UNIVERSITÉ PARIS 13 LSPM - UPR 3407

# Thèse

présentée en première version en vue d'obtenir le grade de Docteur, spécialité « Génie des Procédés »

par

Mathieu Maury

# Simulation numérique de la fragmentation d'un précurseur de dopage au sein d'un réacteur d'implantation ionique par immersion plasma

Thèse soutenue le 04/12/2015 devant le jury composé de :

Pr.	Alix GICQUEL	LSPM	(Présidente)
Pr.	Savino LONGO	Université de Bari	(Rapporteur)
Pr.	Ioan SCHNEIDER	Université du Havre	(Rapporteur)
Dr.	Eberhard BÄR	IISB Fraunhofer	(Examinateur)
M <sup>me</sup>	Gaël BORVON	Ion Beam Services	(Examinatrice)
M.	Laurent ROUX	Ion Beam Services	(Examinateur)
Pr.	Philippe SUPIOT	Université Lille 1	(Examinateur)
Pr.	Khaled HASSOUNI	LSPM	(Directeur de Thèse)

# Table des matières

T	ABLE	DES M	IATIÈRES	iii
Lı	ISTE I	DES FI	GURES	v
In	TRO	DUCTI	ON GÉNÉRALE	1
Ι	Etat de l'art			
	1	Conte	EXTE INDUSTRIEL	3
		1.1	Principe de base d'un transistor	3
		1.2	Évolution des composants électroniques	4
		1.3	Méthodes d'implantation ionique	7
		1.4	Simulation d'un réacteur d'implantation ionique	10
	2	Généf	RALITÉS SUR LES PLASMAS	12
		2.1	Grandeurs caractéristiques	12
		2.2	Effets collectifs et couplages	14
		2.3	Dépôt de puissance électrique	18
	3	Métho	ODES DE GÉNÉRATION DU PLASMA	20
		3.1	Couplage capacitif	21
		3.2	Couplage inductif	23
		3.3	Couplage helicon	25
		3.4	Couplage ECR	25
	4	Simul	ATION NUMÉRIQUE DES PLASMAS	27
		4.1	Principes de base	27
		4.2	Equation de Boltzmann	28
		4.3	Approche PIC-MC	30
		4.4	Approche fluide	32
		4.5	Stratégie de modélisation du réacteur IBS	34
Π	Мо	DÈLE (	QUASI-HOMOGÈNE DE LA SOURCE PLASMA	37
	1	Bases	et objectifs du modèle	37
		1.1	Hypothèses de travail	38
		1.2	Principe d'un modèle homogène	39
	2	Équat	TION DE CONSERVATION DE LA MASSE	40
		2.1	Traitement des réactions dans le volume plasma	41
		2.2	Traitement des réactions sur les parois.	46
		2.3	Rapports des densités centre-paroi	48
	3	Équat	TON DE CONSERVATION DE L'ÉNERGIE	52
		3.1	Flux ionique à la paroi et vitesse de Bohm	53

		3.2	Potentiels plasma et flottant	56
	4	PRISE	EN COMPTE DE L'ÉLECTRONÉGATIVITÉ DU PLASMA	56
		4.1	Vitesse de Bohm	57
		4.2	Rapports des densités centre-paroi	58
		4.3	Potentiels plasma et flottant	60
	5	ÉTUDE	de la source IBS simulée	60
	5	5.1	Géométrie de la source étudiée	60
		5.2	Couplage entre les deux sections	62
		5.3	Choix du nombre d'espèces à traiter	63
		5.4	Etude paramétrique	64
		5.5	Résultats obtenus pour la section haute pression	66
		5.6	Résultats obtenus pour la section basse pression	73
	Con	CLUSIO	N	84
Ш	Mo	dèle I	PIC DE LA CHAMBRE D'IMPLANTATION	87
	1	INTRO	DUCTION	87
		1.1	Description qualitative	87
		1.2	Stratégie de modélisation	89
	2	Modèi	LES ANALYTIQUES DE DIVERGENCE MAGNÉTIQUE	89
		2.1	Détermination de la densité en bord de gaine	90
		2.2	Détermination de la longueur de gaine	93
		2.3	Evolution temporelle de l'épaisseur de gaine	95
		2.4	Description des modèles analytiques de gaine	96
		2.5	Application à la simulation PIC	98
	3	Modèi	le PIC-Monte Carlo	100
		3.1	Description qualitative	100
		3.2	Procédure de résolution	101
		3.3	Méthode de discrétisation	103
		3.4	Critères de stabilité	104
		3.5	Traitement des conditions aux limites	105
		3.6	Traitement des collisions	109
		3.7	Collisions lourd-lourd additionnelles	111
	4	Résult	fats du modèle PIC	112
		4.1	Etude paramétrique de la polarisation du substrat	112
		4.2	Résultats obtenus pour le cas standard	113
		4.3	Cas d'un plasma non collisionnel $\ldots \ldots \ldots \ldots \ldots \ldots$	119
		4.4	Impact de l'amplitude du potentiel imposé	127
		4.5	Impact de la forme d'onde du potentiel imposé	132
	5	Сомра	ARAISON EXPÉRIMENTALE ET PERSPECTIVES	135
		5.1	Profils d'implantation du $BF_3$	135
		5.2	Evolution du plasma dans la chambre d'implantation	137
	Con	CLUSIO	N	139
С	ONCI	LUSION	I GÉNÉRALE	141
٨	NI			
A	INO	Cart	NS EI NOMENCLATUKE	145
	1	CONST	ANTES PHYSIQUES	145

2	Variables employées dans les modèles	145				
	2.1 Notation commune aux différents modèles	145				
	2.2 Notation spécifiques au modèle PIC	146				
3	Formulaire en coordonnées cylindriques	146				
B Se	CTIONS EFFICACES EMPLOYÉES	147				
1	Ionisation (directe ou dissociative)	147				
2	Dissociation neutre	147				
3	Attachement et détachement	149				
4	Recombinaison électron-ion	151				
5	Neutralisation mutuelle ion-ion	152				
6	Réactions inélastiques sans fragmentation	152				
D.						
PIBLI	DIBLIOGRAPHIE					

# LISTE DES FIGURES

I.1	Schéma d'un transistor de type MOSFET	4
I.2	Évolution du nombre de transistors par microprocesseur	5
I.3	Évolution des ventes mondiales de composants	5
I.4	Échéances données par l'ITRS concernant $L_{hp}$ et $L_g$	6
I.5	Évolution du coût d'élaboration d'un transistor	6
I.6	Notations spécifiques à l'implantation ionique	8
I.7	Profils types d'implantation ionique	8
I.8	Schéma de l'implantation de type 'Beamline'	8
I.9	Schéma de l'implantation de type 'PIII'	10
I.10	Géométrie générale du réacteur simulé	12
I.11	Domaine d'existence des plasmas	13
I.12	Exemples de réacteurs à procédé plasma employés dans l'industrie.	21
I.13	Phénomène d'avalanche électronique	22
I.14	Schéma de modèles éléments finis à 0/1/2 dimensions	27
I.15	Organigramme du modèle PIC-MCC	32
II.1	Géométrie générale d'un modèle homogène	39
II.2	Réactions de fragmentation pour un plasma à 15 espèces	44
II.3	Schéma des réactions de surface	47
II.4	Heuristique pour les rapports de densité hR et hR	52
II.5	Schéma de la gaine faisant face à une paroi	54
II.6	Vitesse de Bohm électronégative en fonction des températures et den-	
	sités électroniques	59
II.7	Variation des densités dans un plasma électronégatif	59
II.8	Géométrie de la source plasma du réacteur	61

II.9	Écarts entre les résultats pour 15 espèces et ceux pour 8 espèces	64
II.10	Fractions molaires en section HP pour $P_{abs} = 50$ W	67
II.11	Fractions molaires en section HP pour $P_{abs} = 100 \text{ W} \dots \dots \dots$	69
II.12	Fractions molaires en section HP pour $P_{abs} = 295$ W	69
II.13	Fractions surfaciques en source HP pour $P_{abs} = 295$ W	70
II.14	Fractions volumiques et surfaciques en section HP en fonction de $P_{abs}$	71
II.15	$T_e$ en section HP pour $P_{abs}$ variable	72
II.16	Electronégativité en section HP en fonction de $P_{abs}$	72
II.17	Potentiel flottant en section HP pour $P_{abs} = 295 \text{ W} \dots \dots \dots \dots$	73
II.18	Vitesse de Bohm en section HP en fonction de $P_{abs}$	73
II.19	Fractions volumiques et surfaciques en section HP pour $P_{abs}$ =295W	
II ao	Et $\gamma_r$ variable	74
11.20	Fractions motatie en section br pour $P_{abs} = 5$ w et un nux en entree	
II or	Fractions molaire an section BP neur P = 100 W et up flux on ontrée	74
11.21	variable	
II 22	Exactions molaires on section BP pour $P_{\pm} = 200 \text{ W}$	74
II.22 II.22	Fractions indianes on section BP pour $P_{abs} = 200 \text{ W}$	75
II.23	Fractions molaires on section BP pour $P_{abs} = 200$ W	70
ш.24	Fractions molaires on section BP pour $P_{abs} = 5$ W.	77
II.25	Fractions surfaciones on section BP pour $P_{abs} = 50$ W	77
II.20	Fractions volumiques et surfaciques en section BP pour $\alpha = 0.10$ et	70
11.27	Fractions voluntiques et suffaciques en section Dr pour $\gamma_r=0,10$ et	-
11 -9	$P_{abs}$ variable	79
II.20	$T_e$ et $\alpha_p$ en section Dr pour $\gamma_r=0,10$ et $T_{abs}$ variable	79
II.29	Nodes de perte d'energie en section br pour $\gamma_r=0.10$ et $P_{abs}$ variable	'79 80
II.30	Electronegativite en section Dr en fonction de $P_{abs}$	00
II.31 II.92	Fractions folliques en section BP pour $P_{abs} = 50$ w	00
11.32	Vitesse de Dohim en section de l'électronégativité	01
II.33	T an applier PD an familiar do D	01 0-
II.34	$I_e$ en section DP en fonction de $P_{abs}$	01
II.35	Potentiel nottant en section DP en fonction de $P_{abs}$	01
11.36	Fractions volumiques et surfaciques en section BP pour $P_{abs} = 5$ vv et	0
Π	$\gamma_r$ variable	03
II.37	$I_e$ en section DP en fonction de $\gamma_r$	03
11.38	Electronegativité en section BP en fonction de $\gamma_r$	83
11.39	Potentiel flottant normalise en section DP en fonction de $\gamma_r$	04
11.40 11	Vitesse de Bonm en section BP en fonction de $\gamma_r$	84
11.41	Fractions molaires en section BP pour $P_{abs} = 100$ w en presence ou	0_
II (a	Écart relatif pour les fractions molaires entre un cas magnétics à D	05
11.42	Ecart relatif pour les fractions molaires entre un cas magnetise à $P_{abs}$	0_
	et un cas non magnetise a $P_{abs}/2$	05
III.1	Géométrie générale du réacteur à simuler	88
III.2	Schéma d'emploi des modèles oD et 1D pour la chambre d'implan-	
	tation	89
III.3	Notations pour le modèle de divergence magnétique	90
III.4	Épaisseur de gaine Child-Langmuir selon $n_e$ et $V_0$	95

III.5 Longueur de la gaine en fonction du modèle employé	98
III.6 Épaisseur de gaine en fonction du rapport $\lambda_i / s_{max}$	99
III.7 Épaisseur de gaine en fonction du temps de montée	99
III.8 Nomenclature des longueurs dans la chambre d'implantation	100
III.9 Schéma d'un modèle Particule-in-Cell	101
III.10Profil de potentiel en présence d'une pseudo-gaine	106
III.11Coefficients d'émission secondaire pour le silicium	109
III.12Forme du pulse de tension au niveau du substrat.	113
III.13Évolution du profil axial du potentiel pour un pulse carré.	114
III.14Évolution du profil axial de densité pour le $BF_3^+$ pour un pulse carré.	115
III.15Évolution du profil axial de densité pour le $BF_2^+$ pour un pulse carré.	115
III 16Évolution du profil axial de densité pour les électrons pour un pulse	)
carré	115
III 17Évolution du profil axial de densité pour le $F^-$ pour un pulse carré	115
III 18Évolution du profil axial de l'énergie des électrons pour un pulse carré	116
III 10Évolution spatiale de la FDE pour les électrons avec un pulse carré	117
III 20Évolution de la EDEE pour $t_{rel} = 30us$ et d=10cm	117
III 21Évolution du profil axial de l'énergie du $BE^+$ pour un pulse carré	117
III azévolution engliale de la EDE pour le $BE^+$ avec un pulse carré	118
III 22EVolution spatiale de la FDE pour le $DT_3$ avec un puise carre III 22EDE à une distance donnée du substrat pour le $BE^+$ avec un puise	110
$111.231$ DE a une distance donnée du substrat, pour le $D1_3$ avec un puise	778
III 24Évolution temporelle de la EDE 21 substrat pour le $BE^+$ et un pulse	110
carrá	110
$III 2 = EDE au substrat pour le BE^+ sur une période d'un pulse carré$	119
III 26EDE au substrat pour le $BE^+$ durant les phases ON et OEE du pulse	119
de tension	120
III $27EDA$ au substrat pour la $BE^+$ durant las phases ON at OFE du pulse	120
de tension	120
III a8Évolution du profil avial du potential pour un plasma pon collisionnal	120
III 20 Évolution du profil avial du donsité pour la $BE^+$ pour un plasma non	121
collisionnel	101
$III acÉvolution du profil avial du donsité nour la BE^+ nour un plasma non$	121
collisionnal	101
III atÉvolution du profil avial du donsité pour les électrons pour un	121
plasma non collisionnel	100
III azévolution du profil avial de l'énergie du $BE^+$ pour un plasma pop	122
collisionnal	100
III aaldom quo III aa avoc uno échollo logarithmiquo pour los ordonnées	122
III.33 della que III.32 avec une echene logaritamique pour les ordonnees. III $24$ Évolution enatiale de la EDEI du $BE^+$ pour un plasma non collisionnel	122
III.34Evolution spatiale de la FDEI du $BT_3^+$ pour différentes distances	123
III.35 valeurs de la l'DEI du $Dr_3$ pour dificientes distances	123
m.36Evolution temporene de la FDE pour le <i>Br</i> <sub>3</sub> <sup>-</sup> avec un plasma non	
$III a = E_{volution} do l'énergie merenne d'impact neur le P\Gamma^+ en familier$	124
$d_{23}$ collisions	10-
$III = 0 Comparation do la EDE du PE^+ au substrat on fonction dos collisions$	125
$111.30$ Comparaison de la FDE du $BF_3^+$ au substrat en fonction des collisions	125

III.39FDE au substrat pour le $BF_3^+$ durant les phases ON et OFF du pulse	
de tension pour un plasma non collisionnel.	125
III.40Évolution de l'angle moyen d'impact pour le $BF_3^+$ en fonction des	
collisions	126
III.41FDA au substrat pour le $BF_3^+$ pour un plasma collisionnel	127
III.42FDA au substrat pour le $BF_3^+$ pour un plasma non collisionnel	127
III.43Évolution du profil axial de l'énergie électronique pour un pulse carré	.128
III.44Évolution spatiale de la FDE des électrons pour un plasma non colli-	108
III 4-Profil avial du potentiel pormalisé en fonction du potentiel imposé	120
III 46Profil avial de l'énergie normalisée des jons $BE^+$ en fonction du no-	120
tentiel imposé	120
III $4\pi$ Profil avial de la densité des jons $BE^+$ on fonction du potentiel imposé	129
III.471 Ioni axial de la densité des fons $D1_3$ en fonction du potentiel imposé III.48Profil axial de la densité des électrons en fonction du potentiel imposé	130
III.401 Ioni axial de la defisite des electrons en fonction du potentier impose	130
du potontiol imposó	101
$III = c E_{volution} do l'angle moven d'impact pour le BE^+ on fonction du$	131
potential imposé	101
potentiel impose	131
III.51FDE du $BF_3$ au substrat en fonction du potentiel imposé	131
$11.52FDA$ du $DF_3$ au substrat en fonction du potentier impose	131
III.53Evolution temporelle de l'energie d'impact pour le $BF_3$ ' selon la	
forme a onde au potentiel $\ldots$ $\ldots$ $\ldots$ $\ldots$ $\ldots$	132
III.54FDE du $BF_3'$ au substrat en fonction du temps de montee	133
III.55FDE du $BF_3'$ au substrat en fonction du temps de descente	133
III.56FDE du $BF_3'$ au substrat durant la phase ON du puise en fonction	
au temps de montee	134
III.57FDE du $BF_3'$ au substrat durant la phase OFF du pulse en fonction	
du temps de descente. $\dots$ $\dots$ $\dots$ $\dots$ $\dots$ $\dots$ $\dots$ $\dots$ $\dots$	134
111.58Evolution temporelle de l'angle d'impact pour le $BF_3$ ' selon la forme	
d'onde du potentiel $\dots$ $\dots$ $\dots$ $\dots$ $\dots$ $\dots$ $\dots$ $\dots$ $\dots$	134
III.59FDA du $BF_3'$ au substrat en fonction du temps de montée	135
III.60FDA du $BF_3$ au substrat en fonction du temps de descente	135
III.61FDE du $BF_3'$ pour $V_{max} = 1$ kV selon le modele PIC	136
III.62FDE du $BF_3'$ pour $V_{max} = 1$ kV selon les données d'IBS	136
III.63Profils d'implantation des ions $BF_x^+$ basés sur la FDE du modèle PIC	136
III.64Profils d'implantation des ions $BF_x^+$ basés sur la FDE d'IBS	136
III.65Profils du bore dans le silicium pour $V_{max} = 1 \text{ kV} \dots \dots \dots$	137
III.66Spectre d'emission pour $P_{abs} = 1800$ W	138
III.67Spectres d'emission aux deux extremités de la chambre	138
III.68Spectres d'émission aux niveau du substrat pour $V_{max}$ variable $\ldots$	139
B.1 Sections efficaces d'ionisation	148
B.2 Taux de réaction pour l'ionisation	148
B.3 Calcul des sections efficaces de dissociation ionisante pour le $BF_3$	149
B.4 Sections efficaces de dissociation neutre	150
B.5 laux de réaction pour la dissociation neutre	150
B.6 Sections efficaces pour l'attachement/détachement	151

B.7	Taux de réactions pour l'attachement/détachement	152
B.8	Sections efficaces pour l'excitation vibrationnelle	153
B.9	Taux de réaction pour l'excitation vibrationnelle	154

# INTRODUCTION

Le maintien de la croissance du secteur de l'industrie des composants électroniques requière une augmentation graduelle de la puissance de calcul délivrée par ces composants, qui passe par la miniaturisation toujours plus poussée des transistors qui en constituent l'ossature. Or une telle évolution exponentielle de leurs dimensions caractéristiques se heurte à des limites physiques et quantiques liées aux échelles nanométriques de fabrication, nécessitant des investissements matériels considérables pour maintenir le taux de défaut des composants produits dans des limites acceptables.

Etant données que l'épaisseur des zones dopées d'un transistor est proportionnelle à sa largeur et que la profondeur d'implantation des dopants est proportionnelle à leur énergie d'impact sur le substrat, une réduction progressive de l'énergie d'implantation est nécessaire pour continuer la miniaturisation des composants. Or les techniques conventionnelles de dopage comme l'implantation ionique par balayage de faisceau ne sont plus suffisamment performantes à basse énergie pour résoudre ces difficultés de fabrication. Elles sont progressivement remplacées par l'implantation ionique par immersion plasma ou PIII, car cette dernière offre la possibilité d'opérer à basse énergie sans subir les phénomènes handicapant l'implantation par balayage, ce qui autorise la réalisation de jonctions ultra-fines à l'échelle nanométrique.

La technologie PIII se base sur l'emploi du plasma, un état singulier de la matière dont la maîtrise des propriétés particulières est indispensable pour obtenir un résultat fiable et reproductible. Ceci nécessite une meilleure connaissances des interactions physicochimiques entre les différentes espèces chimiques composant le plasma, ainsi que des couplages entre ce dernier et les différents parties du réacteur comme la source d'excitation et le substrat d'implantation. Le processus de développement des réacteurs plasma pour l'implantation reste souvent empirique, ce qui retarde leur mise en service et limite les possibilités d'innovation dans leur design. L'emploi d'outils de conception assistée par ordinateur pour optimiser un dispositif d'implantation avant industrialisation est cependant une procédure de plus en plus fréquente dans l'industrie électronique, du fait de l'augmentation des coûts de mise en service.

Modéliser un réacteur PIII existant revient à construire un "réacteur virtuel" aussi proche que possible de la machine réelle, employant comme entrées les réglages opérationnels de l'appareil et fournissant en sortie les paramètres de la décharge plasma et ceux liés à l'implantation comme le flux ionique sur le substrat et la distribution en énergie des ions implantés. La modélisation numérique des réacteurs plasma possède l'avantage de pouvoir estimer l'impact de phénomènes importants de la décharge qui sont difficiles à étudier manière expérimentale, parce que l'introduction d'outils de diagnostic dans le réacteur peut perturber la génération du plasma.

La géométrie complexe du réacteur plasma que nous cherchons à simuler rend sa modélisation complète difficile, du fait de la grande étendue des échelles temporelles à considérer ainsi que des importants gradients spatiaux de densité et température attendus. Compte tenu des observations effectués, l'étude s'effectuera en trois étapes :

Le **premier chapitre** expose les propriétés particulières de l'état de la matière appelée plasma, ainsi que l'état de l'art en matière de réacteurs d'implantation ionique basés sur le plasma et de simulation numérique de ces réacteurs.

Le **deuxième chapitre** présente le modèle quasi-homogène de chimie qui permet de caractériser la source plasma et d'y décrire l'évolution temporelle de la décomposition du gaz précurseur.

Le **troisième chapitre** présente le modèle PIC-MC unidimensionnel décrivant la chambre d'implantation ionique et permettent d'étudier la dynamique d'implantation au niveau du substrat placé dans la chambre.

# Etat de l'art

### Sommaire

1	Conti	EXTE INDUSTRIEL	3
	1.1	Principe de base d'un transistor	3
	1.2	Évolution des composants électroniques	4
	1.3	Méthodes d'implantation ionique	7
	1.4	Simulation d'un réacteur d'implantation ionique	10
2	Généi	RALITÉS SUR LES PLASMAS	12
	2.1	Grandeurs caractéristiques	12
	2.2	Effets collectifs et couplages	14
	2.3	Dépôt de puissance électrique	18
3	Méth	ODES DE GÉNÉRATION DU PLASMA	20
	3.1	Couplage capacitif	21
	3.2	Couplage inductif	23
	3.3	Couplage helicon	25
	3.4	Couplage ECR	25
4	Simul	ATION NUMÉRIQUE DES PLASMAS	27
	4.1	Principes de base	27
	4.2	Equation de Boltzmann	28
	4.3	Approche PIC-MC	30
	4.4	Approche fluide	32
	4.5	Stratégie de modélisation du réacteur IBS	34

# 1 CONTEXTE INDUSTRIEL

Les circuits intégrés qui constituent l'ossature de l'informatique grand-public reposent sur le principe fondamental du transistor. Ce composant de taille microscopique est aujourd'hui fabriqué par implantation d'atomes dopants dans un substrat en silicium. Pour assurer un fonctionnement fiable des transistors produits à des échelles nanométriques, l'industrie électronique recourt de plus en plus fréquemment à des procédés d'implantation ionique basés sur l'emploi du plasma, un état de la matière aux propriétés singulières.

# 1.1 Principe de base d'un transistor

Les composants électroniques utilisés dans l'informatique grand-public sont basés sur le concept fondamental du transistor : il s'agit d'un dispositif électrique à

trois connexions (source, drain, porte) qui laisse passer plus ou moins de courant entre la source et le drain en fonction du voltage appliqué sur la porte (cf figure I.1). Le mode de fonctionnement le plus courant est dit binaire ou numérique, lorsque le courant entre source et drain peut prendre seulement deux valeurs, une haute et une basse, en fonction du voltage en entrée de la porte. La fabrication d'un transistor repose sur l'emploi de matériaux semi-conducteurs, dont la résistance électrique est à la fois intermédiaire entre un isolant et un métal mais surtout dépend fortement de la présence ou non d'impuretés atomiques. La largeur de l'espace entre la source et le drain  $L_g$  (pour 'gap' en anglais) et la demi-longueur entre chaque transistor dans le circuit intégré  $L_{hp}$  (pour 'half-pitch' en anglais) définissent les dimensions caractéristiques du composant.



FIGURE I.1 – Vue en coupe schématisée d'un transistor de type MOFSET (ou Metal Oxide Semiconductor Field Effect Transistor). Il est caractérisé par une largeur du gap entre source et drain  $L_g$ , une demi-période de construction  $L_{hv}$  et une épaisseur de dopage  $H_d$ .

Le processus de dopage, consistant dans l'ajout contrôlé d'impuretés atomiques dans le matériau de base afin d'en moduler la conductivité, est une étape clef dans la fabrication de composants électroniques. Dans le cas du silicium comme substrat, deux types de dopants sont possibles : celui de type N à base d'éléments de la colonne V dans le tableau périodique, comme le phosphore, aboutissant à une charge locale négative ; et le type P à base d'éléments de la colonne III comme le bore donnant une charge locale positive.

Les circuits intégrés qui constituent l'unité de base dans la conception des appareils informatiques actuels sont composés d'un ensemble de transistors agencés sous la forme de portes logiques, qui manipulent l'information portée par le courant arrivant en entrée, et d'éléments de mémoire, qui stockent cette information de manière durable sous forme d'un état électrique ou magnétique stable.

## **1.2** Évolution des composants électroniques

La puissance de calcul d'un circuit intégré est proportionnelle à la fréquence de commutation des transistors qui le compose, soit l'inverse du temps nécessaire aux électrons pour traverser le gap entre source et drain. Comme la vitesse de circulation des électrons dans le circuit est finie, augmenter la puissance de calcul revient à diminuer la taille unitaire des transistors et augmenter leur nombre par unité de surface. Les progrès rapides en matière de gravure de composants ont permis de gagner 7 ordres de grandeur sur le nombre de transistors et 5 ordres de grandeur sur la densité surfacique associée depuis 1970, comme montré en figure I.2. Les économies d'échelle réalisées en parallèle ont conduit à une division par 6 ordres de grandeurs du cout de fabrication d'un composant pour la même performance

[Abe et al. 2008]. L'évolution exponentielle de ces caractéristiques, avec un doublement du nombre de composants par puce tous les 24 mois, a été formalisé sous le nom de Loi de Moore en 1965 [Moore 1965].



FIGURE I.2 – Evolution temporelle du nombre de transistors présents dans un microprocesseur grand-public, de leur densité surfacique et de la dimension caractéristique du composant [Intel 2014].

L'industrie de fabrication des composants intégrés est un secteur industriel florissant selon les données de la Semiconductor Industry Association, avec un chiffre d'affaire annuel de 305 milliards de dollars en 2013 [Rosso 2013], soit une augmentation de 23% par rapport aux chiffres de 2006 [Greenagel et Craib 2006]. La vente des équipements de fabrication pour ces composants atteignait 8 - 10 milliards de dollars la même année pour les seuls réacteurs à procédés plasma.



FIGURE I.3 – Évolution temporelle des ventes de composants électroniques par division géographique, total annuel en milliards de dollars [SIA 2014].

Se basant sur les prédictions de Moore, les entreprises du secteur se sont coordonnées au sein de l'International Technology Roadmap for Semiconductors pour établir des objectifs en matière de dimensions caractéristiques des transistors intégrés (voir figure I.4) et faciliter les efforts de recherche interdisciplinaire aptes à les tenir. Le but final de cette collaboration internationale est de maintenir la croissance du secteur durant les décennies à venir.



FIGURE I.4 – Objectifs déclarés par l'ITRS en 2001, 2007 et 2013 concernant la largeur de porte  $L_g$  et la demi-longueur  $L_{hp}$  des transistors présents dans les microprocesseurs. Données issues des rapports exécutifs ITRS [2001; 2007; 2013].



FIGURE I.5 – Évolution des couts de fabrication d'un million de transistors [Miller 2013] et du wafer sur lequel ils sont gravés [Rhines 2014] en fonction de  $L_{hv}$ .

On observe cependant une stabilisation du prix par transistor pour une demipériode inférieure à 32 nm (cf figure I.5) correspondant à l'entrée dans un régime où les économies d'échelle deviennent faibles. Ceci conduit à une augmentation du cout total du wafer, le disque de silicium sur lequel sont gravés les processeurs, puisque le nombre de transistors par processeur continue d'augmenter. Une telle évolution semble indiquer que les limites de validité de la Loi de Moore pourraient être atteintes. De ce fait, l'épaisseur de la couche d'oxyde séparant le contact métallique de la porte du substrat dopé représente seulement 0,5 nm, soit deux fois le diamètre d'un atome de silicium, dans le cas d'une largeur de porte de 22nm. A des échelles spatiales aussi réduites, des phénomènes quantiques comme l'effet tunnel peuvent commencer à se manifester et détériorer l'efficacité des transistors, ce qui nécessite des investissements matériels considérables pour s'assurer que le taux de défaut des composants produits reste dans des limites acceptables pour la commercialisation.

## **1.3** Méthodes d'implantation ionique

Tenir les objectifs ambitieux de l'ITRS nécessite de réduire considérablement les dimensions des transistors intégrés. Or l'épaisseur de la source et du drain des transistors CMOS est proportionnelle à la largeur de la porte [Wilk et al. 2001]. Dans le cas des jonctions ultra-fines actuellement en production, la largeur de porte ne dépasse pas 100 nm et requière des profondeurs d'implantation inférieures à 35 nm. Il faut donc améliorer les procédés de dopage associés sur deux aspects :

- réduire la profondeur d'implantation des impuretés dopantes pour aboutir à des composants plus compacts
- conserver une concentration de dopants aussi élevée que possible dans la zone d'épaisseur souhaitée pour que le composant fonctionne de manière fiable

La méthode prédominante pour obtenir un dopage fin et concentré est l'implantation ionique, qui consiste à accélérer des ions (atome ou molécule auquel a été arraché un électron, lui donnant une charge positive  $z_i e$ ) vers un substrat à l'aide d'un champ électrique  $E_{imp}$  afin de les faire pénétrer dans le matériau. L'épaisseur d'implantation augmente avec l'énergie des particules impactant le substrat  $E_i^{sub} = z_i e E_{imp}$ , comme mis en lumière par la figure I.7. La concentration en dopants près de la surface dépend de la dose envoyée, qui est proportionnelle au flux d'ions impactant le substrat  $F_s$  et à la durée d'implantation (cf figure I.6) et peut atteindre  $10^{16} cm^{-2}$  soit l'équivalent d'une vingtaine de couches atomiques d'épaisseur.

Deux procédés d'implantation ionique sont couramment employés dans l'industrie, le balayage par faisceau et l'immersion plasma.

#### **1.3.1** Balayage de faisceau (Beamline)

Comme son appellation le suggère, l'implantation par balayage de faisceau (Beamline Ion Implantation en anglais) se base sur l'envoi d'un faisceau d'ions de masse et d'énergie bien déterminées vers le substrat à implanter. L'énergie d'implantation dépend du potentiel électrique induit entre la source d'ions et le substrat. La dose d'implantation est proportionnelle au courant traversant le faisceau et à la durée d'implantation. Un balayage du faisceau sur le substrat, par mise en



FIGURE I.6 – Notations associées au concept d'implantation ionique, pour un faisceau d'ions de direction normale au substrat. La dose implantée est égale à  $D = \int_t SF_s(t) dt$ .



FIGURE I.7 – Simulation de profils d'implantation de bore dans du silicium, dans le cas d'une implantation par immersion plasma à partir de BF<sub>3</sub> comme gaz précurseur avec une dose d'implantation de  $10^{15}$  cm<sup>-2</sup>s<sup>-1</sup> [Burenkov et al. 2012].

rotation de ce dernier, peut être nécessaire pour obtenir une implantation uniforme sur toute la surface d'intérêt.



FIGURE I.8 – Vue en coupe schématisée d'un système d'implantation ionique à balayage par faisceau. Illustration adaptée depuis [R.Gwilliam 2009].

La sélection de la masse des ions est effectué par un électroaimant dont le champ magnétique uniforme B est perpendiculaire à la direction du faisceau : la force de Lorentz  $F_L$  exercée sur les ions contrebalance la force centrifuge  $F_c$ , avec un rayon de courbure  $R_b$  dépendant de la masse des particules et de la tension d'extraction  $V_{ex}$ . Les ions lourds sont moins déviés que les ions légers et seuls ceux dont le rapport masse / charge est sélectionné peuvent traverser la fente de sortie.

$$F_{L} = z_{i}ev_{i}B ; F_{c} = m_{i}\frac{v_{i}^{2}}{R_{b}} ; v_{i} = \sqrt{\frac{2eV_{ex}}{m_{i}}}$$

$$F_{L} = F_{c} \Rightarrow R_{b} = \frac{m_{i}v_{i}}{z_{i}eB} = \frac{\sqrt{m_{i}2eV_{ex}}}{z_{i}eB}$$
(I-1.1)

Le principal avantage de cette méthode est un contrôle précis et indépendant des paramètres d'implantation (masse, énergie, dose) puisque les systèmes définissant ces paramètres (aimant de séparation, colonne d'accélération, source d'ions) opèrent de manière séparée.

Sa principale limitation est liée à la nature non électriquement neutre du faisceau : des particules de même charge électrique tendent à se repousser, ce qui induit une divergence du faisceau d'autant plus importante que l'énergie des ions est basse et le courant de faisceau élevé. Opérer à des énergies et courants compatibles avec la formation de jonctions ultra-fines peut conduire à des durées d'implantation trop longues pour être économiquement viables [Brown 1993].

Un possible contournement (appelé mode de décélération) consiste à accélérer les ions à une énergie suffisamment élevée pour minimiser les problèmes de divergence, puis à ralentir le faisceau juste avant le substrat pour réduire son énergie d'implantation au niveau souhaité. Cette méthode souffre cependant d'une contamination par des neutres rapides, causant une profondeur d'implantation plus importante que voulue. En effet, certains ions du faisceau vont entrer en collision avec des atomes du gaz résiduel durant la phase à haute énergie du transport et subir un processus d'échange de charge de type  $A^+ + B \Rightarrow A + B^+$ , ce qui conduit à la formation de neutres rapides qui ne sont pas ralentis par le champ électrique de décélération et impactent le substrat avec une énergie élevée.

#### 1.3.2 Immersion plasma (PIII)

L'implantation par immersion plasma (Plasma Immersion Ion Implantation ou PIII en anglais) est un procédé mis en évidence par Strack en 1963 [Strack 1963] et développé par Conrad et al. en 1987 [Conrad et al. 1987] qui consiste à placer le substrat dans une enceinte sous vide dans laquelle est injectée le gaz précurseur des éléments dopants à implanter. Un plasma composé d'ions de charge positive et des électrons arrachés à ces ions est ensuite généré dans l'enceinte à partir du gaz précurseur. On applique enfin un potentiel négatif  $V_0$  sur le substrat, ce qui accélère les ions positifs vers ce dernier et les implante dans le matériau.

Cette méthode présente plusieurs avantages, notamment que la durée d'implantation nécessaire pour obtenir une dose donnée est indépendante de la taille du substrat tant que ce dernier est entièrement immergé dans le plasma et que la dose d'implantation n'est limitée que par la densité du plasma. La possibilité d'opérer à basse énergie sans subir le phénomène de divergence du faisceau d'ions qui handicape l'implantation par balayage autorise la réalisation de jonctions ultrafines par ce procédé [Goeckner et al. 1999]. Seules les technologies d'implantation ionique basées sur les procédés plasma semblent en mesure de permettre une plus



FIGURE I.9 – Vue en coupe schématisée d'un système d'implantation ionique par immersion plasma.

grande réduction de la taille des composants des circuits intégrés jusqu'à l'échelle nanométrique [Ostrikov et Murphy 2007].

Ses principaux inconvénients sont qu'il n'y pas de sélection précise de la masse ou de l'énergie des ions : tous les ions positifs présents dans le plasma sont implantés quelque soit leur nature, avec une énergie allant du potentiel plasma  $E_i = z_i e V_p$ jusqu'à celle souhaitée  $E_i^{max} = z_i e V_0$ .

La technologie PIII se base sur l'emploi du plasma, un état de la matière qui compose près de 99% de la matière connue dans l'univers. Etant donné que la distribution de l'énergie ionique d'impact dépend de l'évolution temporelle du potentiel d'implantation et de la composition précise du plasma [Agarwal et Kushner 2005], la maitrise des propriétés particulières de cet état de la matière est une nécessité pour obtenir une profondeur d'implantation reproductible durant toute la phase de production des composants.

# 1.4 Simulation d'un réacteur d'implantation ionique

Le coût de mise en service des nouveaux appareillages de fabrication de composants électroniques tendant à augmenter avec la diminution des dimensions caractéristiques des composants à produire, l'usage d'outils de CAO (conception assistée par ordinateur) pour optimiser le design d'un dispositif d'implantation avant industrialisation est une procédure de plus en plus fréquente dans l'industrie électronique.

Cependant, le processus de conception des réacteurs plasma reste souvent empirique et basé sur l'exploration systématique de l'espace des paramètres opérationnels de l'appareil [NRC 1996] ce qui retarde le développement du réacteur et limite les possibilités d'innovation dans le design final. Une des raisons de cet état de fait est la complexité de la physique des plasmas, qui ralentit les progrès en matière de modélisation et rend nécessaire une meilleure connaissance des interactions physicochimiques entre électrons, ions et neutres.

Simuler un réacteur PIII existant revient à construire un "réacteur modèle" aussi proche que possible de la machine réelle, avec comme données en entrée les paramètres de contrôle de la source plasma (puissance absorbée, fréquence d'excitation, pression et débit d'injection de gaz...) tandis les données en sortie possèdent leur pendant physique mesuré expérimentalement. Les résultats obtenus, issus de la résolution des systèmes d'équations du modèle dans le temps et l'espace, concernent principalement les paramètres de la décharge (densité des différentes espèces du plasma, température électronique) et ceux liés à l'implantation ionique (flux ionique sur le substrat, distribution en énergie des ions...)

Le réacteur simulé dans le reste de cette étude est le système PULSION mis au point par la société IBS. Il possède trois parties principales, détaillées dans la figure III.1 :

- 1. Une source plasma à couplage inductif (ou ICP pour Inductively Coupled Plasma) composée d'un tube cylindrique en matériau diélectrique placé au centre d'une bobine d'excitation solénoïdale permettant le transfert de puissance électrique au plasma. La source est divisée longitudinalement en deux sections, fonctionnant à des pressions différentes, par une plaque de séparation en matériau diélectrique percée d'une série de trous. Une bobine magnétique située à la base de la source permet de confiner les ions créés dans celle-ci et donc d'augmenter la densité du plasma en sortie.
- 2. Une chambre d'implantation d'un diamètre suffisant pour accueillir un substrat standard, dans laquelle va diffuser le plasma généré dans la source.
- 3. Un substrat placé à la base de la chambre et pouvant être polarisé à une tension de -100V à -10kV, afin d'assurer l'implantation des ions de dopage dans le substrat à la dose et la profondeur souhaitée.

On se focalise sur quatre classes de phénomènes à étudier :

- Le dépôt d'énergie électrique dans le plasma à partir de la bobine d'excitation inductive, qui dépend de variations spatiales de la densité électronique et du courant dans la bobine d'excitation.
- La physicochimie de la décharge via les réactions de fragmentation, qui détermine le taux de production ou de destruction des espèces composant le plasma. Elle se base sur un schéma réactionnel compilant les différentes collisions électron-lourd et lourd-lourd possibles ainsi que les sections efficaces correspondantes.
- Le transport des espèces et de l'énergie dans le réacteur, que ce soit par diffusion moléculaire (dépendant de la fréquence des collisions élastique et de la température électronique) et/ou convection (influencé par la géométrie du réacteur)
- Les interactions entre le plasma et les surfaces via les réactions de recombinaison, qui dépendent de la densité locale du plasma et du schéma réactionnel choisi, et le transfert de l'énergie particulaire sur le substrat.



FIGURE I.10 – Géométrie générale du réacteur d'implantation ionique simulé

# 2 Généralités sur les plasmas

En première approche, on peut considérer un plasma comme un gaz suffisamment chauffé pour que les molécules qui le composent voient certains de leur électrons être arrachés par collision. Ce phénomène d'ionisation donne lieu à la formation d'un mélange d'ions positifs (molécules ayant perdu un électron) d'électrons libres (non liés à un molécule) et de neutres (molécules n'ayant pas perdu d'électron) dont la charge électrique totale est nulle.

Comme l'illustre la figure I.11, le domaine de température et de pression dans lequel un plasma peut exister est extrêmement large et chaque catégorie de décharge correspond à des propriétés différentes du plasma généré.

## 2.1 Grandeurs caractéristiques

Un plasma peut être caractérisé par plusieurs paramètres fondamentaux.

#### 2.1.1 Température

La température de chaque espèce composant le mélange (d'indice e pour les électrons, i pour les ions et n pour les neutres) constitue une mesure statistique de son agitation thermique et détermine sa vitesse moyenne et l'énergie cédée à chaque collision. L'échelonnement des différentes températures permet de définir la nature du plasma : si  $T_n \approx T_e$  alors le plasma est dit à l'équilibre thermique, sinon il est hors-équilibre. Si  $T_i \gg T_n$  alors le plasma est dit chaud, froid si  $T_i \approx T_n$ .

Pour les plasmas courants en implantation ionique, on a en général  $T_e > T_i > T_n$ 



FIGURE I.11 – Étendue des domaines d'existence de différents types de plasmas en fonction de leur température électronique en abscisse et de leur densité en ordonnée [Huba 2013]. Les plasmas utilisés actuellement pour l'implantation ionique correspondent aux catégories "glow discharge" et "low-pressure".

avec  $T_e$  de l'ordre de 30.000-100.000 K (soit 3-10 eV environ),  $T_i$  entre 300-2.000 K et  $T_n$  de l'ordre de 300-600 K [Koo et al. 2004, Sukhanov et al. 2005].

#### 2.1.2 Taux d'ionisation

Le taux d'ionisation est défini comme le rapport de la densités des espèces chargées sur la densité totale du gaz, soit  $x_{ioni} = \frac{n_i}{n_g}$ . Il approche 1 pour les plasmas fortement ionisés (comme ceux présents dans les réacteurs de fusion thermonucléaires) contre  $10^{-6} - 10^{-4}$  pour les plasmas froids employés dans l'industrie électronique.

Un plasma est d'autant plus réactif que son taux d'ionisation est élevé, mais cela le rend aussi plus difficilement contrôlable car le flux thermique à évacuer est plus élevé et les particules chargées qui atteignent les parois du réacteur ont davantage d'énergie disponible pour endommager par gravure et pulvérisation les surfaces de l'enceinte de confinement.

#### 2.1.3 Libre parcours moyen

Dans le cadre de la théorie cinétique des gaz, le libre parcours moyen  $\lambda_i$  est défini comme la distance moyenne que peut parcourir une molécule présente dans le gaz avant d'entrer en collision avec d'autres molécules. Il permet de déterminer le régime d'opération du plasma et le type d'interaction avec les parois.

Si  $\lambda \ll R, Z$  alors le plasma est en régime continu où les collisions en volume dominent et les espèces chargées sont transportées par diffusion. Si  $\lambda \gg R, Z$  alors le plasma est dans un régime moléculaire où les collisions avec les parois prédominent et le transport des ions et électrons s'effectue dans un régime de vol libre.

Le paramètre fondamental pour quantifier la probabilité d'une collision est la section efficace  $\sigma(v_R)$  donnée en angströms carrés (avec  $1\dot{A}^2 = 10^{-16}cm^2 = 10^{-20}m^2$ ) qui représente la taille de la surface d'interaction entre les particules cible et incidente en fonction de leur vitesse relative  $v_R$ . En première approximation ou en l'absence de données de section efficace pour un type de collision donnée, on peut recourir au modèle des sphères dures. Il schématise les molécules comme des sphères de diamètre d qui vont interagir entre elles si leur plus proche distance devient inférieure à deux fois leur rayon, d'où une section efficace  $\sigma_s = \pi d^2$ indépendante de la vitesse.

On considère une molécule de diamètre d et de vitesse v traversant un gaz parfait de pression  $P_g = n_g k_b T_g$  contenant des molécules cibles avec une vitesse relative moyenne  $\overline{v_{rel}} = \sqrt{2}\overline{v}$ . Le volume d'interaction balayé par la molécule incidente durant un temps t est égal à  $V_c = \sigma_s \sqrt{2}\overline{v}t$  avec un nombre de collisions dans ce volume égal à  $v_c = V_c n_g$ . Le libre parcours moyen est alors pris comme le rapport de la longueur du chemin parcouru sur le nombre de collisions, soit

$$\lambda_i = \frac{\bar{v}t}{\sqrt{2}\pi d^2 v t n_g} = \frac{k_b T_g}{\sqrt{2}\pi d^2 P_g} \tag{I-2.1}$$

#### 2.1.4 Electronégativité

L'électronégativité du plasma  $\alpha_p$  est définie comme le rapport de la densité des ions négatifs sur celle des électrons. Alors que les ions positifs sont créés par une collision suffisamment énergétique pour arracher un des électrons de leur neutre parent, les ions négatifs sont créés par l'attachement d'un électron libre à une molécule neutre qui peut intervenir à des énergies beaucoup plus basses. Un plasma est dit électropositif si  $0 < \alpha_p < 1$ , électronégatif sinon.

Ce dernier type de plasma possède des propriétés particulières du fait de sa composition, notamment parce que les ions négatifs restent généralement piégés dans la décharge et peuvent s'y accumuler, ce qui conduit à réduire la température moyenne des électrons du plasma et modifier la diffusion des espèces chargées.

### 2.2 Effets collectifs et couplages

Deux autres aspects fondamentaux caractéristiques des plasmas sont la présence de couplages entre les espèces composant le mélange et le champ électrique à l'origine du dépôt de puissance, ainsi que le caractère collectif de l'évolution des espèces dû à la présence d'interactions globales induites par les champs de charge d'espace. Plusieurs facteurs peuvent modifier le comportement collectif des composants du plasma :

- Le rayonnement électromagnétique (radio-fréquence ou micro-onde) issu de la source d'excitation maintient le plasma allumé en transférant de l'énergie aux électrons.
- Le plasma est souvent confiné dans une enceinte sous vide et va de ce fait interagir avec les parois du réacteur et les surfaces qui y sont placées.
- Le présence de champs magnétiques et électriques statiques, générés depuis l'extérieur du réacteur, peuvent induire respectivement le confinement des électrons dans la décharge ou l'accélération des ions vers le substrat.
- Des champs électriques et magnétiques peuvent être générés par le plasma lui-même, du fait des variations spatiales et temporelle de la densité et de la température. Le théorème de Gauss indique par exemple qu'un champ électrique dit de charge d'espace tend à se former en présence d'un gradient de densité des espèces chargées, ce qui est caractéristique d'un comportement collectif.

#### 2.2.1 Relation de Boltzmann

Si une variation spatiale de la densité des espèces chargées se forme dans un plasma, les particules présentes dans les zones de forte concentration vont avoir tendance à diffuser vers les zones de faible concentration afin de rétablir une densité uniforme. Mais la présence d'un tel gradient de densité des charges induit un champ de charge d'espace qui tend à contrecarrer la diffusion des espèces chargées. Un équilibre peut alors s'établir et maintenir une densité hétérogène.

Dans le cas des électrons, on peut écrire le principe de conservation de la quantité de mouvement sous la forme d'un équilibre entre la force de pression électronique  $p_e = n_e k_b T_e$  (qui tend à réduire le gradient de densité) et le champ électrique de charge d'espace  $E_c = -\nabla \phi$ .

$$m_e n_e \left[ \frac{\partial \vec{v_e}}{\partial t} + \vec{v_e} \cdot \nabla \vec{v_e} \right] = e n_e \vec{E_c} - \nabla p_e - m_e n_e v_{mt} \vec{v_e}$$
(I-2.2)

En régime stationnaire, deux cas de figure peuvent se présenter selon la valeur de la vitesse de dérive électronique

– si  $v_e \neq 0$  mais que le terme inertiel  $\vec{v_e} \cdot \nabla \vec{v_e} \approx \vec{v_e}^2$  est négligeable, on aboutit à une expression d'équilibre employée dans le cas du régime de dérivediffusion.

$$en_e\vec{E_c}-\nabla p_e-m_en_e\nu_{mt}\vec{v_e}=0$$

- si la vitesse est négligeable, on peut éliminer les termes dépendant de  $\vec{v_e}$  dans (I-2.2) puis réarranger l'expression pour obtenir une relation entre  $n_e$ ,  $T_e$  et  $\phi$ .

$$en_eec{E} + 
abla ec{p}_e = 0$$
  
 $-en_e 
abla \phi + k_b T_e 
abla n_e = 0$   
 $abla (e\phi - k_b T_e \ln n_e) = 0$   
 $e\phi - k_b T_e \ln n_e = cst$ 

Après intégration de l'expression précédente, on aboutit à la **relation de Boltzmann** qui traduit l'équilibre entre la densité électronique et le potentiel local. Elle indique notamment que les électrons sont attirés par les régions du plasma dont le potentiel est positif.

$$n_e(x) = n_e^0 \exp\left(\frac{e\phi(x)}{k_b T_e}\right)$$
(I-2.3)

Un raisonnement similaire peut être effectué pour les ions, avec l'indication qu'ils sont repoussés par les régions du plasma de potentiel positif, mais sa validité est limitée parce que le temps nécessaire pour que les ions atteignent l'équilibre est beaucoup plus important que pour les électrons, à cause d'une mobilité ionique beaucoup plus faible. Dans les plasmas employés en implantation ionique, les ions sont généralement considérés comme hors-équilibre.

$$n_i(x) = n_i^0 \exp\left(-\frac{e\phi(x)}{k_b T_i}\right)$$

#### 2.2.2 Longueur de Debye

En se basant sur la relation de Boltzmann, on comprend que l'introduction d'un potentiel local négatif équivaut à un excès local de charges négatives dans le plasma. Cette perturbation du potentiel tend à repousser les électrons situés à proximité et diminuer leur densité locale. Ceci induit la formation d'un champ électrique de charge d'espace selon la direction parallèle au gradient de densité électronique. La perturbation du potentiel va alors s'étendre jusqu'à ce que le champ de charge d'espace vienne la compenser. On peut alors employer l'équation de Poisson, qui relie la variation du potentiel à la densité de charge locale  $\rho = e(z_i n_i + z_e n_e)$ , pour déterminer sur quelle distance une telle perturbation peut se propager dans le plasma.

On considère un plasma mono-ion, homogène et électriquement neutre où le potentiel local est nul. L'introduction d'un potentiel  $\phi_1$  négatif en x=0 va repousser les électrons, alors que les ions sont considérés comme immobiles du fait de leur grande inertie. On obtient alors :

$$n_e^1 = n_e^0 \exp\left(\frac{e\phi_1}{k_b T_e}\right) ; n_i^1 = n_i^0 = n_e^0$$

$$\frac{d^2\phi_1}{dx^2} = -\frac{e}{\epsilon_0} \left[n_i^1 - n_e^1\right]$$

$$= -\frac{en_e^0}{\epsilon_0} \left[\left(\frac{e\phi_1}{k_b T_e}\right) - 1\right]$$
(I-2.4)

Si la perturbation de potentiel reste faible par rapport à l'énergie des électrons  $(e\phi_1 \ll k_bT_e)$  alors on peut linéariser l'expression précédente à l'aide d'un développement en séries de Taylor au premier ordre en  $e\phi_1/k_bT_e$  puis résoudre l'équation

pour x tendant vers l'infini.

$$\frac{d^2\phi}{dx^2} = -\frac{en_0}{\epsilon_0} \frac{e\phi_1}{k_b T_e}$$

$$\phi(x) = \phi_1 \exp\left(-\frac{x}{\lambda_{De}}\right)$$

$$\lambda_{De} = \sqrt{\frac{\epsilon_0 k_b T_e}{e^2 n_e^0}}$$
(I-2.5)

Le terme  $\lambda_{De}$  est appelée la longueur de Debye et correspond à la distance sur laquelle un changement significatif de la densité de charge peut spontanément exister. A des échelles très supérieures à cette longueur, le plasma paraîtra équipotentiel et donc électriquement neutre. Dans le cas où le plasma comporte plusieurs ions de densité et/ou de température différente, l'expression de la longueur de Debye peut être généralisée selon

$$\lambda_{Di} = \sqrt{\frac{\epsilon_0 k_b}{e^2} \left(\frac{n_e}{T_e} + \sum_{s \neq e} z_s^2 \frac{n_s}{T_s}\right)^{-1}}$$
(I-2.6)

Le concept de longueur de Debye a des implications directes sur l'introduction d'une surface solide en contact avec le plasma, comme les parois de l'enceinte sous vide dans laquelle il est généré. Si la surface possède un potentiel  $\phi_w$  inférieur au potentiel  $\phi_p$  dans le coeur du plasma, alors une zone de densité électronique réduite désignée sous le terme de gaine ionique va se former à proximité de la paroi. Les caractéristiques de cette gaine dépendent de l'écart entre ces deux potentiels :

- Si  $|\phi_w \phi_p| < k_b T_e/e$ , une partie des électrons va pouvoir atteindre la surface du fait d'une vitesse thermique suffisante pour surmonter la barrière de potentiel. La gaine a alors une épaisseur égale à quelques longueurs de Debye, tandis que la densité électronique locale est significativement réduite par rapport au plasma mais non nulle.
- − Si  $|\phi_w \phi_p| \gg k_b T_e/e$  (pour un substrat soumis à un potentiel d'implantation, par exemple) alors les électrons sont repoussés vers le plasma et la densité électronique dans la gaine peut être considérée comme nulle.

#### 2.2.3 Fréquences d'oscillation du plasma

Un autre aspect important du couplage entre la variation de la densité de charge et le champ électrique concerne l'échelle de temps minimale sur laquelle des perturbations peuvent se répercuter. On peut déterminer cette quantité via le modèle simple d'un bloc de plasma homogène et électriquement neutre ( $n_i = n_e = n_0$ ) où le champ électrique initial est nul et les ions immobiles. Si l'on déplace l'ensemble des électrons d'une distance infinitésimale  $\delta x$ , il se forme une densité de charge surfacique  $\rho_i^w$  sur le bord du plasma riche en ions avec une densité de charge égale et de signe opposé sur le bord opposé. Ce déséquilibre des charges va entrainer la formation d'un champ électrique axial qui exerce une force de rappel sur les électrons déplacés. On peut déduire le champ électrique via le théorème de Gauss

Puis appliquer le relation fondamentale de la dynamique aux électrons

$$F = -n_e eE ; a = \frac{\mathrm{d}v}{\mathrm{d}t} = \frac{\mathrm{d}^2 x}{\mathrm{d}t}$$
  

$$F = ma \Rightarrow -n_e eE = m_e n_e \frac{\mathrm{d}^2 \delta x}{\mathrm{d}t}$$
(I-2.8)

En substituant l'expression du champ électrique dans la relation fondamentale, on obtient une équation du second ordre dont la solution de type sinusoïdale indique que le nuage électronique va osciller autour de sa position d'équilibre. Cette solution est caractérisée par une fréquence angulaire  $\omega_{pe}$  appelée fréquence plasma électronique. On peut établir une expression similaire pour la fréquence électronique ionique, avec les densités et masses égales à celles de l'ion considéré.

$$\omega_{pe} = \sqrt{\frac{e^2 n_e}{\epsilon_0 m_e}} ; \ \omega_{pi} = \sqrt{\frac{e^2 n_i}{\epsilon_0 m_i}}$$
(I-2.9)

Ces fréquences plasma constituent le pendant temporel de la longueur de Debye, dans le sens où elles définissent les temps caractéristiques de réaction des composants du plasma aux perturbations du champ électrique local. Cela signifie que les électrons soumis à un potentiel négatif soudain vont mettre un temps  $t_{pe} = 1/\omega_{pe}$  pour réagir à ce potentiel. Par ailleurs, le rapport entre les fréquences électronique et ionique est égal à la racine du rapport des masses et peut atteindre 5 ordres de grandeur dans le cas de l'argon, ce qui justifie l'hypothèse d'immobilité des ions employée dans le calcul précédent.

### 2.3 Dépôt de puissance électrique

Le plasma généré dans un réacteur est maintenu allumé par l'injection de puissance électrique dans la décharge, qui peut être distribuée aux particules du plasma selon deux modes :

- le chauffage collisionnel ou ohmique repose sur une séquence continue d'accélération des électrons par le champ électrique externe suivie de la dissipation de leur énergie cinétique par collision avec les molécules avoisinantes.
- le chauffage non-collisionnel ou stochastique correspond à un transfert d'énergie vers les électrons du plasma du fait de leur interaction avec différents types de barrières de potentiel induites par le champ électromagnétique local.

L'injection de puissance est gouvernée par les équations de Maxwell macroscopiques, qui permettent de décrire les interactions entre les champs électromagnétiques générés et le plasma de décharge

$$\nabla \times \vec{E} = -\mu_0 \frac{\partial^2 \vec{B}}{dt^2}$$
 (théorème de Faraday) (I-2.10)  

$$\nabla \times \vec{B} = +\epsilon_0 \frac{\partial^2 \vec{E}}{dt^2} + \vec{J}$$
 (théorème d'Ampere) (I-2.11)  

$$\nabla \cdot \vec{E} = \frac{\rho}{\epsilon_0}$$
 (théorème de Gauss) (I-2.12)  

$$\nabla \cdot \vec{B} = 0$$
 (pas de monopole magnétique) (I-2.13)

$$\vec{B} = 0$$
 (pas de monopole magnétique) (I-2.13)

avec  $\vec{E}$ ,  $\vec{B}$ ,  $\vec{J}$  respectivement les vecteurs du champ électrique, du champ magnétique et de la densité de courant.

Pour le calcul de la puissance électrique absorbée par un plasma dans le mode de chauffage ohmique, deux cas de figures peuvent se présenter.

## Champ électrique constant

Un électron soumis à un champ électrique E invariant dans le temps va être accéléré par une force motrice  $F_{em} = -eE$  constante. Sa vitesse va croître jusqu'au point où la force de friction  $F_{col} = -v_{ge}m_ev_e$  (exercée par les collisions entre l'électron et les molécules du gaz précurseur et caractérisée par une fréquence de collision  $v_{ge}$ ) devient égale à la force motrice.

On peut alors caractériser le mouvement de l'électron sous la forme d'une équation de Langevin [Delcroix et Bers 1994] :

$$m_e \frac{\mathrm{d}v_e}{\mathrm{d}t} = +F_{em} - F_{col} = -eE - v_{ge}m_e v_e \tag{I-2.14}$$

En régime stationnaire, on peut en déduire que la vitesse de dérive électronique  $v_e$  est proportionnelle au champ électrique et dépend du coefficient de mobilité électronique  $\mu_e$ .

$$\frac{\mathrm{d}v_e}{\mathrm{d}t} = 0 \Rightarrow v_e = -\frac{e}{m_e v_{ge}} E = -\mu_e E \tag{I-2.15}$$

La puissance absorbée par l'électron à partir du champ électrique externe correspond simplement à l'énergie nécessaire pour le maintenir à une vitesse de dérive constante.

$$P_{abs}^{DC} = -v_e e E = \mu_e e E^2 = \frac{e^2}{m_e v_{ge}} E^2$$
 (I-2.16)

#### Champ électrique variable

Pour un champ électrique variable de nature sinusoïdale  $E(t) = E_0 \exp(j\omega t)$ et de fréquence  $f_{rf} = 2\pi\omega$ , on peut écrire l'équation (l-2.14) sous forme complexe et aboutir à un expression de la vitesse de dérive électronique dépendante du temps.

$$v_{e} = \frac{e}{m_{e}} \frac{E(t)}{\omega^{2} + v_{qe}^{2}} (v_{qe} - j\omega)$$
 (I-2.17)

La puissance complexe est la moyenne temporelle du produit du champ électrique par le courant  $J_e = ev_e$ . La moyenne d'une fonction sinusoïdale quant à elle se calcule aisément.

$$P_{cmpl} = \langle E(t)J_e \rangle = \langle eE(t)v_e \rangle = \langle E^2(t) \rangle \frac{e^2}{m_e} \frac{v_{qe} - j\omega}{\omega^2 + v_{qe}^2}$$

$$\langle E^2(t) \rangle = E_0^2 \langle e^{2j\omega t} \rangle = E_0^2 \frac{\omega}{2\pi} \int_0^{\frac{2\pi}{\omega}} e^{2j\omega t} dt = \frac{E_0^2}{2}$$
(I-2.18)

La puissance absorbée par le plasma correspond à la composante réelle de la puissance complexe, obtenue via le conjugué de la composante en  $\omega$  de  $P_{cmvl}$ .

$$P_{reel} = \mathbb{R} \langle P_{cmpl} \rangle = \mathbb{R} \left[ \frac{e^2}{m_e} \frac{E_0^2}{2} \frac{\nu_{qe} - j\omega}{\omega^2 + \nu_{qe}^2} \right] = \frac{E_0^2}{2} \frac{e^2}{m_e} \left( 1 + \frac{\omega^2}{\nu_{qe}^2} \right)^{-1}$$
(I-2.19)

On peut constater que la puissance absorbée diminue rapidement avec la fréquence d'excitation car les électrons ont une durée d'accélération de plus en plus réduite avant que le champ électrique ne s'inverse et ne force les particules à ralentir et changer de direction.

Les calculs précédents se basent sur l'hypothèse que la fréquence de collision électron-gaz est constante en fonction du temps et de l'énergie électronique. Dans le cas contraire, il faut intégrer l'expression précédente en fonction de l'énergie des électrons. La probabilité qu'un électron ayant l'énergie  $\varepsilon$  soit présent dans le plasma nous est donnée par la fonction de distribution en énergie des électrons  $f(\varepsilon)$ . On l'emploiera ici sous sa forme normalisée telle que  $\int f(\varepsilon)d\varepsilon = 1$ .

$$P_{abs}^{DC} = \frac{e^2 E^2}{m_e} \int_{\varepsilon} \frac{1}{\nu_{ge}(\varepsilon)} f(\varepsilon) d\varepsilon$$

$$P_{abs}^{RF} = \frac{e^2 E_0^2}{2m_e} \int_{\varepsilon} \frac{1}{\nu_{ge}(\varepsilon)} \frac{\nu_{ge}^2(\varepsilon)}{\omega^2 + \nu_{ge}^2(\varepsilon)} f(\varepsilon) d\varepsilon$$
(I-2.20)

# 3 Méthodes de génération du plasma

Plusieurs types de réacteur plasma pour l'implantation ionique ont été développés dans l'industrie électroniques et sont présentés en figure I.12. Deux configurations sont fréquemment utilisées :

- celle à source locale où le plasma est généré à l'intérieur de la chambre d'implantation par le champ électrique appliqué au substrat à implanter. Cette configuration permet de limiter la création d'espèces chimiques réactives pouvant endommager le substrat par gravure. Son principal inconvénient est que la densité du plasma au niveau du substrat est variable dans le temps, ce qui rend difficile l'obtention d'une dose implantée reproductible d'une expérience à l'autre.
- celle à source auxiliaire où la zone de génération du plasma est séparée de la chambre d'implantation, le plasma diffusant de l'une vers l'autre sous l'effet

des gradients de densité et des champs électriques présents. Cette configuration fournit une source d'ions permanente et réduit la variation temporelle de leur densité au niveau du substrat, car le plasma n'est pas éteint puis rallumé durant chaque période du pulse d'implantation. Le principal inconvénient est la possibilité de produire des espèces réactives qui vont graver les parois de la source plasma et contaminer le gaz diffusant vers le substrat avec des atomes issus des surfaces de l'enceinte sous vide.



FIGURE I.12 – Représentation schématisée de différents types de de réacteur plasma couramment employées dans l'industrie pour la fabrication de composants électroniques. Le substrat est en rouge, la zone de production du plasma en rose et les portions de l'enceinte en matériau diélectrique en jaune.

# 3.1 Couplage capacitif

Il s'agit d'une des méthodes de dépôt de puissance électrique les plus couramment employées. Le plasma est maintenu allumé par l'application d'une tension  $V_c$  atteignant plusieurs centaines de volts entre une paire d'électrodes séparées par une distance  $d_c$  et placées directement dans l'enceinte de décharge. La tension appliquée peut être continue ou alternative, tandis que le substrat est généralement positionné directement sur l'une des électrodes et peut recevoir une polarisation supplémentaire.

#### 3.1.1 Tension continue

Dans le cas d'une tension constante, la décharge est démarrée par l'accélération vers l'anode des électrons initialement présents sous l'effet du champ électrique  $E = V_c/d_c$  imposé entre les deux électrodes. Ces électrons vont gagner assez d'énergie pour ioniser les molécules du gaz, les ions positifs ainsi créés étant accélérés vers la cathode. L'impact de ces ions sur la surface de l'électrode va s'accompagner de l'émission d'électrons secondaires. Si le champ électrique est suffisamment important, les électrons secondaires vont à leur tour être accélérés vers l'anode et induire des phénomènes d'ionisation, permettant ainsi de maintenir la décharge allumée [Raether 1964]. L'ensemble de ces phénomènes sont schématisés dans la figure I.13.



FIGURE I.13 – Illustration schématique des phénomènes d'avalanche électronique et d'émission d'électrons secondaires entrant en jeu dans un décharge plasma à couplage capacitif.

Le maintien du plasma en régime stationnaire nécessite que l'énergie gagnée par les électrons du fait du champ électrique externe compense les pertes dues aux réactions d'ionisation et à la diffusion vers les électrodes et les parois. Les termes du bilan d'énergie  $P_{gain} - P_{diff} = 0$  peuvent s'exprimer comme

$$P_{gain} = 2\pi \int_{0}^{R} J(r) \cdot E \cdot r \, dr \; ; \; P_{diff} = 2\pi R \left[ -D_{i} \nabla n_{e} \right]_{R} E_{e-i}$$

$$J(r) = en_{e}(r)\mu_{e}(r)E \; ; \; I = 2\pi \int_{0}^{R} J(r)r \, dr \qquad (I-3.1)$$

où  $D_i$  est le coefficient de diffusion des ions dans le plasma,  $E_{e-i}$  est l'énergie nécessaire à la création d'une paire électron-ion dans la décharge, I le courant traversant l'espace inter-électrodes.

#### 3.1.2 Tension alternative

Dans le cas d'une tension alternative de forme  $V_c(t) = V_0 \cos \omega t$ , plusieurs régimes de fonctionnement sont possibles selon le rapport entre  $\omega$  et les fréquences plasmas électronique et ionique. Si  $\omega_{pi} \ll \omega \ll \omega_{pe}$ , ce qui est généralement les cas des décharges radio-fréquence lorsque  $\omega = 13.56$  mHz, alors seuls les électrons vont suivre les variations du champ électrique radio-fréquence. Les ions sont affectés par un champ effectif moyenné par rapport au champ électrique réel et sont sujets à des oscillations amorties.

Dans le cadre d'une excitation radio-fréquence, on peut considérer que les électrons oscillent autour de leur position d'origine avec une fréquence égale à celle de la tension alors que les ions restent pratiquement immobiles. Le comportement moyen du plasma sur une période conduit à distinguer deux régions dans la décharge : une zone centrale quasi-neutre et deux gaines ioniques au voisinage des électrodes dont l'épaisseur varie à la même fréquence que la tension. Le transfert d'énergie peut s'effectuer par chauffage ohmique, comme détaillé en section 2.3, ou par chauffage stochastique. Dans ce deuxième mode de chauffage, les électrons se dirigeant vers les électrodes peuvent être repoussés par une gaine en cours d'expansion et être renvoyés vers le plasma avec un surcroit d'énergie car le potentiel de gaine est généralement égal ou supérieur à l'énergie initiale des électrons [Raizer 1991].

Effectuer le bilan d'énergie sur la décharge dans le cas d'un plasma homogène permet d'obtenir l'expression de la puissance injectée selon chacun des deux modes de transfert

$$\bar{P}_{ohm} = \frac{I^2}{2} \frac{m_e \nu_{mt} d}{e^2 n_e} ; \ \bar{P}_{sto} = \frac{I^2}{2} \frac{m_e \bar{v}_e}{e^2 n_e} ; \ \bar{v}_e = \sqrt{\frac{8k_b T_e}{\pi m_e}}$$
(I-3.2)

avec I le courant imposé entre les électrodes et  $v_{mt}$  la fréquence des collisions de transfert de moment entre les électrons et les molécules du gaz.

Si l'on considère que l'épaisseur des gaines varie selon  $s(t) = \bar{s} + s_0 \sin \omega t$ , on peut en déduire l'évolution temporelle du potentiel de gaine  $\phi_s$ . La puissance reçue par les ions  $\bar{P}_i$  provient de leur accélération dans les gaines et dépend donc du potentiel de gaine. Comme les ions ne suivent qu'un champ effectif moyenné du fait que  $\omega_{pi} \ll \omega$ , la puissance qu'ils reçoivent est fonction de la moyenne temporelle de la chute de potentiel. On peut alors en déduire leur énergie cinétique et le flux ionique aux électrodes.

$$\begin{split} \phi_{s}(t) &= -\frac{e(n_{e}+n_{i})}{2\epsilon_{0}}s(t)^{2} ; s_{0} = \frac{I}{e(n_{e}+n_{i})\omega S} \\ \bar{P}_{i} &= 2en_{i}v_{i}^{B}\bar{\phi}_{s} = \frac{3}{2}v_{i}^{B}\frac{I^{2}}{\epsilon_{0}\omega^{2}S} \\ \bar{E}_{i} &= \frac{\bar{P}_{i}}{2\pi\omega} = \frac{m_{i}v_{i}^{2}}{2} \Rightarrow F_{i} = n_{i}\sqrt{\frac{\bar{P}_{i}}{\pi\omega m_{i}}} \end{split}$$
(I-3.3)

Cette relation met en lumière les principaux inconvénients du couplage capacitif, à savoir que l'énergie des ions  $E_i$  est liée à la densité électronique  $n_e$  via le potentiel de gaine et que le flux ionique à la surface ne peut être modifié indépendamment de l'énergie d'impact des ions. Ces deux faits rendent plus difficile le contrôle fin de l'implantation ionique. La densité électronique est typiquement limitée à un maximum de  $10^{10}cm^{-3}$ , pour obtenir un couplage d'énergie efficace et réduire la détérioration du matériau en cours d'implantation pour des ions énergétiques. Par ailleurs, le contact inévitable du plasma avec les électrodes entraînent des problèmes de contamination du gaz puis du substrat par des atomes arrachés aux électrodes.

### 3.2 Couplage inductif

Dans cette configuration, la source plasma de diamètre  $D_s$  et de longueur  $L_s$  comporte une paroi latérale constituée d'un matériau diélectrique comme le quartz et entourée par une bobine de forme hélicoïdale dans laquelle circule un courant alternatif, de fréquence  $f = 2\pi\omega$  généralement égale à 13,56 MHz. Ce dernier

provoque par influence mutuelle la formation dans le plasma d'un courant électronique azimutal  $I_{\theta}$  de sens opposé au courant de bobine. Dans le cas où la densité électronique est constante, le champ électrique azimutal  $E_{\theta}(\mathbf{r})$  possède une décroissance exponentielle depuis la paroi adjacente à la bobine et le couplage de la puissance injectée avec le plasma est concentré dans une couronne d'épaisseur  $\delta_p$  avec une densité de courant  $J_{\theta}$ . Ce résultat correspond à l'effet de peau qu'on rencontre dans les matériaux conducteurs solides soumis à un courant à haute fréquence.

$$\delta_p = \sqrt{\frac{m_e}{e^2 \mu_0 n_e}}; \ J_\theta = \frac{I_\theta}{2\pi r_s \delta_p} \tag{I-3.4}$$

La puissance absorbée par le plasma peut l'être par chauffage ohmique ou par chauffage stochastique. Ce deuxième mode de transfert d'énergie peut devenir significatif si la pression est suffisamment basse pour limiter la fréquence des collisions électrons-gaz. Il se manifeste lorsque des électrons présents dans le cœur du plasma diffusent radialement vers la couronne où ils entrent en contact avec le champ électrique azimutal. L'accélération des électrons par la barrière de potentiel mobile générée par le champ électrique oscillant conduit à un transfert d'énergie similaire à celui obtenu dans les gaines des décharges capacitives radio-fréquence, tel que détaillé en section 3.1.2.

On peut calculer la puissance stochastique de manière analogue à la puissance ohmique, en remplaçant la fréquence de collision électron-gaz  $v_{ge}$  par une fréquence stochastique  $v_{sto}$  dépendant de la fréquence du courant d'excitation.

$$P_{ohm} = \frac{I_{\theta}^2}{\sigma_{ohm}} L_s \; ; \; \sigma_{ohm} = \frac{e^2 n_e}{m_e \nu_{ge}}$$

$$P_{sto} = \frac{I_{\theta}^2}{\sigma_{sto}} L_s \; ; \; \sigma_{sto} = \frac{e^2 n_e}{m_e \nu_{sto}} \; ; \; \nu_{sto} \approx \frac{\bar{\nu}_e}{\delta_p} \left(\frac{2\bar{\nu}_e}{\omega\delta_p}\right)^{-\frac{1}{3}}$$
(I-3.5)

On peut ensuite relier la puissance totale absorbée au courant circulant dans la bobine radio-fréquence  $I_b$  en modélisant l'interaction entre bobine et plasma comme deux inductances inégales en influence mutuelle. Pour ce faire, on considère que la bobine entourant la source comporte  $N_b$  tours de diamètre  $D_b$  et de résistance totale  $R_b$ . On fait l'hypothèse que le transfert de puissance entre bobine et plasma est parfait et on modélise le plasma comme une bobine à 1 tour de diamètre  $D_s$  et de résistance  $R_p$ .

$$P_{tot} = \frac{R_b I_b^2}{2} = \frac{R_p I_{\theta}^2}{2} ; \ R_p = \frac{\pi D_s}{(\sigma_{ohm} + \sigma_{sto}) L_s \delta_p}$$
(I-3.6)

L'inductance mutuelle  $L_{bp}$  est reliée à l'inductance du plasma  $L_p$  de manière similaire à un transformateur élévateur de courant où l'enroulement primaire comporte  $N_b$  et l'enroulement secondaire 1 tour.

$$L_p = \frac{\mu_0 \pi D_s^2}{4L_s} ; \ L_{bp} = N_b L_p = \frac{\mu_0 N_b \pi D_s^2}{4L_s}$$
(I-3.7)

Les principaux avantages de cette méthode de génération plasma par rapport aux décharges capacitives sont des densités ioniques plus élevées, l'absence de contamination du plasma due au contact avec les électrodes et un contrôle indépendant de l'énergie des ions et de la densité électronique.

## 3.3 Couplage helicon

Un réacteur helicon comporte une antenne radio-fréquence résonnante (fonctionnant en général à une fréquence de 13,56 MHz) entourant l'enceinte en quartz de la source et un électroaimant générant un champ magnétique axial quasiuniforme de l'ordre de 100 gauss. Une telle configuration permet de générer une onde électromagnétique à basse fréquence de type "siffleur" (ainsi dénommé parce que la propagation de ce type d'onde dans la magnétosphère terrestre explique certains parasites radio-électriques sifflants) qui se propage relativement lentement dans le plasma. Le chauffage du plasma s'accomplit par amortissement de l'onde RF via la capture de son énergie par les électrons du plasma [Kinder 2001].

Une onde hélicon est caractérisée par une fréquence angulaire  $\omega$  (inférieure à la fréquence cyclotronique électronique  $\omega_{ce} = eB_0/m_e$ ) et par un vecteur d'onde k (inverse de la longueur d'onde du mode hélicon correspondant) comportant une composante axiale  $k_z$  et une composante  $k_{\perp}$  orthogonale au champ magnétique. Les relations entre vecteur d'onde et fréquence sont données par les expressions suivantes [Boswell 1970].

$$\frac{kk_z}{k_0^2} = \frac{\omega_{pe}^2}{\omega\omega_{ce}} ; \ k_z = \frac{e\mu_0 n_e \omega}{kB_0} ; \ k_0 = \frac{\omega}{c} ; \ k = \sqrt{k_\perp^2 + k_z^2}$$
(I-3.8)

Le couplage de puissance est optimal si  $k_z \approx k_{\perp}$  et que la longueur de l'antenne excitatrice  $L_a$  est un multiple du vecteur d'onde axial, selon  $L_a = 2\pi(2i+1)k_z^{-1}$ . Dimensionner une source hélicon nécessite donc d'optimiser à la fois les dimensions de l'antenne qui dépendent de  $k_z$ , la valeur du champ magnétique qui influence  $k_z$ et  $\omega_{ce}$ , et la puissance injectée qui influence  $n_e$  et  $\omega_{pe}$ .

L'intérêt de ce mode de chauffage est la faible valeur du champ magnétique requis et l'emploi de générateurs radio-fréquences plutôt que micro-ondes. Les densités électroniques obtenues varient de  $10^{12}cm^{-3}$  jusqu'à  $10^{14}cm^{-3}$  dans certaines conditions. Le caractère résonant de l'antenne conduit cependant à des variations brutales de la densité du plasma en fonction des paramètres d'opération du réacteur, ce qui en réduit la polyvalence.

### 3.4 Couplage ECR

Le chauffage par résonance cyclotron électronique (Electron Cyclotron Resonance en anglais) repose sur la conjonction d'un champ magnétique axial  $B_0$  et de l'envoi de micro-ondes de fréquence  $\omega_{mw}$  sur une fenêtre en matériau diélectrique surmontant la source. Cette combinaison permet de générer dans la source une onde électromagnétique à polarisation circulaire droite. Si le champ magnétique est uniforme, les électrons présents dans le gaz sont soumis uniquement à la force de Lorentz  $F_L$  qui leur imprime une accélération perpendiculaire au plan ( $\vec{v_e}, \vec{B}$ ) et aboutit à un mouvement circulaire uniforme, caractérisé par un rayon de giration  $r_{ce}$  et une fréquence cyclotronique  $\omega_{ce}$ .

$$F_L = -e(\vec{v_e} \times \vec{B}) = -ev_e^{\perp}B_0 \; ; \; r_{ce} = \frac{m_e v_e^{\perp}}{eB_0} \; ; \; \omega_{ce} = \frac{eB_0}{m_e} \tag{I-3.9}$$

Si la fréquence micro-onde est proche de la fréquence cyclotronique, alors les électrons présents ont un mouvement en phase avec l'onde polarisée circulaire et sont soumis à un champ électrique azimutale stable durant plusieurs périodes de giration. Le résultat net est une accélération progressive sur une durée suffisante pour arriver à l'énergie d'ionisation du gaz. La puissance électromagnétique ainsi transférée est ensuite dissipée par collisions avec les molécules du gaz précurseur et permet d'amorcer la décharge. Comme les collisions ne doivent pas être trop fréquentes pour permettre aux électrons d'effectuer plusieurs révolutions et de gagner une énergie significative, les décharges ECR sont opérées à des pressions relativement basses de l'ordre du 0,1 Pa.

La puissance gagnée par l'électron dépend de sa vitesse et de la valeur du champ électrique de l'onde circulaire selon

$$P_{ECR} = \frac{en_e E_0^2}{2m_e v_e} \frac{v_e^2}{(\omega_{mw} - \omega_{ce})^2 + v_e^2}$$
(I-3.10)

on constate que le transfert d'énergie est optimal lorsque  $\omega_{mw} = \omega_{ce}$ , ce qui indique un phénomène de résonance dont la fréquence dépend du champ magnétique. Le domaine de résonance le plus fréquemment employé dans l'industrie correspond à une fréquence micro-onde de 2,45 GHz et un champ magnétique de 875 gauss.

Une propriété intéressante du chauffage ECR est la possibilité d'accélérer les ions créés dans la source vers la chambre d'implantation si le champ magnétique axial n'est pas constant. En effet :

- La conservation du flux magnétique ( $A_{src}B_{src} = A_{sub}B_{sub}$ ) implique qu'une divergence du champ magnétique en sortie de source conduit à la diminution de sa valeur au niveau du substrat.
- La conservation du moment magnétique  $\mu = E_e^{\perp} / B$  implique que la composante de l'énergie électronique perpendiculaire à  $\vec{B}$  diminue lorsque le champ magnétique fait de même.
- La conservation de l'énergie totale  $E_{tot} = E_e^{\parallel} + E_e^{\perp} + E_i^{\parallel} + E_i^{\perp}$  implique que l'énergie perdue par les électrons doit être transférée sur d'autres modes énergétiques.

Le résultat final est un transfert d'énergie depuis la composante électronique perpendiculaire au champ  $E_e^{\perp}$  vers la composante ionique parallèle au champ  $E_i^{\parallel}$ . Ce transfert est proportionnel au rapport des champs magnétiques entre la source et la chambre, ce qui conduit à fortement accélérer les ions vers le substrat.

$$E_i^{\parallel}(sub) = E_e^{\perp}(src) \left(1 - \frac{B_{sub}}{B_{src}}\right) = \mu_{src} B_{src} \left(1 - \frac{B_{sub}}{B_{src}}\right)$$
(I-3.11)

Ce mode de chauffage permet d'obtenir des densités électroniques élevées sans recours à une cavité ou une antenne résonnante, ainsi que de contrôler l'énergie des ions et leur flux vers le substrat en fonction du champ magnétique axial. La nécessité de générer un champ magnétique intense et d'employer des générateurs micro-ondes, plus complexes que les appareillages radio-fréquences utilisés par le chauffage inductif, limite cependant le domaine d'application de cette méthode.
## 4 SIMULATION NUMÉRIQUE DES PLASMAS

La modélisation numérique des réacteurs plasma possède plusieurs points d'intérêt une fois que les paramètres clés du modèle (températures, densités...) ont été validés par comparaison avec les résultats physiques, notamment la possibilité d'estimer des grandeurs caractéristiques importantes de la décharge difficilement accessibles de manière expérimentale. En effet, l'introduction d'outils de diagnostic dans un réacteur plasma est une entreprise délicate et coûteuse qui peut perturber la génération du plasma. Pour la même raison, le nombre de points de mesure simultanés est limité et la création de profils de variations spatiales des caractéristiques plasma nécessite de nombreuses expériences consécutives.

Un modèle plasma peut être défini de manière générale par deux facteurs : l'approche choisie pour le traitement des équations mathématiques décrivant le plasma et le nombre de dimensions physiques sur lesquelles elles sont résolues (cf. figure I.14).



FIGURE I.14 – Représentation schématisée de modèles à éléments finis comportant 0, 1 ou 2 dimensions spatiales. Un modèle od (dit aussi homogène ou global) considère que les grandeurs du plasma sont uniformes dans tout l'espace de simulation, ce qui rend le calcul bien plus rapide qu'à 1 ou 2 dimensions mais déteriore la précision des résultats et leur caractère prédictif.

## 4.1 Principes de base

Deux types de traitement seront détaillés dans les sections suivantes, chacun comportant ses avantages et inconvénients :

 L'approche particulaire représente le gaz comme un milieu discret constitué d'un très grand nombre de particules et calcule l'évolution dans le temps de la position et de la vitesse de chaque particule. Elle suit de près la physique réelle du plasma et est donc très puissante pour décrire les décharges pour lesquelles des simplifications sont difficiles à appliquer, comme celles à basse pression ou hors de l'équilibre thermodynamique. La demande en puissance de calcul est cependant très élevée à cause du grand nombre de particules nécessaire pour obtenir une précision raisonnable des résultats dans l'espace et le temps.

2. L'approche fluide décrit les espèces du plasma à partir de leurs propriétés moyennes plutôt qu'à partir de particules individuelles, et s'appuie sur des équations de conservation hydrodynamiques pour traiter l'évolution de la décharge. Il en résulte un côut en puissance de calcul beaucoup plus faible qu'avec une approche particulaire, mais les hypothèses et simplifications nécessaires pour obtenir les équations de conservation limitent le domaine de validité de la méthode.

Un modèle peut avantageusement combiner les approches fluides et particulaires pour contourner les limitations de chacune et/ou adapter la simulation aux caractéristiques particulières de la décharge. La choix entre les approches peut se faire sur des critères spatiaux (une zone à basse pression et/ou fort champ électrique est traité en mode particulaire alors qu'une zone avec un faible champ électrique ou une diffusion de type ambipolaire sera traité en mode fluide) ou bien physicochimiques (les électrons rapides sont traités comme des particules tandis que les électrons lents et les ions sont considérés comme des fluides).

Chaque approche possède un domaine de validité limité dans l'espace des paramètres plasma, du fait des hypothèses simplificatrices qui sont employées pour sa construction. On peut déterminer si une approche est adéquate pour une simulation donnée en se basant sur des critères a-dimensionnels, comme le nombre de Knudsen  $K_n = \lambda_i / L_{\nabla n}$ . Pour donner un exemple, l'approche fluide perd de sa validité lorsque  $K_n > 0, 1$  [Bird 1976] pour plusieurs raisons :

- Un libre parcours moyen élevé à basse pression et faible densité du plasma.
- Des variations très localisés de la densité du plasma dues à l'importance des réactions d'ionisation et de recombinaison.
- Des variations importantes des grandeurs physiques du milieu, comme les champs électriques et magnétiques.

## 4.2 Equation de Boltzmann

L'équation de Boltzmann, qui sera développée dans cette section, constitue la base de toute description mathématique d'un plasma et ce qu'elle soit particulaire ou fluide.

Afin de déterminer la variation des paramètres pertinents pour décrire la décharge, on considère un volume de plasma tridimensionnel dans lequel interagissent des particules caractérisées par un vecteur position  $\vec{r}$  et un vecteur vitesse  $\vec{v}$ . Cela revient à décrire le plasma dans un espace des phases à 6 dimensions ( $\vec{r}, \vec{v}$ ) qui contient l'ensemble des composantes des deux vecteurs pour chaque particule. Un volume élémentaire dans cet espace vaut  $dV = d^3rd^3v$  et le nombre de particules présentes dans le volume élémentaire à un instant t est égal à  $dN = f(\vec{r}, \vec{v}, t) dV$ .

f est appelée la fonction de distribution des particules et correspond à la probabilité qu'une particule se trouvant dans le volume élémentaire de coordonnées ( $\vec{r}, \vec{v}$ ) soit présente à l'instant t dans le plasma. Le nombre de particules N(r,t) partageant le même intervalle de position [ $r; r + d^3r$ ] - quelque soit leur vitesse - est obtenue par intégration de la fonction de distribution.

$$N(r,t) = \int_{v} d^{3}\vec{v} f(\vec{r},\vec{v},t)$$
 (I-4.1)

Afin de déterminer l'évolution de la fonction de distribution en fonction du temps, on se base sur plusieurs hypothèses :

- La densité du plasma est suffisamment faible pour que seules des collisions à deux corps puissent avoir lieu.
- Les interactions entre particules sont considérées comme quasi-instantanées, ce qui est justifié si la durée d'une collision  $t_{coll}$  (calculée selon le modèle des sphères dures) est largement inférieure au temps de vol de la particule incidente  $t_{vol}$ .

$$t_{coll} \approx \frac{d_B}{v_A}$$
;  $t_{vol} = \frac{\lambda_A}{v_A} \Rightarrow \frac{t_{coll}}{t_{vol}} = \frac{d_B}{\lambda_A}$  (I-4.2)

Dans les conditions du réacteur simulé, la dimension de la molécule cible  $d_B = d_{BF_3}$  est égale à 121 pm tandis que le libre parcours moyen  $\lambda_A$  vaut 0,5 à 5 cm, ce qui induit que  $t_{coll}/t_{vol} \approx 10^{-13}$ .

 Les variations spatiales et temporelles de la fonction de distribution sont lentes par rapport aux phénomènes physiques rencontrés dans le plasma.

Compte tenu de la conservation des particules, on peut déterminer l'évolution de f par un bilan sur les flux de particules traversant les faces du volume élémentaire, avec le flux dans l'espaces des positions égal à  $\vec{v}f$  et celui dans l'espace des vitesses égal à  $\vec{a}f$  où  $a(\vec{r}, \vec{v}, t)$  est l'accélération d'une particule.

$$\int_{V} \Delta(f \cdot \vec{v}) = \left( \int_{S_r} \vec{v} f \, \mathrm{d}\vec{s} + \int_{S_v} \vec{a} f \, \mathrm{d}\vec{v} \right) \Delta t \tag{I-4.3}$$

En employant le théorème de la divergence, il est possible d'appliquer le bilan sur le volume élémentaire en lui-même et de séparer les contributions spatiales et cinétiques.

$$\int_{S} \vec{X} \cdot d\vec{s} = \int_{dV} \nabla \cdot \vec{X} dV$$
$$\int_{V} \Delta(f \cdot \vec{v}) = \left( \int_{V_{r}} div(\vec{v}f) \, dV + \int_{V_{v}} div(\vec{a}f) \, dV \right) \Delta t \qquad (I-4.4)$$
$$= \Delta t \int_{V} \nabla_{r}(\vec{v}f) + \nabla_{v}(\vec{a}f) \, dV$$

On introduit pour ce faire les opérateurs de divergence  $\nabla_r$  et  $\nabla_v$  en rapport respectivement aux vecteurs position et vitesse.

$$\nabla_r = \vec{x}\frac{\partial}{\partial x} + \vec{y}\frac{\partial}{\partial y} + \vec{z}\frac{\partial}{\partial z}; \ \nabla_v = \vec{v_x}\frac{\partial}{\partial v_x} + \vec{v_y}\frac{\partial}{\partial v_y} + \vec{v_z}\frac{\partial}{\partial v_z}$$

Prendre en compte le terme de collision et retirer dV - car il s'agit d'un volume élémentaire qui ne modifie pas significativement le résultat de l'intégration - permet d'obtenir une première expression de l'évolution temporelle de la fonction de distribution des particules.

$$\frac{\Delta f}{\Delta t} = \frac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}t} = \nabla_r(\vec{v}f) + \nabla_v(\vec{a}f) + \left.\frac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}t}\right|_{col} \tag{I-4.5}$$

Pour expliciter le terme liés aux forces macroscopiques, on recourt à la relation fondamentale de la dynamique  $\vec{F} = m\vec{a}$  puis on emploie l'identité remarquable du produit vectoriel pour isoler la fonction de distribution.

$$\nabla \cdot (g\vec{x}) = \nabla g \cdot \vec{x} + g\nabla \cdot \vec{x} \Rightarrow \nabla_v \cdot \left(\frac{\vec{F}}{m}f\right) = \frac{\vec{F}}{m} \cdot \nabla_v f \qquad (I-4.6)$$

On obtient alors l'expression finale de l'**équation de Boltzmann** qui décrit l'évolution de la fonction de distribution des particules composant le plasma en fonction du transport des espèces, des forces macroscopiques s'exerçant sur elles et des collisions qu'elles subissent.

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \vec{v} \cdot \nabla_r(f) + \frac{\vec{F}}{m} \cdot \nabla_v(f) = \left. \frac{\partial f}{\partial t} \right|_{coll} \tag{I-4.7}$$

## 4.3 Approche PIC-MC

Ce type d'approche repose sur le calcul direct de la fonction de distribution des particules composant le plasma à partir des relations fondamentales de la dynamique. Il combine le traitement particulaire (Particle-In-Cell ou PIC en anglais) des propriétés locales du plasma avec l'emploi de la méthode Monte-Carlo pour le traitement des collisions et de la modification du vecteur vitesse des particules qui en résulte [Turner 2006].

#### 4.3.1 Méthode Particle-In-Cell

La méthode PIC consiste à représenter le plasma sous la forme d'un grand nombre de particules numériques ou macro-particules, chacune correspondant à un ensemble d'ions/électrons/neutres réels et définie par ses vecteurs vitesse et position dans l'espace des phases. Ces macro-particules sont placées dans les différentes cellules du maillage correspondant à l'espace simulé [Birdsall et Langdon 1985] puis la fonction de distribution associée est évaluée en fonction du temps.

La densité en nombre des particules réelles  $n_s^c$  pour l'espèce s dans la cellule c est reliée au nombre de macro-particules correspondantes selon  $n_s^c = \alpha_s^c N_s^c / V_c$  où  $\alpha_s^c$  est le poids numérique pour l'espèce s et  $V_c$  le volume de la cellule.

Pour chaque pas de temps  $\Delta t$  et dans chaque cellule du maillage (indice c), on calcule successivement :

1. le déplacement des particules chargées sous l'action du champ électrique local  $E_c$  via l'équation de Newton, afin d'obtenir leur position  $x_i$  et vitesse  $v_i$ 

$$m_i \frac{\mathrm{d}v_i}{\mathrm{d}t} = q_i E_c \; ; \; v_i = \frac{\mathrm{d}x_i}{\mathrm{d}t} \tag{I-4.8}$$

2. la densité de charge locale  $\rho_c$  à partir de la position des particules  $x_i$ 

$$\rho_c = \sum_{i}^{N_{tot}^c} z_i n_i^c \frac{|x_i - x_c|}{\Delta x}$$
(I-4.9)

3. le champ électrique local  $E_c$  à partir de la densité de charge locale  $\rho_c$  via l'équation de Poisson

$$\frac{\mathrm{d}^2\phi}{\mathrm{d}x^2} = -\frac{\rho_c}{\epsilon_0} ; \ E_c = \frac{\mathrm{d}\phi}{\mathrm{d}x} \tag{I-4.10}$$

On peut ainsi suivre l'évolution des macro-particules dans l'espace et le temps en fonction du champ électrique généré de manière auto-cohérente [Hockney et Eastwood 1988].

#### 4.3.2 Méthode Monte-Carlo

La méthode Monte-Carlo, dont le nom est dérivé des casinos de Monaco, simule la nature stochastique des collisions entre particules via le tirage de nombres aléatoires et l'emploi d'outils statistiques. Elle est utilisée pour déterminer la probabilité d'occurrence des différents réactions chimiques issues des collisions et leur conséquences sur la dynamique des particules via la modification de leur vecteur vitesse [Kushner 1983]. Une hypothèse centrale de cette méthode est que les nombres aléatoires obtenus ont une distribution de probabilité uniforme dans l'intervalle [0,1].

On considère ici que le mouvement des particules est une succession de trajectoires rectilignes en vol libre (déterminées par l'équation de Newton) interrompues par des collisions donnant lieu à des réactions entre particules. Chaque type r de réaction possible est associée à un fréquence de collision  $v_r(t)$  dérivée de sa section efficace. Trois étapes sont réalisées successivement dans la détermination du nouveau vecteur vitesse des particules :

1. On détermine tout d'abord le temps de vol d'une particules entre deux collisions  $t_v$ , qui dépend de la variable aléatoire  $\eta_v$  et de la somme des fréquences de collisions pour les réactions possibles. Si  $t_v < \Delta t$  alors une collision a lieu durant le pas de temps courant.

Afin de s'assurer que le temps de vol possède une densité de probabilité qui suive une loi uniforme dans l'intervalle  $[0; \Delta t]$ , il est nécessaire que la fréquence de collision totale  $v_{tot}$  soit constante selon l'énergie et le temps. Ceci est rendu possible par l'usage du concept de collision nulle, une réaction qui ne modifie pas le vecteur vitesse mais dont la fréquence est telle que la somme des fréquences de réactions est constante.

$$t_{v} = \frac{\ln(\eta_{v})}{\nu_{tot}} ; \ \nu_{tot} = \sum_{r} \nu_{r}(\varepsilon) + \nu_{nulle}(\varepsilon) = cte \qquad (I-4.11)$$

2. Pour déterminer le type de réaction réalisée en cas de collision, on définit une étendue de réaction  $I_r$  comprise dans l'intervalle [0,1] qui correspond à la probabilité d'occurrence de la réaction r : si la variable aléatoire  $\eta_r \in I_r$  alors la réaction de type r se produit.

$$I_r = \left[\frac{\nu_{r-1}}{\nu_{tot}}, \frac{\nu_r}{\nu_{tot}}\right]$$
(I-4.12)

3. Enfin on modifie le vecteur vitesse de la particule incidente après collision. La variation de l'amplitude du vecteur est liée à l'énergie de la particule incidente après collision  $E_i^{t+t_v}$  qui dépend du type de réaction subie. Les angles

 $\alpha^x$  entre le vecteur vitesse et les axes de la base dans laquelle le modèle est représenté sont déterminés par les variables aléatoires  $\eta^x_a$ .

Dans le cas ci-dessous, la base utilisée est cylindrique  $(\vec{r}, \vec{\theta}, \vec{z})$  et  $\alpha^z$  représente l'angle entre le vecteur vitesse et l'axe z dans le plan  $\vec{r}\vec{z}$  tandis que  $\alpha^{\theta}$  correspond à l'angle entre le vecteur vitesse et l'axe r dans le plan  $\vec{r}\vec{\theta}$ .

$$\vec{v}_i^{fin} = \sqrt{\frac{2E_i^{t+t_v}}{m_i}} \left( \cos(\alpha^z) \vec{z} + \cos(\alpha^\theta) \vec{r} \right)$$

$$\alpha^z = \pi (1 - 2\eta_a^r) ; \ \alpha^\theta = 2\pi \sqrt{1 - \eta_a^{\theta^2}}$$
(I-4.13)

La figure I.15 récapitule le fonctionnement d'un modèle particulaire basé sur les méthodes PIC et Monte-Carlo.



FIGURE I.15 – Organigramme de l'algorithme associé à l'approche particulaire, illustrant le couplage entre les méthodes PIC et Monte-Carlo.

## 4.4 Approche fluide

L'approche fluide comme son nom l'indique assimile le plasma à un fluide réactif, contenant des charges mais électriquement neutre en général, dont les propriétés varient de manière continue dans l'espace. Les équations sous-jacentes sont dérivées de l'équation de Boltzmann, mais décrivent les espèces présentes dans la décharge à partir de leurs quantités propriétés moyennes macroscopiques plutôt que depuis les quantités microscopiques attachées à chaque particule individuelle. Ceci permet de réduire considérablement la complexité des calculs par rapport à la méthode PIC-MC.

Ce type de description est utile pour un plasma relativement dense (moyennehaute pression) et proche de l'équilibre thermique local, mais perd en validité lorsque l'abondance de certaines espèces devient très faible ou en présence de forts gradients de densités. Il est alors plus approprié d'employer des méthodes particulaires, détaillées en section 4.3, pour décrire le plasma.

#### 4.4.1 Equations de conservation

Obtenir les quantités macroscopiques pertinentes pour une espèce (densité, vitesse, énergie cinétique) repose sur le calcul des moments de l'équation de Boltzmann, telle que développée dans la section 4.2. Un moment d'ordre k se définit ici comme la moyenne dans l'espace des vitesses du produit  $f_s A_s$ , où la grandeur  $A_s$  est une fonction d'ordre k du vecteur vitesse.

$$A_s(\vec{r},\vec{v},t) = m_s \frac{\vec{v}^k}{k} \tag{I-4.14}$$

L'évolution temporelle de la grandeur A peut alors être calculée à partir de la fonction de distribution en vitesse des particules de l'espèce en question.

$$\int \left(\frac{\partial f_s}{\partial t} + \vec{v} \cdot \vec{\nabla} f_s + \frac{\vec{F}}{m_s} \cdot \frac{\partial f_s}{\partial \vec{v}}\right) \cdot A_s \mathrm{d}v = -\int A_s \cdot \left(\frac{\partial f_s}{\partial t}\right)_{coll} \mathrm{d}v \qquad (\text{I-4.15})$$

On peut ensuite simplifier l'expression en fonction de la valeur moyenne de la grandeur  $\bar{A}_s = \frac{1}{n_s} \int A_s f dv$ .

$$\frac{\partial(n\bar{A}_s)}{\partial t} - n_s \frac{\partial \bar{A}_s}{\partial t} + \nabla \cdot n_s \vec{v} \cdot \nabla \bar{A}_s - n_s \frac{\vec{F}}{m_s} \cdot \frac{\partial \bar{A}_s}{\partial \vec{v}} = -\int A_s \cdot \left(\frac{\partial f_s}{\partial t}\right)_{coll} dv \quad (I-4.16)$$

Étant donné que la description mathématique d'un plasma repose sur le principe que les quantités physiques macroscopiques sont conservées, la démarche de calcul des moments est équivalente à la réalisation d'un bilan de conservation sur la quantité étudiée au niveau d'un volume de plasma, en prenant en compte les différents mécanismes de gain ou de perte pour cette quantité. Trois systèmes d'équations sont principalement employés pour décrire le plasma, chacun basé sur une moment différent intervenant dans l'intégration sur l'espace des vitesses :

#### Conservation de la matière

Il s'agit d'une équation basée sur un moment d'ordre o en vitesse ( $A_s(\vec{r}, \vec{v}, t) =$  1) qui permet d'obtenir la variation de la densité en nombre  $n_s$  en fonction de la vitesse de l'espèce *s* et des réactions chimiques en volume.

$$\frac{\partial n_s}{\partial t} + \nabla \cdot (\underbrace{n_s \vec{v_s}}_{1}) = + \underbrace{W_s^{prod}}_{2} - \underbrace{W_s^{cons}}_{3}$$
(I-4.17)

- 1. densité du flux de diffusion
- 2. terme source de production
- 3. terme source de consommation

#### Conservation de la quantité de moment

Ce bilan est obtenu à partir d'un moment d'ordre 1 en vitesse  $(A_s(r,t) = m_s \vec{v}^1)$  qui permet d'estimer la vitesse moyenne  $v_s$  en fonction des processus de convection, des forces électromagnétiques extérieures, du gradient de pression et des collisions.

$$\frac{\frac{1}{\nu_{mt}}\frac{\partial v_s}{\partial t}}{1} + \frac{\frac{v_s}{\nu_{mt}}\frac{\partial v_s}{\partial x}}{2} + \underbrace{\frac{v_s}{\nu_{mt}}\frac{\sum \nu_k}{3}}_{3} + \underbrace{\frac{v_t^2}{3\nu_{mt}n_s\varepsilon_s}\frac{\partial n_s\varepsilon_s}{\partial x}}_{4} - \underbrace{\frac{q_s}{m_s}E}_{5} = \underbrace{-\nu_{mt}v_s}_{6}$$
(I-4.18)

1. variation temporelle de la quantité de mouvement

- 2. terme inertiel (ou de transport convectif)
- impact des collisions (de fréquence v<sub>k</sub> pour la réaction d'indice k) sur la vitesse moyenne
- 4. terme de diffusion
- 5. force exercée par le champ électrique local
- 6. pertes dues au forces de friction

#### Conservation de l'énergie cinétique

Il s'agit d'une équation provenant du moment d'ordre 2 en vitesse ( $A_s(r,t) = 1/2m_s \vec{v}^2$ ) qui permet d'obtenir l'énergie particulaire  $\varepsilon_s$  à partir des flux d'énergie thermique, de la variation de la pression et de l'effet des collisions non élastiques. Dans le cas des électrons et si leur énergie thermique est largement supérieure à l'énergie des autres particules, on peut écrire l'équation de conservation sous la forme :

$$\frac{\partial n_e \varepsilon_e}{\partial t} = -\nabla \vec{\phi_e} - \underbrace{q_e \vec{\phi_e} \cdot \vec{E}}_{1} - \underbrace{W_{\varepsilon}}_{2}$$

$$\vec{\phi_{\varepsilon}} = \underbrace{n_e \vec{v_e} \varepsilon_e}_{3} + \underbrace{\vec{v_e} P_e}_{4} - \underbrace{\lambda_e \vec{\nabla} \varepsilon_e}_{5}$$
(I-4.19)

- 1. puissance RF absorbée
- 2. terme de collision
- 3. flux thermique de diffusion
- 4. terme de compressibilité
- 5. flux thermique de conduction

On constate que les équations de conservation sont développées en cascade : la densité  $n_s$  est obtenue à partir de la vitesse  $v_s$  via le bilan sur la matière,  $v_s$  à partir de  $\varepsilon_s$  via le bilan sur la quantité de mouvement, et ainsi de suite. Il nous faut donc une équation supplémentaire dite de fermeture, qui relie ces différentes grandeurs aux paramètres globaux du plasma, afin de rendre le système déterminable. On peut se baser sur la loi des gaz parfaits pour écrire cette équation :

$$P_s = n_s k_b T_s \; ; \; \varepsilon_s = \frac{3}{2} k_b T_s \tag{I-4.20}$$

## 4.5 Stratégie de modélisation du réacteur IBS

La géométrie complexe du réacteur à simuler, présentée en section 1.4, rend sa modélisation d'un seul tenant difficile, sans compter la raideur spatiotemporelle du système d'équations nécessaires pour le représenter : les temps caractéristiques s'échelonnent entre la nanoseconde (collisions électron-lourd) et la seconde (diffusion) tandis que les gradients de température et de densité peuvent être considérables au niveau des parois et presque nulles dans le cœur du plasma.

En examinant les différentes sections du réacteur, on peut déterminer le type de modèle le plus adapté pour chacune.

– Dans la section haute pression de la source plasma, on s'attend à une densité électronique de l'ordre de  $10^{+11} - 10^{+12} cm^{-3}$  et une pression entre 1 et 10 Pa. Il en découle une longueur de Debye inférieure au millimètre et un libre parcours moyen largement inférieur aux dimensions de la section. Le caractère électriquement neutre du plasma et la non résolution des gaines rend difficile d'employer une approche particulaire, car la longueur de Debye dimensionne la taille des cellules du modèle et rend le calcul excessivement lent en cas de faibles longueurs de gaine. Le plasma est de plus isolé du champ électrique issu de la polarisation du substrat par une plaque de séparation en quartz, ce qui conduit à un champ local quasi-nul et rend singulière l'équation de Poisson centrale à tout modèle PIC.

Il est préférable d'employer ici l'approche fluide dans sa variante ambipolaire.

– Dans la section basse pression de la source plasma, la perte de charge au travers de la plaque de séparation entraîne une chute de pression jusqu'à atteindre 0,1-1Pa. Il en découle une densité électronique d'environ 10<sup>+11</sup>cm<sup>-3</sup>, une longueur de Debye d'environ 1-5 mm et un libre parcours moyen d'environ 5 mm. Comme cette section de la source est connectée directement à la chambre d'implantation, un champ électrique local non négligeable peut être présent si la polarisation du substrat est suffisamment élevée pour que la gaine ionique formée au niveau du substrat atteigne la source.

*L'emploi d'une approche fluide, potentiellement sous sa forme de dérive-diffusion si le champ électrique est important, se justifie dans ces conditions.* 

– Dans la chambre d'implantation, la divergence du champ magnétique en sortie de la source induit une chute notable de la densité jusqu'à obtenir des valeurs de l'ordre de  $10^{+8} - 10^{+9} cm^{-3}$ . La polarisation du substrat entraîne une augmentation notable de la longueur de la gaine d'accélération, qui peut atteindre 10 cm et représenter une fraction non-négligeable du volume de la chambre. Du fait de la disposition de la bobine excitatrice, il n'y a probablement que peu ou pas de puissance électrique déposée hors de la source, ce qui signifie que la composition locale du plasma devrait être quasi-constante tant que la fréquence des collisions reste modérée.

L'ensemble des ces facteurs rendent apparemment délicat l'emploi d'un modèle fluide dans la chambre. Une approche particulaire, potentiellement en mode non-collisionnel si la longueur de gaine devient comparable au libre parcours moyen, est préférable dans cette section du réacteur.

Compte tenu de ces observations, une stratégie de simulation en deux étapes a donc été adoptée :

- Tout d'abord, un modèle quasi-homogène des deux portions de la source plasma est construit afin de déterminer l'évolution temporelle de la composition du plasma en fonction de la puissance radio-fréquence injectée. Pour ce faire, un modèle de chimie élaboré est nécessaire pour obtenir la contribution de chaque réaction dans le total de la cinétique de décomposition en fonction de la température électronique. Cette étude sera présentée dans le chapitre II.
- 2. Ensuite un modèle unidimensionnel de la chambre d'implantation, de type PIC-MC et orienté selon l'axe normal à la surface du substrat, permet de

décrire la gaine ionique qui se forme près du substrat du fait du potentiel imposé. Il permet de déterminer le couplage entre transport des espèces chargées et polarisation, puis d'en dériver la distribution de l'énergie d'impact des ions sur le substrat et les flux d'implantation correspondants. Les résultats seront ensuite comparés à ceux obtenus par des approches heuristiques ou semi-analytiques. Le modèle sera détaillé dans le **chapitre III**.

# Modèle quasi-homogène de la source plasma

## Sommaire

1	Base	S ET OBJECTIFS DU MODÈLE				
	1.1	Hypothèses de travail				
	1.2	Principe d'un modèle homogène				
2	ATION DE CONSERVATION DE LA MASSE					
	2.1	Traitement des réactions dans le volume plasma				
	2.2	Traitement des réactions sur les parois				
	2.3	Rapports des densités centre-paroi				
3	Équa	ATION DE CONSERVATION DE L'ÉNERGIE				
	3.1	Flux ionique à la paroi et vitesse de Bohm				
	3.2	Potentiels plasma et flottant				
4	4 Prise en compte de l'électronégativité du plasma					
	4.1	Vitesse de Bohm				
	4.2	Rapports des densités centre-paroi				
	4.3	Potentiels plasma et flottant				
5	Étud	de la source IBS simulée				
	5.1	Géométrie de la source étudiée				
	5.2	Couplage entre les deux sections				
	5.3	Choix du nombre d'espèces à traiter				
	5.4	Etude paramétrique				
	5.5	Résultats obtenus pour la section haute pression				
	5.6	Résultats obtenus pour la section basse pression				
Conclusion						

# 1 Bases et objectifs du modèle

L'emploi initial d'un modèle quasi-homogène pour décrire la source plasma se justifie sur trois aspects :

- l'estimation de l'ordre de grandeur des paramètres plasma dans le centre de la source
- la détermination de l'évolution temporelle de la décomposition du gaz précurseur en fonction de la puissance électrique injectée

 le calcul de la composition du plasma en sortie de source qui sera ensuite utilisée par le modèle 1D PIC-MC décrivant la dynamique de la gaine d'implantation au niveau du substrat.

Le coeur du modèle homogène est un module de traitement de la chimie en volume et en surface, nécessaire pour obtenir la contribution de chaque espèce chimique dans la dynamique de décomposition en fonction de la température électronique.

## 1.1 Hypothèses de travail

Afin de sélectionner les hypothèses correctes pour le système d'équations du modèle, il est nécessaire de déterminer la modélisation adéquate du réacteur dans les deux sections de la source. Ceci peut être réalisé en comparant le temps de séjour du gaz dans la source  $t_s$  avec les temps caractéristiques de diffusion radiale  $t_r$  et axiale  $t_z$ :

$$t_s = \frac{\pi R^2 H}{d_v} ; \ t_r = \frac{R^2}{D_i} ; \ t_z = \frac{Z^2}{D_i} ; \ d_v = 10^{-6} \frac{d_s}{60} \frac{p_{atm}}{p_{tot}}$$
(II-1.1)

Le débit volumique de gaz précurseur injecté dans la source  $d_v$  est obtenu par conversion de la valeur disponible  $d_s$ , connue en centimètres cubes par minute pour les conditions standard de pression et température. Le coefficient de diffusion  $D_i$  peut être estimé en faisant l'hypothèse, valide au démarrage du réacteur, que le gaz précurseur est largement majoritaire dans la source. Dans ce cas,  $D_i$  peut être approximé par le coefficient de diffusion binaire  $D_{ij}$  tel que défini dans l'équation II-1.2, avec i=j pour indiquer l'auto-diffusion du gaz.

$$D_{ij} = \frac{k_b T_g}{p_{tot} \Delta_{ij}} ; \ \Delta_{ij} = \frac{8}{3} \sqrt{\frac{2M_i M_j}{\pi R_g T_g (m_i + m_j)}} \Omega_{ij}$$
(II-1.2)

 $D_{ij}$  quantifie la diffusion entre les espèces i et j et peut être obtenu via la théorie cinétique des gaz de Chapman-Enskog détaillée dans Chapman et Cowling [1970].  $\Omega_{ij}$  est l'intégrale de collision entre les espèces i et j telle que définie dans R. Byron Bird [2002]. Pour simplifier le calcul, on emploie le fit de  $\Omega_{ij}$  effectué par Neufeld et al. [1972] où  $T_s = k_b T_g / \varepsilon_{ij}$ .

$$\Omega_{ij} = \frac{1.06036}{T_s^{0.1561}} + \frac{0.193}{\exp(0.47635T_s)} + \frac{1.03587}{\exp(1.52996T_s)} + \frac{1.76474}{\exp(3.89411T_s)}$$
(II-1.3)

Il est donc nécessaire de déterminer les paramètres de Lennard-Jones  $\sigma_{ij}$  et  $\varepsilon_{ij}$  pour les différents mélanges binaires d'espèces potentiellement présents dans le plasma. Mais ce type de données peut être difficile à trouver dans la littérature, surtout dans le cas d'interactions entre un gaz précurseur et ses fragments. On peut cependant estimer ces coefficients binaires à partir des coefficients du gaz pur selon des règles combinatoires simples, issues de Hirschfelder et al. [1949] pour  $\varepsilon_{ij}$  et Gotoh et al. [1974] pour  $\sigma_{ij}$ , valides dans le cas de gaz non-polaires.

$$\sigma_{ij} = \frac{1}{2}(\sigma_i + \sigma_j) ; \ \varepsilon_{ij} = \sqrt{\varepsilon_i \varepsilon_j} \tag{II-1.4}$$

Pour les conditions étudiées dans la source plasma ( $P_2 = 0,1 - 1,0$  Pa,  $P_1 \approx 10$   $P_2$ ,  $T_g = 300$  K,  $d_s = 5$  sccm) on constate que  $t_s \gg t_r$ ,  $t_z$  pour chaque partie de la source, avec  $T_{s1} \approx 0,45$  s contre  $T_{r1} \approx 5$  ms et  $T_{s2} \approx 70$  ms contre  $T_{r2} \approx 5$  ms. Ce résultat autorise à traiter la source comme un réacteur agité continu, où les caractéristiques du plasma (densités, fractions molaires, température du gaz et des électrons) sont constantes dans le volume de chaque portion de la source.

## 1.2 Principe d'un modèle homogène

L'emploi d'un modèle quasi-homogène pour simuler la source plasma est ici justifié par les résultats obtenus dans la section précédente. Son principe est illustré par la figure II.1, la principale hypothèse employée étant que les données caractéristiques du plasma (densités ou fractions massiques, températures) sont constantes dans tout le volume du plasma. La liaison entre les parois de la source et le plasma est réalisée par une couche limite d'épaisseur  $\delta_x$  faible devant les dimensions de la source, où les paramètres plasma présentent une variation linéaire dans l'espace.



FIGURE II.1 – Représentation schématisée d'un modèle quasi-homogène pour une source plasma cylindrique dans laquelle est injectée une puissance électrique  $P_{abs}$ . La couche limite a une épaisseur  $\delta_x$  faible devant les dimensions de la source.

On considère un modèle avec une pression  $p_{tot}$  constante, ce qui revient à travailler sur un bloc de plasma de masse  $m_{tot}$  constante placé dans un volume fictif  $V_{tot}$  variable (dépendant de la densité massique  $\rho$ ) et qui absorbe une densité de puissance RF  $dP_{abs}$  donnée. Le raisonnement derrière l'emploi d'un volume variable est le suivant : augmenter l'énergie reçue par le plasma conduit à son expansion par échauffement, ce qui induirait une variation de pression si le volume du plasma était fixe, mais l'augmentation du volume fictif et de la surface correspondante permet de compenser les effets de l'échauffement et de travailler à pression constante. L'inconvénient d'une telle démarche est la nécessité de corréler  $V_{tot}$  à la géométrie réelle de la source, puisque les réactions de recombinaison sur les parois ont lieu sur une surface  $S_{src}$  tandis que les taux de production des espèces se basent sur le volume  $V_{src}$ .

$$V_{tot} = \frac{m_{tot}}{\rho} ; dP_{abs} = \frac{P_{rf}}{V_{tot}} ; S_{src} = 2\pi R^2 + 2\pi RH ; V_{src} = \pi R^2 H$$
(II-1.5)

Le modèle homogène pour un plasma composé de  $N_s$  espèces comporte  $N_s + 1$  variables, plus précisément la fraction massique  $Y_s$  pour chaque espèce (sans unité) et l'énergie électronique par unité de masse  $\hat{E}_e$  (J/kg). On considère par ailleurs que la température des neutres est constante.

$$Y_{s} = \frac{m_{s}}{m_{tot}} \,\forall s \in [1, N_{s}] \; ; \; \hat{E}_{e} = \frac{3}{2} Y_{e} \frac{k_{b} T_{e}}{m_{e}} \tag{II-1.6}$$

La détermination de l'évolution temporelle de ces variables repose sur l'établissement de  $N_s$  + 1 équations différentielles ordinaires puis leur résolution groupée. On se base sur deux principes de conservation pour définir ce système d'équations : la conservation de la masse pour les fractions massiques, et la conservation de l'énergie des électrons pour la température électronique. A chaque instant t, on peut obtenir la température électronique  $T_e$ , la densité massique  $\rho$ , les concentrations molaires  $C_s$  et les fractions molaires  $x_s$  à partir des fractions massiques et de l'énergie électronique.

$$T_{e} = \frac{E_{e}}{Y_{e}} \frac{2}{3} \frac{m_{e}}{k_{b}}$$

$$\rho = p_{tot} \left[ \sum_{s=1}^{N_{s}-1} \frac{Y_{s} R_{g} T_{g}}{M_{s}} + \frac{Y_{e} R_{g} T_{e}}{M_{e}} \right]^{-1}$$

$$C_{s} = \frac{m_{tot} Y_{s}}{M_{s} V_{tot}}; C_{tot} = \sum_{s=1}^{n_{s}} C_{s}$$

$$x_{s} = \frac{C_{s}}{C_{tot}} = \frac{p_{s}}{p_{tot}}$$
(II-1.7)

# 2 Equation de conservation de la masse

La masse totale du plasma est conservée, avec un équilibre entre la création d'une espèce (comme produit dans des réactions en volume/surface ou une injection dans le plasma) et sa consommation (comme réactif dans d'autres réactions en volume/surface ou par pompage hors du plasma)

En se basant sur ce principe de conservation, on peut écrire que la variation de la masse d'une espèce du plasma  $\Delta m_s$  dépend de son taux massique de production/consommation  $W_s$  en  $kgm^{-3}s^{-1}$ . Réorganiser cette relation d'équilibre permet

d'obtenir une expression de la dérivée temporelle de la fraction massique  $Y_s$ .

$$\Delta m_{s} = W_{s}V_{tot}\Delta t$$

$$\Delta Y_{s}m_{tot} = W_{s}V_{tot}\Delta t$$

$$\frac{\Delta Y_{s}}{\Delta t} = W_{s}\frac{V_{tot}}{m_{tot}}$$

$$\frac{dY_{s}}{dt} = \frac{W_{s}^{volu} + W_{s}^{surf}}{\rho}$$

$$\operatorname{ec} W_{e}^{volu} = -\sum_{s=1}^{N_{s}-1}q_{s}W_{s}^{volu}$$
(II-2.1)

Afin de simplifier le traitement des différents termes sous-jacents, le taux massique global est séparé entre une composante  $W_s^{volu}$  pour le volume plasma et une composante  $W_s^{surf}$  pour les surfaces de la source. Par ailleurs, le terme volumique pour les électrons  $W_e^{volu}$  peut être dérivé des autres termes volumiques selon le principe de conservation de la charge qui garantit que le plasma reste électriquement neutre.

## 2.1 Traitement des réactions dans le volume plasma

av

Les particules composant le plasma sont en mouvement brownien permanent et entrent en collision les unes avec les autres avec une fréquence inversement proportionnelle à leur libre parcours moyen. Chaque collision peut s'accompagner d'une réaction chimique qui consomme une partie de l'énergie cinétique des particules concernées et modifie leur nature. Différents types de réactions sont possibles selon le type de particule incidente, son énergie cinétique et les énergies caractéristiques de la collision. Ces dernières sont indiquées par les symboles suivants :

- $E_{AB}^{ion}$ : seuil d'ionisation (énergie minimale nécessaire pour séparer un électron de la molécule cible)
- $E_{AB}^{cov}$ : énergie covalente (énergie de liaison entre les atomes de la molécule cible)
- $E_{AB}^{aff}$ : affinité électronique (quantité d'énergie libérée par la molécule cible dans le cas d'un processus d'attachement électronique)

#### Ionisation

Un électron suffisamment rapide pour posséder une énergie supérieure à  $E_{AB}^{ion}$  peut impacter un neutre et lui arracher un de ses électrons, conduisant à la formation d'un ion positif et d'un électron libre selon l'équation  $e^- + AB \Rightarrow AB^+ + 2e^-$ .

Si l'électron incident possède en plus une énergie supérieure à  $E_{AB}^{ion} + E_{AB}^{cov}$ , alors l'ionisation est également dissociative avec un processus de type  $e^- + AB \Rightarrow A + B^+ + 2e^-$ .

#### Dissociation

Les réactions de dissociation d'équation  $e^- + AB \Rightarrow A + B + e^-$  jouent un rôle primordial dans la cinétique de décomposition du gaz précurseur au sein des réacteur plasma. L'énergie nécessaire pour ce type de réaction est généralement inférieure à  $E_{AB}^{ion}$  car l'électron incident ne doit fournir lors de la collision que  $E_{AB}^{cov}$  pour dissocier la molécule et  $E_{AB}^{cov} < E_{AB}^{ion}$  pour la plupart des molécules étudiées dans ce modèle.

## Attachement

La création des ions négatifs dans la décharge s'effectue par l'attachement d'un électron libre à une molécule neutre selon  $e^- + AB \Rightarrow AB^-$ . Si  $E_{AB}^{aff} > 0$  alors la réaction est favorable d'un point de vue thermodynamique, ce qui est généralement le cas des composés fluorés.

La réaction d'attachement dissociatif d'équation  $e^- + AB \Rightarrow A + B^-$  constitue un processus similaire à l'attachement simple, important durant la décomposition initiale d'un gaz précurseur d'affinité positive. Elle présente cependant un caractère résonnant qui en limite l'occurrence sur un intervalle limité d'énergie : la réaction n'a pas lieu si  $E_e^{inc} < E_{AB}^{cov}$  et l'électron n'est pas capturé par la molécule cible si  $E_e^{inc} \gg E_{AB}^{ion}$ .

## Détachement

L'impact d'un électron suffisamment énergétique sur un ion négatif conduit au détachement de l'électron surnuméraire et à la neutralisation de l'anion selon un processus  $e^- + AB^- \Rightarrow AB + 2e^-$  similaire à l'ionisation. Du fait de la répulsion coulombienne entre les deux réactifs de même charge, l'électron incident doit posséder une énergie d'impact au moins égale à 10-20  $E_{AB}^{aff}$  pour que la réaction ait lieu.

## Recombinaison électronique

Un ion positif peut capturer un électron et donner lieu à une réaction de recombinaison de formule  $e^- + AB^+ \Rightarrow AB$  qui détruit cette paire électron-ion, l'attraction coulombienne entre les deux réactifs rendant la réaction possible même à basse énergie. Cependant, l'énergie acquise durant la réaction ne peut pas être évacuée par l'éjection d'une particule rapide tant que l'énergie de l'électron capturé est inférieure à  $E_{AB}^{cov}$ .

Dans le cas contraire, la réaction est dissociative avec comme équation  $e^- + AB^+ \Rightarrow A + B$ . Ce dernier processus présente un caractère résonnant pour les mêmes raisons que l'attachement dissociatif.

## Neutralisation mutuelle

Ce processus d'équation  $A^- + B^+ \Rightarrow A + B$  correspond au transfert de l'électron surnuméraire depuis la molécule A vers l'ion positif B et représente le principal mécanisme de perte des ions négatifs dans les décharges basse pression. L'attraction coulombienne entre les deux réactifs de charge opposée rend la neutralisation mutuelle beaucoup plus favorable que le détachement, surtout à basse énergie où l'ion incident est facilement dévié de sa trajectoire initiale par le champ électrique généré par l'autre particule.

## 2.1.1 Schéma réactionnel complet

Afin d'obtenir un schéma réactionnel satisfaisant pour le modèle, il a été nécessaire de compiler la liste des réactions de fragmentation du  $BF_3$  à partir des données disponibles dans la littérature. Pour borner le schéma en matière de complexité de calcul, plusieurs types de réactions ont été exclus :

- Les réactions neutre-neutre ne sont pas incluses, car leur taux de réaction  $k_{AB}$  est significativement plus faible que ceux pour les réactions électron-neutre, électron-ion, ion-ion et ion-neutre.
  - 1. D'une part, la section efficace  $\sigma_{AB}$  pour ce type de réaction est faible comparée à celle impliquant un ion ou électron, car elle ne bénéficie pas de l'attraction coulombienne entre fragments chargés.
  - 2. D'autre part, la vitesse thermique électronique  $v_e^{th}$  est très largement supérieure à la vitesse thermique neutre  $v_A^{th}$ , puisque  $v_x^{th} = \sqrt{k_b T_x/m_x}$  or  $T_e \approx 10^2 T_g$  et  $m_n \approx 10^5 m_e$
- Les réactions de dimérisation X + X ⇒ X<sub>2</sub> du gaz précurseur et de ses fragments sont considérées comme négligeables. Leur importance n'est significative que pour des plasmas avec des valeurs suffisamment faibles de la fraction des électrons et de la température électronique, ce qui permet d'avoir une fréquence des réactions lourd-lourd conduisant à des dimères qui soit plus élevée que celle des réactions électron-lourd tendant à les détruire.
- Les réactions d'ionisation conduisant à des ions de charge multiple ne sont pas comptabilisées pour trois raisons :
  - 1. Leur seuil d'apparition est beaucoup plus élevé que pour l'ionisation simple : 25,2 eV pour  $B^+ \Rightarrow B^{2+}$  et 40 eV pour  $B \Rightarrow B^{2+}$  contre 8,30 eV pour  $B \Rightarrow B^+$ . Or la probabilité qu'un électron suivant une distribution maxwellienne en vitesse possède une énergie cinétique égale au seuil d'ionisation  $E_{iz}$  pour une réaction est inversement proportionnelle à  $e^{E_{iz}}$ .
  - 2. La valeur maximale de la section efficace, qui quantifie l'importance de la réaction dans le schéma total, diminue très rapidement avec le degré d'ionisation final :  $4\dot{A}^2$  pour  $B \Rightarrow B^+$ ,  $8 \cdot 10^{-2}\dot{A}^2$  pour  $B \Rightarrow B^{2+}$  et  $7 \cdot 10^{-3}\dot{A}^2$  pour  $B \Rightarrow B^{3+}$  [Deutsch et al. 1999].
  - 3. Le taux de réaction associé à une réaction d'ionisation séquentielle  $e^- + X^{n+} \Rightarrow X^{(n+1)+} + 2e^-$  dépend de la densité de l'ion de charge n-1, logiquement plus faible que celle du neutre de base du fait du nécessaire enchaînement des réactions d'ionisation.

Compte tenu de ces règles, on peut définir 15 espèces chimiques dérivées du gaz précurseur étudié :

- 6 neutres  $BF_3$ ,  $BF_2$ , BF, B,  $F_2$  et F
- 6 ions positifs  $BF_3^+$ ,  $BF_2^+$ ,  $BF^+$ ,  $B^+$ ,  $F_2^+$  et  $F^+$
- 2 ions négatifs  $F_2^-$  et  $F^-$  plus les électrons  $e^-$

Le schéma réactionnel pour un plasma contenant ces espèces comporte 55 réactions détaillées dans l'annexe B. L'arbre de fragmentation du  $BF_3$  est synthétisé dans la figure II.2 avec les réactions électron-lourd correspondantes récapitulées dans le tableau II.1.

#### 2.1.2 Traitement mathématique

Calculer le terme de production massique en volume  $W_s^{volu}$  revient à déterminer l'impact sur les fractions massiques des  $N_r^v$  réactions chimiques en volume prises en compte dans le modèle. Ces réactions impliquent les  $N_s^v$  espèces en phase gazeuse



FIGURE II.2 – Séquence de fragmentation du  $BF_3$  dans un plasma comportant 15 espèces, avec indication des réactions électron-lourd impliquées à chaque étape. Les fragments les plus abondants (compte tenu des taux de réaction calculés en annexe) sont indiquées en jaune.

et peuvent être écrites sous la forme généralisée suivante où  $G_r^s$  et  $D_r^s$  sont les coefficients stœchiométriques pour l'espèce s et la réaction r.

$$\sum_{s=1}^{N_s^{\upsilon}} G_r^s \chi_s \Rightarrow \sum_{s=1}^{N_s^{\upsilon}} D_r^s \chi_s , \ \forall r \in [1, N_r^{\upsilon}]$$
(II-2.2)

La vitesse de réaction  $k_r^v$  pour la réaction chimique r peut être calculée à partir des données de la littérature selon deux méthodes :

- 1. Soit par la relation d'Arrhenius  $k_r^v = A_r T_x^{B_r} \exp(-C_r/T_x)$  qui est basée sur le triplet de coefficients  $A_r/B_r/C_r$  associé à une réaction donnée. La température considérée est égale à  $T_g$  pour une réaction lourd-lourd et  $T_e$  pour une réaction électron-lourd.
- 2. Soit à partir de l'intégrale de recouvrement  $k_r^v = \int f_{nrm}^A v_A \sigma_r \, \mathrm{d}T_x$  qui emploit

Catégorie	#	Équation de réaction
	1	$e^- + BF_3 \Rightarrow BF_3^+ + 2e^-$
	2	$e^- + BF_2 \Rightarrow BF_2^+ + 2e^-$
IS (ionication	3	$e^- + BF \Rightarrow BF^+ + 2e^-$
simple)	4	$e^- + B \Rightarrow B^+ + 2e^-$
Simple)	5	$e^- + F_2 \Rightarrow F_2^+ + 2e^-$
	6	$e^- + F \Rightarrow F^+ + 2e^-$
DI	1	$e^- + BF_3 \Rightarrow BF_2^+ + F + 2e^-$
(dissociation	2	$e^- + BF_3 \Rightarrow BF^+ + F_2 + 2e^-$
ionisante)	3	$e^- + BF_3 \Rightarrow F^+ + BF + F + 2e^-$
	1	$e^- + BF_3 \Rightarrow BF_2 + F + e^-$
50	2	$e^- + BF_2 \Rightarrow BF + F + e^-$
DS (dissociation	3	$e^- + BF \Rightarrow B + F + e^-$
simple)	4	$e^- + BF^+ \Rightarrow B^+ + F + e^-$
Simple)	5	$e^- + F_2 \Rightarrow F + F + e^-$
	6	$e^- + F_2^+ \Rightarrow F^- + F + e^-$
	1	$e^- + BF_3 \Rightarrow BF_2^- + F$
AT	2	$e^- + BF_3 \Rightarrow F_2^- + B + F$
(attachement)	3	$e^- + BF_3 \Rightarrow F^- + B + F_2$
	4	$e^- + F_2 \Rightarrow F^- + F$
DE	1	$e^- + F_2^- \Rightarrow F + F$
UE (détachement)	2	$e^- + F_2^- \Rightarrow F_2$
(actuencinent)	3	$e^- + F^- \Rightarrow F$

**TABLE II.1** – *Réactions de fragmentation en volume associées à un plasma comportant* 15 espèces en volume, telles que présentées dans l'arbre de décomposition en figure II.2.

la section efficace de réaction  $\sigma_r$  et la fonction de distribution en énergie de la particule incidente.

Dans le cas de réactions entre électrons et molécules, la fonction de distribution en énergie f employée est celle des électrons (dénotée par l'acronyme FDEE) qui est déterminée à partir de l'équation de Boltzmann établie à la section 4.2. Il faut noter que nous employons ici une formulation locale de l'équation car l'évolution de  $f(\vec{r}, \vec{v_e}, t)$  est déterminée à partir des collisions ayant lieu à la position  $\vec{r}$ , ce qui reste valide tant que le libre parcours moyen est inférieur aux dimensions caractéristiques  $L_{\nabla}$  des gradients de densités ou de température.

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \vec{v} \cdot \nabla_r(f) + \frac{\vec{F}}{m} \cdot \nabla_v(f) = \left. \frac{\partial f}{\partial t} \right|_{coll} ; L_{\nabla}(y) = \left( \frac{1}{y} \frac{\partial y}{\partial r} \right)^{-1}$$
(II-2.3)

On fait l'hypothèse que les collisions et forces externes sont prédominantes dans l'évolution de la fonction de distribution, ce qui permet de négliger le terme de diffusion  $\vec{v} \cdot \nabla_r(f)$ . Si la distribution des vitesses électroniques est quasi-isotrope et homogène dans le volume plasma, ce qui implique à la fois l'absence de confinement magnétique et une température électronique homogène, alors on peut exprimer la fonction de distribution en fonction uniquement de l'énergie électronique  $\varepsilon = \frac{1}{2}m_e v_e^2$ .

La nouvelle fonction de distribution  $f^{nrj}(\varepsilon, t)$  correspond à la densité des électrons dont l'énergie est comprise entre  $\varepsilon$  et  $\varepsilon + d\varepsilon$  à l'instant t, ce qui permet d'en dériver une FDEE normalisée  $f_{nrm}^{nrj}(\varepsilon, t)$ .

$$\int_{\varepsilon} f^{nrj}(\varepsilon, t) \, \mathrm{d}\varepsilon = n_e \; ; \; f^{nrj}_{nrm} = \frac{f^{nrj}}{n_e} \frac{1}{\sqrt{\varepsilon}} \; ; \; \int_{\varepsilon} f^{nrj}_{nrm}(\varepsilon, t) \sqrt{\varepsilon} \, \mathrm{d}\varepsilon = 1 \tag{II-2.4}$$

On peut enfin employer la FDEE normalisée dans le calcul de  $k_r^v$ , qui est réalisé sur un domaine de température électronique compris entre 0,1 et 100 eV. Le choix de ces bornes permet de bien prendre en compte l'influence de la décomposition lors du pic initial de  $T_e$  durant l'amorçage de la décharge tout en traitant correctement la baisse de  $T_e$  durant les phases où la puissance déposée est réduite.

$$\varepsilon = \frac{m_e v_e^2}{2} = \frac{3}{2} k_b T_e \Rightarrow v_e = \sqrt{\frac{2\varepsilon}{m_e}} = \sqrt{\frac{3k_b T_e}{m_e}}; \ T_e = \frac{2}{3} \frac{\varepsilon}{k_b}$$

$$k_r^v = \int_{\varepsilon} f_{nrm}(\varepsilon) v_e(\varepsilon) \sigma_r(\varepsilon) \, \mathrm{d}\varepsilon$$

$$= \int_{T_e^{min}}^{T_e^{max}} f_{nrm}(T_e) v_e(T_e) \sigma_r(T_e) \, \mathrm{d}T_e$$
(II-2.5)

Une réaction r va produire ou consommer  $D_r^s - G_r^s$  moles de l'espèce s pour chaque  $G_r^s$  moles en entrée, ce qui permet d'en déduire le taux de production massique dans le volume  $W_s^{volu}$  pour l'espèce en question.

$$W_s^{volu} = \sum_{r=1}^{N_r^v} \left( k_r^v (D_r^s - G_r^s) \prod_{s=1}^{N_s^v} (x_s C_{tot})^{G_r^s} \right)$$
(II-2.6)

#### 2.2 Traitement des réactions sur les parois

Lorsque des molécules issues du plasma entrent en contact avec les parois de la source, elles peuvent subir des réactions de recombinaison en surface qui aboutissent à la production de molécules de nature différente qui sont émises vers le plasma et en modifie la composition. La prise en compte de ces réactions de surface permet également de déterminer l'importance du dépôt d'espèces adsorbées sur les parois de la source, qui peut occasionner la contamination du plasma puis du substrat par des poussières se détachant de la surface.

Le terme de production surfacique  $W_s^{surf}$  présent dans l'équation de conservation de la masse quantifie l'effet de ces réactions de surface sur le volume du plasma. Il dépend de leur nombre et de la manière dont elles sont traitées dans le modèle. Comme montré dans la figure II.3, on considère que la surface des parois de la source comporte une densité surfacique  $n_s^0$  donnée de sites libres dénommés **s**. Deux types de réactions sont possibles sur chacun de ces sites :



FIGURE II.3 – Représentation schématiques des réactions de surface. Chaque espèce adsorbée occupe une fraction  $\theta_p$  de la surface totale.

- 1. la fixation d'une molécule d'espèce gazeuse sur un site disponible pour donner une molécule adsorbée sur la surface, selon l'équation  $X^v + s \Rightarrow X^s$
- 2. la recombinaison d'une molécule gazeuse avec une molécule adsorbée pour donner un produit gazeux et libérer le site occupé, selon l'équation  $Y^v + X^s \Rightarrow Z^v + s$

De la même manière que pour les réactions en volume, les  $N_r^s$  réactions de surface prises en compte impliquent  $N_s^s$  espèces adsorbées et peuvent être écrites sous la forme généralisée suivante

$$\sum_{v=1}^{N_s^v} G_r^v \chi_v + \sum_{s=1}^{N_s^s} G_r^s \chi_s \Rightarrow \sum_{v=1}^{N_s^v} D_r^v \chi_v + \sum_{s=1}^{N_s^s} D_r^s \chi_s , \ \forall r \in [1, N_r^s]$$
(II-2.7)

où  $G_r^v/D_r^v$  sont les coefficients stœchiométriques pour les espèces de volume et  $G_r^s/D_r^s$  ceux pour les espèces de surface.

Dans le cadre d'une réaction gaz-paroi, une espèce gazeuse **v** ayant une densité à la paroi  $n_v$  impacte la surface avec une vitesse moyenne  $v_v^*$ . Elle peut alors réagir avec les  $N_s^s$  espèces adsorbées, qui chacune occupe une fraction  $\theta_i$  du total des sites disponibles. La réaction de surface **r** impliquant l'espèce gazeuse v possède une probabilité d'occurrence  $\gamma_r$  et sa vitesse de réaction correspondante (en  $m^{-3}s^{-1}$ ) est calculée comme

$$k_r^s = \gamma_r \frac{v_v^*}{4} \theta_s n_v \frac{S_{src}}{V_{src}} ; \ \theta_s + \sum_{i=1}^{N_s^s} \theta_i = 1$$

$$v_v^* = \begin{cases} \sqrt{\frac{8k_b T_g}{\pi m_v}} & \text{(neutre)} \\ 4v_v^B & \text{(ion)} \\ \sqrt{\frac{8k_b T_e}{\pi m_e}} & \text{(électron)} \end{cases}$$
(II-2.8)

Chaque réaction de recombinaison conduit à la formation de  $D_r^v - G_r^v$  moles de produit gazeux par mole de réactif gazeux. En comparaison, chaque réaction d'adsorption conduit à la formation de  $\gamma_r \theta_s x_v$  moles d'espèce adsorbée par mole de réactif gazeux. On peut en déduire le taux de production dû aux réactions de surface  $W_x^{surf}$  (en  $s^{-1}$ ) avec deux composantes contribuant dans le bilan de conservation de la masse :

$$W_{v}^{surf} = \sum_{r=1}^{N_{r}^{s}} k_{r}^{s} (D_{r}^{v} - G_{r}^{v})$$
 (espèces gazeuses) (II-2.9)

$$W_i^{surf} = n_s^0 \frac{V_{src}}{S_{src}} \sum_{r=1}^r k_r^s (D_r^v - G_r^v)$$
 (espèces adsorbées) (II-2.10)

#### 2.2.1 Schéma des réactions de surface

Pour établir le schéma des réactions de surface associées au schéma réactionnel précédemment déterminé, on s'appuie sur plusieurs hypothèses :

- Le  $BF_3$  et le  $F_2$  sont des espèces stables qui ne réagissent pas sur la surface.
- Les ions négatifs ne vont pas réagir sur la surface en quartz car ils sont repoussées par le potentiel flottant négatif (détaillé en section 3.2) qui s'y forme.
- Les électrons doivent être pris en compte dans les réactions de surface car la simple déduction de leur densité en surface à partir du principe de conservation de la charge conduit à des instabilités numériques. De plus, le nombre d'électrons potentiellement adsorbés sur les parois de la source est comparable à leur nombre total dans le plasma du fait d'un rapport surface/volume élevé couplé à un taux d'ionisation faible.
- Les neutres en volume peuvent opérer une recombinaison sur un neutre ou un site chargé avec la même probabilité d'occurrence.
- Les réactions neutre-neutre aboutissent uniquement à une recombinaison, tendant vers le *BF*<sub>3</sub> ou le *F*<sub>2</sub> selon les espèces impliquées.

Compte tenu de ces règles, on aboutit à un ensemble de 10 espèces de surface associées aux 15 espèces en volume :

- -5 neutres s,  $F^s$ ,  $B^s$ ,  $BF^s$ ,  $BF_2^s$
- 5 chargés  $s^-$ ,  $F^{s-}$ ,  $B^{s-}$ ,  $BF_2^{s-}$ ,  $BF_2^{s-}$

Cet ensemble d'espèces peut donner à un total de 57 réactions de surface, détaillées dans le tableau II.2.

## 2.3 Rapports des densités centre-paroi

Puisque la vitesse de réaction en surface  $k_r^{surf}$  tient compte de la densité des espèces à la paroi, il est nécessaire de connaitre les variations spatiales de la densité ionique entre le centre du plasma et les parois. La diffusion des neutres peut être considérée comme suffisamment rapide pour que leur densité soit égale dans le plasma et sur les parois, mais les effets de gaine vont notablement ralentir la diffusion des ions. L'estimation des gradients de densité ionique repose sur une variante de l'équation de conservation de la masse comportant un terme de diffusion.

$$\frac{\partial n_i}{\partial t} = D_i \nabla^2 n_i + w_i n_i$$

$$D_i = \mu_i T_g ; \ \mu_i = \frac{|z_i|e}{m_i \nu_{gi}} ; \ \nu_{gi} = n_g \sigma_{gi} v_i$$
(II-2.11)

Туре	Équation de réaction	$\gamma_r$	
	$e^- + s \Rightarrow s^-$		
Adaption	$e^- + F^s \Rightarrow F^{s-}$		
d'un électron	$e^- + B^s \Rightarrow B^{s-}$	1,00	
a un ciccuon	$e^- + BF^s \Rightarrow BF^{s-}$		
	$e^- + BF_2^s \Rightarrow BF_2^{s-}$		
	$F + s^{(-)} \Rightarrow F^{s(-)}$		
Adsorption	$B + s^{(-)} \Rightarrow B^{s(-)}$	1.00	
d'un neutre	$BF + s^{(-)} \Rightarrow BF^{s(-)}$	1,00	
	$BF_2 + s^{(-)} \Rightarrow BF_2^{s(-)}$		
	$F + F^{s(-)} \Rightarrow s^{(-)} + F_2$		
	$F + B^{s(-)} \Rightarrow s^{(-)} + BF$		
<b>D</b> 1.1 .	$F + BF^{s(-)} \Rightarrow s^{(-)} + BF_2$		
Recombinaisor	$^{1}F + BF_{2}^{s(-)} \Rightarrow s^{(-)} + BF_{3}$	variable	
a un neutre	$B + F^{s(-)} \Rightarrow s^{(-)} + BF$		
	$BF + F^{s(-)} \Rightarrow s^{(-)} + BF_2$		
	$BF_2 + F^{s(-)} \Rightarrow s^{(-)} + BF_3$		
	$BF_3^+ + X^{s-} \Rightarrow X^s + BF_3$		
	$BF_2^+ + X^{s-} \Rightarrow X^s + BF_2$		
Neutralisation	$BF^+ + X^{s-} \Rightarrow X^s + BF$	1.00	
d'un ion	$B^+ + X^{s-} \Rightarrow X^s + B$	1,00	
	$F_2^+ + X^{s-} \Rightarrow X^s + F_2$		
	$F^+ + X^{s-} \Rightarrow X^s + F$		

 TABLE II.2 – Réactions de surface associées à un schéma comportant 10 espèces de surface.

où  $D_i$  ( $m^2/s$ ) est le coefficient de diffusion,  $\mu_i$  ( $m^2/(Vs)$ ) est le coefficient de mobilité,  $\nu_{gi}$  ( $s^{-1}$ ) est la fréquence de collision molécule-gaz.

Résoudre cette équation de conservation permet d'obtenir un profil axial de densité puis d'en dériver la densité en surface. Pour la suite de cette section, on considère un plasma à 1 espèce ionique électriquement neutre en son centre ( $n_i = n_e$  en x=0) présent entre deux parois planes et parallèles séparées par une distance H. Plusieurs régimes de pression sont considérés :

#### Haute pression (diffusion constante)

Lorsque les collisions sont suffisamment fréquentes, la vitesse employée pour calculer la fréquence de collision correspond à la vitesse thermique et le coefficient de diffusion est constant. On peut alors développer l'équation de conservation en fonction de la densité

$$\frac{\partial n_i}{\partial t} = D_i \frac{\mathrm{d}^2 n_i}{\mathrm{d}x^2} + w_i n_i \tag{II-2.12}$$

Si l'on se place en régime stationnaire et que l'on suppose que le système est symétrique par rapport au centre de l'espace entre parois, on obtient dans le cas où  $n_i(H/2) = 0$  une solution de forme parabolique.

$$n_i(x) = \frac{w_i n_i(0) H^2}{8D_i} \left[ 1 - \left(\frac{2x}{L}\right)^2 \right]$$
(II-2.13)

#### Intermédiaire (mobilité variable)

Avec la diminution de la pression, la vitesse thermique des ions devient inférieure à leur vitesse de dérive et c'est cette dernière qui est utilisée pour le calcul de la fréquence de collision. Comme le durée de vol libre d'un ion entre deux collisions avec les molécules du gaz est proportionnelle au libre parcours moyen, on peut en déduire l'expression de la fréquence de collision puis du coefficient de mobilité.

$$\nu_{gi} \approx \frac{|v_i|}{\lambda_i} ; \ \mu_i = \frac{2|z_i|e\lambda_i}{\pi m_i |v_i|} \tag{II-2.14}$$

La vitesse de dérive dépend du champ électrique local, qui est lié au gradient de densité ionique.

$$\vec{v}_i = \mu_i \vec{E}$$
;  $\vec{E} = -\frac{e}{k_b} T_e \frac{\nabla n_i}{n_i}$  (II-2.15)

Développer l'équation de conservation sous la forme d'un bilan des flux  $n_i v_i$  conduit à une équation différentielle sur la densité qui est fonction de la vitesse.

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

$$= \nabla \cdot \left( -\frac{e}{k_b} T_e n_i \frac{2|z_i| e\lambda_i}{\pi m_i |v_i|} \frac{\vec{\nabla} n_i}{n_i} \right) + w_i n_i \quad (\text{II-2.16})$$

$$\Rightarrow v_i^2(x) = -v_i^2(L) \frac{2}{\pi} \frac{\lambda_i}{n_i} \frac{dn_i}{dx}$$

On peut ensuite résoudre ensuite l'équation en régime stationnaire pour une vitesse positive, avec comme conditions aux limites que la vitesse de dérive est nulle au centre du plasma et égale à la vitesse de Bohm (telle que définie dans la section 3.1) au niveau de la gaine ionique. La solution alors obtenue est similaire à l'équation du cercle.

$$\left[\frac{n_i(x)}{n_i(0)}\right]^2 + \left[\frac{2x}{L}\right]^2 \approx 1 \tag{II-2.17}$$

#### Basse pression (non collisionnel)

Lorsque la pression devient suffisamment basse pour que le libre parcours moyen devienne supérieur à la distance entre parois, les ions présents dans la décharge peuvent se déplacer jusqu'à la surface sans subir de collisions. Les ions créés dans un intervalle dx à la position A arrivent à la position B avec un vitesse ionique qui dépend uniquement de la différence de potentiel entre les deux points, du fait de la conservation de l'énergie ionique.

$$w_{i}n_{i}(a)dx = v_{i}(b)dn_{i}$$

$$\frac{m_{i}}{2}\left[v_{i}^{2}(b) - v_{i}^{2}(a)\right] = e\left[\phi(b) - \phi(a)\right]$$
(II-2.18)

Combiner ces deux équations bilans nous fournit un profil axial de densité qui dépend de la valeur locale du potentiel.

$$n_i(x) = \sqrt{\frac{m_i}{2e}} \int_0^x \frac{w_i n_i(x')}{\sqrt{\phi(x') - \phi(x)}} dx'$$
(II-2.19)

Si l'on considère que les électrons suivent la relation de Boltzmann  $n_e(x) = n_e \exp(-\phi(x)/T_e)$ , on peut alors convertir l'équation précédente en une équation intégrale en  $\phi$  qui nous fournit le profil axial du potentiel nécessaire pour déterminer le profil de densité.

Partant de ces profils de densité, on peut établir des rapports de densité entre le centre de la décharge et la paroi  $h_X = n_s(R, L)/n_s(0)$  qui permettent d'estimer la densité des espèces en volume au niveau de la surface de la source. On a alors recours à une surface effective de perte  $S_{eff}$ , inférieure à la surface réelle de la source, pour calculer la vitesse de réaction pour les processus en surface  $k_r^s$ .

$$S_{eff} = (2\pi R^2)h_Z + (\pi 2RL)h_R$$

$$k_r^s = \gamma_r \theta_i \frac{v_v^*}{4} x_v C_{tot} \frac{S_{eff}}{V_{src}}$$
(II-2.20)

Pour simplifier la gestion du calcul de  $h_Z$  et  $h_R$  dans le modèle, on emploie une formulation heuristique issue des équations (05.03.16) et (05.03.17) dans Lieberman et Lichtenberg [2005] qui est valable pour toute valeur de la pression. Elle est représentée schématiquement dans la figure II.4.

$$h_{Z} \approx \frac{0,86}{\sqrt{3 + \frac{H}{2\lambda_{i}} + \left(\frac{0,86H}{\pi} \frac{v_{moy}^{B}}{D_{moy}^{x}}\right)^{2}}} ; h_{R} \approx \frac{0,80}{\sqrt{4 + \frac{R}{\lambda_{i}} + \left(\frac{0,80R}{\chi_{0}J_{1}(\chi_{0})} \frac{v_{moy}^{B}}{D_{moy}^{x}}\right)^{2}}}$$
(II-2.21)  
$$v_{moy}^{B} = \sum_{s} |q_{s}| v_{s}^{B} x_{s} ; D_{moy}^{x} = \sum_{s} |q_{s}| D_{s}^{x} x_{s}$$

où  $v_{moy}^B$  est la vitesse de Bohm moyenne,  $D_{moy}^x$  le coefficient de diffusion moyen pour les ions,  $J_1(x)$  la fonction de Bessel d'ordre 1 et  $\chi_0 \approx 2,405$ .

En présence d'un champ magnétique de vecteur  $\vec{B}$ , une particule chargée dotée d'un vecteur vitesse  $\vec{v}$  subit l'effet de la force de Lorentz qui lui imprime une accélération perpendiculaire au plan  $(\vec{v}, \vec{B})$ . Dans le cas d'un champ magnétique uniforme, la particule possède un mouvement circulaire dans le plan  $(\vec{v}, \vec{B})$  défini par un rayon de giration  $R_{cx}$  dont l'expression est donné par l'équation (I-1.1) du chapitre I. Les particules chargées du plasma vont donc tourner autour des lignes de champ magnétique et subir un confinement plus ou moins important dans la direction perpendiculaire au champ. On en conclut que la diffusion radiale est fortement ralentie si un fort champ magnétique axial est présent, ce qui conduit à  $n_s(R) \approx 0$  et  $h_R \approx 0$  donc à annuler les pertes sur la surface latérale.



FIGURE II.4 – Description qualitative des trois régimes de pression possibles pour le calcul des rapports de densité centre/gaine  $h_R$  et  $h_Z$ , ainsi que de l'heuristique globale valable pour tous les domaines de pression.

# 3 ÉQUATION DE CONSERVATION DE L'ÉNERGIE

L'énergie des électrons est conservée dans le système en régime stationnaire, avec un équilibre entre les gains (puissance RF déposée) et les pertes (impact sur les parois, dissipation via des réactions inélastiques en volume)

Pour obtenir l'équation de conservation de l'énergie électronique, on exprime tout d'abord l'énergie électronique en fonction de l'énergie par unité de masse  $\hat{E}_e$  et de la fraction électronique  $Y_e$ .

$$\frac{3}{2}k_bT_e = \frac{3}{2}\frac{k_bT_e}{m_e}m_e = \hat{E}_e m_e = \hat{E}_e Y_e m_{tot}$$
(II-3.1)

On établit un bilan sur l'énergie électronique en séparant les différents termes

$$\Delta \hat{E}_e Y_e m_{tot} = \underbrace{dP_{abs}}_{1} V_{tot} \Delta t - \underbrace{dP_{surf}}_{2} \frac{S}{V} V_{tot} \Delta t - \underbrace{dP_{volu}}_{3} V_{tot} \Delta t - \underbrace{p_e dV_{tot}}_{4}$$
(II-3.2)

- 1. Gain d'énergie par couplage inductif entre la bobine excitatrice et les électrons du plasma ( $Wm^{-3}$ ) tel que détaillé en section 3.2
- 2. Pertes d'énergie électronique sur les parois  $(Wm^{-2})$  à cause de l'impact des électrons sur les surfaces et du transfert de leur énergie cinétique
- 3. Pertes d'énergie électronique du fait des réactions dans le volume plasma  $(Wm^{-3})$  qui impliquent des collisions non-élastiques (transfert de moment, vibration, fragmentation...)
- 4. Travail des forces de pression (*J*) : lorsque la densité massique du plasma  $\rho$  diminue, le volume fictif  $V_{tot}$  augmente et le plasma en expansion fournit du travail au milieu extérieur, d'où une perte d'énergie. Cette variation d'énergie est reliée à la pression partielle électronique  $p_e = x_e p_{tot}$ .

On réorganise ensuite l'expression (II-3.2) pour obtenir la dérivée de  $\vec{E}_e Y_e$ 

$$\Delta \hat{E}_e Y_e = dP_{abs} \frac{V_{tot}}{m_{tot}} \Delta t - dP_{surf} \frac{S}{V} \frac{V_{tot}}{m_{tot}} \Delta t - dP_{volu} \frac{V_{tot}}{m_{tot}} \Delta t - P_e \mathrm{d} \frac{V_{tot}}{m_{tot}} \tag{II-3.3}$$

$$\frac{d\hat{E}_e Y_e}{dt} = \frac{dP_{abs}}{\rho} - \frac{S}{V} \frac{dP_{surf}}{\rho} - \frac{dP_{volu}}{\rho} + \frac{P_e}{\rho^2} \frac{d\rho}{dt}$$
(II-3.4)

Afin de déterminer la dérivée de la densité massique, on part de l'expression de  $\rho$  tel que défini en section 1.2 et on effectue une substitution dans l'expression de  $\hat{E}_e$ . En se basant sur l'hypothèse que la température du gaz est constante dans le temps, la dérivée temporelle de l'expression permet de faire émerger un terme relatif à la densité massique.

$$\rho = p_{tot} \left[ \sum_{i=1}^{n_s - 1} \frac{Y_i R_g T_g}{M_i} + \frac{Y_e R_g T_e}{M_e} \right]^{-1}$$

$$= p_{tot} \left[ \sum_{i=1}^{n_s - 1} \frac{Y_i R_g T_g}{M_i} + \frac{2}{3} Y_e \hat{E}_e \right]^{-1}$$
(II-3.5)
$$\frac{d\rho}{dt} = -\frac{\rho^2}{p_{tot}} \sum_{i=1}^{n_s - 1} \frac{R_g T_g}{M_i} \frac{W_i}{\rho} - \frac{2}{3} \frac{\rho^2}{p_{tot}} \frac{dY_e \hat{E}_e}{dt}$$

Par substitution de  $\frac{d\rho}{dt}$  dans l'équation (II-3.3) puis regroupement des termes selon la fraction molaire électronique  $x_e$ , on aboutit à une expression de la dérivée de  $\hat{E}_e Y_e$  en fonction du temps.

$$\frac{d\hat{E}_{e}Y_{e}}{dt} = \dots + \frac{P_{e}}{\rho^{2}} \left[ -\frac{\rho^{2}}{p_{tot}} \sum_{i=1}^{n_{s}-1} \frac{R_{g}T_{g}}{M_{i}} \frac{W_{i}}{\rho} - \frac{2}{3} \frac{\rho^{2}}{p_{tot}} \frac{dY_{e}\hat{E}_{e}}{dt} \right]$$

$$= \dots - x_{e} \sum_{i=1}^{n_{s}-1} \frac{R_{g}T_{g}}{M_{i}} \frac{W_{i}}{\rho} - x_{e} \frac{2}{3} \frac{dY_{e}\hat{E}_{e}}{dt}$$
(II-3.6)
$$\frac{d\hat{E}_{e}Y_{e}}{dt} = \left(\frac{2}{3}x_{e} + 1\right)^{-1} \left[ \frac{dP_{abs}}{\rho} - \frac{S}{V} \frac{dP_{srf}}{\rho} - \frac{dP_{vol}}{\rho} - x_{e} \sum_{i=1}^{n_{s}-1} \frac{R_{g}T_{g}}{M_{i}} \frac{W_{i}}{\rho} \right]$$

On constate que le taux de variation de l'énergie électronique est approximativement proportionnelle à  $x_e^{-1}$ , ce qui signifie que les variations temporelles de la température électronique sont d'autant plus fortes que les électrons pouvant récupérer ou dissiper la puissance radio-fréquence déposée dans le plasma sont peu nombreux. On note également une corrélation entre  $\frac{d\hat{E}_e Y_e}{dt}$  et le taux de production massique des espèces autres que les électrons.

## 3.1 Flux ionique à la paroi et vitesse de Bohm

Comme noté en section 2.2.2 du chapitre 1, la présence d'un potentiel de surface  $\phi_w$  inférieur au potentiel plasma  $\phi_p$  entraîne la formation de gaines ioniques au niveau des parois de la source. Ceci tend à ralentir les électrons diffusant depuis

le coeur du plasma et à réduire le flux électronique correspondant. A l'inverse, les ions sont accélérés par la différence de potentiel et impactent la surface en y déposant une partie de leur énergie cinétique.

Déterminer l'énergie perdue nécessite donc de calculer la vitesse d'impact des ions sur la surface. Pour ce faire, on emploie plusieurs hypothèses et approximations correspondant à la structure de l'interface entre plasma et gaine schématisée dans la figure II.5 :

- On considère un plasma comportant uniquement une espèce ionique positive de densité n<sub>i</sub>(x) et les électrons de densité n<sub>e</sub>(x).
- Il n'y a pas de collisions dans la gaine, ce qui revient à affirmer la conservation de l'énergie des ions et du flux ionique. Cette hypothèse est valide si le libre parcours moyen  $\lambda_i$  est largement supérieur à la longueur de Debye  $\lambda_{De}$ . Dans le cas présent,  $\lambda_i \approx 4$  cm  $\gg \lambda_{De} \approx 1$  mm.
- Les électrons suivent une distribution en énergie maxwellienne avec une température *T<sub>e</sub>* constante dans la gaine.
- L'interface plasma-gaine respecte l'électroneutralité avec  $n_e(0) = n_i(0)$ .
- La variation de la densité électronique en fonction du potentiel local  $\phi(x)$  suit une relation de Boltzmann.



FIGURE II.5 – Description qualitative des paramètres définissant la gaine non collisionnelle faisant face à une paroi placée à un potentiel négatif. Schéma adapté de Lieberman et Lichtenberg [2005, p. 168]

On réalise d'abord un bilan sur l'énergie ionique au niveau du bord de la gaine (x=0) afin d'obtenir la variation spatiale de la vitesse ionique dans la pré-gaine.

$$\frac{1}{2}m_i v_i^2(x) = \frac{1}{2}m_i v_i^2(0) - e\phi(x) \; ; \; v_i(x) = \sqrt{v_i^2(0) - \frac{2e\phi(x)}{m_i}} \tag{II-3.7}$$

On utilise ensuite le principe de la conservation du flux ionique  $n_i(x)v_i(x) = n_i(0)v_i(0)$ , valide en l'absence de collisions, pour déterminer la variation de la densité ionique le long de la pré-gaine  $n_i(x)$ .

$$n_i(x) = n_i(0) \frac{v_i(0)}{v_i(x)} = n_i(0) \left[ 1 - \frac{2e\phi(x)}{m_i v_i^2(0)} \right]^{-1/2}$$
(II-3.8)

On peut ensuite substituer  $n_i(x)$  et  $n_e(x)$  dans l'équation de Poisson afin d'obtenir la variation du potentiel au niveau du bord de gaine

$$\frac{\mathrm{d}^2\phi}{\mathrm{d}^2x} = \frac{en_e(0)}{\epsilon_0} \left[ \exp\left(-\frac{e\phi(x)}{k_b T_e}\right) - \left(1 - \frac{2e\phi(x)}{m_i v_i^2(0)}\right)^{-1/2} \right]$$
(II-3.9)

L'emploi des facteurs a-dimensionnels  $\Phi$ , Y, K permet de convertir l'expression précédente sous une forme qui simplifie l'écriture de la condition à la limite pertinente pour ce calcul :  $\Phi \rightarrow 0$  lorsque  $Y \rightarrow \infty$ .

$$\Phi = -\frac{e\phi}{k_b T_e} ; Y = \frac{\sqrt{2}x}{\lambda_{De}} ; K = \frac{m_i v_i^2(0)}{2k_b T_e}$$

$$2\frac{d^2\Phi}{d^2Y} = -\exp(-\Phi) + \left(1 + \frac{\Phi}{K}\right)^{-1/2}$$
(II-3.10)

Une multiplication par  $\frac{d\Phi}{dY}$  puis une intégration selon Y permet d'obtenir la formulation non-linéaire suivante, qui ne possède de solution physique que si le second membre est positif.

$$\left(\frac{\mathrm{d}\Phi}{\mathrm{d}Y}\right)^2 = -\exp(-\Phi) - 1 + 2K\left(\sqrt{1+\frac{\Phi}{K}} - 1\right) \tag{II-3.11}$$

Si l'on réalise une expansion du second membre selon une série de Taylor en  $\Phi$ , les termes d'ordre o et 1 s'annulent et l'on aboutit à

$$\left(\frac{d\Phi}{dY}\right)^2 \approx \frac{\Phi^2}{2} \left(+1 - \frac{1}{2}\frac{1}{K}\right) + \frac{\Phi^3}{3} \left(-1 + \frac{3}{8}\frac{1}{K^2}\right) + O(\Phi^4)$$
(II-3.12)

On peut déduire de cette équation et de la condition à la limite que la solution physique doit minimiser  $\Phi$  lorsque y est grand, ce qui est réalisé lorsque K = 1/2. Ceci permet d'aboutir au critère de gaine de Bohm, qui définit une borne inférieure de la vitesse ionique au bord d'une gaine.

$$\frac{m_i v_i^2(0)}{2k_b T_e} = \frac{1}{2} \Rightarrow v_i(0) = \sqrt{\frac{k_b T_e}{m_i}} = v_i^B$$
(II-3.13)

## 3.2 Potentiels plasma et flottant

Pour un plasma électropositif et une pré-gaine non collisionnelle, on peut obtenir le potentiel plasma  $\phi_p$  via un bilan sur l'énergie des ions en faisant l'hypothèse que les ions acquièrent une vitesse finale en bord de gaine égale à la vitesse de Bohm.

$$\frac{1}{2}m_i(v_i^B)^2 = e\phi_p \Rightarrow \phi_p = \frac{m_i}{2e}\frac{k_bT_e}{m_i} = \frac{k_b}{e}\frac{T_e}{2}$$
(II-3.14)

Si une portion des parois de la source n'est pas connectée à un circuit électrique permettant l'évacuation des charges accumulées, comme c'est le cas pour les sections en quartz, les électrons issus du plasma vont y stationner et entraîner l'apparition d'un potentiel flotant  $\phi_w$  négatif qui s'additionne au potentiel plasma  $\phi_v$ , comme illustré par la figure II.5.

Un électron incident sera affecté par la différence de potentiel entre le plasma et la paroi, avec comme conséquence une réduction de la densité électronique au niveau de la paroi  $n_e^w$  par rapport à la densité dans le plasma  $n_e^p$  selon la relation de Boltzmann.

$$n_e^p = x_e C_{tot} ; n_e^w = n_e^p \exp\left(-\frac{e(\phi_p - \phi_w)}{k_b T_e}\right)$$
 (II-3.15)

On peut calculer le potentiel flottant  $\phi_w$  par un bilan sur le flux des espèces arrivant à la paroi, en prenant en compte l'électroneutralité en bord de gaine.

densités ions/élec. :  

$$n_i^g = n_e^g$$
;  $n_e^w = n_e^g \exp\left(\frac{e\phi_w}{k_b T_e}\right)$   
flux ionique (gaine) :  
 $F_i = n_i^g v_i^B = n_e^g \sqrt{\frac{k_b T_e}{m_i}}$   
flux électronique :  
 $F_e = \frac{1}{4} n_e^w v_e^{th} = n_e^g \exp\left(\frac{e\phi_w}{k_b T_e}\right) \sqrt{\frac{k_b T_e}{2\pi m_e}}$ 

L'équilibre est atteint lorsque la somme des courants électronique et ionique est nulle. Cette condition de courant nul en régime stationnaire permet de déduire le potentiel flottant.

$$n_e^g \sqrt{\frac{k_b T_e}{m_i}} + n_e^g \exp\left(\frac{e\phi_w}{k_b T_e}\right) \sqrt{\frac{k_b T_e}{2\pi m_e}} = 0$$
(II-3.16)  
$$\phi_w = -\frac{k_b}{e} T_e \log \sqrt{\frac{m_i}{2\pi m_e}}$$

# 4 PRISE EN COMPTE DE L'ÉLECTRONÉGATIVITÉ DU PLASMA

La présence d'ions négatifs en proportion non-négligeable par rapport aux électrons induit des modifications notables dans les bilans d'énergie-matière employés pour calculer les rapports de densités  $h_R$  et  $h_Z$ , la vitesse de Bohm  $v_B$  et les potentiels  $\phi_p$  et  $\phi_w$ . Du fait de la barrière de potentiel entre plasma et paroi, une densité importante d'ions négatifs peut aussi entraîner la formation de poussières nano- ou micro-métriques néfastes pour la qualité de l'implantation. Pour établir la nouvelle version de ces bilans, plusieurs paramètres supplémentaires doivent être introduits :

- $\alpha_p$ : électronégativité dans le plasma =  $n_{-}^p / n_e^p$
- $\alpha_g$ : électronégativité en bord de gaine =  $n_{-}^g/n_e^g$
- $\phi_g$ : potentiel en bord de gaine
- $\gamma_t$ : rapport des températures =  $T_e/T_g$

#### 4.1 Vitesse de Bohm

Le calcul de la vitesse de Bohm dans le cas général est réalisé en se basant sur les mêmes hypothèses que pour le cas électropositif, dont l'électroneutralité en bord de gaine, ce que nous permet d'obtenir les densités en bord de gaine :

$$n_{+}^{g} = n_{e}^{g} + n_{-}^{g} = n_{e}^{g}(1 + \alpha_{g})$$

$$n_{e}^{g} = n_{e}^{p} \exp\left(\frac{e\phi_{g}}{k_{b}T_{e}}\right)$$

$$n_{-}^{g} = n_{-}^{p} \exp\left(\frac{e\phi_{g}}{k_{b}T_{g}}\right) = n_{-}^{p} \exp\left(\frac{e\phi_{g}\gamma_{t}}{k_{b}T_{e}}\right)$$
(II-4.1)

La substitution des densités dans l'équation de Poisson nous donne

$$\frac{\mathrm{d}^2 \phi}{\mathrm{d}^2 x} = \frac{e}{\epsilon_0} \left[ n_e^p \exp\left(\frac{e\phi_g}{k_b T_e}\right) + n_-^g \exp\left(\frac{e\phi_g \gamma_t}{k_b T_e}\right) - n_e^g (1 + \alpha_g) \right]$$
(II-4.2)

En effectuant un raisonnement similaire à celui explicité en section 3.1 (intégration de l'équation précédente selon le potentiel, expansion en séries de Taylor puis détermination du domaine de validité de la solution) on obtient une expression de la vitesse de Bohm généralisée  $v_B^-$  en fonction de sa valeur en régime électropositif  $v_B^+$  et de l'électronégativité dans la gaine  $\alpha_g$ .

$$v_B^- = \sqrt{\frac{k_b T_e}{m_+} \frac{1 + \alpha_g}{1 + \alpha_g \gamma_t}} = v_B^+ \sqrt{\frac{1 + \alpha_g}{1 + \alpha_g \gamma_t}}$$
(II-4.3)

Pour déterminer  $\alpha_g$ , on part de sa définition et de la relation de Boltzmann pour relier la variation des densités au potentiel plasma  $\phi_p$ .

$$\alpha_{g} = \frac{n_{-}^{g}}{n_{e}^{g}} = n_{-}^{p} \exp\left(-\frac{e\phi_{p}\gamma_{t}}{k_{b}T_{e}}\right) \left[n_{e}^{p} \exp\left(-\frac{e\phi_{p}}{k_{b}T_{e}}\right)\right]^{-1}$$

$$= \alpha_{p} \exp\left(\frac{e\phi_{p}}{k_{b}T_{e}}(1-\gamma_{t})\right)$$
(II-4.4)

Un bilan sur l'énergie ionique similaire à celui détaillé en section 3.2 permet d'étendre l'expression du potentiel plasma dans le cas où l'électronégativité du plasma est non-négligeable.

$$\frac{1}{2}m_i(v_B^-)^2 = e\phi_p \Rightarrow \phi_p = \frac{m_i}{2e}(v_B^-)^2$$

$$\phi_p = \frac{m_i}{2e}\frac{k_b T_e}{m_i}\frac{1+\alpha_g}{1+\alpha_g\gamma_t} = \frac{k_b}{e}\frac{T_e}{2}\left(\frac{1+\alpha_g}{1+\alpha_g\gamma_t}\right)$$
(II-4.5)

Combiner les deux expressions permet d'obtenir une valeur de  $\alpha_g$  dépendante de  $\alpha_p$  et  $\gamma_T$ .

$$\alpha_{g} = \alpha_{p} \exp\left[\frac{k_{b}Te}{2e} \left(\frac{1+\alpha_{g}}{1+\alpha_{g}\gamma_{t}}\right) \frac{e(1-\gamma_{t})}{k_{b}T_{e}}\right]$$

$$= \alpha_{p} \exp\left[\frac{(1+\alpha_{g})(\gamma_{t}-1)}{2(1+\alpha_{g}\gamma_{t})}\right]$$
(II-4.6)

Connaissant  $\alpha_p$  et  $\gamma_t$ , on peut résoudre de manière itérative le système d'équations composé de (II-4.6) et (II-4.3) pour obtenir l'électronégativité en bord de gaine et la vitesse de Bohm électronégative. Cette dernière tend vers sa valeur en régime électropositif  $v_B^+$  lorsque  $\alpha_g$  tend vers o.

Comme indiqué par la figure II.6, la vitesse de Bohm généralisée peut voir sa valeur divisée par 10 par rapport au régime électropositif pour des valeurs suffisamment élevées de la température électronique et de l'électronégativité, soit  $\alpha_p > 2$  et  $\gamma_t > 75$  si  $T_g = 300$ K. De plus, la transition entre le régime électropositif et le régime électronégatif peut être brutale si l'électronégativité varie alors que la température électronique reste notablement supérieure à  $T_g$ .

#### 4.2 Rapports des densités centre-paroi

La structure du plasma est significativement modifiée en régime électronégatif, comme illustrée par la figure II.7, avec l'apparition d'une région électronégative dans le cœur de la décharge entourée par une région électropositive correspondant à la pré-gaine puis par la gaine ionique en contact avec la paroi [Lichtenberg et al. 1994].

Le profil de densité des ions négatifs peut être approximé par une parabole, avec une relation entre le rayon de la zone électronégative  $R_n$  et le rayon de la source R qui dépend de l'électronégativité dans le plasma et du rapport des températures [Lee et Lieberman 1995].

$$R_n^2 = \frac{2\alpha_p}{\gamma_t + 2\alpha_p} \left(\frac{\gamma_t D_i R}{v_i^B} + R^2\right)$$
(II-4.7)

Si l'on considère que la densité électronique reste constante dans l'ensemble de la région électronégative et que la pression est suffisamment élevée pour que  $v_i^B R \gg \gamma_t D_i$ , alors on peut en déduire la densité ionique en bord de gaine :

$$n_i^g = n_i^p \left(1 + \frac{2\alpha_p}{\gamma_t}\right) \left[\frac{v_i^B R}{2\gamma_t D_i}\right]^{-1}$$
(II-4.8)



FIGURE II.6 – Valeur du rapport des vitesses de Bohm  $v_B^- / v_B^+$  en fonction de l'électronégativité du plasma  $\alpha_p$  en abscisse et du rapport des températures  $\gamma_t$  en ordonnée.



FIGURE II.7 – Représentation qualitative des variations spatiales des densités ioniques et électroniques dans un plasma électronégatif.

Le rapport de densité centre-gaine est ensuite obtenu facilement par le fait que le plasma de cœur est électriquement neutre, soit  $n_i^p = n_e^p(1 + \alpha_p)$ :

$$h_R = \frac{1 + 2\alpha_p / \gamma_t}{1 + \alpha_p} \left[ \frac{v_i^B R}{2\gamma_t D_i} \right]^{-1}$$
(II-4.9)

Un raisonnement similaire, détaillé dans l'annexe de Lee et Lieberman [1995], peut être appliqué dans la direction axiale de la décharge et conduit au même facteur correctif dépendant de  $\alpha_p$  et  $\gamma_t$ . L'emploi de l'heuristique de Lieberman donnée par l'équation (II-2.21) permet par ailleurs d'étendre le domaine de validité en pression de  $h_R$  et  $h_Z$ .

$$h_Z^{neg} \approx \frac{1 + 2\alpha_p / \gamma_t}{1 + \alpha_p} h_Z$$
;  $h_R^{neg} \approx \frac{1 + 2\alpha_p / \gamma_t}{1 + \alpha_p} h_R$  (II-4.10)

## 4.3 Potentiels plasma et flottant

Pour un plasma électronégatif, un bilan sur l'énergie ionique similaire à celui en section 4.1 permet d'obtenir l'expression du potentiel plasma  $\phi_p$  dans le cas où la vitesse de Bohm diverge notablement de sa valeur en régime électropositif.

$$\phi_p = \frac{k_b}{e} \frac{T_e}{2} \left( \frac{1 + \alpha_g}{1 + \gamma_t \alpha_g} \right) \tag{II-4.11}$$

Il faut tenir compte des ions négatifs pour déterminer le potentiel flottant à la paroi  $\phi_w$ , car ils sont affectés de la même manière que les électrons par le potentiel total  $\phi_{tot} = |\phi_w| + |\phi_p|$  entre le cœur du plasma et la surface. On détermine la vitesse des différents types de particules et leur densité à la paroi en faisant l'hypothèse que  $\phi_w < 0$  et que les ions positifs ne sont pas affectés par ce potentiel.

ions pos. 
$$n_{+}^{w} = n_{+}^{p}$$
  $v_{-}^{B} = \sqrt{\frac{k_{b}T_{e}}{m_{+}}} \sqrt{\frac{1 + \alpha_{g}}{1 + \gamma_{t}\alpha_{g}}}$  (II-4.12)

ions neg. 
$$n_{-}^{w} = n_{-}^{p} \exp\left(-\frac{\gamma_{t}e\phi_{tot}}{k_{b}T_{e}}\right) \qquad v_{-}^{th} = \sqrt{\frac{8k_{b}T_{g}}{\pi m_{-}}}$$
 (II-4.13)

électrons 
$$n_e^w = n_e^p \exp\left(-\frac{e\phi_{tot}}{k_b T_e}\right)$$
  $v_e^{th} = \sqrt{\frac{8k_b T_e}{\pi m_e}}$  (II-4.14)

On peut ensuite établir le bilan des flux à la paroi en fonction du potentiel total. Comme le flux total est nul en régime stationnaire, on peut alors résoudre de manière itérative l'équation résultante pour en déduire  $\phi_{tot}$  puis le potentiel flottant dépendant de  $\alpha_g$ .

$$n_e^p v_e^{th} \exp\left(-\frac{e\phi_{tot}}{k_b T_e}\right) + n_-^p v_-^{th} \exp\left(-\frac{\gamma_t e\phi_{tot}}{k_b T_e}\right) - n_+^p v_B^- = 0$$
(II-4.15)

# 5 Étude de la source IBS simulée

## 5.1 Géométrie de la source étudiée

On considère une source plasma cylindrique de type inductif, séparée en trois composants représentés sur la figure II.8 :

- 1. Une section haute pression de hauteur  $H_1$  et de rayon  $R_1$  fonctionnant à une pression  $p_1$  supérieure à la pression dans la section basse.
- 2. Une plaque de séparation d'épaisseur *H*<sub>t</sub> percée de *N*<sub>t</sub> trous cylindriques de rayon *R*<sub>t</sub>.

3. Une section basse pression de hauteur  $H_2$  et de rayon  $R_2$  fonctionnant à une pression  $p_2$  égale à la pression dans la chambre.



FIGURE II.8 – Géométrie de la source plasma dans le modèle oD

Afin de connaitre  $p_1$  dans l'étage haute pression, il est nécessaire de déterminer les caractéristiques du réacteur en tant que système soumis à un vide poussé. Les données importantes sont :

– Le débit volumique du gaz injecté dans le réacteur  $D_2^v$  en  $m^3 s^{-1}$ . Le débit de gaz en entrée du réacteur  $D_1^s$  est connu en sccm (centimètres cubes standard par minute) et doit être converti selon

$$D_2^v = 10^{-6} \frac{D_1^s}{60} \frac{p_{atm}}{p_2} \tag{II-5.1}$$

Le "troughtput" Q en m<sup>-3</sup>s<sup>-1</sup>Pa représente la quantité de gaz passant dans le réacteur à un instant donné. Lorsque le système de pompage est à l'équilibre, Q est constant dans le temps et l'espace selon

$$Q = D_1^v p_1 = D_2^v p_2 \tag{II-5.2}$$

Toute conduite présente dans un système sous vide offre une certaine résistance à l'écoulement du gaz, où la dissipation par frottements de l'énergie mécanique du gaz induit une perte de charge  $\Delta p = p_1 - p_2$ . On peut modéliser cette résistance en analogie à la loi d'Ohm U = RI, avec la conductance  $C = 1/R = Q/\Delta p$  exprimée en  $m^3s^{-1}$ . On peut démontrer de la même manière que  $N_t$  conduites de conductance unitaire  $C_t$  placées en parallèle ont une conductance totale égale à  $C_{tot} = N_tC_t$ . De là, on peut calculer la perte de charge au travers de la plaque de séparation puis la pression dans l'étage supérieur de la source.

$$Q = C\Delta p$$
  

$$D_{2}^{v} p_{2} = N_{t}C_{t}(p_{1} - p_{2})$$
  

$$p_{1} = p_{2} \left(\frac{D_{2}^{v}}{N_{t}C_{t}} + 1\right)$$
(II-5.3)

La méthode de calcul de la conductance dépend du régime d'écoulement du gaz, déterminé par le libre parcours moyen  $\lambda_i$  défini en section 2.1.3. Pour les conditions typiques du réacteur étudié ( $p_2 = 0,1 - 1$  Pa,  $T_g = 300$  K,  $r_{at} = 131.3$  pm) on obtient que  $\lambda_i > R_t$  ce qui correspond au régime moléculaire.

On peut alors calculer la conductance de la plaque en se basant sur la formule de Clausing pour un tube cylindrique court [Steckelmacher 1966] et la formulation de Shi et al. [2012] pour la probabilité de transmission W. Cette dernière quantité correspond à la probabilité qu'une molécule entrant par une extrémité du tube sorte par l'autre extrémité sans rebrousser chemin, qui dépend des dimensions  $H_t$  et  $D_t = 2R_t$  du tube.

$$C_{t} = \frac{v_{g}^{*}}{4} \pi R_{t}^{2} W ; W = W_{dir} + W_{ind}$$

$$W_{dir} = \frac{\sqrt{H_{t}^{2} + D_{t}^{2}} - H_{t}}{\sqrt{H_{t}^{2} + D_{t}^{2}} + H_{t}}$$

$$W_{ind} = \frac{4}{3} \left(\frac{H_{t}}{D_{t}}\right)^{-1} \left[1 - \frac{1}{4} \left(\frac{H_{t}}{D_{t}}\right)^{3} + \frac{1}{4} \left(\left(\frac{H_{t}}{D_{t}}\right)^{2} - 2\right) \sqrt{\left(\frac{H_{t}}{D_{t}}\right)^{2} + 4}\right]$$
(II-5.4)

Pour une pression aval  $p_2$  de 0,3 Pa, un débit d'injection  $D_1^s$  de 5 sccm (cf. Nizou et al. [2002]) et les paramètres géométriques de la plaque de séparation, on obtient une pression amont  $p_1$  de 3,7 Pa. Cette valeur correspond à un libre parcours moyen local  $\lambda_i$  de 4,5 mm, ce qui respecte le critère  $\lambda_i > R_t$  du régime moléculaire et valide l'expression utilisée pour le calcul de la conductance.

## 5.2 Couplage entre les deux sections

Comme détaillé en section 5.1, la section basse pression est alimentée depuis la section haute pression à travers de  $N_t$  trous de rayon  $R_t$ , percés dans une plaque de séparation. Comme cette dernière est fabriquée en quartz et non connectée à la masse, elle est donc soumise à un potentiel flottant fortement négatif par rapport au potentiel plasma, selon le mécanisme déterminé en section 3.2. Ce potentiel flottant repousse les ions négatifs et induit la formation d'une gaine attachée à la paroi latérale des trous.

Calculer l'épaisseur de la gaine via la longueur de Debye  $\lambda_{Di}$  (dans sa formulation généralisée pour un plasma comportant des ions positifs et négatifs, donnée par l'équation I-2.6) permet d'estimer la surface par laquelle les ions négatifs peuvent traverser la plaque de séparation. Si  $\lambda_{Di} \approx R_t$  alors les ions négatifs sont
confinés dans la section haute pression et leur fraction molaire dans la section basse pression est considérée comme négligeable, ce qui conduit à réduire la densité électronique à  $n_e = \sum n_i^+$  par respect de l'électroneutralité du plasma.

En prenant comme base de calcul la composition du plasma en régime permanent pour une puissance de 295 W, on obtient une longueur de Debye d'environ 1  $\mu$ m largement inférieure au rayon d'un trou. Les ions négatifs peuvent donc transiter vers la section basse pression, avec une composition en entrée de section basse à l'instant t égale à la composition en section haute au même instant t.

## 5.3 Choix du nombre d'espèces à traiter

Le temps de calcul moyen pour la simulation d'un plasma par un modèle quasihomogène est généralement inversement proportionnel à la fraction de l'espèce la plus minoritaire. Retirer des espèces minoritaires du schéma réactionnel permet donc de réduire le temps de calcul mais peut avoir un impact non négligeable sur la composition du plasma. Pour déterminer le nombre minimum d'espèces à conserver dans le schéma réactionnel sans compromettre la précision des résultats, une première simulation est réalisée dans la section haute de la source, pour une puissance déposée de 295 W et une pression de 3,7 Pa, avec 15 espèces en volume, dont les résultats sont présentés dans le tableau II.3.

Espèce	minimum	maximum	ecart (%)
BF <sub>3</sub>	$7,37 \cdot 10^{-1}$	$7,34 \cdot 10^{-1}$	0,33
$BF_2$	$1,49 \cdot 10^{-1}$	$1,49 \cdot 10^{-1}$	0,48
BF	$3,30\cdot10^{-4}$	$3,29 \cdot 10^{-4}$	0,31
В	$2,98 \cdot 10^{-6}$	$2,97 \cdot 10^{-6}$	0,43
$F_2$	$3,65 \cdot 10^{-2}$	$3,63 \cdot 10^{-2}$	0,71
F	$7,65 \cdot 10^{-2}$	$7,79 \cdot 10^{-2}$	1,8
$BF_3^+$	$4,77 \cdot 10^{-5}$	$7,45 \cdot 10^{-5}$	36
$BF_2^+$	$4,19 \cdot 10^{-4}$	$6,63\cdot 10^{-4}$	36
$BF^+$	$2,31 \cdot 10^{-6}$	$3,76 \cdot 10^{-6}$	38
$B^+$	$5,71 \cdot 10^{-8}$	$1,02 \cdot 10^{-7}$	44
$F_{2}^{+}$	$2,26 \cdot 10^{-6}$	$3,62 \cdot 10^{-6}$	37
$F^+$	$2,11 \cdot 10^{-6}$	$3,55 \cdot 10^{-6}$	40
$F_2^-$	$2,01 \cdot 10^{-7}$	$2,80 \cdot 10^{-7}$	28
$F^{-}$	$4,54 \cdot 10^{-4}$	$5,29 \cdot 10^{-4}$	14
<i>e</i> <sup>-</sup>	$1,97 \cdot 10^{-5}$	$2,19 \cdot 10^{-4}$	91

TABLE II.3 – Valeurs minimales et maximales en régime permanent des fractions molaires pour un plasma à 15 espèces, dans le cas d'une simulation en section haute pression de la source pour 295 W et 3.7 Pa.

On constate que 6 espèces possèdent une fraction molaire en régime permanent inférieure à  $10^{-5}$ , qui correspond au seuil fixé qui permettrait *a priori* de les retirer du schéma réactionnel sans induire de variation notable sur la composition du

plasma. Afin de vérifier que ce nouveau schéma donne des résultats cohérents avec le premier, on réalise dans les mêmes conditions une seconde simulation avec les 8 espèces en volume sélectionnées soit

$$BF_3$$
;  $BF_2$ ;  $F_2$ ;  $F$ ;  $BF_3^+$ ;  $BF_2^+$ ;  $F^-$ ;  $e^-$ 

Comme illustrée par la figure II.9, l'écart relatif en régime permanent entre les deux simulations pour les espèces communes aux deux schémas ne dépasse pas 2% en général, sauf pour le  $F_2$  et les électrons durant la phase éteinte du pulse RF. Ces déviations sont probablement induites par l'omission de réactions d'attachement / détachement impliquant le  $F_2^-$  comme produit ou réactif. Le tableau II.4 présente les réactions retenues pour un schéma réactionnel comprenant 8 espèces de volume.



FIGURE II.9 – Écart relatif entre les fractions molaires des espèces communes à deux simulations, une avec 15 espèces en volume et une autre avec 8 espèces. Les résultats sont obtenus en régime permanent et donnés en fonction du temps relatif dans la période du pulse d'excitation de 120 µs. Aucune puissance électrique n'est injectée dans le plasma entre 100 et 120 µs.

L'application des règles détaillées dans la section 2.2.1 dans le cas d'un plasma à 8 espèces conduit à un ensemble de 3 sites neutres (s, Fs,  $BF_2s$ ) et de 3 sites chargés ( $s^-$ ,  $Fs^-$ ,  $BF_2s^-$ ) pour un total de 19 réactions de surface possibles, détaillées dans le tableau II.5.

# 5.4 Etude paramétrique

On réalise un ensemble de simulations avec le modèle quasi-homogène dans sa configuration généralisée (prise en compte de l'électronégativité telle que détaillée en section 4, modélisation complète des réactions de surface décrite en section 2.2) avec les paramètres opérationnels suivants :

1. La fréquence de l'onde excitatrice est de 13,56 MHz dans le domaine radiofréquence.

Туре	Type Équation de réaction	
	$BF_3 + e \rightarrow BF_3^+ + 2e -$	15,95
Ionisation	$BF_2 + e \rightarrow BF_2^+ + 2e -$	8,45
	$BF_3 + e \rightarrow BF_2^+ + F + 2e -$	15,95
	$BF_3 + e \rightarrow BF_2 + F + e -$	11,00
Dissociation	$F_2 + e - \Rightarrow F + F + e -$	4,34
	$F_2 + e - \Rightarrow F + F + e -$	3,16
Attachomont	$BF_3 + e \rightarrow F^- + BF_2$	10,38
Détachement	$F_2 + e - \Rightarrow F^- + F$	0,01
Detuenentent	$F^- + e^- \Rightarrow F + 2e^-$	6,66
Recombinaisor	$nBF_3^+ + e^- \Rightarrow BF_2 + F$	1e-13
électron - ion	$BF_2^+ + e^- \Rightarrow BF + F$	1e-13
Neutralisation	$BF_3^+ + F^- \Rightarrow BF_3 + F$	1,14145e-11
ion - ion	$BF_2^+ + F^- \Rightarrow BF_2 + F$	1,18908e-11
	$BF_3 + e \rightarrow BF_3(v1) + e -$	0,11
	$BF_3 + e \rightarrow BF_3(v2) + e -$	0,08
	$BF_3 + e \rightarrow BF_3(v3) + e -$	0,18
	$BF_3 + e \rightarrow BF_3(v4) + e -$	0,06
	$BF_3 + e \rightarrow BF_3(vH) + e -$	0,36
	$BF_2 + e \rightarrow BF_2(v1) + e -$	0,11
Excitation	$BF_2 + e \rightarrow BF_2(v2) + e -$	0,08
vibrationnelle	$BF_2 + e \rightarrow BF_2(v3) + e -$	0,18
	$BF_2 + e \rightarrow BF_2(v4) + e -$	0,06
	$BF_2 + e \rightarrow BF_2(vH) + e -$	0,36
	$F_2 + e - \Rightarrow F_2(v1) + e -$	0,1108
	$F_2 + e - \Rightarrow F_2(v2) + e -$	0,2188
	$F_2 + e - \Rightarrow F_2(v3) + e -$	0,3237
	$F_2 + e - \Rightarrow F_2(v4) + e -$	0,4205

TABLE II.4 – Réactions en volume associés à un schéma à 8 espèces. Le seuil d'apparition est en électron-volts et le coefficient d'Arrhenius  $Kr_0$  en  $m^{-3}s^{-1}$ .

- 2. La période du pulse d'excitation est de 120  $\mu$ s et la puissance RF est déposée pendant 100  $\mu$ s, soit un rapport cyclique de 5/6.
- 3. La puissance RF totale injectée dans le plasma est de 300 W durant la phase allumée du pulse RF, nulle sinon.
- 4. On emploie le schéma réactionnel à 8 espèces en volume et 6 espèces de surface défini en section 5.3.
- 5. La fraction molaire initiale des espèces en volume est de  $10^{-18}$  sauf pour les électrons et le  $BF_3^+$  où elle est de  $10^{-8}$ . Ces valeurs permettent d'avoir le minimum d'électrons nécessaire pour l'amorçage initial de la décharge.

Туре	Equation de réaction	$\gamma_r$
Advarption	$e^- + s \Rightarrow s^-$	
d'un électron	$e^- + F^s \Rightarrow F^{s-}$	1,00
	$e^- + BF_2^s \Rightarrow BF_2^{s-}$	
Adsorption	$F + s^{(-)} \Rightarrow F^{s(-)}$	1.00
d'un neutre	$BF_2 + s^{(-)} \Rightarrow BF_2^{s(-)}$	1,00
Decembination	$F + F^{s(-)} \Rightarrow s^{(-)} + F_2$	
d'un neutre	$^{1}F + BF_{2}^{s(-)} \Rightarrow s^{(-)} + BF_{3}$	variable
a un neutre	$BF_2 + \overline{F^{s(-)}} \Rightarrow s^{(-)} + BF_3$	
Neutralisation	$BF_3^+ + X^{s-} \Rightarrow X^s + BF_3$	1.00
d'un ion	$BF_2^+ + X^{s-} \Rightarrow X^s + BF_2$	1,00

 TABLE II.5 – Réactions de surface associées à un plasma comportant 8 espèces en volume.

6. La fraction initiale des espèces de surface est de  $10^{-8}$  sauf pour  $s^-$  où elle est proche de 1, ce qui revient à considérer que la surface à adsorbé une monocouche d'électrons. Ces valeurs permettent d'étudier la dynamique d'adsorption des espèces neutres sur la surface sans nuire au démarrage de la décharge, lorsque la densité électronique est encore très faible et qu'une adsorption rapide des électrons créés rendrait difficile l'amorçage.

Les grandeurs variables faisant l'objet de l'étude paramétrique sont :

- La puissance locale  $P_{abs}^x$  dans chaque section de la source varie selon les niveaux 5 / 50 / 100 / 150 / 200 / 250 / 295 W. Elle est choisie de manière à ce que la puissance totale  $P_{tot} = P_{abs}^{HP} + P_{abs}^{BP}$  soit égale à 300W durant la phase active du pulse RF.
- La probabilité d'occurrence  $\gamma_r$  des réactions de recombinaison neutre-neutre, définies dans la section 2.2 et d'équation générale  $X + Y_s \Rightarrow s + XY$ , varie selon les niveaux 0,05 / 0,10 / 0,50 / 1,00.

### 5.5 Résultats obtenus pour la section haute pression

Les simulations dans la partie haute pression (HP) de la source sont réalisées pour une pression de 3,7 Pa (calculée dans la section 5.1) et une magnétisation axiale nulle. La probabilité de recombinaison neutre est fixée à une valeur de 0,10. La durée de simulation du plasma est égale au temps de résidence du gaz précurseur dans cette section du réacteur (calculée dans la section 1.1) soit 450 millisecondes.

### 5.5.1 Impact de la puissance injectée

On étudie tout d'abord l'impact de la puissance RF injectée sur l'évolution des fractions molaires des espèces en volume et des fractions surfaciques des espèces de paroi. On constate tout d'abord que la décharge ne peut être maintenue pour une puissance inférieure à 100 W, comme illustrée par la figure II.10 : les oscillations électroniques augmentent avec le temps à partir de 5 ms tandis que la valeur

moyenne de la fraction molaire électronique diminue, ce qui finit par conduire à une fraction électronique trop faible en fin de pulse pour que le plasma puisse se maintenir jusqu'à la montée en puissance suivante.



FIGURE II.10 – Évolution temporelle des fractions molaires ioniques dans la section HP de la source pour  $P_{abs} = 50$  W. L'échelle des abscisses est logarithmique jusqu'à 5 millisecondes et linéaire ensuite.

On synthétise dans le tableau II.6 les résultats en régime permanent de deux simulations réalisées pour une puissance RF respective de 100 et 295 W. La répartition de l'énergie perdue par le plasma nous est fourni par le quotient de l'énergie dissipée dans un mode donné sur le total de l'énergie perdue à un instant t. Les modes ' $e^-$ /parois' et 'ions/parois' correspondent à la perte de l'énergie cinétique des électrons et ions lorsqu'ils impactent les parois du réacteur, tandis que le mode 'inélastique' correspond aux réactions ne générant pas de fragments mais dissipant de l'énergie dans le plasma.

On peut noter que le taux de décomposition et la fraction totale des espèces chargées s'accroissent avec la puissance déposée, une évolution logique étant donné que 10 à 12 % de l'énergie déposée dans le plasma est dépensée dans des réactions de fragmentation.

Comme le montrent les figures II.11 et II.12, les deux simulations présentent une évolution similaire de la fraction molaire des fragments en fonction du temps, avec plusieurs constatations importantes :

- 1. Les fractions du  $BF_2$  et F sont initialement très proches car la réaction  $e^- + BF_3 \Rightarrow BF_2 + F + e^-$  constitue le principal mécanisme de dissociation du gaz précurseur. La divergence des fractions de ces composés après la première milliseconde est due à l'importance croissante de la réaction de recombinaison  $F + BF_{2s} \Rightarrow s + BF_3$ , qui consomme le fluor gazeux mais nécessite une adsorption significative du  $BF_2$  à la surface pour être effective. Cet enchaînement adsorption recombinaison explique pourquoi la divergence intervient tardivement dans l'évolution de la décharge.
- 2. Le  $BF_2^+$  reste l'ion majoritaire durant tout la durée de la décharge parce que le taux de réaction associé à la dissociation ionisante produisant du  $BF_2^+$  est

espèce	Fractions		mode	Rapport des pertes	
$P_{abs} =$	100 W	295 W	$P_{abs} =$	100 W	295 W
BF <sub>3</sub>	$8,76 \cdot 10^{-1}$	$7,60 \cdot 10^{-1}$	<i>e</i> <sup>-</sup> /parois	$7,82 \cdot 10^{-3}$	$6,95 \cdot 10^{-3}$
$F_2$	$2,51 \cdot 10^{-2}$	$3,46 \cdot 10^{-2}$	ions/parois	$2,08 \cdot 10^{-2}$	$1,92 \cdot 10^{-2}$
$BF_3^+$	$4,43 \cdot 10^{-5}$	$6,84 \cdot 10^{-5}$	ionisation	$6,84 \cdot 10^{-8}$	$8,69 \cdot 10^{-8}$
$BF_2^+$	$2,17 \cdot 10^{-4}$	$5,53 \cdot 10^{-4}$	attachement	$1,67 \cdot 10^{-2}$	$2,57 \cdot 10^{-2}$
$F^{-}$	$2,13 \cdot 10^{-4}$	$4,54 \cdot 10^{-4}$	inélastique	$8,71 \cdot 10^{-1}$	$8,54 \cdot 10^{-1}$
$e^-$	$4,83 \cdot 10^{-5}$	$1,67 \cdot 10^{-4}$	dissociation	$8,39 \cdot 10^{-2}$	$9,37 \cdot 10^{-2}$

**TABLE II.6** – Valeurs des fractions molaires (gauche) et du rapport de la perte d'énergie dans un mode sur le total des pertes (droite) obtenues en regime permanent dans la section haute de la source pour t = 0,44995 s et deux valeurs de la puissance déposée.

plus favorable que celui pour l'ionisation simple produisant du  $BF_3^+$ , avec  $K_{BF2+} = 3,73 \cdot 10^{-17} m^{-3} s^{-1}$  contre  $K_{BF3+} = 1,63 \cdot 10^{-17} m^{-3} s^{-1}$  pour  $T_e = 3,1$  eV.

- 3. La fraction molaire du  $F_2$  est initialement faible parce qu'aucune réaction en volume ne permet de le produire dans le schéma à 8 espèces. En revanche, la recombinaison du F gazeux (produit via la dissociation en volume du  $BF_3$ ) avec le fluor adsorbé en surface permet la synthèse de  $F_2$ .
- 4. La réaction  $BF_3 + e^- \Rightarrow F^- + BF_2$  permet de produire les ions  $F^-$  durant les premières microsecondes de la décharge lorsque la fraction du  $F_2$  est encore faible, mais elle est beaucoup moins favorable que l'attachement du  $F_2$  comme illustrée par la figure B.6 en annexe. Le plasma devient notablement électronégatif au bout d'environ 800  $\mu$ s, lorsque suffisamment de  $F_2$  a été créé à partir de la recombinaison en surface de F pour que le mécanisme d'attachement  $F_2 + e^- \Rightarrow F^- + F$  produise une quantité significative d'ions négatifs.
- 5. Le régime permanent est obtenu au bout d'environ 20 ms lorsque qu'un équilibre est atteint dans plusieurs ensembles de réactions antagonistes concernant le même fragment. Pour prendre un exemple, la fraction du  $F^-$  est stable si sa production par attachement est contrebalancé par les réactions de détachement  $F^- + e^- \Rightarrow F + 2e^-$  et de neutralisation mutuelle  $BF_x^+ + F^- \Rightarrow$  $BF_x + F$ . Cet état stable implique un équilibre entre les fractions de cinq espèces ( $BF_3$ ,  $F_2$ ,  $BF_3^+$ ,  $BF_2^+$  et  $e^-$ ) ainsi que des restrictions sur les valeurs de  $T_e$ compatibles avec un tel équilibre.

En ce qui concerne l'évolution temporelle de la fraction des espèces de surface, représentée en figure II.13, on observe une convergence rapide entre la fraction d'une espèce adsorbée et de son équivalent chargé. Ce fait s'explique par l'équilibre entre l'adsorption électronique  $e^- + X_s \Rightarrow X_s^-$  et la recombinaison ionique  $X^+ + Y_s^- \Rightarrow X + Y_s$ : ces deux types de réactions ont le même coefficient d'occurrence  $\gamma_r$  (fixé ici à 1) et donnent le même taux de production si les densité ioniques et électroniques sont comparables, ce qui est approximativement le cas comme illustrée par la figure II.12. En régime permanent, les molécules adsorbées recouvrent environ 99,4% des surfaces de la source, avec une fraction de sites chargées égale à 50 %.



FIGURE II.11 – Évolution temporelle des fractions molaires des espèces en volume pour  $P_{abs} = 100$ W. La moitié gauche du graphique représente la décomposition initiale du gaz précurseur avec une échelle des temps logarithmique, tandis que la moitié droite représente le régime permanent avec une échelle linéaire comportant 1 graduation par période du pulse RF.



FIGURE II.12 – Évolution temporelle des fractions molaires pour  $P_{abs} = 295$  W, représentée selon le même principe que pour la figure II.11.

La variation des espèces de surface a un impact notable sur l'évolution des espèces de volume et inversement :

- Comme  $F_s$  et  $F_s^-$  sont prédominants sur la surface durant les 20 premières  $\mu s$ , la réaction de recombinaison  $F + F_s \Rightarrow s + F_2$  est privilégiée et conduit à une augmentation rapide de la fraction molaire du  $F_2$  en volume durant la même période.
- La prédominance du  $BF_{2s}$  après 100  $\mu$ s résulte de l'évolution des neutres en volume, où le  $BF_2$  remplace le fluor comme fragment majoritaire à partir



FIGURE II.13 – Évolution temporelle de la fraction des espèces en surface pour  $P_{abs} = 295$  W.

de la même période. Cette prépondérance conduit également à augmenter l'importance relative de la réaction de recombinaison en surface  $F + BF_{2s} \Rightarrow BF_3 + s$  qui consomme le fluor gazeux.

Si l'on trace en fonction de la puissance déposée les valeurs de la fraction des espèces du plasma et des parois en régime permanent et pour un temps relatif dans le pulse RF de 60  $\mu$ s (cf. figure II.14) on peut constater plusieurs évolutions intéressantes :

- La fraction du  $F_2$  évolue de manière moins prononcée en fonction de la puissance que celle du F, avec  $xF \approx 6, 8 \cdot 10^{-2} \approx 2xF_2$  pour 295 W. Ceci est dû au fait que le  $F_2$  est produit par un processus en deux étapes (production de Fvia la dissociation du  $BF_3$ , puis recombinaison du fluor gazeux avec le fluor adsorbé sur la paroi) dont la probabilité d'occurrence est moindre que celle d'un processus à une seule étape.
- L'évolution importante de la fraction électronique  $(4,827 \cdot 10^{-5}$  pour 100 W contre  $(1,665 \cdot 10^{-4}$  pour 295 W) s'explique par le fait qu'augmenter la puissance déposée nécessite d'augmenter la densité électronique si  $T_e$  est constante, ce qui est généralement le cas durant la phase allumée du pulse RF d'après les résultats présentés en figure II.15.
- La fraction du  $BF_{2s}$  est relativement stable quelque soit la puissance déposée, parce que les réactions conduisant à sa production ( $BF_2 + s \Rightarrow BF_{2s}$ ) ou sa consommation ( $F + BF_{2s} \Rightarrow BF_3 + s$ ) impliquent les réactifs gazeux  $BF_2$ et F. Or ces espèces évoluent de manière quasi parallèle en fonction de la puissance, avec un rapport de leurs fractions compris entre 3,1 et 3,9, parce qu'elles sont tous deux issues principalement de la réaction de dissociation neutre du  $BF_3$ .
- L'augmentation de la fraction du fluor adsorbé  $F_s$  est liée à l'augmentation concomitante de la fraction de son précurseur gazeux.

On s'intéresse également à l'impact de la puissance déposée sur la valeur en



FIGURE II.14 – Évolution de la fraction des espèces composant le plasma en fonction de la puissance déposée. Résultats obtenus dans la section HP en régime permanent pour un temps relatif dans le pulse RF de 60  $\mu$ s. Seule les fractions des espèces neutres de surface sont représentées car leurs contreparties chargées présentent les mêmes valeurs et la même évolution en fonction de la puissance.

régime permanent des autres paramètres du plasma : température électronique, électronégativité du plasma, potentiel flottant et vitesse de Bohm.

Dans le cas de la température électronique, présentée dans la figure II.15, on remarque qu'elle atteint un maximum de 6,5 eV durant le claquage en début du pulse RF, avant de se stabiliser aux alentours de 3,1 eV au bout de 20  $\mu$ s. Le pic initial s'explique par la baisse notable de la densité électronique durant la phase éteinte du pulse RF, avec une densité chutant de près d'une décade comme indiquée par la figure II.12. La puissance déposée est donc initialement repartie sur un nombre d'électrons réduit, conduisant à une énergie unitaire plus élevée et par là même une température électronique supérieure.

La température électronique ne présente pas de variation majeure en fonction de la puissance déposée, deux raisons pouvant expliquer cette stabilité :

- L'énergie acquise par un électron, qui permet de définir la  $T_e$ , dépend évidemment de la densité électronique dans le plasma. Cette dernière est modulée par les pertes d'électrons sur les parois, qui sont proportionnelles à la surface effective de perte  $S_{eff}$  définie dans l'équation (II-2.20) et basée sur les rapports de densité  $h_R$  et  $h_Z$ . Or ces derniers dépendent de la pression via le libre parcours moyen  $\lambda_i$ , comme noté dans l'équation (II-2.21), mais pas de la puissance absorbée. Il en résulte donc que la température électronique ne varie que peu du fait de ce mécanisme.
- La valeur de *T<sub>e</sub>* dépend aussi de la proportion de l'ionisation par rapport aux différents modes de perte de l'énergie gagnée par le plasma. Si le rapport entre les modes de perte dominants change significativement, l'énergie transférée depuis les électrons va varier en conséquence et par là même leur tem-

pérature. Or cette répartition évolue peu en fonction de la puissance, comme attesté par le tableau II.6.

Comme présentée dans la figure II.16, l'électronégativité du plasma diminue lorsque la puissance déposée augmente avec une valeur en milieu de période de 3,75 pour 100 W contre 2,70 pour 295 W. Cette évolution est due à l'augmentation de la fraction électronique nécessaire pour dissiper la puissance absorbée addition-nelle lorsque la température électronique est pratiquement constante, comme c'est le cas ici entre 20 et 100  $\mu$ s dans la période du pulse RF (cf. figure II.15). Par ailleurs, la très forte hausse de l'électronégativité durant la phase éteinte du pulse, entre 100 et 120  $\mu$ s, tient à la chute de la densité électronique durant cette phase (cf. figure II.12).



FIGURE II.15 – Évolution de la température électronique dans la section HP en régime permanent, pour une puissance déposée variable.

FIGURE II.16 – Évolution de l'électronégativité du plasma dans la section HP en régime permanent, pour une puissance déposée variable.

Le potentiel flottant sur les parois, présenté dans la figure II.17, est proportionnel à  $T_e$  pour une électronégativité donnée comme démontrée par l'équation (II-4.15). Or l'électronégativité est stable durant la phase active du pulse RF après 20  $\mu$ s (cf. figure II.16) donc le potentiel est ici d'une stabilité comparable à la température électronique.

Dans le cas de la vitesse de Bohm, présentée dans la figure II.18, elle augmente avec la puissance déposée car elle varie de manière inversement proportionnelle à l'électronégativité dans la gaine  $\alpha_g$  (cf. équation II-4.3 tandis que  $\alpha_g$  varie de manière non-linéaire mais proportionnelle à l'électronégativité dans le plasma  $\alpha_p$  (cf. équation II-4.6). Or  $\alpha_p$  diminue avec la puissance déposée comme noté précédemment.

### 5.5.2 Impact de la probabilité de recombinaison $\gamma_r$

On étudie ensuite l'impact de la probabilité de recombinaison neutre  $\gamma_r$  sur l'évolution de la fraction des espèces en volume et de celle des espèces de surfaces, dont les résultats en régime permanent sont donnés en figure II.19. La puissance RF déposée est fixée à 295 W. On peut noter que :

– Le taux de décomposition, c'est-à-dire le total de la fraction des fragments issus du  $BF_3$ , tend à diminuer avec l'augmentation de  $\gamma_r$  car les réactions de recombinaison neutre-neutre redonnant du  $BF_3$  deviennent plus efficaces. Les fractions du  $BF_2$  et F sont fortement impactées par la variation de la



FIGURE II.17 – Évolution du potentiel flottant dans la section HP en régime permanent pour une puissance déposée variable.



FIGURE II.18 – Évolution de la vitesse de Bohm dans la section HP en régime permanent pour une puissance déposée variable.

probabilité car ces deux fragments sont les réactifs prépondérants pour les réactions de recombinaison déjà citées.

- La fraction du *F*<sub>2</sub> diminue avec la probabilité du fait de la diminution concomitante de la fraction du *F<sub>s</sub>*, qui constitue un réactif nécessaire pour la réaction de recombinaison en surface donnant du *F*<sub>2</sub>.
- La fraction du fluor adsorbé  $F_s$  diminue avec l'augmentation de la probabilité car les réactions de recombinaison neutre  $(X + F_s \Rightarrow XF + s)$  de coefficient variable voient leur importance relative augmenter par rapport aux réactions d'adsorption  $(F + s \Rightarrow F_s)$  dont le coefficient est fixe. La fraction des sites libres *s* a un comportement inverse car cette espèce représente le produit des réactions de recombinaison utilisant  $F_s$  comme réactif.
- Le même raisonnement peut être tenu pour les sites chargés  $s^-$  et  $F_s^-$  puisque les réactions les impliquant sont identiques en matière de réactifs et produits gazeux ainsi que de probabilité de recombinaison.
- La fraction du  $BF_2^s$  est relativement stable quelque soit la valeur de  $\gamma_r$  du fait d'un équilibre entre la densité du  $BF_2$  en volume et la fraction de sites libres, toutes deux nécessaires pour réaliser la réaction d'adsorption  $BF_2 + s \Rightarrow BF_{2s}$ . Par ailleurs, la réaction de recombinaison  $F + BF_{2s} \Rightarrow BF_3 + s$  a un impact limité sur la fraction du  $BF_{2s}$ , du fait de la diminution rapide de la fraction du fluor avec  $\gamma_r$ .

Pour un  $\gamma_r$  de 0,05, la fraction du  $BF_2$  atteint 20% mais les sites libres ne représentent que 1,5% de la surface, ce qui consitue le facteur limitant pour l'adsorption. A l'inverse, la fraction du  $BF_2$  baisse à 5,5% pour un  $\gamma_r$  de 1,00 mais les sites libres représentent 15% de la surface, le premier terme constituant alors le facteur limitant.

### 5.6 Résultats obtenus pour la section basse pression

Les simulations dans la partie basse pression (BP) de la source sont réalisées pour une pression de 0,30 Pa, une probabilité de recombinaison neutre  $\gamma_r$  de 0,10 et une magnétisation axiale suffisante pour rendre négligeable la diffusion radiale, sauf mention contraire. La durée de simulation du plasma est la même que pour la section haute, soit 450 millisecondes, bien que le temps de résidence du gaz



**FIGURE II.19** – Evolution de la fraction (volumique ou surfacique) des espèces composant le plasma dans la section HP, en fonction de la valeur de  $\gamma_r$  et pour une puissance déposée de 295W.

précurseur dans cette section du réacteur (calculée dans la section 1.1) ne soit que de 70 millisecondes.

### 5.6.1 Impact de la composition en amont

Compte tenu du possible couplage des fractions molaires entre les deux sections de la source, il est nécessaire de déterminer l'impact de la composition en entrée de la section basse sur sa composition en sortie. On réalise donc deux simulations de la section basse, avec soit une injection de BF3 pur soit une injection de composition identique à la section haute. L'écart entre les fractions molaires pour chacune des deux simulations, calculées pour deux valeurs de la puissance locale, sont représentés sur les figures II.20 et II.21. Ces dernières permettent de comparer la composition finale en régime permanent selon le type d'entrée.



FIGURE II.20 – Fractions molaires dans la section BP pour une puissance déposée locale de 5 W, avec un flux en entrée soit de BF<sub>3</sub> pur (lignes pleines) soit issu de la section HP (lignes tirétées)



FIGURE II.21 – Fractions molaires dans la section BP pour une puissance déposée locale de 100 W, avec un flux en entrée soit de BF<sub>3</sub> pur (lignes pleines) soit issu de la section HP (lignes tirétées)

On constate que l'écart relatif des fractions ioniques en régime permanent (t > 100 ms) est beaucoup plus important pour une puissance de 5 W que pour 100 W, avec un maximum de 25% pour le premier cas contre moins de 2% pour le second. Ceci indique que la contribution de l'injection de gaz à la fraction molaire est plus significative à basse puissance. En effet, la température électronique en régime permanent est plus faible à basse puissance ( $\approx$  4,3 eV pour 5 W contre  $\approx$  6,3 eV pour 100 W) comme indiquée par la figure II.28, donc la contribution de l'ionisation locale est notablement plus modeste à basse puissance ( $k_{BF_3} = 6,42 \cdot 10^{-17}m^{-3}s^{-1}$  pour  $T_e = 4,3$  eV contre 5,42  $\cdot 10^{-16}m^{-3}s^{-1}$  pour  $T_e = 6,3$  eV).

### 5.6.2 Impact de la puissance injectée

On étudie tout d'abord l'impact de la puissance RF injectée sur l'évolution des fractions molaires des espèces en volume et celles des espèces de surfaces. Le coefficient de collage des neutres est fixé à 0.10.

La première constatation est que la puissance RF locale doit rester inférieure ou égale à 100 W dans le cas où la section est magnétisée pour que le modèle reste dans son domaine de validité. Dans le cas contraire, la décomposition du gaz précurseur devient suffisamment importante pour que les fragments  $BF_2$  et F deviennent prédominants, comme indiqué par la figure II.22. Or le schéma réactionnel utilisé est obligatoirement incomplet pour  $BF_2$  car toute réaction de décomposition l'impliquant comme réactif produit nécessairement du BF ou du B. Cette asymétrie du schéma conduit à sérieusement sous-estimer les pertes d'énergie par dissociation neutre, ce qui induit un emballement de la décomposition et se traduit par des instabilités dans les fractions ioniques, comme montré dans la figure II.23. Les résultats obtenus pour une puissance locale supérieure à 100 W sont donc sujets à caution.



FIGURE II.22 – Évolution temporelle des fractions molaires des espèces en volume dans la section BP pour  $P_{abs} = 200$  W.



FIGURE II.23 – Évolution des fractions ioniques (courbes pleines, échelle de gauche) et de la température électronique (courbe tireté, échelle de droite) dans la section basse de la source, en régime permanent et pour une puissance déposée de 200 W. On peut constater des instabilités notables pour les fractions ioniques durant la phase allumée du pulse RF, ce qui indique que le modèle n'est plus placé dans son domaine de validité.

On présente ici deux simulations pour une puissance respective de 5 et 50 W avec les résultats en régime permanent rassemblés dans le tableau II.7. On constate d'emblée que l'impact de la puissance déposée sur la décomposition est beaucoup plus notable qu'en section haute pression, car le taux de décomposition en régime permanent est de 15% à 5 W contre 56% à 50 W, avec une électronégativité de 3,38 à 5 W et de 2,19 à 50 W.

Fractions molaires				Rapport o	des pertes
espèce	5 W	50 W	mode	5 W	50 W
BF <sub>3</sub>	$8,58 \cdot 10^{-1}$	$4,39 \cdot 10^{-1}$	<i>e</i> <sup>-</sup> /parois	$1,35 \cdot 10^{-2}$	$6,76 \cdot 10^{-2}$
$F_2$	$3,52 \cdot 10^{-2}$	$1,04 \cdot 10^{-1}$	ions/parois	$3,77 \cdot 10^{-2}$	$1,27 \cdot 10^{-1}$
$BF_3^+$	$7,53 \cdot 10^{-5}$	$9,58 \cdot 10^{-5}$	ionisation	$1,46 \cdot 10^{-7}$	$3,84 \cdot 10^{-7}$
$BF_2^+$	$3,62 \cdot 10^{-4}$	$1,35 \cdot 10^{-3}$	attachement	$1,17 \cdot 10^{-2}$	$1,38 \cdot 10^{-2}$
$F^{-}$	$3,37 \cdot 10^{-4}$	$9,96 \cdot 10^{-4}$	inélastique	$7,49 \cdot 10^{-1}$	$3,94 \cdot 10^{-1}$
<i>e</i> <sup>-</sup>	$9,98 \cdot 10^{-5}$	$4,53 \cdot 10^{-4}$	dissociation	$1,88 \cdot 10^{-1}$	$3,97 \cdot 10^{-1}$

TABLE II.7 – Valeurs des fractions molaires (gauche) et du rapport de la perte d'énergie dans un mode sur le total des pertes (droite) obtenues en regime permanent dans la section BP pour t = 0,45 s et deux valeurs de la puissance déposée.

Une comparaison entre une simulation dans la section haute de la source (figure II.12) et une dans la section basse (figure II.24) permet de constater que l'évolution

temporelle de la fraction des espèces en volume est qualitativement similaire dans les deux cas de figure, avec un plasma qui devient notablement électronégatif au bout d'environ 2 ms. Les mécanismes gouvernant cette évolution sont les mêmes que ceux détaillées en section 5.5.1 pour la portion haute pression de la source.



FIGURE II.24 – Évolution temporelle de la fraction molaire lissée des espèces en volume dans la section basse pression de la source pour  $P_{abs} = 5$  W



FIGURE II.25 – Évolution temporelle de la fraction molaire lissée des espèces en volume dans la section basse pression de la source pour  $P_{abs} = 50 \text{ W}$ 

On peut noter également que la variation de la fraction des espèces de surface présente un comportement similaire au cas de la section haute de la source, comme l'atteste une comparaison des figures II.13 et II.26.

L'évolution de la fraction des différentes espèces (volumiques ou surfaciques) en fonction de la puissance est similaire au cas de la section haute de la source,



FIGURE II.26 – Évolution temporelle de la fraction surfacique lissée des espèces en surface dans la section basse pression de la source pour  $P_{abs} = 5$  W

comme illustrée par la figure II.27. Cependant, on observe entre 50 W et 100 W que le plasma initialement électronégatif évolue vers un régime électropositif. Un mécanisme possible pour expliquer cette transition est le suivant :

- 1. Contrairement au cas de la section haute pression, l'augmentation de la puissance déposée conduit à un accroissement notable de la température électronique, qui monte de 4,2 à 6,6 eV comme illustrée par la figure II.28. La densité électronique augmente afin de dissiper l'énergie rajoutée, mais le taux d'ionisation évolue de manière moins importante que la puissance absorbée ( $n_e$  ne fait que doubler lorsque  $P_{abs}$  passe de 10 à 50 W) d'où une augmentation de l'énergie reçue par électron.
- 2. Le décalage de  $T_e$  vers des valeurs plus élevées modifie l'importance de différentes réactions impliquées dans la création des ions, comme l'indiquent les figures B.2, B.5 et B.7 en annexe. Le tableau II.8 synthétise la variation des constantes de réaction pour différents processus de fragmentation. On constate notamment que le quasi-équilibre entre les réactions d'attachement et de détachement est rompu lorsque  $T_e$  augmente, tandis que les réactions de dissociation gagnent en importance.
- 3. La variation de la chimie en volume de la décharge entraîne un changement du mode prédominant de perte d'énergie, illustré en figure II.29. La prédominance des réactions de dissociation à forte puissance conduit à la diminution de la fraction du  $F_2$ , or ce dernier est nécessaire pour produire l'ion  $F^-$ .
- 4. L'augmentation rapide de l'importance des réactions conduisant au  $BF_2^+$  par rapport à celles produisant du  $F^-$  entraine une baisse notable de l'électronégativité du plasma (cf. figure II.28) et la transition du plasma vers un régime électropositif.

Concernant l'impact de la puissance déposée sur la vitesse de Bohm et l'électro-



**FIGURE II.27** – Évolution de la fraction (volumiques ou surfacique) des espèces composant le plasma dans la section basse pression de la source, en fonction de la puissance déposée, pour un  $\gamma_r$  de 0,10.



selec/parois elec/parois elec

FIGURE II.28 – Évolution en régime permanent de  $T_e$  (courbe pleine) et de l'électronégativité (courbe tiretée) dans la section BP, en fonction  $deP_{abs}$  et pour un  $\gamma_r$  de 0,10.

FIGURE II.29 – Évolution de la contribution des différents modes de perte d'énergie dans la section BP en régime permanent, en fonction de  $P_{abs}$  et pour un  $\gamma_r$  de 0,10.

	$k_r^v$ pour $T_e$ =		
Equation de la réaction	4,2 eV	6,6 eV	
$e^- + BF_2 \Rightarrow BF_2^+ + 2e^-$	$1,5 \cdot 10^{-15}$	$7,0\cdot 10^{-15}$	
$e^- + BF_3 \Rightarrow BF_2^+ + 2e^-$	$2,0\cdot 10^{-16}$	$1, 5 \cdot 10^{-15}$	
$e^- + BF_3 \Rightarrow BF_2 + F + e^-$	$1,0\cdot 10^{-15}$	$5,0\cdot 10^{-15}$	
$e^- + F_2 \Rightarrow 2F + e^-$ (total)	$1, 5 \cdot 10^{-15}$	$2, 2 \cdot 10^{-15}$	
$e^- + F_2 \Rightarrow F^- + F$	$2,0\cdot 10^{-15}$	$1,0\cdot 10^{-15}$	
$e^- + F^- \Rightarrow 2F + 2e^-$	$2,0\cdot 10^{-15}$	$7,0\cdot 10^{-15}$	

TABLE II.8 – Valeurs approximatives des constantes de réaction  $(m^{-3}s^{-1})$  associées à plusieurs processus de fragmentation, pour deux niveaux de la température électronique en régime permanent. Ces valeurs de  $T_e$  sont issues de deux simulations dans la section basse de la source pour une puissance déposée de 10 et 50 W respectivement.

négativité du plasma en régime permanent, plusieurs constatations intéressantes peuvent être faites :

Tout d'abord, la vitesse de Bohm présente des transitions soudaines durant le cycle RF pour des puissances absorbées supérieures à 25 W, avec une vitesse ionique rapidement multipliée par 3 à 10, comme illustré dans la figure II.32. Elles s'expliquent par le caractère fortement non-linéaire de l'évolution du paramètre  $\alpha_g$ en fonction de l'électronégativité du plasma  $\alpha_p$ . Ce terme est défini dans l'équation (II-4.6) et employé dans le calcul de la vitesse de Bohm généralisée. Lorsque l'on trace la vitesse de Bohm en fonction de l'électronégativité du plasma (cf. figure II.33) on observe un transition abrupte pour  $\alpha_p \approx 2,2$  dans le cas où le rapport  $T_e/T_g$  dépasse 50, soit un  $T_e > 1,3$  eV dans notre cas de figure.

La figure II.30 montre clairement que l'électronégativité diminue lorsque la puissance augmente, le plasma devenant même électropositif durant la majeure partie de la période du cycle RF pour  $P_{abs}$  = 100 W. Le mécanisme sous-jacent à cette variation est celui déjà developpé pour expliquer la figure II.27.





FIGURE II.30 – Évolution de l'électronégativité du plasma en régime permanent dans la section BP, pour différentes valeurs de P<sub>abs</sub>.

FIGURE II.31 – Évolution des fractions ioniques en régime permanent dans la section BP pour  $P_{abs} = 50$  W.

On observe par ailleurs pour 25 et 50 W une rupture de pente dans l'évolution de l'électronégativité, qui ne descend pas en dessous de 2,2. Ce comportement singulier peut être expliqué par l'évolution de la vitesse de Bohm, illustrée en figure II.32 : l'augmentation brutale de ce paramètre entre 10 et 100  $\mu$ s induit des flux ioniques vers les parois nettement plus élevés qu'initialement. Comme le plasma est électriquement neutre, un flux ionique accru implique un flux électronique variant dans le même sens, même si la présence d'un potentiel flottant élevé au niveau des parois en limite la valeur. L'accroissement soudain des pertes en surface va modifier l'équilibre de la décharge et limiter la valeur possible de la densité électronique, comme illustrée par la figure II.31. Cette stabilité de  $n_e$  durant la phase allumé de la période RF conduit à maintenir l'électronégativité à sa valeur limite.

Concernant l'évolution de la température électronique en fonction de la puissance absorbée, telle que présentée dans la figure II.34, les ruptures de pente observées en début de cycle pour une puissance de 25 et 50 W s'expliquent de la même manière que pour l'électronégativité. L'absence de variation de la  $T_e$  entre 10 et 100  $\mu$ s pour ces deux puissances tient à la stabilité de la densité électronique durant la





FIGURE II.32 – Évolution de la vitesse de Bohm en régime permanent dans la section BP, pour différentes valeurs de  $P_{abs}$ .

FIGURE II.33 – Évolution du rapport des vitesses de Bohm  $v_B^-/v_B^+$ , calculé à partir de l'équation (II-4.3), en fonction de  $\alpha_p$  et de  $\gamma_t$ .

même période, qui est due au nouveau équilibre entre l'ionisation et les pertes aux parois après l'augmentation subite des flux d'espèces chargées vers les parois.

Le potentiel flottant, illustré en figure II.35, suit une évolution similaire durant la phase allumée du cycle RF, car il est proportionnel à la température électronique lorsque l'électronégativité est constante.



45 40 -Potentiel flottant (inversé) (eV) 35 -30 -25 -20 -15-005W 010W 10-025W 050W 5-100W 0 ò 20µ 100µ . 120µ 40µ 60µ 80µ Temps relatif dans le pulse RF (s)

FIGURE II.34 – Évolution de la température électronique en régime permanent dans la section BP, pour différentes valeurs de P<sub>abs</sub>.

FIGURE II.35 – Évolution du potentiel flottant en régime permanent dans la section BP, pour différentes valeurs de  $P_{abs}$ .

### 5.6.3 Impact de la probabilité de recombinaison $\gamma_r$

On étudie ensuite l'impact de la valeur de la probabilité de recombinaison neutre  $\gamma_r$  sur l'évolution des fractions molaires des espèces en volume et celles des espèces de surface. La puissance déposée est fixée à 5 W et les résultats obtenus en regime permanent sont présentés dans la figure II.36.

– On constate une diminution de 50% de la fraction de  $BF_2$  et F lorsque  $\gamma_r$  augmente car la capture de ces deux neutres sur la surface et leur recombinaison

en  $BF_3$  est de plus en plus efficace. Ceci explique également que la fraction du  $BF_3$  augmente de 80% à 94% dans le même intervalle.

- La fraction du  $F_2$  diminue avec  $\gamma_r$  du fait de la baisse rapide des fractions de F et  $F_s$ , qui sont les réactifs de la réaction de recombinaison produisant le  $F_2$ .
- La diminution de la fraction de  $BF_2^+$  avec l'augmentation de  $\gamma_r$  s'explique par la raréfaction de son précurseur neutre  $BF_2$  du fait d'une recombinaison en surface plus efficace. L'évolution de la fraction de  $F^-$  s'explique par la baisse de la fraction de son précurseur  $F_2$ .
- La stabilité des fractions du  $BF_3^+$  et des électrons peut s'expliquer par un équilibre entre la neutralisation en surface  $BF_3^+ + s^- \Rightarrow BF_3 + s$ , l'adsorption électronique  $e^- + s \Rightarrow s^-$  et l'ionisation en volume  $e^- + BF_3 \Rightarrow BF_3^+ + 2e^-$ . Les deux premières équations donnent une réaction de recombinaison électronique qui consomme le  $BF_3^+$  et réinjecte les électrons adsorbés dans le volume plasma. Sa vitesse de réaction dépend de la fraction des sites libres *s* tandis que l'ionisation dépend de la fraction du  $BF_3$ , or ces deux quantités augmentent avec la valeur de  $\gamma_r$ .
- − la fraction du *F*<sub>s</sub> diminue lorsque  $\gamma_r$  augmente car les réactions de recombinaison le concernant deviennent plus fréquentes. Etant donné que la fraction du *BF*<sub>2s</sub> est au minimum 3 fois supérieure à celle du *F*<sub>s</sub>, la réaction de recombinaison *F* + *BF*<sub>2s</sub> ⇒ *BF*<sub>3</sub> + *s* est favorisée par rapport à la réaction *F* + *F*<sub>s</sub> ⇒ *F*<sub>2</sub> + *s*.
- Le caractère stable de la fraction du  $BF_{2s}$  s'explique pour les mêmes raisons que celles données en section 5.5.2 pour le cas de la section haute pression.
- L'augmentation des sites libres *s* avec la valeur de  $\gamma_r$  tient à deux facteurs : une recombinaison plus efficace qui laisse davantage de sites disponibles durant un intervalle de temps donné, et la baisse de la fraction des neutres en volume qui laisse un intervalle de temps plus long entre chaque nouvelle adsorption d'un neutre sur la surface.

On étudie également l'impact de  $\gamma_r$  sur les autres paramètres plasmas :

- La température électronique (cf. figure II.37 évolue peu en fonction de la probabilité de recombinaison, puisqu'elle dépend de la densité électronique et que cette dernière est stable quelque ce soit la valeur de  $\gamma_r$ . Le potentiel flottant suit une évolution similaire car il est relié de manière linéaire à  $T_e$ .
- Comme montré par la figure II.38, la valeur de l'électronégativité durant la phase allumée du pulse RF diminue avec  $\gamma_r$  et varie de 30% sur l'intervalle, une évolution concordante avec celle des fractions molaires du  $F^-$  dans la figure II.36. Elle est cependant toujours supérieure à 2,2, le plasma restant dans un mode "électronégatif pur" où la vitesse de Bohm garde un comportement linéaire.
- Le potentiel flottant sur les parois  $\phi_w$  est proportionnel à  $T_e$  pour une électronégativité donnée comme indiquée par l'équation (II-4.15). Le quotient  $\phi_w/T_e$ , présenté dans la figure II.39, permet d'isoler l'influence de l'électronégativité sur la potentiel. On constate que la variation du potentiel en fonction de  $\gamma_r$  est surtout notable durant les 20 premières microsecondes de la période, lorsque l'électronégativité est elle aussi fortement affectée par cette variation du coefficient.

- Présentée dans la figure II.40, la vitesse de Bohm évolue de manière inverse-



FIGURE II.36 – Evolution de la fraction (volumiques ou surfacique) des espèces composant le plasma dans la section basse pression de la source, en fonction de  $\gamma_r$  et pour  $P_{abs} = 5$  W.

ment proportionnelle à l'électronégativité mais sans qu'on observe les transitions brutales à plus haute puissance représentées dans la figure II.32.



Temps relatif dans le pulse RF ( $\mu$ s)FIGURE II.37 – Évolution de la température élec-tronique en régime permanent dans la sectiondBP, pour différentes valeurs de  $\gamma_r$ .



FIGURE II.38 – Évolution de l'électronégativité du plasma en régime permanent dans la section BP, pour différentes valeurs de  $\gamma_r$ .

### 5.6.4 Impact du confinement magnétique

Comme noté dans la section 2.3, on emploie une surface effective de perte  $S_{eff} = S_A h_H + S_L h_R$  pour calculer les flux ioniques à la paroi et les pertes d'énergie qui en découlent. Cette surface effective tient compte de la diminution des densités entre le centre du plasma et les parois, représentée par les coefficients  $h_H$  et  $h_R$ .





FIGURE II.39 – Évolution du rapport  $\phi_w/T_e$  en régime permanent dans la section BP, pour différentes valeurs de  $\gamma_r$ .

FIGURE II.40 – Évolution de la vitesse de Bohm en régime permanent dans la section BP, pour différentes valeurs de  $\gamma_r$ .

L'application d'un champ magnétique axial tend à diminuer la diffusion des ions et électrons le long de l'axe perpendiculaire au champ, ce qui augmente la densité des espèces au cœur du plasma. Cela revient à imposer une densité ionique quasi-nulle au niveau de la paroi latérale, donc à fixer  $h_R \approx 0$  et à négliger la surface latérale dans le calcul des pertes aux parois. La diminution de la surface effective du fait de la magnétisation du plasma est notable, car la surface latérale est 4,5 fois plus large que la surface axiale pour la section basse pression.

Pour déterminer précisément l'impact du confinement magnétique sur la composition du plasma, on réalise deux simulations dans la section basse de la source pour une puissance déposée de 100 W avec ou sans prise en compte du champ magnétique dans le calcul des pertes d'espèces à la paroi. La comparaison des résultats pour les ions est présenté en figure II.41. Comme attendu, les fractions molaires obtenues sans champ magnétique sont systématiquement inférieures aux fractions obtenues avec confinement magnétique et présentent une variation temporelle en régime permanent plus faible.

On peut par ailleurs constater que les fractions molaires pour une puissance de 100 W sans champ magnétique présentent des similarités importantes avec les fractions pour un calcul à 50 W avec confinement magnétique, telles que synthétisées en figure II.25. On decide alors de calculer l'écart relatif entre les fractions molaires pour une simulation magnétisée à un  $P_{abs}$  donné et une simulation non magnétisée avec  $P_{abs}/2$ . Les résultats en sont synthétisés dans la figure II.42 et montrent une convergence en régime permanent, avec un écart relatif compris entre 0,8 et 3 % pour la plupart des espèces sauf le  $F^-$  et le  $BF_2$ .

# CONCLUSION DU CHAPITRE

La mise au point puis l'exécution d'un modèle quasi-homogène de la source plasma du réacteur à simuler nous a permis de remplir les trois objectifs listés dans la première section de ce chapitre, dans les limites du domaine de validité du modèle en matière de puissance absorbée :



FIGURE II.41 – Évolution des fractions ioniques dans la section basse pression en régime permanent, pour une puissance déposée de 100W et en présence (lignes pleines) ou en l'absence (lignes tirétées) d'un champ magnétique axial.



FIGURE II.42 – Évolution temporelle de l'écart relatif (%) entre les fractions molaires obtenues à partir de d'une simulation à 100 W avec confinement magnétique et d'une simulation à 200W sans confinement magnétique.

– La nature des couplages entre les différents paramètres globaux du plasma (température électronique, potentiel flottant, vitesse de Bohm, modes de perte d'énergie dans le volume) et la puissance déposée dans la décharge a pu être déterminée. Des transitions brutales de la valeur de ces paramètres, dues au caractère fortement non-linéaire des dépendances entre l'électronégativité du plasma et le flux ionique à la paroi, ont aussi été mises en évidence et leur impact sur le comportement dynamique du plasma évalué.

- L'influence de la puissance déposée sur la décomposition a pu être quantifiée et est d'autant plus importante à basse pression, lorsque la faible densité des électrons conduit à des variations plus notables de la température électronique.
- La présence d'une grille de séparation entre les deux portions de la source n'affecte pas la diffusion du plasma dans les conditions courantes de simulation, mais la composition du plasma en amont a une influence notable sur le taux de décomposition final. Ces deux faits indiquent que l'obtention de la composition du plasma diffusant dans la chambre d'implantation peut être

réalisée simplement par simulation successive des deux portions de la source. En complément, la prise en compte de la chimie de surface (rendue nécessaire par l'important rapport surface/volume au niveau des deux portions de la source) a permit de raffiner le traitement des espèces neutres peu affectés par la chimie en volume.

# Modèle PIC de la chambre d'implantation

# Sommaire

1	INTRO	DUCTION
	1.1	Description qualitative
	1.2	Stratégie de modélisation 89
2	Modè	ELES ANALYTIQUES DE DIVERGENCE MAGNÉTIQUE
	2.1	Détermination de la densité en bord de gaine
	2.2	Détermination de la longueur de gaine
	2.3	Evolution temporelle de l'épaisseur de gaine
	2.4	Description des modèles analytiques de gaine
	2.5	Application à la simulation PIC
3	Modè	ELE PIC-Monte Carlo
	3.1	Description qualitative
	3.2	Procédure de résolution 102
	3.3	Méthode de discrétisation
	3.4	Critères de stabilité
	3.5	Traitement des conditions aux limites 105
	3.6	Traitement des collisions
	3.7	Collisions lourd-lourd additionnelles
4	Résui	tats du modèle PIC
	4.1	Etude paramétrique de la polarisation du substrat
	4.2	Résultats obtenus pour le cas standard
	4.3	Cas d'un plasma non collisionnel
	4.4	Impact de l'amplitude du potentiel imposé
	4.5	Impact de la forme d'onde du potentiel imposé 132
5	Сомр	ARAISON EXPÉRIMENTALE ET PERSPECTIVES
	5.1	Profils d'implantation du $BF_3$
_	5.2	Evolution du plasma dans la chambre d'implantation
Con	ICLUSIC	$DN \dots \dots$

# 1 INTRODUCTION

# 1.1 Description qualitative

Comme indiqué par la figure III.1, la chambre d'implantation du réacteur est une enceinte cylindrique de rayon  $R_c$  et hauteur  $H_c$  située en dessous de la source plasma et dont les dimensions sont largement supérieures à celles de cette dernière. Le substrat à implanter de rayon  $R_{sub}$  est placé sous la source plasma, à une distance  $L_{tot}$  de la base de la section basse pression de la source. Il est polarisé avec un potentiel négatif  $V_0(t)$  variable dans le temps de manière périodique et dont la valeur maximale peut atteindre - 500 V à -5 kV.



FIGURE III.1 – Géométrie générale du réacteur d'implantation ionique à simuler. La zone où le plasma est majoritairement présent est indiquée en rose.

Une fois généré dans la source, le plasma diffuse dans la chambre où il interagit avec le potentiel négatif imposé sur le substrat à implanter. Plusieurs aspects de la géométrie de la chambre d'implantation vont impacter le comportement de la décharge :

- La disposition de la bobine excitatrice implique que la fraction de la puissance électrique déposée hors de la source peut être considérée comme négligeable. Celé signifie que la composition du plasma dans la chambre devrait être similaire à celle dans la source tant que la fréquence des collisions reste faible.
- La grande différence de volume entre les deux parties du réacteur peut être la cause d'un effet de dilution qui réduit la densité du plasma dans la chambre par rapport à celle dans la source.
- Les dimensions réduites de la bobine de confinement entourant la partie basse pression de la source entraînent nécessairement une divergence du champ magnétique à l'intérieur de la chambre. Ce phénomène peut conduire à une chute notable de la densité du plasma entre la source et la chambre.
- La polarisation du substrat entraîne l'apparition d'une gaine ionique à son voisinage qui peut atteindre 10 cm d'épaisseur pour les potentiels les plus élevés et représenter une fraction non-négligeable du volume de la chambre.
- Les ions accélérés vers le substrat vont s'y implanter avec un énergie cinétique suffisante pour potentiellement créer des électrons secondaires. Ces

électrons, accélérés vers le plasma par le potentiel négatif du substrat, peuvent acquérir une énergie suffisante pour ioniser des molécules neutres du gaz. On voit alors apparaitre une décharge secondaire qui augmente le taux d'ionisation du plasma jouxtant la gaine ionique.

# 1.2 Stratégie de modélisation

Du fait de la faible valeur attendue de la densité du plasma et de la longueur notable de la gaine d'accélération, l'emploi d'un modèle fluide dans la chambre est délicat et une approche particulaire est préférable dans cette section du réacteur. Mais il est nécessaire de dériver les paramètres du plasma faisant face au substrat à partir des caractéristiques de la source plasma. Cette opération demande de déterminer les effets de la divergence magnétique et de la polarisation du substrat sur le plasma issu de la source.

La chambre d'implantation sera donc simulée à l'aide de deux modèles conjoints, dont les domaines d'application sont précisés dans la figure III.2 :

- Un modèle analytique qui fait la jonction entre la source plasma et la chambre d'implantation et traite la divergence du champ magnétique issu de la bobine de confinement placée dans la source. Il permet de déterminer la fraction molaire des composants du plasma dans la chambre et les flux ioniques correspondants en fonction des caractéristiques de la source.
- Un modèle PIC-MCC qui décrit la gaine ionique formée au-dessus du substrat du fait du potentiel imposé à sa surface. Il permet de déterminer le couplage entre le transport des espèces chargées du plasma dans la chambre d'implantation et la polarisation, puis d'en dériver la distribution de l'énergie d'impact des ions sur le substrat et les flux d'implantation correspondants.



FIGURE III.2 – Schéma de modélisation de la chambre d'implantation du réacteur à simuler, se basant sur le modèle oD de chimie pour la source et le modèle 1D PIC-MC pour la gaine surmontant le substrat.

# 2 Modèles analytiques de divergence magnétique

Ce modèle analytique permet de faire la transition entre le plasma situé dans la source et le substrat. Il repose sur le calcul des paramètres d'entrée du modèle PIC en fonction des caractéristiques de la source plasma, soit la longueur de simulation, les fractions molaires des composants du plasma et les flux ioniques en entrée de gaine. La résolution de trois systèmes d'équations est nécessaire pour obtenir ces résultats.

# 2.1 Détermination de la densité en bord de gaine

En présence d'un champ magnétique de vecteur  $\vec{B}$ , une particule chargée dotée d'un vecteur vitesse  $\vec{v}$  subit l'effet de la force de Lorentz qui lui imprime une accélération perpendiculaire au plan  $(\vec{v}, \vec{B})$ . Dans le cas d'un champ magnétique uniforme, la particule possède un mouvement circulaire dans le plan  $(\vec{v}, \vec{B})$  défini par un rayon de giration  $R_{cx}$  dont l'expression est donné par l'équation (I-1.1). Les particules chargées du plasma vont donc tourner autour des lignes de champ magnétique et subir un confinement plus ou moins important dans la direction perpendiculaire au champ.

Pour obtenir un ordre de grandeur de ce confinement, on calcule  $R_{cx}$  pour le  $BF_2^+$  et les électrons en se basant sur le plasma dans la section basse de la source ( $T_e = 4,3 \text{ eV}$ ;  $T_g = 300 \text{ K}$ ) et un champ magnétique de 400 gauss. Les rayons de giration obtenus sont de 4,5 mm pour  $BF_2^+$  et 0,19 mm pour les électrons, largement inférieurs au rayon de la source. Ceci indique que les particules chargées du plasma tendent à suivre les lignes de champ mais que les électrons sont davantage confinés dans la décharge que les ions.

En s'éloignant de la sortie de la source plasma, la valeur du champ magnétique générée par la bobine diminue et les lignes de champ divergent. Comme les ions et électrons suivent les lignes de champ, ce phénomène entraine une expansion du plasma et une baisse de la densité ionique entre la source et la bordure de la gaine d'implantation. Pour quantifier ces variations de densité ionique le long de la divergence magnétique, on a recours à un modèle analytique simple basé sur Lieberman et Lichtenberg [2005, p. 509] et étendu pour un plasma électronégatif. Ses caractéristiques sont résumées dans la figure III.3.



FIGURE III.3 – Schéma de modélisation de la divergence magnétique entre la source (exposant 's') et le bord de la gaine faisant face au substrat (exposant 'g')

La diminution de la densité du plasma le long de la divergence magnétique entraine l'émergence d'un potentiel distribué  $V_d$  qui contrebalance la dilution et tend à accélérer les ions positifs vers la substrat. La variation de la densité électronique en fonction du potentiel suit alors la relation de Boltzmann. On considère pour ce modèle que la température électronique est constante dans tout l'intervalle entre source et gaine, ce qui n'est valide qu'en l'absence d'une discontinuité de densité comme une double couche.

$$n_e^g = n_e^s \exp\left(-\frac{eV_d}{k_b T_e}\right) \tag{III-2.1}$$

On fait par ailleurs l'hypothèse que les ions négatifs possèdent le même comportement face au potentiel distribué. Ceci n'est valide que si la durée d'évolution du phénomène (le transport des ions depuis la source vers le substrat) est supérieure à l'inverse de la fréquence plasma ionique. Avec une valeur de cette dernière entre 5 et 500 ns (voir tableau III.1) une vitesse en sortie de source de l'ordre de la vitesse de Bohm ( $\approx$  300 m/s pour un plasma électronégatif) et une distance sourcesubstrat de 40 cm, il en découle que la condition d'application est respectée avec  $t_{diff} \approx 1,1 \ \mu$ s.

$$n_{-}^{g} = n_{-}^{s} \exp\left(-\frac{eV_{d}}{k_{b}T_{g}}\right) \text{ si } t_{diff} = \frac{X_{sub} - X_{src}}{v_{src}} > (\omega_{pi})^{-1}$$
(III-2.2)

Étant donné que la portion de la divergence magnétique considérée dans le modèle est par définition située en dehors de la gaine faisant face au substrat, le plasma reste électriquement neutre dans tout l'intervalle entre source et gaine.

$$n_e^s + n_-^s = n_+^s; n_e^g + n_-^g = n_+^g$$
 (III-2.3)

Le système à résoudre comporte quatre inconnues définies au niveau de l'entrée de la gaine : la densité ionique  $n_i^g$ , la vitesse ionique  $v_i^g$ , le potentiel distribué  $V_d$  et la surface magnétique équivalente  $A^g$ . On peut déterminer le système d'équations correspondant à l'aide de trois principes de conservation :

 La conservation du flux magnétique implique que l'aire du plasma perpendiculaire à la direction de propagation A<sub>x</sub> augmente lorsque le flux magnétique diminue. La source plasma a une section de sortie A<sub>s</sub> où le champ magnétique axial a une valeur B<sub>s</sub>.

$$A_g = A_s \frac{B_s}{B_g} \tag{III-2.4}$$

Afin d'appliquer l'équation de conservation du flux magnétique, on considère ici que la divergence constitue un tube de champ et que le flux magnétique est proportionnel à la valeur du champ magnétique axial. La valeur du champ magnétique en fonction de la position z est calculé pour une bobine plate de rayon  $R_m$  et longueur  $L_m$  située à la position  $z_m$ , comportant  $N_m$  spires parcourues par un courant  $I_m$ .

$$B(z) = \frac{\mu_0 I_m N_m}{2L_m} \left[ \frac{z_2}{\sqrt{z_2^2 + R_m^2}} - \frac{z_1}{\sqrt{z_1^2 + R_m^2}} \right]$$

$$z_1 = z - z_m - \frac{L_m}{2} ; z_2 = z - z_m + \frac{L_m}{2}$$
(III-2.5)

2. La conservation du flux ionique implique que la masse du plasma traversant la divergence est conservée. On fait l'hypothèse que les ions du plasma ne sont générés que dans la source avec une densité  $n_+^s$  et en sortent avec une vitesse  $v_+^s$  égale à la vitesse de Bohm.

$$n_{+}^{s}v_{+}^{s}A_{s} = n_{+}^{g}v_{+}^{g}A_{g}$$
 (III-2.6)

Cette dernière est donnée ici sous sa forme généralisée, valable pour un plasma aussi bien électropositif qu'électronégatif, avec  $\alpha_p$  l'électronégativité du plasma et  $\gamma_t = T_e/T_g$ .

$$v_{+}^{s} = \sqrt{\frac{k_{b}T_{e}}{m_{+}}} \sqrt{\frac{1+\alpha_{g}}{1+\alpha_{g}\gamma_{t}}}; \ \alpha_{p} = \alpha_{g} \exp\left[\frac{(1+\alpha_{g})(\gamma_{t}-1)}{2(1+\gamma_{t}\alpha_{g})}\right]$$
(III-2.7)

3. La conservation de l'énergie ionique implique ici un régime non colisionnel et l'absence de tout potentiel imposé entre la source et la gaine autre que le potentiel distribué.

$$\frac{1}{2}m_{+}(v_{+}^{g})^{2} = \frac{1}{2}m_{+}(v_{+}^{s})^{2} + eV_{d}$$
(III-2.8)

Pour résoudre ce système, on commence par extraire  $V_d$  de l'équation de conservation de l'énergie ionique

$$\frac{1}{2}m_{+}(v_{+}^{g})^{2} = \frac{1}{2}m_{+}(v_{+}^{s})^{2} + eV_{d}$$

$$V_{d} = \frac{m_{+}}{2e}\left[(v_{+}^{g})^{2} - (v_{+}^{s})^{2}\right]$$
(III-2.9)

La valeur de  $v_{+}^{g}$  peut être déduite de la conservation du flux ionique.

$$n_{+}^{g} v_{+}^{g} A_{g} = n_{+}^{s} v_{+}^{s} A_{s}$$

$$v_{+}^{g} = v_{+}^{s} \frac{n_{+}^{s}}{n_{+}^{g}} \frac{A_{s}}{A_{g}}$$

$$= v_{+}^{s} \frac{B_{g}}{B_{s}} \left(\frac{n_{+}^{g}}{n_{+}^{s}}\right)^{-1}$$
(III-2.10)

Puis on détermine  $V_d$  à partir de la relation de Boltzmann pour les électrons.

$$n_{e}^{g} = n_{e}^{s} \exp\left(-\frac{eV_{d}}{k_{b}T_{e}}\right)$$
$$-\frac{eV_{d}}{k_{b}T_{e}} = \ln\left(\frac{n_{e}^{g}}{n_{e}^{s}}\right)$$
$$V_{d} = -\frac{k_{b}}{e}T_{e}\ln\left(\frac{n_{e}^{g}}{n_{e}^{s}}\right)$$
(III-2.11)

La même procédure nous fournit  $V_d$  en fonction de la densité des ions négatifs en bord de gaine.

$$V_d = -\frac{k_b}{e} T_g \ln\left(\frac{n_-^g}{n_-^s}\right) \tag{III-2.12}$$

Étant donné que la valeur de  $V_d$  est identique dans les expressions précédentes et connaissant la valeur du champ magnétique axial en un point donné, on peut résoudre ce système d'équations de manière itérative selon la procédure suivante

- 1. On calcule le rapport  $B_g/B_s$  associé à la position z
- 2. On choisit une valeur de  $n_e^g$  puis on en déduit la potentiel distribué  $V_d$  selon l'équation (III-2.11)
- 3. On calcule la valeur correspondante de  $n_{-}^{g}$  à partir de la relation de Boltzmann (III-2.2)
- 4. On obtient la densité ionique  $n_{+}^{g}$  par électroneutralité selon (III-2.3)
- 5. On calcule la vitesse ionique en bord de gaine  $v_+^g$  à partir de l'expression (III-2.10)
- 6. Enfin, on calcule le potentiel distribué  $V_d$  selon l'équation (III-2.9)

La convergence sur la valeur de  $V_d$  d'obtenir les valeurs des densités au bord de la gaine.

### 2.2 Détermination de la longueur de gaine

Comme démontrée dans la section 2.2.2 du chapitre 1 traitant de la longueur de Debye, l'introduction d'un potentiel négatif au niveau d'une surface tend à repousser les électrons situés à proximité et diminuer leur densité locale, ce qui induit la formation d'un champ de charge d'espace. La perturbation du potentiel va alors s'étendre jusqu'à ce que le champ de charge d'espace vienne la compenser.

Dans le cas du potentiel  $V_0$  imposé sur le substrat, son amplitude maximale de 0,5 à 5 kV dépasse notablement la valeur équivalente de l'énergie des électrons  $\frac{k_b}{e}T_e \approx 5$  V. La gaine générée va alors complètement repousser les électrons puis s'établir sur une épaisseur largement supérieure à la longueur de Debye, non-négligeable devant les dimensions de la chambre d'implantation.

Si on considère un plasma mono-ion homogène de densité  $n_0$  et un potentiel imposé constant  $V_0$ , le processus d'expansion de la gaine se réalise en trois étapes :

- 1. Dans une première phase de temps caractéristique  $\tau_e = (\omega_{pe})^{-1}$ , les ions sont considérés comme immobiles du fait de leur grande inertie par rapport aux électrons. Ces derniers sont considérés comme étant sans inertie et sont expulsés immédiatement de la proximité du substrat par le potentiel négatif présent. La densité ionique dans la gaine est égale à celle dans le plasma tandis que la densité électronique est négligeable. Le plasma restant quasi-neutre, la différence de potentiel entre substrat et plasma est répartie entièrement dans la gaine. On parle alors de **gaine matricielle**.
- 2. Pour des échelles de temps de l'ordre de  $\tau_i = (\omega_{pi})^{-1}$ , le champ électrique dans la gaine provoque l'accélération des ions en direction du substrat et une diminution de la densité ionique dans la gaine. Une fois les ions de la gaine matricielle collectés, de nouveaux ions sont extraits du plasma et la gaine commence son expansion. Du fait de l'impact des ions, des électrons secondaires sont émis de la surface du substrat et sont accélérés hors de la gaine en sens contraire des ions.

3. Pour des durées notablement supérieures à τ<sub>i</sub>, les particules traversant le bord de la gaine sont les électrons chassés vers le plasma à cause de l'expansion de la gaine et les ions accélérés vers la gaine par la différence de potentiel. Les courants correspondants continuent d'augmenter avec l'épaisseur de la gaine, jusqu'à ce qu'ils ne soit limités par le champ de charge d'espace lié aux variations axiales de densité ionique. On parle alors de gaine de Child-Langmuir.

L'évolution de ces temps caractéristiques en fonction en fonction de la densité électronique est résumée dans le tableau III.1.

$n_0 (m^{-3})$	$10^{+14}$	$10^{+15}$	$10^{+16}$	$10^{+17}$	$10^{+18}$
$\tau_e$ (s)	$1,77 \cdot 10^{-09}$	$5,60 \cdot 10^{-10}$	$1,77 \cdot 10^{-10}$	$5,60 \cdot 10^{-11}$	$1,77 \cdot 10^{-11}$
$\tau_i$ (s)	$6,23 \cdot 10^{-07}$	$1,97 \cdot 10^{-07}$	$6,23 \cdot 10^{-08}$	$1,97 \cdot 10^{-08}$	$6,23 \cdot 10^{-09}$

TABLE III.1 – Variation des grandeurs caractéristiques de la gaine de Child-Langmuir en fonction de la densité plasma, pour un plasma  $BF_3^+/e^-$  et une  $T_e$  de 5 eV.

Il est possible de déterminer analytiquement l'épaisseur de la gaine aux deux limites de sa dynamique d'évolution, au démarrage du saut de potentiel et à l'état stationnaire :

Dans le cas d'une **gaine matricielle**, son épaisseur maximale  $s_M$  peut être aisément estimée en fonction de la densité plasma et du potentiel imposé. L'application du théorème de Gauss permet d'obtenir le profil axial du potentiel, qui nous donne la longueur de gaine si l'on pose que  $\phi = V_0$ .

$$\frac{\mathrm{d}^2\phi}{\mathrm{d}z^2} = -\frac{en_0}{\epsilon_0} ; \ \phi(z) = -\frac{en_0}{\epsilon_0} \frac{z^2}{2} ; \ s_M = \sqrt{\frac{2\epsilon_0 V_0}{en_0}}$$
(III-2.13)

Dans le cas d'une **gaine de Child-Langmuir**, le facteur prépondérant dans l'évolution de l'épaisseur de gaine est la valeur maximale du courant permis par la différence de potentiel entre le plasma et le substrat. Lorsque la densité de courant limite est atteinte, le déplacement des électrons et des ions est limité par la charge d'espace qui se développe dans l'épaisseur de la gaine et il n'est pas possible d'obtenir un courant plus élevé.

En régime stationnaire, cette valeur limite  $J_{CL}$  est donnée par la loi de Child-Langmuir qui s'applique au départ pour un tube sous vide de type diode comportant deux électrodes séparées par une distance s et soumises à une différence de potentiel  $V_0$ . On peut alors déduire de cette relation l'épaisseur maximale de la gaine  $s_{CL}$ , obtenue lorsque le courant de Child-Langmuir est égal au courant de Bohm.

$$J_{CL} = \frac{4}{9}\epsilon_0 \sqrt{\frac{2e}{m_i}} \frac{V_0^{\frac{3}{2}}}{s^2}; \ en_0 v_i^B = J_{CL} \Rightarrow s_{CL} = \left(\frac{4}{9}\epsilon_0 \sqrt{\frac{2e}{m_i}} \frac{V_0^{\frac{3}{2}}}{en_0 v_i^B}\right)^{\frac{1}{2}}$$
(III-2.14)

On peut alors écrire une équation d'évolution de l'épaisseur de gaine **s** en se basant sur trois hypothèses :

1. la densité du plasma loin du substrat  $n_0$  est constante

- 2. le plasma en bord de gaine est électriquement neutre, soit  $n_e^g = n_i^g = n_0$
- 3. le courant total est égal à chaque instant à la valeur limite  $J_{CL}$

Si l'on néglige l'émission d'électrons secondaires, le courant total traversant le bord de la gaine est la somme d'un courant d'ions  $J_i^g = en_i^g v_i^B$  extrait du plasma avec la vitesse de Bohm et d'un courant d'électrons  $J_e^g = en_e^g ds/dt$  expulsés vers le plasma par la croissance de la gaine. On peut alors déterminer l'évolution temporelle de l'épaisseur de gaine s(t) dans le régime de Child-Langmuir.

$$J_i^g + J_e^g = J_{CL} \Rightarrow en_0 \left( v_i^B + \frac{\mathrm{d}s}{\mathrm{d}t} \right) = J_{CL} \Rightarrow \frac{\mathrm{d}s(t)}{\mathrm{d}t} = \frac{J_{CL}(s)}{en_0} - v_i^B \qquad \text{(III-2.15)}$$

Des valeurs typiques de  $s_{CL}$  pour un plasma  $BF_3^+/e^-$  avec une  $T_e$  de 5 eV, calculées en fonction de la densité du plasma et du voltage imposé, sont présentées dans la figure III.4.



FIGURE III.4 – Valeurs de l'épaisseur maximale de la gaine Child-Langmuir  $s_{CL}$  (cm) en fonction de la densité plasma (m<sup>-3</sup>) et du voltage imposé (V).

### 2.3 Evolution temporelle de l'épaisseur de gaine

Déterminer l'évolution temporelle de l'épaisseur de la gaine s(t) est une étape nécessaire pour estimer la dose ionique implantée, qui est calculée par intégration sur le temps du courant ionique d'implantation. Or l'évolution du courant dépend du volume  $V_g(t) = s(t)S_{sub}$  affecté par la gaine à un instant donné et du profil axial de la densité ionique  $n_i(z)$ . L' équations (III-2.13) et (III-2.14) permettent de connaitre respectivement l'épaisseur de la gaine au début de l'expansion (régime matriciel) et en régime stationnaire (Child-Langmuir) mais elles ne fournissent pas d'informations sur la phase d'expansion en elle-même.

## 2.4 Description des modèles analytiques de gaine

Plusieurs modèles sont utilisés pour obtenir le profil d'expansion de la gaine :

### Modèle de Child-Langmuir

Si l'on considère que le courant traversant la gaine est égal à la limite de Child-Langmuir à partir du moment où la gaine matricielle s'est établie, alors on peut résoudre de manière itérative l'équation (III-2.15) en fonction du temps. L'épaisseur initiale de la gaine s(t=0) correspond à l'épaisseur de la gaine matricielle pour le voltage initial V(t=0).

$$s(t + \Delta t) = s(t) + \frac{\mathrm{d}s(t)}{\mathrm{d}t}\Delta t \; ; \; \frac{\mathrm{d}s(t)}{\mathrm{d}t} = \frac{4}{9}\epsilon_0 \sqrt{\frac{2e}{m_i}\frac{V(t)^{\frac{3}{2}}}{en_0s(t)^2}} - v_i^B \qquad \text{(III-2.16)}$$

Si le potentiel imposé  $V_0$  est constant dans le temps, on peut alors intégrer l'équation (III-2.15) selon la démarche détaillée dans Lieberman et Lichtenberg [2005, p. 637] afin d'obtenir une équation d'évolution de l'épaisseur de gaine. Ici  $s_M$  et  $s_{CL}$  sont respectivement l'épaisseur de gaine en regime stationnaire dans les régimes matriciel et de Child-Langmuir.

$$\tanh^{-1}\left(\frac{s(t)}{s_{CL}}\right) - \frac{s(t)}{s_{CL}} = \frac{v_i^B t}{s_{CL}} + \tanh^{-1}\left(\frac{s_M}{s_{CL}}\right) - \frac{s_M}{s_{CL}}$$
(III-2.17)

Il est également possible de calculer le temps nécessaire pour que la gaine atteigne le régime stationnaire. Dans le cas d'un modèle de Child-Langmuir avec un potentiel  $V_0$  constant dans le temps, on obtient :

$$t_{CL} \approx \frac{\sqrt{2}}{9} \sqrt{\frac{\epsilon_0 m_i}{e^2 n_0}} \left(\frac{2eV_0}{k_b T_e}\right)^{3/4}$$
(III-2.18)

### Modèle à transition continue

Le Continuous Transition Model (ou CTM) est basé sur un modèle d'expansion de gaine dans un plasma basse pression écrit par Andrews et Varey [1971]. Ce modèle s'appuie sur un système comprenant les équations de continuité de la masse et de la quantité de mouvement pour les électrons, ainsi que l'équation de Poisson. Les conditions aux limites sont respectivement que  $n_e(z,t=0) = n_0$ ,  $V(z=0,t) = V_{sub}(t)$  et V(z=L,t) = 0.

$$\frac{\partial n_e}{\partial t} = -\frac{\partial n_e v_e}{\partial z}$$

$$\frac{\partial n_e v_e}{\partial t} = -\frac{\partial n_e v_e^2}{\partial z} - \frac{1}{m_e} \frac{\partial n_e k_b T_e}{\partial z} - en_e E$$
(III-2.19)
$$\frac{dE}{dz} = -\frac{d^2 V}{dz^2} = \frac{e}{\epsilon_0}(n_0 - n_e)$$

Si l'on résout le système d'équations précédent de la manière détaillé dans Holmes et Yanabu [1973] en supposant un courant constant au niveau du substrat, on obtient l'expression suivante où  $\phi_0$  est le potentiel en bord de gaine.

$$(s(t) - z)^{2} = \frac{4\epsilon_{0}}{9en_{0}}\phi_{0}\left[\left(1 + \frac{V(z,t)}{\phi_{0}}\right)^{\frac{3}{2}} + 3\frac{V(z,t)}{\phi_{0}} - 1\right]$$

$$\phi_{0} = \frac{m_{i}}{2e}\left(v_{i}^{B} - \frac{\mathrm{d}s}{\mathrm{d}t}\right)^{2}$$
(III-2.20)

Cette équation peut nous fournir à la fois l'évolution de l'épaisseur de gaine (par résolution du système en fonction de t, pour z=0 et une valeur de V(z=0,t) donnée) mais aussi le profil de potentiel à un instant donné (par résolution du système en fonction de z, pour des valeurs de s(t),  $\frac{ds}{dt}$  et V(z=0,t) données.

### Modèle à double régime

Cette approche, détaillée notamment dans Murakami et Nishihara [1993] et Brutscher et al. [1996], prend en compte le fait que l'expansion de la gaine s'effectue initialement en régime supersonique ( $\dot{s} > v_i^B$ ) avant de passer dans un régime subsonique jusqu'à établissement de l'état stationnaire.

### 2.4.1 Résultats des modèles de gaine

On étudie tout d'abord la dynamique de la longueur de gaine dans le cas d'un potentiel appliqué de 500 V et d'un temps de montée du temps de 100 ns. Plusieurs modèles sont employés :

- le modèle de Child-Langmuir (CL) résumé dans l'équation (III-2.15) issue de Stewart et Lieberman [1991]
- une variante du modèle CL prenant en compte les collisions dans la gaine , détaillée dans Wang et al. [1993]
- le modèle à transition continue (CTM) issu de [Glinkowski et Stoving 1995], dont le résultat est donné par l'équation (III-2.20) dans le cas où z=0
- enfin deux modèles à double régime (DR) tirés de Murakami et Nishihara [1993] et Brutscher et al. [1996], qui prennent en compte le fait que l'expansion de la gaine est initialement en régime supersonique ( $\dot{s} > v_i^B$ ) avant de passer dans un régime subsonique jusqu'à établissement de l'état stationnaire.

Les résultats de ces modèles sont synthétisés dans la figure III.5, avec pour comparaison la valeur de l'épaisseur de gaine de Child-Langmuir dans le cas quasistatique donnée par l'équation (III-2.14). On peut constater que

- les modèles basés sur la loi de Child-Langmuir présentent une convergence asymptotique au bout de 30  $\mu$ s, tout comme le modèle à transition continue.
- la valeur asymptotique donné par le modèle de Wang se rapproche de la longueur quasi-statique non-collisionnelle parce que le caractère collisionnel de la gaine est relativement faible dans les conditions étudiées, avec un rapport  $C_i = \lambda_i / s_{max}$  d'environ 0,8.
- les modèles à double régime donnent une longueur de gaine stationnaire 60% supérieure à celle de Child-Langmuir.

On s'intéresse ensuite à l'impact des collisions dans la gaine sur la dynamique temporelle de son expansion et la valeur asymptotique de son épaisseur. Le modèle



FIGURE III.5 – Évolution temporelle de la longueur de la gaine ionique au niveau du substrat en fonction du modèle employé. Les références sont respectivement LI91 pour [Stewart et Lieberman 1991], WA93 pour [Wang et al. 1993], GL95 pour [Glinkowski et Stoving 1995], MU93 pour [Murakami et Nishihara 1993] et BR96 pour [Brutscher et al. 1996].

de Wang et al. [1993] est le seul décrit plus haut permettant d'étudier ce facteur, le caractère collisionnel de la gaine étant caractérisée par le rapport  $C_i = \lambda_i / s_{max}$ entre le libre parcours moyen et l'épaisseur maximale de la gaine non-collisionnelle. Les résultats, donnés dans la figure III.6, montrent que l'effet des collisions sur l'évolution de la gaine est surtout notable en régime collisionnel ( $C_i < 1$ ) puisque l'écart entre les valeurs asymptotiques de l'épaisseur de gaine atteint 26% lorsque  $C_i$  varie de 0,1 à 1,0 contre seulement 5,6% pour une variation de  $C_i$  entre 1,0 et 10. La durée nécessaire pour atteindre le régime asymptotique reste cependant inchangé.

On s'intéresse enfin à l'impact du temps de montée du potentiel sur la dynamique temporelle de l'épaisseur de gaine dans le cas non-collisionnel, avec une synthèse des calculs dans la figure III.7. L'effet de la montée en potentiel n'est notable que pour des temps de montée supérieurs à l'inverse de la fréquence d'oscillation ionique (soit  $\approx 10^{-8}$ s) car les ions ont une inertie trop grande pour suivre l'évolution de pertubations de potentiel plus rapides. En revanche, le modèle de Child-Langmuir converge vers sa valeur asymptotique au bout de 10  $\mu$ s et ce quelque soit le temps de montée.

# 2.5 Application à la simulation PIC

La longueur de la gaine générée par la polarisation du substrat a son importance dans le dimensionnement de la simulation PIC employée pour étudier la dynamique d'implantation. Afin de modéliser correctement l'évolution temporelle du profil axial de potentiel, le segment simulé par le modèle PIC (de longueur  $L_{pic}$ ) doit à la fois capturer l'ensemble de la gaine et comporter du coté opposé au substrat une zone ambipolaire où le champ électrique est quasi-nul et l'électroneu-


FIGURE III.6 – Évolution temporelle de l'épaisseur de la gaine ionique au niveau du substrat en fonction du caractère collisionnel du plasma, selon le modèle de Wang et al. [1993].



FIGURE III.7 – Évolution temporelle de l'épaisseur de la gaine ionique au niveau du substrat en fonction du temps de montée du potentiel, selon l'équation quasi-statique (III-2.14) (CL-qs) et le modèle de Stewart et Lieberman [1991] (LI95).

tralité localement respectée. Il est donc nécessaire de pouvoir estimer l'épaisseur maximale de la gaine en fonction des paramètres du le pulse d'implantation, afin de configurer le modèle de manière satisfaisante.

Pour ce faire, on considère une gaine de type Child-Langmuir en régime stationnaire avec comme implications que la densité électronique dans la gaine est négligeable et le potentiel imposé est constant. Le plasma libre faisant face à la gaine est de densité constante. On fait par ailleurs l'hypothèse que la gaine n'interagit pas avec la source, ce qui impose que  $L_g \leq L_{tot}$ .



FIGURE III.8 – Détail des longueurs caractéristiques prises en compte dans la modélisation de la chambre d'implantation.

La longueur de gaine en fonction du potentiel imposé  $V_0$  est donnée par l'équation (III-2.14) qui dépend de la densité électronique. De son coté, la valeur de la densité électronique de bord de gaine  $n_e^g$  est donnée par l'équation (III-2.1) qui dépend de la position du bord de la gaine. Enfin la valeur du champ magnétique local, employée dans l'équation de la densité, est donnée par l'équation (III-2.5). Il est donc nécessaire de résoudre ce système d'équations de manière couplée et itérative afin de converger vers une valeur satisfaisante. Dans le cas présent, on résout d'abord l'équation de la densité en bord de gaine avant d'utiliser le résultat dans l'équation de la longueur de gaine puis de vérifier la convergence sur cette dernière valeur.

# 3 MODÈLE PIC-MONTE CARLO

## 3.1 Description qualitative

L'approche particulaire représente le gaz comme un milieu discret constitué d'un très grand nombre de particules et calcule l'évolution dans le temps de la position et de la vitesse de chaque particule. Elle suit de près la physique réelle du plasma et est donc très puissante pour décrire les décharges pour lesquelles des simplifications sont difficiles à appliquer, comme celles hors d'équilibre thermodynamique ou avec des fonctions de distribution en vitesse fortement nonmaxwelliennes.

La demande en puissance de calcul est cependant très élevée à cause du grand nombre de particules nécessaire pour obtenir une précision raisonnable des résultats dans l'espace et le temps. Simuler le nombre réel de particules physiques serait prohibitif en temps de calcul, puisque la densité du gaz atteint des valeurs de l'ordre de  $10^{+19}m^{-3}$  pour une pression dans la chambre de 0,3 Pa.

Un compromis consiste alors à approximer la fonction de distribution des vitesses **f** par un ensemble de  $N_{tot}$  super-particules, appelées ainsi parce que chaque particule numérique représente statistiquement un grand nombre de particules réelles. Chaque super-particule i correspond à un point  $P_i$  dans l'espace des phases, typiquement défini par six coordonnées correspondant aux trois composantes du vecteur vitesse  $\vec{v}_i$  et aux trois composantes du vecteur position  $\vec{x}_i$ .

Un modèle PIC (pour Particule-In-Cell en anglais) tient son nom du fait qu'il décrit le plasma sous la forme d'un nombre de macro-particules numériques pla-

cées dans des cellules (cells en anglais) formant un maillage qui découpe l'espace de simulation, comme schématisé dans la figure III.9. Le poids statistique d'une macro-particule  $\alpha_s$  correspond au nombre de particules réelles représentées par la particule numérique. Les caractéristiques des macro-particules, comme leur vecteur vitesse ou leur position dans le maillage, varient dans le temps en fonction des interactions avec le champ électrique local ou des collisions subies.



FIGURE III.9 – Représentation schématique du modèle Particle-in-Cell employé dans la modélisation de la chambre d'implantation.

Si l'on impose une différence de potentiel entre les deux extrémités du maillage, alors le champ électrique généré va accélérer les particules de charge positive vers la zone où le potentiel est le plus négatif et inversement pour les particules négatives. Une situation d'équilibre finit par s'établir, avec une gaine ionique face au substrat complétée par une zone de plasma ambipolaire face au bord libre. Les particules arrivant sur les bords du domaine de simulation sont retirées et remplacées par d'autres placées aléatoirement dans le domaine, afin de maintenir un  $N_{tot}$  aussi constant que possible.

En se plaçant dans une configuration proche de celle du réacteur simulé (substrat au niveau du pôle négatif de l'espace de simulation et prise en compte les réactions de surface) on peut voir apparaître un phénomène dit de décharge secondaire :

- 1. Les ions positifs qui impactent le substrat peuvent générer des électrons secondaires qui sont injectés dans le plasma environnant.
- 2. Ces électrons sont ensuite repoussés par le potentiel négatif imposé sur le substrat et éjectés de la gaine avec une énergie cinétique élevée.
- 3. Ils peuvent alors entrer en collision avec les neutres présents dans le plasma et générer des ions positifs via des réactions d'ionisation.

Si un nombre  $\gamma_i^{es}$  d'électrons secondaires est produit pour chaque ion i impactant la surface, alors il suffit que chaque électron secondaire génère  $1/\gamma_i^{es}$  ions du fait des collisions dans le plasma pour que la décharge secondaire soit maintenue par la différence de potentiel entre substrat et plasma libre.

# 3.2 Procédure de résolution

Le modèle repose sur le calcul direct de la fonction de distribution en vitesse des particules  $f_s$  pour chaque espèce s à partir des relations fondamentales de la dynamique. Il combine le traitement particulaire de la dynamique du plasma (PIC) avec l'emploi de la méthode Monte-Carlo (MCC) pour le traitement des collisions et de la modification du vecteur vitesse des particules qui en résulte. Afin de reproduire

la physique du plasma au niveau de la gaine, on suit les trajectoires individuelles des macro-particules soumises à la fois aux collisions et au champ électrique.

Le nombre de particules numériques  $N_{tot}$  employé pour un calcul constitue un compromis : l'erreur statistique sur les résultats varie en  $N_{tot}^{-1/2}$  [Verboncoeur 2005] ce qui favorise l'usage d'un  $N_{tot}$  grand, mais le temps de calcul est approximativement proportionnel à  $N_{tot}$  [Markidis S. et Z. 2005]. Un calcul PIC typique utilise donc une valeur de  $N_{tot}$  située entre 10<sup>4</sup> et 10<sup>5</sup> ainsi qu'un poids statistique  $\alpha_s$  entre 10<sup>3</sup> et 10<sup>6</sup>.

Du fait de la géométrie cylindrique axisymétrique de la chambre d'implantation, on emploie pour cette simulation un schéma dit '1D<sub>3</sub>V' où la position de chaque macro-particule n'est connue que selon l'axe Z mais son vecteur vitesse comporte trois composantes selon les axes R,  $\theta$ , et Z.

Chacune des macro-particules présentes dans la simulation est caractérisée par sa masse  $m_i$ , sa charge  $z_i$ , sa position  $z_i$  et sa vitesse  $v_i$ . La procédure de résolution pour chaque pas de temps  $\Delta t$  est la suivante :

1. Le mouvement des particules chargées est dérivé de la loi de Newton  $F = m_i a$ , dans le cas d'une particule massique chargée soumise à un champ électrique variable E(t). Ceci nous permet d'obtenir les variations temporelles des vecteurs vitesse et position de chaque particule.

$$z_i e E(t) = m_i \frac{\mathrm{d}v_i}{\mathrm{d}t} \qquad v_i(t) = \frac{\mathrm{d}z_i}{\mathrm{d}t}$$
$$\mathrm{d}v_i = \frac{z_i e}{m_i} E(t) \mathrm{d}t \qquad \mathrm{d}z = v_i(t) \mathrm{d}t$$

Comme le champ électrique ne possède qu'une seule composante non nulle selon l'axe z et que les composantes radiale et transversale de la vitesse sont orthogonales à cet axe, seule la composante selon z de la vitesse est affectée par le champ électrique. L'intégration des équations du mouvement permet de déterminer la variation de la vitesse et de la position de la particule durant le pas de temps.

$$v_i^z(t + \Delta t) = v_i^z(t) + \int_{\Delta t} \frac{z_i e}{m_i} E_z(t) dt$$
  

$$z_i(t + \Delta t) = z_i(t) + \int_{\Delta t} v_i^z(t) dt$$
(III-3.1)

- 2. On applique ensuite la méthode Monte-Carlo aux différentes particules afin de déterminer si elles subissent des collisions, quelle est la nature de ces dernières ainsi que leur impact sur le vecteur vitesse des macro-particules.
- 3. Si une macro-particule impacte le substrat, elle est retirée du plasma et ses caractéristiques utiles (énergie d'impact et angle d'implantation) sont conservées pour analyse ultérieure. On doit alors prendre en compte les phénomènes de recombinaison à la paroi et d'émission électronique pour déterminer si la particule impactant la surface donne lieu à la formation de neutres ou d'électrons secondaires qui seront injectés dans la gaine.

4. La densité de charge ρ<sub>z</sub> est calculée comme la somme pondérée de la charge des macro-particules, le facteur de pondération étant la distance entre la position z<sub>c</sub> du centre de la cellule et la position z<sub>i</sub> de la particule considérée.

$$\rho(z) = \sum_{s=1}^{m} \rho_s^z; \ \rho_s^z = \sum_{i=1}^{N_s^z} z_i \alpha_i \frac{|z_i - z_c|}{\Delta z}$$
(III-3.2)

5. Les interactions coulombiennes entre espèces chargées influent sur l'évolution de la densité locale du plasma, selon un effet collectif décrit par l'équation de Poisson. Sa résolution permet d'obtenir le potentiel électrique  $\phi_z$  en fonction de la densité de charge. Le champ électrique  $E_z$  est ensuite obtenu par dérivation du potentiel.

$$\frac{\partial^2 \phi}{\partial z^2} = -\frac{\rho_z}{\epsilon_0}; \ E_z = \frac{\partial \phi}{\partial z}$$
 (III-3.3)

Si nécessaire, les valeurs locales des grandeurs moyennes pertinentes pour le plasma (densité, vitesse et température électronique) peuvent être obtenues par le calcul des moments d'ordre n de la fonction de distribution des particules pour une position donnée, de la même manière que démontrée dans la section 4.4.1 du chapitre 1.

$$n_s = \int f_s dv \; ; \; u_s = \frac{1}{n_s} \int f_s v_s dv \; ; \; T_e = \frac{m_e}{3k_b n_e} \int (v_e^2 - u_e^2) f_e(z) dv \qquad \text{(III-3.4)}$$

### 3.3 Méthode de discrétisation

Pour initialiser la simulation, les macro-particules appartenant aux *m* espèces du plasma sont disposées aléatoirement sur un maillage unidirectionnel de longueur  $L_{pic}$ , comportant  $N_z$  cellules de longueur  $\Delta z$  et d'orientation perpendiculaire à la surface du substrat. Dans chaque cellule, les  $N_s^z$  macro-particules de l'espèce s correspondent à une densité physique  $n_s^z$  et une fraction en nombre  $x_s^z$  données par le poids statistique  $\alpha_s$  des particules.

$$\alpha_{s} = \sum_{z} x_{s}^{z} \frac{n_{tot}}{N_{s}^{z}} \Delta z \; ; \; n_{s}^{z} = \alpha_{s} N_{s}^{z} \; ; \; x_{s}^{z} = \frac{n_{s}^{z}}{n_{tot}} \; ; \; n_{tot} = \frac{P}{k_{b} T_{g}}$$
(III-3.5)

L'équation de Poisson est discrétisée par la méthode des différences finies centrées, tandis que le champ électrique local est obtenu par dérivation du potentiel. Le calcul de la densité de charge dans un cellule est réalisé par interpolation linéaire de la charge des macro-particules présentes uniquement dans cette cellule, comme donnée dans l'équation (III-3.2).

$$-\frac{\rho(z)}{\epsilon_0} = \frac{\phi(z-1) - 2\phi(z) + \phi(z+1)}{\Delta z^2}$$

$$E(z) = \frac{\phi(z-1) - \phi(z+1)}{2\Delta z}$$
(III-3.6)

La résolution des équations du mouvement des particules chargées se base sur un schéma d'Euler explicite, avec l'emploi de la méthode "Leap-Frop" qui consiste à calculer les vecteurs caractéristiques des particules sur des intervalles séparés : la position sur les pas de temps entiers (t,  $t + \Delta t$ , etc.) et la vitesse sur les pas de temps demi-entiers ( $t - \Delta t/2$ ,  $t + \Delta t/2$ , etc.) ce qui permet alors de discrétiser les équations du mouvement (III-3.1) selon :

$$v_i(t + \Delta t/2) = v_i(t - \Delta t/2) + \frac{q_i}{m_i} E_i(t) \Delta t$$
  

$$z_i(t + \Delta t) = z_i(t) + v_i(t + \Delta t/2) \Delta t$$
(III-3.7)

Le choix de cette méthode permet d'augmenter la précision du calcul pour la même rigueur du critère de stabilité sur le pas de temps. En effet, un développement en série de Taylor permet de montrer que ce schéma est précis à l'ordre 2 en temps, contre une précision à l'ordre 1 pour le schéma explicite simple de type 'Push'. D'autres schémas de résolution possédant une plus grande précision et stabilité sont utilisables, mais le surcoût en termes de temps de calcul est significatif comme indiqué dans le tableau III.2.

		Nombre d'opérations			Erreur $O(\Delta t^x)$		
Méthode	Туре	Add.	Mul.	Tan.	$\vec{x}$	$\vec{v}$	tot
Push	simple	7	6	0	2	1	0
Leap-Frog		21	22	1	4	2	1
Boris Push	simple	43	56	2	3	2	1
	modifié	89	105	3	3 - 4	2	1 <b>-</b> 2
	gradients	110	129	3	3 - 4	2	1 - 2
Second Ordre		123	155	3	4	2	2

**TABLE III.2** – *Coût de calcul et précision de différentes méthodes de résolution des équations pour le mouvement des ions, selon des données issues de [Cartwright et al. 2000].* 

# 3.4 Critères de stabilité

Pour que les calculs sur la variation temporelle des vitesses et positions des macro-particules puissent converger d'un point de vue numérique, il est nécessaire que le pas de temps  $\Delta t$  et le pas d'espace  $\Delta x$  respectent certains critères de stabilité.

– La condition de Courant-Friedrichs-Lewy (CFL) impose que le pas de temps soit suffisamment faible pour qu'une particule ne traverse pas plus d'une cellule durant une itération. On choisit comme  $v_{max}$  la vitesse d'un électron accéléré sans collisions par le potentiel imposé au substrat.

$$\Delta t < \frac{\Delta z}{v_{max}} ; v_{max} = \sqrt{\frac{2e|V_0|}{m_e}}$$
(III-3.8)

– Afin de rendre compte des effets collectifs dus aux particules chargées composant le plasma, la taille des mailles doit typiquement être inférieure à la longueur de Debye  $\lambda_{De}$  qui caractérise la distance sur laquelle une perturbation du potentiel local peut se propager. Dans le cas contraire, la valeur de la densité de charge en présence d'une perturbation de potentiel sera faussée car toutes les particules chargées nécessaires pour le calcul ne seront pas présentes dans la même cellule.

$$\Delta z < \lambda_{De} \; ; \; \lambda_{De} = \sqrt{\frac{\epsilon_0 k_b T_e}{n_e e^2}} \tag{III-3.9}$$

Un autre critère ayant trait à la charge d'espace impose que la simulation soit capable de rendre compte des oscillations propres du plasma. En présence d'un déséquilibre local de l'électroneutralité, les électrons auront tendance à se mouvoir autour de la position d'équilibre avec une fréquence égale à leur fréquence d'oscillation ω<sub>pe</sub>. Cela signifie en pratique que le pas de temps doit être inférieur à l'inverse de ω<sub>pe</sub> pour capturer ces oscillations.

$$\Delta t < \frac{1}{\omega_{pe}} ; \; \omega_{pe} = \sqrt{\frac{n_e e^2}{\epsilon_0 m_e}} \tag{III-3.10}$$

– La stabilité d'un schéma de type 'Leap-Frop' est assurée tant que  $\Delta t < 2/\omega_{pe}$ . D'autres critères de stabilité sont détaillés dans les ouvrages de Birdsall et Langdon [2004] et Verboncoeur [2005].

## 3.5 Traitement des conditions aux limites

Afin de calculer correctement les paramètres des macro-particules et les caractéristiques du plasma qui en découle, il est nécessaire d'estimer la valeur de la vitesse des particules et du potentiel local au niveau des deux limites de l'espace de simulation, qui sont le substrat et le bord libre dans le modèle unidimensionnel employé.

#### 3.5.1 Cas du bord libre

L'espace de simulation du modèle PIC comporte deux zones, une pour la gaine ionique en contact avec le substrat (dont la longueur en régime stationnaire est calculée dans la section 2.5) et une pour le plasma libre surmontant la gaine. La situation au niveau du bord libre est plus complexe qu'au niveau du substrat car on cherche à y obtenir un plasma libre de nature ambipolaire, ce qui revient à avoir un champ électrique local quasi-nul.

Le développement de la gaine va générer un courant ionique vers le substrat qui va progressivement raréfier le plasma libre. Or la zone libre n'est pas isolée, mais connectée au reste de la chambre d'implantation où la densité du plasma est supposée constante. Pour maintenir constante la densité ionique du plasma libre en régime stationnaire, il est nécessaire d'injecter des ions au niveau du bord libre pour remplacer ceux perdus par impact sur le substrat.

Le traitement de cette condition à la limite repose donc sur l'ajustement des trois paramètres qui caractérisent les macro-particules injectées : densité en nombre  $n_i$ , vitesse de dérive  $v_i^0$  et fonction de distribution en vitesse  $f_i$ . Ils doivent posséder des valeurs cohérentes avec la nature physique de la condition à la limite, sinon des effets non-physiques peuvent se manifester comme des fluctuations importantes du champ électrique. Une pseudo-gaine d'origine numérique a également des chances de se développer entre le bord libre et le plasma (cf. figure III.10) et peut déformer la fonction de distribution en vitesse des ions incidents si son amplitude est comparable à la température électronique locale [Surendra et Vender 1994].



FIGURE III.10 – Exemple d'un profil axial de potentiel entre le substrat et le bord libre du plasma dans le cas où une pseudo-gaine numérique d'amplitude  $\phi_l - \phi_p$  est présente.

Une initialisation correcte du modèle PIC nécessite donc de déterminer les flux ioniques  $F_i^L = n_i^L v_i^L$  sur le bord libre de l'espace de simulation. Si la longueur de gaine dépasse le libre parcours moyen des ions (une situation possible lorsque la pression ou le potentiel imposé sont élevés) alors la gaine doit être considérée comme collisionnelle.

La variation du flux ionique sur une épaisseur  $\delta z$  faible devant  $L_{pic}$  dépend des réactions produisant ou consommant l'espèce *i*, caractérisées par leur section efficace  $\sigma_k$  et la vitesse  $v_k^f$  de la particule la plus rapide impliquée dans la réaction. Cette vitesse est égale à la vitesse thermique électronique pour une réaction électron - neutre ou à la vitesse de de Bohm dans le cas d'une réaction ion - neutre.

$$n_{i}v_{i} = \delta z \left( W_{p}^{x} - W_{c}^{x} \right) ; W_{p}^{x} = \sum_{k}^{prod} \sigma_{k} n_{k}^{x} n_{j}^{x} v_{k}^{f} ; W_{c}^{x} = \sum_{k}^{cons} \sigma_{k} n_{k}^{x} n_{i}^{x} v_{k}^{f}$$
(III-3.11)

Intégrer l'équation précédente entre le substrat (exposant S) et la surface libre (exposant L) nécessite de connaitre l'évolution de la densité ionique dans l'espace de simulation. Pour simplifier l'intégration, on considère une densité ionique moyenne  $n_i^m$ . Pour estimer cette dernière variable, on effectue deux hypothèses :

– la densité électronique suit la relation de Boltzmann avec  $\Delta \phi = \phi_L - \phi_S$ 

les densités ioniques suivent la densité électronique

$$\beta = \exp\left(-\frac{e\Delta\phi}{k_b T_e}\right) \; ; \; n_e^S = n_e^L\beta \; ; \; n_i^m = \frac{n_i^L + n_i^S}{2} = \frac{1+\beta}{2}n_i^L \tag{III-3.12}$$

Une fois la densité ionique moyenne connue, on peut déterminer le flux ionique

en entrée du modèle PIC  $F_i^L$ .

$$n_{i}^{S} v_{i}^{S} - n_{i}^{L} v_{i}^{L} = L_{pic} \left( W_{p}^{m} - W_{c}^{m} \right)$$

$$F_{i}^{L} = n_{i}^{L} v_{i}^{L} = n_{i}^{S} v_{i}^{S} - L_{pic} \left( W_{p}^{m} - W_{c}^{m} \right)$$

$$= \beta n_{i}^{L} v_{i}^{S} - L_{pic} \left( \frac{1+\beta}{2} \right)^{2} \left( W_{p}^{L} - W_{c}^{L} \right)$$
(III-3.13)

Il est important de noter que le calcul du flux ionique selon les expressions précédentes suppose que  $\Delta \phi$  soit modéré devant la température électronique, donc que  $\phi_S = V_{sub}$  soit proche du potentiel flottant  $\phi_w$ . Il en résulte que le courant ionique traversant l'espace de simulation, calculé selon cette méthode, peut être considéré comme indépendant du potentiel imposé et constant dans le temps.

Un paramètre important du flux ionique est sa fonction de distribution en vitesse  $f_i(v_i)$ , qui indique la probabilité qu'un des ions possède une vitesse égale à v. Le type de fonction de distribution utilisé pour ce modèle est celle de Maxwell-Boltzmann, qui ne dépend que de la masse de la particule et de la température. Il faut noter par ailleurs que l'ajout d'une vitesse de dérive  $v_0$  à une population maxwellienne de particules va occasionner un décalage linéaire de la fonction de distribution vers les hautes vitesses selon  $v' = v + v_0$ , tant que la vitesse totale reste non relativiste.

$$f_i(v_i) = \left(\frac{m_i}{2\pi k_b T_i}\right)^{3/2} 4\pi v_i^2 \exp\left(-\frac{m_i v_i^2}{2k_b T_i}\right)$$
(III-3.14)

On peut en déduire la fonction de distribution cumulée **R** qui possède une distribution uniforme sur l'intervalle [0,1]. Elle peut être définie sur un intervalle de vitesse fini, délimité par une valeur minimale  $v_{min}$  et une valeur maximale  $v_{max}$ .

$$R(v_i) = \frac{\int_{v_{min}}^{v_i} f_i(v') dv'}{\int_{v_{min}}^{v_{max}} f_i(v') dv'} = \frac{\operatorname{erf}(v_i) - \operatorname{erf}(v_{min})}{\operatorname{erf}(v_{max}) - \operatorname{erf}(v_{min})}$$
(III-3.15)

Compte tenu des propriétés statistiques de R, il est alors possible d'obtenir en deux étapes la vitesse  $v_i$  d'un ion donné appartenant à une population maxwellienne : on effectue tout d'abord un tirage aléatoire de la valeur de R, puis on calcule la vitesse en employant la fonction d'erreur erf et son inverse selon

$$v_i = \operatorname{erf}^{-1} \left( R_i \operatorname{erf}(v_{max}) + (1 - R_i) \operatorname{erf}(v_{min}) \right) \; ; \; R_i \in [0; 1] \tag{III-3.16}$$

Il faut noter cependant que le calcul de la fonction d'erreur demande un nombre important d'opérations arithmétiques élémentaires : comme le calcul de  $v_i$  à partir de R emploie la fonction d'erreur trois fois et doit être répété pour chaque particule de la population, ceci rend l'opération relativement couteuse en temps de calcul.

Une alternative consiste à employer la méthode de Box-Muller détaillée dans Hammersley et Handscomb [1964], :

1. On effectue le tirage de deux variables aléatoires  $\eta_a$  et  $\eta_b$  de distribution uniforme dans l'intervalle [0,1]

- 2. On en déduit la valeur de la distribution cumulée  $R_{ab} = \sqrt{\eta_a^2 + \eta_b^2}$  ainsi que celle du facteur  $C_u = \sqrt{v_{max}^2 \ln(R_{ab}^2 + (1 R_{ab}^2)\exp(v_{max}^2))}$ .
- 3. Si  $R_{ab} < 1$  alors on conserve la valeur des deux variables aléatoires, que l'on emploie pour calculer deux valeurs de vitesse associées à une distribution maxwellienne à intervalle fini selon

$$v_a = \frac{\eta_a}{\exp(v_{max}^2)} C_u \ ; \ v_b = \frac{\eta_b}{\exp(v_{max}^2)} C_u \tag{III-3.17}$$

L'emploi des fonctions racines et exponentielle plutôt que de la fonction d'erreur dans les opérations diminue notablement le cout de calcul.

### 3.5.2 Cas du substrat

Le substrat étant polarisé par un générateur externe, la valeur du potentiel de surface  $V_{sub}(t)$  est une fonction du temps relatif dans le pulse de tension. L'arrivée d'un ion sur le substrat peut donner lieu à l'émission d'électrons secondaires si son énergie d'impact est suffisamment élevée pour ioniser des atomes du substrat et libérer des électrons. Le phénomène est caractérisé par un coefficient d'émission secondaire  $\gamma_i^{es}$ , qui quantifie le nombre d'électrons libérés pour chaque ion d'espèce i impactant la surface.

On peut estimer la valeur du coefficient à l'aide de la formule empirique de Oechsner [1978], qui dépend de l'énergie d'ionisation de l'ion incident  $E_{ioni}$  et reste en bon accord avec les données expérimentales (±10%) tant que  $E_{ioni}$  est compris dans l'intervalle indiqué.

$$\gamma_i^{es} = \frac{0,2}{E_F} (0,8E_{ioni} - 2E_{\phi}) \text{ tant que } 3E_{\phi} < E_{ioni} < 2(E_F + E_{\phi})$$
(III-3.18)

où  $E_F$  est l'énergie de Fermi du matériau cible et  $E_{\phi}$  sa fonction de travail.

La fonction de travail représente la barrière de potentiel que doit franchir un électron pour s'échapper du substrat. On peut la calculer par une formulation détaillée dans Halas et Durakiewicz [1998]

$$E_{\phi} = \frac{\alpha\sqrt{3}}{2} R_{yd} \left(\frac{E_F}{R_{yd}}\right)^{-1/2} \left(\frac{r_s}{a_0}\right)^{-3/2} ; r_s = \left(\frac{3}{4\pi n_e^m}\right)^{1/3}$$
(III-3.19)

Ici  $a_0$  est le rayon de Bohr,  $R_{yh}$  le rydberg (unité atomique d'énergie) et  $n_e^m$  la densité moyenne des électrons libres dans la matrice du matériau. Le paramètre  $\alpha$  vaut 1 pour tout les éléments sauf les métaux alcalins (Ca, Sr, Ba, Ra, Tl) où il vaut 0,86.

Il est donc possible de calculer le coefficient d'émission secondaire en fonction des propriétés du substrat (listées dans le tableau III.3 pour plusieurs matériaux d'intérêt) mais il faut cependant noter que l'état de surface et les traitements thermiques ont une influence considérable sur le coefficient d'émission [Baglin et al. 2000]. Une surface propre a généralement un coefficient d'émission réduit par rapport à une surface sur laquelle des contaminants sont adsorbés.

Element	Al	Si	Ga	Ge	Se
$E_F$ (eV)	11,3	12,5	10,4	13,0	07,5
$E_{\phi}$ (eV)	4,34	4,35	4,16	4,00	5,90

TABLE III.3 – Grandeurs caractéristiques des éléments d'intérêt composant les substrats employés dans l'industrie électronique. Données issues de [Halas et Durakiewicz 1998] pour  $E_F$  et  $E_{\phi}$ .

L'équation (III-3.18) nous fournit un coefficient d'émission indépendant de l'énergie d'impact, or on peut s'attendre à ce que l'énergie transférée par l'ion incident à chaque électron secondaire ne puisse croître indéfiniment. Un ion à haute énergie aura donc tendance à créer davantage d'électrons secondaires qu'un ion à basse énergie. Il est donc utile de connaitre la valeur du coefficient d'émission secondaire pour des valeurs allant au moins jusqu'à 5 keV. On se basera alors sur les résultats donnés par Lenoble [2000] et Qin et al. [2002], présentés dans la figure III.11.



FIGURE III.11 – Valeurs du coefficient d'émission pour les ions  $BF_x^+$  en fonction de leur énergie d'impact, dans le cas d'une surface de silicium. Les données sont issues de Lenoble [2000] et Qin et al. [2002].

## 3.6 Traitement des collisions

La prise en compte des collisions et de leur effet sur le vecteur vitesse des particules fait par l'emploi de la méthode Monte-Carlo, dont le nom est dérivé des casinos de Monaco. Ce type d'algorithme recourt au tirage de nombres aléatoires et à l'emploi d'outils statistiques pour simuler la nature stochastique des interactions entre particules. Une hypothèse centrale de cette méthode est que les nombres aléatoires employés ont une distribution de probabilité uniforme dans l'intervalle [0,1].

L'intégration de la méthode Monte-Carlo dans les modèles PIC, initialement réalisée par Boswell et Morey [1988] avec des sections efficaces constantes puis raffinée par Vahedi et Surendra [1995] avec l'emploi de sections efficaces variables en énergie, permet de déterminer la probabilité d'occurrence des différents réactions chimiques issues des collisions et leur conséquences sur la dynamique du plasma.

Dans le cadre de notre simulation, on fait l'hypothèse que le mouvement des particules est une succession de segments rectilignes en vol libre interrompus par des collisions. Un ensemble de **r** réactions (électrons-molécule et ion-molécule) est possible à chaque collision, chacune associée à une fréquence de collision  $v_r$  qui dépend de la section efficace  $\sigma_r$  et de la vitesse de la particule incidente  $v_i$ . La fréquence de collision totale  $v_{tot}$  pour un type donné de particule se calcule comme

$$\nu_{tot} = \sum_{r} \nu_r ; \ \nu_r = n_i v_i \sigma_r(v_i) \tag{III-3.20}$$

Afin de déterminer l'intervalle de temps entre deux collisions, on nomme P(t) la probabilité qu'une particule donnée subisse une collision avant l'instant t. Cette grandeur implique que sur une population initiale de  $n_0$  particules, un nombre n ne seront pas impactées par des collisions à cet instant donné.

On peut alors en déduire la variation du nombre de particules non déviées entre les instants  $t_0$  et  $t_1 = t_0 + dt$ , puis le nombre de particules en vol libre à l'instant  $t_1$ .

$$\frac{n}{n_0} = 1 - P(t) ; \frac{\mathrm{d}n}{\mathrm{d}t} = -n\nu_{tot}$$

$$\ln\left(\frac{n}{n_0}\right) = -\int_{t_0}^{t_1} \nu_{tot} \,\mathrm{d}t \qquad (\text{III-3.21})$$

$$\frac{n(t_1)}{n_0} = \exp\left[-\int_{t_0}^{t_1} \nu_{tot} \,\mathrm{d}t\right]$$

En introduisant la variable aléatoire  $\eta_v = 1 - P(t)$  possédant une distribution de probabilité uniforme dans l'intervalle [0,1], il devient possible de définir le temps de vol entre collisions  $t_{vol}$  en fonction de la fréquence de collision totale.

$$\eta_{v} = \exp\left[-\int_{t_{0}}^{t_{1}} \nu_{tot} \,\mathrm{d}t\right]$$

$$\ln(\eta_{v}) = -\int_{t_{0}}^{t_{vol}} \nu_{tot} \,\mathrm{d}t$$
(III-3.22)

L'obtention du temps de vol par cette approche nécessite d'intégrer la fréquence de collision totale en fonction du temps et de l'énergie pour chaque particule, ce qui représente un coût prohibitif en termes de temps de calcul. Pour contourner ce problème, on emploie alors le concept de collision nulle développé par Skullerud [1968] puis appliqué à la méthode PIC par Boeuf et Marode [1982].

La collision nulle est une réaction fictive qui n'affecte pas le vecteur vitesse de la macro-particule incidente mais possède une section efficace  $\sigma_{nul}(v_i)$  telle que la somme des sections efficaces de toutes les réactions envisagées (nulle comprise) soit constante en fonction de l'énergie de collision dans le centre de masse. Cette astuce revient à ce que la fréquence de collision totale  $v_{tot} = \sum v_r + v_{nul}$  soit indépendante du temps et de l'énergie de la particule incidente, ce qui permet de grandement simplifier l'expression du temps de vol.

$$t_{vol} = \frac{\ln(\eta_v)}{\nu_{tot}} \tag{III-3.23}$$

Si le i-ème tirage de  $\eta_v$  donne un temps de vol inférieur au pas de temps courant, alors la particule i est impliquée dans une collision.

Un fois déterminé si une collision a eu lieu, il est nécessaire de connaitre le processus associée à la collision en cours de traitement. Pour ce faire, on définit une étendue de réaction  $I_r$  comprise dans l'intervalle [0,1] qui correspond à la probabilité que la réaction r ait lieu.

$$I_r = \left[\frac{\nu_{r-1}}{\nu_{tot}}, \frac{\nu_r}{\nu_{tot}}\right] \text{ avec } \nu_{tot} = \sum_r \nu_r + \nu_{nul}$$
(III-3.24)

Si le tirage de  $\eta_r$  donne une valeur faisant partie de  $I_r$ , alors la réaction de type r est réalisée. L'énergie de la particule incidente (et de son produit éventuel) est modifiée en conséquence selon la formule  $E_i^{t+t_v} = A_r E_i^t$ , où la valeur du facteur  $A_r$  dépend du type de processus en jeu :

- Pour la réaction nulle, le vecteur vitesse est inchangé et  $A_r = 1$
- Dans le cas d'une réaction élastique électron-ion, il s'opère un transfert d'énergie depuis l'ion vers l'électron tel que  $A_r = 1 \frac{2m_e}{(m_e + m_i)}$
- Une réaction inélastique est caractérisée par son seuil d'apparition  $E_r^{thr}$  et conduit à un facteur  $A_r = 1 E_r^{thr} / E_i^t$
- Dans le cas de l'ionisation, une variable aléatoire supplémentaire  $\eta_e$  est employée pour répartir l'énergie restante après la collision (qui consomme une énergie égale à  $E_r^{ioni}$ ) entre les deux fragments résultants. On obtient alors  $A_r^{ion} = (1 E_r^{ioni} / E_t^i)\eta_e$  et  $A_r^{e-} = 1 A_r^{ion}$
- Une réaction d'attachement se traite de manière similaire à une réaction inélastique mais l'ion résultant conserve l'énergie de l'électron incident, soit  $A_r = 1 + E_r^{thr} / E_i^t$

En dehors de la réaction nulle, l'orientation du vecteur vitesse par rapport aux axes du modèle est modifié via le tirage de la variable  $\eta_a$ , qui permet de calculer le nouvel angle  $\rho$  que fait le vecteur vitesse avec l'axe Z.

$$\cos(\rho) = 1 - 2\eta_a$$
;  $\sin(\rho) = \sqrt{1 - \cos(\rho)^2}$  (III-3.25)

Le vecteur vitesse résultant de la collision est enfin calculé comme étant égal à

$$\vec{v_i}^{t+t_v} = \sqrt{\frac{2E_i^{t+t_v}}{m_i}} \left(\cos(\rho)\vec{z} + \sin(\rho)\vec{r}\right)$$
(III-3.26)

# 3.7 Collisions lourd-lourd additionnelles

En plus des réactions électron-lourd présentées dans la section 2.1.1, il nous faut également tenir compte dans le schéma réactionnel du modèle PIC de réactions ion-neutre qui seraient très peu probables dans la source plasma du fait de l'absence de champ électrique. En effet, l'énergie des ions accélérés vers le substrat par la différence de potentiel entre la source et le porte-substrat peut largement excéder leur énergie thermique en l'absence de champ électrique. Ces réactions additionnelles sont également nécessaires pour effectuer un bilan précis sur l'énergie ionique, contrairement au modèle homogène de la source plasma où la température des lourds était considérée comme constante.

Réactifs	Produits	Seuil (eV)	Réference
$BF_2^+ + BF_3$	$BF_3^+ + BF_2$	6,16	
	$BF_2^+ + BF_2 + F$	7,34	
	$BF^+ + BF_3 + F$	6,82	[Stojanovic et al. 2012]
	$B^+ + BF_3 + 2F$	11,53	
	$F^+ + BF_3 + BF$	13,12	
$BF^+ + BF_3$	$BF_3^+ + BF$	4,44	
	$BF_2^+ + BF + F$	5,62	
	$BF^+ + BF_2 + F$	7,34	[Stojanovic et al. 2012]
	$B^+ + F + BF_3$	4,71	
	$F^+ + BF_2 + BF$	13,64	
$B^+ + BF_3$	$BF_3^+ + B$	7,26	
	$BF_2^+ + B + F$	8,44	[Stojanovic et al. 2012]
	$BF^+ + B + F_2$	13,66	
	$B^+ + BF_2 + F$	7,34	
$F^- + BF_3$	$F_2^- + BF_2$	5,60	[Iovanovic et al. 2012]
	$F + BF_3 + e^-$	3,40	
$F^{-} + F_{2}$	$F_{2}^{-} + F$	0,38	
	$F^{-} + 2F$	1,60	[Stojanovic et al. 2012]
	$F + F_2 + e^-$	3,40	
	$F + 2F + e^{-}$	5,00	

Les réactions supplémentaires sont résumées dans le tableau III.4, les cases grisées indiquant les réactions possibles avec un plasma à 8 espèces.

**TABLE** III.4 – Liste des réactions ion - neutre possibles dans le plasma de  $BF_3$  jouxtant le substrat à implanter. Les cases grisées indiquent les réactions compatibles avec un plasma à 8 espèces.

# 4 Résultats du modèle PIC

# 4.1 Etude paramétrique de la polarisation du substrat

On réalise un ensemble de simulations avec le modèle PIC avec les paramètres opérationnels suivants :

- 1. La pression dans la chambre d'implantation est de 0,3 Pa
- 2. La composition du plasma dans la chambre (en matière de fractions molaires) est celle issue de la source plasma, telle que donnée par le modèle quasi-homogène dans le cas d'une répartition de la puissance RF absorbée de 295 W dans la section haute et 5 W dans la section basse.
- 3. La divergence du champ magnétique en sortie de la source plasma est prise en compte dans l'évaluation de la densité du plasma en entrée du modèle PIC.

- 4. Le pulse de tension appliqué au substrat possède une forme trapézoïdale d'aire constante quelque que soit la durée des phases de montée et de descente, comme schématisé dans la figure III.12. Sa période est de 120  $\mu$ s et la phase allumée dure 40  $\mu$ s soit un rapport cyclique de 1/3.
- 5. On emploie le schéma collisionnel à 8 espèces en volume défini en section 5.3, tout en incorporant les réactions additionnelles listées dans le tableau III.4.



FIGURE III.12 – Représentation schématisée de la forme du pulse de tension imposée sur le substrat. La phase allumée du pulse possède une forme trapézoïdale d'aire constante, caractérisée par des phases linéaires de montée et descente en potentiel de durée respective  $T_m$  et  $T_d$ . Si  $T_m = T_d = 0$ , on revient au cas d'une forme d'onde carrée.

Les grandeurs variables faisant l'objet de l'étude paramétrique sont :

- Les temps de montée et de descente du potentiel durant la phase allumé du pulse de tension varient selon les niveaux 0,00 / 0,10 / 1,00 / 5,00  $\mu$ s.
- La tension maximale appliquée au substrat varie selon les niveaux 0,5 / 1,0 / 2,5 / 5,0 kV

# 4.2 Résultats obtenus pour le cas standard

On réalise tout d'abord une simulation avec un potentiel imposé de 500 V, un pulse de tension de forme carrée (temps de montée et descente nuls) et un plasma collisionnel. L'étude portera sur l'évolution en fonction du temps des paramètres spatiaux de la décharge (densité ionique, potentiel,...) ainsi que la dynamique de l'implantation des ions d'intérêt dans le substrat durant une période du pulse de tension.

### 4.2.1 Évolution temporelle de la gaine

Le profil axial du potentiel pour différents instants durant la période du pulse, obtenu par moyenne sur 15 périodes consécutives, est présenté dans la figure III.13. On constate un établissement rapide de la gaine qui se stabilise en environ  $20\mu$ s et atteint une épaisseur finale d'environ 5 cm, une valeur comparable aux résultats obtenus via les modèles de gaine présentés dans la section 2.4.1. Le potentiel dans la zone de plasma libre tend à converger vers une valeur d'environ +2 V, ce qui



implique que la différence de potentiel subie par les ions accélérés vers le substrat s'écarte de la valeur souhaitée avec une erreur inférieure à 1%.

FIGURE III.13 – Évolution du profil axial de potentiel en fonction de la distance au substrat, pour une forme d'onde carrée et à différentes valeurs du temps relatif dans le pulse de tension.

Les variations spatiales de la densité des particules chargées durant une période du pulse de tension sont présentées dans les figures III.14 à III.17. La présence de la gaine a un effet notable sur la composition locale du plasma, avec une densité ionique pour le  $BF_3^+$  et le  $BF_2^+$  qui est divisée par 10 durant les 40  $\mu$ s de la phase allumée du pulse.

Cette rarefaction du plasma au sein de la gaine peut être expliquée par la conservation du flux ionique  $n_i v_i$  entre le plasma libre et le substrat. Ce principe de conservation est valide si les réactions d'ionisation sont négligeables dans la gaine, ce qui est probablement le cas ici car les collisions sont peu fréquentes. En effet, le libre parcours moyen pour une pression de 0,3 Pa (4,5 cm) est du même ordre de grandeur que l'épaisseur de gaine. Comme le produit  $n_i v_i$  est constant le long de l'axe Z, alors la densité ionique  $n_i$  diminue lorsque la vitesse des ions  $v_i$  augmente du fait de leur accélération par la différence de potentiel entre le substrat et le bord libre.

On peut aussi noter que la densité ionique varie légèrement au niveau du bord libre de la simulation, du fait de la présence de fluctuations numériques du potentiel visibles dans l'encart de la figure III.13.

Concernant les espèces chargées négativement, les électrons voient leur densité divisée par  $10^3$  dans le même intervalle de temps tandis que les ions  $F^-$  sont entièrement expulsés de la gaine en formation. Par ailleurs, la remontée des densités





FIGURE III.14 – Évolution du profil axial de densité pour le  $BF_3^+$ , en fonction du temps relatif dans le pulse de tension, pour une forme d'onde carrée.

FIGURE III.15 – Évolution du profil axial de densité pour le  $BF_2^+$ , en fonction du temps relatif dans le pulse de tension, pour une forme d'onde carrée.

dans la zone de la gaine durant la phase éteinte du pulse de tension est plus rapide pour les électrons car ces derniers possèdent une masse beaucoup moins élevée qui leur confèrent une inertie bien moindre.

La présence d'une densité électronique résiduelle dans la gaine durant la phase active du pulse de tension ainsi que sa remontée près du substrat s'explique en partie par le mécanisme d'émission secondaire : la production d'électrons au niveau du substrat est assurée tant que le flux ionique impactant la surface est suffisant pour compenser l'éjection des électrons créés hors de la gaine et leur consommation dans des réactions avec les neutres du plasma.





FIGURE III.16 – Évolution du profil axial de la densité électronique, en fonction du temps relatif dans le pulse de tension et pour une forme d'onde carrée.

FIGURE III.17 – Évolution du profil axial de la densité pour le  $F^-$ , en fonction du temps relatif dans le pulse de tension et pour une forme d'onde carrée.

On s'intéresse également à la répulsion des électrons hors de la gaine du fait du fort potentiel négatif imposé sur le substrat, car l'injection d'électrons énergétiques dans le plasma peut augmenter la contribution des réactions d'ionisation dans le bilan de chimie et modifier la composition du plasma libre.

Si l'on étudie l'énergie électronique moyenne en fonction de la distance depuis le substrat durant une période du pulse de tension, présentée en figure III.18, on peut constater que les électrons sont uniquement accélérés dans la gaine. Ce résultat peut être attendu car la variation spatiale du potentiel (et donc le champ électrique susceptible d'agir sur les électrons) est pratiquement nulle dans la zone du plasma libre. L'énergie électronique finale en sortie de gaine n'est cependant que de l'ordre de 350 eV au lieu des 500 attendus.

Un tel écart peut être expliqué en traçant la fonction de distribution de l'énergie électronique (ou FDEE) en fonction de la distance au substrat, montrée dans la figure III.19 pour un temps relatif de 30µs dans le pulse de tension. Au sein de la gaine, l'énergie de la majorité des électrons présents augmente de manière quasi-linéaire avec la distance depuis le substrat. L'élargissement de la FDEE vers des valeurs inférieures peut être attribuée au caractère collisionnel de la décharge, les réactions électrons-lourds de nature inélastique ou dissociative entraînant une dissipation de l'énergie des électrons incidents.

On peut également remarquer via la figure III.20 que la FDEE dans la zone de plasma libre comporte deux composantes notables : une population d'électrons à basse énergie issus du plasma libre avec une distribution maxwellienne représentant plus de 99,9% du total, plus un faisceau d'électrons à haute énergie (450-500 eV) émis depuis la gaine comptant pour une fraction de  $5 \cdot 10^{-5}$ .



FIGURE III.18 – Évolution du profil axial de l'énergie électronique en fonction du temps relatif dans le pulse de tension. L'encart emploie une échelle logarithmique pour les ordonnées.

#### 4.2.2 Dynamique de l'accélération des ions vers le substrat

Afin d'étudier la distribution de l'accélération des ions positifs et de leur implantation dans le substrat, il nous faut déterminer la fonction de distribution de l'énergie d'impact des ions en fonction du temps relatif dans le pulse de tension. Les constatations présentées dans cette section le seront uniquement pour les ions  $BF_3^+$ , car les résultats obtenus avec les ions  $BF_2^+$  sont similaire à ceux du  $BF_3^+$ .

On trace tout d'abord l'évolution durant le pulse de tension du profil axial de l'énergie locale des ions  $BF_3^+$ , représentée en figure III.21. Un parallèle direct



FIGURE III.19 – Évolution de la FDEE en fonction de la distance depuis le substrat, pour un temps relatif dans le pulse de 30  $\mu$ s.



FIGURE III.20 – Évolution de la FDEE à une distance de 10 cm depuis le substrat (zone de plasma libre) pour un temps relatif dans le pulse de 30 µs.

peut être effectué avec le profil axial du potentiel, ce qui permet d'estimer l'effet des collisions sur l'énergie d'impact. Étant donné que le potentiel plasma tend à converger vers +2 V durant la phase allumée du pulse et que l'énergie d'impact moyenne est de 450V, les collisions dans la gaine induisent une perte d'environ 50 eV soit 10% de l'énergie d'implantation souhaitée.



FIGURE III.21 – Évolution du profil axial de de l'énergie du  $BF_3^+$  en fonction de la distance au substrat, pour une forme d'onde carrée et à différentes valeurs du temps relatif dans le pulse de tension. L'encart présente l'évolution de l'énergie ionique sur les 7 premiers centimètres depuis le substrat, avec une échelle logarithmique des ordonnées pour rendre plus lisibles les données obtenues hors du pulse de tension.

Pour compléter la figure précédente, il est utile de représenter la fonction de distribution de l'énergie ionique (FDEI) en fonction de la distance depuis le substrat. Le résultat pour un temps relatif de 30  $\mu$ s dans le pulse de tension est donné dans la figure III.22. On constate que l'énergie ionique moyenne présentée dans la figure III.21 est proche de la bande principale de la FDEI pour le même temps relatif. Mais cette dernière comporte également une population d'ions à basse énergie qui représente entre 7 et 15% de la fraction totale des particules présentes à une distance donnée du substrat, comme démontrée par la figure III.23. Ceci nous permet de quantifier l'effet des collisions sur la dispersion en énergie du faisceau d'ions accélérés vers le substrat.



FIGURE III.22 – Évolution de la fonction de distribution de l'énergie des ions  $BF_3^+$  en fonction de la distance depuis le substrat, pour un temps relatif dans le pulse de 30 µs et dans le cas d'une forme d'onde carrée.



FIGURE III.23 – Valeurs de la fonction de distribution de l'énergie des ions  $BF_3^+$ , à différentes distances depuis le substrat, pour un temps relatif dans le pulse de 30 µs et dans le cas d'une forme d'onde carrée.

Si l'on trace la FDEI pour différents temps relatifs dans le pulse de tension et que l'on en extrait les valeurs pour x=0, on peut alors calculer la fonction de distribution de l'énergie des ions arrivant sur le substrat en fonction du temps relatif dans le pulse de tension. Les résultats en sont présentés dans la figure III.24. On constate que l'énergie d'impact atteint rapidement une valeur stable après établissement du potentiel maximal sur le substrat (moyenne de l'ordre de 490 eV entre 5 et 38  $\mu$ s) mais avec une forte dispersion (largeur à mi-hauteur du pic de 50 eV) qui peut s'expliquer par la modification de la vitesse des ions accélérés vers le substrat du fait des collisions.

En sommant la FDEI au substrat sur une période complète, on peut déterminer la proportion des ions implantés dans le substrat avec une énergie donnée. Les résultats dans le cas d'un pulse de tension carré sont présentés dans la figure III.25. Le spectre en énergie comporte plusieurs domaines :

- un pic principal centré sur 490 eV correspondant aux ions accélérées avec une énergie proche de celle souhaitée, représentant environ 35% du total des ions si l'on emploie la largeur à mi-hauteur du pic (soit 470-500 eV)
- un ensemble d'ions accélérés durant la phase de montée en potentiel et dont l'énergie d'impact est comprise entre 350 et 470 eV, représentant 22% du total.
- une base d'ions d'énergie située entre 50 et 350 eV, générés à la fois par les transitions du potentiel durant le pulse et les collisions subies durant l'accélération, qui représente environ 8% du total.
- une traine d'ions à basse vitesse compris entre o et 50 eV mais d'énergie majoritairement inférieure à 10 eV, qui arrivent sur le substrat durant la phase éteinte du pulse de tension et représente environ 35 % du total.



FIGURE III.24 – Évolution de la fonction de distribution de l'énergie d'impact du  $BF_3^+$  au niveau du substrat, en fonction du temps relatif dans le pulse de tension, pour une forme d'onde carrée.



FIGURE III.25 – Somme sur une période du pulse de tension de la FDE des ions  $BF_3^+$  impactant le substrat (échelle de gauche) et de leur FDE cumulée (échelle de droite) pour une forme d'onde carrée.

Il est également possible de séparer la contribution de la phase active du pulse dans la distribution de l'énergie d'impact et celle de la phase éteinte, comme le montre la figure III.26. Cela permet de constater que la majorité des ions ayant une énergie d'impact inférieure à 50 eV arrivent sur le substrat durant la portion du pulse sans polarisation. Un calcul similaire peut être réalisé pour la fonction de distribution de l'angle d'impact, représentée en figure III.41. La faible largeur du pic principal durant la phase active du pulse ainsi que l'élargissement significatif de la FDA en l'absence de polarisation du substrat peuvent s'expliquer pour des raisons trigonométriques : l'angle d'impact au niveau du substrat  $\theta_{sub}$  se calcule en degrés comme

$$\theta_{sub} = \frac{180}{\pi} \arctan\left(\frac{v_{\perp}}{|v_{\parallel}|}\right) ; v_{\parallel} \approx \sqrt{\frac{2e(\phi_{sub} - \phi_{plas})}{m_i}}$$
(III-4.1)

où  $v_{\parallel}$  est la vitesse selon la normale à la surface du substrate et  $v_{\perp}$  la vitesse transversale à cet axe. Or  $v_{\parallel}$  est proportionnelle à la différence de potentiel entre substrat et plasma libre, et cette dernière est notablement plus faible durant la phase éteinte du pulse ( $\approx$ 2 V) que durant la phase active ( $\approx$ 490 V)

## 4.3 Cas d'un plasma non collisionnel

Afin de déterminer l'impact des collisions sur la dynamique de gaine et le comportement du plasma, on réalise une seconde simulation avec les mêmes paramètres que pour le cas standard mais sans prise en compte des collisions.

### 4.3.1 Évolution temporelle de la gaine

Comme montrée par la figure III.28, la gaine ionique face au substrat atteint un état quasi-stationnaire de manière plus rapide dans le cas non collisionnel, pour un temps relatif de 10  $\mu$ s contre 30 pour le cas standard. Sa longueur asymptotique de





FIGURE III.26 – Comparaison de la contribution à la FDE des ions  $BF_3^+$  impactant le substrat durant la portion active du pulse de tension (courbe rouge) et durant la portion éteinte (courbe bleue) pour une forme d'onde carrée.

FIGURE III.27 – Comparaison de la contribution à la FDA des ions  $BF_3^+$  impactant le substrat durant la portion active du pulse de tension (courbe rouge) et durant la portion éteinte (courbe bleue) pour une forme d'onde carrée.

10 cm est également beaucoup plus importante que pour le cas standard. Ces deux faits s'expliquent par une migration plus rapide des électrons éjectés de la gaine en formation, en l'absence des collisions pouvant ralentir leur mouvement de dérive.

On constate également d'importantes oscillations du potentiel durant la phase éteinte du pulse de tension, avec une valeur locale du potentiel pouvant atteindre +5V à  $t_{rel} = 75\mu s$  et donc entraîner l'accélération des ions positifs vers le substrat en dehors de l'impulsion d'implantation. La présence d'une pseudo-gaine numérique durant la phase active du pulse, d'une amplitude positive par rapport au plasma libre d'environ 8 eV, constitue une barrière de potentiel qui peut réfléchir les ions positifs vers le plasma libre et augmenter la densité ionique au niveau du bord libre du plasma.

Concernant la composition du plasma dans la gaine, un premier constat important est que les ions  $F^-$  sont absents de la décharge durant l'ensemble de la période du pulse de tension. Le mécanisme suivant peut expliquer cet état de fait :

- Ces ions négatifs sont expulsés de la gaine en formation avec une vitesse finale importante (avoisinant les 6900 m/s pour des ions *F*<sup>-</sup> ayant une énergie finale de l'ordre de 480 eV) du fait de leur charge négative et de l'importance du potentiel appliqué.
- Ils traversent l'étendue du plasma libre (soit 5 cm) en environ 7  $\mu$ s sans être ralentis ou diffusés par des collisions de transfert de moment ou de neutralisation mutuelle.
- La gaine numérique au niveau du bord libre va à la fois accélérer de nouveau les ions en dehors de l'espace de simulation et empêcher l'injection de nouvelles macro-particules du même type depuis le bord libre.

Le profil axial pour les ions  $BF_3^+$  (figure III.29) et  $BF_2^+$  (figure III.30) comporte une diminution de la densité dans la gaine nettement moins marquée que pour le cas standard, avec un rapport des densités entre le substrat et le plasma libre (à d=12,5cm) d'environ 8 sans collisions contre 38 avec collisions. La forte augmentation de la densité au niveau du bord libre est due à la présence de la pseudo-gaine



FIGURE III.28 – Évolution du profil axial du potentiel en fonction de la distance au substrat et à différentes valeurs du temps relatif dans le pulse de tension, pour un potentiel imposé de 500 V et un plasma non collisionnel.

numérique, qui tend à réfléchir vers l'espace de simulation les ions d'énergie faible n'étant pas accélérés vers le substrat.

Ces différents points permettent d'avancer que la prise en compte des collisions limite l'amplitude des pseudo-gaines numériques et leurs effets sur les profils axiaux de potentiel, et donc par là même sur ceux des densités ioniques.





FIGURE III.29 – Évolution du profil axial de densité pour le  $BF_3^+$ , en fonction du temps relatif dans le pulse de tension, pour un plasma non collisionnel.

FIGURE III.30 – Évolution du profil axial de densité pour le  $BF_2^+$ , en fonction du temps relatif dans le pulse de tension, pour un plasma non collisionnel.

De son coté, le profil axial de densité électronique (cf. figure III.31) présente le même type d'évolution que pour le cas collisionnel avec une densité au substrat divisée par 10<sup>3</sup> par rapport au plasma libre. La remontée de la densité des électrons au niveau du substrat, durant la phase active du pulse de tension, illustre l'effet du mécanisme d'émission secondaire qui génère des électrons supplémentaires de manière proportionnelle au flux d'ions positifs arrivant sur le substrat.



FIGURE III.31 – Évolution du profil axial de la densité électronique en fonction du temps relatif dans le pulse de tension, pour un plasma non collisionnel.

### 4.3.2 Dynamique de l'accélération des ions vers le substrat

On étudie ensuite l'impact de l'absence de collisions sur l'accélération des ions positifs et leur implantation dans le substrat. Comme pour le cas standard en section 4.2.2, les résultats présentées dans cette section le seront uniquement pour les ions  $BF_3^+$ .

Si l'on trace le profil axial de l'énergie moyenne locale des ions en fonction du temps relatif dans le pulse de tension, représenté en figure III.32, on peut effectuer des constatations similaires à celles pour le cas standard. L'énergie d'impact maximale atteinte au bout de 20  $\mu$ s est d'environ 480 eV contre 450 pour un plasma collisionnel. En revanche, l'énergie d'impact durant la phase éteinte du pulse de tension s'établit autours de 10 eV alors qu'elle est inférieure à 3 eV dans le cas d'un plasma collisionnel.



FIGURE III.32 – Évolution du profil axial de l'énergie moyenne des ions  $BF_3^+$  en fonction du temps relatif dans le pulse de tension, pour un plasma non collisionnel.



FIGURE III.33 – Idem que III.32 mais avec une échelle logarithmique pour les ordonnées, afin de rendre plus visibles l'évolution de l'énergie ionique durant la phase du pulse sans polarisation.

La fonction de distribution en énergie des ions pour un temps relatif de 30  $\mu$ s (représentée dans la figure III.34) est proche du profil axial de l'énergie ionique moyenne dans la figure III.32 pour ce temps donné, car la variation de la FDEI en fonction de l'énergie à une distance donnée (cf. figure III.35) présente un pic unique globalement symétrique. En comparaison avec la FDEI pour le cas standard, le caractère non collisionnel du plasma conduit à l'absence d'ions d'énergie notablement inférieure à l'énergie moyenne locale.





**FIGURE III.34** – Évolution de la fonction de distribution de l'énergie des ions  $BF_3^+$  en fonction de la distance depuis le substrat, pour un temps relatif dans le pulse de 30 µs et dans le cas d'un plasma non collisionnel.

FIGURE III.35 – Valeurs de la fonction de distribution de l'énergie des ions  $BF_3^+$  pour différentes distances depuis le substrat, pour un temps relatif dans le pulse de 30 µs et dans le cas d'un plasma non collisionnel.

En traçant la fonction de distribution de l'énergie d'impact des ions  $BF_3^+$  sur le substrat en fonction du temps dans le pulse de tension, représentée dans la figure III.36, on peut constater que la FDEI ne comporte pas d'ion d'énergie significativement inférieure à la valeur moyenne courante durant la phase où la tension d'implantation est appliquée. Ce résultat peut être mis en parallèle avec le profil axial de la FDEI (cf. figure III.34) et le caractère approximativement mono-énergétique des ions présents à une distance donnée du substrat.

On remarque également que l'énergie d'impact des ions durant la phase éteinte du pulse de tension, entre 60 et 120  $\mu$ s, est significativement plus élevée que dans le cas collisionnel. L'encart de la figure III.36 illustre bien ce phénomène. Il peut être relié aux oscillations rapides du potentiel plasma durant cette phase, car leur amplitude locale peut atteindre 14 V contre 0,5 V pour le cas standard, mais aussi au fait que la présence de collisions tend à dissiper l'énergie cinétique des ions.

Partant de la variation temporelle de la FDE au substrat telle que présentée en figure III.36 pour le cas non collisionnel et de son équivalent en figure III.25 pour le cas standard, on peut calculer et comparer l'évolution de l'énergie d'impact moyenne pour les ions  $BF_3^+$  durant une période du pulse de tension. Les résultats sont mis en valeur dans la figure III.37 incluant l'écart-type de la distribution des énergies d'impact.

On peut noter pour le régime stationnaire durant la phase active du pulse de tension (10-40  $\mu$ s) que l'écart-type sur l'énergie est plus faible en l'absence de collisions que pour le cas standard, avec 10 eV pour le premier contre 60 eV pour le second. Une telle observation est logique puisque des collisions entre les ions



FIGURE III.36 – Évolution de la fonction de distribution de l'énergie des ions  $BF_3^+$  impactant le substrat, en fonction du temps relatif dans le pulse de tension, dans le cas d'un plasma non collisionnel. L'encart permet de comparer la FDEI cumulée sur le segment 60-120 µs dans les cas standard et non-collisionnel.

accélérés vers le substrat et le gaz vecteur vont entraîner une dispersion de l'énergie cinétique ionique qui est de l'ordre du seuil d'apparition pour les réactions inélastiques et fragmentantes les plus significatives. On constate par ailleurs que la montée de l'énergie ionique à l'impact après établissement du pulse de tension est plus lente dans le cas non collisionnel.

Si l'on compare la fonction de distribution de l'énergie d'impact des ions  $BF_3^+$  pour les cas standard et non collisionnel, telle que présentée dans la figure III.38, les deux courbes sont similaires pour des énergies comprises entre 50 et 400 eV. Le pic principal à 450-500 eV est davantage resserré dans le cas non-collisionnel, en l'absence de réactions pouvant modifier l'énergie des ions incidents. La présence d'une importante population ionique d'énergie comprise entre 10 et 40 eV pour un plasma non collisionnel est dû aux oscillations du potentiel durant la phase éteinte du pulse de tension. Cependant, la proportion des ions d'énergie inférieure à 50 eV dans le total est similaire dans les deux cas de figure, avec 35 % pour un plasma standard et 32 % pour un plasma non collisionnel.

Tracer l'évolution temporelle de la valeur moyenne de l'angle d'impact pour les cas standard et non-collisionnel (voir figure III.40) permet d'effectuer plusieurs constatations :



FIGURE III.37 – Comparaison de l'énergie moyenne d'impact des ions  $BF_3^+$  en fonction du temps relatif dans le pulse de tension, selon que le plasma est collisionnel ou non. Les barres d'erreur indiquent l'écart type standard associé à chaque courbe.





FIGURE III.38 – Comparaison de la fonction de distribution en énergie des ions  $BF_3^+$  impactant le substrat durant une période complète du pulse de tension, en fonction du caractère collisionnel ou non du plasma.

FIGURE III.39 – Comparaison pour un plasma non collisionnel de la contribution à la FDE des ions  $BF_3^+$  impactant le substrat durant la portion active du pulse de tension (courbe rouge) et durant la portion éteinte (courbe bleue)

- La valeur moyenne de l'angle d'impact  $\theta_{sub}$  durant la phase active du pulse de tension varie entre 0,35 et 0,40 degrées, ce qui est en concordance avec la valeur donnée par l'équation (III-4.1). En effet,  $\theta_{sub}$  est une fonction du rapport  $v_{\perp}/v_{\parallel}$ , or  $v_{\perp}$  est de l'ordre de la vitesse thermique ionique ( $\approx$  240 m/s) tandis que  $v_{\parallel}$  est proportionnelle au potentiel imposé et peut atteindre 37,7 km/s pour  $V_{max} = 500$  V. Le rapport obtenu vaut approximativement  $7 \times 10^{-3}$  durant la phase d'implantation et correspond à un angle de 0,35 degrés.
- L'angle d'impact augmente fortement durant la phase éteinte du pulse de tension, du fait de la diminution de la vitesse ionique axiale  $v_{\parallel}$  en l'absence de polarisation du substrat. Dans le cas non-collisionnel, l'angle moyen est notablement inférieur par rapport au cas standard puisque l'énergie ionique

hors polarisation est significativement plus élevée, comme demontré dans l'encart de la figure III.36.



FIGURE III.40 – Comparaison de l'angle moyen d'impact des ions  $BF_3^+$  en fonction du temps relatif dans le pulse de tension, selon que le plasma est collisionnel ou non. Les barres d'erreur indiquent l'écart type standard associé à chaque courbe.

Concernant la fonction de distribution de l'angle d'impact pour les ions  $BF_3^+$ , on peut comparer la contribution des deux portions pertinentes du pulse de tension à la FDA dans le cas standard (figure III.41) et non-collisionnel (figure III.42). Dans les deux cas de figure, on peut distinguer un pic principal centré sur 0 pour les ions accélérés vers le substrat durant la phase active du pulse de tension et un pic secondaire non centré qui comprend les ions impactant le substrat durant la phase éteinte du pulse.

La largeur plus importante du pic secondaire par rapport au pic principal s'explique par la plus faible valeur de la différence de potentiel entre plasma libre et substrat durant la phase éteinte du pulse de tension. En effet, un énergie ionique faible induit une vitesse axiale  $v_{\parallel}$  réduite (voir équation (III-3.26)) tandis que qu'un rapport  $v_{\perp}/v_{\parallel}$  plus élevé est lié à un angle d'impact plus important selon l'équation (III-4.1).

Durant la phase active du pulse, l'énergie ionique est suffisamment élevée pour que l'impact des collisions sur la vitesse d'impact soit quasiment négligeable. Mais on constate un élargissement net de la distribution durant la phase éteinte du pulse lorsque les collisions sont prises en compte, avec un sommet du pic secondaire passant de 1,5 degrés dans le cas non-collisionnel à 6 degrés dans le cas standard. Un tel comportement peut se justifier par deux phénomènes concomitants :

- La présence de collisions tend à diminuer l'énergie cinétique des ions, ce qui conduit à une vitesse axiale réduite et donc à un angle d'impact plus important.
- L'énergie ionique moyenne est plus élevée dans le cas non-collisionnel du fait des oscillations du potentiel plasma durant cette phase, dont l'amplitude peut atteindre 14 V contre 0,5 V pour le cas standard. Or une énergie ionique élevée conduit à une vitesse axiale importante et donc un angle d'impact réduit.



FIGURE III.41 – Comparaison de la contribution des ions  $BF_3^+$  impactant le substrat à la fonction de distribution angulaire pour un plasma collisionnel, durant la portion active (courbe rouge) ou la portion éteinte (courbe bleue) du pulse de tension.

FIGURE III.42 – Comparaison de la contribution des ions  $BF_3^+$  impactant le substrat à la fonction de distribution angulaire pour un plasma noncollisionnel, durant la portion active (courbe rouge) ou la portion éteinte (courbe bleue) du pulse de tension.

En complément de l'étude réalisée pour les ions  $BF_3^+$ , une analyse similaire peut être effectuée pour les électrons afin d'obtenir le profil axial d'énergie moyenne et la fonction de distribution en énergie des électrons le long de l'axe normal à la surface du substrat.

Concernant le profil axial de l'énergie électronique (cf. figure III.43) un régime quasi-stationnaire est atteint au bout d'environ 10  $\mu$ s après application du pulse de tension où l'évolution de l'énergie locale en fonction de la distance au substrat est quasi-linéaire dans la gaine. L'énergie maximale en bord de gaine est aussi plus élevée que dans le cas collisionnel, avec 400 eV contre 350 eV. On peut également constater que l'évolution de l'énergie électronique durant la phase éteinte du pulse de tension (représentée dans l'encart) suit de près les oscillations du potentiel plasma durant la même période du fait de la grande mobilité des électrons, avec une énergie maximale au niveau du substrat de l'ordre de 16 eV.

En l'absence de collisions pouvant modifier l'énergie des électrons durant leur mouvement, la FDEE résultante pour un temps relatif de 30  $\mu$ s (cf. figure III.44) présente une structuration nette en deux régions :

- la gaine où l'énergie électronique augmente quasi-linéairement avec la distance depuis le substrat
- le plasma libre où une population d'électrons suivant une distribution de Maxwell-Boltzmann coexistent avec un jet d'électrons éjectés de la gaine avec une énergie de  $495 \pm 10$  eV

## 4.4 Impact de l'amplitude du potentiel imposé

Pour discerner l'influence de la valeur maximale du potentiel imposé au substrat sur les paramètres de la décharge et de la gaine, on réalise plusieurs simulations avec des temps de montée et de descente du pulse de 1 $\mu$ s et un potentiel maximal variant selon les niveaux -0,5 / -1,0 / -2,5 / -5,0 kV. Le plasma simulé est collisionnel et la longueur de simulation est ajustée en fonction du potentiel afin





FIGURE III.43 – Évolution du profil axial de l'énergie électronique moyenne en fonction du temps relatif dans le pulse de tension, pour un plasma non collisionnel. L'encart illustre l'évolution de l'énergie électronique en l'absence de polarisation du substrat ( $40 < t_{rel} < 120 \ \mu s$ )

FIGURE III.44 – Évolution de la fonction de distribution de l'énergie des électrons en fonction de la distance depuis le substrat, pour un temps relatif dans le pulse de 30 µs et dans le cas d'un plasma non collisionnel.

de conserver une étendue suffisante pour la zone du plasma libre. Afin de comparer aisément les paramètres plasma entre les différents calculs, on aura recours à une normalisation de forme  $X_{nrm} = X(z)/X_{max}$  pour le potentiel, les densités en nombre et l'énergie ionique.

La figure III.45 présente le potentiel normalisé en fonction de la distance au substrat pour un temps relatif de 30  $\mu$ s, correspondant au régime quasi-stationnaire durant la phase active du pulse de tension. On peut noter que la longueur de la gaine est multipliée par 2,5 lorsque le potentiel imposé est multiplié par 10. Comme indiqué dans l'encart de la figure, le potentiel dans la zone de plasma libre varie sur un faible intervalle (+0,5 à +1,5 V) en fonction du potentiel imposé au substrat.



FIGURE III.45 – Variation du profil axial pour le potentiel normalisé en fonction du potentiel imposé au substrat, pour un temps relatif de 30µs dans le pulse de tension. L'écart présente les variations du potentiel non normalisé au niveau du plasma libre pour différentes valeurs de la polarisation.

L'évolution de l'épaisseur de gaine en régime stationnaire en fonction du potentiel suit une loi d'échelle en  $V_0^{0,4}$ , plus limitée que celle donnée par l'équation de Child-Langmuir (III-2.14) où l'épaisseur est proportionnelle à  $V_0^{3/4}$ . Mais il faut aussi tenir compte de la densité électronique dans l'estimation de l'épaisseur de gaine, car cette dernière varie en  $n_e^{-1/2}$ . Or la densité électronique au niveau du plasma libre décroit de manière non-linéaire lorsque la distance depuis la source augmente, du fait de la dilution du plasma occasionée par le divergence du champ magnétique de confinement au niveau de la source plasma, comme indiqué par l'équation (III-2.10) dans la section 2.1. Il en découle que l'augmentation de l'épaisseur de gaine due à l'augmentation du potentiel imposé est partiellement compensée par l'augmentation de la densité électronique dans le plasma libre lorsque la distance entre le bord libre et le source plasma diminue.

L'évolution du profil axial de l'énergie ionique normalisée en fonction du potentiel imposé au substrat, montré dans la figure III.46, est calculée pour le même temps relatif dans le pulse de tension que pour la figure précédente. L'énergie ionique locale est minimale en dehors de la gaine et évolue de manière inversement proportionnelle au potentiel. Mais elle n'atteint pas la valeur maximale possible au niveau du substrat à cause du caractère non nul du potentiel plasma et des pertes par collisions entre plasma libre et substrat.



FIGURE III.46 – Variation du profil axial de l'énergie ionique normalisée en fonction du potentiel imposé au substrat, pour un temps relatif dans le pulse de tension de 30µs. L'encart présente les valeurs de l'énergie normalisée au niveau du substrat pour différentes valeurs de la polarisation.

Le calcul des paramètres pertinents au sujet de l'énergie ionique moyenne, dont les résultats sont résumés dans le tableau III.5, permet d'effectuer plusieurs constatations. Dans le cas standard, l'énergie maximale des ions  $BF_3^+$  arrivant sur le substrat (en proportion du potentiel imposé) augmente avec le potentiel tandis que la proportion des pertes par collisions diminue. Pour un plasma non-collisionnel, l'énergie d'impact reste stable par rapport au potentiel imposé.

Concernant les profils axiaux pour les densités ioniques et électroniques normalisées, présentés dans les figures III.47 et III.48, les variations de la composition du

Potentiel substrat $V_s$	(V)	500	1000	2500	5000
énergie d'impact $E_s^n$	(eV)	493	971	2415	4854
(non-collisionnel)	$(\%V_s)$	98,7	97,2	95,8	97,1
énergie d'impact $E_s^c$	(eV)	447	891	<b>2</b> 400	4809
(cas standard)	$(%V_s)$	89,3	89,1	95,9	96,2
pertes par collisions	(eV)	46	80	15	45
$(E_c = E_s^n - E_s^c)$	$(\%V_s)$	9,20	8,00	0,60	0,90

TABLE III.5 – Valeurs des paramètres pertinents pour l'implantation des ions  $BF_3^+$ , dans le cas d'un potentiel imposé  $V_s$  variable et d'un temps relatif dans le pulse de tension de 30 µs.

plasma dans la gaine sont similaires au cas standard. La densité du  $BF_3^+$  diminue graduellement à partir du bord de la gaine et atteint une valeur au niveau du substrat égale à 1-2% de celle du plasma libre, tandis que la densité électronique chute beaucoup plus brutalement avec une division par 10<sup>4</sup> sur une distance inférieure à 2 centimètres.





FIGURE III.47 – Variation du profil axial pour la densité normalisée des ions BF3+ en fonction du potentiel imposé au substrat, pour un temps relatif de 30µs dans le pulse de tension.

FIGURE III.48 – Variation du profil axial pour la densité électronique normalisée en fonction du potentiel imposé au substrat, pour un temps relatif de 30µs dans le pulse de tension.

En comptabilisant l'énergie ionique moyenne au niveau du substrat pour différentes valeurs du temps relatif dans le pulse de tension, on peut alors tracer pour les différents potentiels d'implantation envisagés l'énergie moyenne normalisée des ions  $BF_3^+$  impactant le substrat. Les résultats, présentés dans la figure III.49, permettent deux constatations durant la phase active du pulse de tension : l'énergie ionique moyenne converge vers la valeur idéale de 1,0 d'autant plus que le potentiel appliqué est plus élevé, tandis que l'écart type de la distribution des valeurs d'énergie d'impact diminue lorsque le potentiel augmente.

Concernant l'angle d'impact moyen des ions  $BF_3^+$  sur le substrat, représenté dans la figure III.50, on peut effectuer deux constatations : l'angle moyen est inversement proportionnel au potentiel imposé durant la phase active du pulse de tension (voir l'encart) ce qui est en accord avec la formulation donnée dans l'équation (III-4.1), tandis qu'il converge vers une valeur d'environ 5,5° durant la phase éteinte du pulse quelque soit le potentiel initialement imposé.



FIGURE III.49 – Évolution de l'énergie moyenne normalisée des ions  $BF_3^+$  impactant le substrat, en fonction du temps relatif dans le pulse de tension et selon le potentiel imposé au substrat.

FIGURE III.50 – Évolution de l'angle moyen d'impact des ions  $BF_3^+$  en fonction du temps relatif dans le pulse de tension, selon le potentiel imposé au substrat.

La figure III.51 représente la fonction de distribution des ions  $BF_3^+$  en fonction de l'énergie d'impact normalisée, avec une séparation entre les phases active et éteinte du pulse de tension. Dans un parallèle direct avec l'évolution de l'énergie moyenne d'impact représenté dans la figure III.49, l'augmentation du potentiel imposé conduit à un léger resserrement du pic principal de la distribution ainsi qu'à une migration de son maximum vers les valeurs plus élevées. Il faut cependant noter qu'une largeur de pic stable en termes d'énergie normalisée implique un accroissement de sa largeur en électron-volts.

Une démarche similaire peut être réalisée pour la fonction de distribution de l'angle d'impact des ions, afin d'aboutir à la figure III.52. Deux constatations majeures peuvent être faites : le pic principal correspondant à la phase active du pulse se resserre lorsque le potentiel imposé augmente, tandis que le sommet du pic secondaire associé à la phase éteinte du pulse se déplace vers les angles faibles. Ces variations s'expliquent par le fait que le rapport des vitesses ioniques  $v_{\parallel}/v_{\perp}$  est proportionnel au potentiel imposé, ce qui implique un angle d'impact réduit lorsque l'énergie ionique au substrat devient plus élevée.



1E+0 0,5kV (ON) | 1,0kV( ON) | 0,5kV( OFF) 1,0kV (OFF) 2.5kV (ON) 2.5kV (OFF 5,0kV (ON) 5,0kV (OFF 1E-3 FDA 1E-2 1E-3 15 10 20 angle d'impact (°)

**FIGURE III.51** – Évolution de la fonction de distribution en énergie des ions  $BF_3^+$  impactant le substrat, en fonction du potentiel imposé.

FIGURE III.52 – Évolution de la fonction de distribution angulaire des ions  $BF_3^+$  impactant le substrat, en fonction du potentiel imposé.

# 4.5 Impact de la forme d'onde du potentiel imposé

Pour déterminer l'influence de la forme du pulse de tension appliqué au substrat sur l'implantation ionique, on réalise plusieurs simulations pour un plasma collisionnel avec un potentiel imposé de 500V et un temps de montée  $T_m$  et de descente  $T_d$  du potentiel variant selon les niveaux présentés dans la section 4.1. Cela revient à effectuer 8 calculs, 4 avec un temps de montée variable et un temps de descente nul et 4 avec un temps de montée nul et un temps de descente variable. A partir de ces simulations, il est ensuite possible de comptabiliser les ions arrivant sur le substrat en fonction de leur énergie et angle d'impact et en déduire les fonctions de distributions correspondantes.

La figure III.53 représente l'énergie moyenne des ions  $BF_3^+$  au niveau du substrat en fonction du temps relatif dans le pulse de tension, selon les différentes valeurs des paramètres de forme du pulse. Lors de la phase de montée, l'énergie d'impact ne commence à suivre l'évolution du potentiel que si le temps de montée dépasse la microseconde et un retard d'environ 0,5  $\mu$ s peut être constaté. La présence d'oscillations au niveau de l'énergie d'impact pour les temps de montée faibles indiquent que la formation rapide de la gaine induit des oscillations du potentiel au niveau du plasma libre. Durant la phase de descente, l'énergie tend initialement à suivre l'évolution du potentiel mais se rapproche ensuite d'une décroissance exponentielle.



FIGURE III.53 – Évolution temporelle de l'énergie moyenne d'impact des ions  $BF_3^+$  en fonction du temps relatif dans le pulse de tension, selon les valeurs respectives des temps de montée  $T_m$  et de descente  $T_d$  du pulse de tension appliqué au substrat. Les courbes tiretés indiquent l'évolution temporelle du potentiel imposé selon les différents cas de figure.

Une fois obtenue l'énergie d'impact des ions  $BF_3^+$  pour les différents cas de figure, il est possible d'en déduire la fonction de distribution en énergie en fonction des temps de montée et de descente du potentiel. Pour un temps de montée variable (figure III.54) l'augmentation du temps de montée tend à resserrer le pic principal autour de la valeur nominale de l'énergie d'implantation (du fait de l'absence d'oscillations durant l'établissement de la gaine) mais conduit également à augmenter de manière significative la proportion des ions d'énergie inférieure à 350 eV, qui passe de 42% pour  $T_m = 0\mu s$  à 50% pour  $T_m = 5\mu s$ . Par comparaison, l'influence du temps de descente sur la FDEI (III.55) est beaucoup plus modeste.





FIGURE III.54 – Évolution de la fonction de distribution en énergie des ions  $BF_3^+$  impactant le substrat en fonction du temps de montée du pulse de tension, dans le cas d'un plasma collisionnel et pour un potentiel imposé de 500 V.

FIGURE III.55 – Évolution de la fonction de distribution en énergie des ions  $BF_3^+$  impactant le substrat en fonction du temps de descente du pulse de tension, dans le cas d'un plasma collisionnel et pour un potentiel imposé de 500 V.

Dans le cas d'un temps de montée variable, il est utile de séparer la contribution dans le pulse de tension de la phase active (figure III.56) et de la phase éteinte (figure III.57) afin de quantifier l'impact de ce paramètre sur la fonction de distribution de l'énergie d'impact. Ceci nous permet de démontrer que la variation de la FDEI, surtout pour les ions d'énergie inférieure à 350 eV, n'intervient que durant la montée initiale du potentiel imposé au substrat puisque la FDEI ne varie pas notablement durant la phase éteinte du pulse de tension.

On peut effectuer les mêmes démarches concernant l'angle d'impact, qui est relié à l'énergie d'impact selon les relations données par l'équation (III-4.1). La figure III.58 représente l'angle d'impact moyen au niveau du substrat en fonction du temps relatif dans le pulse de tension. Deux remarques peuvent être effectuées :

- Une fois le substrat polarisé, l'angle d'impact diminue rapidement depuis sa valeur sans potentiel imposé vers une valeur en régime quasi-stationnaire d'environ 0,4 degrés. La durée de convergence est environ égale au temps de montée lorsque ce dernier paramètre est égal ou supérieur à 1  $\mu$ s, ce qui permet de quantifier l'inertie des ions  $BF_3^+$  au sein de la gaine en formation.
- Après l'arrêt de la polarisation du substrat à 40 µs, l'angle d'impact augmente de nouveau mais sur une durée plus longue (20 à 30 µs) avant de converger vers une valeur de 4,2 degrés dans le cas d'un temps de descente non-nul. Le temps de descente n'a pas d'influence notable sur cette valeur asymptotique.

Une fois comptabilisé l'angle d'impact des ions en fonction des paramètres du



FIGURE III.56 – Évolution de la fonction de distribution en énergie des ions  $BF_3^+$  impactant le substrat durant la phase active du pulse de tension, en fonction du temps de montée et pour un potentiel imposé de 500 V.



FIGURE III.57 – Évolution de la fonction de distribution en énergie des ions  $BF_3^+$  impactant le substrat durant la phase éteinte du pulse de tension, en fonction du temps de descente et pour un potentiel imposé de 500 V.



FIGURE III.58 – Évolution temporelle de l'angle d'impact moyen des ions  $BF_3^+$  en fonction du temps relatif dans le pulse de tension, selon les valeurs respectives des temps de montée  $T_m$  et de descente  $T_d$  du pulse de tension appliqué au substrat.

pulse, il est possible d'en obtenir les fonctions de distribution angulaires d'impact en fonction du temps de montée (figure III.59) et du temps de descente (figure III.60). L'impact des temps de montée et de descente sur la FDA est cependant modeste en comparaison de l'impact du potentiel imposé.


FIGURE III.59 – Évolution de la fonction de distribution angulaire des ions  $BF_3^+$  impactant le substrat en fonction du temps de montée du pulse de tension, dans le cas d'un plasma collisionnel et pour un potentiel imposé de 500 V.



FIGURE III.60 – Évolution de la fonction de distribution angulaire des ions  $BF_3^+$  impactant le substrat en fonction du temps de descente du pulse de tension, dans le cas d'un plasma collisionnel et pour un potentiel imposé de 500 V.

### 5 COMPARAISON EXPÉRIMENTALE ET PERSPECTIVES

#### **5.1 Profils d'implantation du** *BF*<sub>3</sub>

L'obtention des fonctions de distribution de l'énergie d'impact des ions à l'aide du modèle PIC nous permet de calculer les profils d'implantation de ces ions dans le substrat, puis de comparer ces profils simulés aux profils d'implantation expérimentaux obtenus par IBS. Avant d'effectuer cette comparaison, il est utile de comparer tout d'abord les FDEIs au niveau du substrat pour un même potentiel imposé, avec en figure III.61 celle obtenue via le modèle PIC et en figure III.62 celle employée par IBS.

On peut constater d'emblée les dissimilarités entre les deux courbes, qui s'expliquent principalement par des différences dans les conditions aux limites appliquées :

- Le modèle PIC se base sur un flux ionique au bord libre (détaillé en section 3.5.1) qui est constant dans le temps
- La FDEI d'IBS se base sur des modèles analytiques de croissance de gaine issus de Stewart et Lieberman [1991] et Linder et Cheung [2001] où le flux ionique à l'interface plasma-gaine est variable dans le temps.

Ensuite, on emploie un logiciel de simulation de l'implantation ionique basé sur la méthode Monte-Carlo ("2D Implant Simulator" par Axcelis) pour calculer les profils d'implantation pour chaque ion du plasma. L'incidence du faisceau est normale à la surface du substrat et le phénomène de channeling (un ion subit moins de collisions et pénètre plus profondement dans un matériau cristallin si sa direction d'incidence est proche de celle d'un axe cristallographique) est pris en compte sur l'axe < 100 >.

Etant donné que ce logiciel se base sur l'envoi d'un faisceau d'ions monoatomiques vers le substrat à implanter, il est nécessaire de déterminer dans le cas d'ions moléculaires quelle proportion de l'énergie d'impact sera transmise vers l'ion  $B^+$  implanté. En première approximation, on considère que l'ion moléculaire se fragmente à l'impact en ses constituants atomiques et qu'il n'y a pas transfert



FIGURE III.61 – Fonction de distribution de l'énergie d'impact du  $BF_3^+$  pour  $V_{max} = 1 \ kV$  selon le modèle PIC



FIGURE III.62 – Fonction de distribution de l'énergie d'impact du  $BF_3^+$  pour  $V_{max} = 1 \ kV$  selon les données d'IBS

d'énergie d'un atome vers l'autre, ce qui implique que l'énergie de l'ion  $B^+$  dépend du rapport des masses selon  $E_{B+} = E_{imp}m_{B+}/m_i$ .

Les profils d'implantation de chaque ion dans le silicium sont présentés dans la figure III.63 pour le modèle PIC et la figure III.64 pour les données IBS. On peut constater que les profils obtenus sont similaires pour les ions lourds  $BF_3^+$  et  $BF_2^+$ , mais d'autres caractéristiques dépendant de la FDE appliquée :

- **PIC** Le profil pour le *B*<sup>+</sup> présente une profondeur d'implantation notablement supérieure au cas de la FDE d'IBS (à cause du pic à haute énergie) et la position du maximum de concentration dépend du rapport des masses. L'influence du channeling y est moins prononcée.
- **IBS** Les profils présentent une profondeur d'implantation moindre que pour la FDE issue du PIC, avec une position du maximum de concentration et une pente de décroissance moins sensible au rapport des masses.



FIGURE III.63 – Profils d'implantation pour les ions  $BF_x^+$ , avec une fonction de distribution de l'énergie d'impact basée sur le modèle PIC.



FIGURE III.64 – Profils d'implantation des ions  $BF_x^+$ , avec une fonction de distribution de l'énergie d'impact basée sur les données d'IBS.

Enfin, les profils d'implantation totaux du bore dans le silicium sont calculés par combinaison linéaire des profils d'implantation pour chaque ion en fonction de la composition du plasma face au substrat, résumée dans le tableau III.6. Il faut noter que les compositions listées comportent le même ion principal avec une proportion identique, mais diffèrent sur la nature de l'ion secondaire. Cette écart peut s'expliquer par la difficulté de mesurer de manière précise la densité d'un ion minoritaire avec un spectromètre de masse, sachant que les fractions ioniques dans le plasma libre varient entre  $4 \cdot 10^{-10}$  et  $2 \cdot 10^{-6}$ .

Ion	$BF_3^+$	$BF_2^+$	$BF^+$	$B^+$	Remarques
PIC	0,17	0,81	0,02	≈0,00	plasma libre, $T_{rel}$ = 30 $\mu$ s
IBS	≈0,00	0,80	0,15	0,05	Burenkov et al. [2015]

 TABLE III.6 – Proportion relative des ions positifs présents dans le plasma situé face au substrat.

Les profils obtenus à partir des deux FDEs, représentés dans la figure III.65, sont similaires malgré la grande différence dans les fonctions de distribution en énergie des ions. La faible pénétration pour le profil d'implantation issu du modèle PIC est due au fait que la contribution du  $B^+$  au total y est négligeable.



FIGURE III.65 – Profils d'implantation du bore dans le silicium pour  $V_{max} = 1 \ kV$  et  $D = 10^{15} cm^{-2}s^{-1}$ . La courbe noire pleine est basée sur la FDEI et le plasma du modèle PIC, la courbe rouge pleine sur la FDEI et les données d'IBS, et la courbe rouge tiretée est un profil d'implantation expérimental obtenue par la méthode SIMS.

#### 5.2 Evolution du plasma dans la chambre d'implantation

On s'intéresse maintenant à des mesures en émission optique réalisées dans différentes zones dans la chambre d'implantation du réacteur IBS. Elles nous permettent d'obtenir des informations supplémentaires concernant l'impact de la décomposition du gaz précurseur et de la polarisation du substrat sur la composition du plasma dans la chambre.

La figure III.66 présente un cas à haute puissance où la présence de composés  $SiF_x$  indique la gravure des parois en quartz ( $SiO_2$ ) de la source plasma par le fluor arrivant en surface. On détecte également des pics pour le *BF*, *B* et *F*, qui sont des

fragments de niveau 3 ou 4 dans le schéma réactionnel complet détaillé en figure II.2. Ces deux phénomènes démontrent l'importance des mécanismes de chimie, en volume ou en surface, sur la composition finale du plasma diffusant dans la chambre d'implantation.



FIGURE III.66 – Spectre d'émission optique dans la chambre d'implantation pour  $P_{abs} = 1800$  W

Les figures III.67 et III.68 présentent des résultats pour une puissance absorbée de 300 W et un potentiel imposé variable. On constate tout d'abord que le pic de bore au niveau du substrat est beaucoup plus prononcé que près de la source (si les mesures ont été réalisées durant la même session, celà dénote une différence marquée dans la densité locale du bore neutre) tandis que l'intensité du pic de bore près du substrat augmente avec le potentiel imposé.



FIGURE III.67 – Spectres d'émission optique près de la source plasma (courbe bleue) et près du substrat (courbe orange) pour une puissance déposée dans la source de 300 W et un potentiel imposé sur le substrat de 3 kV.



FIGURE III.68 – Spectres d'émission optique près du substrat pour une puissance déposée dans la source de 300 W et un potentiel imposé sur le substrat variable.

Une possible explication pour ces données est l'existence d'un cycle dépôtpulvérisation au niveau du substrat synchronisé avec le pulse de tension : du bore est déposé à la surface du substrat durant la phase OFF du pulse (potentiellement à partir d'ions  $BF_x^+$  avec une énergie d'impact inférieure à 20 eV) suivie de la pulvérisation de ce dépôt par les ions à haute énergie durant la phase ON du pulse. Ceci démontre que l'implantation ionique par immersion plasma est un procédé complexe où l'effet souhaité entre en compétition avec d'autres phénomènes de surface comme le dépôt, la gravure et la pulvérisation.

#### CONCLUSION DU CHAPITRE

L'emploi d'une combinaison de deux modèles (un de type analytique pour traiter la divergence du champ magnétique en sortie de source plasma et un de type PIC 1D pour simuler l'expansion de la gaine faisant face au substrat polarisé) nous a permis de quantifier le couplage entre le transport des espèces chargées du plasma dans la chambre d'implantation et la polarisation, ainsi que l'impact du pulse de tension sur la distribution de l'énergie d'impact des ions sur le substrat :

- Dans le cas d'un plasma collisionnel, la dynamique de développement de la gaine ionique donnée par le modèle PIC est quantitativement similaire aux résultats obtenus avec les modèles analytiques de croissance de gaine.
- L'évolution des profils axiaux de densités durant la formation de la gaine met en évidence la rapide diminution de la densité du plasma du fait à la fois de l'accélération des ions positifs vers le substrat et de l'expulsion des particules négatives à cause de la barrière de potentiel.
- L'impact du phénomène d'émission d'électrons secondaires sur la dynamique d'évolution de la gaine est également visible, si l'on compare la densité électronique non-nulle à proximité du substrat et celle négligeable des ions F<sup>-</sup> qui sont entièrement expulsés de la gaine sans régénération au niveau de la surface.

- L'étude de la distribution de l'énergie ionique d'impact sur le substrat durant une période du pulse de tension permet de quantifier l'inertie des ions accélérés vers le substrat ainsi que la dispersion de la FDEI occasionnée par les collisions dans la gaine.
- L'absence de collisions dans le plasma a un impact notable sur l'évolution de la décharge, avec une gaine de longueur finale doublée, une composition du plasma dans la gaine nettement plus électropositive et une FDEI au substrat présentant une dispersion bien moindre durant la phase du pulse de tension que pour le cas collisionnel.
- Augmenter le potentiel imposé conduit à augmenter l'épaisseur de la gaine formée mais aussi à diminuer la proportion des pertes par collisions par rapport à l'énergie ionique maximale possible. Les distributions énergétiques et angulaires pour les ions accélérés vers le substrat présente cependant une évolution opposée : un faisceau d'ions affecté par une différence de potentiel plus élevée sera davantage focalisé (l'angle d'impact moyen diminue avec le potentiel imposé) mais plus dispersé en matière d'énergie d'impact car la largeur normalisée du pic principal est pratiquement constante.
- La forme d'onde du pulse de tension imposée sur le substrat a également un impact notable sur la distribution de l'énergie d'impact. Mais ce dernier est surtout visible pour la phase de montée du potentiel, avec une proportion des ions à basse énergie croissante lorsque le temps de montée augmente. Le temps de montée doit rester inférieur à  $\omega_{pi}^{-1}$  pour minimiser la proportion des ions dont l'énergie d'impact est inférieure à 350 eV.

Concernant le modèle PIC, l'évolution monotone des profils axiaux de potentiel et l'absence d'oscillations notables indiquent que la simulation est stable dans l'espace. De plus, le maintien d'une large zone de plasma libre de nature ambipolaire (potentiel quasi-constant et champ électrique local  $\approx 0$ ) durant l'ensemble du pulse de tension illustre la robustesse du code face à des conditions où la résolution de l'équation de Poisson est rendue difficile.

# Conclusion générale

Cette thèse est centrée principalement sur le développement de modèles numériques pour simuler le comportement physique des plasmas présents dans la source et la chambre d'un réacteur d'implantation ionique à immersion plasma. Ces modèles ont pour but d'estimer l'impact des réglages opérationnels de l'appareil sur les paramètres de la décharge pertinents pour l'implantation, comme le flux ionique sur le substrat et la distribution en énergie des ions à l'impact.

Le chapitre 1 porte sur l'état de l'art en matière d'implantation ionique, de physique des plasmas et de simulation numérique de cet état de la matière. L'augmentation graduelle de la puissance de calcul délivrée par les micro-processeurs actuels passe par la miniaturisation toujours plus poussée des transistors qui constituent la base de ces composants électroniques. Cette miniaturisation demande une diminution progressive de la profondeur d'implantation des zones dopées du transistor et par là même une réduction de l'énergie d'implantation des ions de dopage.

La technique conventionnelle d'implantation ionique par balayage de faisceau n'est plus suffisamment performante à basse énergie pour maintenir un taux acceptable de défaut pour les composants produits. Elle est donc progressivement remplacée par la technique d'implantation ionique par immersion plasma (PIII) qui permet de réaliser des jonctions ultra-fines à l'échelle nanométrique mais repose sur l'emploi d'un plasma dont la maîtrise des propriétés particulières est indispensable pour obtenir un résultat fiable et reproductible. Le développement des réacteurs PIII nécessite une bonne connaissances des interactions physicochimiques entre les différentes espèces chimiques composant le plasma, ainsi que des couplages entre ce dernier et les différentes parties du réacteur comme la source plasma et le substrat d'implantation.

La géométrie et le fonctionnement du réacteur plasma à simuler sont complexes : source plasma en deux parties à pressions différents, divergence magnétique en sortie de source, régime impulsionnel pour la puissance imposée et le potentiel au substrat. Ceci rend sa modélisation d'un seul tenant difficile, du fait des importants gradients temporels et spatiaux attendus pour les densités ioniques et la température électronique. Une stratégie de simulation en deux étapes a donc été adoptée :

 Un modèle quasi-homogène, couplé à un module de chimie en volume élaboré, permet de représenter des deux portions de la source plasma et d'obtenir l'évolution de la composition du plasma en fonction de la puissance radiofréquence injectée. Le modèle de chimie fournit la contribution de chaque réaction dans la cinétique de décomposition en fonction de la température électronique. 2. Un modèle unidimensionnel de type PIC-MC et orienté perpendiculairement à la surface du substrat permet de décrire la dynamique de la gaine ionique qui se forme près du substrat du fait du potentiel imposé. Ce modèle sert à déterminer le couplage entre le transport des espèces chargées et la polarisation, puis d'en dériver la distribution de l'énergie d'impact des ions sur le substrat et les flux d'implantation correspondants.

La mise au point puis l'exécution d'un modèle quasi-homogène de la source plasma du réacteur à simuler a été détaillée dans le chapitre 2. Après détermination des limites du domaine de validité du modèle en matière de puissance absorbée, les simulations réalisées ont permis d'effectuer plusieurs constatations :

- La puissance électrique est principalement absorbée dans la section haute pression de la source, ce qui implique que la décomposition du gas précurseur s'effectue surtout dans cette portion de la source. L'augmentation du degré de décomposition en fonction de la puissance déposée a aussi pu être établi.
- Le taux de fragmentation final est d'autant plus important que la pression est basse, car la faible densité électronique conduit à des valeurs élevées de la  $T_e$  et des vitesses de réaction importantes. Il faut d'ailleurs noter que ce fort taux de décomposition peut poser des problèmes de modélisation lorsque la fraction du  $BF_2$  dépasse celle du  $BF_3$ , car les connaissances en matière de réactions électrons-radicaux sont insuffisantes pour obtenir un arbre de fragmentation complet.
- Le plasma obtenu est généralement électronégatif, ce qui peut entraîner la formation de poussières de bore et de fluor néfastes pour la qualité de l'implantation, mais il devient électropositif pour une faible pression locale et une forte puissance déposée.
- L'important rapport surface/volume au niveau de la source implique une absorption rapide des espèces du plasma sur les parois, d'où la nécessité d'une prise en compte correcte de la chimie de surface. Dans ce contexte, les réactions de recombinaison en surface peuvent entraîner la formation de films de bore qui constituent une source de contamination du plasma. Le couplage entre espèces en volume et espèces de surface joue un rôle déterminant dans l'évolution d'espèces neutres comme le *F*<sub>2</sub>, qui sont peu affectées par la chimie en volume mais sont générées en quantité notable par recombinaison sur les parois.
- Des transitions brutales des densités ioniques et de la température électroniques ont été observées. Elles sont dues au caractère fortement non-linéaire de la dépendance entre l'électronégativité du plasma et le flux ionique vers les parois, ce qui entraîne des variations importantes de la dissipation du plasma sur la surface de la source. L'impact de ces fluctuations sur le comportement dynamique du plasma a aussi pu être évalué.

Les couplages présents entre les différents paramètres globaux du plasma (température électronique, potentiel flottant, vitesse de Bohm, modes de perte d'énergie dans le volume) et la puissance déposée dans la décharge ont donc pu être déterminés. Le chapitre 3 traite de la simulation de la chambre d'implantation du réacteur et du substrat placé à l'intérieur, ce traitement étant réalisé par la combinaison d'un modèle analytique pour traiter la divergence du champ magnétique en sortie de source plasma et d'un modèle PIC 1D pour simuler l'expansion de la gaine faisant face au substrat polarisé. Concernant le modèle PIC, le caractère monotone des profils axiaux de potentiel obtenus et l'absence d'oscillations notables indiquent que la simulation est stable dans l'espace. De plus, le maintien d'une large zone de plasma libre de nature ambipolaire durant l'ensemble du pulse de tension illustre la robustesse du code face à des conditions où la résolution de l'équation de Poisson est difficile.

Les résultats obtenus ont permis de quantifier le couplage entre le transport des espèces chargées du plasma dans la chambre d'implantation et la polarisation, ainsi que l'impact du pulse de tension sur la distribution de l'énergie d'impact des ions sur le substrat. Il est important de noter que les conditions aux limites appliquées au modèle impliquent un flux ionique constant au niveau du bord libre opposé au substrat et une source plasma non perturbée par la présence de la gaine ionique.

- La gaine ionique présente une dynamique de développement rapide, durant la phase de montée en potentiel ou après la mise à la masse du substrat, avec un temps d'établissement ou d'extinction proche de 5 microsecondes.
- Dans le cas d'un plasma collisionnel, la dynamique de la gaine ionique donnée par le modèle PIC est quantitativement similaire aux résultats obtenus avec les modèles analytiques de croissance de gaine.
- La FDEI présente un pic principal autour de l'énergie d'impact nominale, un fond d'ions d'énergie moyenne accélérées durant les phases de montée et de descente du potentiel, et un pic secondaire d'ions à basse énergie issus de la phase éteinte du pulse de tension. Cette structure de la FDEI diffère notablement des résultats expérimentaux obtenus avec le réacteur réel, l'écart étant probablement dû aux conditions aux limites appliquées au bord libre.
- L'impact du potentiel imposé sur les fonctions de distributions des ions implantés a pu être déterminé. Un faisceau d'ions accéléré par une potentiel plus élevé sera davantage focalisé (l'angle d'impact moyen diminue avec le potentiel imposé) mais plus dispersé en matière d'énergie d'impact car la largeur normalisée du pic principal est pratiquement constante.
- La forme d'onde du pulse de tension imposée sur le substrat a un impact notable sur la distribution de l'énergie d'impact. Mais cet effet est surtout visible pour la phase de montée du potentiel, avec une proportion des ions à basse énergie tendant à croitre lorsque le temps de montée augmente.

Au final, ces travaux de recherche ont permis d'aboutir à une meilleure compréhension de l'impact des paramètres opérationnels du réacteur sur les processus de décomposition du gaz précurseur et le transport des espèces obtenues dans la chambre d'implantation. L'ampleur exacte des couplages physiques entre la source plasma et la chambre d'implantation reste cependant à déterminer, du fait des hypothèses simplificatrices adoptées pour la transition entre le modèle homogène de la source et le modèle PIC de la chambre. Pour ce faire, un modèle bidimensionnel fluide du réacteur (inachevé avant la finalisation de ce manuscrit) traitant l'ensemble source-chambre de manière unifié est en cours de développement.

# NOTATIONS ET NOMENCLATURE

### 1 Constantes physiques

Symbole	Unité	Définitions	Valeur
$\epsilon_0$	$Fm^{-1}$	Permittivité du vide	$8.8542  imes 10^{-12}$
$\mu_0$	$Hm^{-1}$	Perméabilité du vide	$4\pi  imes 10^{-7}$
е	С	Charge électronique élémentaire	$1.60218  imes 10^{-19}$
k <sub>b</sub>	$JK^{-1}$	Constante de Boltzmann	$1.3806504  imes 10^{-23}$
$m_e$	kg	Masse moléculaire électronique	$9.109383  imes 10^{-31}$
$N_A$	$mol^{-1}$	Constante d'Avogadro	$6.0221417 \times 10^{+23}$
$R_g$	$JK^{-1}mol^{-1}$	Constante des gaz parfaits	8.3144

## 2 VARIABLES EMPLOYÉES DANS LES MODÈLES

### 2.1 Notation commune aux différents modèles

Symbole	Unité	Définition
$N_s^v, N_s^p$	1	Nombre d'espèces présentes dans le volume / en surface
$N_r^v, N_r^p$	1	nombre de réactions chimiques dans le volume / en sur-
		face
$n_s$	$m^{-3}$	Densité en nombre de l'espèce s
$T_g, T_e$	Κ	Température du gaz précurseur et des électrons du plasma
$W_s^{volu}$	$m^{-3}s^{-1}$	Taux de production dans le volume plasma
$W_s^{surf}$	$m^{-2}s^{-1}$	Taux de production sur les surfaces
$G_r^s, D_r^s$	1	Coefficients stœchiométriques pour la réaction r concer- nant l'espèce s
k <sub>r</sub>	$m^{-3}s^{-1}$	Taux de réaction pour l'équation chimique r
$A_r, B_r, C_r$	1	Coefficients d'Arrhenius associés à la réaction r
$\sigma_r$	$m^2$	Section efficace de la réaction r
F <sub>nrm</sub>	1	Fonction de distribution en énergie des électrons normali- sée

$\Delta t$	S	Pas de temps durant la simulation
$\gamma_r$	1	Probabilité d'occurrence de la réaction de recombinaison
		neutre r
$v_s^*$	$ms^{-1}$	Vitesse moyenne pour une particule de l'espèce s
$x_s$	1	Fraction molaire de l'espèce s
$m_s$	kg	Masse moléculaire de l'espèce s
$\nu_{gs}$	$s^{-1}$	Fréquence de collision pour le transfert de moment entre
0		le gaz précurseur et l'espèce s
$\omega_{pe},\omega_{pi}$	$s^{-1}$	Fréquences d'oscillation électronique et ionique
$D_s^{amb}$	$m^2 s^{-1}$	Coefficient de diffusion ambipolaire pour l'espèce s
$D_i$ , $D_e$	$m^2 s^{-1}$	Coefficients de diffusion ionique et électronique
$\mu_i$ , $\mu_e$	$m^2 V^{-1} s^{-1}$	Mobilité ionique et électronique
$D_{ab}$	$m^2 s^{-1}$	Coefficient de diffusion binaire entre les espèces a et b
$\sigma_{ab},  \varepsilon_{ab}$	m, J	Paramètres de Lennard-Jones pour le potentiel 12-6

## 2.2 Notation spécifiques au modèle PIC

Symbole	Unité	Définition
V <sub>d</sub>	V	Potentiel distribué induit par une divergence magnétique présente entre deux points du réacteur
$L_g$	т	Longueur de gaine de Child-Langmuir
$N_s^{\chi}$	1	Nombre de pseudo-particules de l'espèce s présentes dans la cellule x
$\alpha_s$	1	Poids statistique de chaque pseudo-particule de l'espèce s
$\rho_x$	$Cm^{-3}$	Densité de charge dans la cellule x
$\phi_x$	V	potentiel électrique dans la cellule x
$E_x$	$Vm^{-1}$	Champ électrique dans la cellule x
$x_i, v_i$	$m, ms^{-1}$	Position et vitesse de la pseudo-particule i

## 3 Formulaire en coordonnées cylindriques

Grandeur	Application	Symbole	Formule
Divergence	vecteur	$\nabla \cdot \vec{A}$	$\frac{1}{r}\frac{\partial rA_r}{\partial r}\vec{r} + \frac{1}{r}\frac{\partial A_\theta}{\partial \theta}\vec{\theta} + \frac{\partial A_z}{\partial z}\vec{z}$
Gradient	vecteur	$\nabla f$	$\frac{\partial f}{\partial r}\vec{r} + \frac{1}{r}\frac{\partial f}{\partial \theta}\vec{\theta} + \frac{\partial f}{\partial z}\vec{z}$
Laplacien	scalaire	$\nabla^2 f$	$\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(r\frac{\partial f}{\partial r}\right) + \frac{1}{r^2}\frac{\partial^2 f}{\partial \theta^2} + \frac{\partial^2 f}{\partial z^2}$

# Sections efficaces employées

Compte tenu des règles données en section 2.1.1 et appliquées pour un plasma avec 15 espèces en volume, un ensemble de 55 réactions et leur section efficace correspondante est détaillé dans les sections qui suivent. On présente également les constantes de réaction  $K_r^{volu}$  correspondantes, calculées à partir des sections efficaces dans le cas d'une fonction de distribution en énergie des électrons incidents de type maxwellienne.

### 1 IONISATION (DIRECTE OU DISSOCIATIVE)

Le seuil d'ionisation  $E_{AB}^{ion}$  est de l'ordre de 8-15 eV pour les neutres issus du  $BF_3$ . Si l'électron incident possède une énergie incidente  $E_e^{inc}$  supérieure à la somme de  $E_{AB}^{ion}$  et de l'énergie de liaison de la molécule  $E_{AB}^{cov}$  alors l'ionisation est également dissociative avec un processus de type  $e^- + AB \Rightarrow A + B^+ + 2e^-$ .

Equation de la réaction	Seuil(eV)	Réference
$BF_3 + e \rightarrow BF_3^+ + 2e -$	15,95	[Farber et Srivastava 1984]
$BF_3 + e \rightarrow BF_2^+ + F + 2e -$	15,95	[Farber et Srivastava 1984]
$BF_3 + e \rightarrow BF^+ + F_2 + 2e -$	24,93	[Farber et Srivastava 1984]
$BF_3 + e \rightarrow F^+ + BF + F + 2e -$	30,95	[Farber et Srivastava 1984]
$BF_2 + e \rightarrow BF_2^+ + 2e -$	8,45	[Kim et Irikura 2000]
$BF + e - \Rightarrow BF^+ + 2e -$	11,12	[Kim et Irikura 2000]
$B + e \rightarrow B^+ + 2e -$	9,00	[Kim et Irikura 2000]
$F_2 + e - \Rightarrow F_2^+ + 2e -$	15,69	[Biagi 2014]
$F + e \rightarrow F^+ + 2e -$	15,00	[Bartlett et Stelbovics 2004]

Les sections efficaces d'ionisation dissociative ayant pour base le  $BF_3$  sont obtenues à partir de la section efficace totale d'ionisation du  $BF_3$  calculée par [Kim et Irikura 2000] et des fractions relatives pour les différents fragments du  $BF_3$  $I_i = g(E_{inc})$  mesurées par [Farber et Srivastava 1984]. Elles sont présentées dans la figure B.3

### 2 Dissociation neutre

Les réactions de dissociation impliquant des composés fluorés ( $F_2$  et  $F_2^-$ ) présentent un seuil d'apparition plus faible que les sections concernant les composés de bore ( $BF_3$  et  $BF^+$ ) parce que l'énergie de rupture d'une liaison covalente F-F n'est que de 155 kJ/mol contre 613 pour une liaison B-F. La section efficace plus

B



FIGURE B.1 – Sections efficaces pour l'ionisation directe des différents fragments issus de  $BF_3$  en fonction de l'énergie électronique incidente.



FIGURE B.2 – Constantes de réaction du premier ordre en fonction de  $T_e$ , calculées à partir des sections efficaces présentés dans la figure B.1 pour une FDEE maxwellienne. Les réactions d'ionisation directe sont indiquées par des lignes continues, les réactions dissociatives par des lignes tiretés.

élevée pour les réactions impliquant des ions ( $F_2^-$  et  $BF^+$ ) s'explique d'une part par l'effet de l'attraction coulombienne entre l'ion positif et l'électron incident et d'autre part par l'importante affinité électronique du  $F_2^-$ .



FIGURE B.3 – Gauche : fractions relatives des différents ions issus d'une collision  $BF_3 + e^-$  en fonction de l'énergie de l'électron incident, calculées à partir des intensités relatives tirées de [Farber et Srivastava 1984]. Droite : Sections efficaces d'ionisation dissociative pour les fragments du  $BF_3$  calculées à partir de la section d'ionisation totale de la molécule mère et de la fraction relative des fragments. Ces dernières sont considérées comme constantes au-delà d'une énergie incidente de 70 eV.

Equation de la réaction	Seuil(eV)	Référence
$BF_3 + e \rightarrow BF_2 + F + e -$	11,00	[Biagi 2014]
$F_2 + e - \Rightarrow F + F + e -$	4,34	[Morgan 1992]
$F_2 + e - \Rightarrow F + F + e -$	3,16	[Morgan 1992]
$F_2^- + e - \Rightarrow F - +F + e -$	2,62	[Pedersen et al. 2001]
$BF^+ + e^- \Rightarrow B^+ + F^- + e^-$	4,64	[Tennyson et al. 2009]

### **3** Attachement et détachement

Le processus d'attachement peut intervenir à des énergies beaucoup plus basses que pour l'ionisation car l'électron incident ne doit pas nécessairement posséder une énergie d'impact suffisante pour arracher un autre électron. Du fait de son absence de seuil et d'une section efficace élevée, la réaction d'attachement du  $F_2$ domine à basse énergie et il faut que la température électronique dépasse 4 eV pour que la consommation du  $F^-$  par détachement contrebalance sa production depuis le  $F_2$ , comme illustré en figure B.7.

Par contraste, la faiblesse de la section efficace de production du  $F^-$  via l'attachement du  $BF_3$  s'expliquent par trois facteurs :

- L'affinité électronique des molécules cibles, qui est d'autant plus grande que la réaction d'attachement est favorable, est supérieure pour le  $F_2$  (3,12 eV selon Artau et al. [2000]) par rapport au  $BF_3$  (2,65 eV selon Page [1969])
- La réaction d'attachement du *BF*<sub>3</sub> nécessite la rupture d'une liaison covalente



FIGURE B.4 – Sections efficaces pour la dissociation non ionisante de  $BF_3$  et  $F_2$  en fonction de l'énergie électronique incidente.



FIGURE B.5 – Constantes de réaction du premier ordre  $(m^3s^{-1})$  en fonction de la température électronique, calculées à partir des sections efficaces présentés dans la figure B.4 pour une FDEE maxwellienne.

B-F, ce qui requière des électrons plus énergétiques et rend le processus moins probable.

 Du fait du caractère résonnant de la réaction d'attachement (voir section 2.1.1) une énergie électronique incidente supérieure à 15 eV conduira à une ionisation directe ou dissociative du *BF*<sub>3</sub> plutôt qu'à un attachement.

Équation de la réaction	Seuil(eV)	Référence
$BF_3 + e - \Rightarrow F_2^- + BF$	9,81	[Harland et Franklin 1974]
$BF_3 + e \rightarrow F^- + BF_2$	10,38	[Harland et Franklin 1974]
$F_2 + e - \Rightarrow F^- + F$	0,01	[Morgan 1992]
$F_2^- + e^- \Rightarrow F_2 + 2e^-$	9,97	[Pedersen et al. 2001]
$F_2^- + e^- \Rightarrow 2F + 2e^-$	9,97	[Pedersen et al. 2001]
$F^- + e^- \Rightarrow F + 2e^-$	6,66	[Deutsch et al. 2003]



FIGURE B.6 – Sections efficaces pour l'attachement de  $BF_3$  et  $F_2$  ainsi que le détachement de  $F_2^-$  et  $F^-$  en fonction de l'énergie électronique incidente.

## 4 RECOMBINAISON ÉLECTRON-ION

Le  $Kr_0$  indiqué est une estimation de la valeur de coefficient d'Arrhenius  $A_r$  qui est employé dans la formule  $K_r^{volu} = A_r T_e^{B_r} e^{-C_r/T_e}$  tandis que  $B_r = -\frac{1}{2}$  et  $C_r = 0$ .

Equation de la réaction	$Kr_0(m^{-3}s^{-1})$
$BF_3^+ + e^- \Rightarrow BF_2 + F$	1e-13
$BF_2^+ + e^- \Rightarrow BF + F$	1e-13
$BF^+ + e^- \Rightarrow B + F$	1e-13
$B^+ + e^- \Rightarrow B$	1e-13
$F_2^+ + e - \Rightarrow F + F$	1e-13
$F^+ + e^- \Rightarrow F$	1e-13



FIGURE B.7 – Constantes de réaction du premier ordre  $(m^3s^{-1})$  en fonction de la température électronique, calculées à partir des sections efficaces présentés dans la figure B.6 pour une FDEE maxwellienne.

### 5 NEUTRALISATION MUTUELLE ION-ION

La valeur de  $Kr_0$  indiquée correspond au coefficient d'Arrhenius  $A_r$  dans la formule  $K_r^{volu} = A_r T_g^{B_r} e^{-C_r/T_g}$  tandis que  $B_r = -1$  et  $C_r = 0$ . Ces coefficients sont calculées à partir de l'équation (08.04.10) dans [Lieberman et Lichtenberg 2005]

Equation de la réaction	$Kr_0(m^{-3}s^{-1})$
$F_2^- + BF_3^+ \Rightarrow F_2 + BF_3$	9,98670e-12
$F_2^- + BF_2^+ \Rightarrow F_2 + BF_2$	1,06619e <b>-</b> 11
$F_2^- + BF^+ \Rightarrow F_2 + BF$	1,20578e-11
$F_2^- + B^+ \Rightarrow F_2 + B$	1,69872e-11
$F_2^- + F_2^+ \Rightarrow F_2 + F_2$	1,13064e <b>-</b> 11
$F_2^- + F^+ \Rightarrow F_2 + F$	1,38476e-11
$F^- + BF_3^+ \Rightarrow F + BF_3$	1,14145e-11
$F^- + BF_2^+ \Rightarrow F + BF_2$	1,18908e-11
$F^- + BF^+ \Rightarrow F + BF$	1,29089e-11
$F^- + B^+ \Rightarrow F + B$	1,67521e-11
$F^- + F_2^+ \Rightarrow F + F_2$	1,23557e-11
$F^- + F^+ \Rightarrow F + F$	1,42673e-11

### 6 Réactions inélastiques sans fragmentation

Comme le  $BF_2$  peut constituer un fragment de proportion relative notable si le taux de décomposition devient non-négligeable, le traitement des canaux de

dissipation d'énergie le concernant ne doit pas être négligé. Cependant, les sections efficaces inélastiques dédiés à cette molécules ne semblent pas être disponibles dans la littérature. On fait ici l'hypothèse que la structure vibrationnelle du  $BF_2$  est suffisamment similaire à celle du  $BF_3$  pour pouvoir employer les données pour ce dernier comme substitut.

Equation de la réaction	Seuil(eV)	Réference
$BF_3 + e \rightarrow BF_3(V1) + e -$	0,11	
$BF_3 + e \rightarrow BF_3(V2) + e -$	0,08	
$BF_3 + e \rightarrow BF_3(V3) + e -$	0,18	[Biagi 2014]
$BF_3 + e \rightarrow BF_3(V4) + e -$	0,06	
$BF_3 + e \rightarrow BF_3(VH) + e -$	0,36	
$BF_2 + e \rightarrow BF_2(V1) + e -$	0,11	
$BF_2 + e \rightarrow BF_2(V2) + e -$	0,08	
$BF_2 + e \rightarrow BF_2(V3) + e -$	0,18	[Biagi 2014]
$BF_2 + e \rightarrow BF_2(V4) + e \rightarrow$	0,06	
$BF_2 + e \rightarrow BF_2(VH) + e -$	0,36	
$F_2 + e - \Rightarrow F_2(V1) + e -$	0,1108	
$F_2 + e - \Rightarrow F_2(V2) + e -$	0,2188	[Morgan 1002]
$F_2 + e - \Rightarrow F_2(V3) + e -$	0,3237	[worgan 1992]
$F_2 + e - \Rightarrow F_2(V4) + e -$	0,4205	



FIGURE B.8 – Sections efficaces pour l'excitation vibrationnelle de  $BF_3$  et  $F_2$  en fonction de l'énergie électronique incidente. Les sections efficaces d'excitation vibrationnelle pour le  $BF_3$  ont une étendue en énergie bien plus importante que celles pour  $F_2$ .



FIGURE B.9 – Constantes de réaction en fonction de la température électronique, calculées à partir des sections efficaces de la figure B.8 pour une FDEE maxwellienne.

## Bibliographie

- H. Abe, M. Yoneda, et N. Fujiwara. Developments of plasma etching technology for fabricating semiconductor devices. *Jpn. J. Appl. Phys.*, 47 :1435, 2008. (Cité page 5.)
- A. Agarwal et M. J. Kushner. Time evolution of ion energy distributions for plasma doping. *IEEE Trans. Plasma Sci.*, 33:252, 2005. (Cité page 10.)
- J. G. Andrews et R. H. Varey. Sheath growth in a low pressure plasma. *Phys. Fluids*, 14:339, 1971. (Cité page 96.)
- A. Artau, K.E. Nizzi, B.T. Hill, L.S. Sunderlin, et P.G. Wenthold. Bond dissociation energy in trifluoride ion. *J. Am. Chem. Soc.*, 122 :10667–10670, 2000. (Cité page 149.)
- V. Baglin, J. Bojko, O. Gröbner, B. Henrist, N. Hilleret, C. Scheuerlein, et M. Taborelli. The secondary electron yield of technical materials and its variation with surface treatments. Dans *Proceedings of EPAC 2000*, pages 217–221, Vienna, Austria, 2000. (Cité page 108.)
- Philip L. Bartlett et Andris T. Stelbovics. Electron-impact ionization cross sections for elements z=1 to z=54. *Atomic Data and Nuclear Data Tables*, 86(2) :235–265, 2004. (Cité page 147.)
- Stephen Biagi. Cross sections from the 'magboltz' boltzmann equation solver, 2014. version 10.0.4. (Cité pages 147, 149 et 153.)
- G.A. Bird. Molecular Gas Dynamics. Clarendon Press, 1976. (Cité page 28.)
- C. K. Birdsall et A. B. Langdon. *Plasma Physics via Computer*. McGraw-Hill, Inc., New York, 1985. (Cité page 30.)
- C. K. Birdsall et A. B. Langdon. *Plasma Physics via Computer Simulation*. Series in Plasma Physics. Institute of Physics Publishing, Bristol, UK, 2004. (Cité page 105.)
- J.-P. Boeuf et E. Marode. A monte carlo analysis of an electron swarm in a nonuniform field : the cathode region of a glow discharge in helium. *J. Phys. D : Appl. Phys.*, 15 :2169, 1982. (Cité page 110.)
- R. W. Boswell. Plasma production using a standing helicon wave. *Physics letters A.*, 33(7) :457, 1970. (Cité page 25.)
- R. W. Boswell et I. J. Morey. Self-consistent simulation of a parallel-plate rf discharge. *Appl. Phys. Lett.*, 52 :21–23, 1988. (Cité page 109.)

- J. F. Brown, D. A .and O'Hanlon. Space-charge divergence of an intense, unneutralized rectangular ion beam. *Phys. Rev. E*, 48:523, 1993. (Cité page 9.)
- Jorg Brutscher, Reinhard Gunzel, et Wolfhard Moller. Sheath dynamics in plasma immersion ion implantation. *Plasma Sources Sci. Technol.*, 5 :54–60, 1996. (Cité pages 97 et 98.)
- A. Burenkov, A. Hahn, Y. Spiegel, H. Etienne, et F. Torregrosa. Simulation of bf3 plasma immersion ion implantation into silicon. Dans *IIT*, AIP Conf proceedings, pages 233–236, Valadolid, Spain, 2012. (Cité page 8.)
- A. Burenkov, J. Lorenz, Y. Spiegel, et F. Torregrosa. Simulation of plasma immersion ion implantation into silicon. Dans *Simulation of Semiconductor Processes and Devices (SISPAD)*, 2015 International Conference on, pages 218–221, 2015. (Cité page 137.)
- K. L. Cartwright, J. P. Verboncoeur, et C. K. Birdsall. Loading and injection of maxwellian distributions in particle simulations. *Journal of Computational Physics*, 162:483–513, 2000. (Cité page 104.)
- S. Chapman et T. G. Cowling. *The Mathematical Theory of Non-Uniform Gases*. Wiley, 3rd édition, 1970. (Cité page 38.)
- J.R. Conrad, J.L. Radtke, R.A. Dodd, F. J. Worzala, et N.C. Tran. Plasma source ion-implantation technique for surface modifications of materials. *J. Appl. Phys.*, 62:4591, 1987. (Cité page 9.)
- Jean-Loup Delcroix et Abraham Bers. *Physique des plasmas*. CNRS Editions, Paris, 1994. (Cité page 19.)
- H Deutsch, K Becker, S Matt, et T D Märk. Calculation of cross sections and rate coefficients for the electron impact multiple ionization of beryllium, boron, carbon, and oxygen atoms. *International Journal of Mass Spectrometry*, 192 :1–8, 1999. (Cité page 43.)
- H. Deutsch, P. Scheier, K. Becker, et T. D. Märk. Calculated cross-sections for the electron-impact detachment from negative ions using the deutsch-märk (dm) formalism. *Chemical Physics Letters*, 382(1-2):26–31, 2003. (Cité page 151.)
- M. Farber et R. D. Srivastava. Electron and thermal dissociation of bf3. *Journal of Chemical Physics*, 81(1):241–244, 1984. (Cité pages 147 et 149.)
- Mietek T. Glinkowski et Paul Stoving. Numerical modeling of vacuum arc interruption based on the simplified plasma equations. *IEEE Transactions on Magnetics*, 31 (3):1924–1927, 1995. (Cité pages 97 et 98.)
- M. J. Goeckner, S. B. Felch, Z. Fang, D. Lenoble, J. Galvier, A. Grouillet, G. C.-F. Yeap, D. Bang, et M.-R. Lin. Plasma doping for shallow junctions. *J. Vac. Sci. Technol. B*, 17 :2290, 1999. (Cité page 9.)

- S. Gotoh, M. Manner, J. P. Sdrensen, et W. E. Stewart. Binary diffusion coefficients of low-density gases. ii. molecular parameters and combining rules. *Chem. Eng. Data*, 19:172–174, 1974. (Cité page 38.)
- John Greenagel et Anne Craib. Annual global sales report. Rapport technique, Semiconductor Industry Association, 2006. document disponible sur http://www.semiconductors.org/news/2007/02/02/global\_sales\_ reports\_2006/global\_chip\_sales\_hit\_record\_247.7\_billion\_in\_ 2006/. (Cité page 5.)
- Stanislaw Halas et Tomasz Durakiewicz. Work functions of elements expressed in terms of the fermi energy and the density of free electrons. *J. Phys. : Condens. Matter*, 10:10815–10826, 1998. (Cité pages 108 et 109.)
- J. M. Hammersley et D. C. Handscomb. *Monte Carlo Methods*. Methuen, London, 1964. (Cité page 107.)
- P. W. Harland et J. L. Franklin. Partitioning of excess energy in dissociative resonance capture processes. *Journal of Chemical Physics*, 61(5):1621–1636, 1974. (Cité page 151.)
- J. O. Hirschfelder, R. B. Bird, et E. L. Spotz. The transport properties of gases and gaseous mixtures. ii. *Chem. Revs.*, 44 :205–231, 1949. (Cité page 38.)
- R. W. Hockney et J. W. Eastwood. *Computer Simulation Using Particles*. IOP, Bristol, 1988. (Cité page 31.)
- R. Holmes et S. Yanabu. Post-arc current mechanism in vacuum interrupters. J. *Phys. D : Appl. Phys.*, 6 :1217, 1973. (Cité page 96.)
- J. D. Huba. Nrl plasma formulary. Rapport technique, Naval Research Laboratory, 2013. (Cité page 13.)
- Intel. Microprocessor technology, 2014. document disponible sur http://en. wikipedia.org/wiki/Microprocessor\_chronology. (Cité page 5.)
- ITRS. Itrs executive summary. Rapport technique, International Technology Roadmap for Semiconductors, 2001. document disponible sur http://www.itrs. net/Links/2001ITRS/ExecSum.pdf. (Cité page 6.)
- ITRS. Itrs executive summary. Rapport technique, International Technology Roadmap for Semiconductors, 2007. document disponible sur http://www.itrs. net/Links/2007ITRS/ExecSum2007.pdf. (Cité page 6.)
- ITRS. Itrs executive summary. Rapport technique, International Technology Roadmap for Semiconductors, 2013. document disponible sur http://www.itrs. net/Links/2013ITRS/2013Chapters/2013ExecutiveSummary.pdf. (Cité page 6.)
- J.V. Jovanovic, Z.M. Raspopovic, V.D. Stojanovic, et Z.D. Nikitovic. Transport of f- ions in gaseous environment for technological applications. *FME Transactions*, 41:163–166, 2013. (Cité page 112.)

- Yong-Ki Kim et Karl K. Irikura. Electron-impact ionization cross sections for polyatomic molecules, radicals, and ions. Dans *ICAMDATA Second International Conference*, volume 543, pages 220–241, Oxford (England), 2000. AIP. (Cité page 147.)
- Kinder. Noncollisional heating and electron energy distributions in magnetically enhanced inductively coupled and helicon plasma sources. *Journal of Applied Physics*, 90(8) :3699–3712, 2001. (Cité page 25.)
- Bon-Woong Koo, Fang Ziwei, Ludovic Godet, S.B. Radovanov, C. Cardinaud, G. Cartry, A. Grouillet, et D. Lenoble. Plasma diagnostics in pulsed plasma doping (p2lad) system. *IEEE Transactions on Plasma Science*, 32(2) :456–463, 2004. (Cité page 13.)
- M. J. Kushner. Monte-carlo simulation of electron properties in rf parallel plate capacitively coupled discharges. *J. Appl. Phys.*, 54:4958–4965, 1983. (Cité page 31.)
- C. Lee et M. A. Lieberman. Global model of ar, o2, cl2, and ar/o2 high-density plasma discharges. *J. Vac. Sci. Technol. A*, 13(2) :368–380, 1995. (Cité pages 58 et 59.)
- Damien Lenoble. Étude, réalisation et intégration de jonctions P+/N ultra-fines pour les technologies CMOS inférieures à 0,18 micromètre. PhD thesis, Institut national des sciences appliquées, 2000. (Cité page 109.)
- A. J. Lichtenberg, V. Vahedi, M. A. Lieberman, et T. Rognlien. Modeling electronegative plasma discharges. *J. Appl. Phys.*, 75 :2339, 1994. (Cité page 58.)
- M. A. Lieberman et A. J. Lichtenberg. *Principles of plasma discharges and materials processing*. Wiley, 2nd édition, 2005. (Cité pages 51, 54, 90, 96 et 152.)
- Barry P Linder et Nathan W Cheung. Modeling of energy distributions for plasma implantation. *Surface and Coatings Technology*, 136 :132–137, 2001. (Cité page 135.)
- VanderHeyden W. B. Markidis S., Lapenta G. et Budimlic Z. Implementation and performance of a particle-in-cell code written in java. *Concurrency Computat.* : *Pract. Exper.*, 17 :821–837, 2005. (Cité page 102.)
- Skip Miller. Asml's nxe platform for volume production. Dans Semicon West, July 2013. document disponible sur http://www.semiconwest.org/sites/ semiconwest.org/files/docs/SW2013\_SkipMiller\_ASML.pdf. (Cité page 6.)
- Gordon E. Moore. Cramming more components onto integrated circuits. *Electronics*, April :114–117, 1965. (Cité page 5.)
- W. L. Morgan. A critical evaluation of low-energy electron impact cross sections for plasma processing modeling. i : Cl2, f2, and hcl. *Plasma Chemistry and Plasma Processing*, 12(4) :449–476, 1992. (Cité pages 149, 151 et 153.)
- M. Murakami et K. Nishihara. Sheath dynamics induced by ionacoustic rarefaction wave. *Phys. Fluids B*, 5 :3441, 1993. (Cité pages 97 et 98.)

- P. D. Neufeld, A. R. Jansen, et R. A. Aziz. Empirical equations to calculate 16 of the transport collision integrals for the lennard-jones (12-6) potential. *J. Chem. Phys.*, 57 :1100, 1972. (Cité page 38.)
- S. Nizou, V. Vervisch, H. Etienne, M. Ziti, Frank Torregrosa, L. Roux, M. Roy, et D. Alquier. Deep trench doping by plasma immersion ion implantation in silicon. Dans *AIP Conference Proceedings*, 2002. (Cité page 62.)
- NRC. Database Needs for Modeling and Simulation of Plasma Processing. National Academy Press, Washington, D.C., 1996. ISBN-10: 0-309-05591-1. (Cité page 10.)
- H. Oechsner. Electron yields from clean polycristalline metal surfaces by noblegas-ion bombardment at energies around 1 ke. *Phys. Rev. B*, 17 :1052–1056, 1978. (Cité page 108.)
- K. Ostrikov et A. B. Murphy. Plasma-aided nanofabrication : where is the cutting edge? J. Phys. D : Appl. Phys., 40 :2223–41, 2007. (Cité page 10.)
- G.C. Page, F.M.and Goode. *Negative Ions and the Magnetron*. Wiley, 1st édition, 1969. (Cité page 149.)
- H. B. Pedersen, R. Bilodeau, M. J. Jensen, I. V. Makassiouk, C. P. Safvan, et L. H. Andersen. Electron collisions with the diatomic fluorine anion. *Physical Review A*, 63(3):032718, 2001. (Cité pages 149 et 151.)
- Shu Qin, Michael P. Bradley, Peter L. Kellerman, et Kourosh Saadatmand. Measurements of secondary electron emission and plasma density enhancement for plasma exposed surfaces using an optically isolated faraday cup. *Rev. Sci. Instrum.*, 73 :1153, 2002. (Cité page 109.)
- Edwin N. Lightfoot R. Byron Bird, Warren E. Stewart. *Transport phenomena*. Wiley, 2nd édition, 2002. (Cité page 38.)
- H. Raether. *Electron avalanches and Breakdown in gases*. Butterworths, Washington, 1964. (Cité page 21.)
- Y. Raizer. Gas discharge Physics. Springer Verlag, New York, 1991. (Cité page 23.)
- R.Gwilliam. Ion implantation machines. Dans Ion Implantation Workshop, Surrey Ion Beam Centre, 2009. document disponible sur http: //www.spirit-ion.eu/tl\_files/spirit\_ion/files/Training% 20course/Fundamentals%20II.pdf. (Cité page 8.)
- Walden C. Rhines. The big squeeze. Dans *EDPS*, April 2014. document disponible sur http://www.semiwiki.com/forum/files/ edpswrhinesdinnerkeynote.pdf. (Cité page 6.)
- Dan Rosso.Annual global sales report.Rapport technique, Se-<br/>miconductormiconductorIndustry Association, 2013.document disponiblesurhttp://www.semiconductors.org/clientuploads/GSR/December2013GSRtableandgraphforpressrelease.pdf. (Cité page 5.)

- Yong Shi, Yong Taek Lee, et Albert S. Kim. Knudsen diffusion through cylindrical tubes of varying radii : Theory and monte carlo simulations. *Transp. Porous Med.*, 93 :517–541, 2012. (Cité page 62.)
- SIA. Global billings report history 1976 july 2014. Rapport technique, Semiconductor Industry Association, 2014. document disponible sur http://www.semiconductors.org/clientuploads/directory/ IndustryStatistics/GSR1976-July2014.xls. (Cité page 5.)
- H. R. Skullerud. The stochastic computer simulation of ion motion in a gas subjected to a constant electric field. *J. Phys D : Appl. Phys.*, 1 :1567, 1968. (Cité page 110.)
- W. Steckelmacher. A review of the molecular flow conductance for systems of tubes and components and the measurement of pumping speed. *Vacuum*, 16(11):561–584, 1966. (Cité page 62.)
- R.A. Stewart et M.A. Lieberman. Model of plasma immersion ion implantation for voltage pulses with finite rise and fall times. *Journal of Applied Physics*, 70(7) : 3481–3487, 1991. (Cité pages 97, 98, 99 et 135.)
- V.D. Stojanovic, Z.M. Raspopovic, J.V. Jovanovic, Z.D. Nikitovic, et Z.Lz. Petrovic. Transport of f— ions in f2. *EPL*, 101 :45003, 2013. (Cité page 112.)
- V.D. Stojanovic, Z.M. Raspopovic, J.V. Jovanovic, S.B. Radovanov, Z.D. Nikitovic, et Z.Lz. Petrovic. Cross sections and transport properties of positive ions in bf3 plasma. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B*, 279 :151–154, 2012. (Cité page 112.)
- H. Strack. Ion bombardment of silicon in a glow discharge. *J. Appl. Phys.*, 34(8) : 2405, 1963. (Cité page 9.)
- Yakov N. Sukhanov, Alexey P. Ershov, Konstantin V. Rudenko, et Alexander A. Orlikovsky. On the parameters of inductively coupled and microwave bf3 plasmas used for plasma immersion ion implantation. *Plasma Process. Polym.*, 2 :472–479, 2005. (Cité page 13.)
- M. Surendra et D. Vender. Collisionless electron heating by radio-frequency plasma sheaths. *Appl. Phys. Lett.*, 65(2) :153, 1994. (Cité page 106.)
- Jonathan Tennyson, A Faure, V Kokoouline, et Chris H Greene. Near threshold rotational excitation of molecular ions by electron impact. *Journal of Physics B* : *Atomic, Molecular and Optical Physics*, 39 :4261–4273, 2009. (Cité page 149.)
- M. M. Turner. Kinetic properties of particle-in-cell simulations compromised by monte carlo collisions. *Phys. Plasmas*, 13:033506, 2006. (Cité page 30.)
- V. Vahedi et M. Surendra. Monte carlo collision model for particle-in-cell method : Application to argon and oxygen discharges. *Comput. Phys. Commun.*, 87 :179– 198, 1995. (Cité page 109.)

- J. P. Verboncoeur. Particle simulation of plasmas : review and advances. *Plasma Phys. Control. Fusion*, 47 :A231, 2005. (Cité pages 102 et 105.)
- Dezhen Wang, Tengcai Ma, et Xinlu Deng. Model of collisional sheath evolution in plasma source ion implantation. *Journal of Applied Physics*, 74 :2986, 1993. (Cité pages 97, 98 et 99.)
- G. D. Wilk, R. M. Wallace, et J. M. Anthony. High-k gate dielectrics : current status and materials properties considerations. *J. Appl. Phys.*, 89 :5243, 2001. (Cité page 7.)

**Titre** Simulation numérique de la fragmentation d'un précurseur de dopage au sein d'un réacteur d'implantation ionique par immersion plasma

**Résumé** Des modèles numériques ont été développés pour simuler le plasma présent dans un réacteur d'implantation ionique à immersion plasma. Ils ont pour but d'estimer l'impact des réglages opérationnels du réacteur sur les paramètres plasma pertinents pour l'implantation. La géométrie complexe du réacteur rend difficile sa modélisation d'un seul tenant, du fait des gradients temporels et spatiaux attendus, donc une stratégie en deux étapes a été adoptée :

- Un modèle quasi-homogène de la source plasma, couplé à un module de chimie en volume élaboré, permet d'obtenir l'évolution de la composition du plasma en fonction de la puissance radiofréquence injectée.
- Un modèle 1D PIC-MC de la gaine face au substrat permet de décrire la dynamique de formation de la gaine du fait du potentiel imposé, ainsi que de déterminer la distribution de l'énergie d'impact des ions et les flux d'implantation correspondants.

La connaissance des couplages physiques entre la source plasma et la chambre d'implantation permet d'optimiser le processus de dopage, car les paramètres opérationnels peuvent être réglés de manière à minimiser la profondeur de dopage après implantation.

**Mots-clés** Simulation numérique; Physique des plasmas; Génie des procédés; Implantation ionique par immersion plasma

**Title** Numerical simulation of the fragmentation of a doping gas inside a plasma immersion ion implantation reactor

**Abstract** Numerical models have been developped to simulate the plasma present inside a plasma immersion ion implantation reactor. Their goal is to estimate the impact of the reactor's settings on the plasma parameters relevant for ion implantation. The complex geometry of the reactor renders its modelling difficult, because of the stiff spatial and temporal gradients expected, so a two-step simulation strategy was adopted :

- A global model of the plasma source, coupled to a detailed volume chemistry module, allows to determine the time evolution of the plasma composition according to the radio-frequency power injected in the source.
- A 1D PIC-MC model of the sheath facing the substrate describes the dynamics of the expanding sheath and allows to determine the ion impact energy distribution function and corresponding implantation profiles.

Determination of the couplings between the plasma source and the implantation chamber makes possible to optimize the doping process, since the reactor's operational settings can then be adjusted to minimize the doping depth after implantation.

Keywords Numerical simulation; Plasma physics; Process engineering; PIII