de calcul de P_s et P_γ pour H sont comme le montre la figure III.4 et la figure III.5.

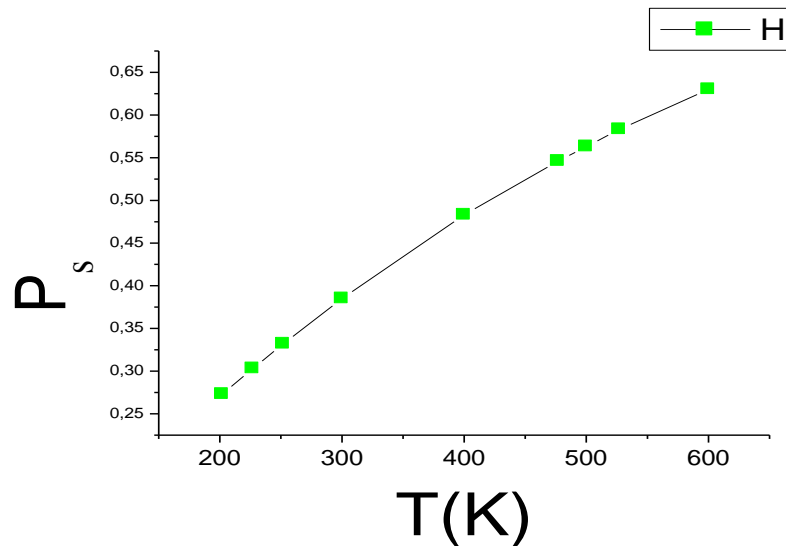


Figure III.4 : Variation de probabilité P_s en fonction de la température du gaz pour (H) et une énergie d'activation $E_a = 0.1$ eV

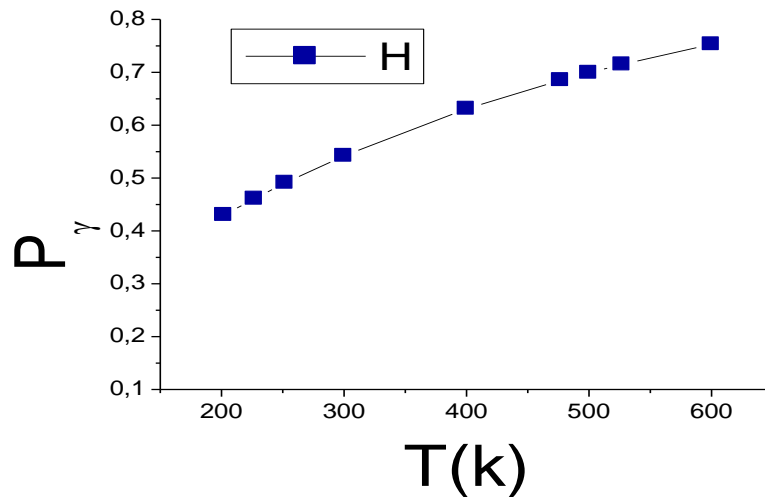


Figure III.5 : Variation de probabilité P_γ en fonction de la température du gaz pour (H) et une énergie d'activation $E_a = 0.1$ eV

III.2 Calcul des probabilités de la réactivité à la surface des radicaux SiH_x par la méthode MC

Nous avons calculé les probabilités de réactivité à la surface S , γ et β , pour les radicaux SiH_x , et pour chaque densité électronique n_e et température électronique T_e .

Pour $T=300\text{ K}$, $n_e=10^{18}$ et $T_e=2.5\text{ eV}$.

Les concentrations initiales sont obtenus par la résolution de l'équation de diffusion dans un travail de O.BABAHANI ; la figure III.6 montre les résultats obtenus.

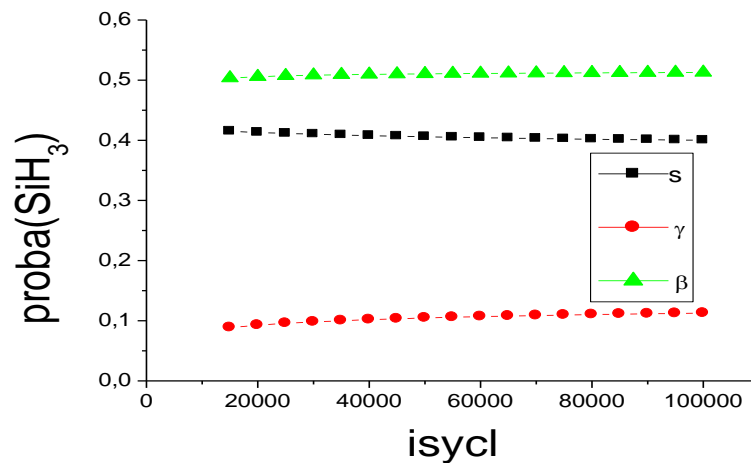


Figure III.6 : Résultats de simulation MC des probabilités de réactivité de SiH_3 à la surface

La probabilité S varie suivant la température T comme le montre la figure III.7.

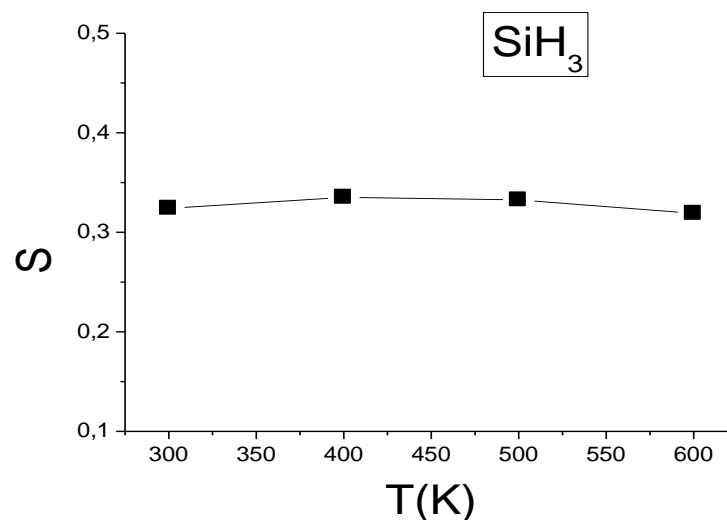


Figure III.7: Variation de la probabilité S de (SiH_3), en fonction de T , pour la densité électronique $n_e=10^{18}\text{ m}^{-3}$ et l'énergie électronique $E_e=2.5\text{ eV}$

La probabilité γ varie suivant la température T comme le montre la figure III.8.

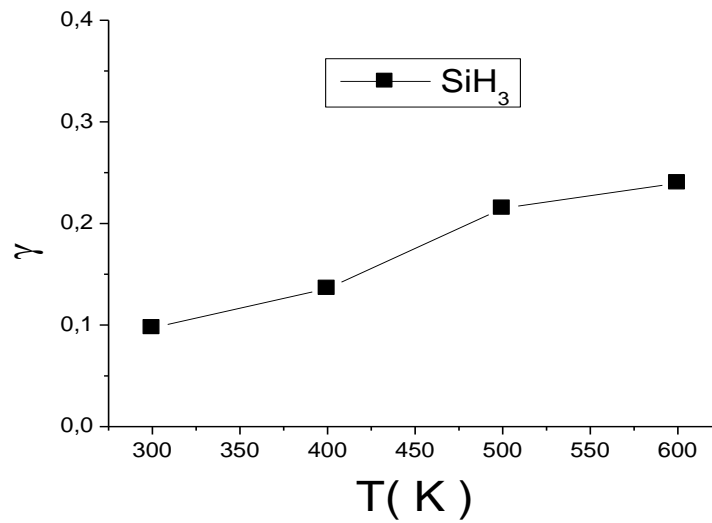


Figure III.8 : Variation de la probabilité γ de (SiH_3) en fonction de T , pour $n_e=10^{18} \text{ m}^{-3}$ et $T_e=2.5\text{eV}$

La probabilité β varie suivant la température T comme le montre la figure III.9.

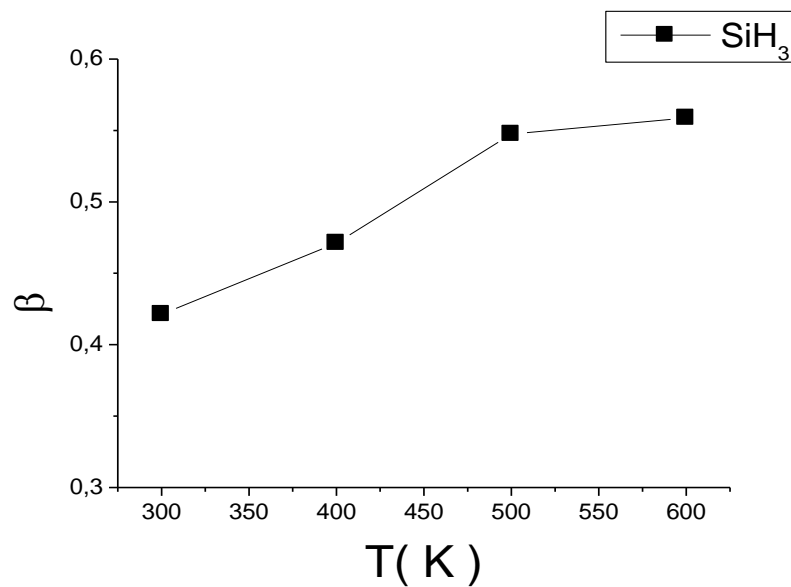


Figure III.9 : Variation de la probabilité β de SiH_3 en fonction de T , pour $n_e=10^{18} \text{ m}^{-3}$ et $T_e=2.5 \text{ eV}$

La probabilité S varie suivant la température T comme le montre la figure III.10.

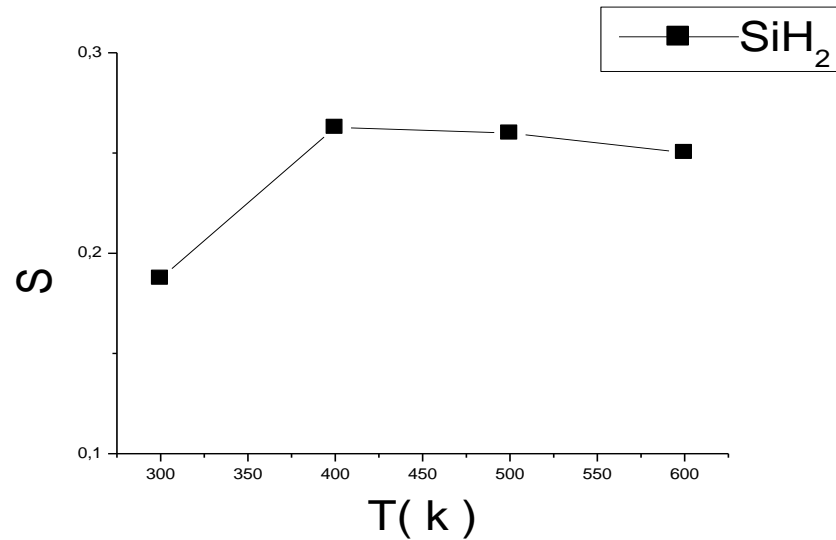


Figure III.10 : Variation de probabilité S de (SiH_2) en fonction de T , pour $n_e=10^{18} \text{ m}^{-3}$ et $T_e=2.5 \text{ eV}$

La probabilité γ varie suivant la température T comme le montre la figure III.11.

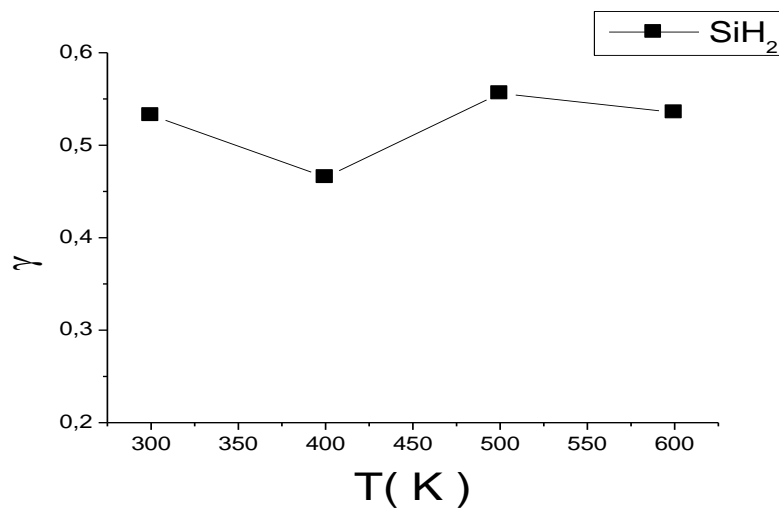


Figure III.11 : Variation de probabilité γ de SiH_2 en fonction de T , pour $n_e=10^{18} \text{ m}^{-3}$ et $T_e=2.5 \text{ eV}$

La probabilité β varie suivant la température T comme le montre la figure III.12.

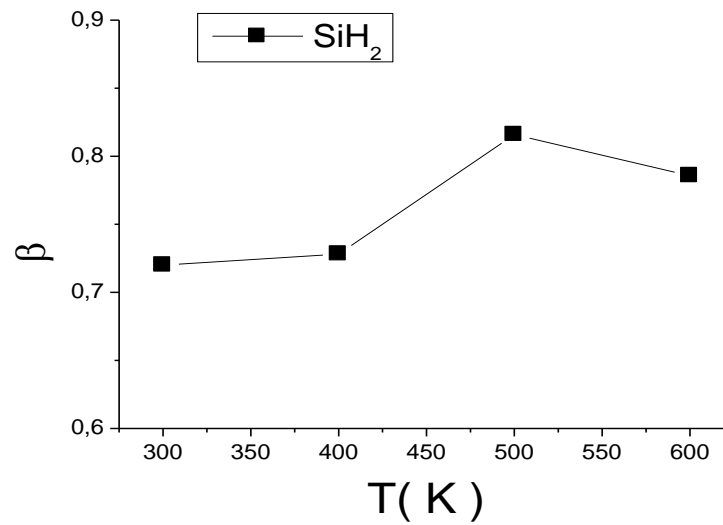


Figure III.12 : Variation de la probabilité β (SiH₂) en fonction de T, pour $n_e=10^{18} \text{ m}^{-3}$ et $T_e=2.5 \text{ eV}$

La probabilité S varie suivant la température T comme le montre la figure III.13

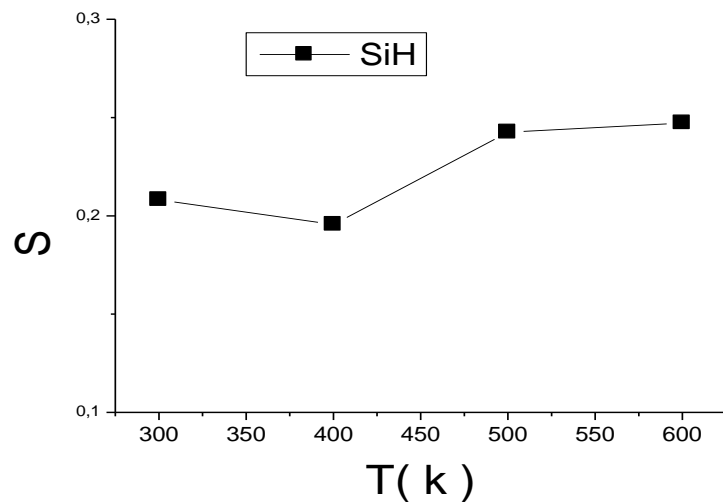


Figure III.13 : Variation de probabilité S de SiH en fonction de T, pour $n_e=10^{18} \text{ m}^{-3}$ et $T_e=2.5 \text{ eV}$

La probabilité γ varie suivant la température T comme le montre la figure III.14.

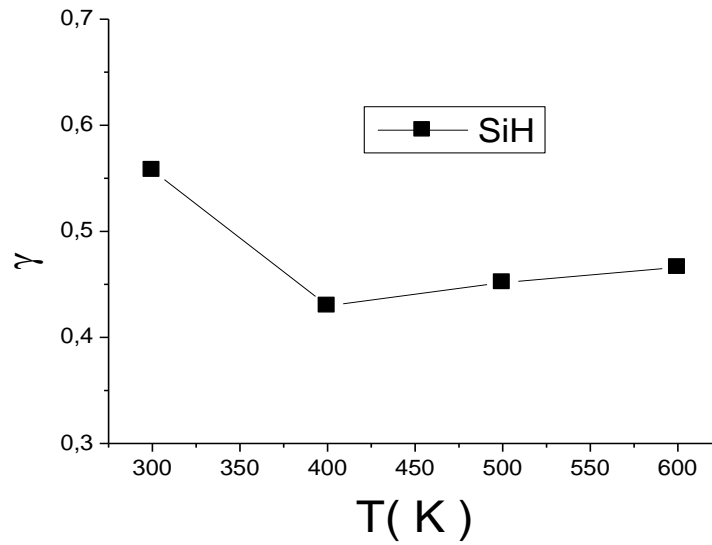


Figure III.14 : Variation de probabilité γ de SiH en fonction de T , pour $n_e=10^{18} \text{ m}^{-3}$ et $T_e=2.5\text{eV}$

La probabilité β varie suivant la température T comme le montre la figure III.15.

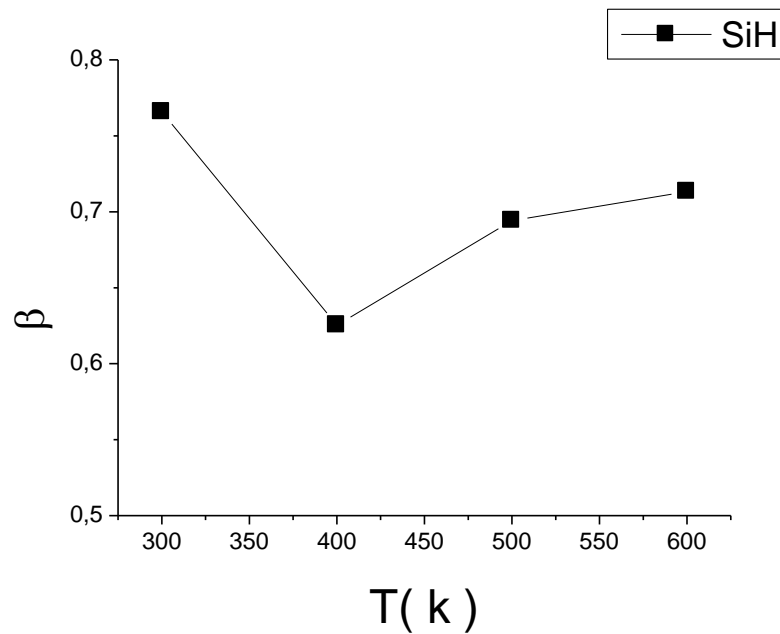


Figure III.15 : Variation de probabilité β de SiH en fonction T , pour $n_e=10^{18} \text{ m}^{-3}$ et $T_e=2.5\text{eV}$

La probabilité S varie suivant la température T comme le montre la figure III.16.

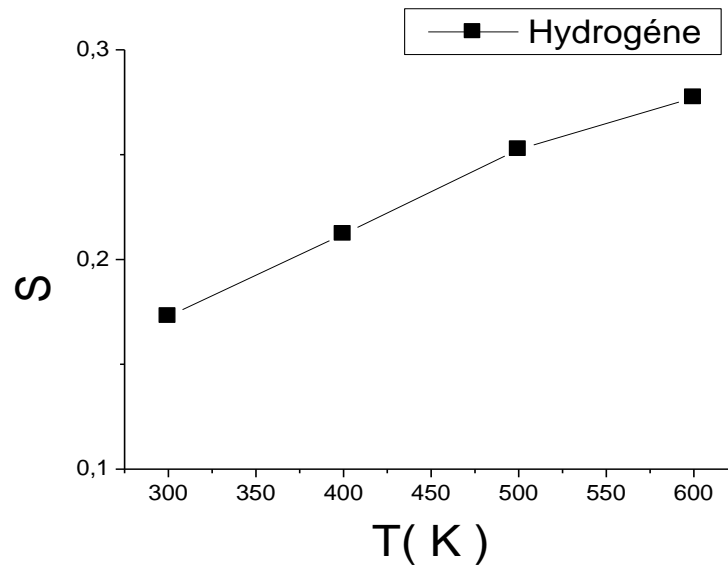


Figure III.16 : Variation de probabilité S de H en fonction T , pour $n_e=10^{18} \text{ m}^{-3}$ et $T_e=2.5 \text{ eV}$

La probabilité γ varie suivant la température T comme le montre la figure III.17.

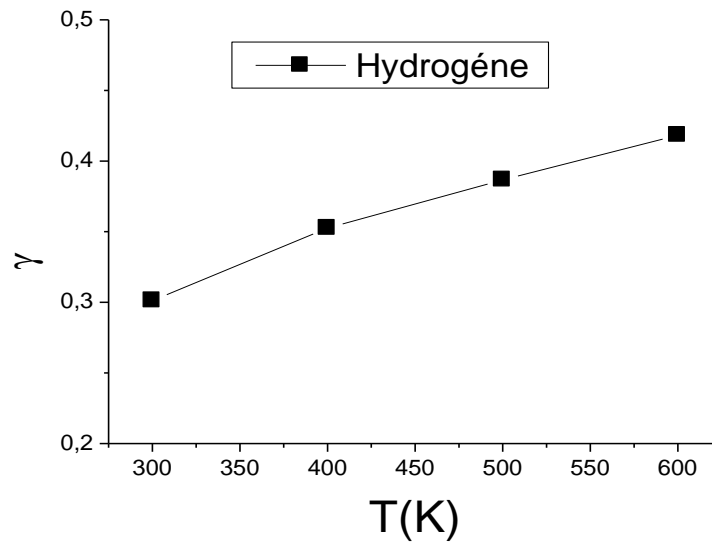


Figure III.17 : Variation de probabilité γ de H en fonction T , pour $n_e=10^{18} \text{ m}^{-3}$ et $T_e=2.5 \text{ eV}$

La probabilité β varie suivant la température T comme le montre la figure III.18.

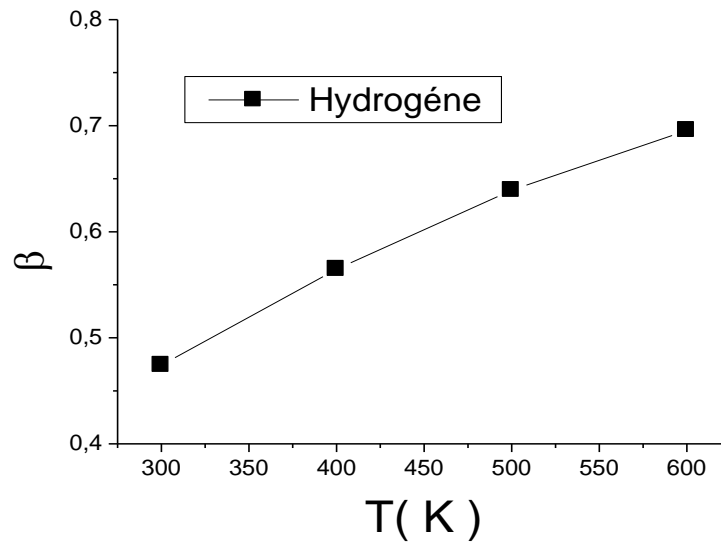


Figure III.18 : Variation de probabilité β de H, en fonction T , pour $n_e=10^{18} \text{ m}^{-3}$ et $T_e=2.5\text{eV}$

Nous avons considéré que quelle que soit l'énergie des électrons, ils peuvent arracher les hydrogènes de la surface, leurs probabilité de réactivité est 1.

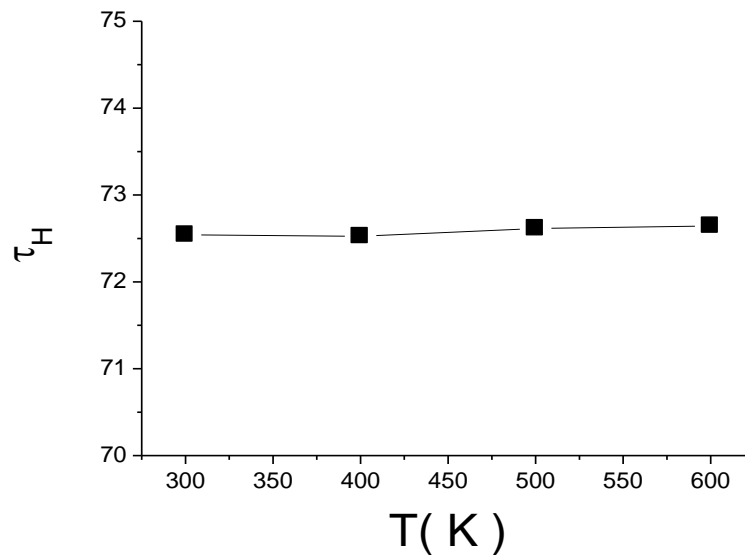


Figure III.19 : Variation de taux des sites hydrogénés en fonction de T , pour $n_e=10^{18} \text{ m}^{-3}$ et $T_e=2.5 \text{ eV}$

Le tableau III.2 présente, la variation de S et γ et β , pour SiH_3 , en fonction de la température électronique T_e .

Tableau III.2 : Les valeurs des probabilités de réactivité à la surface en fonction des énergies électronique, pour $T=300\text{K}$, $n_e=1*10^{15} \text{ m}^{-3}$

T_e	2.4eV	3eV	3.5eV
S	0.069	0.337	0.058
γ	0.016	0.032	0.015
β	0.085	0.369	0.073

Le tableau III.3 présente, la variation de S et γ et β , pour SiH_3 , en fonction des densités électroniques.

Tableau III.3 : les valeurs des probabilités de réactivité à la surface en fonction des densités électroniques, pour $T=300\text{K}$, $T_e=2.4\text{eV}$

N_e	$1*10^{15} \text{ m}^{-3}$	$1.7*10^{16} \text{ m}^{-3}$	$3.4*10^{16} \text{ m}^{-3}$
S	0.069	0.005	0.0009
γ	0.016	0.005	0.005
β	0.085	0.010	0.014

Discussions:

Les probabilité de réactivité sur site

-La figure III.1, la figure III.3, la figure III.4 et la figure III.5 montrent que les probabilités P_s et P_γ pour les radicaux (SiH_3 , SiH_2 , SiH et H) augmentent avec l'augmentation de la température de gaz dans l'intervalle [200 à 500 K] .

- La figure III.2 : montre que la probabilité P_γ pour le radical SiH_3 augment linéairement avec l'augmentation de température de gaz dans l'intervalle [200 à 500 K] .

Les probabilité de réactivité à la surface

-La figure III.6 montre que la probabilité de la réactivité à la surface de radical SiH_3 est constante.

- La figure III.7 : montre que S_{SiH_3} est constante lorsque la température augmente dans l'intervalle [300 , 600K] .

- La figure III.8, la figure III.9, la figure III.16, la figure III.17 et La figure III.18 montrent que, γ_{SiH_3} , β_{SiH_3} et β_{SiH_2} , S_{H} , γ_{H} et β_{H} , augmentent avec l'augmentation de la température dans l'intervalle [300 , 600 K] .
- La figure III.10 : montre que S_{SiH_2} , augment avec la température entre [300 , 400K] puis elle reste presque constante entre [400 , 600 K] .
- La figure III.11 : montre que γ_{SiH_2} , diminue entre [300.400K] puis elle augment dans l'intervalle [400 , 500 K] ,elle est presque constante dans l'intervalle [400 , 600 K] .
- La figure III.12 : montre que β_{SiH_2} est constante dans l'intervalle [300.400 K], puis elle augmente dans l'intervalle [400 , 500 K] ,puis elle diminue dans l'intervalle [500 , 600 K] .
- La figure III.13 : montre que S_{SiH} , diminue dans l'intervalle [300,.400 K] ,puis elle augmente dans d l'intervalle [400 , 500K] , elle est constante dans l'intervalle [500 , 600K].
- La figure III.14 et la figure III.15 : montrent que γ_{SiH} et β_{SiH} , diminuent dans l'intervalle [300,.400 K] , puis elles augmentent dans l'intervalle [400 , 600K] .
- La figure III.19 : montre que le taux de sites hydrogénés est constant lorsque la température augmente de la température dans l'intervalle [300 - 600K] .

La simulation MC nous a permis de trouver les valeurs de probabilités de réactivité à la surface, de collage et de recombinaison et de réactivité des radicaux (SiH_3). Les résultats de la simulation sont très proches des résultats expérimentaux de Valipa obtenus par la simulation DM [26]

*Conclusion générale
et perspectives*

Conclusion générale et perspectives

La croissance de couches minces à partir de plasmas à basse température présente un grand intérêt pour de nombreuses applications. Le dépôt chimique en phase vapeur assisté par plasma (PECVD) (ou Plasma Enhanced Chemical Vapor Deposition) est parmi les méthodes d'élaboration les plus courantes pour la réalisation de couches minces.

Ce travail concerne la déposition d'une couche mince a-Si:H élaboré par procédé PECVD à partir d'un mélange gazeux $\text{SiH}_4 / \text{H}_2$. Dans ce travail, la simulation MC consiste à choisir aléatoirement des particules dans le volume du réacteur et des sites à la surface de substrat. Les radicaux neutres considérés dans cette étude sont : SiH_3 , SiH_2 , SiH et H issus de plasma. Nous avons calculé les probabilités de réactivité sur site P_s , et P_γ et les probabilités de réactivité à la surface S , γ et β . Pour SiH_3 l'énergie d'activation en cas de collage est 0.09eV et l'énergie d'activation en cas de recombinaisons est 0.2eV. Nous avons trouvé que $P_s=0.853$, et $P_\gamma=0.384$ pour $T=500\text{K}$. Ces résultats sont les mêmes que ceux trouvés par O.K. Babahani par un calcul analytique [12]. Nous avons calculé $S=0.33$, $\gamma=0.17$ et $\beta=0.49$. Le taux des sites hydrogénés calculé est $\tau_H=73\%$. Nos résultats sont très proches des résultats expérimentaux de Valipa et al. [26]

-On peut réaliser d'autres études qui concernent le calcul des probabilités de réactivité lors de déposition d'autres couches minces à partir d'autres mélanges gazeux.

-On peut étudier l'effet de la variation de la température du substrat sur ces probabilités.



Références

Références

- [1] O. Babahani ; *"Contribution à l'étude des plasmas lors de déposition sur couches minces par procédés CVD "*; Mémoire de magister, Université de Ouargla (2004).
- [2] A. Grunenwald ; *" Dépôt et caractérisation de couches minces diélectriques poreuses à porosité ordonnée obtenues par voies sol-gel et plasma"*; thèse de doctora; l'Ecole Nationale Supérieure de Chimie de Montpellier, (2011)
- [3] S. Benramache ; *"Elaboration et caractérisation des couches minces de ZnO dopées cobalt et indium "*; Thèse de Doctorat ; Université de Biskra (2012).
- [4] N. Attaf; *"Etude Energétique d'une décharge lumineuse utilisée dans le dépôt de couche mince de a-Si "*; Thèse de Doctorat ; Université Constantine (2003).
- [5] S. Hariech ; *"Elaboration et caractérisation des couches minces de sulfure de cadmium (cds) préparées par bain chimique (CBD)"*; Mémoire de magister ; Université Constantine (2009).
- [6] H. O. K. Kebaili ; *"Contribution à l'étude par la simulation numérique de Dynamique Moléculaire de la croissance des couches minces par procédé PECVD "*; Mémoire magister, Université Kasdi Merbah Ouargla (2013).
- [7] M. Khechba; *"Caractérisation de la réaction interfaciale entre une couche mince de tungstène et un substrat d'acier"*; Mémoire de magister, Université Mentouri, Constantine (2008).
- [8] F. Yaninb ; *"Contribution à l'élaboration de couches minces d'Oxydes Transparents Conducteurs (TCO) "*; Mémoire de magister ; Université Mentouri, Constantine (2010).
- [9] S. Mahdjoub ; *"Elaboration et Etude des Couches Minces du Carbure de Silicium"*; Mémoire de magister ; Université Mentouri Constantine (2010).
- [10] A.Gupta, H. Yang, G. N. Parsons ; *"Surface réaction during plasma enhanced chemical vapor deposition of silicon based dielectrics "*; surface science **496**, pp307-317,(2002)
- [11] A. Khaled ; *" Elaboration de nevvelle phases de siliciumen couches minces "*; Mémoire de magister ; Université Mentouri, Constantine (2008).
- [12] O.Babahani ; *"Simulation numérique par la méthode de Monte Carlo de la déposition de couche mince par procédé CVD "*; Thèse de Doctorat ; Université de Ouargla (2013).

- [13] S. B. Zabardjade ; *"Élaboration et caractérisations du silicium polycristallin par cristallisation en phase liquide du silicium amorphe"*; Thèse de Doctorat ; Université Paris Sud (2012).
- [14] K. Bogdan ; *"adsorption-définition"* ; laboratoire madirel Université , France.
- [15] N. Yahiaoui ; *"Etude de l'adsorption des composés phénoliques des margines d'olive sur carbonate de calcium hydroxyapatite et charbon actif"*; Mémoire de magister ; Université de Tizi-Ouzou (2012).
- [16] B. Régis ; *" Interaction de l'hydrogène atomique avec les surface de silicium : réalisation du système expérimental caractérisation et premiers résultats"*; Thèse de doctorat ; Ecole Polytechnique (2004).
- [17] O. Babahani, F. Khelfaoui and M. T. Meftah ; *"Analytical calculation of site and surface reaction probabilities of SiH_x radicals in PECVD process "*; Phys. J. Appl. Phys., Vol. **62**, 1030 (2013).
- [18] C. E. Chiteur ; *" Physico-chimie des surface l'adsorption gaz-solide et liquide-solide "*; Alger Office des Publications Universitaires (2004).
- [19] D. J. Srolovitz, C. A. Volkert, M. J. Fiues and R. J. Kee ; *" Modeling and simulation of thin-film processing. Materials "*; Research Society Symposium Proceedings, Volume **389**, (1995).
- [20] W.D.Wilson, L.G. Haggmark, J.P. Biersak; Phys. Vol. **15**, 2458, (1977).
- [21] P. M. Morse; Phys. Rev., Vol. **34**, 57 (1929).
- [22] Y. Benzahi ; *"Simulation numérique par la dynamique moléculaire de l'interaction plasma-surface lors de déposition des couches minces"*; Mémoire de magister; Université Ouargla (2002).
- [23] 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).
- [24] G. Kochanski ; *"Monte Carlo simulation"* ; <http://kochanski.org/gpk>,
- [25] O. Babahani et F. Khelfaoui ; *"1^{er} Séminaire International sur la Physique des Plasmas"* ; (SIPP2011), Ouargla du 13-15 février (2011).
- [26] M. S. Valipa, Eray S. Aydil et Dimitrios Maroudas ; *"Atomistic calculation of the SiH₃ surface reactivity during plasma deposition of amorphous silicon thin films "*; Surface Science, Vol. **572**,(2004).

ملخص:

من أجل توضع طبقة رقيقة من a-Si : H بواسطة التوضع الكيميائي المدعم بالبلازما PECVD, اقترحنا حساباً عددياً بلغة الفورتران, وباستعمال محاكاة مونت كارلو وكمون (3-9) لحساب قيم احتمالات التفاعل على المواقع P_s و P_γ واحتمالات التفاعل على السطح وهي معامل الالتحام S, معامل إعادة التركيب γ ومعامل التفاعل β لمختلف الجذور (SiH_3 , SiH_2 , SiH , H), من أجل درجات حرارة مختلفة للمزيج الغازي المستعمل (SiH_4 / H_2) وقد كانت نتائجنا متوافقة مع أعمال أخرى .

الكلمات الدالة : محاكاة مونت كارلو . حساب الاحتمالات . توضع طبقة رقيقة . PECVD, CVD.

Résumé :

Pour la déposition d'une couche mince de (a-Si: H) par le procédé chimique en phase vapeur assisté par plasma (PECVD), nous avons proposé un calcul numérique en utilisant le langage fortran, la simulation de Monte Carlo et le potentiel (3-9). Nous avons calculé les probabilités de réactivité sur site P_s et P_γ et les probabilités de réactivité à la surface, probabilité de collage S, de recombinaison γ et de réactivité β pour les radicaux (SiH_3 , SiH_2 , SiH , et H) et pour différentes température de mélange gazeux (SiH_4 / H_2). Nos résultats sont en bonne accord avec d'autres travaux.

Mots de clefs : Simulation de Monte Carlo, Calcul des probabilités, Déposition de couches minces, CVD, PECVD,

Summary :

For the deposition of a thin films (a-Si: H) by the chemical vapor assisted by plasma (PECVD), we proposed a numerical calculation using the Fortran language, Monte Carlo simulation and the potential (3-9). We calculated site reaction probabilities P_s , P_γ . We calculated also sticking probability S, recombination probability γ and surface reaction reactivity β for the radicals (SiH_3 , SiH_2 , SiH , and H) at different temperatures of gas mixture (SiH_4 / H_2). Our results are in good agreement with other works.

Key words: Monte Carlo simulation, Calculation of probability, Deposition of thin films, PECVD, CVD.