



REPUBLIQUE ALGERIENNE DEMOCRATIQUE ET POPULAIRE
MINISTRE DE L'ENSEIGNEMENT SUPERIEUR ET DE LA RECHERCHE SCIENTIFIQUE

UNIVERSITE ABOU-BEKR BELKAID - TLEMCCEN

THÈSE

Présentée à :

FACULTE DES SCIENCES – DEPARTEMENT DE PHYSIQUE

Pour l'obtention du diplôme de :

DOCTORAT EN SCIENCES

Spécialité: **Physique des Matériaux**

Par :

Mr BOUDGHENE STAMBOULI Arslane

Sur le thème

Étude des conditions physiques d'une décharge DF-CCP pour l'obtention de couches minces

Soutenue publiquement le 12/04/2018 à Tlemcen devant le jury composé de :

Mr INAL Mokhtar	Professeur	Univ. Tlemcen	Président du jury
Mr BENALLAL Rafik	MCA	ESSA. Tlemcen	Directeur de thèse
Mr BENDIB Abderrezeg	Professeur	USTHB Alger	Examineur
Mr LASRI Boumediene	Professeur	Univ. Saïda	Examineur
Mme BEDRANE Zineb	MCA	Univ. Tlemcen	Examineur

*UNITE DE RECHERCHE MATERIAUX ET ENERGIES RENOUVELABLES
BP 119, 13000 Tlemcen - Algérie*

Étude des conditions physiques d'une décharge DF-CCP
pour l'obtention de couches minces

Arslane BOUDGHENE STAMBOULI

16 avril 2018

Résumé

On présente dans ce travail l'effet de la capacité de blocage (C_B) et l'angle de phase (θ) par une décharge plasma capacitive double fréquence (DF-CCP). Cette étude est réalisée par le modèle particulière en tenant compte des collisions de Monté-Carlo (PIC-MCC). Les résultats de la simulation sont confirmés par un modèle semi-analytique, nos résultats montrent que le couple (C_B, θ) contrôle la tension d'auto-polarisation (η), où η est la chute de potentiel formé dans les gaines adjacentes à l'électrode de puissance et de masse. On montre aussi la possibilité d'utiliser le couple (C_B, θ) comme paramètres à contrôler indépendamment la chute de potentiel dans la gaine de puissance (Φ_{sp}) par rapport à celui de l'électrode de masse (Φ_{sg}) (et vice-versa). Cette dernière, nous permet de contrôler, quasi-indépendamment la distribution en énergie ioniques bombardant chaque électrode.

Abstract

This work investigates the effects of a blocking capacitor (C_B) and a phase angle (θ) on Dual Frequency Capacitively Coupled Plasma (DF-CCP). This investigation is conducted by a Particle-In-Cell with Monte Carlo Collision (PIC-MCC) model. The simulation results are corroborated by a semi-analytical model. Our simulations show that the couple of parameters (C_B, θ) allows the control of the DC self-bias, η , as well as the potential drop within the sheaths that form in front of the powered and grounded electrodes. We show, also, that it is possible to use the parameters couple (C_B, θ) such that to control the potential drop within the sheath in front of the powered electrode, (Φ_{sp}), independently of the potential drop within sheath in front of the grounded electrode, (Φ_{sg}), and vice versa. This latter ability allows us to control, quasi independently, the ion energy distribution bombarding each electrode.

ملخص

يعرض هذا العمل تأثير سعة الحجب (C_B) والصفحة الابتدائية (θ) عن طريق تفريغ البلازما السعوية مزدوجة التواتر (DF-CCP). نفذت هذه الدراسة عن طريق نموذج الجسيمات مع الأخذ بعين الاعتبار تصادمات مونت كارلو (PIC-MCC). نتائج المحاكات تؤكد بواسطة نموذج شبه تحليلي، تظهر نتائجنا أن الزوج (C_B, θ) يتحكم في توتر الاستقطاب الذاتي (η)، بحيث η هو فرق الكمون المشكل في الأغمد على القطب الكهربائي و القطب الشامل، تظهر أيضا إمكانية استخدام الزوج (C_B, θ) كإعدادات تحكم بشكل مستقل في فرق الكمون للغمد في القطب الكهربائي (Φ_{sp}) بالنسبة الى القطب الشامل (Φ_{sg}) (والعكس بالعكس). يسمح لنا هذا الأخير بالسيطرة بشكل شبه مستقل على توزيع قصف أيونات الطاقة على كل قطب كهربائي.

A mes très chers parents

A ma femme

et mes filles

Manel et Rania

Remerciements

*Je tiens tout d'abord à remercier **Dieu** le tout puissant et miséricordieux, qui m'a donné la force et la patience d'accomplir ce modeste travail.*

Le travail rapporté dans cette thèse est réalisé au sein de la division Nouveau Matériau, Système et Environnement (NMSE), de l'Unité de Recherche Matériaux et Énergie renouvelable (URMER), de l'université de Tlemcen.

*Je tiens à exprimer mes sincères remerciements à Monsieur **BENALLAL Rafik**, Maître de conférences A, à l'École Supérieure en Sciences Appliquées de Tlemcen, en tant que Directeur de thèse, pour l'orientation, la confiance, la patience qui ont constitué un apport considérable, son exigence, sa disponibilité, ses encouragements et aussi pour m'avoir supporté durant ces années, sans lequel ce travail n'aurait pas pu être mené au bon port. Je désire vous exprimer mes respects et mon affection.*

*J'exprime ma gratitude à Monsieur **INAL Mokhtar**, Professeur à l'université de Tlemcen qui m'a fait l'honneur de présider le jury de cette thèse.*

*Mes remerciements les plus chaleureux s'adressent à Monsieur **LASRI Boumediene**, Professeur à l'université de Saïda, Monsieur **BENDIB Abderrezeg**, Professeur à l'université USTHB d'Alger ainsi qu'à Mme **BEDRANE Zineb**, Maître de conférences A, à l'université de Tlemcen, qui ont accepté d'être membres et examinateurs, veuillez trouver ici l'expression de ma profonde gratitude.*

*J'adresse mes remerciements les plus respectueux à Monsieur **CHABANE SARI Nasr-Eddine**, Professeur à l'université de Tlemcen, pour sa compréhension, soutien et encouragement durant la réalisation de cette thèse.*

*Mes remerciements s'étendent également à Monsieur **ODINI Noureddine**, Maître de recherches A, au Centre Algérien de Développement des Technologies Avancées (CDTA), pour son aide, la pertinence de ses remarques et sa collaboration avec nous dans l'accomplissement de ce modeste travail.*

Enfin, je tiens également à remercier toutes les personnes qui ont participé de près ou de loin à la réalisation de ce travail.

Arslane BOUDGHENE STAMBOULI

Table des matières

Table des figures	7
Liste des tableaux	10
Nomenclature	10
Introduction Générale	14
1 Déposition Par Procédé Plasma à Couplage Capacitive	16
1.1 Les plasmas	16
1.2 Grandeurs caractéristiques du plasma	17
1.2.1 Densités des espèces	17
1.2.2 Température électronique	17
1.2.3 Fréquence d'oscillation	18
1.2.4 Taux d'ionisation, de dissociation, d'excitation	19
1.2.5 Libre parcours moyen	19
1.2.6 Longueur de Debye électronique	20
1.2.7 Potentiel plasma	20
1.2.8 Potentiel flottant	21
1.2.9 La tension d'auto-polarisation	21
1.3 Décharges Radiofréquences Capacitives	23
1.3.1 Disposition d'une décharge RF capacitive	24
1.4 Les principales applications des décharges RF-CCP	25
1.4.1 Application au traitement de surface	25
1.4.2 La gravure ionique réactive	26
1.5 Phénomène de déposition de couches minces	26

1.5.1	Dépôt par pulvérisation cathodique	26
1.5.2	Caractéristiques liées à la pulvérisation	27
1.5.2.1	Seuil de pulvérisation	27
1.5.2.2	Rendement de pulvérisation	28
1.5.3	Paramètres de dépôt	29
1.5.3.1	Puissance	29
1.5.3.2	Pression et distance cible-substrat	30
2	La Méthode PIC-MCC	31
2.1	Le modèle PIC	31
2.1.1	Schéma général d'une simulation PIC-MCC	31
2.1.2	Équation de mouvement	33
2.1.3	Interpolation de la densité de charge	33
2.1.4	Résolution de l'équation de Poisson	34
2.1.5	Interpolation des champs (\vec{E} et \vec{B})	36
2.2	Le modèle MCC	37
2.2.1	La méthode des "collisions-nulles"	37
2.2.2	Types de collision dans l'argon	39
2.2.2.1	Les collisions électron-neutre	40
2.2.2.2	Les collisions ion-neutre	42
2.3	Émission secondaire	43
2.4	Application au modèle PIC-MCC	43
2.4.1	Description du code xpdp2	43
2.4.2	Condition de stabilité	45
3	Modélisation et Simulation d'une Décharge DF-CCP	47
3.1	Modèle physique	47
3.1.1	Origine de l'asymétrie électrique dans une décharge DF-CCP	47
3.1.2	Modélisation physique	49
3.2	Simulation d'une décharge DF-CCP	56
4	Résultats et Discussions	61
4.1	Représentations des fonctions de distributions des énergies ioniques	61
4.2	Profil de potentiel	69

TABLE DES MATIÈRES

4.3	Paramètre de symétrie	71
4.4	Profils des densités	73
4.5	Influence du couple de paramètres C_B et θ	74
	Conclusion Générale	82
	Bibliographie	84

Table des figures

1.1	Potentiel du plasma dans l'espace inter-électrode.	21
1.2	Distribution du potentiel entre les électrodes pour une décharge RF à couplage capacitif.	22
1.3	Représentation schématique du potentiel plasma $V_p(t)$ [trait plein], de la tension RF excitatrice [trait discontinu] et de la tension d'auto polarisation V_{DC} pour trois géométries de décharge RF à couplage capacitif [1].	23
1.4	schéma d'une décharge RF capacitive.	25
1.5	Principe de pulvérisation cathodique diode radiofréquence [2].	27
1.6	variation du rendement de pulvérisation en fonction de l'énergie des ions incidents[3].	28
1.7	Rendement de pulvérisation suivant la nature de la cible (pour Ar^+ d'énergie comprise entre 0 et 600 eV)[3].	29
2.1	Organigramme d'une simulation PIC	32
2.2	Schéma de l'algorithme Leap-frog	33
2.3	projection des charges dans une maille 2D	34
2.4	Discretisation de la maille pour le calcul du champ \vec{E} et interpolation à la position de la particule.	37
2.5	Représentation graphique de l'addition du processus des collision-nulle. Ce qui se traduit par une fréquence de collision constante sur toutes les énergies [4].	39
2.6	Section efficace électron-neutre dans l'argon [5].	40
2.7	Section efficace ion-neutre dans l'argon [6].	42
2.8	Fichier d'entrée.	44
2.9	Interface graphique du programme xpdp2.	44
3.1	Schéma de la simulation d'une décharge DF-CCP	48
3.2	Circuit électrique équivalent d'une décharge DF-CCP [7]	50

3.3	$V(t) = 250 \cos(2\pi ft + \theta) + 250 \cos(4\pi ft)$ pour différentes valeurs de l'angle de phase θ pour 2 périodes RF ($2T_{RF}$).	54
3.4	Solution de l'équation (3.33)[8].	55
3.5	Variations de ϕ_{m1} et ϕ_{m2} à partir des équations (3.36) à (3.39)[8]	56
3.6	Comparaison de η en fonction de θ calculé par la simulation et le modèle analytique pour : (a) $C_B = 50pF$, (b) $C_B = 100pF$ et (c) $C_B = 500pF$, en considérant $V_L = V_H = 250V$ et $V_0 = V_L + V_H = 500V$	59
4.1	Fonction de distribution ionique (a-f) à différent angle de phase calculée par PIC-MCC à différentes valeurs de C_B pour ($V_0 = 500V$, $p = 20mTorr$, $d = 3cm$).	64
4.2	Fonction de distribution ionique(a-d) à différentes capacité de blocage C_B calculée par PIC-MCC à différentes valeurs de θ pour ($V_0 = 500V$, $p = 20mTorr$, $d = 3cm$).	67
4.3	Fonction de distribution des énergies ioniques à différents tensions d'entrées (a) électrode de puissance, (b) électrode de masse ($p = 5mtorr$, $f = 13,56MHz$ et $27,12MHz$).	68
4.4	le profil de potentiel calculé en fonction de la distance inter électrode pour différents capacités de blocage C_B à $\theta = 0^\circ$	69
4.5	le profil de potentiel calculé en fonction de la distance inter électrode pour différents angle de phase (θ), (a) $C_B = 100pF$, (b) $C_B = 300pF$, (c) $C_B = 500pF$	71
4.6	Paramètre de symétrie (ε) en fonction de : (a) la capacité de blocage C_B pour $\theta = 0^\circ$ et $\theta = 90^\circ$ et (b) en fonction de l'angle de phase (θ) pour $C_B = 50pF$, $100pF$ et $300pF$	72
4.7	Profil de la densité d'argon en fonction de l'angle de phase obtenu par la simulation PIC/MCC pour $C_B = 100pF$, à l'électrode de puissance (en noir), et à l'électrode de masse (en rouge).	73
4.8	Distribution spatiale des densités d'argon entre l'électrode de puissance et l'électrode de masse calculé par la simulation PIC/MCC à $\theta = 0^\circ$ (à gauche) et à $\theta = 90^\circ$ (à droite). ($p = 20mTorr$, $V_{RF} = 500V$, $d = 3cm$).	74
4.9	distribution (en Volts) de (a) potentiel d'auto-polarisation η , (b) chute du potentiel de la gaine adjacente à l'électrode de puissance ϕ_{sp} et (c) chute du potentiel de la gaine adjacente à l'électrode de masse ϕ_{sg} en fonction de la capacité de blocage C_B et de l'angle de phase θ pour les conditions résumées au tableau 3.1.	76

4.10 (a) distribution de la chute de potentiel de la gaine adjacente à l'électrode de puissance (lignes solides) et de masse (lignes pointillées) en fonction de la capacité de blocage C_B et l'angle de phase θ pour les conditions résumées au tableau 3.1. Les symboles en cercles (1-11) représentent les 11 cas de simulations dans le tableau 4.1. (b) le profil de potentiel moyen calculé pour les conditions résumées dans le tableau 3.1 et pour les cas de 1 à 6 (voir tableau 4.1). (c) le profil de potentiel moyen calculé pour les conditions résumées dans le tableau 3.1 et pour les cas de 7 à 11, voir tableau 4.1. 78

4.11 Fonction de distribution des énergies ioniques (IEDF) à l'électrode de puissance et de masse pour les cas résumés dans la figure 4.10(a). (a) et (c) à l'électrode de masse. (b) et (d) à l'électrode de puissance. 80

Liste des tableaux

1.1	Valeurs de fréquences d'oscillations pour différentes densités dans un plasma d'argon	18
1.2	Gamme de fréquence pour les sources de plasma	24
1.3	Seuils d'énergie de pulvérisation (eV) [9].	28
2.1	Tableau récapitulatif des conditions de stabilité à la modélisation particulaire communément utilisées.	46
3.1	Paramètre de simulation utiliser dans le code (XPDP2)	57
4.1	Paramètres de contrôles utilisés dans différentes cas de simulations.	76

Nomenclature

γ	<i>Coefficient d'émission secondaire</i>
ϕ_{m1}	<i>Tension maximale dans la gaine (V)</i>
ϕ_{m2}	<i>Tension minimale dans la gaine (V)</i>
AC	<i>Source de courant alternative (V)</i>
I_{sp}	<i>Intégrale de gaine de l'électrode de puissance</i>
I_t	<i>Courant de conduction (A)</i>
n_{cx}	<i>Nombre des cellules suivant (x)</i>
n_{cy}	<i>Nombre des cellules suivant (y)</i>
N_{init}	<i>Densité initiale (m^{-3})</i>
n_{sp}	<i>Nombre des espèces</i>
p_n, g_n	<i>Composantes complexes de Fourier</i>
Q_t	<i>Charge d'espace non normalisée (C)</i>
q_t	<i>Charge d'espace positive (C)</i>
s_m	<i>Largeur maximale de la gaine (m)</i>
V_c	<i>Chute tension de la capacité de blocage (V)</i>
V_{sg}	<i>Tension dans la gaine de masse (V)</i>
V_{sp}	<i>Tension dans la gaine de puissance (V)</i>
V_t	<i>Tension total au sein de la décharge (V)</i>
α	<i>Taux d'ionisation</i>
η	<i>Tension d'auto-polarisation (V)</i>
λ_D	<i>Longueur de Debye (m)</i>
λ_{ij}	<i>Libre parcours moyen (m)</i>
ν_{coll}	<i>Fréquence de collision (Hz)</i>
ω_{pe}	<i>Fréquence plasma électronique (rad/sec)</i>

Nomenclature

ω_{pi}	Fréquence plasma ionique (rad/sec)
ϕ_{sg}	Chute de tension de l'électrode de masse (V)
ϕ_{sg}^f	potentiel flottant à l'électrode de masse (V)
ϕ_{sp}	Chute de tension de l'électrode de puissance (V)
ϕ_{sp}^f	Potentiel flottant à l'électrode de puissance (V)
ρ	Densité de charge (Cm^{-3})
σ_{ij}	Section efficace (m^2)
τ_i	Taux d'ionisation
θ	Angle de phase (deg)
ϵ_0	Permittivité du vide ($F.m^{-1}$)
ϵ_{diff}	Énergie de diffusion (J)
ϵ_{ej}	Énergie d'éjection (J)
ϵ_{inc}	Énergie incident (J)
ϵ_{ion}	Énergie de seuil d'ionisation (J)
ϵ_i	Énergie des ions (J)
ϵ_N	Énergie des atomes neutres (J)
\vec{B}	Champ magnétique (T)
\vec{E}	Champ électrique (NC^{-1})
C_B	Capacité de Blocage (F)
E_i	Énergie cinétique de la ième particule (J)
K	Fonction d'interpolation linéaire
k_B	Constante de Boltzmann (JK^{-1})
m_e	Masse électronique (kg)
m_i	Masse ionique (kg)
m_p	Masse de particule chargé (kg)
n_0	Densité des neutres (m^{-3})
n_e	Densité électronique (m^{-3})
n_{i+}	Densité d'ions positifs (m^{-3})
n_{i-}	Densité d'ions négatifs (m^{-3})
p	Pression (Torr)

Nomenclature

P_i *Probabilité de collision*

q *Charge élémentaire (C)*

T_e *Température électronique (eV)*

T_i *Température ionique (eV)*

v_e *Vitesse de l'électron (m/s)*

V_p *Potentiel plasma (V)*

V_p, V_{Bulk} *Chute de tension au centre du plasma (V)*

Introduction Générale

La fabrication assistée par plasma englobe une vaste gamme d'applications industrielles. Elle a un impact direct sur l'économie mondiale dans différents aspects de l'industrie des hautes technologies. Les décharges à couplage capacitive sont les plus utilisées dans la fabrication des semi-conducteurs et des dépôts de couches minces. Une compréhension globale et quantitative de ces décharges est requise pour optimiser le procédé plasma. Ces décharges radio fréquences (RF) sont utilisées dans de nombreuses applications industrielles de traitement de surface[10]. La qualité des résultats de ces procédés nécessite une maîtrise des conditions physique et chimique du plasma. À titre d'exemple, le challenge dans les dépôts de couches minces est d'obtenir un taux de dépôt idéal avec une répartition spatiale uniforme de la couche[11]. Un des avantages des décharges plasma à couplage capacitif double fréquence (CCP-DF) est l'éventuelle possibilité de contrôler l'énergie cinétique ionique pendant le processus[12, 13, 14, 15]. L'un des objectifs dans les dépôts physiques en phase vapeur (PVD) est de pouvoir donner un niveau d'énergie ionique élevé afin d'assurer un taux de pulvérisation souhaité sur l'électrode cible, tout en limitant l'énergie ionique sur le substrat[16], et cela afin d'éviter l'endommagement du film mince déposé[17]; dans certaines applications, les distributions angulaires des ions (IAD)[18] et les énergies de bombardement ioniques sont choisis soigneusement afin de contrôler la micro-structure du film minces déposé. Pour y parvenir, on peut apporter un effet asymétrique électrique à la décharge qui va nous permettre de contrôler la tension d'auto-polarisation (V_{DC}) induite[19].

La superposition d'une fréquence fondamentale f (13,56 Mhz) et son harmonique $2f$, peut entraîner une asymétrie électrique (EAE) dans une décharge électrique d'un réacteur possédant une géométrie symétrique sous des conditions particulières[20, 7, 21]. Cette technique (CCP-DF) est intéressante, car elle nous permet de contrôler la décharge via un circuit électrique externe, et cela sans modifier sa configuration géométrique. Heil et al ont montré que l'utilisation de l'EAE permet de contrôler la tension électrique d'auto-polarisation. Raizer et Shneider[22] ont montré dans leur travail que la capacité de blocage à un effet non marginal sur la tension d'auto-polarisation d'une

décharge plasma à couplage capacitive (CCP) géométriquement asymétrique. Cependant l'effet de la capacité de blocage sur la tension d'auto-polarisation générée par la méthode de (EAE) dans une décharge CCP-DF n'a pas encore été traité.

Dans ce travail, les effets de la capacité de blocage (C_B) et de l'angle de phase (θ) dans une décharge CCP-DF, i.e 13,56 et 27,12Mhz sont étudiés par la simulation (PIC-MCC) à 2 dimensions, soumise à une tension de 500V sous une pression de 20 mTorr. Notre réacteur plan simulé est constitué de deux électrodes de surfaces identiques 100 cm^2 et l'espace de travail est de 3 cm . L'étude s'est focalisée sur le comportement de la décharge à différentes valeurs de la capacité de blocage (C_B) et d'angle de phase (θ), puis sur l'influence du couple de paramètres (C_B, θ). On propose une méthode qui pourrait permettre le contrôle de l'énergie de bombardement ionique sur l'électrode cible indépendamment à celle qui va bombarder le substrat via une décharge CCP-DF reliée à un circuit électrique externe contenant une capacité de blocage C_B .

La thèse est composée d'une introduction générale et de quatre chapitres ; le premier chapitre comporte des généralités sur le plasma, les décharges plasma à couplage capacitif soumises à une double fréquence et des notions sur la pulvérisation et dépôt de couches minces. Le deuxième chapitre contient la méthode de calcul choisie à savoir le PIC-MCC, les conditions de stabilité pour obtenir des résultats fiables et l'algorithme du code XPDP2. Le troisième chapitre décrit avec détails la modélisation physique du problème, les conditions de la simulation qui ont été prises en compte dans les calculs et la comparaison du modèle semi-analytique avec les simulations obtenues. Le quatrième chapitre expose les résultats obtenus et les discussions qui en découlent. Enfin pour compléter cette étude, une conclusion générale avec nos perspectives futures est présentée à la fin de ce document.

Chapitre 1

Déposition Par Procédé Plasma à Couplage Capacitive

1.1 Les plasmas

Le plasma est un gaz partiellement ou totalement ionisé et il est macroscopiquement neutre. Il peut être aussi composé de molécules ou de gaz neutres, de radicaux et d'espèces excitées. L'émission d'un rayonnement, qui donne au plasma ses couleurs magiques, provient de ces espèces excitées qui retournent leurs états fondamentales.

On distingue deux types de plasmas :

- Les plasmas dits chauds qui sont fortement ionisés.
- Les plasmas dits froids caractérisés par des degrés d'ionisation beaucoup plus faibles (inférieur à 10^{-2})

Les plasmas froids peuvent être divisés en deux catégories, les plasmas thermiques qui sont à l'équilibre thermodynamique, et les plasmas hors équilibre thermodynamique. C'est ce dernier type de plasma (froid hors équilibre) qui va être utilisé dans cette étude et dont les caractéristiques et grandeurs fondamentales vont être décrites au cours de ce chapitre.

Les applications industrielles des procédés plasma sont multiples, notamment pour le dépôt de couches minces fonctionnelles ou pour la gravure de matériaux[23, 24, 25]. Les procédés plasmas ont été la base du développement de multiples traitements de surfaces dans de nombreux domaines : micro-électronique[26, 27], métallurgie, textile[28] et polymères. Les autres applications des procédés plasma sont l'éclairage[29], la stérilisation[30], les écrans plats[31], les cellules solaires[32] et la fabrication de revêtements biocompatibles[33], hydrophobes[34] ou

antibactériens[35]. À chaque application lui correspondent des conditions différentes de pression, de composition, de température et de densités électronique et ionique.

1.2 Grandeurs caractéristiques du plasma

1.2.1 Densités des espèces

La densité est le nombre de particules (électrons, ions, ou neutres) par unité de volume. La neutralité du plasma impose l'égalité suivante [36] :

$$n_{i+} = n_e + n_{i-} \quad (1.1)$$

avec n_{i+} densité d'ions positive, n_e densité électronique et n_{i-} densité d'ions négatifs. On suppose les ions mono chargés dans la majorité des décharges électriques. En l'absence d'ions négatifs ou lorsque $n_{i-} \ll n_e$, le taux d'ionisation α est donné par la relation :

$$\alpha = \frac{n_e}{n_e + n_0} \cong \frac{n_e}{n_0} \quad (1.2)$$

où $n_0 \gg n_e$ pour les plasmas froids, n_e densité électronique et n_0 densité des neutres.

Le taux d'ionisation peut varier dans de grandes proportions : de 10^{-7} pour des milieux faiblement ionisés, jusqu'à quelque 10^{-1} pour des plasmas fortement ionisés, (dans les décharges plasmas froids de laboratoire, α est compris entre 10^{-8} et 10^{-3}).

1.2.2 Température électronique

Dans un plasma froid, l'ionisation est principalement produite par collisions entre les électrons de hautes énergies fortement accélérés par le champ électrique, appelés électrons primaires, et des espèces neutres du gaz. De ces collisions, on obtient deux nouvelles espèces [36] :

-Les électrons secondaires, dont l'énergie est inférieure à celle des électrons primaires (quelques eV).

-Les ions, dont l'énergie est faible ($< 1eV$).

Il en résulte un milieu hors équilibre thermodynamique ($T_{ep} > T_i \simeq T_n \sim 300K$).

Avec T_{ep} la température des électrons primaires, T_i la température des ions et T_n température des neutres. A l'état stationnaire, en considérant les distributions de Boltzmann, les températures

caractéristiques sont liées à l'énergie cinétique par la relation suivante :

$$\frac{1}{2}m_j\nu_{qj}^2 = \frac{3}{2}k_B T_j \quad (1.3)$$

où l'indice j désigne la particule considérée, ν_{qj}^2 désigne la vitesse quadratique moyenne de la particule j , m_j la masse, k_B la constante de Boltzmann et T_j la température.

1.2.3 Fréquence d'oscillation

Si, dans un plasma initialement neutre, on introduit une perturbation locale due à un signal RF par exemple, celui-ci va tendre à revenir vers l'état d'équilibre neutre. Cependant, la perturbation initiale engendre généralement une oscillation du plasma autour de son état d'équilibre. Au cours de ces collisions, les ions, beaucoup plus lourds que les électrons, restent pratiquement immobile ; les électrons se déplaçant, sous l'effet d'un champ électrique, provoquent une séparation momentanée des charges de signe opposé, qui tend à revenir à la position d'équilibre. Ce mouvement d'oscillation des électrons est un mouvement sinusoïdal de pulsation ω_{pe} appelée pulsation plasma :

$$\omega_{pe} = \sqrt{\frac{n_e q_e^2}{m_e \epsilon_0}} \quad (1.4)$$

Où $q_e = 1.6 \times 10^{-19} C$, est la charge élémentaire, $\epsilon_0 = 8.85 \times 10^{-12} F.m^{-1}$ la permittivité du vide et n_e la densité électronique du plasma.

De manière générale, on définit la fréquence plasma de l'entité k, f_{pk} telle que :

$$f_{pk} = \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{n_k q_e^2}{m_k \epsilon_0}} \quad (1.5)$$

Où k désigne un électron ou un ion.

Le tableau 1.1 représente quelque valeurs numériques de f_{pe} et f_{pi} pour différentes densités électroniques et ioniques, dans un plasma d'argon[37]

$n_i = n_e(\text{cm}^{-3})$	$f_{pe}(\text{GHz})$	$f_{pi}(\text{MHz})$
10^9	0.28	1.1
10^{10}	0.9	3.3
10^{11}	2.8	11.0

TABLEAU 1.1 – Valeurs de fréquences d'oscillations pour différentes densités dans un plasma d'argon

Si on pose une fréquence supérieure aux fréquences données dans le tableau 1.1, l'espèce concernée ne pourra pas suivre les oscillations du champ électrique.

1.2.4 Taux d'ionisation, de dissociation, d'excitation

Le degré d'ionisation du plasma est directement donné par le rapport τ_i qui est le taux d'ionisation défini par [38]

$$\tau_i = \frac{n_i}{(n_i + n_0)} \quad (1.6)$$

C'est le rapport de la densité des ions à la densité totale (densité des neutres + densité des ions). Enfin, le taux d'excitation est défini comme le rapport de la densité des particules excitées à la somme de la densité des particules excitées et la densité des neutres :

$$\tau^* = \frac{n^*}{(n^* + n_0)} \quad (1.7)$$

1.2.5 Libre parcours moyen

Le libre parcours moyen λ d'une espèce est un paramètre qui résulte de la théorie cinétique des gaz et représente la distance moyenne parcourue par cette espèce entre deux collisions. Il est donné par l'équation(1.8), en considérant une particule immobile par rapport à l'autre et la section efficace indépendante de l'énergie des particules [36].

$$\lambda_{ij} = \frac{1}{n_j \sigma_{ij}} \quad (1.8)$$

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

Si l'on considère le modèle "rigide", considérant les particules cible comme étant immobiles, la section efficace d'une particule i peut se définir par l'équation suivante :

$$\sigma_{ij} = \pi(r_i + r_j)^2 \quad (1.9)$$

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

À partir de l'équation classique des gaz parfaits et de l'équation(1.9), l'équation(1.10) peut s'écrire :

$$\lambda_{ij} = \frac{k_B T_j}{p \pi (r_i + r_j)^2} \quad (1.10)$$

k_B constante de Boltzmann en $(J.K^{-1})$, T_j température des particules j , p pression

1.2.6 Longueur de Debye électronique

La longueur de Debye est la distance parcourue par un électron thermique pendant un cycle de la pulsation plasma [38]

$$\lambda_D = \frac{v_e}{\sqrt{2}\omega_p} \quad (1.11)$$

où v_e est la vitesse de l'électron

Elle peut être aussi donnée par la formule suivante :

$$\lambda_D^2 = \frac{\varepsilon_0 k_B T_e}{e^2 n_e} \quad (1.12)$$

Où T_e et la température électronique en Kelvin

La longueur de Debye donne l'échelle des distances typiques sur lesquelles une perturbation électrostatique s'étend dans un plasma avant d'être écrantée par la réponse des charges du plasma. En particulier, du fait de son interaction avec les autres charges, une particule chargée voit son potentiel coulombien moyen à une distance r devenir :

$$V(r) = \frac{e}{4\pi\varepsilon_0} \frac{1}{r} \exp\left(-\frac{r}{\lambda_D}\right) \quad (1.13)$$

Le potentiel $V(r)$ est écranté sur une distance de l'ordre de λ_D , et de même les épaisseurs des gaines sont quelques fois de l'ordre de la longueur de Debye.

1.2.7 Potentiel plasma

La distribution des charges dans l'ensemble du plasma donne lieu à une évolution spatiale du potentiel. La figure 1.1 représente l'évolution spatiale du potentiel du plasma dans un espace inter-électrode. Cet espace se divise en trois parties : le plasma ou "Bulk" et les deux gaines électrostatiques. Dans les gaines, il y a une chute du potentiel qui va varier dans le temps. Dans la région plasma règne un potentiel stationnaire dit potentiel plasma (V_p ou V_{Bulk})[39].

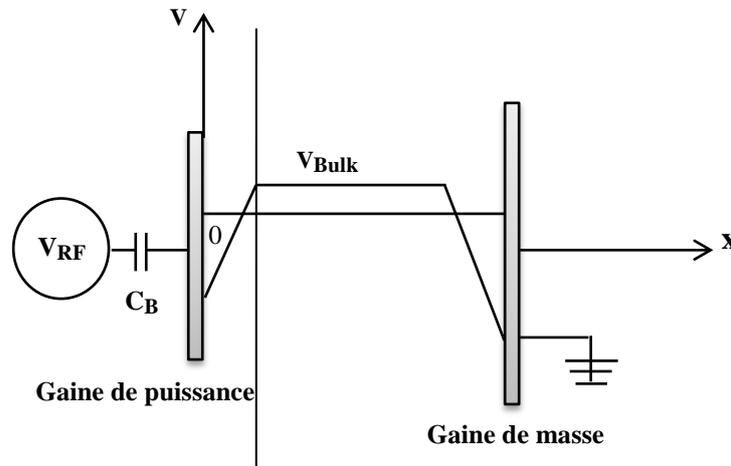


FIGURE 1.1 – Potentiel du plasma dans l'espace inter-électrode.

1.2.8 Potentiel flottant

Le potentiel flottant est le potentiel que va atteindre un corps étranger isolé électriquement plongé dans un plasma. Le potentiel flottant est toujours inférieur au potentiel plasma puisque les électrons plus rapides que les ions arriveront plus vite à la surface provoquant une accumulation de charges négatives (différence de mobilité entre les électrons et les ions). Une gaine va donc se former autour du corps qui va avoir tendance à repousser les électrons et à attirer les ions jusqu'à l'établissement d'un équilibre entre les flux de ces deux espèces [39].

1.2.9 La tension d'auto-polarisation

Sous l'effet d'asymétrie électrique, il est possible d'augmenter l'énergie de bombardement des ions traversant les gaines de champ électrique. Cela aura pour conséquence d'améliorer, à titre d'exemple, la pulvérisation du matériau. Considérons le schéma de la figure 1.2. La surface de l'électrode de puissance alimentée par le potentiel RF est plus petite par rapport à celle de l'électrode reliée à la masse. Une capacité de blocage est placée en série avec un générateur RF de sorte qu'aucun courant de conduction ne s'écoule de l'électrode vers le plasma et vice versa. Lorsque la chute de potentiel de gaine est importante, des électrons suffisamment énergétiques sortent du plasma, ils sont accélérés vers l'électrode et s'accumulent sur la capacité de blocage. Lorsque la chute de potentiel dans la gaine diminue, les électrons sont repoussés dans le plasma alors que les ions affluent sur l'électrode. La mobilité entre électrons et ions étant très différente, la charge accumulée sur la capacité croît jusqu'à l'égalité des flux d'espèces chargées à travers les gaines. Ainsi

un potentiel continu et négatif dite "tension d'auto polarisation", V_{DC} , apparaît à la l'électrode de puissance et s'ajoute à la tension radio fréquence. La chute de potentiel résultante et par conséquent le champ électrique dans la gaine de puissance est plus élevé qu'à la gaine adjacente à l'électrode de masse. La densité de courant à l'électrode de puissance est également supérieure à celle de l'électrode de masse. Cette plus grande chute de potentiel moyennée dans le temps augmente la vitesse dirigée des ions à l'électrode alimentée (ou de puissance). Ce phénomène est utilisé pour des applications telles que la gravure et la pulvérisation dont les performances dépendent de l'énergie des ions [40].

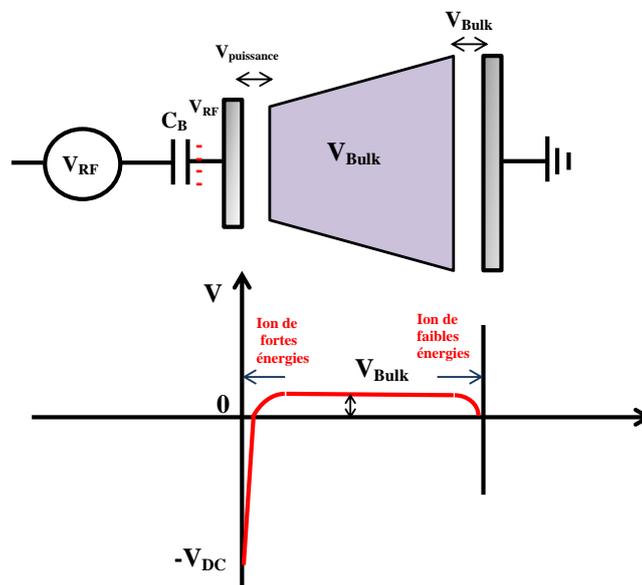


FIGURE 1.2 – Distribution du potentiel entre les électrodes pour une décharge RF à couplage capacitif.

La figure 1.3 montre que la tension d'auto-polarisation apparaît quand les électrodes ont des valeurs de surfaces différentes et quand elles sont couplées à une capacité de blocage. Elle est négative lorsque la surface de l'électrode alimentée est inférieure à celle à la masse (figure 1.3(a)). Elle est positive pour la situation inverse (figure 1.3(c)) et nulle lorsque les électrodes ont la même surface (figure 1.3(b)). Si la géométrie du système est très asymétrique, la valeur de la tension d'auto-polarisation peut être quasiment égale à celle de la tension appliquée $V_{DC} = V_{RF}$ [1].

Il est possible aussi d'obtenir une tension d'auto-polarisation en soumettant notre plasma à une

double fréquence, cela induira un effet asymétrique électrique même si les électrodes ont la même surface [8]. Les prochains chapitres traiteront le phénomène avec plus de détails.

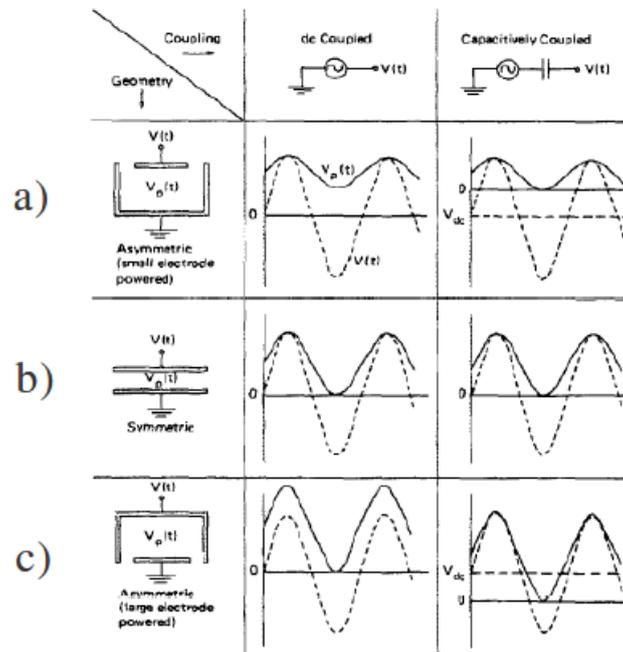


FIGURE 1.3 – Représentation schématique du potentiel plasma $V_p(t)$ [trait plein], de la tension RF excitatrice [trait discontinu] et de la tension d’auto polarisation V_{DC} pour trois géométries de décharge RF à couplage capacitif [1].

1.3 Décharges Radiofréquences Capacitives

Les types de plasmas de décharge sont nombreux. Ils diffèrent par le mode de couplage de l’énergie au gaz, ainsi que par la fréquence d’excitation qui varie du continu au domaine micro-onde. La majorité des systèmes utilisés pour le dépôt ou la gravure en micro-électronique fonctionnent à 13.56 MHz (RF) ou 2.45 GHz (micro-onde). Le domaine radiofréquence est intéressant car il se situe entre les deux fréquences propres du plasma à savoir la fréquence plasma ionique et la fréquence plasma électronique, de sorte que les électrons du plasma vont suivre les variations instantanées du champ électrique, alors que les ions ne suivront que le champ électrique moyen. L’extension spatiale de la décharge est limitée par les parois du réacteur(capacitive), qui peuvent être conductrices ou isolantes.

Les réacteurs plasma utilisés pour le dépôt ou la gravure sont souvent mis à des fréquences comprises entre 1MHz et 200MHz (domaine radiofréquence), et en particulier à 13,56MHz qui est

utilisé pour des applications industrielles et médicales. Le tableau 1.2 [41] donne une classification de fréquence pour les différents types de réacteur commune.

Type	Rang
DC	$f < 1\text{MHz}$
Radiofréquence	$1 < f < 500\text{MHz}$, généralement à 13.56MHz
Micro-onde	$0.5 < f < 10\text{GHz}$, généralement à 2.45GHz

TABLEAU 1.2 – Gamme de fréquence pour les sources de plasma

1.3.1 Disposition d'une décharge RF capacitive

La décharge plasma de type capacitive est généralement constituée de deux plaques parallèles disposées dans une enceinte à vide dans laquelle on peut injecter un gaz d'argon. On génère un champ électrique, en connectant l'une des électrodes (de puissance) à une source RF qui est placée en série avec une capacité de blocage, tandis que l'autre électrode est reliée à la masse (figure 1.4). Les régions qui composent la décharge capacitive sont le plasma proprement dit (ou bulk) et les gaines de charge d'espace positive. Ces gaines sont créées par la perte des électrons très rapides qui vont être perdus sur les parois du réacteur. Le plasma étant globalement neutre, son potentiel moyen doit être supérieur au potentiel des gaines afin de retenir les électrons. À l'intérieur de la gaine, il se développe un champ électrique qui est dirigé vers l'électrode, cela va conduire à un confinement des électrons dans le plasma et à une accélération des ions positifs vers les surfaces, cela est une des conséquences de la chute de potentiel dite d'auto polarisation V_{DC} . Cette barrière de potentiel se trouvant à l'interface gaine-plasma n'est franchie que par les électrons ayant une énergie suffisamment élevée et cela pour un court instant du cycle RF chargeant négativement les électrodes. Les ions vont alors bombarder les électrodes d'une énergie qui va dépendre de la valeur du champ électrique. Notons que le potentiel au centre du plasma est au dessus du potentiel de l'électrode la plus positive.

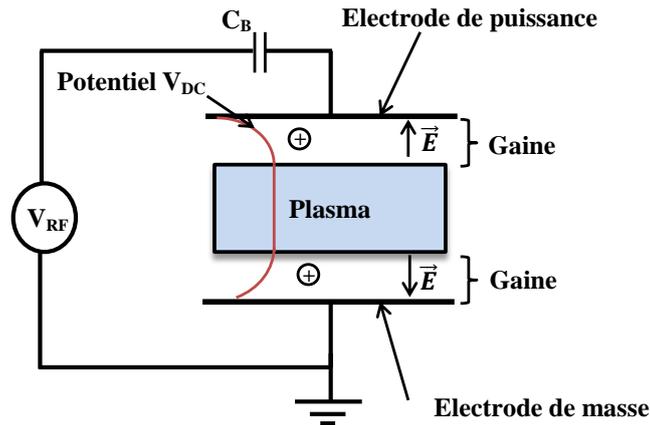


FIGURE 1.4 – schéma d'une décharge RF capacitive.

1.4 Les principales applications des décharges RF-CCP

Les plasmas RF ont la particularité de produire des espèces ionisées et des espèces neutres à des températures relativement basses. Ces particules peuvent interagir ou réagir avec des surfaces exposées au plasma par des processus physiques ou chimiques. Ils sont largement employés dans l'industrie de la microélectronique pour la fabrication de circuits intégrés. Le dépôt par procédé plasma est utilisé, par exemple, pour la croissance de couches minces protectrices ou de films spéciaux, modifiant ainsi les propriétés initiales (mécaniques, optiques, chimiques) des substrats sur lesquels ils sont déposés. De plus en comparaison à des méthodes classiques de dépôt en phase vapeur chimique (CVD) ou de dépôt en phase vapeur physique (PVD), la basse température des particules du plasma RF rend possible, le traitement de substrats sensibles à la température comme les verres ou les polymères. Les plasmas RF sont également utilisés comme outils de nettoyage de surfaces industrielles ou encore comme moyen de stérilisation et dans le domaine de la chimie analytique pour des diagnostics élémentaires.

1.4.1 Application au traitement de surface

Le substrat peut être traité en étant disposé sur l'électrode à la masse. Du gaz est introduit dans l'enceinte à vide, il peut s'agir de gaz inertes comme l'argon (Ar) ou bien de gaz réactifs tels l'hydrogène (H_2) ou encore d'un mélange de gaz tel que l'hexafluorure de soufre (SF_6) ou le silane (SiH_4), à basse pression de l'ordre de quelques dizaines à quelques centaines de mtorr. L'utilisation d'une tension RF permet de générer et de maintenir un plasma même en présence

d'électrode isolants qui sont alors traversés par un courant de déplacement [42].

1.4.2 La gravure ionique réactive

Dans la gravure d'un matériau, il faut produire des gaz volatils à partir des radicaux réactifs produits dans le plasma et les atomes de la surface. À titre d'exemple, lors de la gravure du silicium avec des gaz fluorocarbonés (CF_4 , C_2F_6), ce sont les atomes de fluor qui vont réagir avec les atomes de silicium pour former le radical volatil SiF_4 . Cette réaction est activée par le bombardement ionique qui fragilise les liaisons $Si - Si$ de la surface en accélérant considérablement la formation de SiF_4 . L'énergie de ce bombardement ionique peut varier de quelques eV jusqu'à plusieurs milliers eV. Les ions créés par ionisation frappent le substrat avec l'énergie acquise dans la gaine, la gravure est donc anisotrope. La gravure par plasma est utilisée dans un grand nombre d'étapes des procédés : gravure de couches isolantes (silice), semi-conductrices, de métaux ou de résines. Notons que la gravure par plasma est également appelée gravure sèche (*dry etching*) en référence aux procédés de gravure chimique humide (*wet etching*). Ces derniers ont été supplantés car la gravure était isotrope [43].

1.5 Phénomène de déposition de couches minces

1.5.1 Dépôt par pulvérisation cathodique

La pulvérisation cathodique permet d'éjecter des particules issus d'un matériau. Lorsque celui-ci est bombardé par un flux de particule très énergétiques pour les déloger par collision. Cette technique présente l'avantage de pouvoir fournir des espèces réactives qui vont permettre la déposition en films minces de toutes sortes de matériaux, notamment les matériaux réfractaires ou les alliages puisqu'il s'agit d'un processus mécanique.

La pulvérisation est basée sur l'érosion du matériau par les ions produits par une décharge luminescente des gaz rares : Ar, Xe ou Kr, les ions Ar^+ sont les plus communément utilisés. Le matériau à pulvériser est porté à un potentiel électrique négatif de quelques centaines de volts, cela va permettre d'accélérer les particules chargées. Le générateur de puissance utilisé pour une décharge peut être à courant continu si on pulvérise des métaux. Pour le dépôt des films diélectriques, la source de puissance alternative, en général à la fréquence de radiofréquence (13,56 MHz) est

nécessaire pour entretenir la décharge [2].

Les particules pulvérisées sont en général électriquement neutres. Elles sont diffusées dans toute l'enceinte. Un certain nombre d'entre elles sont recueillies sur un support appelé substrat, placé en face de la cible, et sur lequel elles forment une couche mince.

Les isolants ne peuvent pas être pulvérisés à courant continu, puisque les ions incidents s'accumulent sur la surface de la cible, créant une charge d'espace qui arrête le courant ionique. Pour surmonter cette difficulté, on emploie un potentiel alternatif à radio fréquence dans le but d'obtenir un couplage capacitif à travers la cible diélectrique. Pendant le cycle négatif, les ions positifs bombardent la cible et pendant le cycle positif, les électrons neutralisent la charge positive accumulée (figure 1.5). Puisque la mobilité de l'électron est beaucoup plus grande que la mobilité d'un ion, le sommet de la cible diélectrique acquiert un potentiel de polarisation continu, négatif par rapport au plasma. Si la cible ne se polarisait pas automatiquement, un courant d'électron circulerait dans l'isolant pendant chaque cycle, ce qui est impossible car le courant continu doit être nul. Cette polarisation négative continue repousse les électrons et crée une gaine d'ions de longueur l qui dépend du temps. Un ion, pour être accéléré vers la cible, doit se trouver dans cette gaine. En général, il faut plusieurs cycles à l'ion pour atteindre la cible, de sorte que son énergie est plus petite que celle correspondant à la différence de potentiel maximale.

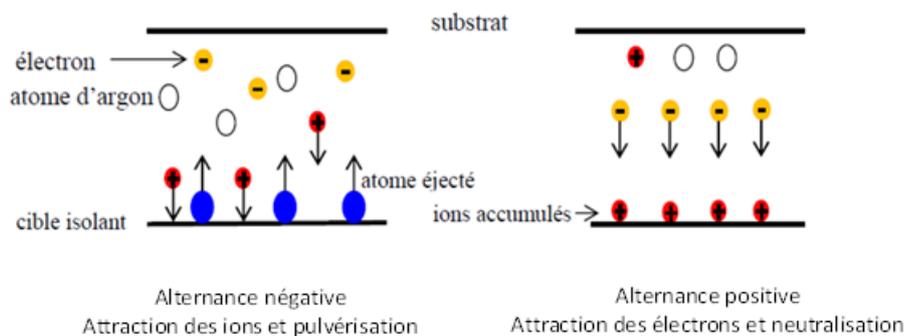


FIGURE 1.5 – Principe de pulvérisation cathodique diode radiofréquence [2].

1.5.2 Caractéristiques liées à la pulvérisation

1.5.2.1 Seuil de pulvérisation

L'effet de pulvérisation n'est sensible qu'à partir d'un certain niveau d'énergie de l'ion incident appelé seuil de pulvérisation. Ce niveau d'énergie dépend de l'ion incident et du matériau bombardé (voir tableau 1.3), [44, 45, 9].

Éléments(eV)	Ne	Ar	Kr	Xe
Al	13	13	15	18
Ti	22	20	17	20
Cr	22	20	18	20
Fe	22	20	25	20
Ni	23	21	25	20
Cu	17	17	16	15
Mo	24	24	28	27
Ag	12	15	15	17
Au	20	20	20	18
Ta	25	26	30	30
W	35	33	30	30

TABLEAU 1.3 – Seuils d'énergie de pulvérisation (eV) [9].

1.5.2.2 Rendement de pulvérisation

Le rendement de la pulvérisation ou encore le taux de Sputtering S est le paramètre important caractérisant le processus de pulvérisation. Il est défini comme le nombre d'atomes pulvérisés (N_e) par particules incidentes (N_i)[46].

$$S = \frac{N_e}{N_i} (\text{atome/ion incident})$$

La figure 1.6 représente la variation typique du rendement de pulvérisation en fonction de l'énergie des ions incidents.

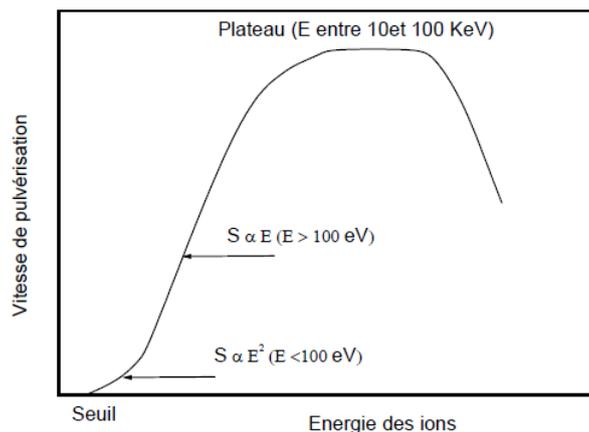


FIGURE 1.6 – variation du rendement de pulvérisation en fonction de l'énergie des ions incidents[3].

Sur la figure 1.6, le rendement de pulvérisation est représenté en fonction de l'énergie des ions incidents. Au voisinage de l'énergie de seuil, on peut constater que le rendement de pulvérisation

S est proportionnel à $S \propto E^2$, puis passera à $S \propto E$ vers 100 eV.

Cette relation se maintiendra vers 10 keV. Dans cette plage d'énergie les ions incidents entrent en collision avec des atomes de surface de la cible et le nombre d'atomes éjectés par ion incident sera proportionnel à l'énergie de ces ions. À des énergies plus élevées (10 keV- 100 keV) le rendement de pulvérisation reste constant et lorsque l'énergie dépasse 100 keV les ions incidents vont s'implanter sous la surface et le rendement va diminuer.

Le rendement de pulvérisation S varie en fonction de la nature de la cible, du type de l'ion incident et de leurs énergies. Il dépend de divers autres paramètres tels que l'angle de incident de l'ion par rapport à la cible, l'orientation cristalline du solide bombardé, et la température. La figure 1.7 suivante montre l'évolution du rendement de pulvérisation pour différents solides bombardés par des ions Ar^+ :

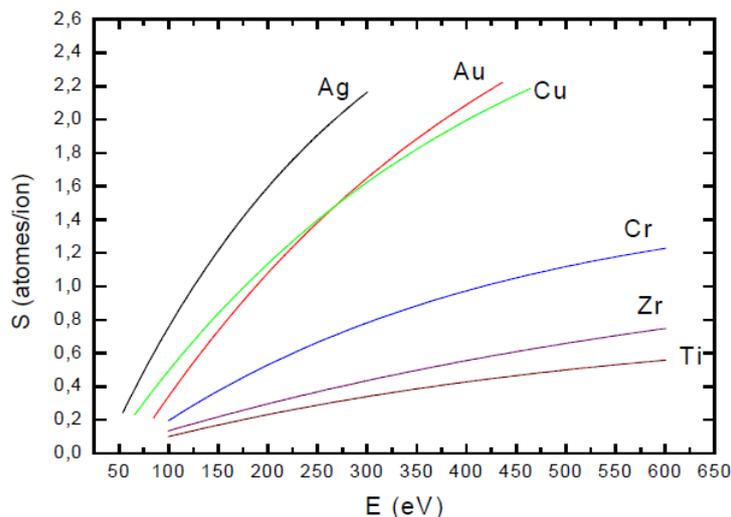


FIGURE 1.7 – Rendement de pulvérisation suivant la nature de la cible (pour Ar^+ d'énergie comprise entre 0 et 600 eV)[3].

1.5.3 Paramètres de dépôt

1.5.3.1 Puissance

Dans un réacteur RF à couplage capacitif, le courant de conduction issu du plasma étant nul, c'est la tension d'auto-polarisation qui augmente avec la puissance, et par conséquent l'énergie des atomes pulvérisés seront très énergétiques, jusqu'à plusieurs dizaines d'électron volts. La conséquence immédiate de ce dépôt d'énergie sur la couche de depot est la formation, au niveau du substrat, de cristaux de taille importante d'où une rugosité importante. Cela présente un incon-

venient majeur dans le cadre de dépôts d'épaisseur nanométrique. Une autre conséquence d'une puissance élevée est l'augmentation de l'énergie de la population d'électrons qui bombardent le substrat une période sur deux [47] .

1.5.3.2 Pression et distance cible-substrat

Les particules éjectés de la cible vont devoir traverser le plasma RF qui est composé majoritairement d'atomes neutres d'argon avant de se condenser sur le substrat. Pendant la traversée, elle vont subir des collisions avec les atomes du gaz. Ces chocs induira une diminution de leur énergie et une modification de leur trajectoire, ce qui modifiera les conditions de croissance. Si le nombre de collisions est très important, on dit alors que les atomes sont thermalisés. Pour que les atomes restent en régime balistique, il faut donc estimer la distance parcourue par un atome éjecté de la cible entre deux chocs successifs. Ce paramètre appelé libre parcours moyen (λ_m), sera donc totalement corrélé au produit (pression X distance cible-substrat)[47].

Chapitre 2

La Méthode PIC-MCC

La simulation particle-in-cell (PIC) est un outil d'étude puissant pour les plasmas, il possède un certain nombre d'avantages comme la description cinétique d'un plasma de grande dimension, la capacité d'intégrer les atomes complexes et aussi les interactions plasma-surface.

Les simulations PIC sont utilisées pratiquement dans toutes les branches des laboratoires des physiques des plasmas. Les premières approches particulières se développèrent dans les années 1950 par *Buneman* [48] et *Dawson* [49], ils simulèrent le mouvement de 100-1000 particules, y compris les interactions entre eux. À présent les codes PIC peuvent procéder à la simulation de plus de 10^{10} particules, les codes PIC dites "auto-cohérentes", pour lesquels à chaque instant champs et distributions de particules sont en équilibre, ont été standardisés par *Birdsall* et *Langdon*[50], *Hockney* et *Eastwood*[51].

2.1 Le modèle PIC

2.1.1 Schéma général d'une simulation PIC-MCC

Les modèles mathématiques appliqués pour les méthodes particulières, peuvent être formulées comme un ensemble de particules chargées qui interagissent avec un champ auto-cohérent. Ces particules ont un certain nombre de caractéristiques constantes comme la charge (q) et la masse (m), et d'autres variables comme la position et la vitesse.

L'essence des simulations PIC, est que le déplacement des particules chargées suivent les équations

du mouvement de Newton en présence de la force de Lorentz :

$$\frac{d\vec{x}}{dt} = \vec{v} \quad (2.1)$$

$$\frac{d\vec{v}}{dt} = \frac{q}{m}(\vec{E} + \vec{v} \times \vec{B}) \quad (2.2)$$

où \vec{E} est le champ électrique et \vec{B} le champ magnétique, ils sont calculés sur la maille à l'aide des équations de Maxwell.

Les phénomènes collisionnels dans la modélisation d'un plasma sont réalisés par l'adjonction d'un module Monté-carlo (MCC) aux schémas de résolution de type particle-in-cell.

En pratique le nombre de particules chargées dans le système est très grand ($\geq 10^{12}$), il est donc impossible d'effectuer des simulations de particules en utilisant les particules réelles, même sur les ordinateurs les plus rapides. Par conséquent les modèles PIC traitent avec des particules de calcul, dite "*super particules*", qui sont des ensembles de milliers de particules réelles. Sachant que le rapport charge-masse pour les super particules reste le même que pour les particules réelles, en effet ils obéissent à la même équation de mouvement, équations (2.1) et (2.2).

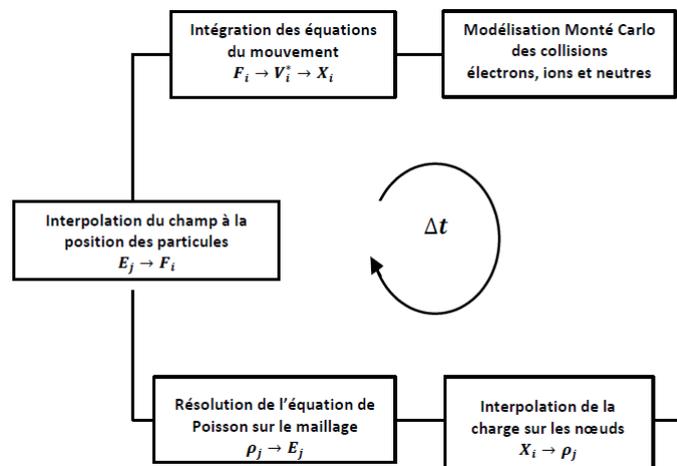


FIGURE 2.1 – Organigramme d'une simulation PIC

La figure 2.1 indique les différentes étapes d'une itération de type PIC-MCC. En premier lieu, la charge et les densités de courant sont interpolées à partir de la position des super particules sur les nœuds de la maille, afin de déterminer le champ \vec{E} via les équations de Maxwell, ensuite les valeurs du champ sont interpolées à la position des super particules, et enfin ces super particules sont déplacées suivant les équations de mouvement.

2.1.2 Équation de mouvement

Dans les simulations PIC, l'algorithme le plus couramment utilisé est connu sous le nom de saute-mouton (*leap-frog*), où la position et la vitesse des particules y sont intégrées sur un pas de temps suivant la figure 2.2.

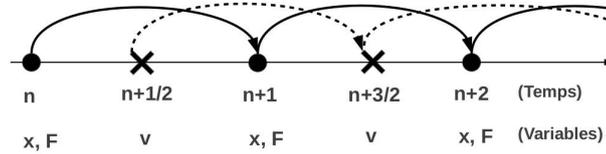


FIGURE 2.2 – Schéma de l'algorithme Leap-frog

La position des particules et le champ électrostatique sont définis au pas de temps t_i et sont utilisés pour calculer la force de Lorentz agissant sur les particules (voir équation 2.2). Cette force est interpolée à la position de la particule à partir des valeurs obtenues sur la maille.

La position des particules t_{i+1} se fait en connaissant les vitesses calculées au pas de temps $t_{i+\frac{1}{2}}$.

Le schéma Leap-frog est donné par les relations suivantes :

$$\begin{cases} x_{t_{i+1}} = x_{t_i} + v_{t_{i+\frac{1}{2}}} \Delta t \\ v_{t_{i+\frac{1}{2}}} = v_{t_{i-\frac{1}{2}}} + \Delta t F_{t_i} \end{cases} \quad (2.3)$$

Où F_{t_i} est la force interpolée à la position de la particule au début du pas de temps t_i , Δt correspond à l'intervalle de temps compris entre t_i et t_{i+1} et x et v sont respectivement la position et la vitesse de la particule.

2.1.3 Interpolation de la densité de charge

Les particules chargées sont assignées dans une maille à chaque itération temporelle dans le but de calculer la distribution spatiale de la charge. L'objectif consiste à interpoler la charge des particules sur les noeuds de la maille. La charge de chaque particule dans une cellule est alors distribuée sur les quatre noeuds définissant la cellule (voir figure 2.3).

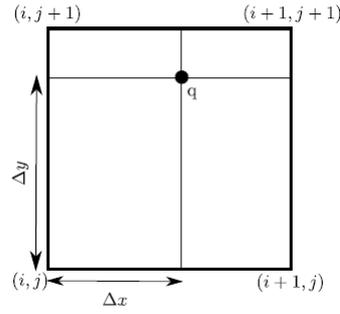


FIGURE 2.3 – projection des charges dans une maille 2D

La densité de charge sur chaque point de la maille est calculée en pondérant les particules chargées :

$$\rho_i = \sum_i \frac{q_i}{\Delta x \Delta y} S(\vec{x}_j - \vec{x}_i) \quad (2.4)$$

Où ρ_i est la densité de charge au point de la maille avec les coordonnées \vec{x}_j, \vec{x}_i .
 q_i est la charge de la particule i , $\Delta x \Delta y$ est la taille de la cellule.

2.1.4 Résolution de l'équation de Poisson

Le calcul du champ électrostatique se réduit à la résolution de l'équation de Poisson. Un champ électrique peut être généré par des charges :

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{E}(r) = \frac{\rho}{\epsilon_0} \quad (2.5)$$

Où le champ électrique peut être exprimé comme suit :

$$\vec{E} = -\vec{\nabla} \phi \quad (2.6)$$

Ces deux équations (2.5) et (2.6), nous conduit à l'équation de Poisson :

$$\nabla^2 \phi = -\frac{\rho}{\epsilon_0} \quad (2.7)$$

Où la forme dérivée à deux dimensions s'écrit :

$$\frac{d^2 \phi(x, y)}{dx^2} + \frac{d^2 \phi(x, y)}{dy^2} = -\frac{\rho(x, y)}{\epsilon_0} \quad (2.8)$$

Les conditions aux limites sont définies comme suit, soit $x = 0, x = L$, et $y = 0, y = L$, où (x, y)

sont les coordonnées cartésiennes et L la taille du domaine de simulation.

Le potentiel électrique est fixé à l'une des électrodes comme étant égal à $\phi = 0$, potentiel aux frontières de type Dirichlet, et d'une distribution de densité de charges, le potentiel dans la décharge est entièrement défini par la résolution de l'équation de Poisson.

Pour un maillage simple dans l'espace (2D), l'équation (2.8) est évaluée à partir de la formule des différences finies :

$$\frac{\phi_{i-1,j} - 2\phi_{i,j} + \phi_{i+1,j}}{\Delta^2} + \frac{\phi_{i,j-1} - 2\phi_{i,j} + \phi_{i,j+1}}{\Delta^2} = -\frac{\rho_{i,j}}{\epsilon_0} \quad (2.9)$$

Où l'on note Δ le pas constant de l'espace de la grille et

$$\phi_{i,j} = \phi(x_i, y_j)$$

et $\phi_{i,j}$ le potentiel au point (x_i, y_j) de la maille, avec

$$\begin{cases} x_i = x_0 + i\Delta & i = 0, 1, \dots, N \\ y_j = y_0 + j\Delta & j = 0, 1, \dots, N \end{cases}$$

Alors l'équation (2.7) peut s'écrire :

$$\phi_{i-1,j} + \phi_{i+1,j} + \phi_{i,j-1} + \phi_{i,j+1} - 4\phi_{i,j} = -\frac{\rho_{i,j}}{\epsilon_0} \Delta^2$$

Où

$$\phi_{i,j} = \frac{1}{4} \left(\frac{\rho_{i,j}}{\epsilon_0} \Delta^2 + (\phi_{i-1,j} + \phi_{i+1,j} + \phi_{i,j-1} + \phi_{i,j+1}) \right) \quad (2.10)$$

Les composants du champ électrique dans un système à 2 dimensions sur la maille sont calculés avec le schéma des différences finies :

$$\begin{cases} (E_x)_{i,j} = \frac{(\phi_{i-1,j} - \phi_{i+1,j})}{2\Delta x} \\ (E_y)_{i,j} = \frac{(\phi_{i,j-1} - \phi_{i,j+1})}{2\Delta y} \end{cases} \quad (2.11)$$

où les indices (i, j) correspondent aux points discrets de la maille illustrés sur la figure 2.4

2.1.5 Interpolation des champs (\vec{E} et \vec{B})

Les valeurs des champs (\vec{E} et \vec{B}) sont obtenues spatialement sur une grille discrète de point. En supposant que le courant généré dans le plasma est suffisamment faible, le champ magnétique peut être négligé.

L'équation de Maxwell-Faraday :

$$\vec{\nabla} \times \vec{E} = -\frac{\partial \vec{B}}{\partial t} \quad (2.12)$$

devient alors :

$$\vec{\nabla} \times \vec{E} = \vec{0}$$

$$\vec{E} = -\vec{\nabla} \phi$$

$$\vec{E}_{(x,y,z)} = -\left(\frac{\partial \phi}{\partial x}, \frac{\partial \phi}{\partial y}, \frac{\partial \phi}{\partial z}\right) \quad (2.13)$$

Dans un système à deux dimensions, la résolution des équations différentielles (2.13) est obtenue à l'aide des différences finies et permet de trouver la valeur du champ électrostatique en chaque noeud du maillage, équation (2.11).

Le champ vectoriel dans la maille est donné par les valeurs aux noeuds $n_{i,j}$ de cette maille. La force électrostatique s'exerçant sur la particule p de coordonnées (x, y) est donnée par :

$$F_{(x,y)} = \sum_{n_{i,j}} E_{i,j} - K(n_{i,j}, P_{x,y}) \quad (2.14)$$

Où K est la fonction d'interpolation linéaire, et $E_{i,j}$ correspond à la valeur du champ électrique calculé sur le noeud i, j . Soit à 2 dimensions, la force interpolée aux coordonnées (x, y) donné par :

$$F_{(x,y)} = \frac{E_{i,j}}{V_{X,Y}}(X_{i+1} - x)(Y_{i+1} - y) + \frac{E_{i+1,j}}{V_{X,Y}}(x - X_i)(Y_{j+1} - y) + \frac{E_{i,j+1}}{V_{X,Y}}(X_{i+1} - x)(y - Y_j) + \frac{E_{i+1,j+1}}{V_{X,Y}}(x - X_i)(y - Y_j) \quad (2.15)$$

Où $V_{x,y}(= \Delta_x \Delta_y)$ est le volume de la maille, (X_i, Y_j) les coordonnées de la maille aux noeuds (i, j) et (x, y) les coordonnées de la particule figure 2.4.

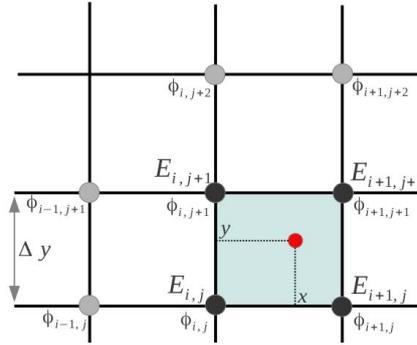


FIGURE 2.4 – Discrétisation de la maille pour le calcul du champ \vec{E} et interpolation à la position de la particule.

2.2 Le modèle MCC

2.2.1 La méthode des "collisions-nulles"

La méthode de Monté-Carlo est une méthode très utilisée en simulation numérique. Cette méthode est basée sur le tirage des nombres aléatoires dans le but de trouver une solution statistique à un problème donné. Dans notre simulation le plasma est supposé collisionnel. Cela signifie que notre modèle PIC doit inclure non seulement les mouvements des espèces chargées qui baignent dans un champ électrique, mais doit également tenir compte des différentes collisions que ces espèces rencontrent dans la décharge. Cela est nécessaire afin de représenter les processus physique atomiques tel que la dissociation, la recombinaison, l'ionisation par impact électronique, les collisions élastique... Par conséquent, pour obtenir des fonctions de distribution ionique auto-cohérente précise, on ajoute au code PIC les collisions de Monte carlo (MCC). Ce modèle MCC a été développé par le groupe de l'université de Californie à Berkley [52, 4], le package MCC considère un pas de temps constant et inclus la méthode de "collision-nulle" [53].

Considérant que la i ème particule chargée est connue par son énergie cinétique $E_i = \frac{mv_i^2}{2}$ et sa vitesse, avec une magnitude $g = |v_i - V_i|$, et une densité locale $n_t(X_i)$, la fréquence de collision ν_{coll} est :

$$\nu_{coll} = n_t(X_i)\sigma(E_i)g \quad (2.16)$$

où $\sigma(E_i)$ est la section efficace de collision.

La probabilité de collision P_i est calculé en fonction de la distance parcourue à chaque étape ($\nu_i \Delta t$) [4].

$$P_i = 1 - \exp(-\nu_i \Delta t \sigma_T(E_i) n_t(X_i)) \quad (2.17)$$

La collision est effectuée si le nombre aléatoire R distribué uniformément dans l'intervalle $[0,1]$ est inférieure à la probabilité P_i .

Cependant ce n'est pas évident de calculer la probabilité P_i pour toutes les particules à chaque pas de temps. Pour cela la constante de fréquence de collision ν_{max} est définie par [4] :

$$\nu_{max} = \max_X(n_t(X)) \max_E \left(\sigma_T \left(\frac{2E}{m_p} \right)^{1/2} \right) \quad (2.18)$$

où m_p est la masse de particule chargée. Cette fréquence est obtenue au début de calcul. L'équation (2.17) signifie qu'un autre processus collisionnel, ie. "collision nulle" est introduit. Lorsque sa fréquence de collision est ajouté à la fréquence de collision totale $n_t(X)\sigma_T(E)\nu$, cela donne une valeur constante sur tout X et E . Ce processus collisionnel est appelé "collision-nulle" puisque aucune interaction réelle n'a lieu.

La probabilité P_{null} déterminée par la méthode des "collision-nulle" pour chaque pas de temps est :

$$P_{null} = 1 - \exp(-\nu_{max}\Delta t) \quad (2.19)$$

Si N_{part} est le nombre de particules totales des espèces, alors le nombre maximum de particules qui subit les collisions N_{coll} est :

$$N_{coll} = N_{part}P_{null} = N_{part}(1 - \exp(-\nu_{max}\Delta t)) \quad (2.20)$$

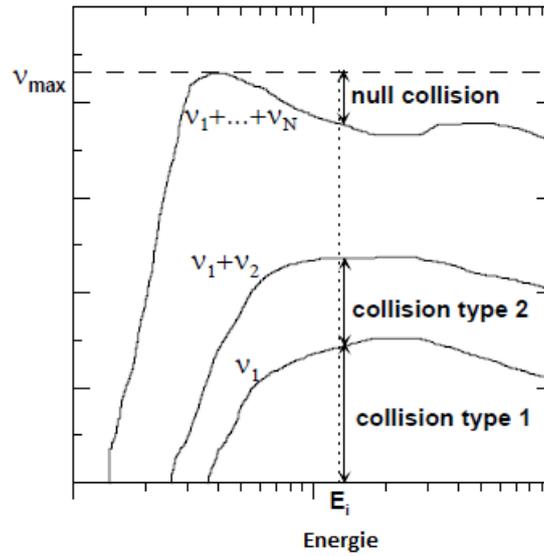


FIGURE 2.5 – Représentation graphique de l'addition du processus des collision-nulle. Ce qui se traduit par une fréquence de collision constante sur toutes les énergies [4].

Les particules qui entrent en collision sont choisies de façon aléatoire. Chaque particule est sélectionnée pour un type de collision par un nombre aléatoire R entre [0 et 1] :

$$R \leq \frac{\nu_1(E_i)}{\nu_{max}}, \quad \text{collision type 1}$$

$$\frac{\nu_1(E_i)}{\nu_{max}} \leq R \leq \frac{\nu_1(E_i) + \nu_2(E_i)}{\nu_{max}}, \quad \text{collision type 2} \quad (2.21)$$

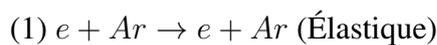
...

$$\frac{\sum_{j=1}^N \nu_j(E_i)}{\nu_{max}} \leq R, \quad \text{collision - nulle}$$

En général $N_{coll} \ll N_{part}$ ce qui favorise la méthode des collisions-nulles. Typiquement P_{null} est de l'ordre de 10^{-2} , ce qui signifie un gain important de calcul.

2.2.2 Types de collision dans l'argon

Le modèle de collision pour l'argon décrit ci-dessous est utilisé par Vahedi et al [54] dans les décharges RF à couplage capacitif. Les différentes réactions dans ce modèle sont :



- (2) $e + Ar \rightarrow e + Ar^*$ (Excitation)
- (3) $e + Ar \rightarrow e + Ar^+ + e$ (Ionisation)
- (4) $Ar^+ + Ar \rightarrow Ar + Ar^+$ (Échange de charge)
- (5) $Ar^+ + Ar \rightarrow Ar^+ + Ar$ (Élastique)

On assume que le gaz d'argon (espèce neutre) est maintenu uniformément dans l'espace.

2.2.2.1 Les collisions électron-neutre

Collision élastique

L'angle de déviation χ d'un électron incident peut être obtenu par inversion de la section efficace différentielle de collision $\sigma(\varepsilon, \chi)$ [5], les sections efficaces électrons-neutres du modèle sont représentées dans la figure 2.6

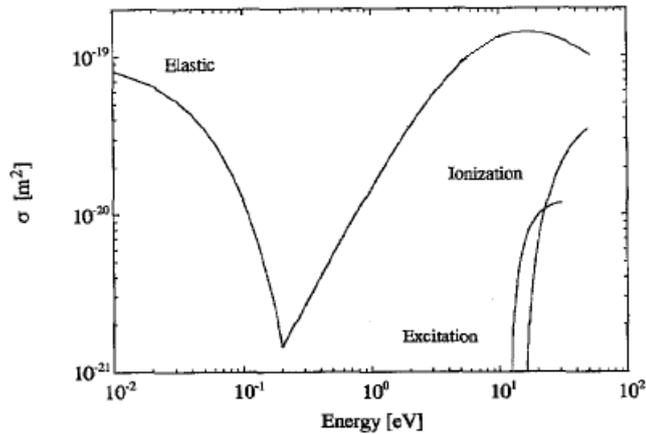


FIGURE 2.6 – Section efficace électron-neutre dans l'argon [5].

Une expression empirique de la section efficace différentielle de collision élastique proposée originalement pour l'argon par Surendra et al.[55] est :

$$\frac{\sigma(\varepsilon, \chi)}{\sigma(\varepsilon)} = \frac{\varepsilon}{4\pi [1 + \varepsilon \sin^2(\chi/2)] \ln(1 + \varepsilon)} \quad (2.22)$$

Où ε est l'énergie de l'électron incident en eV. La fonction de répartition associée à l'équation (2.22) est :

$$R = \frac{\int_0^\chi \sigma(\varepsilon, \chi) \sin \chi d\chi}{\int_0^\pi \sigma(\varepsilon, \chi) \sin \chi d\chi} \quad (2.23)$$

Moyennant un changement de variable $u = \cos(\chi)$ et l'expression (2.22) de la section efficace

différentielle de collision, l'intégration de l'équation (2.23) conduit à :

$$R = \frac{\text{Ln} \left[1 + \frac{\varepsilon}{2}(1 - \cos(\chi)) \right]}{\text{Ln}(1 + \varepsilon)} \quad (2.24)$$

Où R est un nombre aléatoire ($R \in [0, 1]$), l'angle de déviation peut alors être exprimé sous la forme :

$$\cos \chi = \frac{2 + \varepsilon - 2(1 + \varepsilon)^R}{\varepsilon} \quad (2.25)$$

L'équation (2.25) détermine l'angle de déviation des électrons pour tous types de collisions électron-neutre.

On calcul via l'angle χ déterminé, l'énergie des électrons perdues [56] :

$$\Delta\varepsilon = \frac{2m}{M}(1 - \cos \chi) \quad (2.26)$$

Où m , M sont respectivement la masse d'un électron et d'un atome d'argon .

Processus inélastiques

Excitation L'électron incident perd une énergie de 11,55 eV, et il est diffusé suivant l'angle χ déterminé par l'équation (2.25).

Ionisation Une paire électron-ion est créée, l'équation du bilan des énergies est :

$$\varepsilon_{diff} + \varepsilon_{ej} + \varepsilon_i = \varepsilon_{inc} + \varepsilon_N + \varepsilon_{ion} \quad (2.27)$$

Où ε_{diff} , ε_{ej} , ε_{inc} sont l'énergie de diffusion, éjection et incidente respectivement.

ε_i , ε_N sont les énergies des ions créées et des atomes neutres.

ε_{ion} est l'énergie de seuil d'ionisation.

Par le large rapport de masse des ions sur les électrons, on assume que le moment des électrons incident est inférieur à celui des atomes neutres, l'équation (2.27) se réduit à :

$$\varepsilon_{diff} + \varepsilon_{ej} = \varepsilon_{inc} + \varepsilon_{ion} \quad (2.28)$$

$$\varepsilon_i = \varepsilon_N \quad (2.29)$$

2.2.2.2 Les collisions ion-neutre

La différence majeure entre les processus électron-neutre et ion-neutre réside dans la différence existant entre la masse d'un électron et celle d'un ion. En effet, les ions ayant une masse similaire à celle des atomes neutres, les équations de chocs ne conduisent plus aux mêmes propriétés. la figure 2.7 montre les sections efficaces ion-neutre utilisées dans le modèle[6]. Lors des collisions d'échange de charge, l'énergie de l'ion initial et les particules neutres sont transférées à la production paire ion-neutre.

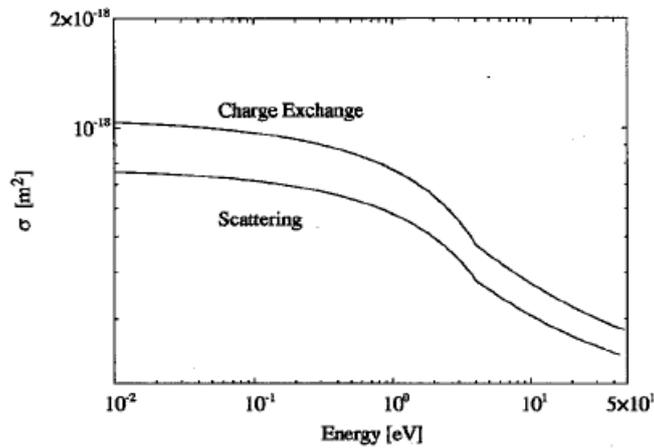


FIGURE 2.7 – Section efficace ion-neutre dans l'argon [6].

Collision élastique Un modèle de sphère dures est utilisé pour représenter les collisions élastique ion-neutre, dans lequel l'énergie de l'ion diffusé est déterminée par :

$$\varepsilon_{diff} = (1 - \alpha_L)\varepsilon_{inc} \quad (2.30)$$

α_L est le facteur de l'énergie de perte, il est donné par :

$$\alpha_L = \frac{2m_1m_2}{(m_1 + m_2)^2} (1 - \cos \Theta) \quad (2.31)$$

m_1 et m_2 sont les masses respectives de l'ion et les neutres.

Θ est l'angle de déviation au centre de masse, il est donné par :

$$\cos \Theta = 1 - 2R \quad (2.32)$$

Où R est un nombre aléatoire compris entre $(0, 1)$

Échange de charge La prise en compte des phénomènes d'échange de charge consiste à la création d'un neutre avec les propriétés (vecteur, vitesse) de l'ion incident, et que l'ion est ré-émis d'un angle ($\chi \in [0, \pi/2]$) avec une énergie déterminée par une distribution maxwellienne ayant pour température celle du gaz. L'énergie de l'ion diffusé étant égale à l'énergie du neutre incident, l'énergie est bien conservée au cours de la collision. Le neutre rapide créé par ce processus est alors suivi de manière tout à fait analogue que ceux des ions et électrons.

2.3 Émission secondaire

Le code est destiné à la modélisation d'un plasma existant dans une enceinte, il est important de pouvoir rendre compte des effets induits par l'impact des particules du plasma sur les parois de cette enceinte, ces derniers étant isolantes ou conductrices soumises à un bombardement ionique émettent des électrons appelés "*électrons secondaires*". Le coefficient γ correspond au nombre d'électrons émis par ion incident, γ varie entre 0.1 et 0.4 [57, 58]. γ dépend de la distribution en énergie des ions (elle même définie par la distribution du champ dans la gaine), de la nature du gaz et du matériau qui compose les électrodes.

2.4 Application au modèle PIC-MCC

2.4.1 Description du code xdp2

xdp2 (*2 dimensional planar electrostatic device*), est un code en langage C++ qui simule le plasma couplé avec un circuit externe, ce code opère en deux dimensions de coordonnées spatiales (x, y) et de vitesses (v_x, v_y, v_z) , dont les caractéristiques tels que les super particules et le champ électrostatique sont spécifiés par l'utilisateur en utilisant un fichier d'entrée (figure 2.8)

```

argon.inp: Argon RF discharge

-nsp---ncx---ncy---nc2p---dt [s]---xlength[m]---ylength[m]---zlength[m]---epsilon-
  2    200   600   5e4  3.60089e-11 0.03      0.1      0.1      1.0

-lhs---length[m]---dc[V|Amp]---ac[V|Amp]---f0 [Hz]---theta0 [D]---extC [F]---gapsize [nc]-
  1    0.1    0.0    500    13.56e6   0.0    1.e-10   0

-rhs---length[m]---dc[V|Amp]---ac[V|Amp]---f0 [Hz]---theta0 [D]---extC [F]---gapsize [nc]-
  1    0.1    0.0    0.0    0.0     0.0    10.0    0

-rhoback [C/m^3]---bmag[T]---btheta [D]---bphi [D]---nfft---sflag---tol_pois---strc_max-
  0.0      0.0      0.0      0.0      2048   1      1e-6    0

-e_collisnal---i_collisnal---ion species---Gpressure[Torr]---GTemp [eV]---.....
  1            2            2            0.005    0.03
    
```

FIGURE 2.8 – Fichier d'entrée.

La simulation procède en temps réel et on visualise les divers diagnostics spécifiés à chaque pas de temps (voir figure 2.9) On définit parmi les paramètres les plus important :

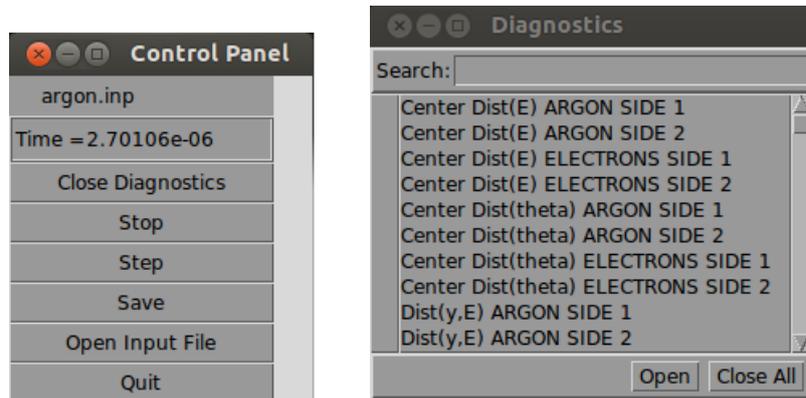


FIGURE 2.9 – Interface graphique du programme xpdp2.

nsp : nombre des espèces.

ncx : nombre des cellules suivant la direction x, la largeur de la cellule est calculée par :

$$\Delta x = \frac{\text{longueur}(x)}{ncx}$$

nc2p : la proportion entre les particules simulées sur les particules réelles. elle est définie par la relation suivante :

$$N = \frac{N_{initn. \text{ aire. Longueur}(x)}}{nc2p}$$

dt : le pas de temps(s).

x length, y length : la longueur suivant l'axe (x) et (y) respectivement en (m).

ac : source de courant alternatif (V ou A).

θ_0 : la phase de la source (Degré).

C_{ext} : capacité de blocage (F).

$G_{pressure}$: pression du gaz (Torr).

G_{temp} : température du gaz (eV).

q : charge de l'espèce (c).

m : masse de l'espèce (kg).

N_{init} : Densité initiale (m^{-3}).

2.4.2 Condition de stabilité

Le code PIC demande un choix judicieux de la taille des mailles, que l'on note Δx et Δy , ainsi que le pas de temps Δt de la simulation ; ces paramètres jouent sur la stabilité ainsi que sur la vitesse de convergence du code numérique, plus les valeurs sont petites et plus le temps de calcul augmente. De plus une statistique précise sur un maillage plus fin demande plus de particules, ce qui augmente aussi ce temps.

On peut montrer, en raisonnant sur un simple oscillateur harmonique de pulsation ω_0 [59], que le schéma classique d'avancement des superparticules dit de "saute mouton" est stable lorsque :

$$\omega_0 \Delta t < 2$$

Une condition assurant d'une part la stabilité du schéma pour des oscillations simples telles que les oscillations plasmas est :

$$\Delta t < 0.2 \omega_p^{-1} \quad (2.33)$$

Où ω_p est la pulsation plasma :

$$\omega_p = \sqrt{\frac{n e^2}{\varepsilon_0 m}}$$

D'autre part pour le critère spatial, la taille des mailles Δx (et Δy) doit vérifier la relation :

$$\Delta x < 3.4 \lambda_D \quad (2.34)$$

Où λ_D est la longueur de Debye.

La dernière condition numérique relie le pas de temps Δt à la dimension caractéristique du maillage

Δx et Δy .

Il est communément choisi de limiter le pas de temps de sorte que les super-particules ne traversent pas plus d'une cellule du maillage au cours d'un pas de temps :

$$v \frac{\Delta t}{\Delta x} < 1 \tag{2.35}$$

Où v est la norme de vitesse d'une superparticule.

Conditions	Expression
-Résolution de la fréquence plasma	$\Delta t < 0.2\omega_p^{-1}$
-Résolution de la longueur de Debye	$\Delta x < 3.4\lambda_D$
-Limite d'avancement des superparticules	$v \frac{\Delta t}{\Delta x} < 1$

TABLEAU 2.1 – Tableau récapitulatif des conditions de stabilité à la modélisation particulaire communément utilisées.

Chapitre 3

Modélisation et Simulation d'une Décharge DF-CCP

3.1 Modèle physique

3.1.1 Origine de l'asymétrie électrique dans une décharge DF-CCP

L'origine du modèle de l'effet de l'asymétrie électrique (EAE) a été proposé par *Heil* [8], il peut être appliqué à une décharge capacitive double fréquence (DF-CCP) dotée d'une géométrie asymétrique ou symétrique (figure 3.1). Les gaines peuvent devenir asymétriques en appliquant une double fréquence, ie. la fréquence fondamentale et une de ses harmoniques. Une conséquence de cette asymétrie électrique est qu'un potentiel d'auto-polarisation se développe dans l'une des électrodes.

Cette auto polarisation est ajustée en manipulant la forme du signal appliqué. On suppose V_t la tension totale au sein de la décharge qui est la somme des tensions dans les gaines adjacentes à l'électrode de puissance V_{sp} et de masse V_{sg} :

$$V_t(\omega t) = V_{sp}(\omega t) + V_{sg}(\omega t) \quad (3.1)$$

Si on décompose V_t en termes de série de Fourier, on aura :

$$V_t(\omega t) = \sum_{n=-N}^N t_n e^{in\omega t} \quad (3.2)$$

Où $\omega = 2\pi f$, t_n est la composante complexe de Fourier, et N est l'ordre de l'harmonique la plus

élevé dans la tension V_t .

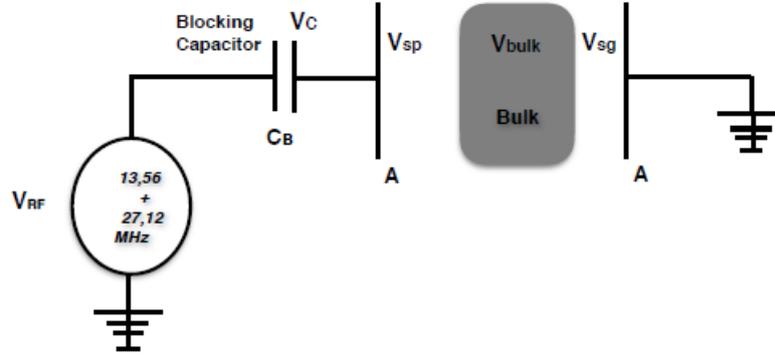


FIGURE 3.1 – Schéma de la simulation d'une décharge DF-CCP

On décompose de la même manière V_{sp} et V_{sg} :

$$V_{sp}(\omega t) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} p_n e^{in\omega t} \quad (3.3)$$

Et

$$V_{sg}(\omega t) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} g_n e^{in\omega t} \quad (3.4)$$

Où p_n et g_n sont les composantes complexes de Fourier.

En examinant les équations précédentes, pour $|n| \leq N$ on aura :

$$t_n = p_n + g_n \quad (3.5)$$

La condition pour que les deux gains soient électriquement symétriques est que :

$$V_{sp}(\omega t) = -V_{sg}(\omega t + \pi) \quad (3.6)$$

En substituant l'équation (3.3) et (3.4) dans (3.6), on aura :

$$\sum_{n=-\infty}^{\infty} p_n e^{in\omega t} = - \sum_{n=-\infty}^{\infty} g_n e^{in(\omega t + \pi)} \quad (3.7)$$

De l'équation (3.7), les gains seront électriquement symétriques si :

$$p_n = -g_n e^{in\pi} \quad (3.8)$$

Où

$$\begin{cases} e^{in\pi} = 1, & \text{si } n \text{ pair} \\ e^{in\pi} = -1, & \text{si } n \text{ impair} \end{cases}$$

À partir de l'équation (3.8) et (3.5) on peut conclure que la décharge est électriquement symétrique, et que :

$$t_n = \begin{cases} 0, & n = 0, 2, 4... \text{ avec } |n| \leq N \\ 2p_n, & n = 1, 3, 5... \end{cases} \quad (3.9)$$

En se basant sur l'équation (3.9), il apparait que l'amplitude fondamentale et ses harmoniques impaires auront une gaine électriquement symétrique. Si l'harmonique est paire, les gains seront électriquement asymétriques.

3.1.2 Modélisation physique

On se propose d'étudier l'effet d'asymétrie électrique en utilisant le modèle théorique introduit par *Heil et Czarnetzki* [8, 7] tout en ajoutant l'effet de la capacité de blocage via son potentiel V_c [60]. Notre étude met en évidence la relation entre la tension d'auto-polarisation, η , et la chute de tension dans les deux gaines (gaine de puissance et de masse). Le modèle est basé sur la résolution d'un circuit électrique équivalent typique à une décharge DF-CCP. Le circuit est constitué d'une source de tension (générateur RF) en série avec la capacité de blocage C_B . La décharge se compose de deux condensateurs non linéaires représentant les gaines adjacentes aux deux électrodes et d'une inductance (inertie d'électron) en série avec une résistance (collisions électron-neutre) représentant le plasma (ou Bulk) (figure 3.2). Le courant dans le plasma est un courant de conduction tant que $\omega_{RF} \ll \omega_{pe}$ où $\omega_{RF} = 2\pi f$ et ω_{pe} est la fréquence du plasma électronique.

Le bilan des tensions normalisées décrivant la décharge RF sera :

$$\bar{V}_{RF}(t) = \bar{V}_c(t) + \bar{V}_{sp}(t) + \bar{V}_{Bulk}(t) + \bar{V}_{sg}(t) \quad (3.10)$$

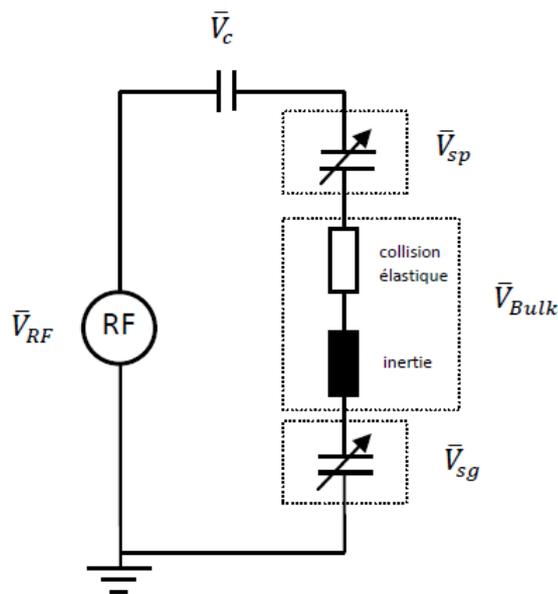


FIGURE 3.2 – Circuit électrique équivalent d'une décharge DF-CCP [7]

Où $\bar{V}_c(t)$ est la chute tension de la capacité de blocage (C_B); $\bar{V}_{sp}(t)$ et $\bar{V}_{sg}(t)$ sont les chutes de tensions des deux électrodes de puissance et de masse respectivement. $\bar{V}_{RF}(t)$ la tension RF appliquée tel que $\bar{V}_{RF}(t) = \frac{\tilde{V}_{RF}(t)}{V_0}$ et V_0 la somme des amplitudes des harmoniques appliquées.

Quant à, $\bar{V}_{Bulk}(t)$, la chute de tension au centre du plasma est supposée négligeable par rapport aux différentes tensions impliquées dans l'équation (3.10), cette hypothèse est réaliste dans notre cas, (ie. décharge électropositive à basse pression, cette hypothèse a été validée dans plusieurs travaux de recherche [8, 61]). Cependant les valeurs de $\bar{V}_{Bulk}(t)$ deviennent significatives dans des décharges à haute pression ou dans des plasmas électronégatifs [62]

Si $q(t)$ est la charge d'espace positive normalisée dans la gaine adjacente à l'électrode de puissance qui varie d'une valeur minimale à une valeur maximale $0 \leq q(t) \leq 1$ pour une période de la fréquence fondamentale appliquée :

$$q(t) = \frac{Q(t)}{Q_0} \quad (3.11)$$

Où $Q(t)$ est la charge d'espace dans cette gaine en fonction du temps et

$$Q_0 = A_p \sqrt{2e\epsilon_0 \bar{n}_{sp} V_0 / I_{sp}} \quad (3.12)$$

Avec :

Q_0 : constante de normalisation.

e : la charge élémentaire.

ε_0 : constante diélectrique.

\bar{n}_{sp} : densité moyenne des ions dans la gaine de l'électrode de puissance.

I_{sp} : l'intégrale de gaine de l'électrode de puissance, elle est exprimée comme suit :

$$I_{sp} = 2 \int_0^1 p_s(y) y dy \quad (3.13)$$

Avec $y = x/s_m$ et $p_s(y) = n_i(x)/\bar{n}_{sp}$.

Où s_m est la largeur maximale de la gaine de puissance, $n_i(x)$ est la densité des ions en fonction de sa position par rapport à l'électrode de puissance. Selon le profil de densité d'ion dans la gaine $1 \leq I_{sp} \leq 2$, dans notre cas $I_{sp} = 1$.

Différentes études de simulations et des résultats expérimentaux [20, 63], ont montré que la caractéristique charge-tension de la gaine est quadratique :

$$\bar{V}_{sp}(t) = -q(t)^2 \quad (3.14)$$

Cette relation quadratique (charge-tension) traduit l'analogie de la gaine à une capacité non-linéaire. Cette non-linéarité est provoquée physiquement par la distance modulée dans le temps entre les plaques de la capacité, (ie. largeur de la gaine).

La charge d'espace positive dans les gaines des deux électrodes est liée par une charge totale non-compensée normalisée :

$$q_t = \frac{Q_t}{Q_0} \quad (3.15)$$

On aura :

$$q_t(t) = q(t) + q_{sg}(t) \quad (3.16)$$

$q_{sg}(t)$ est la charge d'espace positive normalisée dans la gaine de masse.

La tension de la gaine de l'électrode de masse est exprimée en fonction du paramètre de symétrie ε [8]

$$\bar{V}_{sg}(t) = \varepsilon(q_t - q(t))^2 \quad (3.17)$$

Où ε est donné par le rapport de tensions de gaines normalisées :

$$\varepsilon = \left| \frac{\hat{\phi}_{sg}}{\hat{\phi}_{sp}} \right| \quad (3.18)$$

$\hat{\phi}_{sg}$ et $\hat{\phi}_{sp}$ sont les chutes de tensions maximales de la gaine de puissance et de masse respectivement, elles sont obtenues par simulations.

La tension de la capacité de blocage \bar{V}_c est exprimée comme suit :

$$\frac{\partial \bar{V}_c(t)}{\partial t} = \frac{I(t)}{C_B V_0} = -\frac{Q_0}{C_B V_0} \frac{\partial q(t)}{\partial t} \quad (3.19)$$

Avec :

$$I(t) = -Q_0 \frac{\partial q(t)}{\partial t} \quad (3.20)$$

$I(t)$ est le courant de conduction, en intégrant l'équation (3.19) on obtient :

$$\bar{V}_c(t) = -\alpha q(t) - \bar{\eta} \quad (3.21)$$

Où $\bar{\eta}$ représente physiquement la tension d'auto polarisation et $\alpha = 0.613 \cdot \varepsilon_0 \cdot A / (c_B \cdot s_m)$ où ε_0 est une constante diélectrique (permittivité du vide), A l'aire de l'électrode et s_m la largeur maximale de la gaine.

Finalement le bilan des tension en fonction de la charge d'espace décrivant la décharge RF sera[64] :

$$\bar{V}_{RF}(t) = -\alpha q(t) - \bar{\eta} - q(t)^2 + \varepsilon(q_t - q(t))^2 \quad (3.22)$$

La tension d'auto-polarisation $\bar{\eta}$ et la charge d'espace $q(t)$ sont calculées en considérant l'équation (3.22) en deux temps distincts pour une période RF (ie. tension maximale ϕ_{m1} et minimale ϕ_{m2})[64] :

$$\phi_{m1} - V_c(t) = \phi_{sg}^f + \hat{\phi}_{sg} \quad (3.23)$$

$$\phi_{m2} - V_c(t) = \phi_{sp}^f + \hat{\phi}_{sp} \quad (3.24)$$

ϕ_{sp}^f et ϕ_{sg}^f sont les potentiels flottant à l'électrode de puissance et de masse qui correspondent

au potentiel minimum des gaines. Des équations (3.23) et (3.24), on obtient :

$$V_c(t) = \frac{\phi_{m1} + \varepsilon\phi_{m2}}{(1 + \varepsilon)} + \frac{\phi_{sp}^f + \varepsilon\phi_{sg}^f}{(1 + \varepsilon)} \quad (3.25)$$

Le potentiel flottant est très petit comparé à la tension appliquée, le second terme est donc négligeable, l'équation (3.25) devient :

$$V_c(t) = \frac{\phi_{m1} + \varepsilon\phi_{m2}}{(1 + \varepsilon)} \quad (3.26)$$

L'équation de la charge d'espace positive $q(t)$ obtenue en résolvant l'équation (3.22), sera alors [60] :

$$q(t) = \frac{-\varepsilon q_t + \sqrt{\varepsilon q_t^2 - (1 - \varepsilon)(\tilde{V}_{RF}(t) - \bar{V}_c(t))}}{1 - \varepsilon} \quad (3.27)$$

Où q_t est la charge totale non compensée dans une décharge normalisée, elle est donnée par :

$$q_t = \sqrt{\frac{\phi_{m1} - \phi_{m2}}{1 + \varepsilon}} \quad (3.28)$$

La forme du signal RF appliqué sur l'électrode de puissance est présentée dans l'équation (3.29) où $f = 13.56\text{Mhz}$ est la fréquence fondamentale, V_L et V_H sont les amplitudes associés à f (basse fréquence) et $2f$ (haute fréquence), respectivement. θ est l'angle de phase entre les deux formes du signal RF.

$$\tilde{V}_{RF}(t) = V_L \cos(2\pi ft + \theta) + V_H \cos(4\pi ft) \quad (3.29)$$

La figure 3.3 nous renseigne sur le comportement de la tension RF appliquée à la décharge pour 2 périodes RF en fonction du déphasage θ . On remarque que le profil de la courbe s'inverse de $\theta = 0^\circ$ à $\theta = 90^\circ$.

Dans notre travail, on suppose que les amplitudes V_L et V_H sont égales telles que $V_0 = V_L + V_H$, l'équation (3.29) devient :

$$\tilde{V}_{RF}(t) = \frac{V_0}{2} [\cos(2\pi ft + \theta) + \cos(4\pi ft)] \quad (3.30)$$

La résolution analytique de l'équation (3.30) a été proposée par Heil[8]. On définit $\varphi = 2\pi ft$

et on normalise par V_0 la tension appliquée V_{RF} , on a alors :

$$\bar{V}(\varphi) = \frac{1}{2} \cos(\varphi + \theta) + \frac{1}{2} \cos(2\varphi) \quad (3.31)$$

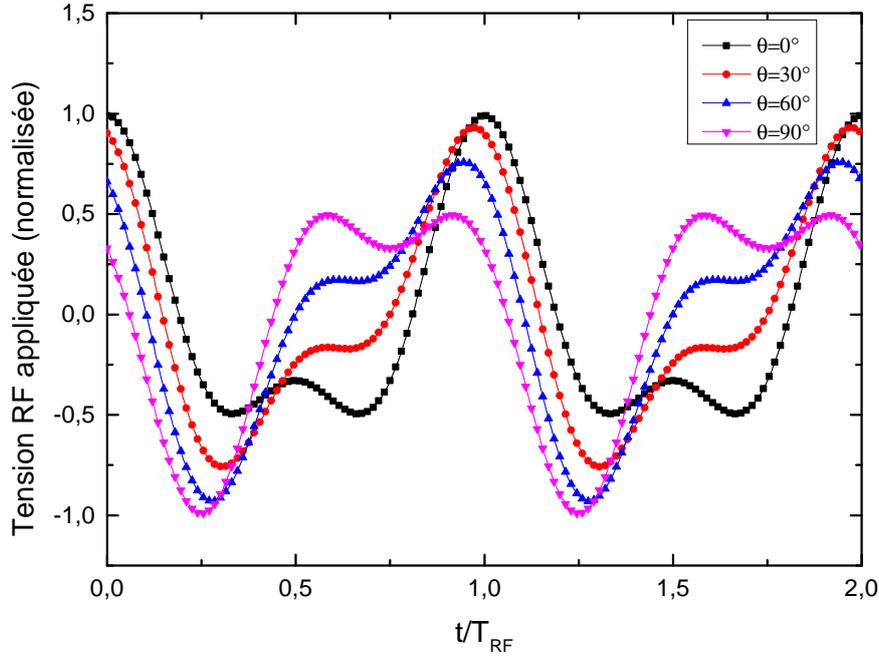


FIGURE 3.3 – $V(t) = 250 \cos(2\pi ft + \theta) + 250 \cos(4\pi ft)$ pour différentes valeurs de l'angle de phase θ pour 2 périodes RF ($2T_{RF}$).

La tension totale à travers la décharge sera :

$$\bar{V} = \bar{\eta} + \frac{1}{2} \cos(\varphi + \theta) + \frac{1}{2} \cos(2\varphi) \quad (3.32)$$

Les extremums de l'équation (3.32) sont calculés en dérivant par rapport à φ :

$$\sin(\varphi_m + \theta) + 2 \sin(2\varphi_m) = 0 \quad (3.33)$$

Le résultat de l'équation (3.33) est de la forme :

$$\theta = \begin{cases} -\varphi_m + \arcsin(-2 \sin(2\varphi_m)) \\ -\varphi_m - \arcsin(-2 \sin(2\varphi_m)) \pm \pi \end{cases} \quad (3.34)$$

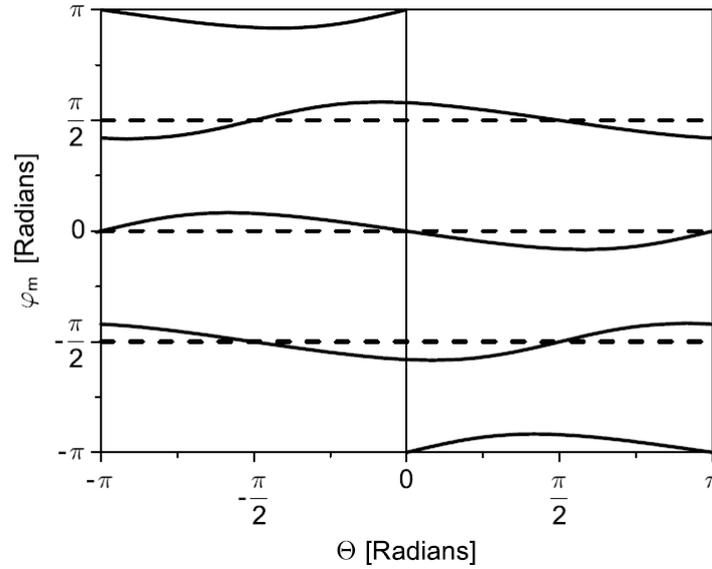


FIGURE 3.4 – Solution de l'équation (3.33)[8].

La figure 3.4 montre les solutions de l'équation (3.33). En examinant celle-ci, les solutions pour φ_m sont :

$$|\varphi_m - n\frac{\pi}{2}| \leq \frac{\pi}{12} \quad \text{avec} \quad n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \quad (3.35)$$

En substituant pour φ_m dans l'équation (3.31) on aura :

$$\phi_m = \frac{1}{2}(\cos \theta + 1) \quad \text{lorsque} \quad \varphi_m = 0 \quad (3.36)$$

$$\phi_m = \frac{1}{2}(-\sin \theta - 1) \quad \text{lorsque} \quad \varphi_m = \frac{\pi}{2} \quad (3.37)$$

$$\phi_m = \frac{1}{2}(\sin \theta - 1) \quad \text{lorsque} \quad \varphi_m = -\frac{\pi}{2} \quad (3.38)$$

$$\phi_m = \frac{1}{2}(-\cos \theta + 1) \quad \text{lorsque} \quad \varphi_m = \pi \quad (3.39)$$

A partir de ces quatre équations, on trace la tension maximale ϕ_{m1} et la tension minimale ϕ_{m2} illustré dans la figure 3.5.

La tension maximale est :

$$\phi_{m1} = \begin{cases} \frac{1}{2}(1 + \cos \theta), & -\frac{\pi}{2} \leq \theta \leq \frac{\pi}{2} \\ \frac{1}{2}(1 - \cos \theta), & \frac{\pi}{2} \leq \theta \leq \pi \end{cases} \quad (3.40)$$

Et la tension minimale est :

$$\phi_{m2} = \begin{cases} \frac{1}{2}(-1 - \sin \theta), & 0 \leq \theta \leq \pi \\ \frac{1}{2}(-1 + \sin \theta), & -\pi \leq \theta \leq 0 \end{cases} \quad (3.41)$$

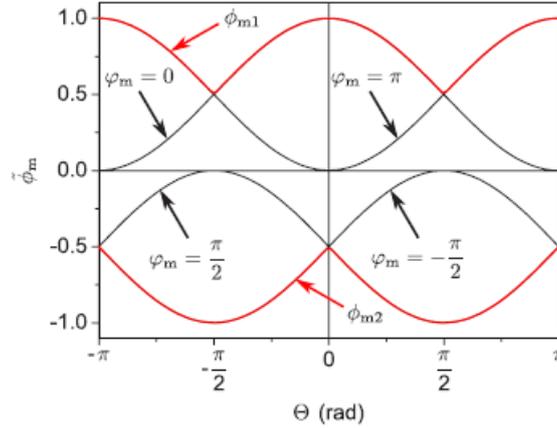


FIGURE 3.5 – Variations de ϕ_{m1} et ϕ_{m2} à partir des équations (3.36) à (3.39)[8]

3.2 Simulation d'une décharge DF-CCP

Le schéma de la simulation de la décharge DF-CCP est donné par la figure 3.1, où le plasma est généré dans un gaz d'argon pur à une pression de $20mTorr$ sous température ambiante, entre 2 électrodes parallèles identiques.

L'électrode de puissance est situé à $x = 0cm$, et l'électrode de masse est situé à $x = 3cm$, l'aire de l'électrode est de $100cm^2$. Nos simulations sont réalisées en utilisant le code électrostatique(XPDP2) développé par Verboncoeur [65] et Vahedi [66] décrit précédemment (section 2.4.1), en tenant compte des processus collisionnels de Monté Carlo, ie. excitation électronique, ionisation, diffusion élastique pour les collisions électron-neutre, l'échange de charge et la diffusion isotrope pour les collisions ion-atome.

Afin de résoudre le cycle RF, le pas de temps de la simulation est 1000 fois plus petit que la période de la fréquence caractérisant la tension injectée, ie. $dt = 3,6010^{-11}s$, sachant que dt est 100 fois plus petit que l'inverse de la fréquence plasma.

Le domaine de simulation est discrétisé sur des cellules de 180×600 cellules, ainsi le segment défini par deux nœuds successifs est inférieur à $0,8\lambda_D$. le poids statistique des macro-particules est

choisi de manière à obtenir dans le plasma plus de 80 macro-particules par cellule.

La densité du gaz est supposée uniforme et fixée, elle dépend de la pression et de la température ambiante du système. Les densités de particules chargées sont calculées en intégrant les trajectoires d'ions et d'électrons ; et qui sont simulées par la méthode PIC-MCC. Les particules (ions et électrons) sont traquées dans la simulation de l'instant où elles sont créées, par ionisation, jusqu'à ce qu'elles rencontrent une paroi ou une électrode du domaine de la simulation.

Notons que le flux de particules chargées est neutralisé sur les surfaces des électrodes et les parois de la chambre à vide. La contribution sur la charge de la capacité de blocage des flux d'électrons et d'ions atteignant l'électrode de puissance est prise en compte.

Le potentiel plasma est calculé par la résolution numérique de l'équation de Poisson, nous utilisons la condition de Dirichlet pour résoudre cette équation. L'électrode de puissance est alimentée par une tension alternative ie. $V_{RF}(t) - V_c(t)$, tandis que l'autre électrode est reliée à la masse. La chute de potentiel aux bornes de (C_B) est $V_c(t)$, elle est calculé sur la base de la charge électrique stockée dans la capacité de blocage.

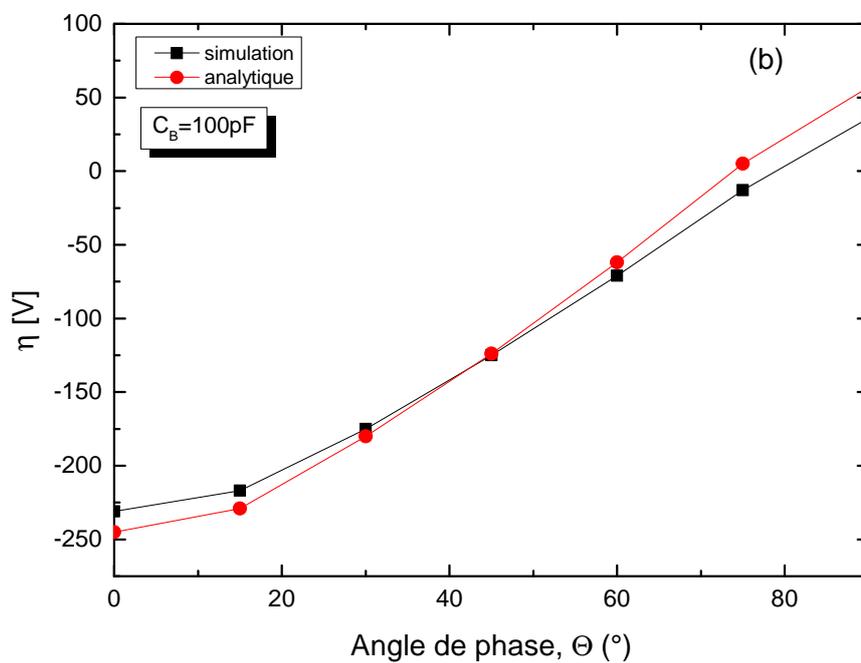
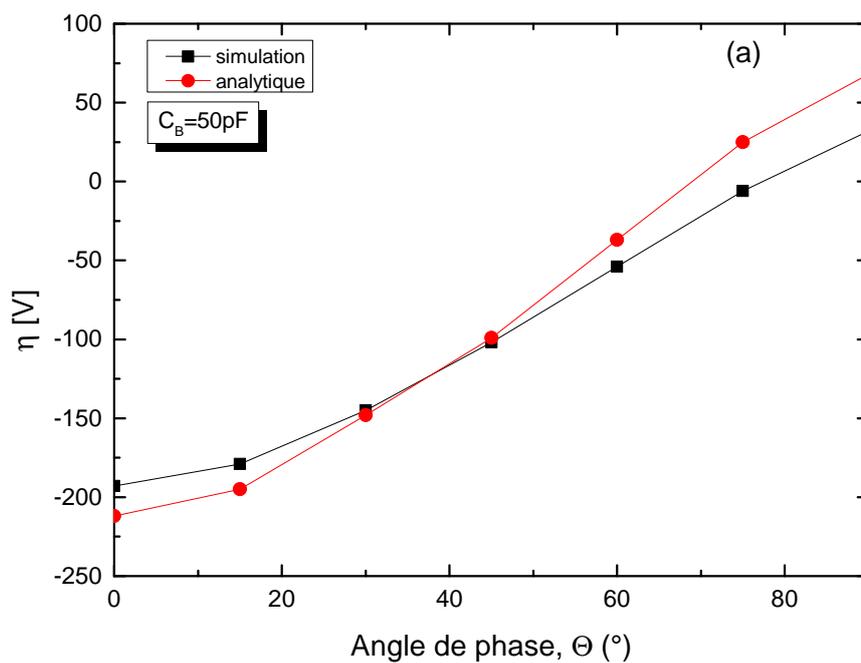
Le bombardement ionique des électrodes induit une émission d'électrons secondaires, pour simuler ce flux d'électrons on considère le coefficient d'émission secondaire $\gamma = 0.2$, toutefois ce coefficient joue un rôle marginale dans la simulation, puisque la puissance fournie au plasma est principalement dissipée par chauffage ohmique et stochastique, ces mécanismes de chauffage sont simulés d'une manière auto-cohérente dans la méthode PIC-MCC.

Les conditions de simulation, telles que l'amplitude, la pression, la capacité de blocage et l'angle de phase sont considérées comme étant des données d'entrée. Les résultats obtenus sont moyennés sur une période RF et ont atteint l'état stationnaire. ($\sim 80\mu s$)

P(mTorr)	T_g(eV)	dt(s)	x(m)	y(m)	nc_x	nc_y
20	0.03	$3,610^{-11}$	0.03	0.1	180	600

TABLEAU 3.1 – Paramètre de simulation utiliser dans le code (XPDP2)

Le tableau3.1 résume nos paramètres physiques de simulation tel que P et T_g qui sont la pression et la température du gaz d'argon, dt est le pas du temps dans la simulation, x est la distance entre les deux électrodes, et y la distance suivant l'axe (y), nc_x et nc_y sont les nombres de cellules suivant les axes (x) et (y).



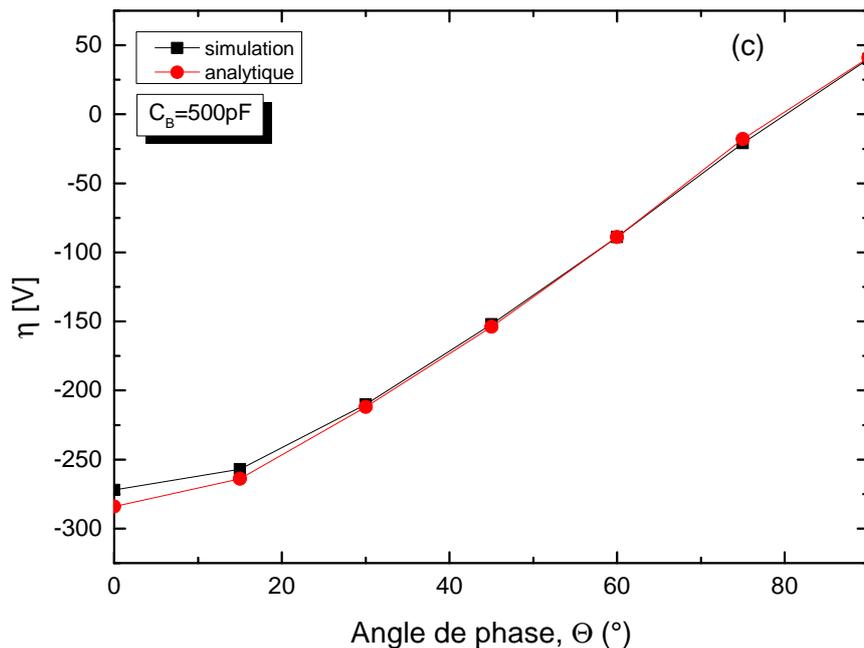


FIGURE 3.6 – Comparaison de η en fonction de θ calculé par la simulation et le modèle analytique pour :(a) $C_B = 50pF$, (b) $C_B = 100pF$ et (c) $C_B = 500pF$, en considérant $V_L = V_H = 250V$ et $V_0 = V_L + V_H = 500V$

Dans la figure 3.6, on compare la simulation (PIC-MCC) à la méthode semi-analytique pour différentes capacités $C_B = 50pF$, $100pF$ et $500pF$. Le potentiel d'auto-polarisation est calculé à partir de l'équation (3.29) et elle a pour solution approximative les équations (3.40) et (3.41). La comparaison du potentiel d'auto-polarisation, η , montre un bon accord entre la simulation obtenue par le potentiel moyen distribué pour une période RF $|\langle \phi_{sg} \rangle - \langle \phi_{sp} \rangle|$ et la méthode analytique, ie. $\eta = -V_c(t) + \alpha \langle q(t) \rangle V_0$. Notons que, l'évolution de la tension d'auto-polarisation illustrée dans la figure 3.6, ne montre pas le comportement décrit par *Donko et al* [19]. Ceci est expliqué par le fait que *Donko et al* supposent que le diamètre des électrodes est nettement plus grand que l'espace entre électrodes. Cela permet de simuler par la méthode PIC à une dimension (1D3V). En d'autre termes, la surface de la paroi de la chambre à vide en contact avec le plasma est supposé négligeable par rapport à la surface de l'électrode. Ainsi, du point de vue géométrique, cette décharge est toujours symétrique. Dans nos calculs, les électrodes ont $10cm$ de diamètre, le domaine de simulation est de $10 \times 3cm^2$ on utilise alors la simulation PIC à 2 dimensions (2D3V). Dans ce cas, les parois du réacteur vont, eux aussi, jouer le rôle d'électrode de masse. Ainsi dans notre cas, et généralement dans les réacteurs à plasma, la surface de l'électrode

alimentée est plus petit que l'électrode de masse qui inclut les parois du réacteur et l'électrode de masse. Cela induit à une configuration géométriquement asymétrique.

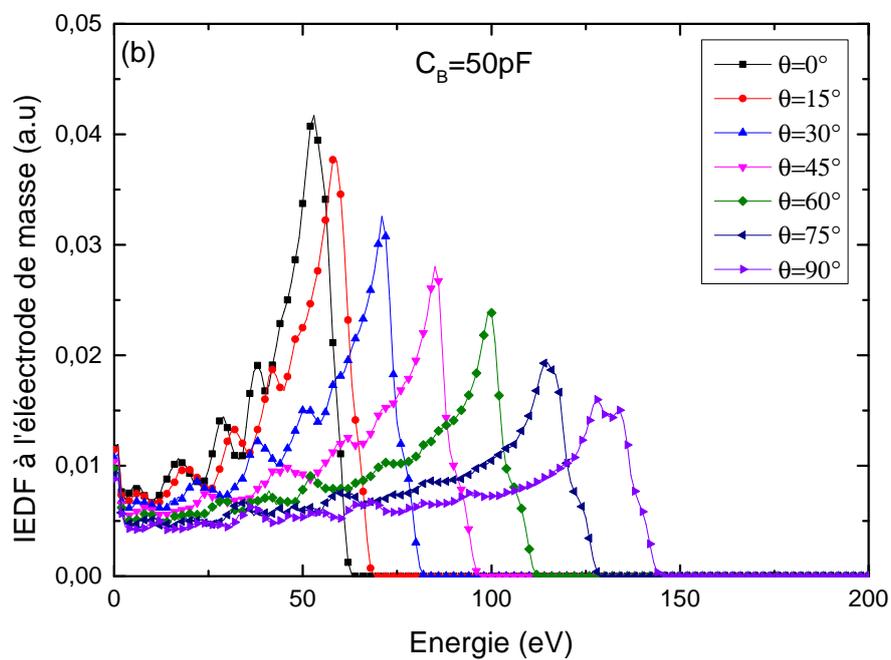
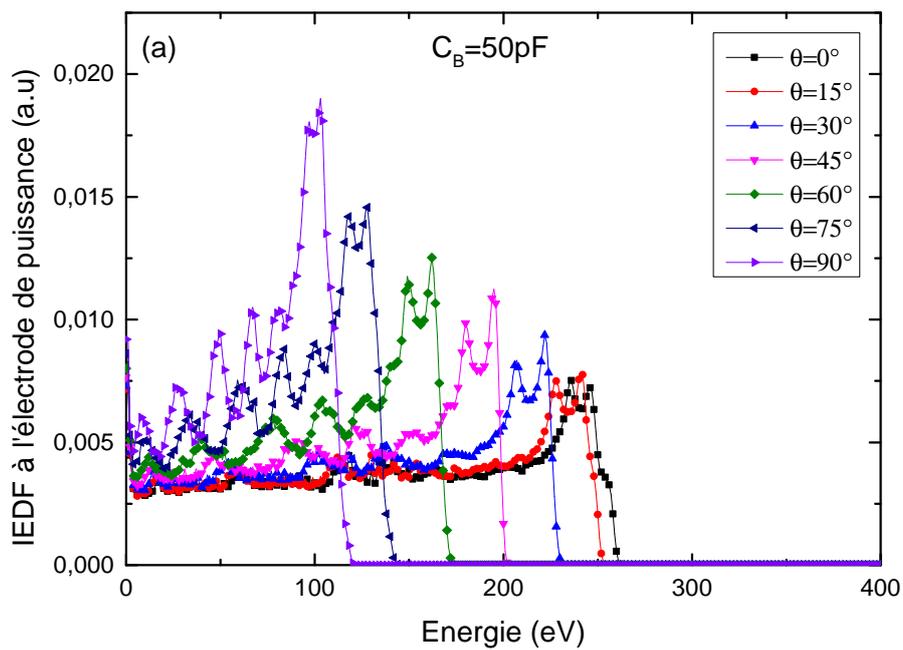
Chapitre 4

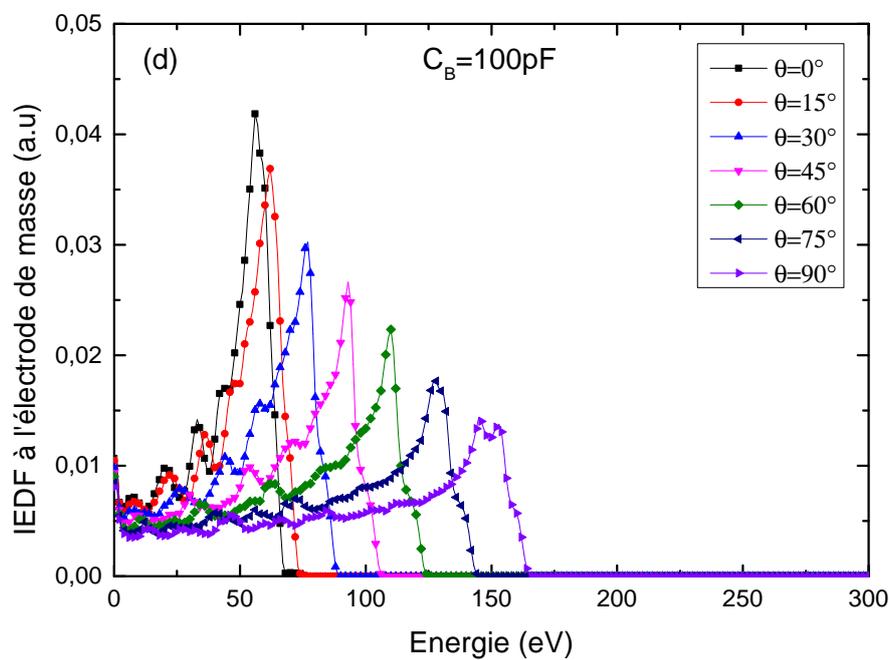
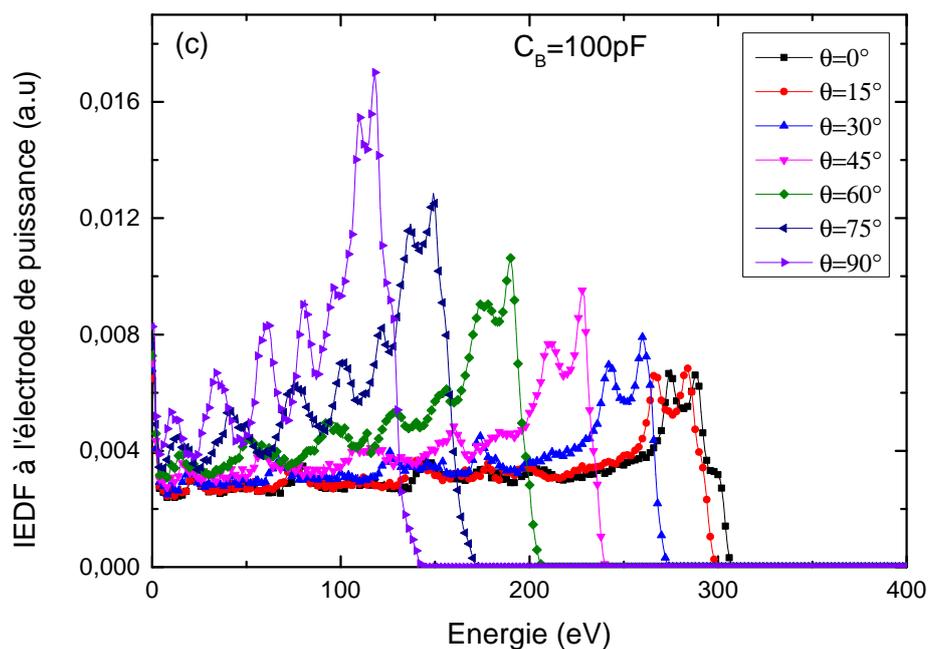
Résultats et Discussions

Dans ce chapitre, les résultats présentés ont été obtenus par la simulation d'une décharge DF-CCP d'un plasma d'argon confiné entre 2 électrodes. L'utilisation du modèle particulaire (PIC-MCC) décrit dans le chapitre deux, nous a permis d'étudier les propriétés physiques de notre décharge plasma à savoir le profil spatial du potentiel et ceux des densités ioniques. Nous présenterons ainsi l'effet de la capacité de blocage (C_B) et l'angle de phase (θ) en tant que couple de paramètres de commande sur la distribution des énergies ioniques bombardant l'électrode de puissance et de masse.

4.1 Représentations des fonctions de distributions des énergies ioniques

Les figures 4.1(a-f) montrent l'influence de l'angle de phase sur la fonction de distribution des énergies ioniques (IED) pour différentes valeurs de C_B ($50pF$, $100pF$ et $300pF$). On constate que l'effet du déphasage (θ) sur l'énergie de bombardement est très significatif. Il est important de mentionner que les énergies des ions traversant les gaines vont quasiment doublées ; et que le flux ionique va varier en fonction de θ , en effet il est réduit d'un facteur d'environ trois pour θ allant de 90° à 0° . Par ailleurs on peut considérer qu'à $\theta = 90^\circ$, le rôle de chaque électrode est inversé, cela est dû au fait que la tension d'auto-polarisation dépend en premier lieu de la tension appliquée $V_{RF}(\theta)$.





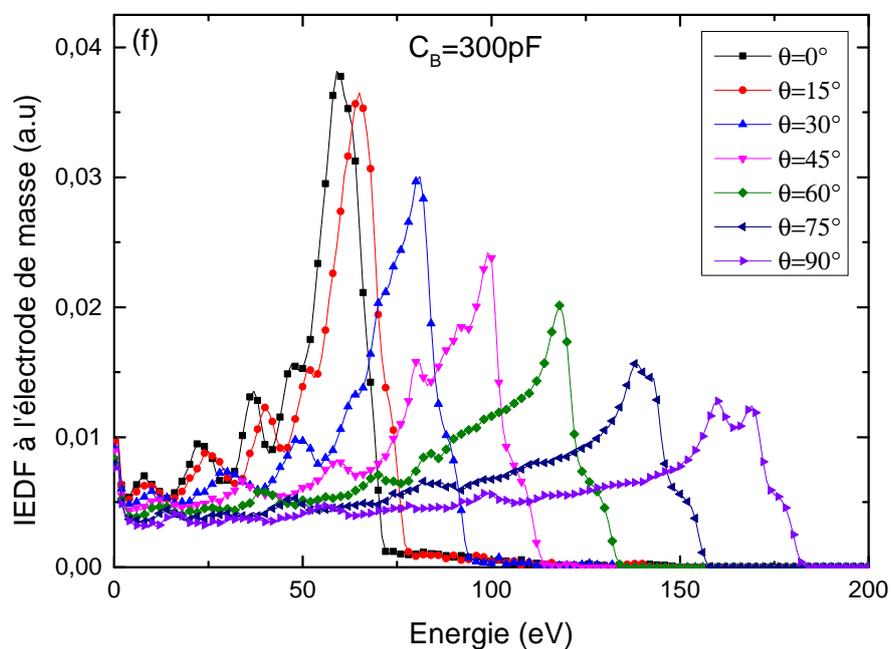
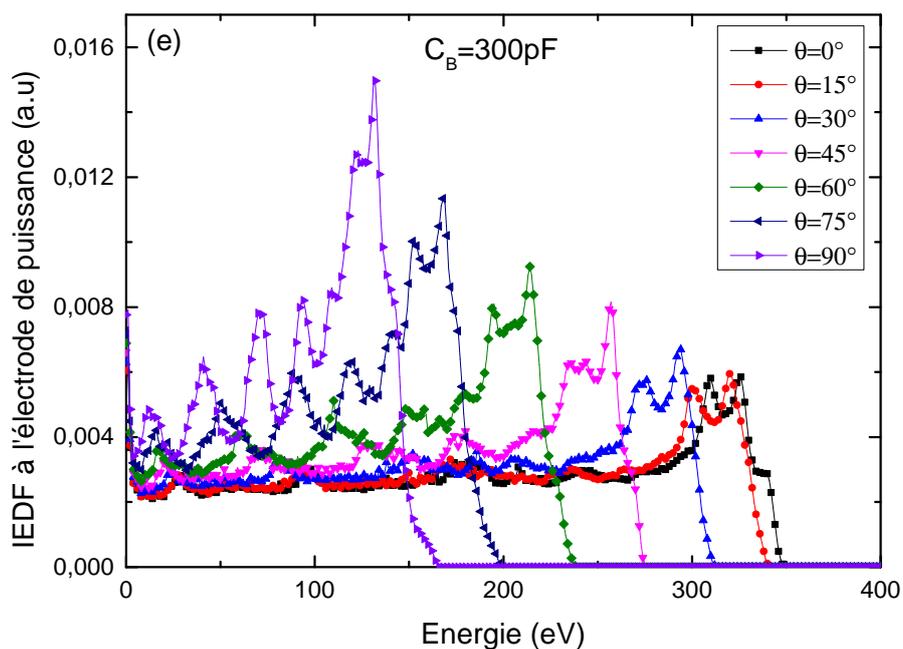
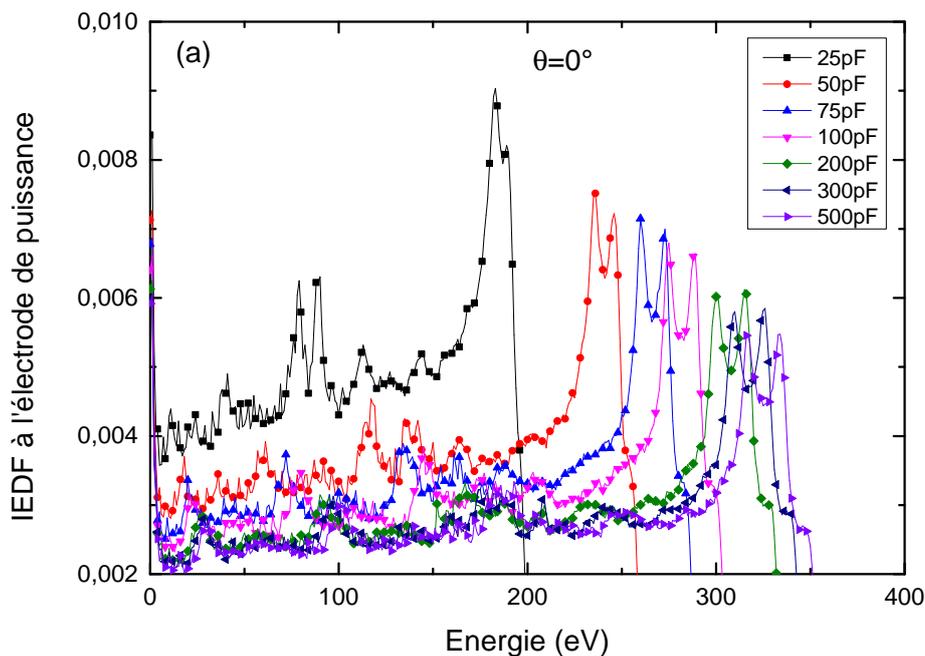
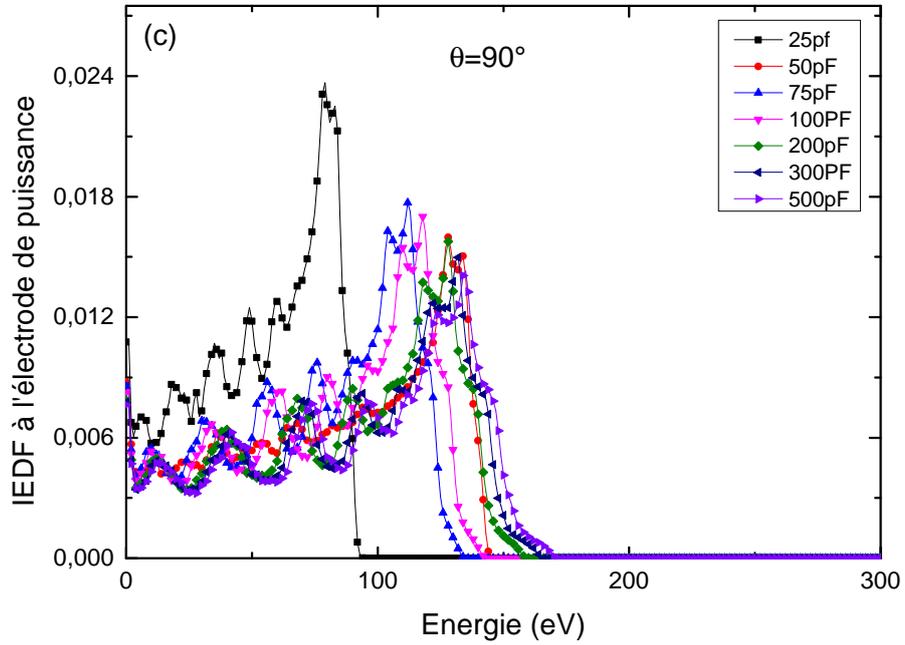
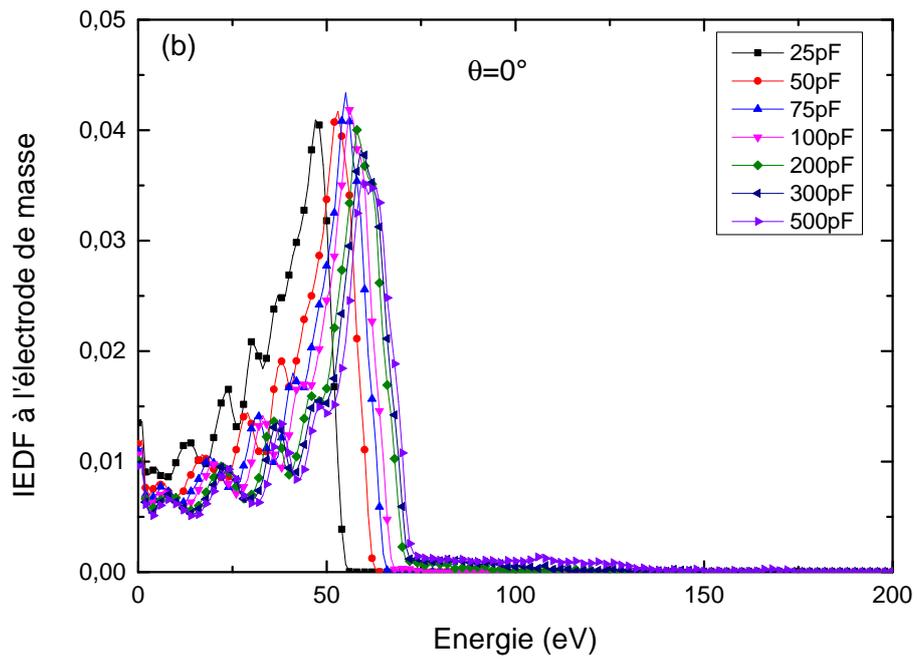


FIGURE 4.1 – Fonction de distribution ionique (a-f) à différent angle de phase calculée par PIC-MCC à différentes valeurs de C_B pour ($V_0 = 500\text{V}$, $p = 20\text{mTorr}$, $d = 3\text{cm}$).



Les figures 4.2(a-d) présentent l'effet de la capacité de blocage (C_B) sur la fonction de distribution des énergies ioniques d'argon pour différentes valeurs de θ (0° et 90°). La forme générale des IED est constituée de deux pics à des énergies élevées, dues aux deux fréquences appliquées, sans subir de collisions dans la gaine, et une large distribution à des énergies inférieures causées par les éventuelles collisions au niveau de la gaine. On constate que la forme de la distribution des énergies ioniques est sensible à la variation de la capacité de blocage (C_B), elles sont plus importantes quand la valeur de C_B est plus élevée sur l'électrode de puissance. Ce changement de comportement des IEDs est dû au potentiel d'auto-polarisation qui augmente avec la capacité de blocage reliée à l'électrode de puissance.



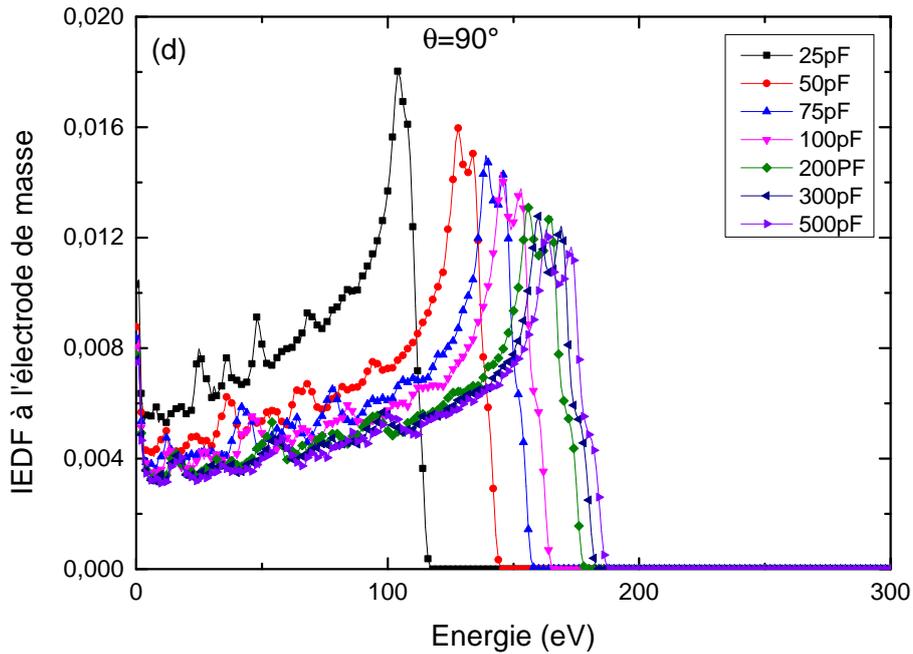


FIGURE 4.2 – Fonction de distribution ionique(a-d) à différentes capacité de blocage C_B calculée par PIC-MCC à différentes valeurs de θ pour ($V_0 = 500V$, $p = 20mTorr$, $d = 3cm$).

Les résultats de la simulation des fonctions de distribution des énergies ioniques (IED) à différentes tensions d'entrée sont reportés sur la figure 4.3. On remarque que la tension V_{RF} a une influence significative sur l'énergie de bombardement et sur le flux ionique traversant les gaines. En effet la tension d'auto-polarisation augmente avec la tension V_{RF} , ce qui se traduit par un déplacement des pics vers des énergies plus élevées.

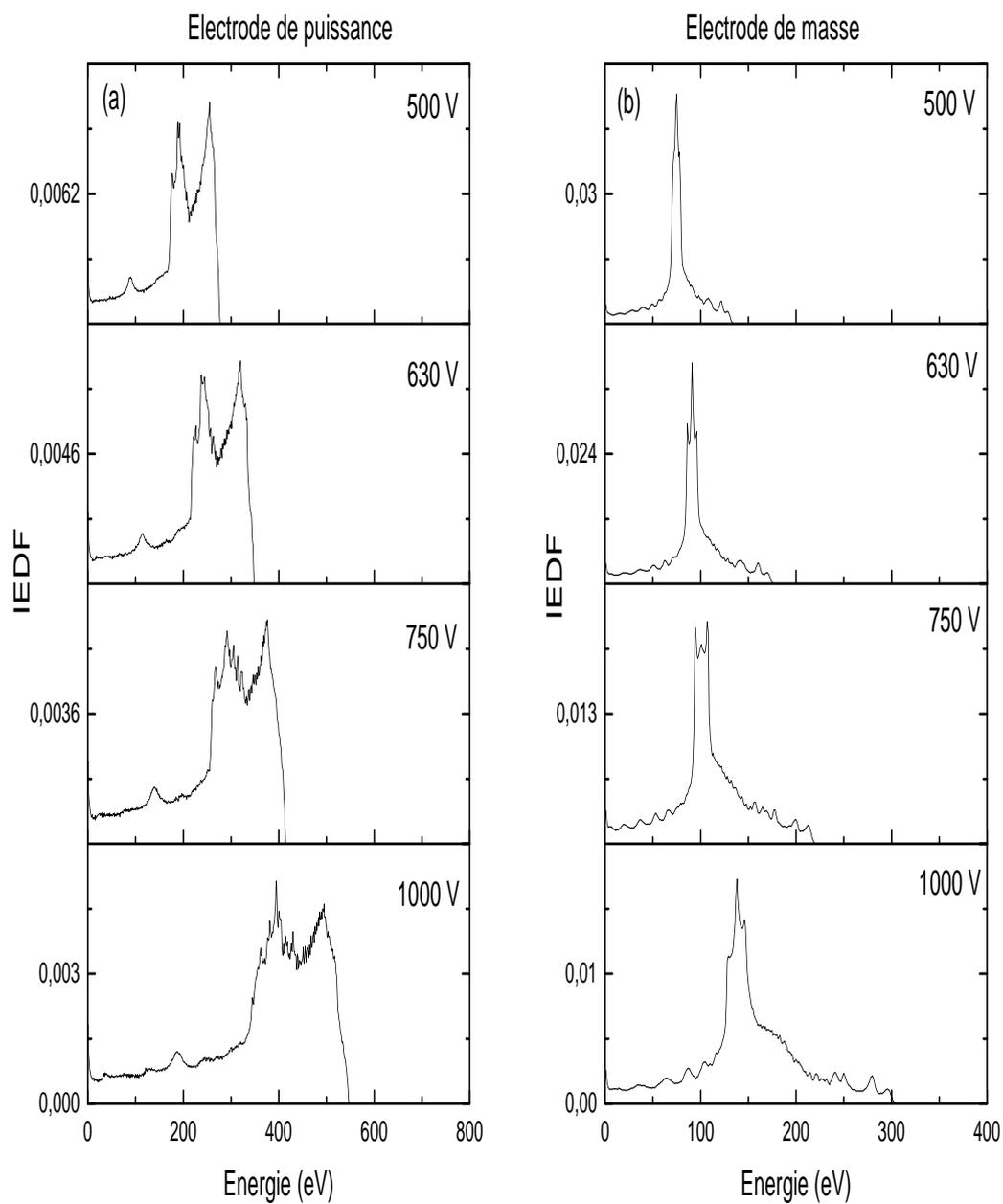


FIGURE 4.3 – Fonction de distribution des énergies ioniques à différentes tensions d’entrées (a) électrode de puissance, (b) électrode de masse ($p = 5\text{mtorr}$, $f = 13,56\text{MHz}$ et $27,12\text{MHz}$)

4.2 Profil de potentiel

La figure 4.4 représente la distribution spatiale du profil de potentiel en fonction de la position pour différentes capacités de blocage, on remarque une importante chute de potentiel dans la gaine de puissance, elle est sensiblement proportionnelle à la capacité de blocage C_B ; la chute de potentiel est quasiment identique au niveau de la gaine de masse, et nulle au niveau du plasma.

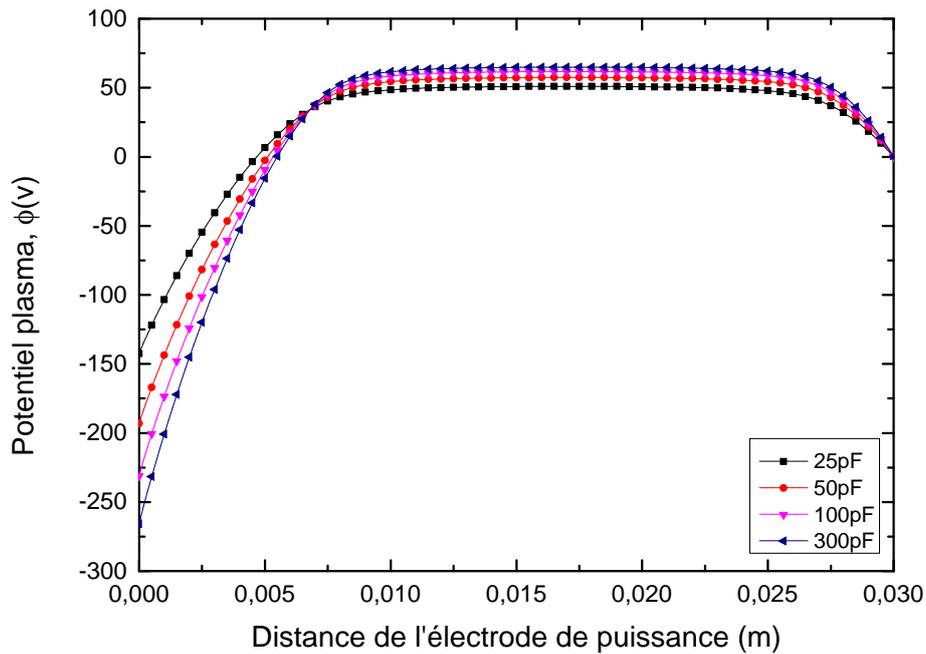
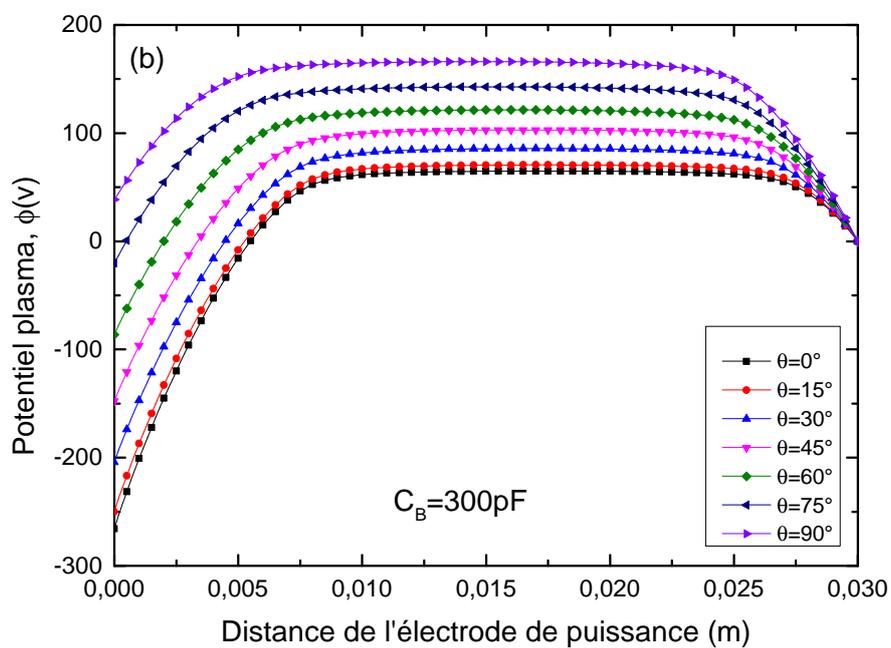
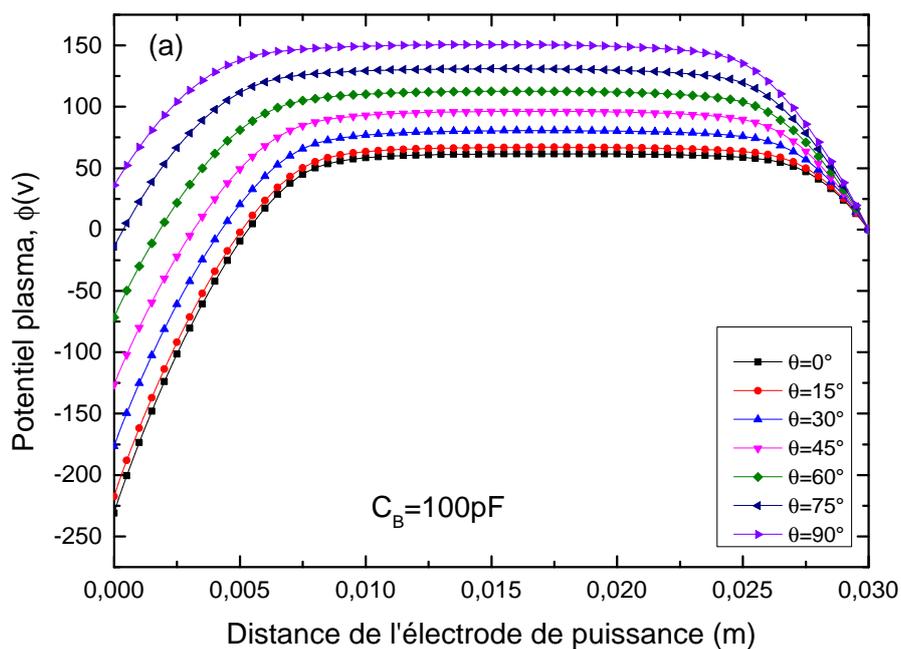


FIGURE 4.4 – le profil de potentiel calculé en fonction de la distance inter-électrode pour différents capacités de blocage C_B à $\theta = 0^\circ$.

La distribution spatiale du profil de potentiel pour différents angle de phase (θ), est tracée dans les figures 4.5(a-c) ; on remarque qu'il est possible de changer le signe de la tension d'auto-polarisation. Celle-ci peut varier de $\sim -225V$ à $\sim +30V$ pour $\theta = 0^\circ$ et $\theta = 90^\circ$ respectivement à $C_B = 100pF$. La chute de potentiel est nulle au niveau du plasma (neutralité électrique) et augmente en fonction de l'angle de phase dans la gaine de masse, de $\sim 60V$ pour $\theta = 0^\circ$ à $\sim 145V$ pour $\theta = 90^\circ$.



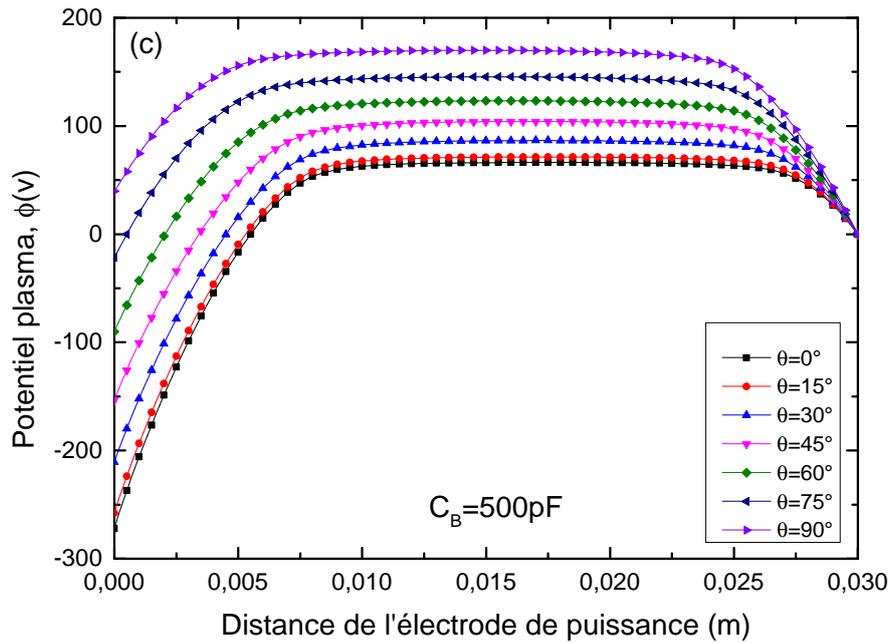


FIGURE 4.5 – le profil de potentiel calculé en fonction de la distance inter électrode pour différents angle de phase (θ), (a) $C_B = 100pF$, (b) $C_B = 300pF$, (c) $C_B = 500pF$

4.3 Paramètre de symétrie

Dans la figure 4.6(a), le paramètre de symétrie (ε) est représenté en fonction de la capacité de blocage (C_B) pour deux valeurs de θ , à savoir $\theta = 0^\circ$ et $\theta = 90^\circ$. Tandis que dans la figure 4.6(b), le paramètre de symétrie (ε) est en fonction de l'angle de phase (θ) pour trois valeurs de C_B ($50pF$, $100pF$ et $300pF$). On remarque que la capacité de blocage n'a pas d'effet sur le paramètre de symétrie i.e. sur le rapport entre les maximums des chutes de tension dans la gaine de masse et celle de puissance (figure 4.6(a)) toutefois comme on peut le vérifier sur les graphes (4.2 et 4.4) les chutes de tension dans les gaines de masse et de puissance varient en fonction de C_B , tout en conservant une valeur de ε ; en d'autre terme le rapport ($\frac{\hat{\phi}_{sq}}{\hat{\phi}_{sp}}$) ne change quasiment pas. Par contre, on note l'influence significative de l'angle de phase (θ) sur le paramètre de symétrie (ε) comme indiqué sur la figure 4.6(b). En effet plus le déphasage (θ) augmente et plus l'effet d'asymétrie diminue, i.e la décharge est plus électriquement asymétrique quand l'angle de phase diminue.

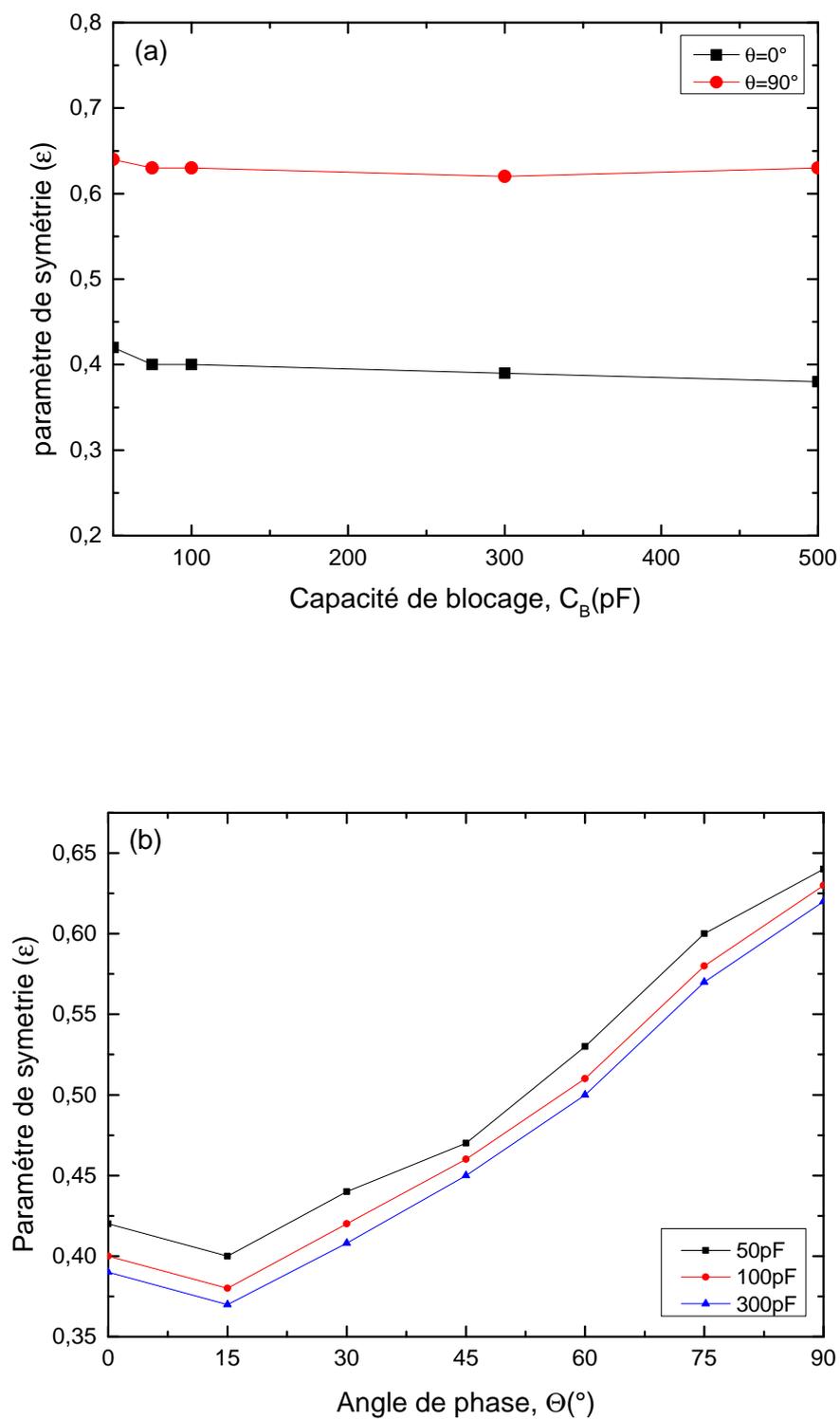


FIGURE 4.6 – Paramètre de symétrie (ϵ) en fonction de : (a) la capacité de blocage C_B pour $\theta = 0^\circ$ et $\theta = 90^\circ$ et (b) en fonction de l'angle de phase (θ) pour $C_B = 50\text{pF}$, 100pF et 300pF

4.4 Profils des densités

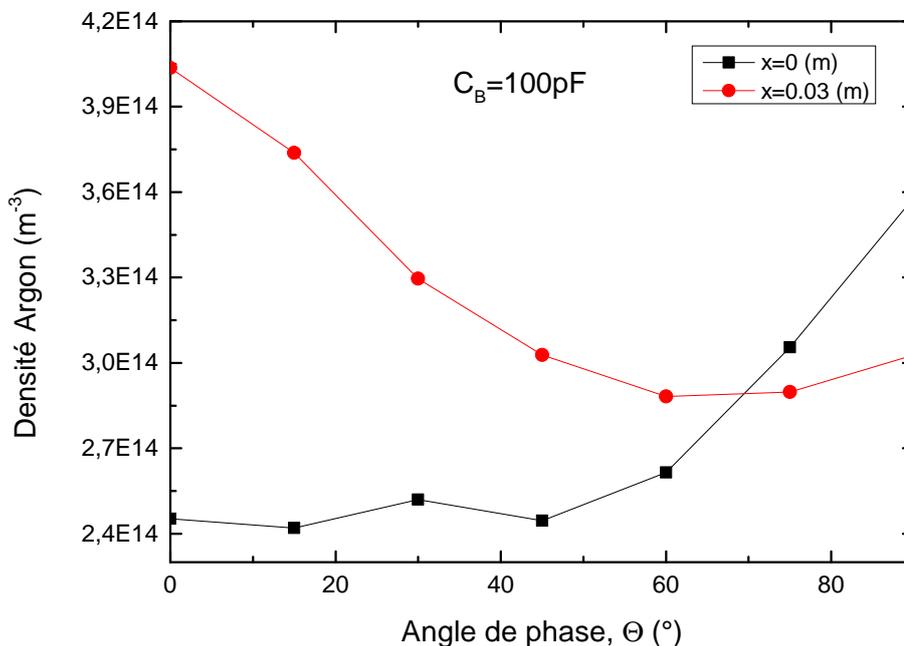


FIGURE 4.7 – Profil de la densité d’argon en fonction de l’angle de phase obtenu par la simulation PIC/MCC pour $C_B = 100pF$, à l’électrode de puissance (en noir), et à l’électrode de masse (en rouge).

Le profil de densité d’argon est illustré dans la figure 4.7 en fonction de l’angle de phase (θ) pour les deux gaines : de puissance (en noir) et de masse (en rouge), on remarque que les densités d’argon dans la gaine de masse sont inversement proportionnelles à l’angle de phase (θ), par contre les densités au niveau de la gaine de puissance augmentent avec (θ). On en déduit que le rôle des électrodes a tendance à s’inverser avec l’angle de phase (θ). L’asymétrie électrique n’est pas totalement inversée cela est due à la présence des parois latérales qui s’ajoutent à l’électrode de masse impliquant une géométrie asymétrique.

La figure 4.8 représente la distribution spatiale des densités d’argon au centre de la décharge calculé par la simulation PIC/MCC, on remarque qu’à $\theta = 0^\circ$, la gaine de puissance est plus élargie, exprimant une chute de potentielle plus importante que celle de la gaine de masse cela s’explique par l’effet d’asymétrie électrique. A $\theta = 90^\circ$, l’écart diminue par l’inversement des rôles des électrodes. On note que les densités des particules sont plus importantes au centre du plasma et plus particulièrement à $\theta = 90^\circ$, sachant que les flux ioniques sont moins importants et les électrons et les ions ont moins tendance à disparaître lors de leurs collisions sur les parois comme l’indiquent

les figures 4.1(a) et 4.1(b).

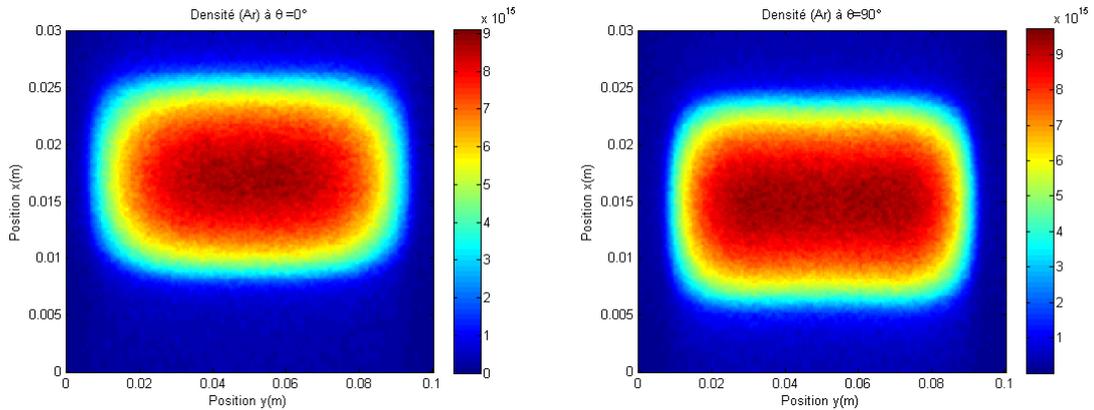
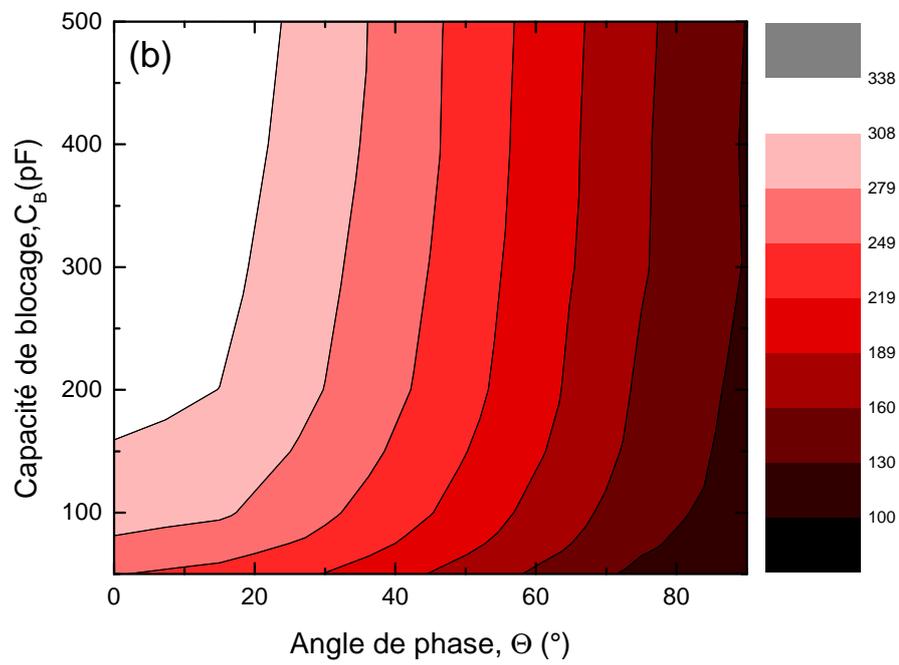
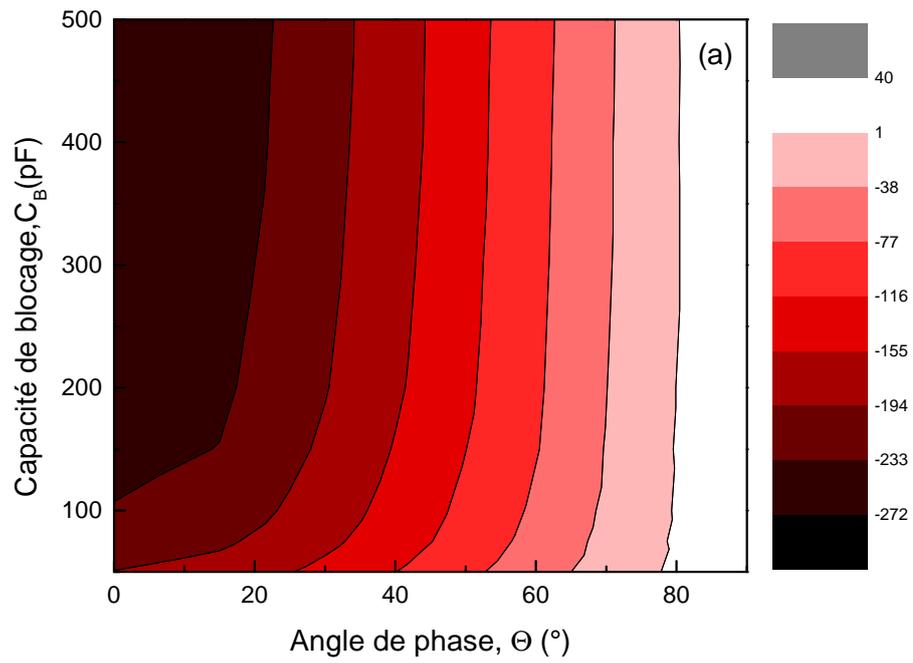


FIGURE 4.8 – Distribution spatiale des densités d’argon entre l’électrode de puissance et l’électrode de masse calculé par la simulation PIC/MCC à $\theta = 0^\circ$ (à gauche) et à $\theta = 90^\circ$ (à droite). ($p = 20mTorr$, $V_{RF} = 500V$, $d = 3cm$).

4.5 Influence du couple de paramètres C_B et θ

Les figures 4.9 de (a-c) représentent la distribution ; du potentiel d’auto-polarisation (η) et de la chute de potentiel des gaines adjacentes aux électrodes de puissance (ϕ_{sp}) et de masse (ϕ_{sg}) en fonction de la capacité de blocage (C_B) et de l’angle de phase (θ), obtenue pour les conditions de simulation résumées dans le tableau 3.1. Ces figures montrent que les deux paramètres C_B et θ contrôlent les valeurs η , ϕ_{sp} et ϕ_{sg} . Cependant ce qui est intéressant à savoir, est que pour la même valeur de η , il est possible de définir différentes valeurs de ϕ_{sp} et ϕ_{sg} . A titre d’exemple $\eta = \phi_{sp} - \phi_{sg} = -150V$, on contrôle ϕ_{sp} de $\sim 210V$ à $\sim 270V$ et ϕ_{sg} de $\sim 70V$ à $\sim 100V$. Une autre idée intéressante, est la possibilité de choisir le couple (C_B, θ) comme des paramètres de contrôles, de telle manière à contrôler indépendamment, d’une part la chute de potentiel dans chaque gaine et d’autre part l’énergie ionique bombardant chaque électrode.



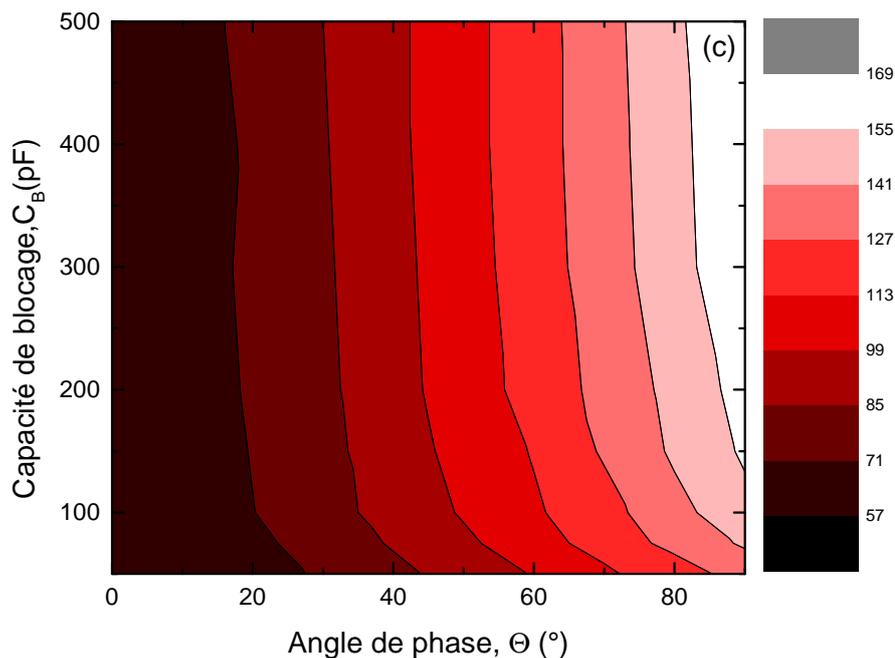
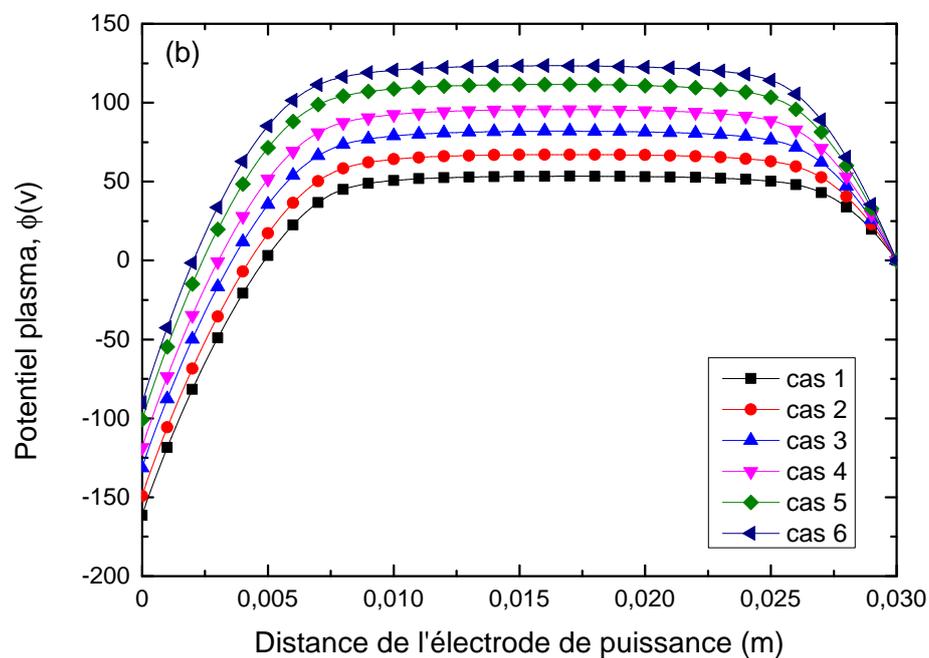
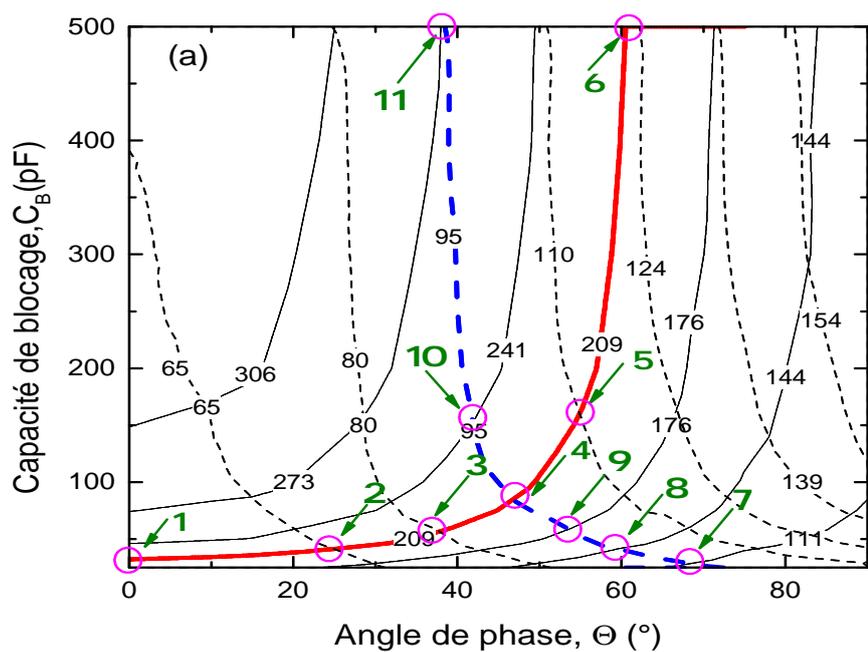


FIGURE 4.9 – distribution (en Volts) de (a) potentiel d’auto-polarisation η , (b) chute du potentiel de la gaine adjacente à l’électrode de puissance ϕ_{sp} et (c) chute du potentiel de la gaine adjacente à l’électrode de masse ϕ_{sg} en fonction de la capacité de blocage C_B et de l’angle de phase θ pour les conditions résumées au tableau 3.1.

La figure 4.10(a) exprime la superposition de la chute de potentiel des gaines adjacentes aux électrodes de masse (lignes pointillées) et de puissance (lignes solides) en fonction du C_B et θ pour les conditions résumées dans la tableau 3.1. On peut prédire à partir de cette figure que les leviers de contrôles C_B et θ vont permettre à l’opérateur de choisir, quasi-indépendamment, la chute de potentiel dans chaque gaine. Par exemple, l’opérateur peut varier C_B et θ de façon à maintenir ϕ_{sp} constant, tout en variant le ϕ_{sg} et cela jusqu’à 50% de sa valeur maximale, et vice versa. Ceci permet à l’opérateur de contrôler l’énergie ionique bombardant l’électrode sans affecter l’énergie des ions bombardant l’autre électrode.

Cas	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11
$\theta(^{\circ})$	0	24	37	46	55	60	70	60	53	42	38
$C_B(pF)$	32	41	56	85	168	500	30	41	53	161	500

TABLEAU 4.1 – Paramètres de contrôles utilisés dans différentes cas de simulations.



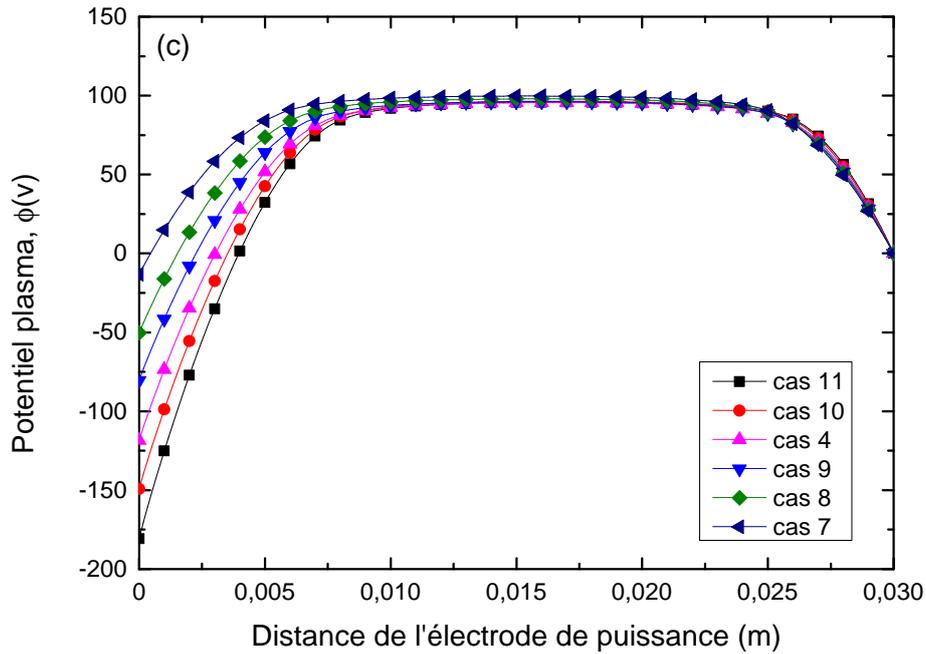
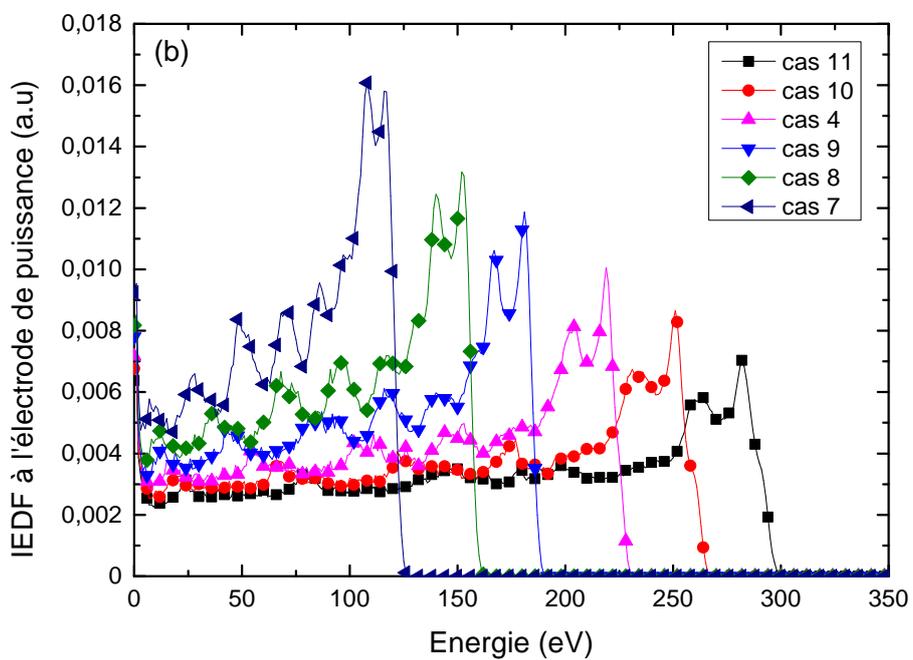
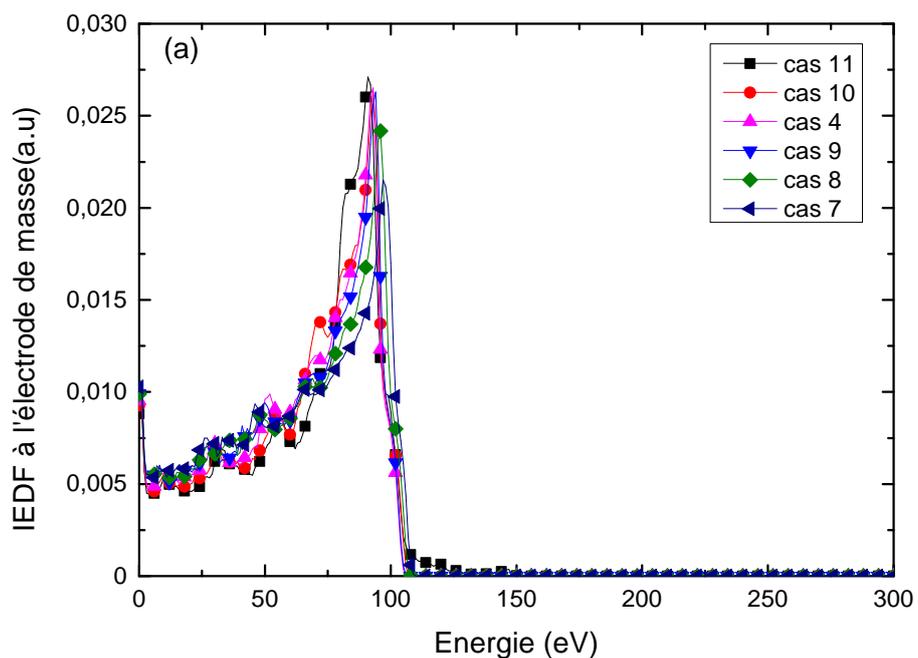


FIGURE 4.10 – (a) distribution de la chute de potentiel de la gaine adjacente à l'électrode de puissance (lignes solides) et de masse (lignes pointillées) en fonction de la capacité de blocage C_B et l'angle de phase θ pour les conditions résumées au tableau 3.1. Les symboles en cercles (1-11) représentent les 11 cas de simulations dans le tableau 4.1. (b) le profil de potentiel moyen calculé pour les conditions résumées dans le tableau 3.1 et pour les cas de 1 à 6 (voir tableau 4.1). (c) le profil de potentiel moyen calculé pour les conditions résumées dans le tableau 3.1 et pour les cas de 7 à 11, voir tableau 4.1.

Afin de mettre en évidence cet effet, on simule la décharge en considérant 11 valeurs du couple de paramètres (C_B et θ), (voir les cercles rouge illustrés dans la figure 4.10(a)), choisies le long des courbes rouge et bleu. Les 6 premiers cas simulés visent à maintenir ϕ_{sp} constant (de l'ordre de $\sim 210V$), et de faire varier ϕ_{sg} entre [$\sim 50V$ et $\sim 120V$], (courbe bleu en pointillée). Les 6 autres cas simulés ont pour but de maintenir ϕ_{sg} constant (de l'ordre de $\sim 100V$) tout en variant ϕ_{sp} entre [$\sim 110V$ et $\sim 270V$] (courbe en rouge).

Les figures 4.10(b) et 4.10(c) représentent le profil de potentiel du plasma sur une période pour les conditions résumées au tableau 3.1. À titre d'exemple dans la figure 4.10(b), on a fixé le potentiel de la gaine adjacente à l'électrode de puissance, ϕ_{sp} est de $\sim 210V$, et on a varié le potentiel dans la gaine adjacente à l'électrode de masse, ϕ_{sg} entre [$\sim 50V$ et $\sim 120V$]. Tandis que dans la figure 4.10(c), on a fixé le ϕ_{sg} à $\sim 100V$ et on a varié ϕ_{sp} entre [$\sim 110V$ et $\sim 270V$].



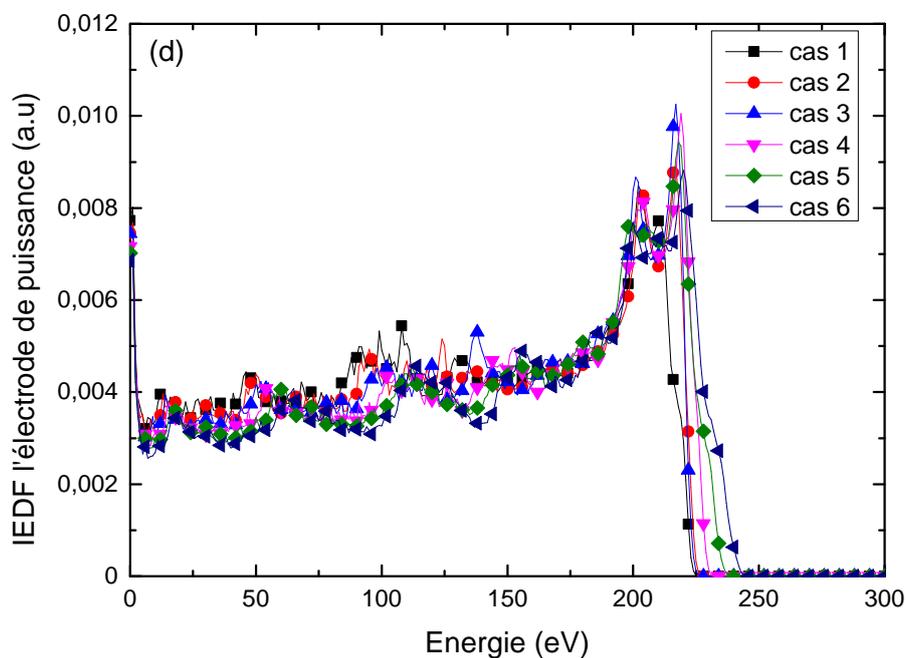
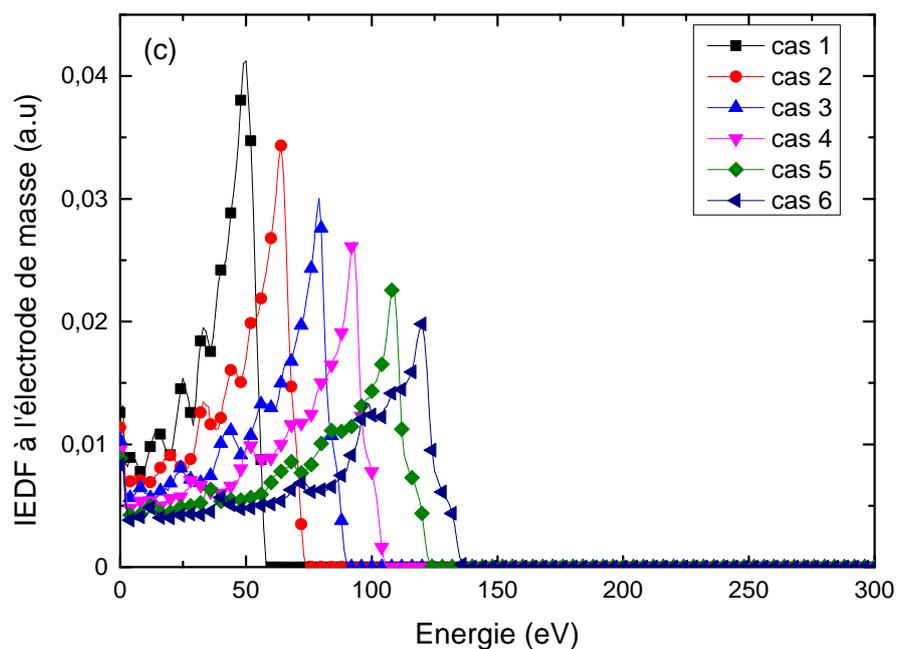


FIGURE 4.11 – Fonction de distribution des énergies ioniques (IEDF) à l'électrode de puissance et de masse pour les cas résumés dans la figure 4.10(a). (a) et (c) à l'électrode de masse. (b) et (d) à l'électrode de puissance.

La figure 4.11(a) exprime la fonction de distribution des énergies ioniques (IEDF) sur l'élec-

trode de masse pour les cas présentés dans la figure 4.10(c), les paramètres de contrôles C_B et θ sont définies de manière à obtenir une chute de potentiel d'environ $\sim 100V$ dans la gaine adjacente à l'électrode de masse, il en découle des fonctions de distribution des énergies ioniques centré à $\sim 100eV$. On remarque que la forme des IEDF varie légèrement, en raison des changements dans l'évolution temporelle des caractéristiques de la gaine, (baisse de potentiel, courant au bord de la gaine, largeur de la gaine ... etc.). La fonction de distribution des énergies ioniques (IEDF) sur l'électrode de puissance pour les différents cas présentés dans la figure 4.10(c), est représentée sur la figure 4.11(b). Par exemple dans les cas (8,4 et 11) correspondant aux chutes de potentiels de la gaine adjacente à l'électrode de puissance, les chutes de potentiels sont $\sim 140V$, $\sim 210V$ et $\sim 270V$ respectivement.

Les figures 4.11(c) et 4.11(d) expriment la fonction de distribution des énergies ioniques à l'électrode de masse et de puissance respectivement pour les cas (1 à 6) présentés dans la figure 4.10(b). Pour ces cas, la valeur de la chute potentiel dans la gaine adjacente à l'électrode de puissance est fixé à $\sim 210V$. En revanche la chute de potentiel à l'électrode de masse va varier de $\sim 60V$, $\sim 90V$ et $\sim 120V$ pour les cas (2,4 et 6) respectivement. Et les IEDF correspondant à l'électrode de masse seront centrés à $\sim 60eV$, $\sim 90eV$ et $\sim 120eV$ pour les cas (2,4 et 6) respectivement, tandis que les IEDF sur l'électrode de puissance, sont pratiquement identiques ($\sim 210eV$).

Conclusion générale

La décharge plasma à couplage capacitive est très utilisée en industrie pour la fabrication des couches minces et dans le traitement de surfaces. Les techniques de procédés pour la fabrication des couches minces que l'on peut citer sont : le dépôt, la gravure et la pulvérisation. Quant au traitement de surfaces, il a pour conséquence de modifier l'aspect ou la fonction de la surface des matériaux afin de l'adapter à des conditions d'utilisation données ou à la préparer à un dépôt. Les procédés de traitement de surfaces peuvent aller de la stérilisation du matériel biomédical au nettoyage et activation d'une surface pour recevoir un dépôt d'un constituant particulier. Il est important de mentionner que ce type de procédé, à savoir une décharge plasma à couplage capacitive (CCP), est parmi les procédés les moins coûteux et les plus utilisés dans l'industrie. Toutefois, dans un premier temps, la décharge plasma à couplage capacitive ne permettait pas de privilégier le bombardement d'une électrode par rapport à l'autre excepté pour des électrodes métalliques où l'on imposait une tension continue. La proposition d'appliquer une double fréquence au plasma a donné naissance à l'effet d'asymétrie électrique qui a engendré une tension continue auto-polarisée au sein de la décharge. Cependant le contrôle total de l'énergie de bombardement et du flux ionique est resté une problématique jusqu'à l'introduction de l'angle de phase [8] qui a permis d'avoir un certain contrôle sur l'énergie de bombardement ionique. Notre objectif dans cette thèse a été de trouver un compromis qui pourrait nous permettre d'avoir un contrôle quasi-complet sur l'énergie de bombardement des ions sur les électrodes, cela a été possible en utilisant le couple de paramètres (C_B, θ) .

Ce travail a été consacré à l'étude de l'effet de la capacité de blocage (C_B) et de l'angle de phase (θ) entre la fréquence fondamentale 13,56MHz et sa première harmonique 27,12MHz sur une décharge plasma à couplage capacitive. La tension RF appliquée traverse une capacité de blocage (C_B) qui est placée dans un circuit qui relie l'électrode de puissance et le générateur à double fréquence.

Nos calculs et résultats montrent d'une part que la capacité de blocage (C_B) et l'angle de phase

Conclusion générale

(θ) ont un effet significatif sur la génération d'une tension d'auto-polarisation et sur le paramètre de symétrie (ε). i.e le rapport entre les maximums de chute de tensions formées dans les gaines de masse et de puissance. Et d'autre part, on a démontré que l'utilisation de la capacité de blocage (C_B) et de l'angle de phase (θ), en tant que couple de paramètres de commande, permet de contrôler quasi-indépendamment la distribution des énergies ioniques bombardant l'électrode de puissance et de masse, à travers la génération d'un potentiel d'auto-polarisation désiré. En d'autres termes, elles permettent à l'opérateur de choisir la chute de potentiel à l'intérieur de chaque gaine. Cela nous permet de contrôler l'énergie ionique bombardant l'une des électrodes sans affecter l'énergie des ions bombardant la seconde électrode. Cela pourrait faciliter la mise en place en pratique de procédés de pulvérisation et de dépôt avec un bon rendement sur le coût et sur la qualité des couches déposées, si on arrive à reproduire l'influence de la capacité de blocage à travers la boîte d'accord se trouvant reliée au réacteur plasma et utilisée pour adapter l'impédance du plasma. Nous comptons nous pencher sur cette problématique dans le futur proche.

Bibliographie

- [1] K Köhler, DE Horne, and JW Coburn. Frequency dependence of ion bombardment of grounded surfaces in rf argon glow discharges in a planar system. *Journal of Applied Physics*, 58(9) :3350–3355, 1985.
- [2] SANA Hariech. Elaboration et caractérisation des couches minces de sulfure de cadmium (cds) préparées par bain chimique (cbd). *Mémoire de Magistère de l'université Mentouri–Constantine*, 2009.
- [3] Saïd Agouram et al. *Caractérisation de couches minces d'oxynitrures de chrome produites par pulvérisation cathodique réactive en présence d'air : influence de la vapeur d'eau contenue dans du plasma/Influence of the water vapor concentration into the reactive plasma during the deposition of chromium oxynitrides layers on steel*. PhD thesis, FUNDP., 2003.
- [4] Vahid Vahedi and Maheswaran Surendra. A monte carlo collision model for the particle-in-cell method : applications to argon and oxygen discharges. *Computer Physics Communications*, 87(1) :179–198, 1995.
- [5] M Surendra, DB Graves, and IJ Morey. Electron heating in low-pressure rf glow discharges. *Applied physics letters*, 56(11) :1022–1024, 1990.
- [6] WH Cramer. Elastic and inelastic scattering of low-velocity ions : Ne⁺ in a, a⁺ in ne, and a⁺ in a. *The Journal of Chemical Physics*, 30(3) :641–642, 1959.
- [7] U Czarnetzki, J Schulze, E Schüngel, and Z Donkó. The electrical asymmetry effect in capacitively coupled radio-frequency discharges. *Plasma Sources Science and Technology*, 20(2) :024010, 2011.
- [8] Brian G Heil, Uwe Czarnetzki, Ralf Peter Brinkmann, and Thomas Mussenbrock. On the possibility of making a geometrically symmetric rf-ccp discharge electrically asymmetric. *Journal of Physics D : Applied Physics*, 41(16) :165202, 2008.

- [9] K.Oka and R.P.Howson. the control of the plasma in a d.c. planar magnetron. *proc.6thInt.Conf.IPAT.Brighton*, pages 158–163, 1987.
- [10] Michael A Lieberman and Alan J Lichtenberg. *Principles of plasma discharges and materials processing*. John Wiley & Sons, 2005.
- [11] H Randhawa. Review of plasma-assisted deposition processes. *Thin Solid Films*, 196(2) :329–349, 1991.
- [12] MA Lieberman, J Kim, JP Booth, P Chabert, JM Rax, and MM Turner. Semi technology symposium. *SEMICON Korea, Seoul, Korea*, 22 :31–37, 2003.
- [13] PC Boyle, AR Ellingboe, and MM Turner. Independent control of ion current and ion impact energy onto electrodes in dual frequency plasma devices. *Journal of Physics D : Applied Physics*, 37(5) :697, 2004.
- [14] Haruhiro H Goto, Hans-Dirk Löwe, and Tadahiro Ohmi. Dual excitation reactive ion etcher for low energy plasma processing. *Journal of Vacuum Science & Technology A : Vacuum, Surfaces, and Films*, 10(5) :3048–3054, 1992.
- [15] T Kitajima, Y Takeo, Z Lj Petrović, and T Makabe. Functional separation of biasing and sustaining voltages in two-frequency capacitively coupled plasma. *Applied Physics Letters*, 77(4) :489–491, 2000.
- [16] HB Profijt, SE Potts, MCM Van de Sanden, and WMM Kessels. Plasma-assisted atomic layer deposition : basics, opportunities, and challenges. *Journal of Vacuum Science & Technology A : Vacuum, Surfaces, and Films*, 29(5) :050801, 2011.
- [17] PC Boyle, AR Ellingboe, and MM Turner. Electrostatic modelling of dual frequency rf plasma discharges. *Plasma Sources Science and Technology*, 13(3) :493, 2004.
- [18] Jolanta E Klemberg-Sapieha, Jörg Oberste-Berghaus, Ludvik Martinu, Richard Blacker, Ian Stevenson, George Sadkhin, Dale Morton, Scott McEldowney, Robert Klinger, Phil J Martin, et al. Mechanical characteristics of optical coatings prepared by various techniques : a comparative study. *Applied optics*, 43(13) :2670–2679, 2004.
- [19] Z Donkó, J Schulze, BG Heil, and U Czarnetzki. Pic simulations of the separate control of ion flux and energy in ccrf discharges via the electrical asymmetry effect. *Journal of Physics D : Applied Physics*, 42(2) :025205, 2008.

- [20] Z Donkó, J Schulze, U Czarnetzki, and D Luggenhölscher. Self-excited nonlinear plasma series resonance oscillations in geometrically symmetric capacitively coupled radio frequency discharges. *Applied Physics Letters*, 94(13) :131501, 2009.
- [21] Trevor Lafleur, Pascal Chabert, MM Turner, and Jean-Paul Booth. Theory for the self-bias formation in capacitively coupled plasmas excited by arbitrary waveforms. *Plasma Sources Science and Technology*, 22(6) :065013, 2013.
- [22] Yu P Raizer and MN Shneider. Near-electrode sheath dynamics, current anharmonicity and battery effect in asymmetrical, low-pressure radio frequency discharges. *Plasma Sources Science and Technology*, 1(2) :102, 1992.
- [23] M.Walker, F.Meerman, J.Schneider, K.Bazzoun, J.Feichtinger, A.Schultz, J.Krüger, and U.Schumader. *Surf. and Coatings Technol*, 200(947), Oct 2005.
- [24] D.Hegemann, H.Brunner, C.Oehr, and Nucl. *Instr. Meth. Phys. Res. B*, 208(281), 2003.
- [25] S.Vallon, A.Hofrichter, B.Drevillon, J.E.Kleniberg-Sapicha, L.Martinu, and F.Poncin-Epaillard. *Thin Solid Films*, 68 :290–291, 1996.
- [26] J.Robertson. Diamond-like amorphous carbon. *Mat. Sci. Eng. R*, 271(129), 2002.
- [27] S.Loghothetidis and Diam. *Relat. Mat*, 12(141), 2003.
- [28] U.Vohrer, H.Müller, and C.Oehr. *Surf. Coat. Technol*, 98(1128), 1998.
- [29] M.Heintel, M.Neiger, and R.Scholl. *Contrib. Plasma. Phys*, 38 :419–433, 1998.
- [30] M.Moisan, J.Barbeau, and S.Moreau et al. *Int. J. Pharm*, 226(1), 2001.
- [31] R.Ganter, Th.Callegari, L.C.Pitchford, and J.P.Boeuf. *Appl. Surf. Sc*, 192(299), 2002.
- [32] J.K.Nelson and Y.Hu. *J. Phys. D : Appl. Phys*, 38(213), 2005.
- [33] R.Agostino, F.Camarossa, F.Fracassi, E.Desimani, L.Sabbatini, P.G.Zambonin, and G.Capariccio. *Thin Solid Films*, 143(163), 1986.
- [34] G.Bonizzoni and E.Vassalo. *Vacuum*, 64(327), 2002.
- [35] M.S.Sheu, A.S.Hoffman, and B.D.Ratner et al. Plasma surface modification of polymers. édité par M. Strobel, C. Lyons et K. L. Mittal (VSP, 1994).
- [36] Isabelle Savin de Larclause. *Dépôt organosilicic par plasma froid basse pression et pression atmosphérique sur substrats microstructurés*. PhD thesis, 2008.
- [37] E.G.Gerstner, P.B.Lukins, and D.R. Mc Kenzie. *Phys. Rev*, 54(20) :14504, 1996.

- [38] Djilali Benyoucef. *Modélisation particulière et multidimensionnelle des décharges hors équilibre à basse pression excitées par champs électromagnétiques*. PhD thesis, Université de Toulouse, Université Toulouse III-Paul Sabatier, 2011.
- [39] Maria Calafat. *Formation de poudres dans des décharges d'acétylène en plasma micro-ondes multipolaire excité à la résonance cyclotronique électronique répartie. Etude des nanocomposites carbone-carbone et leurs applications*. PhD thesis, Université de Toulouse, Université Toulouse III-Paul Sabatier, 2008.
- [40] Laurent Thérèse. *Plasmas radiofréquence pour l'analyse des matériaux : étude expérimentale, analytique et numérique*. PhD thesis, Toulouse 3, 2005.
- [41] Pascal Chabert and Nicholas Braithwaite. *Physics of radio-frequency plasmas*. Cambridge University Press, 2011.
- [42] Brian N Chapman. *Glow discharge processes*. Wiley, 1980.
- [43] Sébastien Dine. *Effet de la fréquence dans les décharges VHF sur les caractéristiques des plasmas utilisés pour le dépôt de silicium microcristallin*. PhD thesis, Université Paris Sud-Paris XI, 2006.
- [44] A.Darbida, A.Saker, A.Billard, and J.Von Stebut. Optimisations of the surface mechanical strength of aisi 316 l pvd nitrogen–doped coating on aisi 316 l substrates. *Surf. Coat. Technol.*, 60(434), 1993.
- [45] J.M.Soro, L.Lelait, J.C.Van Duysen, G. Zacharie, and J.Von Stebut. influence of substrate roughness and lateral spacing on morphology and brittleness of different cr-pvd coating. *Surface Coatings Technology.*, 98(1490), 1998.
- [46] JJ Bessot. Dépôts par pulvérisation cathodique, techniques de l'ingénieur, 1985. *M*, 1 :657.
- [47] G RENO. Dépôt de films nanométriques en pulvérisation cathodique radiofréquence, techniques de l'ingénieur, 2006. *M*, 1 :657.
- [48] Oscar Buneman. Dissipation of currents in ionized media. *Physical Review*, 115(3) :503, 1959.
- [49] John Dawson. One-dimensional plasma model. *Physics of Fluids (1958-1988)*, 5(4) :445–459, 1962.
- [50] Charles K Birdsall and A Bruce Langdon. *Plasma physics via computer simulation*. CRC Press, 2004.

- [51] Roger W Hockney and James W Eastwood. *Computer simulation using particles*. CRC Press, 1988.
- [52] Charles K Birdsall. Particle-in-cell charged-particle simulations, plus monte carlo collisions with neutral atoms, pic-mcc. *Plasma Science, IEEE Transactions on*, 19(2) :65–85, 1991.
- [53] HR Skullerud. The stochastic computer simulation of ion motion in a gas subjected to a constant electric field. *Journal of Physics D : Applied Physics*, 1(11) :1567, 1968.
- [54] Vahid Vahedi, CK Birdsall, MA Lieberman, G DiPeso, and TD Rognlien. Verification of frequency scaling laws for capacitive radio-frequency discharges using two-dimensional simulations*. *Physics of Fluids B : Plasma Physics (1989-1993)*, 5(7) :2719–2729, 1993.
- [55] M Surendra, DB Graves, and GM Jellum. Self-consistent model of a direct-current glow discharge : Treatment of fast electrons. *Physical Review A*, 41(2) :1112, 1990.
- [56] Earl Wadsworth McDaniel. *Atomic collisions : electron and photon projectiles*, volume 1. Wiley-Interscience, 1989.
- [57] Christian Böhm and Jérôme Perrin. Retarding-field analyzer for measurements of ion energy distributions and secondary electron emission coefficients in low-pressure radio frequency discharges. *Review of scientific instruments*, 64(1) :31–44, 1993.
- [58] AV Phelps and Z Lj Petrovic. Cold-cathode discharges and breakdown in argon : surface and gas phase production of secondary electrons. *Plasma Sources Science and Technology*, 8(3) :R21, 1999.
- [59] E Jeckelmann. H. benthien in computational many particle physics, h. fehske, r. schneider and a. weiße. *Lecture Notes in Physics*, 739 :621.
- [60] Arslane Boudghene Stambouli, Rafik Benallal, Nourredine Oudini, Sidi Mohamed Mesli, and Rabah Tadjine. Control of dual frequency capacitively coupled plasma via blocking capacitor and phase angle. *The European Physical Journal Applied Physics*, 80(1) :10802, 2017.
- [61] Julian Schulze, E Schüngel, Z Donkó, and U Czarnetzki. Charge dynamics in capacitively coupled radio frequency discharges. *Journal of Physics D : Applied Physics*, 43(22) :225201, 2010.
- [62] Julian Schulze, Edmund Schüngel, Uwe Czarnetzki, Markus Gebhardt, Ralf Peter Brinkmann, and Thomas Mussenbrock. Making a geometrically asymmetric capacitive rf discharge electrically symmetric. *Applied Physics Letters*, 98(3) :031501, 2011.

- [63] J Schulze, BG Heil, D Luggenhölscher, RP Brinkmann, and Uwe Czarnetzki. Stochastic heating in asymmetric capacitively coupled rf discharges. *Journal of Physics D : Applied Physics*, 41(19) :195212, 2008.
- [64] U Czarnetzki, T Mussenbrock, and RP Brinkmann. Self-excitation of the plasma series resonance in radio-frequency discharges : An analytical description. *Physics of Plasmas (1994-present)*, 13(12) :123503, 2006.
- [65] John Paul Verboncoeur, Maria Virginia Alves, Vahid Vahedi, and Charles Kennedy Birdsall. Simultaneous potential and circuit solution for 1d bounded plasma particle simulation codes. *Journal of Computational Physics*, 104(2) :321–328, 1993.
- [66] Vahid Vahedi and G DiPeso. Simultaneous potential and circuit solution for two-dimensional bounded plasma simulation codes. *Journal of Computational Physics*, 131(1) :149–163, 1997.

Control of Dual Frequency Capacitively Coupled Plasma via blocking capacitor and phase angle

Arslane Boudghene Stambouli¹, Rafik Benallal^{2,*}, Nourredine Oudini³, Sidi Mohamed Mesli², and Rabah Tadjine³

¹ Faculté des Sciences, Université Mouloud Mammeri, 15000 Tizi Ouzou, Algeria^a

² École Supérieure des Sciences Appliquées, 13000 Tlemcen, Algeria^a

³ Laboratoire des plasmas de décharges, Centre de Développement des Technologies Avancées, cité du 20 Aout BP17 Baba Hassen, 16081 Algiers, Algeria

Received: 18 May 2017 / Received in final form: 30 August 2017 / Accepted: 1 September 2017

Abstract. This work investigates the effects of a blocking capacitor C_B and a phase angle θ on Dual Frequency Capacitively Coupled Plasma (DF-CCP). This investigation is conducted by a Particle-In-Cell with Monte Carlo Collision (PIC-MCC) model. The simulation results are corroborated by a semi-analytical model. Our simulations show that the couple of parameters (C_B, θ) allows the control of the DC self bias, η , as well as the potential drop within the sheaths that form in front of the powered and grounded electrodes. We show, also, that it is possible to use the parameters couple (C_B, θ) such that to control the potential drop within the sheath in front of the powered electrode, ϕ_{sp} , independently of the potential drop within sheath in front of the grounded electrode, ϕ_{sg} , and vice versa. This latter ability allows us to control, quasi independently, the ion energy distribution bombarding each electrode.

1 Introduction

RF discharges are involved in many industrial surface processing applications [1]. The process quality might require the control of several plasma parameters. The challenge in plasma deposition of thin films, for example, is to achieve a high deposition rate with a good uniformity in layer thickness [2]. One of the advantages of Dual Frequency Capacitively Coupled Plasma (DF-CCP) is consist in the possibility of adjusting of ionic kinetic energy during the process [3–6]. One of the worry in Physical Vapor Deposition (PVD) of thin films is to ensure a high ion energy on the target electrode such that to insure a high sputtering rate [7] while limiting the ion energy on the substrate holder to avoid the damage of deposited thin film [8]. In some applications the ion energy bombarding the deposited thin film is chosen carefully such that to control the micro-structure of the deposited thin film, e.g. Ion Assisted Deposition (IAD) [9]. To achieve this, one can provide an asymmetry effect to the discharge in order to control the induced DC self bias [10]. In this work we propose to control, independently, ion energy on both target electrode and substrate holder through a DF-CCP discharge.

Electrical asymmetric effect (EAE), which consists in the superposition of two even harmonics frequency, e.g. 13.56 and 27.12 MHz, can also lead to an asymmetry on plasma and ion flux characteristics [11–13] even in geometrically symmetric reactor. This latter technique, DF-CCP, is attractive since it allows the user to control the reactor asymmetry via an external electrical circuit and without changing its geometrical configuration. Heil et al. demonstrate that the use of EAE allows the control of self-bias electrically by driving one electrode with fundamental frequency f in addition to its even harmonic $2f$ [14]. Raizer and Shneider [15] demonstrate that the blocking capacitor has a non-marginal effect on the DC self-bias for a geometrically asymmetric CCP discharge. However, the effect of blocking capacitor on the self-bias generated via the EAE in a DF-CCP discharge has not yet been studied.

In this work, the effects of the blocking capacitor C_B and phase angle θ on DF-CCP discharge, i.e. 13.56 MHz plus 27.12 MHz, are investigated by the use of a two-dimensional Particle-In-Cell with Monte Carlo Collision (PIC-MCC) simulations. Our results show, from one side, that the blocking capacitor C_B and phase angle θ have a significant effect on the self-bias voltage and on the symmetry parameter ε , i.e. ratio between the maximum potential drops across the sheaths of the grounded and powered electrodes. From the other side, we demonstrate that the use of blocking capacitor C_B and phase angle θ as control parameters allows us to control, quasi-independently, the ion energy distribution bombarding the powered and grounded electrodes.

^a Also at Unité de Recherche des Matériaux et Énergies Renouvelables, Université Abou-Bekr Belkaid, 13000 Tlemcen, Algeria.

*e-mail: rafik.benallal@gmail.com

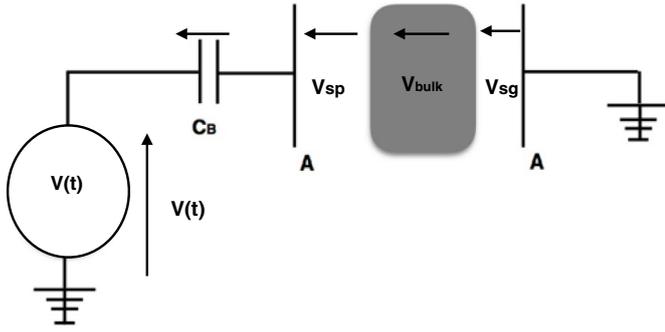


Fig. 1. Schematic of the simulation of the parallel-plate DF-CCP discharge.

2 Physical model

In this section, we describe briefly the theory model introduced by Heil et al. [14] considering the blocking capacitor effect via its potential V_c . This model highlights the relationship between self bias, η , and potential drop within the sheaths that form in front of the powered and grounded electrodes, ϕ_{sp} and ϕ_{sg} . The driving voltage waveform on the powered electrode used in this work is given by equation (1), where $f=13.56$ MHz is the fundamental frequency, V_L , V_H are the amplitudes associated to the frequencies f , low frequency, and $2f$, high frequency and θ the phase angle between the two waveforms.

$$V(t) = V_L \cdot \cos(2\pi ft + \theta) + V_H \cdot \cos(4\pi ft). \quad (1)$$

The electric circuit is composed of an ideal voltage source placed in series with a blocking capacitor. To insure plasma quasi-neutrality, sheaths form in front of the powered and grounded electrodes. These sheaths screen the electric field within the plasma bulk and limit significantly the potential drop within the said region. As consequence, the injected voltage (see Eq. (1)) divides on the blocking capacitor, the sheaths and the plasma bulk as illustrated in Figure 1. Then the voltage balance, that describes CCP-RF discharge, normalized by $V_0 = V_L + V_H$ is:

$$\bar{V}(t) = \bar{V}_c(t) + \bar{V}_{sp}(t) + \bar{V}_{sg}(t). \quad (2)$$

Note that equation (2), implicitly, assumes that the potential drop within the plasma bulk, i.e. V_{Bulk} , has a negligible quantity relatively to the different voltages involved in this equation. This assumption is realistic in our case, i.e. in low pressure electropositive discharge, and have been used in several published works [14,16]. However, we emphasize that the values of V_{Bulk} might be significant in high pressure discharges or in electronegative plasmas [17].

$\bar{V}_{sp}(t)$ and $\bar{V}_{sg}(t)$ are the voltage drop across the sheath adjacent to the powered and grounded electrode, respectively, and $\bar{V}_c(t)$ the normalized voltage drop across the blocking capacitor of capacitance C_B . We highlight that, from one side, the matching networks is not taken into account in our simulation. From the other side,

the blocking capacitor represented in Figure 1 is external to the matching-boxes used to adapt the plasma impedance and external to the circuit used to insure the superimposition of the voltage waveforms with the frequencies 13.56 MHz and 27.12 MHz. Thus, the decomposition of the voltage $V(t)$ on $V_H(t)$ and $V_L(t)$ components corresponds to voltage decomposition upstream the blocking capacitor, represented in Figure 1, and not to what is initially generated by the generators. This means that the voltages delivered by the generators, i.e. $V_H(t)$ and $V_L(t)$, might be different from the $V_H(t)$ and $V_L(t)$, respectively. In view of the impedance adaptation capability of the matching networks, the capacitance value of the blocking capacitor should be chosen, reasonably, with respect with the plasma impedance and the matching networks. We highlight that the capacitance range studied in this work, i.e. from 50 pF to 500 pF, corresponds to the blocking capacitor used in literature [15,18]. Note that the effects inherent to the presence of the matching-boxes are beyond the scope of the present work.

At two distinct times within the RF period, i.e. maximum applied voltage, ϕ_{m1} , and minimum applied voltage, ϕ_{m2} , one sheath voltage is maximum and the other sheath voltage is minimum:

$$\phi_{m1} - \bar{V}_c(t) = \hat{\phi}_{sg}, \quad (3)$$

$$\phi_{m2} - \bar{V}_c(t) = \hat{\phi}_{sp}. \quad (4)$$

Here, we have not considered the floating potentials which are small compared with the applied voltage, then:

$$V_c(t) = \frac{\phi_{m1} + \varepsilon \phi_{m2}}{1 + \varepsilon} \quad (5)$$

where the symmetry parameter, ε , is given by the normalized sheath voltage ratio:

$$\varepsilon = \left| \frac{\hat{\phi}_{sg}}{\hat{\phi}_{sp}} \right|. \quad (6)$$

Here $\hat{\phi}_{sg}$ and $\hat{\phi}_{sp}$ are the maximum sheath voltages and they obtained by the simulation and used in this model.

$$\bar{V}_c(t) = -\alpha q(t) - \bar{\eta} \quad (7)$$

where $\bar{\eta}$ is introduced as the normalized DC self bias and $\alpha = 0.613 (\varepsilon_0 A / (C_B \cdot s_m))$, here, ε_0 is the dielectric constant, A the electrode area and s_m the maximum sheath length. While $q(t)$ is the normalized positive space charge in the sheath adjacent to the powered electrode who changes from a minimum value to a maximum value as function of time within one period of the fundamental applied frequency, i.e. $0 \lesssim q(t) \lesssim 1$, and is defined as [14]:

$$q(t) = \frac{-\varepsilon q_t + \sqrt{\varepsilon q_t^2 - (1 - \varepsilon)(\bar{V}(t) - \bar{V}_c(t))}}{1 - \varepsilon}, \quad (8)$$

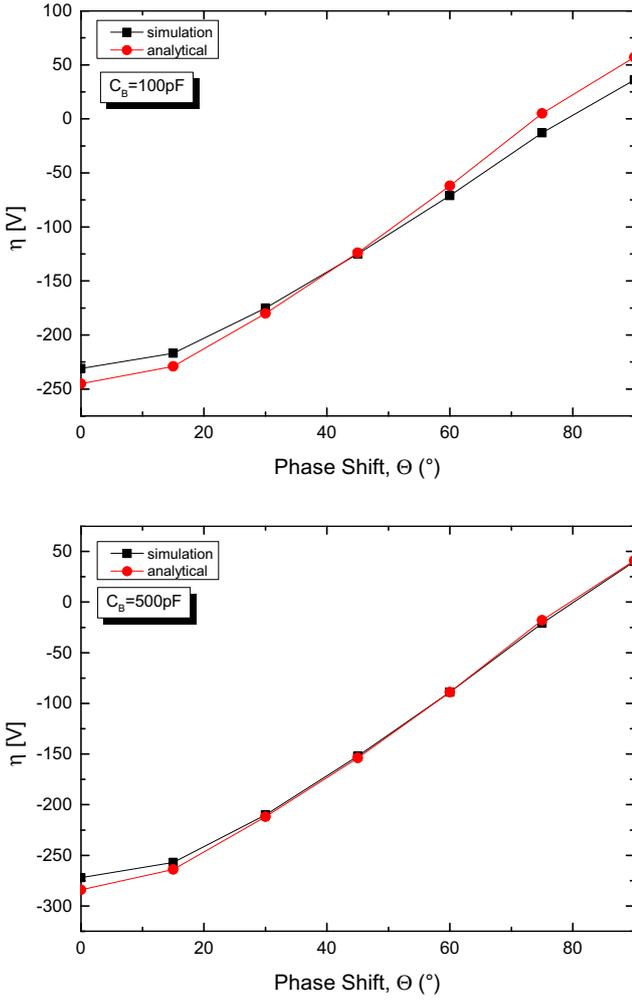


Fig. 2. Comparison of η as a function of θ resulting from the PIC-MCC simulations and the analytical model for $C_B = 100$ pF and $C_B = 500$ pF, considering equal amplitudes $V_L = V_H = 250$ V and $V_0 = V_L + V_H = 500$ V.

where q_t is the normalized total uncompensated charge in the discharge is given in the following form:

$$q_t = \sqrt{\frac{\phi_{m1} - \phi_{m2}}{1 + \varepsilon}}. \quad (9)$$

It is pointed out that the applied voltage $V(t)$ changes with the angle phase θ and the voltage drop across the blocking capacitor $V_c(t)$ with its capacitance C_B and consequently these parameters, i.e. (C_B, θ) will play an important role on the DC self bias value, η , as will be presented in Section 4.

3 Particle-in-cell simulation

The schematic of simulated DF-CCP discharge is shown in Figure 1. The plasma is generated, in 20 mTorr pure argon gas at ambient temperature, between two identical parallel electrodes. The left electrode, located at $x = 0$ cm, is powered and the right electrode, located at $x = 3$ cm, is grounded. The area of these electrodes is 10 cm^2 .

Table 1. The simulation parameters performed using PIC-MCC code (XPDP2).

P (mTorr)	T_g (eV)	dt (s)	x (m)	y (m)	n_{cx}	n_{cy}
20	0.03	3.6×10^{-11}	0.03	0.1	180	600

The behavior of the plasma is simulated by a bounded electrostatic PIC-MCC code “XPDP2” developed by Verboncoeur [19] and Vahedi [20]. We emphasize that “XPDP2” simulates, through a Monte Carlo routine, the collisional processes characterizing an argon discharge, i.e. electronic excitation, ionization and elastic scattering for electron-atom collisions and charge exchange and isotropic scattering for ion-atom collisions. In order to resolve the radio-frequency cycle of both frequencies, the simulation time step is 1000 times smaller than the period characterizing the injected voltage, i.e. $dt = 3.60 \times 10^{-11}$ s. We emphasize that this time step is ~ 100 times smaller the inverse of plasma frequency. The simulation domain is discretized over 180×600 cells. Thus, the segment defined by two successive nodes is smaller than the $0.8\lambda_D$. The macro-particle statistical weight is chosen such as to obtain, within the plasma bulk, more than 80 macro-particles per cell. Gas density is assumed uniform and is fixed according to the operating pressure and an ambient temperature. While charged particle densities are calculated by integrating ion and electron trajectories. These trajectories are simulated, self-consistently, through a PIC method. Ions and electrons are followed within the simulation domain from the instant where they are created, by ionization, until they reach any border of the simulation domain. These borders represent electrodes or vacuum chamber walls. Note that we assume here a full neutralization of charged particle flux on the surface of the electrodes or vacuum chamber walls. The contribution of the electron and ion fluxes that reach the powered electrode to the electric charge of the blocking capacitor is taken into account. Plasma potential is calculated by numerically solving Poisson equation. We highlight that we use Dirichlet condition to solve this equation. The boundary corresponding to powered electrode is biased with an AC voltage, i.e. $V(t) - V_c(t)$, while other boundaries are grounded. The potential drops between the bounds of the blocking capacitor, i.e. $V_c(t)$, is calculated on the basis of the electric charge stored within the blocking capacitor and its capacitance. Electrode ion bombardment induces an emission of secondary electron. To simulate this flux of electrons, we consider a secondary electron emission coefficient of $\gamma = 0.2$. However, we highlight that the value of γ plays a marginal role in the simulated discharge, since the power delivered to the plasma is mainly dissipated by Ohmic and stochastic heating. These latter heating mechanisms are self-consistently simulated in PIC-MCC method.

The simulation conditions, such as voltage amplitude, pressure, blocking capacitor and main harmonic phase angle, are considered as input data. All results presented in this paper are averaged over one RF period after the simulation reaches the steady state ($\sim 80 \mu\text{s}$).

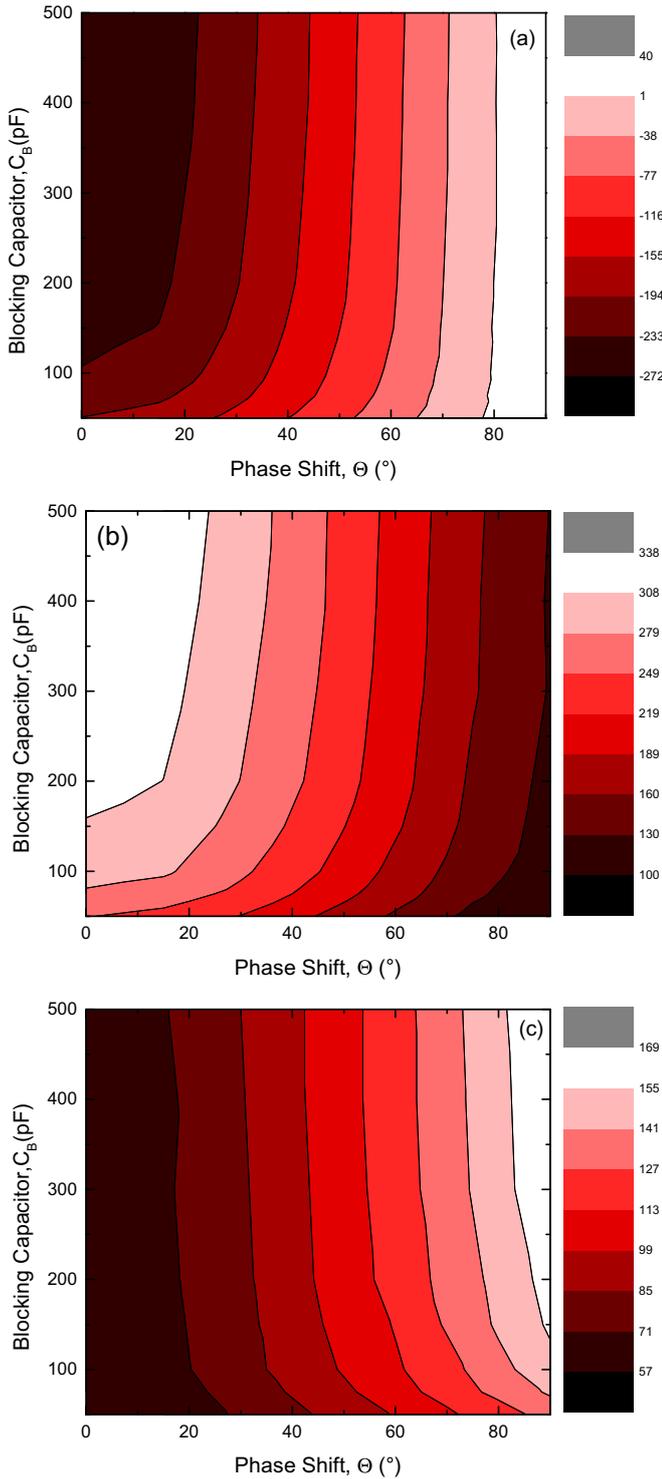


Fig. 3. Distribution (in V) of (a) self bias η , (b) potential drop with the sheath in front of the powered electrode ϕ_{sp} and (c) potential drop with the sheath in front of the grounded electrode ϕ_{sg} as function of blocking capacitor C_B and phase shift θ for condition summarized in Table 1.

Table 1 summarizes our parameters of simulation, where P , T_g are the background neutral gas pressure and temperature, dt the time step, x electrodes spacing, y distance along Y -axis, n_{cx} , n_{cy} the number of spatial cells along X -axis and Y -axis.

4 Results

The generation of a DC self-bias is a characteristic feature of asymmetric discharges regardless whether this asymmetry is induced geometrically [1,21–23], electrically [11,14,16], or both [17]. In this work, the EAE is investigated in a coupled capacitive plasma with dual-frequency voltage waveform containing the fundamental frequency, i.e. 13.56 MHz, and its first harmonic, i.e. 27.12 MHz, separated by a phase angle θ . We focus on the behavior of this discharge when a blocking capacitor is inserted between the RF generator and the powered electrode. In Figure 2, the PIC-MCC simulations are compared with semi-analytical method, where self bias can be found by taking the derivative of the equation (1) normalized and setting the result to zero:

$$\sin(2\pi ft + \theta) + 2 \sin(4\pi ft) = 0. \quad (10)$$

It can be shown that equation (10) has the following approximate solutions:

$$\begin{cases} \phi_{m1} = \frac{1}{2}(1 + \cos \theta), & 0 \leq \theta \leq \pi/2 \\ \phi_{m2} = \frac{1}{2}(1 + \sin \theta), & 0 \leq \theta \leq \pi/2 \end{cases}. \quad (11)$$

Calculation of the absolute extremes of the applied voltage waveform, ϕ_{m1} and ϕ_{m2} , is described in detail by Heil et al. [14]. The comparison of the self bias, η , between simulation, $|\phi_{sg}| - |\phi_{sp}|$ obtained from distribution of potential averaged over one RF period, and analytical method calculated by equations (5) and (7), where $\eta = -V_c(t) + \alpha q(t)V_0$, shows a good agreement. For example, the results presented in Figure 2 are performed for blocking capacitor $C_B = 100$ and 500 pF.

We draw the reader's attention to the fact that the trends of DC self-bias illustrated in Figure 2 does not show the behavior described by Donko et al. [10]. This can be understood as follow. Donko et al. used a one dimensional (1D3V) PIC simulation to investigate, among other, the behavior of DC self-bias relatively to the phase angle. In such model the diameter of the electrodes is assumed infinitely larger than the inter-electrode space. In other words, the vacuum chamber wall area in contact with the plasma is assumed negligible in comparison to the electrode area. Thus and from geometrical point of view, such discharge is always symmetric. While, in our simulation we use a two dimensional (2D3V) PIC simulation. In the studied configuration we consider electrodes with a diameter of 10 cm, while the simulation domain is 10×3 cm². Thus in our case, and generally in plasma reactors, the area of the powered electrode is smaller than the area of grounded surfaces, i.e. grounded electrode and vacuum chamber walls. Thus the studied configuration is geometrically asymmetric.

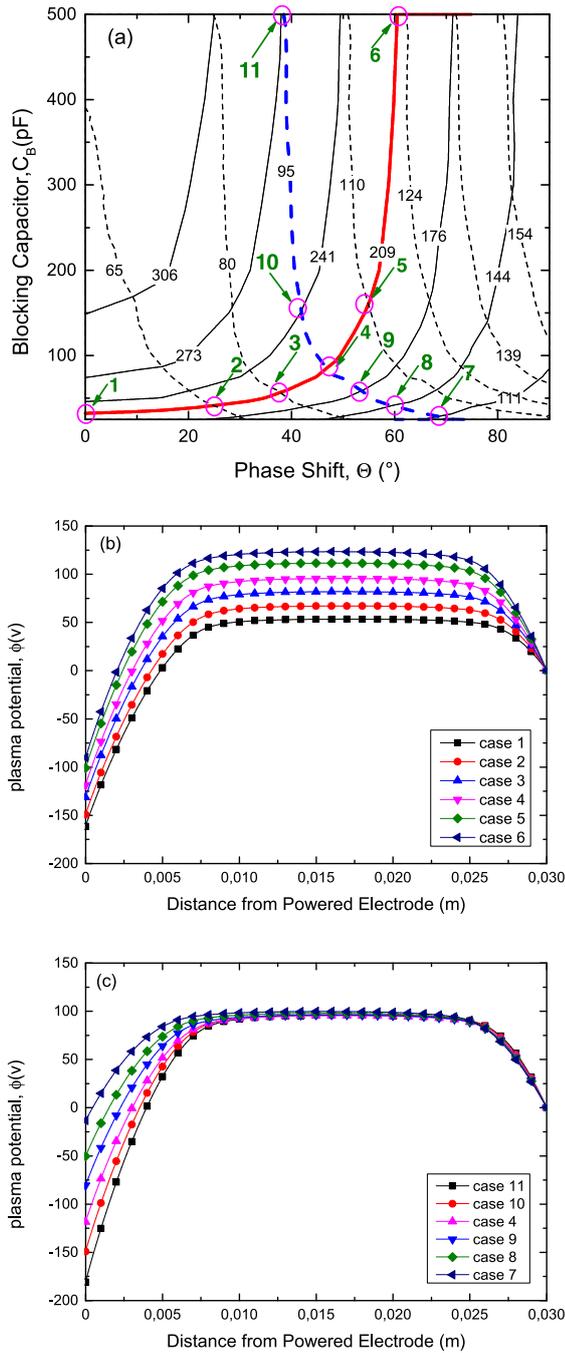


Fig. 4. (a) Distribution of potential drop within the sheath in front of powered electrode (solid lines) and grounded one (dashed lines) as function of blocking capacitor C_B and phase shift θ for condition summarized in Table 1. The circle symbols 1–11 represent 11 simulated cases summarized in Table 2. (b) Averaged potential profile calculated for conditions summarized in Table 1 and for cases 1–6 (see Table 2). (c) Averaged potential profile calculated for conditions summarized in Table 1 and for cases 7–11 and 4 (see Table 2).

Figure 3, panels a–c, shows the distributions of DC self bias η , potential drop within the sheaths in front of the powered and grounded electrodes ϕ_{sp} and ϕ_{sg} , respectively, as function of blocking capacitor C_B and the phase shift θ

Table 2. The control parameters used in different cases of simulations.

Case	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11
θ ($^\circ$)	0	24	37	46	55	60	70	60	53	42	38
C_B (pF)	32	41	56	85	168	500	30	41	53	161	500

values for simulation conditions summarized in Table 1. The panels a–c shows that both C_B and θ control the η , ϕ_{sp} and ϕ_{sg} values. However, what is interesting to emphasize here is that for the same value of η it is possible to set different value of ϕ_{sp} and ϕ_{sg} . For example for $\eta = \phi_{sp} - \phi_{sg} = -150$ V, the user might control ϕ_{sp} from ~ 210 V to ~ 270 V and ϕ_{sg} from ~ 70 V to ~ 100 V. Another interesting insight is the possibility to choose C_B and θ as a couple of control parameters such that to control independently the potential drop within each sheaths and the ion energy bombarding each electrode.

Figure 4a shows the superposition of potential drop within the sheaths in front of the grounded (dashed lines) and powered (solid lines) electrodes as function of C_B and θ for condition summarized in Table 1. It is shown that the control levers C_B and θ allow the operator to choose quasi-independently the potential drop within each sheath. For example, the operator might vary C_B and θ such that to maintain ϕ_{sp} constant while varying ϕ_{sg} up to $\sim 50\%$ of its maximum possible value and vice versa. This latter, allows the operator to control the energy of ions bombarding one electrode without affecting the energy of ions bombarding the second electrode.

In order to highlight this effect we simulate the discharge with eleven cases of (C_B, θ) (see the magenta circles illustrated in Fig. 4a) chosen along the thick red solid and blue dashed lines. These simulated cases aim to keep ϕ_{sp} constant, ~ 210 V and to vary ϕ_{sg} in the range [~ 50 V, ~ 120 V] for six cases (see the blue dashed line). Also, six of the simulated cases aim to keep ϕ_{sg} constant, ~ 100 V, while varying ϕ_{sp} in the range [~ 110 V, ~ 270 V] (see the red solid line). Figure 4b and c shows the time averaged plasma potential profile calculated at along a line perpendicular to the electrodes and located at the center of the discharge for condition summarized in Table 1. For instance, in Figure 4b we set up the potential with the sheath in front of the powered electrode to $\phi_{sp} \sim 210$ V and we vary the potential drop within the grounded electrode ϕ_{sg} from ~ 50 V to ~ 120 V. While in Figure 4c we fix $\phi_{sg} \sim 100$ V and we vary ϕ_{sp} from ~ 110 V to ~ 270 V.

Figure 5a shows Ion Energy Distribution Function (IEDF) at grounded electrodes for different cases summarized in Figure 4a. For these cases, the control parameters C_B and θ are set such as to fix the averaged value of potential drop within the sheath in front of the grounded electrode to ~ 100 V. As expected, the obtained IEDF is centered at ~ 100 eV for all simulated cases. However, the shape of the IEDF might vary slightly due to changes in the temporal evolution of sheath characteristics, e.g. potential drop, current at sheath edge, width, etc. Figure 5b shows the IEDF at powered electrodes for

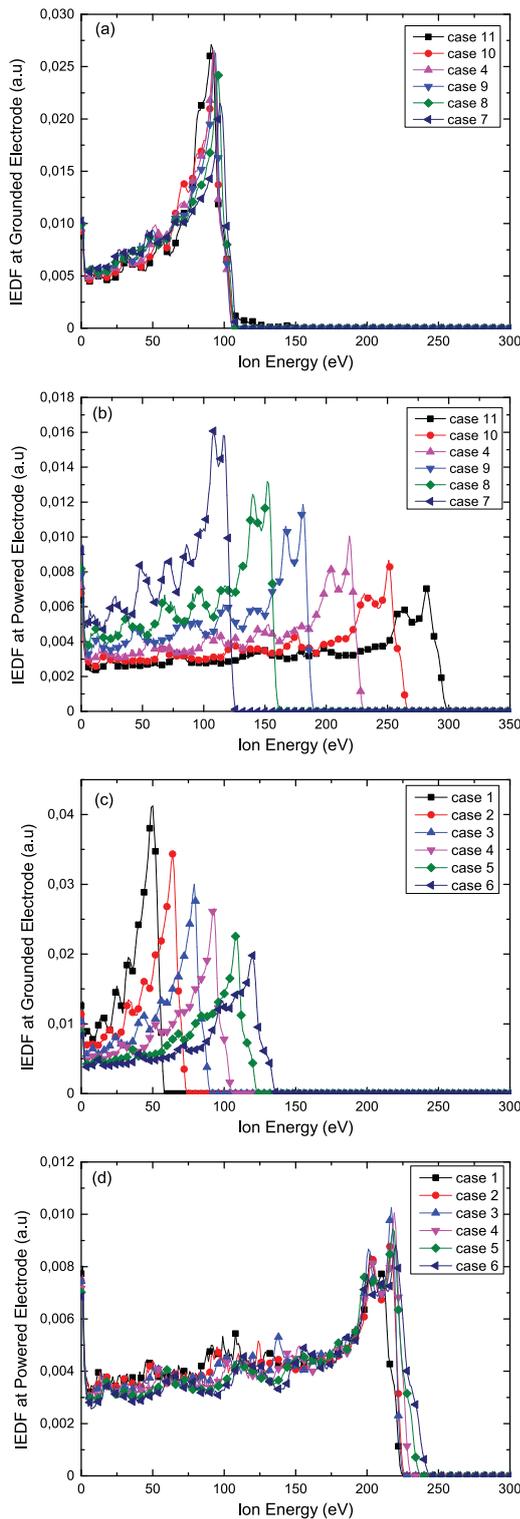


Fig. 5. Time averaged Ion Energy Distribution Function at grounded (IEDF) and powered electrodes for cases summarized in Figure 3a. (a) and (c) At grounded electrode. (b) and (d) At powered electrode.

different cases summarized in Figure 4a. For example, the cases 8, 4 and 11, corresponds to a potential drop within the sheath in front of the powered electrode of ~ 140 V, ~ 210 V and ~ 270 V, respectively. Thus, the IEDF at this

electrode is centered at ~ 140 eV, ~ 210 eV and ~ 270 eV respectively for the cases 8, 4 and 11. Figure 5c and d shows IEDF respectively at grounded and powered electrodes for cases 1 to 6 summarized in Figure 4b. For these cases, the averaged value potential drop within the sheaths is fixed to 210 V in front of the powered electrode and ~ 60 V, ~ 90 V and ~ 120 V respectively for cases 2, 4 and 6 in front of the grounded one. Thus the IEDF at grounded electrode is centered at ~ 60 eV, ~ 90 eV and ~ 120 eV respectively for cases 2, 4 and 6 and kept almost unchanged at the powered electrode.

5 Conclusions

This paper is devoted to study the effects of a blocking capacitor C_B and a phase angle θ , between the fundamental frequency 13.56 MHz and its first harmonic 27.12 MHz, on coupled capacitive plasma discharge. RF voltage is driven through a blocking capacitor C_B which is placed in the circuit between the powered electrode and the dual frequency generator.

This work demonstrates that the couple (C_B, θ) controls the DC self bias, η , the potential drop within the sheaths in front of powered grounded electrodes, respectively ϕ_{sp} and ϕ_{sg} . It is shown that the control parameters C_B and θ allow the operator to choose quasi-independently the potential drop within each sheath. This allows us to control the energy of ions bombarding one electrode without affecting the energy of ions bombarding the second electrode.

This research was supported in part by “Unité de Recherche des Matériaux et Énergies Renouvelables” (URMER) and “Centre de Développement des Technologies Avancées” (CDTA) under MASSINISSA project.

Authors would like to thanks Trevor Lafleur for a number of fruitful discussions.

References

1. M.A. Lieberman, A.J. Lichtenberg, Principles of plasma discharges and materials processing (Wiley, New York, 2005), 2nd ed.
2. H. Randhawa, Thin Solid Films **196**, 329 (1991)
3. M.A. Lieberman, J. Kim, J.P. Booth, J.M. Rax, M.M. Turner, SEMICON Korea Etching Symposium (2003), p. 23
4. P.C. Boyle, A.R. Ellingboe, M.M. Turner, J. Phys. D: Appl. Phys. **37**, 697 (2004)
5. H.H. Goto, H.D. Lowe, T. Ohmi, J. Vac. Sci. Technol. A **10**, 3048 (1992)
6. T. Kitajima, Y. Takeo, Z.Lj. Petrovic, T. Makabe, Appl. Phys. Lett. **77**, 489 (2000)
7. H.B. Profijt et al., J. Vac. Sci. Technol. A **29**, 050801 (2011)
8. P.C. Boyle, A.R. Ellingboe, M.M. Turner, Plasma Sources Sci. Technol. **3**, 493 (2004)
9. J.E. Klemberg-Sapieha et al., Appl. Opt. **43**, 2670 (2004)
10. Z. Donkó, J. Schulze, B.G. Heil, U. Czarnetzki, J. Phys. D: Appl. Phys. **42**, 025205 (2009)
11. Z. Donkó, J. Schulze, U. Czarnetzki, D. Luggenhölscher, Appl. Phys. Lett. **94**, 131501 (2009)
12. U. Czarnetzki, J. Schulze, E. Schüngel, Z. Donkó, Plasma Sources Sci. Technol. **20**, 024010 (2011)

13. T. Lafleur et al., Plasma Sources Sci. Technol. **22**, 5013 (2013)
14. B.G. Heil, U. Czarnetski, R.P. Brinkmann, T. Mussenbrock, J. Phys. D: Appl. Phys. **41**, 165202 (2008)
15. Yu.P. Raizer, M.N. Shneider, Plasma Sources Sci. Technol. **1**, 102 (1992)
16. J. Schulze, E. Schüngel, Z. Donkó, U. Czarnetski, J. Phys. D: Appl. Phys. **43**, 225201 (2010)
17. J. Schulze et al., Appl. Phys. Lett. **98**, 031501 (2011)
18. W. Jiang et al., Plasma Sources Sci. Technol. **20**, 035013 (2011)
19. J.P. Verboncoeur, M.V. Alves, V. Vahedi, C.K. Birdsall, J. Comput. Phys. **104**, 321 (1993)
20. V. Vahedi, G. DiPeso, J. Comput. Phys. **131**, 149 (1997)
21. I.V. Schweigert et al., Plasma Sources Sci. Technol. **20**, 015011 (2011)
22. E. Schüngel et al., J. Appl. Phys. **112**, 053302 (2012)
23. M.A. Liebermann, J. Appl. Phys. **65**, 4186 (1989)

Cite this article as: Arslane Boudghene Stambouli, Rafik Benallal, Nourredine Oudini, Sidi Mohamed Mesli, Rabah Tadjine, Control of Dual Frequency Capacitively Coupled Plasma via blocking capacitor and phase angle, Eur. Phys. J. Appl. Phys. **80**, 10802 (2017)

