

Étude du chauffage d'un substrat de silicium dans un système thermique rapide (RTP : Rapid Thermal Process)

Pierre-Olivier Logerais

▶ **To cite this version:**

Pierre-Olivier Logerais. Étude du chauffage d'un substrat de silicium dans un système thermique rapide (RTP : Rapid Thermal Process). Thermique [physics.class-ph]. Arts et Métiers ParisTech, 2007. Français. NNT : 2007ENAM0024 . pastel-00797638

HAL Id: pastel-00797638
https://pastel.hal.science/pastel-00797638

Submitted on 6 Mar 2013

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

N°: 2007 ENAM 0024

Ecole doctorale n° 432 : Sciences des Métiers de l'Ingénieur

T H È S E

pour obtenir le grade de

Docteur
de
l'École Nationale Supérieure d'Arts et Métiers

Spécialité "Énergétique, génie des procédés"

présentée et soutenue publiquement
par

Pierre-Olivier LOGERAIS

le 25 octobre 2007

ÉTUDE DU CHAUFFAGE D'UN SUBSTRAT DE SILICIUM DANS UN SYSTÈME THERMIQUE RAPIDE (RTP : RAPID THERMAL PROCESS)

Directeur de thèse : *Mme Anne BOUTEVILLE*

Jury :

M. Michel SARRET, Professeur, GM-IETR, Université de Rennes I..... Président
M. Hugues MURRAY, Professeur, LAMIP, ENSICAEN, Caen ..... Rapporteur
M. Michel PONS, Directeur de recherche CNRS, LTPCM, INP de Grenoble .. Rapporteur
M. Jean-Pierre L'HUILLIER, Professeur, LPMI, ENSAM, Angers..... Examinateur
Mme Anne BOUTEVILLE, Professeur, LPMI, ENSAM, Angers ..... Directeur thèse
M. Franck LAPORTE, Président, ANNEALSYS, Montpellier ..... Invité

Laboratoire Procédés Matériaux Instrumentation
ENSAM, CER d'Angers

L'ENSAM est un Grand Etablissement dépendant du Ministère de l'Education Nationale, composé de huit centres :
AIX-EN-PROVENCE ANGERS BORDEAUX CHÂLONS-EN-CHAMPAGNE CLUNY LILLE METZ PARIS

ÉTUDE DU CHAUFFAGE D'UN SUBSTRAT DE SILICIUM DANS UN SYSTÈME THERMIQUE RAPIDE (RTP : RAPID THERMAL PROCESS)

RÉSUMÉ: Le procédé thermique rapide (RTP : Rapid Thermal Process) est très utilisé dans la fabrication des composants de microélectronique. Il correspond à plusieurs étapes clés comme les recuits d'implantation, de siliciuration, d'oxydation, de nitruration et le dépôt de couches minces par CVD (Chemical Vapor Deposition). Il consiste à chauffer un nombre restreint de substrats de silicium par des lampes infrarouges permettant ainsi des durées de traitement très courtes. L'enjeu majeur est d'obtenir une température uniforme à la surface du substrat.

Le but de cette étude est de mieux comprendre les relations entre le chauffage par les lampes infrarouges et le profil de température d'un substrat de silicium dans un système thermique rapide, le système AS-One 150, en vue d'améliorer l'uniformité de la température du substrat de silicium.

La modélisation du système est réalisée en deux et trois dimensions. La modélisation approfondie d'une lampe infrarouge est aussi effectuée pour mieux cerner les paramètres des lampes à entrer dans les modèles en deux et trois dimensions. Les modélisations ont été réalisées à l'aide du logiciel CFD'ACE. Les équations de conservation de la masse et de la chaleur ont été considérées et l'équation de transfert radiatif est résolue selon un schéma utilisant la méthode Monte-Carlo. Les modèles sont validés en confrontant les profils de température du substrat et les températures des filaments à des mesures expérimentales.

Des simulations avec le modèle en deux dimensions sont par la suite réalisées pour mettre en évidence l'influence du hublot en quartz sur le profil de température du substrat et inversement. Différents paramètres du modèle sont modifiés comme les propriétés radiatives du substrat et du hublot ou la diffusivité.

Cette corrélation est ensuite expliquée par les propriétés d'émission, d'absorption, de réflexion et de transmission du substrat de silicium et du hublot en quartz et par l'influence des parois froides du réacteur à 300 K. Les différents phénomènes expliquant la forme du profil de température du substrat sont alors posés dans un schéma en quatre phases. La discussion de ce schéma permet d'aboutir à deux idées pour améliorer l'uniformité de la température du substrat. Ces dernières consistent à modifier les propriétés radiatives au niveau de la surface inférieure du hublot pour laisser passer le rayonnement des lampes et éviter l'absorption du rayonnement émis par le substrat de silicium selon deux configurations. Ces idées sont alors vérifiées par des simulations numériques en deux dimensions. Une future mise en œuvre expérimentale est finalement envisagée.

Mots-clés: Procédé thermique rapide (RTP), modélisation, simulation numérique, CFD'ACE, profil de température, uniformité de température, lampe infrarouge, substrat de silicium, hublot en quartz, AS-One 150.

STUDY OF THE HEATING OF A SILICON WAFER IN A RAPID THERMAL SYSTEM (RTP: RAPID THERMAL PROCESS)

ABSTRACT: Rapid Thermal Process (RTP) is very used in the manufacturing of microelectronic components. It is a key stage like annealing, silicidation, oxidation, nitruration and chemical vapour deposition (CVD). Its principle is to heat a small number of silicon wafers by infrared lamps for very short durations. Its main challenge is to obtain a uniform temperature for the wafer surface.

The aim of this study is to get a better understanding of the relations between the infrared lamp heating and the silicon wafer temperature profile in a rapid thermal system, the AS-One 150 system, in order to improve the silicon wafer temperature uniformity.

The system is modelled in two and three dimensions. The modelling of an infrared lamp is also realized to have a better knowledge of the parameters to enter in the two and three dimensional models. The models are realized by using the CFD'ACE software. The heat and mass conservation equations are taken into consideration and the radiative heat transfer equation is solved by using a Monte-Carlo scheme. The models are validated by comparing the wafer temperature profiles and the filament temperatures in the calculations to the experimental ones.

Two dimensional simulations are thereby carried out to put into light the influence of the quartz window on the wafer temperature profile and vice-versa. Different parameters are modified in the models like the radiative properties of the wafer or the window thermal diffusivity.

This correlation is then explained by the emission, absorption, reflection and transmission properties of the silicon wafer and the quartz window and by the influence of the reactor cooled wall at 300 K. The different phenomena which explain the shape of the wafer temperature profile are displayed in a four phase diagram. A discussion of the diagram leads to two ideas to improve the wafer temperature uniformity. They consist in changing the radiative properties for the lower face of the quartz window to let the radiative heat of the lamp pass and to prevent the absorption of the radiations emitted by the silicon wafer by two configurations. These two ideas are verified by numerical simulations in two dimensions. A future experimental test is finally suggested.

Keywords: Rapid Thermal Process (RTP), modelling, numerical simulation, CFD'ACE, temperature profile, temperature uniformity, infrared lamp, silicon wafer, quartz window, AS-One 150.

Cette thèse a été réalisée au

LABORATOIRE PROCÉDÉS MATÉRIAUX INSTRUMENTATION

du CER ENSAM d'ANGERS





en collaboration avec

l'entreprise ANNEALSYS à MONTPELLIER



Remerciements

Ce mémoire est le résultat de trois années de recherches effectuées au Laboratoire Procédés Matériaux Instrumentation (LPMI) de l'ENSAM d'Angers avec une bourse MNERT. À ce titre, je tiens à remercier vivement **M. Jean-Pierre L'HUILLIER** et **M. Jean-Jacques HANTZPERGUE**, directeurs successifs du LPMI pour la confiance qu'ils m'ont accordée pour mener à bien cette thèse. Je remercie également **le Ministère de la Recherche** pour m'avoir accordé une bourse MNERT.

J'adresse mes très sincères remerciements **aux membres du jury** : à **M. Hugues MURRAY** et **M. Michel PONS** qui me font l'honneur d'accepter la charge de rapporteur de thèse, et à **M. Michel SARRET** et **M. Jean-Pierre L'HUILLIER** qui ont accepté de juger ce travail de recherche.

Concernant mon travail sur les trois années de la thèse, mes remerciements vont principalement à ma directrice de thèse, **Mme Anne BOUTEVILLE**, qui a suivi la progression de mon travail avec beaucoup d'attention et de disponibilité. Par ses précieux conseils, ses compétences et son enthousiasme, elle a su m'aider à avancer au mieux dans mes travaux de recherche.

Ce travail a été effectué en collaboration avec l'entreprise AnnealSys dirigée par **M. Frank LAPORTE** à qui j'adresse mes vifs remerciements. Cette collaboration m'a permis d'avoir à disposition les moyens nécessaires pour mener mes recherches, notamment la mise à disposition de la machine thermique rapide AS-One 150 pour les essais expérimentaux. Ces derniers n'ont pu être réalisés que grâce au savoir-faire de **M. Éric DUPUY**, technicien, que je remercie énormément.

Mes remerciements vont aussi aux deux personnes suivantes qui sont restées proches de moi dans mon travail pendant ces trois années :

- **Mme Mihaela GIRTAN**, maintenant Maître de conférences au laboratoire POMA de l'Université d'Angers, pour ses conseils et sans qui ce travail n'aurait pas pu être valorisé par ma participation à deux congrès internationaux en Roumanie ;

- **M. David CHAPRON**, ATER au LPMI, pour son aide et sa disponibilité.

Mes vifs remerciements vont aussi à

- **Mme Marie-Geneviève ROBERT**, technicienne au LPMI ;
- **Mme Béatrice POULAIN et toutes les personnes travaillant au centre de documentation** pour leur aide si précieuse dans ma recherche de documents ;
- Tous les stagiaires que j'ai co-encadré : **M. Pravin GOPALAKHRISHNAN**, **M. Tarek BRAHAM-BOUCHNAK**, **M. Hou XIAOJUN** et **M. Arthur DE LAVENNE** ;
- **M. Vianney PIRON**, ATER au LMPI, pour son aide pour la mise en page ;
- **M. Fabrice LOGERAIS**, mon frère, pour son aide si précieuse pour la mise en forme de certaines figures ;
- **M. Simon MALHERBE** pour son aide lors de ma première année de thèse.

Je souhaite aussi remercier **M. Abdelhak AMBARI**, Professeur à l'ENSAM d'Angers, pour son aide sur certains points de la thèse, ainsi que **M. Ludovic BOT** et **M. Bruno COURANT** dont les formations suivies à l'École Doctorale de Nantes m'ont aidé dans mon travail.

Je ne saurais oublier toutes les autres personnes qui ont participé à un moment ou à un autre, directement ou indirectement à l'aboutissement de ce travail : le service informatique, toutes les secrétaires et les techniciens, le service de maintenance et bien sûr tous les autres collègues doctorants.

Enfin, je remercie ma famille qui m'a soutenu durant toutes ces années de travail et à qui je dédie cette thèse.

Sommaire

SOMMAIRE……..... 1

INTRODUCTION……..….. 5

CHAPITRE I : LE PROCÉDÉ THERMIQUE RAPIDE (RTP : RAPID THERMAL PROCESS) ……..…… 9

I.1. Généralités sur le procédé thermique rapide (RTP : Rapid Thermal Process).. 10
I.1.1. Principe……... 10
I.1.2. Applications…… 12
I.1.3. Le marché des équipements……...……. 14

I.2. État de l'art sur l'uniformité de la température du substrat de silicium…… 15

I.3. État de l'art sur la modélisation numérique du chauffage du substrat de silicium……... 19

I.4. Problématique de la thèse…… 20

Références du chapitre I…….. 23

CHAPITRE II : PRÉSENTATION DU SYSTÈME THERMIQUE RAPIDE ÉTUDIÉ ET DE LA MÉTHODE DE MODÉLISATION……... 25

II.1. Présentation du système thermique rapide AS-One 150……. 26
II.1.1. Le four……... 26
II.1.2. Le réacteur……. 28

II.2. Modélisation par simulation numérique 29
II.2.1. Présentation générale de la méthode CFD (Computational Fluid Dynamics).. 29
II.2.2. Constitution du logiciel CFD'ACE……..... 30
II.2.2.1. GEOM……..……. 30
II.2.2.2. CFD-ACE (U)……... 31
II.2.1.3. CFD'VIEW……..... 31

Références du chapitre II……. 33

CHAPITRE III : MODÉLISATION DU SYSTÈME THERMIQUE RAPIDE…… 35

III.1. Présentation de la modélisation…… 36

III.2. Réalisation des géométries…… 38
III.2.1. Modèle en deux dimensions……. 38
III.2.2. Modèle en trois dimensions……. 39

III.3. Équations et données de la modélisation……. 43
III.3.1. Présentation de la forme générale de l'équation de conservation…… 43
III.3.2. Modélisation des écoulements……. 44
III.3.2.1. Lois de conservation…… 44
III.3.2.2. Données concernant les écoulements……... 45
III.3.3. Modélisation des transferts de chaleur par conduction et convection…….. 46
III.3.3.1. Équation de transfert radiatif…… 46
III.3.3.2. Données de la modélisation……. 47

III.4. Cas du transfert de chaleur par rayonnement…… 49
III.4.1. Équation de transfert radiatif…… 49
III.4.2. Principe de la résolution de l'équation de transfert radiatif……. 51
III.4.3. Détermination des propriétés optiques des surfaces…… 52
III.4.3.1. Cas des solides semi-transparents de géométrie plane parallèle…….. 53
III.4.3.1.a. Hypothèses (approximation de McMahon).…….…… 54
III.4.3.1.b. Loi de Descartes et formules de Fresnel ……..…… 54
III.4.3.1.c. Approche matricielle ……..…… 57
III.4.3.2. Cas des surfaces opaques……. 57
III.4.4. La méthode Monte-Carlo…….…… 58
III.4.5. Propriétés radiatives des surfaces de la modélisation…….. 62

III.5. Résultats des simulations numériques……. 64
III.5.1. Résolution numérique des équations de conservation……. 64
III.5.2. Visualisation des résultats…… 66

III.6. Conclusion…….. 67

Références du chapitre III……..……. 69

CHAPITRE IV : MODÉLISATION APPROFONDIE D'UNE LAMPE INFRAROUGE…….. 71

IV.1. État de l'art sur la modélisation des lampes infrarouges dans les systèmes thermiques rapides……. 72

IV.2. Présentation du modèle réalisé……. 74

IV.3. Choix des dimensions et des conditions aux limites…… 75

IV.4. Géométrie, données et résultats numériques……... 78
IV.4.1. Géométrie……. 78
IV.4.2. Les données du modèle…… 79
IV.4.3. Résultats numériques……... 80

IV.5. Discussion……... 80

Références du chapitre IV…… 83

CHAPITRE V : VALIDATION DE LA MODÉLISATION DU SYSTÈME THERMIQUE RAPIDE ET DE LA LAMPE INFRAROUGE…….. 85

V.1. Essais expérimentaux…….. 86
V.1.1. Mesure de la température du substrat…… 86
V.1.2. Évaluation de la température des filaments des lampes…… 87

V.2. Résultats expérimentaux……. 90
V.2.1. Température du substrat…… 90
V.2.2. Température des filaments des lampes…….. 90
V.2.3. Hypothèse du régime permanent……... 91

V.3. Validation de la modélisation du système thermique rapide…….. 93
V.3.1. Confrontation des profils de température…….. 93
V.3.2. Confrontation des températures des filaments.……. 96
V.3.3. Conclusions……... 98

V.4. Validation de la modélisation approfondie de la lampe infrarouge……... 99

V.5. Conclusion…… 101

Références du chapitre V……. 103

CHAPITRE VI : CORRÉLATION ENTRE LA RÉPARTITION DE TEMPÉRATURE DU SUBSTRAT DE SILICIUM ET ET CELLE DU HUBLOT……..…….…….. 105

VI.1. Observation des profils de température du substrat et du hublot…… 106

VI.2. Influence du substrat sur la température du hublot……..… 108
VI.2.1. Température du hublot sans substrat…… 108
VI.2.2. Modification des propriétés radiatives du substrat…….. 109

VI.3. Influence du hublot sur la température du substrat…….. 112
VI.3.1. Température du substrat sans hublot…… 112
VI.3.2. Calcul de la température du substrat avec un hublot de diffusivité thermique élevée……... 114

VI.4. Conclusion…….……. 118

Références du chapitre VI……..…….. 119

CHAPITRE VII : COMPRÉHENSION DE LA FORME DU PROFIL DE TEMPÉRATURE DU SUBSTRAT DE SILICIUM…….. 121

VII.1. Propriétés radiatives des surfaces du système thermique rapide…… 122
VII.1.1. Le tungstène des filaments des lampes infrarouges…… 122
VII.1.2. Le substrat de silicium…… 123
VII.1.3. Le hublot en quartz……. 124
VII.1.4. Les parois du système……. 124

VII.2. Discussion des constatations à l'aide des propriétés radiatives……... 125

VII.3. Phénomènes intervenant dans la forme du profil de température du substrat et du hublot……..…… 129

VII.4. Idées pour uniformiser la température du substrat……..…… 132
VII.4.1. Réflexion sur la surface inférieure du hublot des rayonnements émis et réfléchis par le substrat……...……...……. 132
VII.4.2. Réflexion au niveau du bord du hublot des rayonnements émis et réfléchis par le bord du substrat……. 133

VII.5. Conclusion……. 136

Références du chapitre VII*……...……... *137

CHAPITRE VIII : AMÉLIORATION DE L'UNIFORMITÉ DE LA TEMPÉRATURE DU SUBSTRAT DE SILICIUM…….…… 139

VIII.1. Propriété radiative souhaitée……. 140

VIII.2. Calculs avec le filtre sur toute la face inférieure du hublot…… 142

VIII.3. Calculs avec le filtre disposé suivant une couronne sur la face inférieure du hublot……..... 144

VIII.4. Discussion…… 147

VIII.5. Mise en œuvre expérimentale…… 149
VIII.5.1. Filtrage avec un empilement de couches minces…….. 149
VIII.5.2. Proposition d'un empilement de couches minces……. 150

VIII.6. Conclusion……... 151

Références du chapitre VIII*…… *153

CONCLUSION GÉNÉRALE ET PERSPECTIVES……...…… 155

ANNEXE 1 : Caractéristiques de l'AS-One 150……... 161
ANNEXE 2 : Caractéristiques de la lampe infrarouge…..……..…….. 163
ANNEXE 3 : Étapes de la construction de la géométrie en deux dimensions de l'AS-One 150….…… 166
ANNEXE 4 : Propriétés thermiques et radiatives…… 169

Références des annexes* ……... *177

GLOSSAIRE……..... 179

TABLE DES FIGURES…….. 183

INDEX DES PRINCIPAUX AUTEURS CITÉS……...…… 187

PUBLICATIONS …… 189
CONGRÈS……..... 190

Introduction

Le **procédé thermique rapide** (**RTP : Rapid Thermal Process**)***** est très utilisé dans la fabrication des **composants de microélectronique**. Il correspond à des étapes clés de la fabrication comme les recuits d'implantation, de siliciuration, d'oxydation, de nitruration et plus récemment dans le dépôt de couches minces.

L'origine du procédé thermique rapide remonte aux années 1980[1,2]. Depuis la mise en place des premiers circuits intégrés, la technologie silicium s'efforce sans cesse de miniaturiser les composants semi-conducteurs afin d'améliorer les performances des circuits. Dans les années 1980, l'utilisation de fours conventionnels a commencé à devenir un frein pour la miniaturisation des composants. Leur trop grande inertie n'autorisait pas des traitements de courtes durées pour les plaques de silicium. Ces plaques de silicium sont couramment appelées **substrats** (wafer en anglais). Actuellement, le procédé thermique rapide est utilisé avec succès pour ces traitements de courtes durées. Dans ce procédé, le chauffage des substrats de silicium est en effet réalisé par un banc de **lampes infrarouges** permettant des temps de réponse très courts.

Mais, le principal défi est d'avoir une **bonne uniformité de la température sur toute la surface du substrat de silicium**. Même si une nette amélioration a été obtenue depuis la création du procédé, cette condition reste bel et bien l'enjeu majeur. Il est en effet nécessaire d'assurer un traitement identique sur tout le substrat pour que les composants répondent de manière identique aux critères de qualité. L'étude du chauffage du substrat de silicium permet de mieux comprendre les phénomènes responsables des gradients de température constatés.

En parallèle, le développement de l'informatique a permis de mettre au point des méthodes de **simulations numériques** efficaces pour optimiser les procédés thermiques rapides.

*En gras, les mots ou expressions clés de chaque page.

Cette thèse, réalisée en collaboration avec l'entreprise AnnealSys (Montpellier), s'inscrit dans ce cadre. Ses objectifs sont les suivants.

Le premier objectif est d'étudier le chauffage d'un substrat de silicium par le banc de lampes infrarouges d'un système thermique rapide afin de mieux comprendre la relation entre le chauffage des lampes et le profil thermique du substrat.

Le second objectif consiste à proposer des solutions pour améliorer l'uniformité de la température du substrat.

Pour atteindre ces deux objectifs, la démarche suivante a été utilisée. Le système thermique rapide de type AS-One 150 a été considéré. Une **modélisation** du système a été réalisée avec le logiciel CFD'ACE qui permet de restituer la géométrie et de simuler numériquement les phénomènes essentiellement thermiques qui y ont lieu. Les résultats numériques sont alors obtenus avec la méthode des volumes finis. Ces derniers sont confrontés à des mesures expérimentales de température effectuées sur le substrat afin d'apprécier la **validité du modèle**. Les **phénomènes responsables de la non-uniformité de la température du substrat** peuvent être mis en évidence et expliqués. Des **solutions** peuvent être alors proposées.

Cette démarche a été traitée en huit chapitres. Les objectifs de chacun d'entre eux sont donnés ci-dessous.

Le **chapitre I** présente d'abord le procédé thermique rapide de manière générale. Un état de l'art sur l'uniformité de la température du substrat de silicium et un autre sur la modélisation numérique des procédés thermiques rapides sont proposés afin de poser la problématique de la thèse et la stratégie pour y répondre.

Le **chapitre II** présente le système thermique rapide considéré pour bien cerner les différentes parties. La méthode de modélisation est ensuite exposée. Le logiciel CFD'ACE utilisé pour les calculs est notamment décrit.

Dans le **chapitre III**, la modélisation réalisée pour le système thermique rapide AS-One 150 est détaillée. Il s'agira d'aborder la construction de la géométrie, les équations utilisées, les propriétés des matériaux et des gaz, les propriétés radiatives des surfaces, les conditions aux limites, ainsi que la visualisation des résultats calculés numériquement.

Concernant les équations prises en compte, l'accent est mis sur la résolution de l'équation de transfert radiatif car le chauffage du substrat de silicium se fait principalement par le rayonnement infrarouge émis par les lampes.

Dans le **chapitre IV**, une modélisation d'une lampe seule est proposée afin de connaître avec précision les paramètres de température à entrer pour les filaments des lampes dans la modélisation de l'AS-One 150.

La validation de la modélisation du système thermique rapide et de sa lampe seule fait l'objet du **chapitre V**. Pour ce faire, des essais expérimentaux ont été menés et les profils de température obtenus pour le substrat sont confrontés à ceux obtenus par le calcul. Les températures des filaments des lampes infrarouges ont aussi été évaluées expérimentalement et comparées.

Dans le **chapitre VI**, il s'agira de mettre en évidence l'influence du hublot sur la répartition de la température du substrat. Pour apprécier cette influence, certains paramètres de la modélisation sont modifiés.

Le but du **chapitre VII** est de poser et de comprendre les différents phénomènes intervenant dans la forme du profil de la température du substrat en s'appuyant sur les constations effectuées dans le chapitre VI. Une réflexion est alors engagée afin de proposer des idées pour améliorer l'uniformité de la température du substrat.

Enfin, le **chapitre VIII** a pour objectif de vérifier l'efficacité des solutions proposées dans le chapitre VII par des calculs numériques et de débattre des éventuelles mises en œuvre expérimentales.

[1]Lojek B., (1999), *Early History of Rapid Thermal Processing*, Proc. of 1999 IEEE Int. Conf. on Adv.Thermal Proc. of Semicon., RTP'99, pp. 292-317.

[2]Niess, J., S. Paul, S. Buschbaum, P. Schmid, W. Lerch, (2004), *Mainstream rapid thermal processing for source-drain engineering from first applications to latest results*, Materials Science and Engineering B: Solid-State Materials for Advanced Technology 114-115, pp. 141-150.

CHAPITRE I

Le procédé thermique rapide (RTP : Rapid Thermal Process)

*L'obtention d'une **température uniforme** sur toute la surface du substrat de silicium est le principal enjeu du procédé thermique rapide. Pour répondre à cette exigence, ces procédés peuvent être modélisés numériquement.*

*Dans ce chapitre, **les différents aspects du procédé thermique rapide** sont d'abord présentés : le principe, les applications, les intérêts et les difficultés, ainsi qu'une brève description du marché des équipements.*

*Dans les deux parties qui suivent, **un état de l'art sur l'uniformité de la température du substrat de silicium** et un autre sur **la modélisation numérique des procédés thermiques rapides** sont proposés.*

*Ce chapitre est conclu par **la problématique de la thèse**.*

I.1. Généralités sur le procédé thermique rapide (RTP : Rapid Thermal Process)

I.1.1. Principe

Le procédé thermique rapide — communément appelé RTP (Rapid Thermal Process) — consiste à **chauffer un nombre restreint de substrats de silicium par des lampes infrarouges**. Il peut s'agir d'un procédé de recuit ou d'un procédé de dépôt. On ne s'intéressera qu'au procédé de **recuit**.

Le schéma de la Figure I-1 montre les différents éléments qui entrent dans ce procédé. Le **substrat de silicium** est placé dans une enceinte appelée « **réacteur** ». Le réacteur peut être maintenu à basse pression grâce à un système de pompage. Le substrat est chauffé par le rayonnement **infrarouge** émis par un ou plusieurs bancs de **lampes** placés dans le **four**. Le **hublot en quartz** assure l'étanchéité du réacteur tout en laissant passer le rayonnement émis par les lampes. Les parois du réacteur sont maintenues à environ 300 K pour éviter de contaminer le substrat. La température du substrat est contrôlée par l'intermédiaire d'un régulateur relié à une mesure pyrométrique.

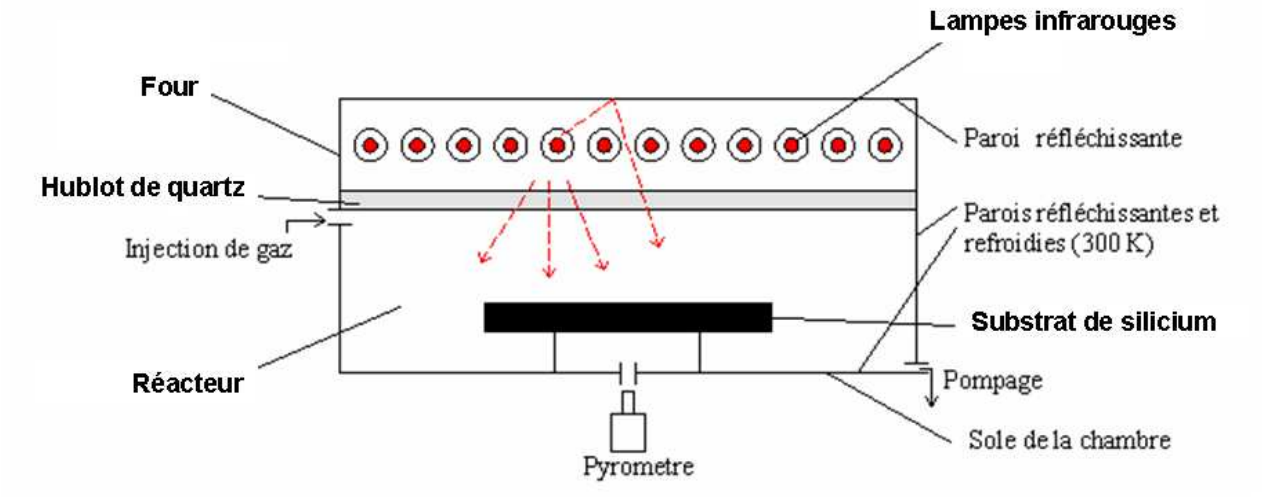


Figure I-1. *Principe du procédé thermique rapide (RTP : Rapid Thermal Process).*

La Figure I-2 montre un exemple d'évolution typique de la température du substrat. La montée en température du substrat est de l'ordre de quelques **secondes**. Puis, le substrat est maintenu à la température du recuit pendant la durée requise. La puissance des lampes est ensuite coupée pour laisser le substrat revenir à sa température initiale.

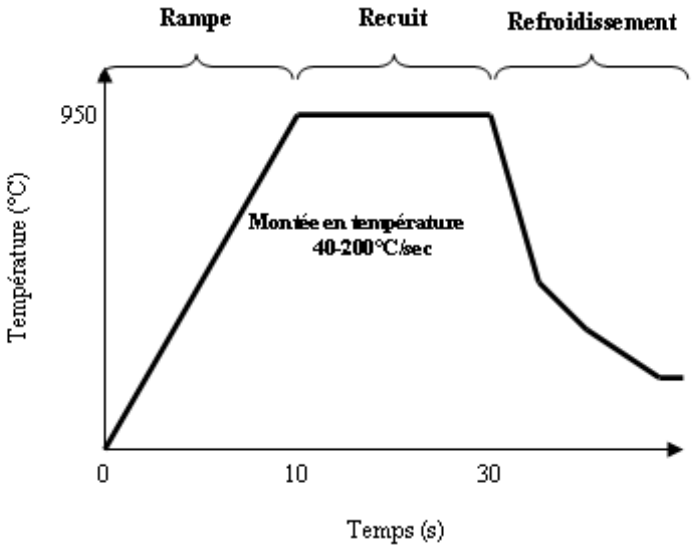


Figure I-2. *Exemple d'évolution de la température du substrat dans un procédé thermique rapide.*

L'**intérêt** du procédé thermique rapide peut être évalué en effectuant une comparaison avec le chauffage réalisé dans les fours résistifs conventionnels. La configuration d'un tel four est présentée par la Figure I-3. Les substrats de silicium sont placés en grand nombre à l'intérieur d'un tube en quartz. La pression peut être maintenue basse à l'intérieur du tube grâce à un système de pompage. Une résistance chauffante est placée autour du tube. Une bonne uniformité de la température des substrats est obtenue.

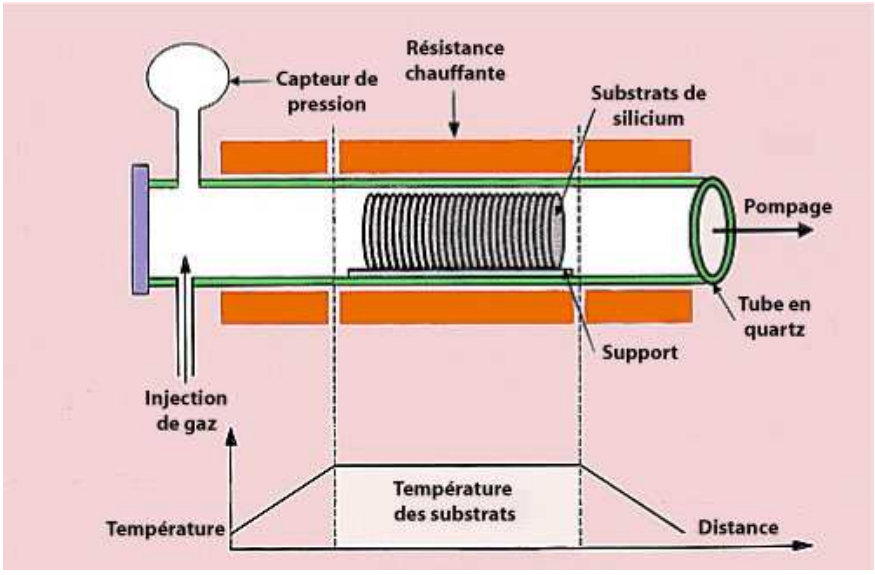


Figure I-3. *Schéma d'un four résistif.*

Le procédé thermique rapide présente de nombreux **avantages** par rapport au four conventionnel.
Il permet de diminuer le budget thermique des substrats car les durées de montée et de descente pour un four résistif sont très longues. Ces dernières se comptent en heures contre quelques secondes pour le procédé thermique rapide.
Les substrats sont traités dans de meilleures conditions de pureté car les parois du réacteur sont maintenues à basse température, environ 300 K, pour limiter leur « mémoire ». Les parois chaudes du tube de quartz du four conventionnel se recouvrent progressivement d'un dépôt qui finit par se détacher et polluer les substrats.
Il présente aussi l'avantage d'avoir une flexibilité dans le traitement des substrats. Il permet également de limiter les pertes en cas de problème puisqu'un nombre restreint de substrats est traité à la fois.

La principale **difficulté** du procédé thermique rapide est celle d'obtenir une **bonne uniformité de la température à la surface des substrats**. Elle est due à la présence de gradients de température importants au sein des systèmes thermiques rapides.
Le contrôle de la température des substrats avec une grande précision est une autre difficulté.
D'autres difficultés peuvent être répertoriées comme :

- la bonne répétabilité de la température à la surface du substrat
- la mesure pyrométrique difficile pour les températures d'utilisation les plus basses car l'émission du substrat est faible
- la dégradation accélérée du matériel pour des puissances d'utilisation élevées.

I.1.2. Applications

Il existe plusieurs types de procédés thermiques rapides. Ils entrent dans les étapes de fabrication de différents **composants de microélectronique**. De nombreux exemples d'applications sont donnés dans l'ouvrage *Rapid thermal processing of semiconductors (Borisenko et Hesketh 1997)*. Concernant la durée des procédés thermiques rapides, elle va de quelques secondes à 1000 secondes comme l'illustre le schéma de la Figure I-4 *(Mattson 2001)*. Ce schéma indique aussi les températures des substrats. Les applications les plus retrouvées sont commentées ci-après.

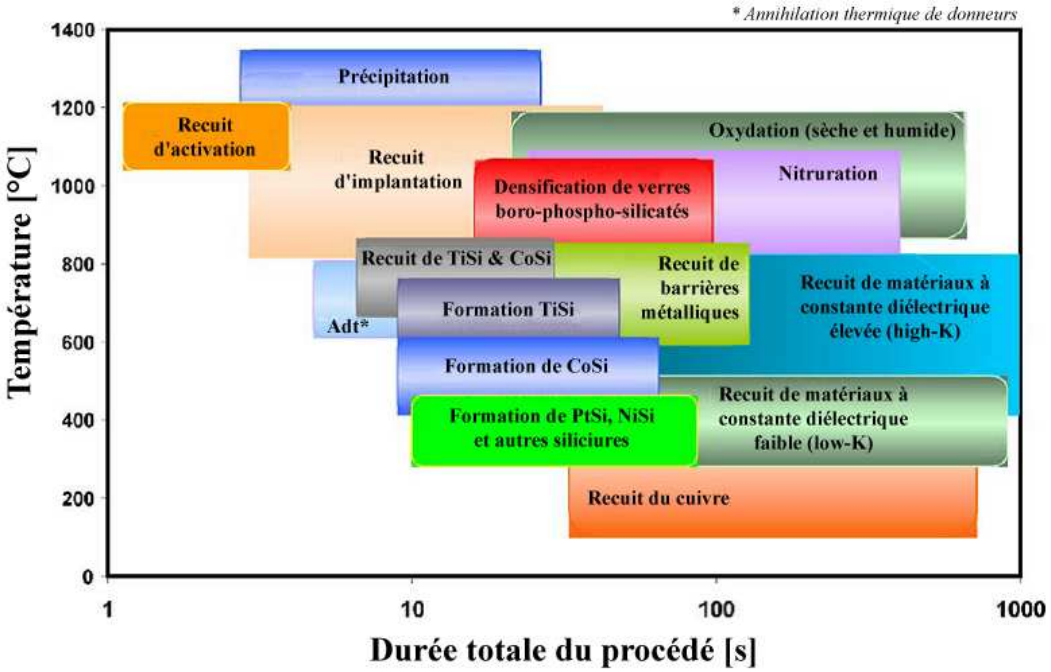


Figure I-4. *Durées et températures des applications RTP.*

Le **recuit rapide « simple » (Rapid Thermal Annealing : RTA)** est utilisé pour la diffusion de dopants implantés en surface. Il permet également d'activer des dopants ou encore de réaliser des recristallisations pour guérir les endommagements dus à l'implantation ionique des dopants. Réalisé sur des substrats mono ou polycristallin, ce type de recuit intervient dans la fabrication de diodes, de transistors MOS (Metal Oxide Semi-conductor), de cellules solaires … Il peut être utilisé dans la fabrication des diodes lasers sur des substrats d'arséniure de gallium GaAs (matériaux III-V).

Le **recuit de siliciuration** est effectué à des températures plus basses. Pour le nickel, la siliciuration se fait aux alentours de 250°C. Il consiste à faire diffuser des atomes métalliques (titane, tungstène, nickel, molybdène …) dans une matrice de silicium. Il entre dans la fabrication des circuits intégrés de type VLSI (Very Large Scale Integration), les contacts ohmiques, les interconnexions, les barrières de diffusion …

Le recuit d'**oxydation (Rapid Thermal Oxidation : RTO)** est réalisé à haute température soit par voie sèche, soit par voie humide. Comme le recuit de **nitruration (Rapid Thermal Nitruration : RTN)**, il entre dans la fabrication des mémoires et des transistors à effet de champ de type MOSFET (Metal Oxide Semiconductor Field Effect Transistor).

D'autres types d'applications peuvent être rencontrés comme le **dépôt chimique à partir de la phase vapeur (Rapid Thermal Chemical Vapour Deposition : RTCVD)**. Il consiste à envoyer des espèces gazeuses qui réagissent sur la surface du substrat préalablement chauffé à une température pouvant aller de 200°C à plus de 1000°C. Au contact de la surface chaude, les gaz aboutissent à la formation d'un composé solide qui se dépose sur le substrat. Une couche mince est alors formée. Les co-produits gazeux de la réaction sont évacués. Le procédé RTCVD entre notamment dans la fabrication des transistors CMOS (Complementary Metal Oxide Semiconductor) des microprocesseurs.

I.1.3. Le marché des équipements

Cette partie permet de situer dans un contexte général la recherche effectuée dans le présent travail. Afin de ne pas alourdir la thèse qui se focalise sur l'étude physique d'un système thermique rapide, on ne s'attardera pas sur cet aspect. Les fabricants et l'évolution du marché des équipements RTP sont présentés ici en quelques lignes.

Les fabricants d'équipements RTP peuvent être répartis en deux catégories. Il y a les grands groupes qui fournissent des équipements « figés » destinés à la production. Derrière ces leaders, on trouve des entreprises de tailles moins importantes. Ces dernières répondent généralement à des demandes particulières de machines formulées généralement par les milieux de la recherche et du développement.

Comme noms d'équipementiers du semi-conducteur, citons Applied Materials (États-Unis) qui est le numéro un. Ensuite, il vient « Tokyo Electron » (Japon) et ASM (Advanced Semiconductor Materials) un très grand groupe basé au Pays-Bas. Comme société de taille moins importante, il y a AnnealSys (France). Cette thèse a été réalisée en collaboration avec cette entreprise.

Le marché des équipements RTP suit bien entendu celui de la microélectronique avec une évolution en dents de scie. Suivant cette l'évolution, les entreprises qui fabriquent ces équipements se rachètent souvent entre elles ou fusionnent.

Pour suivre les évolutions de la microélectronique sous les différents aspects ici évoqués, les sites Internet suivants peuvent être consultés :

- revue Semiconductor International : www.reed-electronics.com
- International Technology Roadmap for Semiconductors (ITRS) : www.itrs.net
- Semiconductor Industry Association (SIA) : http://www.sia-online.org
- Semiconductor International Capacity Statistics (SICAS) : www.sicas.info
- Semiconductor Equipment Manufacturing International (SEMI) où les données sont payantes : http://www.semi.org/.

I.2. État de l'art sur l'uniformité de la température du substrat de silicium

Les **difficultés** pour obtenir une température uniforme à la surface du substrat ont différentes causes *(Yoshio et Doering 2000)*.
Tout d'abord, le flux incident provenant des lampes n'est pas homogène sur le substrat.
Il y a aussi la présence d'effets au bord du substrat. L'effet le plus important est celui du gradient thermique créé par les parois du réacteur qui sont maintenues relativement froides (de l'ordre de 300 K). Comme autre effet, on trouve la convection dans le réacteur ou la trop faible réflectivité des parois du réacteur.
Une difficulté importante est l'élévation de la température du hublot de quartz qui joue sur l'uniformité de la température du substrat.
Enfin, on peut signaler les problèmes de contamination, de vieillissement, de stabilité et de placement du substrat.

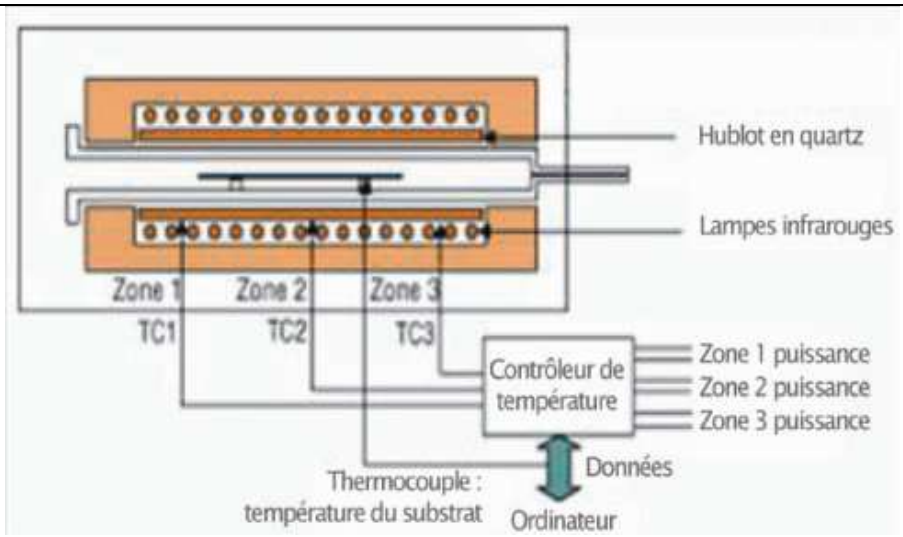
Des **solutions** ont été étudiées pour remédier à ces difficultés mais elles ne parviennent pas à le faire de manière totalement efficace. Quelques-unes de ces solutions sont illustrées par la Figure I-5.
Le chauffage par plusieurs **groupes de lampes** pilotés séparément permet l'obtention d'un flux uniforme arrivant sur le substrat *(Silva Neto et al. 1998) (Acharya et al. 2001)*. Cependant sa mise en œuvre pour un équipement nécessite une étude préalable très poussée.

La **rotation du substrat** permet d'homogénéiser la température circulairement mais l'écart de température entre le centre et le bord du substrat reste inchangé *(Tillman et al. 1998).*

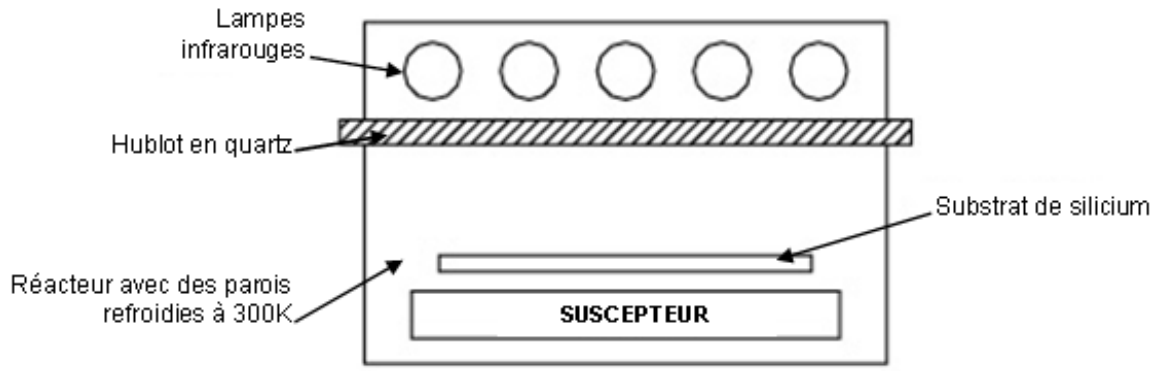
L'utilisation d'un **suscepteur** permet une meilleure uniformité de la température puisqu'il y a une plus grande inertie thermique *(Yoo et al. 1998).* Cependant, l'ajout d'un suscepteur présente l'inconvénient de réduire le caractère rapide du chauffage.

L'utilisation d'un **anneau de garde** placé autour du substrat permet de réduire les effets au bord *(Kakoschke et al. 1990).* Il présente plusieurs inconvénients comme une manipulation difficile des substrats lors du chargement, une augmentation de la taille du réacteur ou encore une augmentation du risque de contamination des substrats si il y a des dépôts sur l'anneau.

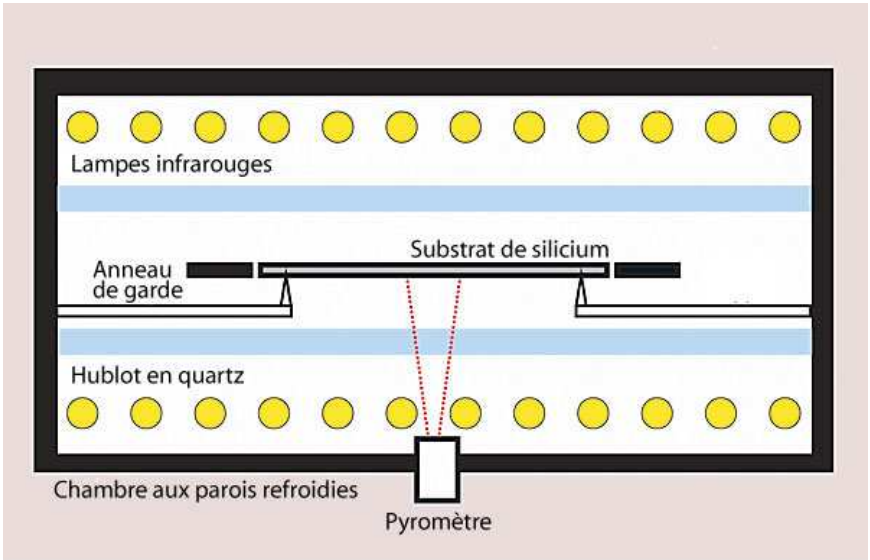
Une réduction est aussi obtenue par l'augmentation de la **réflectivité des parois du réacteur** pour renvoyer le rayonnement au bord du substrat *(Knutson et al. 1993).*



Contrôle des groupes de lampes



Utilisation d'un suscepteur



Utilisation d'un anneau de garde

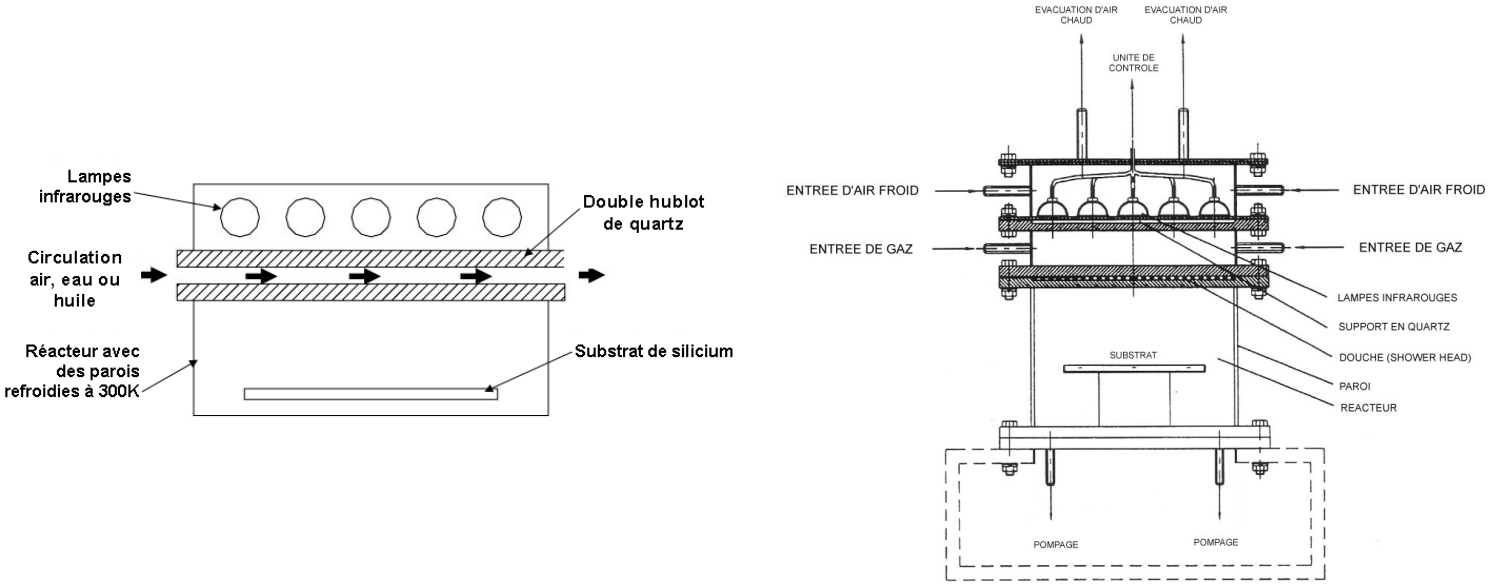
Figure I-5. *Exemples de solutions pour améliorer l'uniformité de la température du substrat.*

Une autre solution consiste à **réduire les gradients thermiques au niveau du hublot**. Cette réduction peut être effectuée par plusieurs méthodes (Figure I-6).

L'utilisation d'un double hublot avec une circulation d'huile ou d'eau *(Slaoui et al. 2002)* est une solution. L'inconvénient en est que l'eau et l'huile absorbent une partie du rayonnement des lampes. Un refroidissement avec de l'air peut être utilisé *(Dassau et al. 2006).* Son efficacité est moindre car la conductivité thermique de l'air est plus faible.

Une autre solution consiste à utiliser une douche *(Yin et al. 2000).* Cette méthode est utilisée dans le cas d'applications impliquant une injection de gaz. Le gaz, à une température d'environ 300 K, est injecté dans le réacteur à travers des trous dans le hublot. Cette solution est complexe et ne s'applique pas à un recuit simple.

Une autre idée fait l'un des objets du brevet de Timans et al. *(Timans et al. 2006)* : ils ont proposé un arrangement au niveau du hublot pour sélectionner les longueurs d'onde à réfléchir, permettant ainsi son refroidissement.



Double hublot *Hublot avec douche (showerhead)*

Figure I-6. *Solutions au niveau du hublot pour améliorer l'uniformité de la température du substrat.*

I.3. État de l'art sur la modélisation numérique du chauffage du substrat de silicium

La modélisation d'un procédé d'un système thermique rapide est complexe car différents phénomènes interviennent en même temps : le chauffage du substrat, le contrôle de la température du substrat, les écoulements, les réactions chimiques et les structures des films traités. Dans une première approche, ces phénomènes peuvent être considérés indépendants. Ils peuvent être couplés par la suite. La modélisation numérique se focalise généralement sur un aspect.

Dans le cadre de la présente thèse, on se penche sur **la modélisation numérique du chauffage du substrat de silicium**. Ce dernier se fait essentiellement par un transfert de chaleur **radiatif**.

Ce transfert a été modélisé de plusieurs façons.

En écrivant l'équation d'équilibre des flux, une relation entre la puissance des lampes et la température du substrat peut être obtenue *(Balakrishnan et Edgar 2000)*.

La réponse en température du substrat peut être représentée par un modèle du premier ordre *(Balakrishnan et Edgar 2000)*.

Une autre manière de traiter le transfert radiatif consiste à poser l'équation d'équilibre des flux, puis à la résoudre à l'aide de la méthode des différences finies *(Dassau et al. 2006) (Chao et al. 2003)* ou par d'autres outils de simulation *(Plévert 1995)*.

Les trajectoires des rayons peuvent être tracées suivant d'autres méthodes. Citons la méthode DARTS (Direct Approach using Ray Tracing Simulation) *(Habuka et al. 2005) (Chang et Hwang 2006)*. Il y a également celle des ordonnées discrètes *(Liu et Chen 2000)*. Kersch et Morokoff ont proposé une résolution par **la méthode Monte-Carlo** *(Kersch et Morokoff 1995)*. Différents systèmes de chauffage rapide ont été modélisés suivant cette résolution *(Kersch et Schafbauer 2000) (Bouteville 2005)*.

I.4. Problématique de la thèse

L'objectif de ce travail consiste à mieux comprendre les phénomènes impliqués dans le chauffage du substrat de silicium par les lampes infrarouges afin d'améliorer son uniformité de température.

La **stratégie** pour répondre à cette problématique est illustrée par le schéma de la Figure I-7. Elle est la suivante :

- Un système thermique rapide est **modélisé par simulation numérique** dans le cas d'un recuit sans débit de gaz. Le réacteur est considéré dans le cas d'un recuit car seul le chauffage du substrat par les lampes infrarouges fait l'objet de la thèse.
  Afin de mieux cerner les paramètres du chauffage infrarouge, la réponse en température du filament d'une lampe peut être déduite d'une modélisation plus poussée d'une seule lampe infrarouge du four.

- La modélisation réalisée doit être **validée** à l'aide de résultats expérimentaux de la température du substrat.

- Une fois l'étape de validation effectuée, différentes études peuvent être réalisées pour avoir **une meilleure connaissance des phénomènes impliqués dans le chauffage** du substrat. Par exemple, l'influence du hublot sur le profil de température du substrat peut être appréciée.
  Des **solutions** pour améliorer l'uniformité de la température du substrat peuvent alors être proposées.

Le même schéma de la Figure I-7 peut être repris pour la modélisation poussée d'une lampe infrarouge du four. La modélisation de la lampe est d'abord réalisée, puis validée. Ainsi, la relation entre la puissance fournie par les lampes et le chauffage du substrat peut être mieux connue.

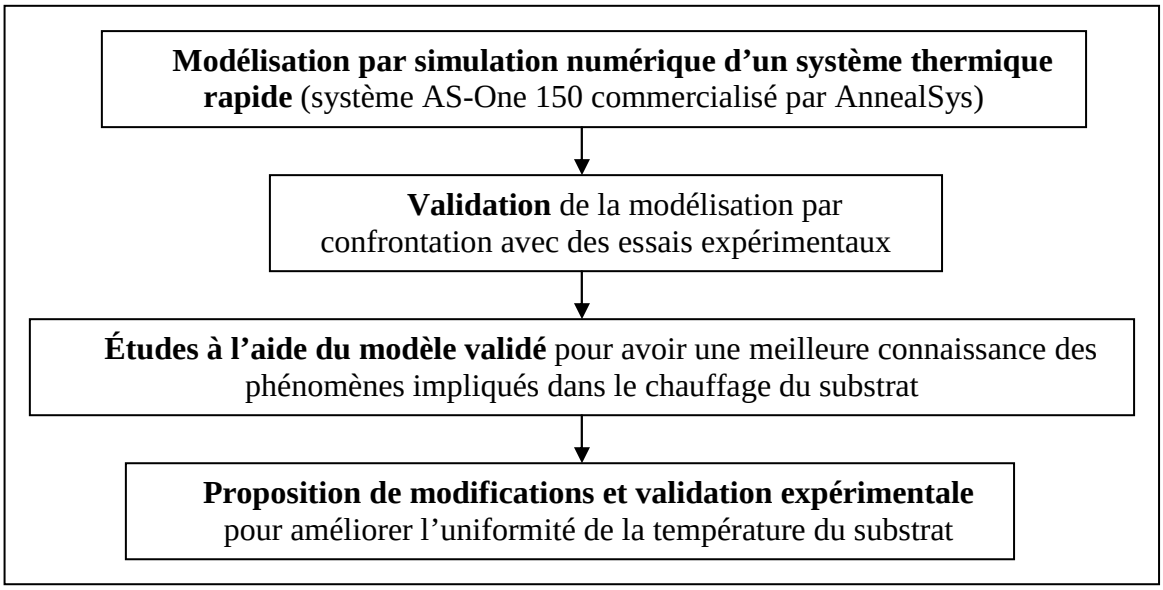


Figure I-7. *Stratégie pour améliorer l'uniformité de la température du substrat.*

Références du chapitre I

Acharya, N., V. Kirtikar, S. Shooshtarian, H. Doan, P.J. Timans, K.S. Balakrishnan, K.L. Knutson, (2001), *Uniformity optimization techniques for rapid thermal processing systems*, IEEE Transactions on Semiconductor Manufacturing, 14 (3), pp. 218-226.

Balakrishnan, K.S., T.F. Edgar, (2000), *Model-based control in rapid thermal processing*, Thin Solid Films, 365, pp. 322-333.

Borisenko, V. E., P.J. Hesketh, (1997), *Rapid thermal processing of semiconductors*, Plenum Press, New York.

Bouteville, A., (2005), *Numerical simulation applied to Chemical Vapour Deposition process, Rapid Thermal CVD and spray CVD*, Journal of Optoelectronics and Advanced Materials, 7 (2), pp. 599-606.

Chang, P.C., S.J. Hwang, (2006), *Simulation of a rapid surface heating for injection molding*, International Journal of Heat and Mass Transfer, 49, pp. 3846-3854.

Chao C.-K., S.Y. Hung, C.C. Yu, (2003), *The effect of lamps radius on thermal stresses for Rapid Thermal Processing system*, Journal of Manufacturing Science and Engineering, 125, pp. 504-511.

Dassau, E., B. Grosman, D.R. Lewin, (2006), *Modelling and temperature control of rapid thermal processing*, Computers and Chemical Engineering, 30, pp. 686-697.

Habuka, H., T. Wada, T. Sakurai, T. Takeuchi, M. Aihara, (2005), *Heat balance evaluation for rapid thermal processing system design*, Journal of the Electrochemical Society, 152 (12), pp. 924-928.

International Technology Roadmap for Semiconductors (ITRS) : www.itrs.net .

Kakoschke, R., E. Bussmann, H. Foell, (1990), *Modelling of wafer heating during rapid thermal processing*, Applied Physics A: Solids and Surfaces, 50, pp. 141-150.

Kersch, A., W.J. Morokoff, (1995), *Transport Simulation in Microelectronics*, Birkhauser, Bâle.

Kersch, A., T. Schafbauer, (2000), *Thermal modelling of RTP and RTCVD processes*, Thin Solid Films, 365(2), pp. 307-321.

Knutson, K., S.A. Campbell, F. Dunn, (1993), *Three dimensional temperature uniformity modelling of a rapid thermal processing chamber*, Materials Research Society Symposium Proceedings, 303, pp. 211-215.

Liu, J., Y.S. Chen, (2000), *Prediction of surface radiative heat transfer using the modified discrete transfer method*, Numerical Heat Transfer, Part B: Fundamentals, 38 (4), pp. 353-367.

Mattson, B., P.J. Timans, S.P. Tay, D.J. Devine, J. Kim, (2001), Proceedings on 9th International Conference on Advanced Thermal Processing of Semiconductors-RTP 2001, p. 13., D.P. DeWitt, J. Gelpey, B. Lojek, Z. Nenyei (Eds.).

Plévert, L., (1995), *Cristallisation par recuit rapide du silicium amorphe sur verre*, thèse de doctorat, Université de Rennes I.

Semiconductor Equipment Manufacturing International (SEMI) : http://www.semi.org/ .

Semiconductor Industry Association (SIA) : http://www.sia-online.org .

Semiconductor International : www.reed-electronics.com .

Semiconductor International Capacity Statistics (SICAS) : www.sicas.info .

Silva Neto, A.J., M.J. Fordham, W.J. Kiether, F.Y. Sorrell, (1998), *Rapid Thermal Processing Furnace with Three Heating Zones*, Revista Brasileira De Ciencias Mecanicas/Journal of the Brazilian Society of Mechanical Sciences, 20, pp. 532-541.

Slaoui, A., S. Bourdais, G. Beaucarne, J. Poortmans, S. Reber, (2002), *Polycrystalline silicon solar cells on multiple substrates*, Solar Energy Materials and Solar Cells, 71 (2), pp. 245-252.

Tillmann, A., S. Buschbaum, S. Frigge, U. Kreiser, D. Löffelmacher, T. Theilig, et al., (1998), *Modelling and Off-Line Optimization of a 300 mm Rapid Thermal Processing System*, Materials Science in Semiconductor Processing, 1, pp. 181-186.

Timans, J.P., et al., (2006), *Selective reflectivity process chamber with customized wavelength response and method*, brevet : United States Patent 7 115 837, 3 octobre, 2006.

Yin, C.P., C.C. Hsiao, T.F. Lin, (2000), *Improvement in substrate temperature uniformity and flow pattern in a lamp heated rapid thermal processor*, Journal of Crystal Growth, 217, pp. 201-210.

Yoo W.S., A.J. Atanos, J.F. Daviet, (1998), *Susceptor-based rapid thermal processing system and its suicide application*, Japanese Journal of Applied Physics, Part 2: Letters, 37 (10 part A), pp. L1135-L1137.

Yoshio, N., R. Doering, (2000), *Handbook of semiconductor manufacturing technology*, Marcel Dekker, New York.

CHAPITRE II

Présentation du système thermique rapide étudié et de la méthode de modélisation

Dans ce chapitre, ***le système thermique rapide*** *considéré dans ce travail de thèse est d'abord présenté. Les différentes parties du système sont décrites.*

Dans une deuxième partie, ***la méthode CFD (Computational Fluid Dynamics)*** *utilisée pour la modélisation du système est présentée. Les trois différentes étapes entrant dans cette méthode sont détaillées.*

II.1. Présentation du système thermique rapide AS-One 150

Le système thermique rapide étudié est du type **AS-One 150**. Il est commercialisé par l'entreprise **AnnealSys** qui est une PME basée à Montpellier.

Les caractéristiques de ce système sont disponibles sur le site www.annealsys.com. Parmi celles-ci, on peut retenir que la température du substrat peut aller jusqu'à 1250°C. La montée en température peut se faire très rapidement (200°C/s au maximum). La température du substrat est contrôlée avec une mesure pyrométrique et un thermocouple reliés à un régulateur PID (Proportionnel Intégral Dérivée). Un contrôle à ± 1°C de la température du substrat est assuré. Il y a un système informatique de pilotage avec cent étapes possibles pour un procédé. D'autres informations concernant la machine sont données dans l'Annexe 1.

La photo de la Figure II-1 montre le système AS-One 150. Il comprend un four et un réacteur.



Figure II-1. *L'équipement de chauffage thermique rapide type AS-One 150.*

II.1.1. Le four

Il est constitué d'un banc de **dix-huit lampes infrarouges** à halogène, toutes alimentées avec la **même puissance électrique**. Les caractéristiques complètes d'une lampe sont données dans l'Annexe 2.

Chacune des lampes est constituée par **un filament de tungstène** situé au centre d'une ampoule en quartz (Figure II-2). Pour limiter l'évaporation du tungstène, l'ampoule est remplie par de l'azote sous pression (de l'ordre de 400 000 Pa soit 4 bars) avec un halogénure à base d'iode. C'est ainsi que la durée de vie des lampes est allongée.

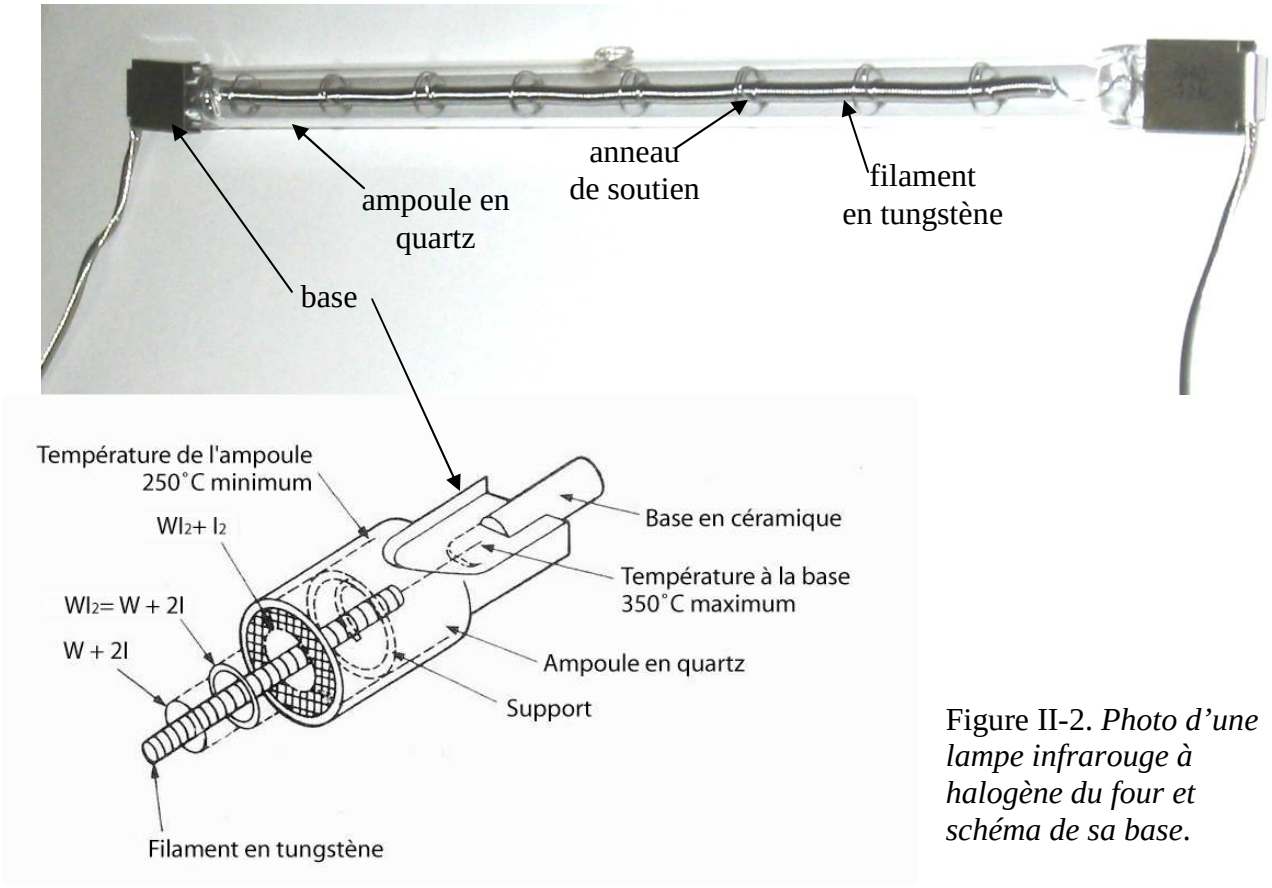


Figure II-2. *Photo d'une lampe infrarouge à halogène du four et schéma de sa base.*

Lorsque les lampes sont alimentées, le rayonnement émis se situe essentiellement dans l'**infrarouge avec des longueurs d'onde allant de 0,3 à 4 µm centrées aux alentours de 1 µm**. Un système de ventilation d'air montré Figure II-3 permet de refroidir les culots des lampes qui chauffent énormément. Ainsi, les culots sont à des températures inférieures à 350°C conseillées par le constructeur (Figure II-2).

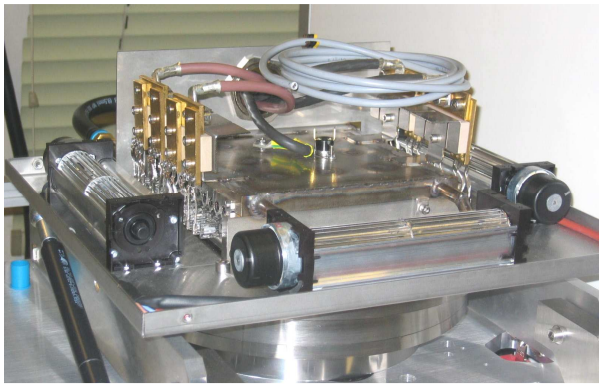


Figure II-3. *Le four abaissé avec le système de ventilation d'air pour refroidir les culots des lampes.*

II.1.2. Le réacteur

La photo de la Figure II-4 montre le **réacteur** en position relevée.

Sur sa partie supérieure, un **hublot en quartz** assure l'étanchéité du réacteur tout en laissant passer le rayonnement infrarouge des lampes.

Le réacteur est de forme cylindrique avec des parois en inox. **Un substrat de 150 mm de diamètre** (soit 6 pouces) y repose sur trois picots de quartz. Trois autres picots de quartz permettent de le maintenir dans une position stable. Une circulation d'eau maintient **les parois à la température relativement basse de l'ordre de 300 K**.

Les gaz peuvent être introduits à l'aide de quatre injecteurs de diamètre 0,5 mm. Leur extraction est possible par une ouverture qui s'étend sur 105° sur le côté opposé aux injecteurs. Un système de pompage des gaz permet d'assurer la basse pression. Un panneau de gaz gère l'arrivée et la sortie des gaz.



Figure II-4. *Le réacteur en position relevée.*

II.2. Modélisation par simulation numérique

L'introduction de l'informatique pour simuler les procédés thermiques rapides permet de réduire les coûts et les temps de recherche des machines *(Rauf et al. 2005)*. Pendant de nombreuses années, l'intuition et l'expérience ont été les seuls outils.

La simulation numérique est très souvent réalisée par la technique **CFD (Computational Fluid Dynamics)**. Cette technique permet la résolution des équations aux dérivées partielles régissant les bilans énergétiques (masse, chaleur etc.). Le logiciel utilisé, **CFD'ACE**, est développé par l'entreprise CFDRC (Computational Fluid Dynamics Research Corporation : www.cfdrc.com) et commercialisé par ESI Group (www.esi-group.com).

II.2.1. Présentation générale de la méthode CFD (Computational Fluid Dynamics)

La CFD désigne une technique générale d'analyse de systèmes impliquant des transferts de masse et de chaleur aux moyens de simulations informatiques. Elle permet aussi d'étudier les phénomènes qui leur sont associés comme les réactions chimiques, les changements de phase et les déformations. Elle est présentée en détails dans l'ouvrage *An introduction to Computational Fluid Dynamics (Versteeg et Malalasekera 1995).*

La résolution d'un problème de CFD nécessite trois éléments :

- **un pré-processeur** qui permet de rentrer la géométrie et les données utiles à la résolution du problème.
- **un solveur** qui résout les équations du problème suivant des techniques numériques en tenant compte des données du pré-processeur. La méthode des éléments finis et celle des différences finies sont les plus utilisées. Mais compte tenu de l'évolution des ordinateurs, la méthode des volumes finis se développe plus vite. Pour une présentation détaillée de ces méthodes, le lecteur pourra également se reporter à l'ouvrage *An introduction to Computational Fluid Dynamics (Versteeg et Malalasekera 1995).*
- **un post-processeur** qui sert à visualiser les résultats.

II.2.2. Constitution du logiciel CFD'ACE

CFD'ACE est constitué de trois logiciels interactifs présentés Figure II-5 qui sont ici détaillés.

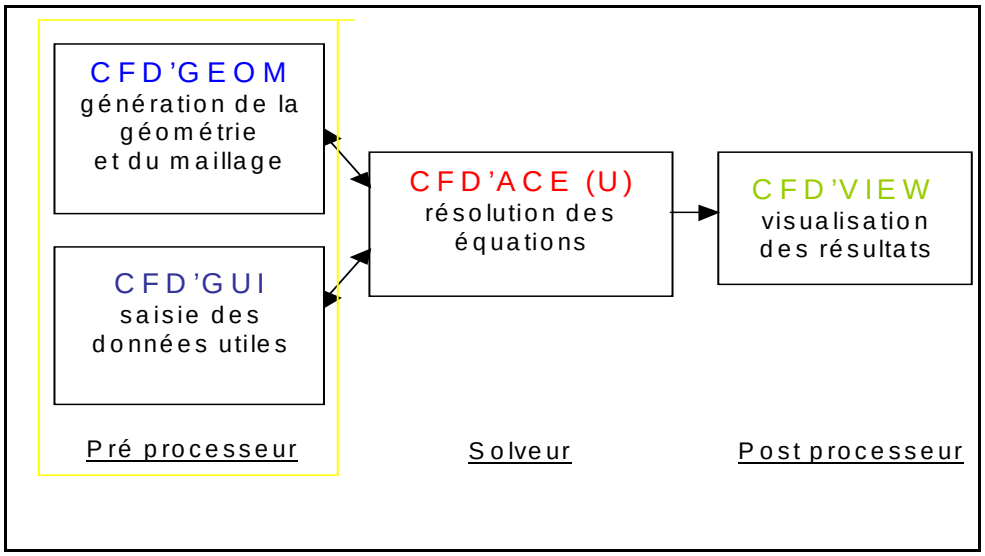


Figure II-5. *Interactions et rôles des trois logiciels constitutifs de CFD'ACE.*

II.2.2.1. GEOM

Il correspond à un outil de CAO et à un **mailleur**. Il permet en effet de générer **la géométrie** des différentes parties de la machine que l'on modélise, mais aussi de créer le maillage correspondant. Le maillage a une grande importance dans les calculs.

Le langage de programmation de GEOM est Python. Au fur et à mesure que l'on construit la géométrie, le programme correspondant s'affiche à l'écran. Pour faire varier un paramètre, des modifications peuvent être effectuées directement dans le programme sans recommencer toute la géométrie.

Quand on entre la géométrie du système à étudier en deux ou trois dimensions, les surfaces ou les volumes qui intéressent la résolution numérique doivent être divisés en sous domaines. On fabrique ainsi un maillage constitué de cellules. Le centre de chaque cellule correspond à un nœud. Trois types de maillage peuvent être réalisés :

- Un maillage structuré où l'arrangement des mailles est ordonné. Il est adapté pour modéliser des objets de forme simple.

- Un maillage non-structuré où les mailles ont des formes quelconques (tétraédriques, octaédriques …) lorsqu'on réalise une géométrie pour des objets de forme complexe.
- Un maillage hybride est à la fois composé de mailles structurées et non-structurées.

Ces différents types de maillage seront utilisés dans les modélisations réalisées dans le présent travail de thèse.

II.2.2.2. CFD-ACE (U)

C'est le **solveur** où les phénomènes physiques à modéliser, les propriétés des éléments constitutifs du système (fluide, gaz, solide), les conditions aux limites et les conditions initiales doivent être spécifiées. Le solveur utilise **la méthode des volumes finis** pour résoudre par des méthodes itératives les systèmes d'équations différentielles servant à la modélisation du procédé. Cette méthode est expliquée dans le chapitre II.3 qui suit.

II.2.2.3. CFD'VIEW

C'est le **post-processeur**. Son interface propose différentes possibilités d'apprécier **les résultats** (contrastes, champs de vecteurs, courbes, etc.).

Références du chapitre II

AnnealSys : www.annealsys.com .

CFD Research Corporation : http://www.cfdrc.com/ .

ESI group : www.esi-group.com .

Rauf, S., L.A. Gochberg, P.L.G. Ventzek, E.J. McInerney, (2005), *Computer simulation accelerates equipment and process design*, Semiconductor International, 11/01/2005.

Versteeg, H.V., W. Malalasekera, (1995), *An introduction to computational fluid dynamics, The finite volume method*, Longman, Londres.

CHAPITRE III

Modélisation du système thermique rapide

L'objectif de ce chapitre est de présenter ***la modélisation du système thermique rapide*** *qui a été réalisée. Deux modèles ont été réalisés : un en deux dimensions et l'autre en trois dimensions.*

Dans un premier temps, ces modèles sont présentés.

La construction de leurs géométries est ensuite décrite. Puis, les équations et les données sont détaillées. Comme le chauffage du substrat se fait principalement par rayonnement, la résolution de ***l'équation de transfert radiatif*** *est présentée.*

Dans une dernière partie, la résolution numérique des équations et la visualisation des résultats des calculs sont montrées.

III.1. Présentation de la modélisation

La modélisation a d'abord été réalisée en **deux dimensions**. La modélisation en **trois dimensions** a été faite après pour pouvoir comparer les résultats. Ces deux modèles sont présentés sur la Figure III-1. Les différentes parties du four de recuit rapide mentionnées au chapitre II.1 y sont indiquées.

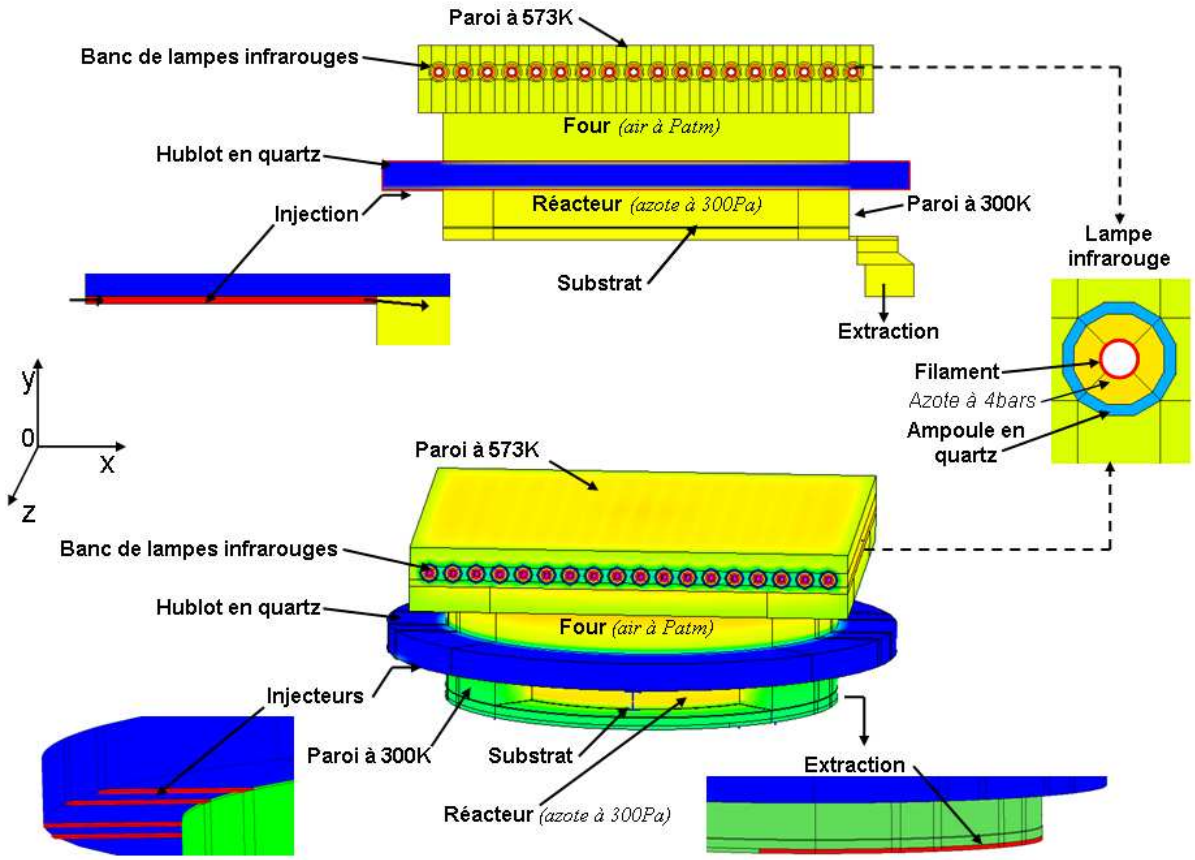


Figure III-1. *Modèles de l'AS-One 150 réalisés en deux et trois dimensions.*

La géométrie en deux dimensions correspond à une coupe dans le plan (Oxy).

Le four où sont disposées les lampes infrarouges contient de l'air à la pression atmosphérique.

Comme **le filament de la lampe** est constitué d'un nombre important de spires très rapprochées, sa représentation en trois dimensions a été approximée par **un cylindre** creux de température uniforme pour sa face externe. Des anneaux, répartis tous les 18 mm, soutiennent

le filament. Leur influence sur la température du filament et leur flux émis ont été négligés. Ces hypothèses se basent sur les résultats de la thèse de Caratini *(Caratini 1988)*. En effet, en déplaçant une photodiode délivrant un courant proportionnel au flux lumineux reçu le long d'une lampe infrarouge allumée dans un réacteur, on s'aperçoit que le rayonnement reçu décroit du centre vers l'extérieur de la lampe avec des oscillations toutes les 25 mm. Le filament est soutenu périodiquement par des anneaux de tungstène distants de 25 mm. Comme ces anneaux représentent une masse thermique en contact aussi avec le quartz, au voisinage de ceux-ci l'émission est plus faible La décroissance du centre à l'extérieur n'est que de 5%. L'ordre de grandeur des oscillations est inférieur à 2% entre deux zones voisines séparées par un anneau de soutien. Ces variations sont donc relativement faibles. Le rayonnement est donc **quasi uniforme** le long de la lampe, ce qui justifie l'hypothèse d'un flux uniforme émis.

Comme la modélisation en deux dimensions est une coupe dans le plan (Oxy), le filament est représenté par **un cercle**.

Le réacteur contient de l'azote à la pression de 300 Pa.

Les quatre injecteurs sont représentés dans le modèle en trois dimensions. Dans le cas du modèle en deux dimensions, un seul injecteur peut être représenté à cause de la vue en coupe. De même pour l'extraction qui s'étend sur 105°, elle est représentée dans le plan.

III.2. Réalisation des géométries

La construction des géométries est une étape longue, surtout pour le cas du modèle en trois dimensions. Elle nécessite une réflexion particulière car le choix du maillage va conditionner la bonne résolution numérique du problème.

Seule la géométrie du modèle en deux dimensions est ici décrite. Les étapes de sa construction sont précisées dans l'Annexe 3.

Pour la réalisation de la géométrie en trois dimensions, la construction n'est pas détaillée mais son **raisonnement** est donné. À partir de ce dernier, il est facile de retrouver les détails de la construction.

III.2.1. Modèle en deux dimensions

La Figure III-2 montre la géométrie réalisée avec son maillage. Dans son ensemble, ce dernier est régulier. Les cellules sont de forme carrée avec un côté proche de 2,5 mm. Cette taille ni trop grande ni trop faible permet de limiter les erreurs de discrétisation et d'arrondi de la résolution numérique.

À signaler que le maillage dans la région située entre l'injecteur et le bord gauche du substrat est légèrement distordu car il est plus resserré dans l'injecteur. En effet, le maillage est plus fin pour l'injecteur à cause de ses dimensions inférieures. Si on considère des écoulements, ils seront donc pris en compte avec précision.

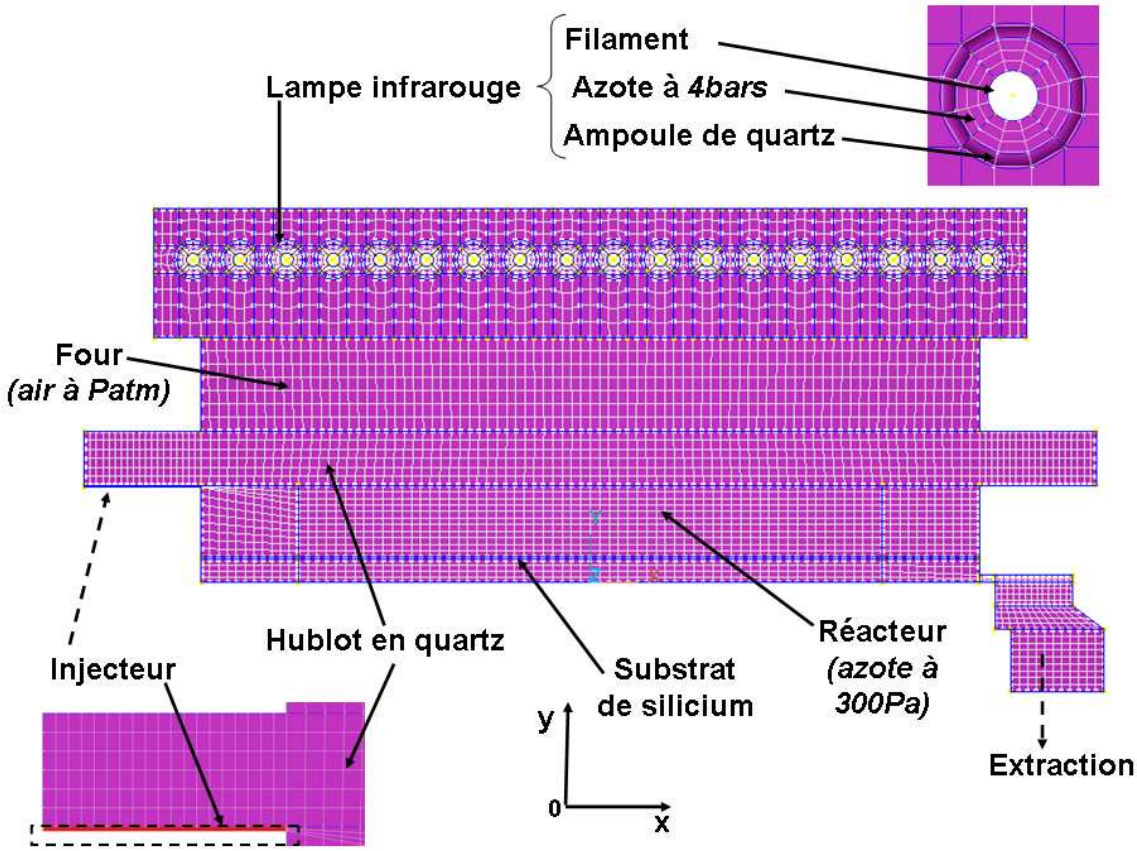


Figure III-2. *Géométrie en deux dimensions de l'AS-One 150 avec son maillage.*

III.2.2. Modèle en trois dimensions

La Figure III-3 donne les différentes parties à considérer dans la construction. La construction est réalisée à partir d'une forme de base sauf pour la partie supérieure du four.

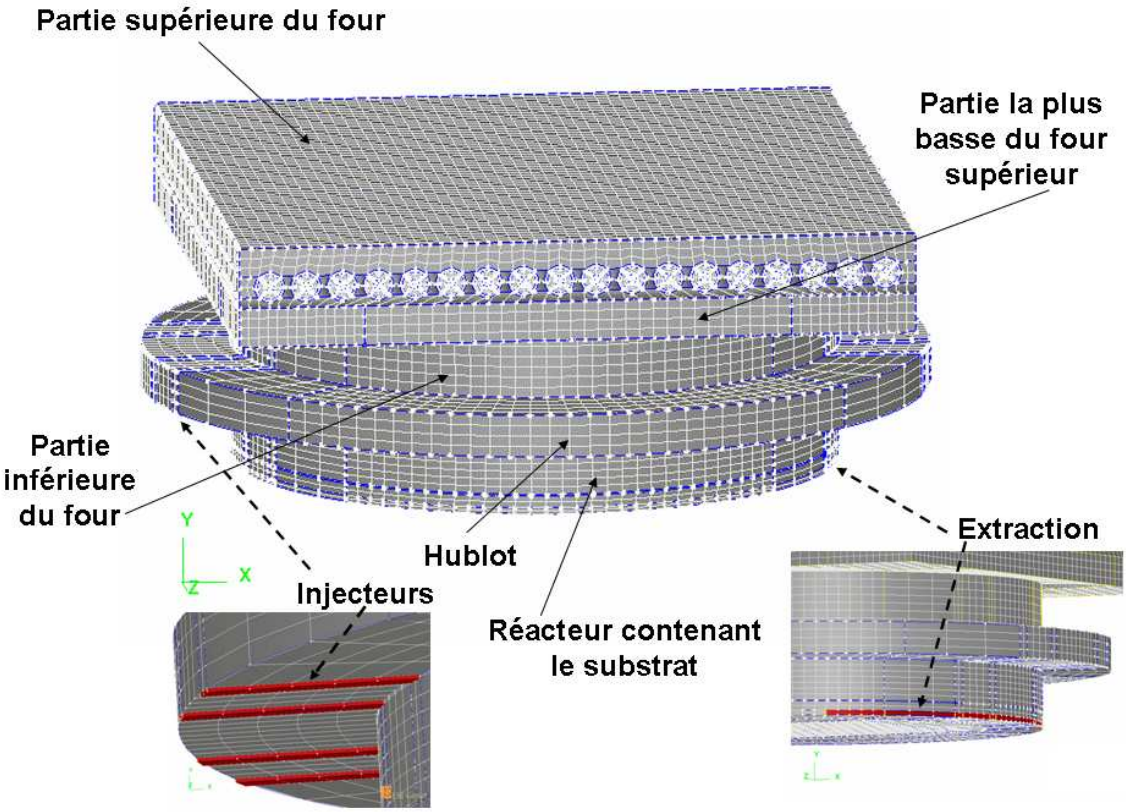


Figure III-3. *Géométrie en trois dimensions de l'AS-One 150 avec son maillage et les différentes parties de la construction.*

La forme de base donnée par la Figure III-4 a un diamètre égal à celui du réacteur. Le disque en rouge à l'intérieur a le diamètre du substrat. Le carré qui y est inscrit permet d'avoir des cellules de tailles équilibrées pour le substrat. La taille des cellules est choisie ni trop grande ni trop faible pour limiter les erreurs de discrétisation et d'arrondi de la résolution numérique. Il faut bien penser à cette répartition car elle va conditionner la précision des résultats calculés de la répartition en température. Pour information, chacune des cellules a un volume proche de 27 mm^3 (cube de 3 mm de côté). Il y a peu de cellules déformées.

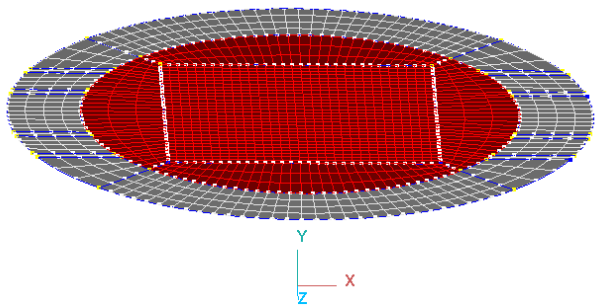


Figure III-4. *Forme de base avec anticipation sur le maillage du substrat (en rouge).*

La réalisation du réacteur, du substrat, du hublot, des injecteurs et de l'extraction est effectuée à partir de la forme de base. Le réacteur, le substrat et le hublot sont réalisés par extrusion linéaire de la forme de base. Des adaptations sont nécessaires pour les autres parties :

- La partie la plus basse du réacteur où il faut adapter une surface sur le côté s'étendant sur 105° pour l'extraction.
- La partie la plus haute du réacteur où il y a les quatre injecteurs à ajouter sur le côté opposé à l'extraction.
- Le hublot qui a un diamètre supérieur. Une couronne tenant compte des injecteurs situés en-dessous est donc rajoutée à la forme de base. La nouvelle forme est extrudée linéairement pour réaliser le hublot.

Pour la réalisation du four, il faut distinguer la partie basse de la partie haute (Figure III-3). La partie basse du four est également réalisée par extrusion linéaire de la forme de base. Quant à la partie supérieure, elle peut se diviser en deux parties parallélépipédiques :

- La partie haute contenant le banc de lampes. Une lampe a d'abord été réalisée, puis translatée et dupliqué dix-sept fois pour obtenir le banc de dix-huit lampes. Le parallélépipède correspondant à cette partie haute est alors comblé par des petits blocks de forme quasi-parallélépipédiques.

- La partie basse qui fait la jonction avec le four inférieur. Dans cette partie, il faut raccorder le maillage de la forme de base à celui de la forme rectangulaire de la partie haute. Ce passage est décrit par la Figure III-5 : le carré de la forme de base devient plus grand pour réaliser un block qui est entouré de quatre autres blocks ayant une forme prismatique. Ces derniers ont tous une de leur face qui est dégénérée. Comme le four supérieur est rectangulaire, des blocks sont ajoutés sur les côtés.

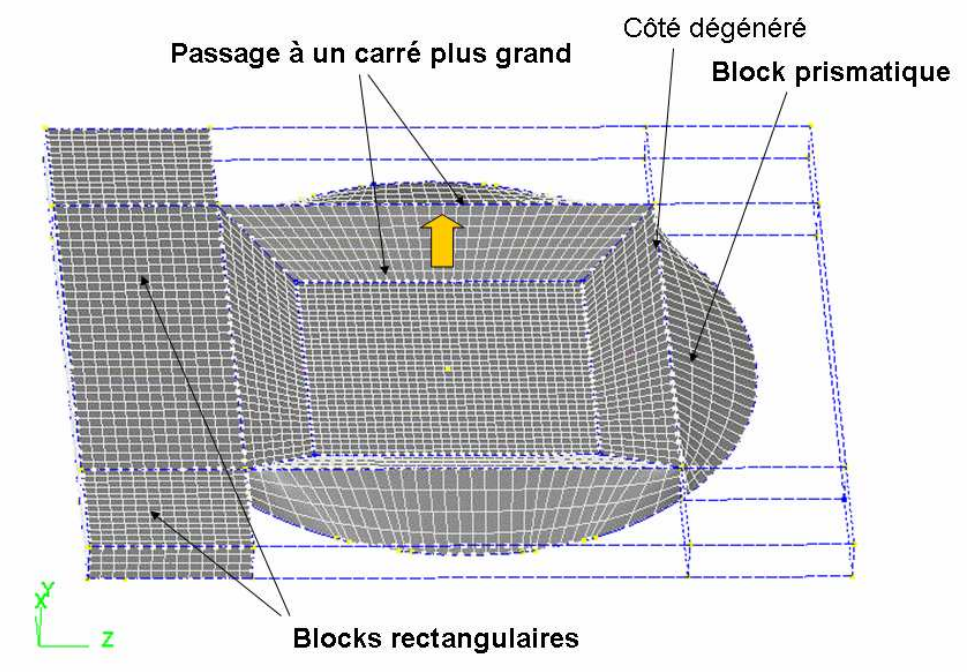


Figure III-5. *Jonction entre le four inférieur et supérieur.*

III.3. Équations et données de la modélisation

La modélisation de chauffage du substrat de silicium par les lampes infrarouges dans le système thermique rapide nécessite de spécifier les équations de conservation qui régissent :

- les **écoulements** en raison de la présence des gaz (l'azote dans le réacteur et les lampes, l'air dans le four)
- les différents **modes de transfert de chaleur**. Ces modes sont la convection, la conduction et le **rayonnement**. Comme le transfert par rayonnement est prépondérant dans le chauffage du substrat de silicium, le paragraphe III.4 lui sera consacré.

III.3.1. Présentation de la forme générale de l'équation de conservation

Les équations de conservation ou équations de transport général gouvernent la plupart des phénomènes d'écoulements et de transferts thermiques. **La forme générale d'une équation de conservation** est :

$$\frac{\partial(\rho\phi)}{\partial t} + div\left(\rho\phi\vec{V}\right) = div\left(\Gamma.\overrightarrow{grad}\,\phi\right) + S_\phi \qquad \text{(III-1)}$$

où

$\frac{\partial(\rho\phi)}{\partial t}$ est le terme transitoire ;

$div\left(\rho\phi\vec{V}\right)$ est le terme de convection ;

$div\left(\Gamma.\overrightarrow{grad}\,\phi\right)$ est le terme de diffusion ;

S_ϕ est le terme de source ;

ϕ correspond à la variable étudiée, ρ à la densité, $\vec{V}$ à la vitesse et Γ est le coefficient de diffusion.

Le principe de **la méthode des volumes finis** consiste à intégrer l'équation III-1 sur chaque cellule du domaine. Une telle cellule porte le nom de surface ou volume de contrôle. La méthode des volumes finis est décrite dans l'ouvrage *Numerical heat transfer and fluid flow (Patankar 1980).*

III.3.2. Modélisation des écoulements

III.3.2.1. Lois de conservation

Les écoulements sont régis par les lois de conservation suivantes :

- **la conservation de la masse d'un fluide**

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + div\left(\rho \vec{V}\right) = 0 \qquad \text{(III-2)}$$

où

$\frac{\partial \rho}{\partial t}$ est la variation de la densité ρ par rapport au temps ;

$div\left(\rho \vec{V}\right)$ est le terme convectif.

- **la seconde loi de Newton** : la masse multipliée par la variation de la vitesse par rapport au temps est égale à la somme des forces appliquées sur le fluide. Les forces de surface (forces de pression) et de volumes (forces de gravité, centrifuge etc.) peuvent s'exercer sur le fluide. Projetée sur l'axe des x, on obtient :

$$\frac{\partial(\rho u)}{\partial t} + div\left(\rho \vec{V} u\right) = \frac{\partial(-p + \tau_{xx})}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{yx}}{\partial y} + \frac{\partial \tau_{zx}}{\partial z} + S_{M_x} \qquad \text{(III-3)}$$

où

p est la pression statique ;

τ_{ij} est le tenseur des contraintes ;

u est la composante de la vitesse du fluide suivant x ;

S_{M_x} est le terme de source.

Pour décrire les écoulements des fluides visqueux incompressibles présents dans le réacteur, l'équation III-3 peut être réécrite. C'est **l'équation de Navier-Stokes**. Sa projection sur l'axe des x donne :

$$\frac{\partial(\rho u)}{\partial t} + div\left(\rho \vec{V} u\right) = -\frac{\partial p}{\partial x} + div\left(\mu \overrightarrow{grad}\, u\right) + S_{M_x} \qquad \text{(III-4)}$$

où

μ désigne la viscosité dynamique du fluide.

Les démonstrations des expressions III-2 à III-4 à partir de l'équation de conservation sont détaillées dans l'ouvrage *An introduction to computational fluid dynamics (Versteeg et Malalasekera 1995).*

La validité de l'équation de Navier-Stokes nécessite que le milieu soit continu. Le calcul du nombre de Knudsen doit être pour cela inférieur à 0,001 *(Kersch et Morokoff 1995).* Cette validité est respectée dans tous les cas du modèle puisque pour l'azote dans le réacteur le nombre de Knudsen est de l'ordre de 0,001. Pour l'air dans le four et l'azote des lampes, ce nombre est respectivement de l'ordre de 10^{-6} et de 10^{-5}.

III.3.2.2. Données concernant les écoulements

La modélisation d'un écoulement requiert la spécification de la densité ρ, de la viscosité μ et de la pression statique p. Ces valeurs sont indiquées dans le Tableau III-1 pour l'azote et l'air. Le modèle du gaz parfait est considéré dans le réacteur où l'azote est à la faible pression de 300 Pa et donc l'interaction des particules est peu importante. Dans le four et les lampes, ce choix constitue une approximation suffisante. L'air dans le four est à la pression atmosphérique. La pression de l'azote dans les lampes est élevée (400 000 Pa soit 4 bars) pour éviter l'évaporation du filament de tungstène.

Les viscosités sont fonctions de la température T. Les valeurs proviennent du site http://webbook.nist.gov/chemistry/fluid/.

À signaler que la constante de gravitation a pour valeur 9,81 $m.s^{-2}$. Elle est orientée suivant l'axe y.

Composition	**État**	**Masse molaire (en $g.mol^{-1}$)**	**Viscosité cinématique (en $m^2.s^{-1}$)**	**Pression (en $N.m^{-2}$)**
Air du four	Gaz supposé parfait	29	$8.10^{-6} + 4\ 10^{-8}\ T$	100 000
Azote du réacteur		28	$7.10^{-6} + 4.10^{-8}\ T - 6.10^{-12}\ T^2$	300
Azote des lampes				400 000

Tableau III-1. *Caractéristiques des gaz.*

Au niveau du réacteur, l'injection et l'extraction de l'azote sont à la pression du réacteur de 300 Pa (Tableau III-2). La condition aux limites « Inlet » signifie que l'injection des gaz se fait au travers de la surface et la condition aux limites « Outlet » que l'éjection des gaz se fait par cette surface. Les gaz sont injectés et extraits à la température ambiante de 300 K.

Désignation de la partie	**Conditions d'écoulement**		
	Type	**Pression (en N.m^{-2})**	**Température (en K)**
Injection (réacteur)	Inlet	300	300
Extraction du réacteur	Outlet	300	300

Tableau III-2. *Conditions aux limites d'injection et d'extraction.*

III.3.3. Modélisation des transferts de chaleur par conduction et convection

III.3.3.1. Équation de transfert de chaleur

L'équation de transfert de chaleur permet de rendre compte de la transmission de chaleur par **conduction** dans les solides et par **convection** dans les gaz. La résolution de l'équation de conservation de l'énergie, équation de conservation de l'enthalpie totale, permet d'évaluer les processus de transfert thermique mis en jeu pour le système considéré. La démonstration de l'expression III-5 à partir de l'équation III-1 est également détaillée dans l'ouvrage *An introduction to Computational Fluid Dynamics (Versteeg et Malalasekera 1995)*. Cette équation a pour expression :

$$\frac{\partial(\rho h_0)}{\partial t} + div\left(\rho \vec{V} h_0\right) = div\left(k.\overrightarrow{grad\ T}\right) + \frac{\partial p}{\partial t} + \left[\frac{\partial(u\tau_{xx})}{\partial x} + \frac{\partial(u\tau_{yx})}{\partial y} + \frac{\partial(u\tau_{zx})}{\partial z}\right] + \left[\frac{\partial(v\tau_{xy})}{\partial x} + \frac{\partial(v\tau_{yy})}{\partial y} + \frac{\partial(v\tau_{zy})}{\partial z}\right] + \left[\frac{\partial(w\tau_{xz})}{\partial x} + \frac{\partial(w\tau_{yz})}{\partial y} + \frac{\partial(w\tau_{zz})}{\partial z}\right] + S_h \quad \text{(III-5)}$$

où

l'enthalpie totale massique est :

$$h_0 = i + \frac{p}{\rho} + \frac{1}{2}\left(u^2 + v^2 + w^2\right) \quad \text{(III-6)}$$

i est l'énergie interne massique. C'est une variable qui dépend de la densité ρ et de la température T ;

u, v, w sont les composantes de la vitesse du fluide suivant *x*, *y* et *z* ;

k est la conductivité thermique ;

p est la pression statique ;

τ_{ij} est le torseur de viscosité ;

S_h représente une variable contenant les termes provenant de sources de chaleur additionnelles comme par exemple ceux d'une source radiative ou d'une réaction chimique.

III.3.3.2. Données de la modélisation

La résolution de l'équation III-4 requiert la spécification des densités ρ des solides données dans le Tableau III-3, ainsi que celles des gaz avec leurs pressions statiques p indiquées dans le précédent Tableau III-1.

Désignation	**Composition**	**État**	**Densité (en kg.m^{-3})**
Filament	Tungstène	Solide	19 300
Ampoule lampe	Quartz	Solide	2 649
Hublot	Quartz	Solide	2 649
Substrat	Silicium	Solide	2 329

Tableau III-3. *Caractéristiques des matériaux.*

La température initiale de la machine est la température ambiante de 300 K. Les propriétés thermiques que sont les capacités calorifiques et les conductivités thermiques sont souvent des expressions polynomiales de la température T. L'exemple du quartz qui sera utilisé par la suite (chapitre VI) est montré par la Figure III-6. Les propriétés des autres matériaux et gaz, sont indiquées dans l'Annexe 4. Signalons la provenance des données :

- la conductivité thermique du silicium *(Glassbrenner et Slack 1964)* et sa capacité calorifique *(Okhotin et al. 1972)* ;
- la conductivité thermique du quartz et sa capacité calorifique *(Sosman 1927)* ;
- pour les gaz (l'air et l'azote), elles proviennent du site http://webbook.nist.gov/chemistry/fluid/.

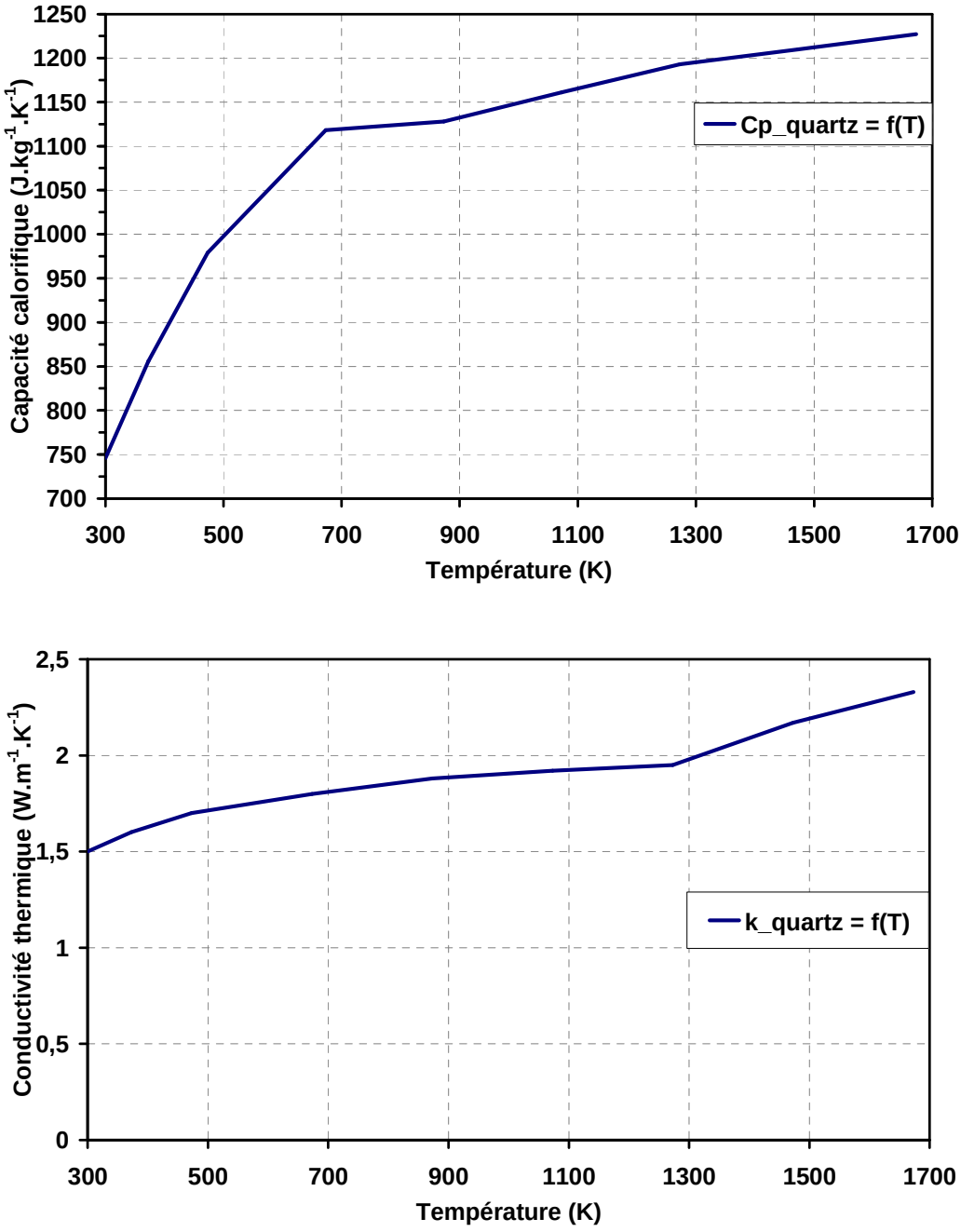


Figure III-6. *Capacité calorifique et conductivité thermique du quartz (Sosman 1927).*

III.4. Cas du transfert de chaleur par rayonnement

La résolution de l'équation de transfert radiatif est réalisée en connaissant **les propriétés optiques des surfaces** et en utilisant **la méthode Monte-Carlo** *(Mazumder et Kersch 2000).*

III.4.1. Équation de transfert radiatif

L'équation de transfert radiatif pour un milieu qui émet, absorbe et diffuse de l'énergie par rayonnement (Figure III-7) est présentée dans le chapitre 8 de l'ouvrage *Radiative Heat Transfer (Modest 1993).* Elle s'écrit en régime permanent :

$$\Omega.\overrightarrow{grad}\left(I(r,\Omega)\right) = -(\kappa+\sigma)I(r,\Omega) + \kappa I_b(r) + \frac{\sigma}{4\pi}\int_{\Omega'=4\pi} I(r,\Omega).\Phi(\Omega'\rightarrow\Omega)d\Omega' \quad \text{(III-7)}$$

où

Ω est la direction de propagation du faisceau ;

$I(r,\Omega)$ est l'intensité du rayonnement. Elle est fonction de la position r et de la direction Ω ;

κ et σ sont respectivement le coefficient d'absorption et de diffusion ;

$I_b(r)$ est l'intensité du corps noir à la température du milieu ;

$\Phi(\Omega)$ est une fonction de phase du transfert de l'énergie de la direction d'arrivée Ω' à la direction de sortie Ω' ;

$\Omega.\overrightarrow{grad}\left(I(r,\Omega)\right)$ est le gradient d'intensité dans la direction de propagation Ω ;

$-(\kappa+\sigma)I(r,\Omega)$ représente respectivement les pertes dues à l'absorption κ et à la diffusion σ ;

$\kappa I_b(r)$ correspond à l'émission du corps ;

$\frac{\sigma}{4\pi}\int_{\Omega'=4\pi} I(r,\Omega).\Phi(\Omega'\rightarrow\Omega)d\Omega'$ est le gain dû à la diffusion.

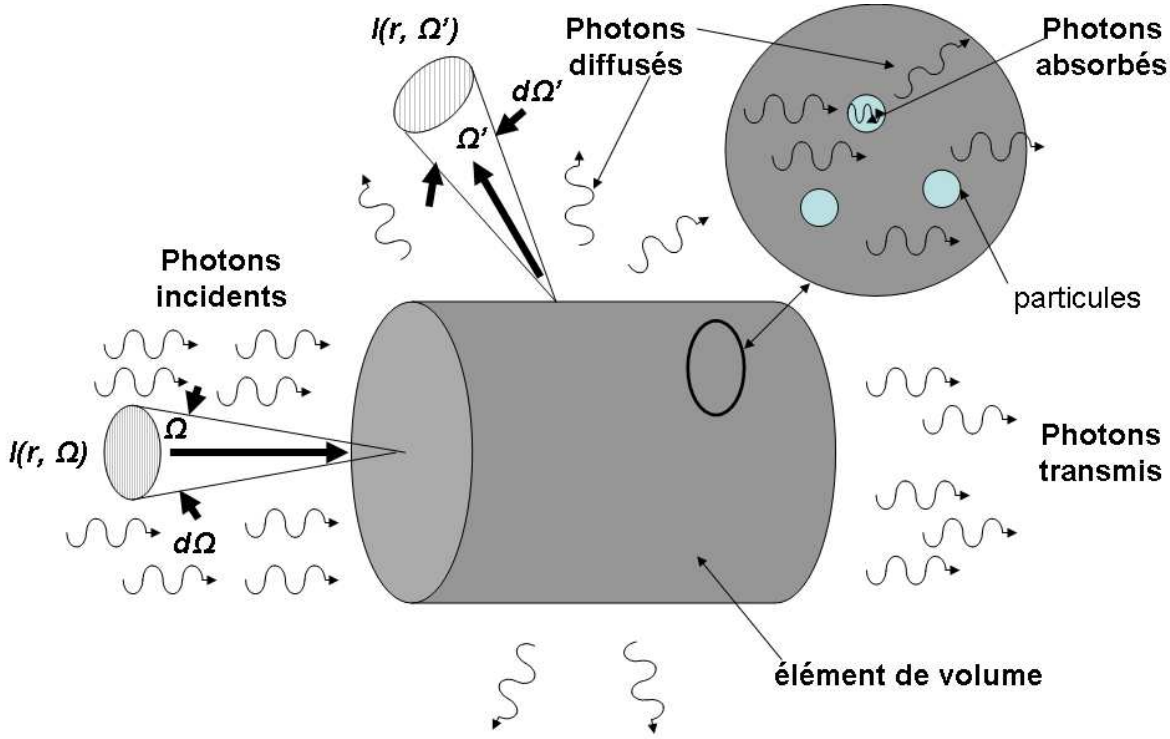


Figure III-7. *Transfert de chaleur par rayonnement pour un élément de solide qui absorbe et diffuse.*

À la surface, on a pour l'intensité :

$$I(r,\Omega) = \varepsilon I_b(r) + \frac{\rho}{\pi} \int_{n.\Omega'} \left| n.\Omega' \right| I(r,\Omega')\, d\Omega' \qquad \text{(III-8)}$$

avec

$I(r,\Omega)$ qui représente l'intensité de l'énergie du rayonnement quittant la surface ;

ε est l'émissivité de la surface ;

ρ est la réflectivité de la surface ;

$\vec{n}$ est un vecteur unitaire normal à la surface.

III.4.2. Principe de la résolution de l'équation de transfert radiatif

L'équation de transfert radiatif est résolue en considérant les rayons émis par chacune des surfaces du système. Ces rayons émis d'une surface sont tracés jusqu'à ce qu'ils soient absorbés par la même surface ou une autre. Les surfaces portent le nom de « **patch** ».

L'énergie radiative s'échange alors par **émission** ou **absorption de rayonnements** électromagnétiques. Ce transfert thermique ne nécessite pas de support matériel.

La solution de l'équation de transport radiatif III-9 correspond donc à un échange d'énergie entre les surfaces appelées « patchs ». Le flux de chaleur radiatif pour un patch *i* est le bilan des rayonnements incidents provenant de tous les autres patchs *j* et de sa propre émission. La **solution discrète** a alors pour expression :

$$Q_i = q_i A_i = \sum_{j=1}^{N_S} \left(M_{ij} - \delta_{ij} \varepsilon_j \right) \sigma T_j^4 A_j \qquad \text{(III-9)}$$

où

Q_i est le flux de chaleur ;

q_i est la densité de flux de chaleur ;

A_i est l'aire de la surface considérée ;

M_{ij} est la matrice d'échange ;

δ_{ij} est le symbole de Kronecker ;

ε_j est l'émissivité du patch *j* ;

σ est la constante de Stefan-Boltzmann qui vaut $5{,}669.10^{-8}$ $W.m^{-2}.K^{-4}$;

T_j est la température moyenne du patch j.

Un paquet d'énergie ou photon, quand il est émis d'un patch *i*, subit plusieurs événements avant d'être absorbé par une surface. Quand le rayonnement frappe un corps, les processus d'**absorption**, de **réflexion** (diffuse, spéculaire ou partiellement spéculaire) et de **transmission** peuvent se produire *(Siegel et Howell 1992)*. Ces processus sont schématisés sur la Figure III-8.

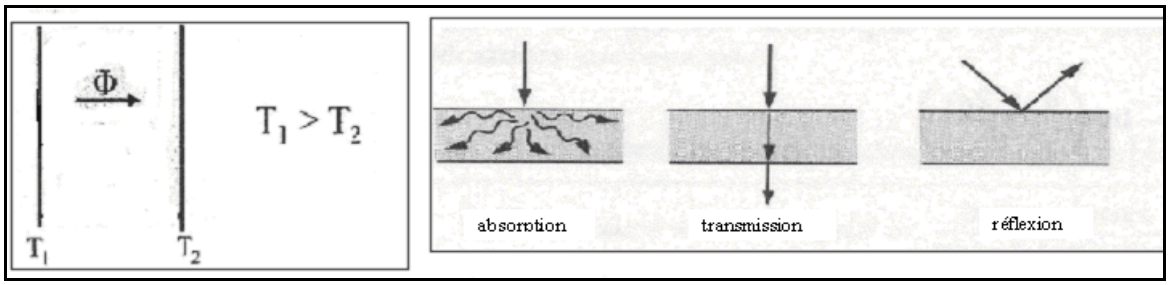


Figure III-8. *Flux radiatif (à gauche) et les trois processus relatifs au rayonnement (à droite).*

Chacun de ces événements va dépendre de plusieurs facteurs : **la longueur d'onde du rayon**, **la direction de propagation du rayon**, **l'orientation des patchs rencontrés** et **leurs caractéristiques optiques**. Il est donc nécessaire de déterminer tous ces facteurs.

La détermination des propriétés optiques des surfaces est détaillée ci-après. La détermination des longueurs d'onde, de la direction et du tracé des rayons est réalisée à l'aide de **la méthode Monte-Carlo**. Elle sera présentée juste après.

III.4.3. Détermination des propriétés optiques des surfaces

Les propriétés optiques d'un matériau peuvent être décrites à l'aide de **l'indice de réfraction complexe** $\tilde{n}_\lambda$. Il est généralement dépendant de **la longueur d'onde** λ du rayonnement incident et s'exprime alors comme suit :

$$\tilde{n}_\lambda = n_\lambda - ik_\lambda \qquad \text{(III-10)}$$

où

n_λ est l'indice de réfraction ;

k_λ est l'indice d'absorption (ou coefficient d'extinction).

Pour bon nombre de matériaux, l'indice de réfraction complexe dépend également de la température T. Des tableaux de valeurs sont disponibles. Des interpolations linéaires peuvent être réalisées entre deux valeurs ou une courbe de tendance polynomiale peut être trouvée. L'ouvrage *Handbook of Optical Constants of Solids (Palik 1998)* constitue une base de données pour ces indices. Cet ouvrage est très complet pour les matériaux qui interviennent dans les applications concernant les semi-conducteurs comme celle de la présente étude. Dans notre cas, pour les indices de réfraction n_λ et l'indice d'absorption k_λ, la courbe de tendance de forme polynomiale ayant la forme suivante peut être considérée :

$$n_\lambda = n_0 + n_1\theta + n_2\theta^2 + n_3\theta^3 \quad \text{(III-11)}$$

$$k_\lambda = \left(k_1 + k_2\theta + k_3\theta^2\right).\exp[k_0\theta] \quad \text{(III-12)}$$

où

$n_0, n_1, n_2, n_3, .k_0, k_1, k_2, k_3$ sont les coefficients des monômes ;

θ correspond à la température sans dimension égale à $\frac{T-300}{1000}$.

Une fois que l'indice de réfraction complexe a été calculé, l'**absorptivité**, l'**émissivité,** la **réflectivité** et le **coefficient de transmission** des différentes surfaces peuvent être déduits.

Les surfaces du système thermique rapide étudié peuvent être classées comme suit :

- cas des **solides semi-transparents de géométrie plane parallèle** (substrat en silicium, hublot en quartz, quartz de l'ampoule des lampes infrarouges)
- cas des **surfaces opaques** (parois du réacteur, filament de tungstène, injection et extraction des gaz).

III.4.3.1. Cas des solides semi-transparents de géométrie plane parallèle

L'émissivité, la réflectivité et la transitivité sont calculées en considérant :

a) plusieurs **hypothèses** présentées dans l'ouvrage *Transport Simulation in Microelectronics (Kersch et Morokoff 1995)* sous le nom d'approximation de McMahon
b) la **loi de Snell** et les **formules de Fresnel** présentées par exemple dans l'ouvrage *Ellipsometry and Polarized Light (Azzam et Bashara 1977)*
c) ainsi qu'une **approche matricielle** détaillée également dans l'ouvrage *Ellipsometry and Polarized Light (Azzam et Bashara 1977).*

III.4.3.1.a. Hypothèses (approximation de McMahon)

L'approximation de McMahon sert à résoudre l'équation de transfert radiatif pour le cas d'une géométrie ayant des surfaces planes parallèles. Les **hypothèses** de cette approximation sont les suivantes :

- Les sources et puits de rayonnement sont considérés au niveau des surfaces des solides comme dans le cas d'un solide opaque. Par conséquent, le transfert de rayonnement se fait entre les surfaces.
- Le matériau semi-transparent est homogène : son absorptivité est notamment constante.
- Par conséquent, comme l'absorptivité suivant la longueur d'onde λ, notée α_λ, est constante dans tout le matériau, le coefficient de transmission τ entre deux points x et y dépend seulement de la distance traversée à travers le matériau mais pas de la direction (expression II-13). L'absorptivité α_λ est liée au coefficient d'extinction k_λ par la relation II-14.

$$\tau = e^{-|x-y|\alpha_\lambda} \qquad \text{(III-13)}$$

avec

$$\alpha_\lambda = \frac{4\pi k_\lambda}{\lambda} \qquad \text{(III-14)}$$

- Les effets aux limites sont ignorés.

III.4.3.1.b. Loi de Descartes et formules de Fresnel

Le rayonnement émis par les lampes infrarouges dans le système thermique rapide est incohérent. Les **vibrations** qui le composent ont des phases et des amplitudes différentes en un point de l'espace et dans le temps. On considère alors que ce rayonnement est formé de deux vibrations transversales. Ces deux vibrations sont polarisées rectilignement dans deux directions prises arbitrairement, une parallèle au plan d'incidence notée *p* et une autre perpendiculaire à celui-ci notée *s*. Les coefficients complexes de Fresnel de l'amplitude de la réflexion et de la transmission pour les deux vibrations *p* et *s* peuvent être calculés en utilisant les formules de Fresnel et la loi de Snell *(Azzam et Bashara 1977)*.

La loi de Snell est illustrée par le schéma de la Figure III-9. Elle donne la relation entre l'angle d'incidence θ_1 et l'angle de réfraction θ_2 pour un rayon incident réfracté lors de son passage du milieu diélectrique d'indice de réfraction n_λ à celui d'indice de réfraction n'_λ :

$$n_\lambda \sin\theta_1 = n'_\lambda \sin\theta_2 \qquad \text{(III-15)}$$

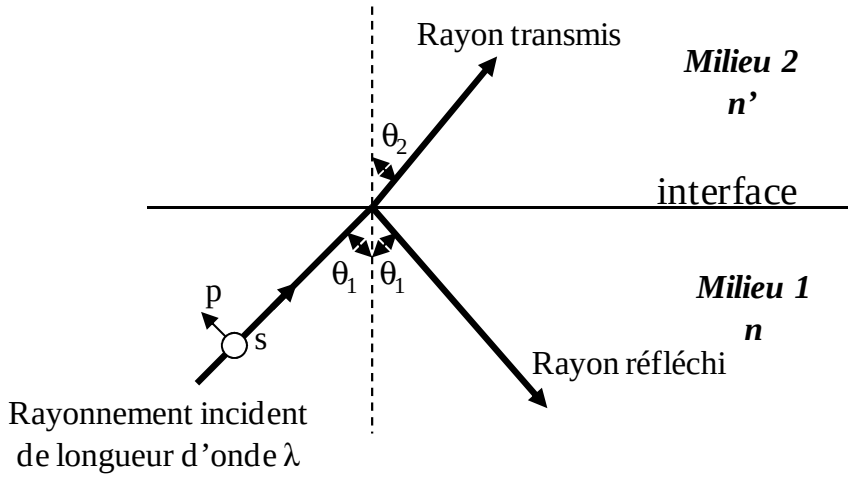


Figure III-9. *Réfraction et réflexion d'un rayon incident à l'interface entre deux milieux d'indices différents.*

Les formules de Fresnel réarrangées donnent les rapports entre les amplitudes du champ électrique de l'onde réfléchie ou transmise et celle du champ électrique de l'onde incidente pour les composantes polarisées parallèlement et perpendiculairement au plan d'incidence. Ces formules sont déduites des équations de Maxwell *(Pérez 2002)*. La réflectivité ρ à la surface est alors :

$$\rho = \frac{1}{2}\left(\frac{\tan^2(\theta_1-\theta_2)}{\tan^2(\theta_1+\theta_2)} + \frac{\sin^2(\theta_1-\theta_2)}{\sin^2(\theta_1+\theta_2)}\right) \qquad \text{(III-16)}$$

Les solides semi-transparents de la modélisation ont la forme de **lames**. L'absorptivité, la réflectivité et le coefficient de transmission d'une lame s'expriment à partir de la réfléctivité ρ et du coefficient de transmission τ à l'interface entre la lame et le milieu extérieur *(Modest 1993) (Kersch et Morokoff 1995).*

La **réflectivité de la lame** se calcule en sommant les contributions de la réflectivité et du coefficient de transmission pour chacune des interfaces (schéma de la Figure III-10) :

$$R_{lame} = \rho_{12} + \rho_{23}(1-\rho_{12})^2\tau^2\left[1+\rho_{12}\rho_{23}\tau^2 + (\rho_{12}\rho_{23}\tau^2)^2 + \ldots\right] \qquad \text{(III-17)}$$

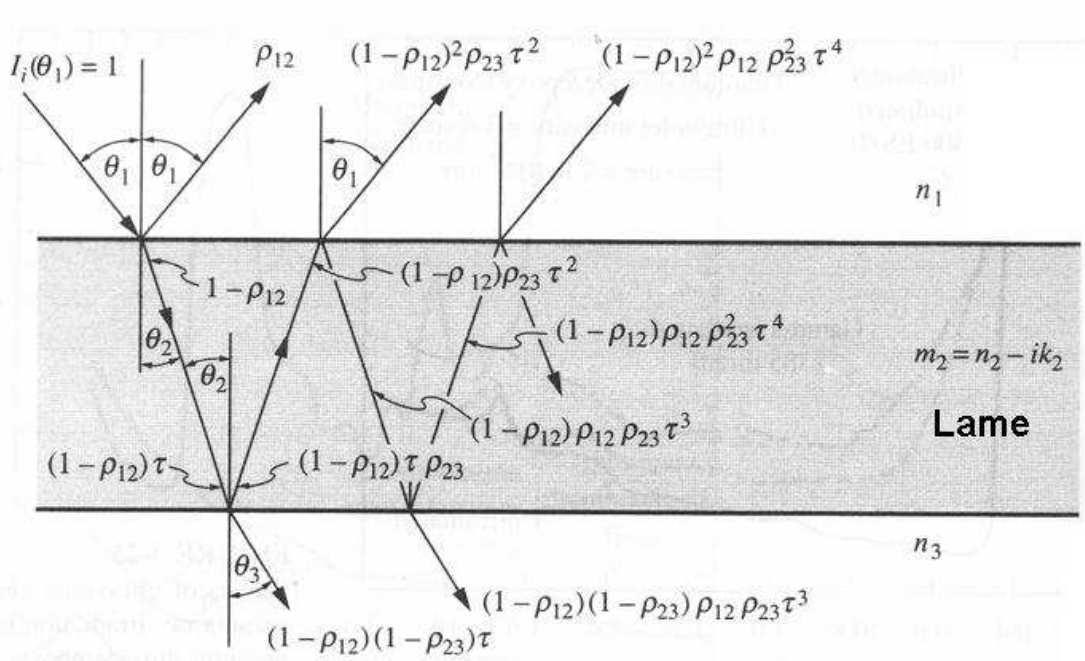


Figure III-10. *Réflectivité et coefficient de transmission d'une lame semi-transparente.*

Comme $\rho_{12}\rho_{23}\tau << 1$, il vient :

$$R_{lame} = \rho_{12} + \frac{\rho_{23}(1-\rho_{12})^2\tau^2}{1-\rho_{12}\rho_{23}\tau^2} \qquad \text{(III-18)}$$

De même, comme $\rho_{12}\rho_{23}\tau << 1$, il vient pour le **coefficient de transmission de la lame** :

$$T_{lame} = (1-\rho_{12})(1-\rho_{23})\tau\left[1+\rho_{12}\rho_{23}\tau^2 + (\rho_{12}\rho_{23}\tau^2)^2 + \ldots\right] \qquad \text{(III-19)}$$

$$T_{lame} = \frac{(1-\rho_{12})(1-\rho_{23})\tau}{1-\rho_{12}\rho_{23}\tau^2} \qquad \text{(III-20)}$$

L'**absorptivité de la lame** est alors :

$$A_{lame} = 1 - T_{lame} - R_{lame} \qquad \text{(III-21)}$$

$$A_{lame} = \frac{(1-\rho_{12})(1+\rho_{23}\tau)(1-\tau)}{1-\rho_{12}\rho_{23}\tau^2} \qquad \text{(III-22)}$$

Comme le milieu 1 et 3 ont les mêmes propriétés alors $\rho_{12} = \rho_{23} = \rho$, les expressions III-18, III-20 et III-22 deviennent :

$$R_{lame} = \rho\left[1 + \frac{(1-\rho)^2\tau^2}{1-\rho^2\tau^2}\right] \qquad \text{(III-23)}$$

$$T_{lame} = \frac{(1-\rho)^2\tau}{1-\rho^2\tau^2} \qquad \text{(III-24)}$$

$$A_{lame} = \frac{(1-\rho)(1-\tau)}{1-\rho\tau} \qquad \text{(III-25)}$$

L'**émissivité** donnée par l'égalité III-26 est obtenue en considérant **la loi de Kirchhoff**. Cette loi est par exemple présentée dans l'ouvrage *Fundamentals of Heat and Mass Transfer (Incropera et Dewitt 1996)* : l'émissivité hémisphérique totale $\varepsilon_{\theta,\lambda}$ est égale à l'absorptivité hémisphérique totale $\alpha_{\theta,\lambda}$ quelle que soit la longueur d'onde λ considérée (expression III-27) :

$$A_\lambda = \varepsilon_\lambda \qquad \text{(III-26)}$$

$$\alpha_{\theta,\lambda} = \varepsilon_{\theta,\lambda} \qquad \text{(III-27)}$$

III.4.3.1.c. Approche matricielle

Cette approche permet de calculer l'absorptivité, la réflectivité et le coefficient de transmission de la lame de manière plus simple. Elle est basée sur le fait qu'à l'interface entre deux milieux isotropes, la continuité des champs tangentiels peut être vue comme une transformation linéaire matricielle *(Azzam et Bashara 1977).*

À titre d'exemple, considérons la situation décrite sur la Figure III-9. Les amplitudes complexes pour le rayon incident E_1^+, réfléchi E_1^- et transmis E_2^+ sont reliés par la relation matricielle :

$$\begin{bmatrix} E_1^+ \\ E_1^- \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{1}{\tau} & \frac{\rho}{\tau} \\ \frac{\rho}{\tau} & \frac{1}{\tau} \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} E_2^+ \\ 0 \end{bmatrix} \qquad \text{(III-28)}$$

III.4.3.2. Cas des surfaces opaques

Un solide est considéré comme opaque quand son épaisseur l est très supérieure à la longueur d'absorption *(Kersch et Morokoff 1995)*. Le coefficient de transmission d'une de ces surfaces, qui s'exprime à l'aide de l'absorptivité α_λ, tend vers 0 :

$$T_{corps\ opaque} = e^{-l\alpha_\lambda} \to 0 \qquad \text{(III-29)}$$

Le solide peut donc réfléchir, absorber et émettre. La **réflectivité** et l'**absorptivité** sont alors reliées par :

$$R_{corps\ opaque} + A_{corps\ opaque} = 1 \qquad \text{(III-30)}$$

Comme indiqué par **la loi de Kirchhoff** (relations III-26 et III-27), l'**émissivité** de la surface est égale à son absorptivité pour une longueur d'onde λ donnée :

$$A_\lambda = \varepsilon_\lambda \qquad \text{(III-31)}$$

III.4.4. La méthode Monte-Carlo

La résolution de l'équation d'échange des radiations thermiques (équation III-8) consiste à tracer le parcours d'un photon depuis son point d'émission jusqu'à son point d'absorption. En réalité, il y a beaucoup plus de photons (des milliards !). On doit donc se restreindre à un **nombre de photons** suffisamment élevé pour que la statistique soit acceptable. Ces photons doivent alors être représentatifs d'un groupe et leurs trajectoires doivent être parfaitement **aléatoires**. La théorie de cette méthode est détaillée dans le chapitre 19 de l'ouvrage *Radiative Heat Transfer (Modest 1993)*. Elle est brièvement expliquée ci-dessous.

Pour résoudre l'équation d'échange des radiations thermiques, on considère un système fermé (Figure III-11) comme le système thermique rapide étudié.

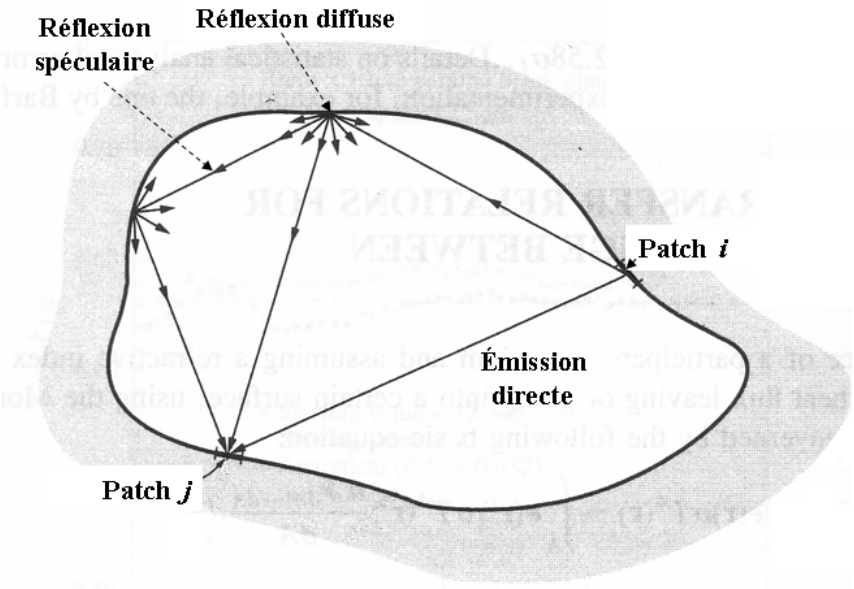


Figure III-11. *Exemple de trajets pour les paquets de photons.*

Les surfaces de ce système sont divisées en **patchs**. On se place en un patch *i*. L'équation de transfert radiatif est résolue quand **la matrice d'échange** M_{ij} est déterminée (équation III-9). La matrice d'échange contient **les facteurs d'échanges** du rayonnement provenant du patch *i* vers les autres patchs *j* et lui-même. Pour cela, il faut tracer **le devenir des rayons** émis par le patch *i*. Les photons sont émis par paquets. Un nombre de paquets de photons N_i est émis du patch *i* qui a pour surface A_i. Chacun des paquets transporte la quantité d'énergie :

$$\Delta\xi_i = \varepsilon_i \sigma T_i^4 \frac{A_i}{N_i} \qquad \text{(III-32)}$$

où ε_i est l'émissivité du patch *i* et T_i sa température moyenne.

Si N_{ij} est le nombre de ces photons absorbés par la surface A_j, soit directement ou après plusieurs réflexions sur les parois du système, alors **le facteur d'échange** est :

$$F_{i\to j} = \left(\frac{N_{ij}}{N_i} \right)_{N_i >> 1} \qquad \text{(III-33)}$$

Pour calculer les facteurs d'échange, il faut tracer **le devenir** d'un nombre important de rayons (photons). Chaque paquet de photons doit être tiré de manière la plus **aléatoire** possible. Pour chaque paquet, il est nécessaire de déterminer **un point d'émission**, **une direction d'émission** et **une longueur d'onde d'émission**. Une fois que le paquet de photons arrive sur un point d'une surface du système fermé, il faut déterminer si le paquet est **absorbé ou réfléchi**. S'il est réfléchi, il faut déterminer **la direction**.

Les différentes caractéristiques des paquets de photons émis et absorbés (point, direction et une longueur d'onde d'émission) sont déterminées en se basant sur **la répartition du pouvoir émissif**.

Par exemple pour déterminer la longueur d'onde, la répartition du pouvoir émissif est divisé en N **paquets d'énergie** ayant chacun une longueur d'onde entre *0* et une valeur λ. La probabilité pour qu'un paquet de photons ait une longueur d'onde entre *0* et λ est donnée par **la fonction de distribution cumulée** :

$$R_\lambda(\lambda) = \int_0^\lambda P(\lambda) d\lambda = \frac{\int_0^\lambda E_\lambda d\lambda}{\int_0^\infty E_\lambda d\lambda} \qquad \text{(III-34)}$$

où

$P(\lambda)$ est la fonction de densité de probabilité en fonction de la longueur d'onde λ ;

E_λ est le pouvoir émissif suivant la longueur d'onde λ.

La fonction de distribution cumulée R_λ varie entre 0 et 1. Elle correspond à une distribution normalisée. De ce fait, générer de manière aléatoire R_λ est plus facile et plus représentatif. On considère un tirage aléatoire d'un grand nombre de valeurs également réparties pour $R_\lambda(\lambda)$. Pour une valeur $R_{\lambda 0}(\lambda)$ en inversant l'équation III-34, on obtient une valeur de longueur d'onde λ_0. En utilisant les autres nombres tirés entre 0 et 1, on arrive à obtenir un ensemble de longueurs d'onde représentatif pour les paquets émis.

Les autres caractéristiques du rayonnement sont générées suivant le **même modèle**. La fonction de distribution cumulée présentée pour la longueur d'onde, $R_\lambda(\lambda)$, est adaptée pour chaque grandeur. Les caractéristiques d'un paquet de photons sont générées dans l'ordre suivant :

- D'abord **les coordonnées des points d'émission** sont déterminées en inversant la fonction de distribution cumulée suivant les coordonnées x et y des points d'un patch, respectivement $R_x(x)$ et $R_y(y)$, soit :

$$x = x(R_x) \; ; \; y = y(R_y) \qquad \text{(III-35)}$$

- Puis **la longueur d'onde** est déterminée pour chaque point en inversant la fonction de distribution cumulée suivant la longueur d'onde λ, $R_\lambda(\lambda)$:

$$\lambda = \lambda(R_\lambda, x, y) \qquad \text{(III-36)}$$

- Enfin, **la direction d'émission** est déterminée à l'aide du pouvoir émissif spectral pour une position et une longueur d'onde données. Elle est définie par les angles polaire θ et azimutal ψ. Les fonctions de distribution cumulées suivant ces angles, respectivement $R_\theta(\theta)$ et $R_\psi(\psi)$, sont inversées :

$$\theta = \theta(R_\theta, x, y, \lambda) \; ; \; \psi = \psi(R_\psi, x, y, \lambda) \qquad \text{(III-37)}$$

- Finalement, une fois le paquet émis, il va rencontrer une surface. Il faut savoir si le paquet est **absorbé ou réfléchi** par cette surface. Quand l'énergie radiative arrive sur une surface, l'absorptivité α_λ détermine à partir des indices des matériaux la fraction de cette énergie qui va être absorbée. Cette valeur peut aussi dépendre de la direction des rayons incidents et de la température locale. Si on considère une surface qui ne transmet pas de rayonnement ($\tau_\lambda=0$), alors, la réflectivité ρ_λ vaut $1-\alpha_\lambda$. Il faut générer des nombres aléatoires ρ_λ et les comparer à α_λ. Si $\rho_\lambda > \alpha_\lambda$, alors le paquet est réfléchi. Dans le cas contraire, il est absorbé. Dans le cas où le paquet est réfléchi, il faut utiliser la réflectivité hémisphérique spectrale et inverser la fonction de distribution cumulée correspondante en tenant compte de l'aspect diffus ou spéculaire de la surface.

La génération des nombres aléatoires *R* peut se faire selon deux modèles statistiques *(CFDRC, CFD'ACE (U) Module Manual 2007)* :

- Le modèle pseudo qui génère des nombres pseudo aléatoires. C'est celui-ci qu'on utilise.
- Le modèle quasi où les nombres sont tirés suivant une séquence de Halton. Il donne des résultats en peu plus précis pour moins de rayons. Cependant, il est moins bien adapté pour les cas impliquant des surfaces réfléchissantes comme les parois d'un système rapide thermique.

Le traçage des rayons et la détermination des points d'intersection avec les surfaces du système fermé se font en regardant le produit scalaire d'un vecteur normal à une surface avec un vecteur ayant la direction du photon *(Mazumder et Kersch 2000)*.

Plusieurs méthodes existent pour traiter le transfert radiatif comme la méthode DOM (Méthode des Ordonnées Discrètes) (chapitre 15 de l'ouvrage *Radiative Heat Transfer (Modest 1993)*), la méthode Surface-à-Surface *(CFDRC, CFD'ACE (U) Module Manual 2007)* ou la méthode zonale (chapitre 18 de l'ouvrage *Radiative Heat Transfer (Modest 1993)*). La méthode Monte-Carlo présente **de nombreux avantages** sur ces méthodes. Elle est particulièrement bien adaptée à l'étude du transfert **radiatif** dans les systèmes de chauffage rapide.

En effet, la méthode Monte-Carlo traduit le mieux le phénomène d'**émission**. Elle permet de bien rendre compte du caractère **aléatoire** de la direction des rayons dans le phénomène d'émission. Ce phénomène est très présent dans les systèmes thermiques rapides.

Par ailleurs, la méthode Monte-Carlo permet de calculer les échanges radiatifs dans un ensemble continu. C'est la seule méthode qui traite les réflexions spéculaires, les réflexions non diffuses et les milieux semi-transparents. Cependant, elle a l'inconvénient d'être la plus longue des méthodes. Mais comme les calculateurs sont de plus en plus puissants, cet inconvénient n'en est plus un. D'autre part, elle ne permet de traiter que la réflexion des rayons par les solides mais dans le cas d'un système RTP les gaz utilisés sont tous transparents.

III.4.5. Propriétés radiatives des surfaces de la modélisation

Les caractéristiques optiques et thermiques de toutes les surfaces sont indiquées dans le Tableau III-4. Les choix effectués sont expliqués ci-dessous.

Surface	**Propriétés**	
	Optiques	**Thermiques**
Tungstène des filaments des lampes	Diffus Non gris Opaque	Wall Tfilament variable*****
Quartz du hublot et des lampes	Diffus Non-gris Semi-transparent	Interface 500K < T < 1000K
Silicium du substrat	Diffus Non-gris Semi-transparent	Interface 300K < T < 1300K
Acier des parois	Diffus Gris Émissivité 0,25	Wall Four : T = 573K Reste des parois : T = 300K
Injection	Diffus Gris Émissivité 1 + Farfield	Inlet T = 300K
Extraction	Diffus Gris Émissivité 1	Outlet T = 300K

Tableau III-4. *Propriétés radiatives des surfaces de la modélisation du système thermique rapide AS-One 150.*

Commentaires sur le Tableau III-4 :

- **Le choix des propriétés optiques**

  - Une surface diffuse est une surface pour laquelle l'intensité radiative de l'émission est la même quelle que soit la direction, pour n'importe quel point de cette surface. L'autre cas est une surface qui émet de manière spéculaire.
  - Un corps gris est un corps dont l'émissivité est indépendante de la longueur d'onde.
  - Un corps semi-transparent ne laisse passer qu'une partie du rayonnement qui lui est incident.
  - Pour l'injection, la propriété « Farfield » est expliquée dans le manuel des modules du logiciel CFD'ACE *(CFDRC, CFD'ACE (U) Module Manual 2007)*. Elle désigne des rayonnements extérieurs à la géométrie, qui n'ont pas de

conditions aux limites dans la géométrie. Quand les gaz sont injectés, ils émettent et absorbent dans un vaste domaine de longueur d'onde. Pour l'extraction, comme le domaine d'absorption et d'émission des gaz est connu, il n'y a pas besoin de considérer la propriété « Farfield ».

- **Le choix des propriétés thermiques**

  - Les surfaces peuvent être définies comme :

    - **Wall** : paroi infranchissable pour un fluide. Elles sont toutes isothermes ici.
    - **Interface** : surface quelconque subissant les phénomènes présents
    - **Inlet** : l'injection des gaz se fait au travers de cette surface
    - **Outlet** : l'éjection des gaz se fait par cette surface.

  - ***La température des filaments** est fixée par l'utilisateur. C'est elle qu'on fait varier lorsqu'on étudie les profils thermiques du substrat. Elle traduit l'échauffement des filaments quand les lampes sont alimentées.
  - Pour les conditions radiatives des interfaces (substrat et hublot), les domaines de température sont précisés. Une température intuitive de l'ordre de grandeur de la solution attendue peut être donnée pour faciliter la résolution numérique.
  - De l'azote arrive à température ambiante (300 K) et sort du réacteur par le système de pompage vers le milieu ambiant à 300 K.

Les propriétés radiatives de chacune des surfaces sont réunies dans deux fichiers détaillés dans l'Annexe 4 :

- Le **fichier « Patch»** reprend les caractéristiques optiques mentionnées dans le Tableau III-4.

- Le **fichier "Optical Database"** présente les coefficients sous forme de colonnes dans l'ordre $n_0, n_1, n_2, n_3, k_0, k_1, k_2, k_3$ des expressions III-10 et III-11. Il y a 60 lignes qui correspondent chacune au centre d'une plage de longueurs d'onde. L'exemple du silicium est donné dans l'Annexe 4.

III.5. Résultats des simulations numériques

III.5.1. Résolution numérique des équations de conservation

La résolution numérique des équations de conservation est effectuée par le solveur CFD'ACE (U). Ce dernier utilise **une méthode itérative** pour la résolution des équations.

Les équations de conservation sont **discrétisées** pour chaque variable étudiée (l'enthalpie, la pression et la vitesse des fluides). Cette discrétisation conduit à un ensemble d'équations non linéaires pour chaque volume de contrôle du système. Les détails de la discrétisation sont donnés dans le manuel de l'utilisateur du logiciel CFD'ACE *(CFDRC, CFD'ACE (U) User Manual 2007)* et dans l'ouvrage *Numerical heat transfer and fluid flow (Patankar 1980)*. L'équation de conservation discrétisée est de la forme :

$$a_p \phi_p = \sum_{nb} a_{nb} \phi_{nb} + S_u \qquad \text{(III-38)}$$

où

l'indice *p* est utilisé pour désigner une valeur au nœud P ;

a_p est un coefficient ;

ϕ_p est la variable en ce point ;

l'indice *nb* indique les coordonnées des cellules voisines ;

a_{nb} est appelé coefficient de lien ;

S_u est le terme de source.

À chaque itération, la somme des résidus est calculée pour toutes les cellules du système. Une bonne **convergence** est obtenue pour une réduction de quatre ordres de grandeur de cette somme. Pour empêcher la divergence de la procédure de résolution, l'équation III-28 doit être modifiée comme suit :

$$a_p (1+I) = \sum_{nb} a_{nb} \phi_{nb} + S_u + a_p I \phi_p^* \qquad \text{(III-39)}$$

où

ϕ_p^* est la valeur de ϕ_p de l'itération précédente ;

I est une constante dite de « sous relaxation ».

La valeur de I est inversement proportionnelle à un pseudo pas de temps Δt_f. Si Δt_f est grand, I devient petit et vis versa. Par conséquent, des grands pas en temps entraînent un

risque d'oscillation. À l'opposé, des petits pas de temps impliquent une convergence lente et effective. Typiquement *I* est pris entre 0,1 et 0,8. Dans les modélisations en deux et trois dimensions, elles sont prises à 0,1 ou 0,2.

Le **déroulement de la résolution numérique** se fait de la manière suivante :

- Les propriétés et les conditions de chaque cellule sont d'abord récapitulées.
- La méthode Monte-Carlo est mise en œuvre avec successivement :
  - l'émission de 5 millions de rayons qui sont jetés sur toutes les surfaces (les patchs). Ce nombre important satisfait à la statistique et permet d'assurer un résultat précis.
  - le tracé des rayons ;
  - le bilan des flux de chaleur radiative de tous les patchs ;
  - les rayons sont jetés toutes les 400 itérations afin de rafraichir le calcul.

- Au fur et à mesure des itérations, la **convergence** peut être visualisée au moyen de l'évolution de la somme des résidus. La courbe de la Figure III-12 montre la convergence des calculs en deux dimensions en régime permanent. Une convergence similaire est obtenue en trois dimensions. La somme des résidus de chaque variable est diminuée de 10^4 fois (de quatre ordres de grandeur) au moins.

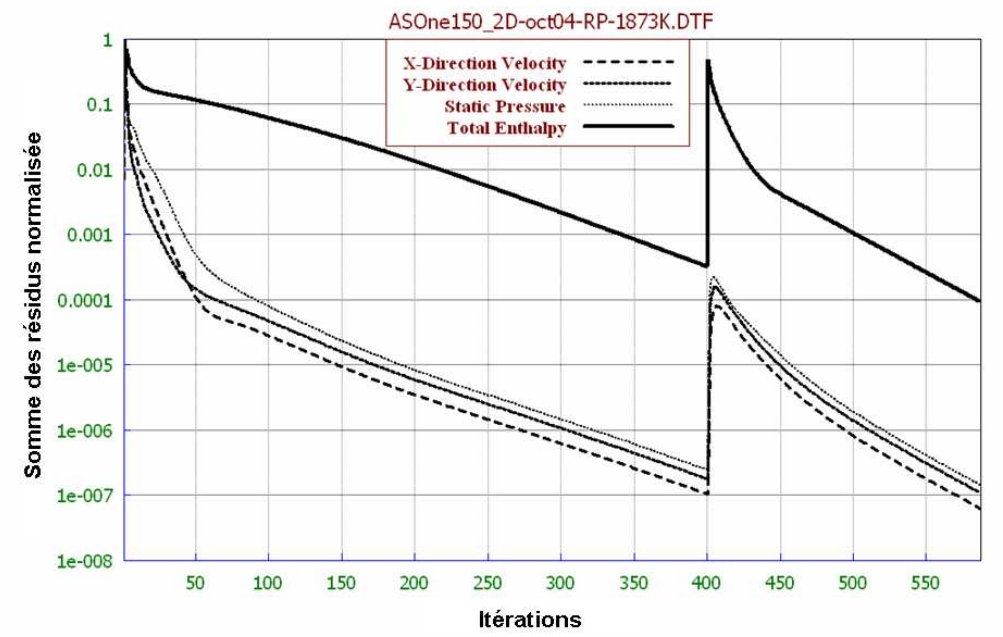


Figure III-12. *Suivi de la résolution numérique : visualisation de la somme des résidus normalisée de chaque variable en fonction du nombre d'itérations.*

III.5.2. Visualisation des résultats

Les calculs sont réalisés à l'aide d'un ordinateur PC de type AMD Athlon 64, processeur 32 avec 1 Gb de mémoire RAM. Les résultats sont obtenus en **régime permanent**. La durée des simulations en deux dimensions est d'environ 15 minutes alors que celle des simulations en trois dimensions est de 2h30. Ces deux durées sont tout à fait acceptables.

Les résultats sont appréciés à l'aide du logiciel View. Les schémas de la Figure III-13 montrent les résultats obtenus pour une température des filaments des lampes de 1873 K. On y voit la répartition de la température du système. Pour la modélisation en deux dimensions, **le profil de la température du substrat** nous intéresse particulièrement. Pour la modélisation en trois dimensions, on peut obtenir **la cartographie de la température du substrat**.

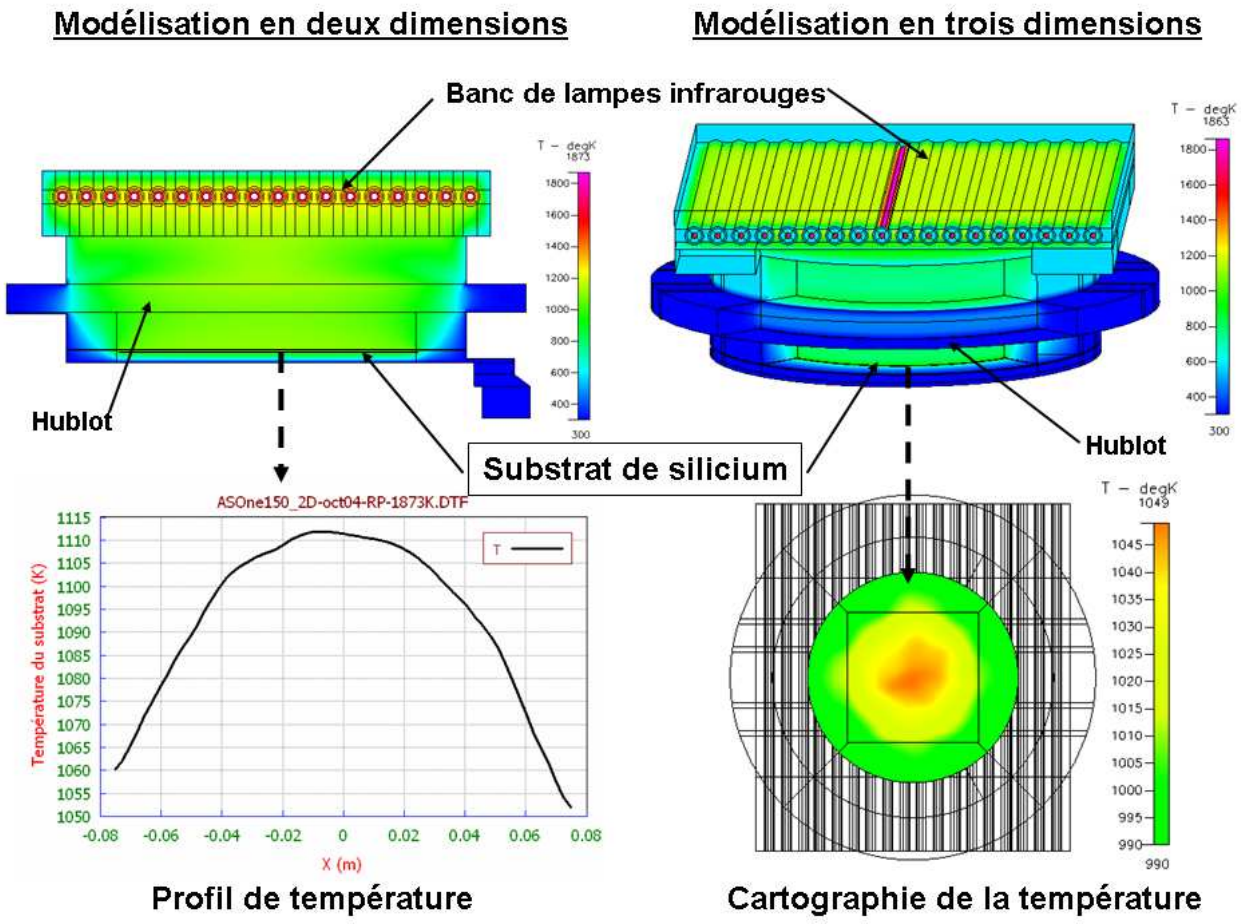


Figure III-13. *Visualisation de la température du système et de sa répartition pour le substrat.*

III.6. Conclusion

La modélisation du système rapide thermique AS-One 150 a été réalisée en **deux et trois dimensions**. Les **équations de conservations** permettent de rendre compte des échanges de masse et de chaleur (rayonnement, conduction et convection) au sein du système. Le transfert de chaleur par **rayonnement**, prépondérant au sein du système rapide thermique, a été résolu suivant le schéma suivant :

- discrétisation des surfaces en **patchs** ;
- détermination des propriétés de chaque surface (**absorptivité, émissivité, réflectivité et coefficient de transmission**). Les propriétés radiatives de toutes les surfaces de la modélisation ont été précisées.
- calcul de l'échange d'énergie entre les patchs par **traçage** des rayons. L'échantillonnage des rayons émis et réfléchis par les surfaces est effectué à l'aide de **la méthode Monte-Carlo**.

Références du chapitre III

Azzam, R.M.A., N.M. Bashara, (1977), *Ellipsometry and Polarized Light*, Elsevier North-Holland, New York.

Caratini, Y., (1988), *Développement d'un four de recuit rapide, application à la croissance et à la nitruration de couches minces d'oxydes sur silicium*, thèse de l'Institut National Polytechnique de Grenoble.

CFD Research Corporation, (2007), *CFD'ACE (U) Module Manual*, Version 2007, Huntsville.

CFD Research Corporation, (2007), *CFD'ACE (U) User Manual*, Version 2007, Huntsville.

Glassbrenner, C.J., G.A. Slack, (1964), *Thermal Conductivity of Silicon and Germanium from 3°K to the Melting Point*, Phys. Rev, 134, 4 A, pp. 1058-1069.

Incropera, F., D.P. Dewitt, (1996), *Fundamentals of Heat and Mass Transfer*, John Wiley and Sons, New York.

Kersch, A., W.J. Morokoff, (1995), *Transport Simulation in Microelectronics*, Birkhauser, Bâle.

Mazumder, S., A. Kersch, (2000), *A fast Monte Carlo scheme for thermal radiation in semiconductor processing applications*, Numerical Heat Transfer, Part B: Fundamentals, 37, pp. 185-199.

Modest, M.F., (1993), *Radiative Heat Transfer*, McGraw-Hill, New York.

NIST Webbook : http://webbook.nist.gov/chemistry/fluid/.

Okhotin, A.S., A.S. Pushkarskii, V.V. Gorbachev, (1972), *Thermophysical Properties of Semiconductors* (en Russe), Russia : Atom, Moscou.

Palik, E.D., (1998), *Handbook of Optical Constants of Solids*, Academic Press, New York.

Patankar, S.V., (1980), *Numerical Heat Transfer and Fluid Flow*, Hemisphere Publishing Corporation, McGraw-Hill Book Company, New York.

Pérez, J.P., R. Carles, R. Fleckinger, C. Lagoute, (2002), *Électromagnétisme : fondements et applications : avec 300 exercices et problèmes résolus*, Dunod, Masson Sciences, Paris.

Siegel, R., J.R. Howell, (1992), *Thermal Radiation Heat Transfer*, Taylor and Francis, Washington DC.

Sosman, R.B., (1927), *The Properties of Silica : An Introduction to the Properties of Substances in the Solid Non-conducting State*, Chemical Catalog Co., New York.

Versteeg, H.V., W. Malalasekera, (1995), *An introduction to computational fluid dynamics, The finite volume method*, Longman, Londres.

CHAPITRE IV

Modélisation approfondie d'une lampe infrarouge

Dans les modèles de l'AS-One 150 réalisés en deux et trois dimensions, les lampes infrarouges allumées ont été modélisées en entrant la température de leurs filaments. Pour connaître avec plus de précision cette température, il faut réaliser ***une modélisation plus approfondie d'une lampe****. Cette modélisation doit tenir compte des conditions d'un système thermique rapide.*

Un état de l'art sur la modélisation des lampes dans les systèmes thermiques rapides *est d'abord dressé. Puis, le modèle réalisé est présenté en insistant sur les* ***hypothèses*** *effectuées.*

Dans une autre partie, ***les particularités de ce modèle*** *sont discutées. Une comparaison avec les différentes modélisations présentées dans l'état de l'art est faite.*

IV.1. État de l'art sur la modélisation des lampes infrarouges dans les systèmes thermiques rapides

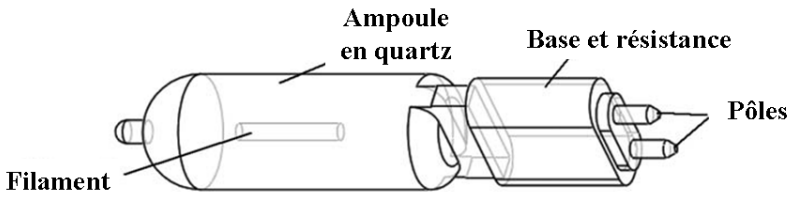
Les lampes infrarouges ont été modélisées de **différentes façons** dans les systèmes thermiques rapides. En voici différents exemples. Pour chacun d'entre eux, une référence représentative est considérée. Les trois premiers exemples sont illustrés par la Figure IV-1.

Chang et Hwang ont modélisé les lampes infrarouges linéaires en représentant la **géométrie complète** de la lampe (filament, ampoule de quartz, base) *(Chang et Hwang 2006)*. Les conditions aux limites sont appliquées à l'ampoule de quartz et au filament : l'absorptivité, le coefficient de transmission, et la puissance sont entrées. Le traçage des rayons et la simulation des propriétés d'absorption et de transmission sont réalisés à l'aide des programmes TracePro et ANSYS et de la méthode Monte-Carlo. La puissance est imposée à 1 kW.

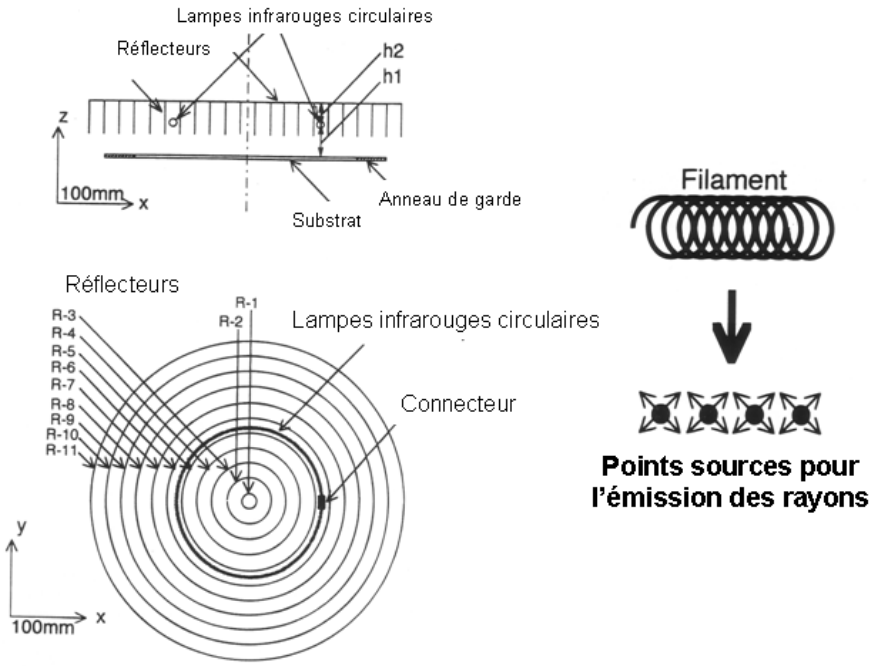
Habuka et al. ont réalisé l'étude d'un système où les lampes sont circulaires *(Habuka et al. 2000)*. Le filament de la lampe est modélisé par des **points sources**. La méthode DARTS (Direct Approach using Ray Tracing Simulation) est utilisée pour le traçage des rayons. Les connecteurs des lampes sont pris en compte dans les équations du modèle. Leur effet est notable : l'étude révèle que la température du substrat est plus basse de quelques pourcents en dessous des connecteurs.

Chao et al. utilisent des facteurs de formes calculés et des approximations sur les propriétés radiatives *(Chao et al. 2003)*. La représentation des lampes dans le modèle est un ensemble de **couronnes concentriques** pour lesquelles une puissance uniforme est appliquée. Dans d'autres travaux de modélisation, les lampes sont représentées de cette manière *(Park et Jung 2001)*.

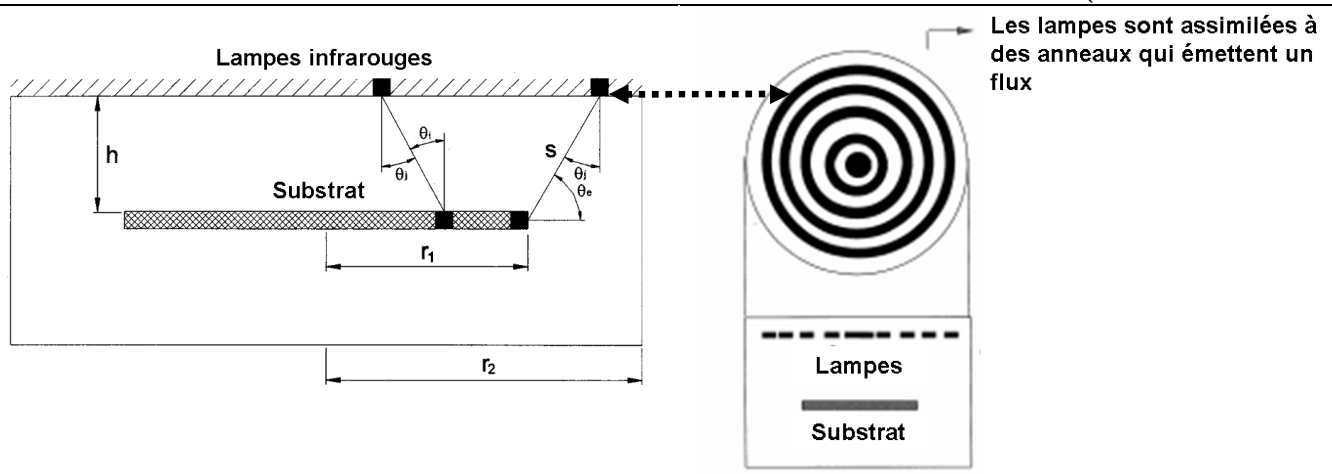
Kersch et Schafbauer ont modélisé un système thermique rapide où la puissance des lampes entrées dans le modèle correspond à des **mesures** *(Kersch et Schafbauer 2000)*.



Modélisation (Chang et Hwang 2006)



Modélisation (Habuka et al. 2000)



Modélisation (Chao et al. 2003) et (Park et Jung 2001)

Figure IV-1. *Différentes modélisations des lampes infrarouges dans des systèmes thermiques rapides.*

Balakrishnan et Edgar traitent deux façons de modéliser les lampes dans la machine qu'ils ont étudiée *(Balakrishnan et Edgar 2000)* :

- La relation entre la puissance des lampes et la température du substrat est considérée à partir de l'**équilibre des flux de chaleur** à l'intérieur du système. Cette relation est valable en régime permanent pour les lampes car les variations de température sont moins rapides.
- La réponse en température du substrat et le système de régulation sont représentés sous forme de **fonctions de transfert**. Dans cette représentation, la dynamique des lampes est restituée par un modèle du premier ordre. Ils indiquent que la constante de temps de la lampe dépend de la température du filament T_{fil} : elle est proportionnelle à T_{fil}^{-3} autour d'un point de fonctionnement.

Plévert assimile le banc de lampes à une **surface continue** émettant le rayonnement infrarouge *(Plévert 1995)*. Il est précisé que cette hypothèse entraîne une surestimation du rayonnement émis puisqu'en fait seuls les filaments rayonnent.

IV.2. Présentation du modèle réalisé

Le modèle réalisé correspond à une représentation en trois dimensions d'une **portion d'un dixième de la lampe**. La Figure IV-2 montre la modélisation avec les différentes parties de la lampe. Le filament avec ses spires chauffées par effet Joule y est notamment représenté.

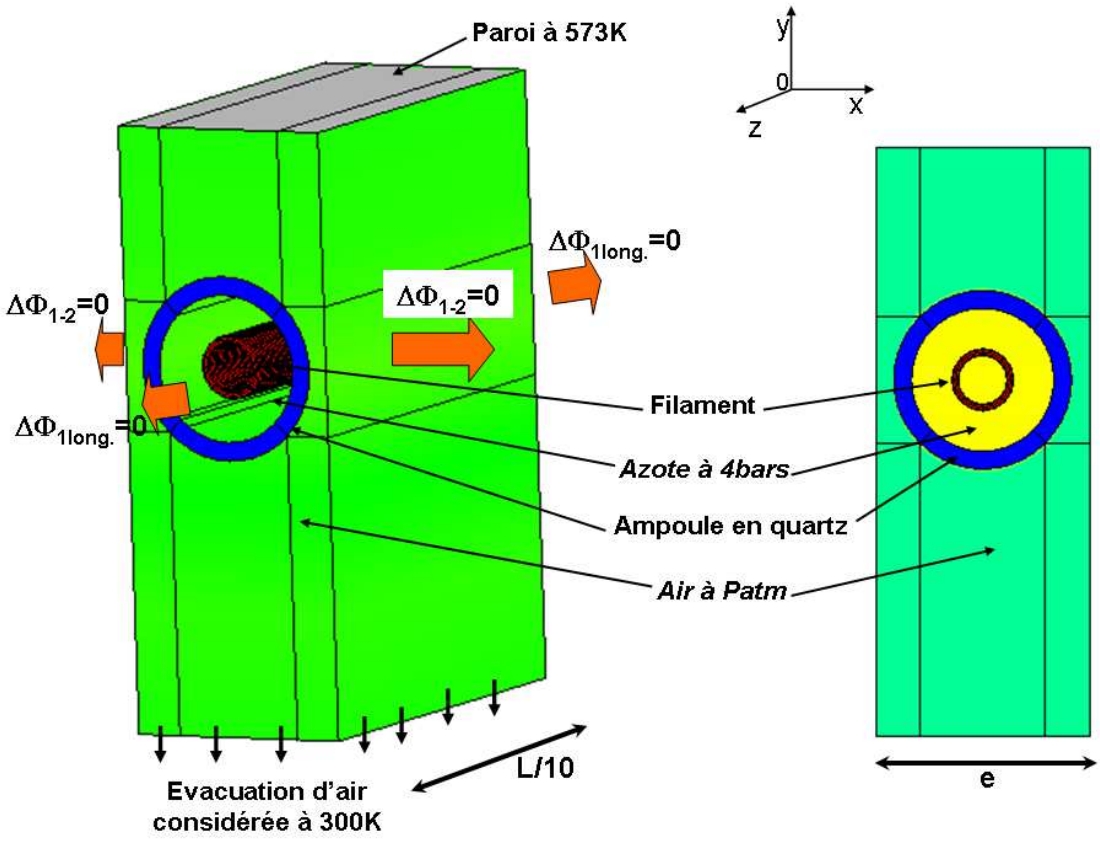


Figure IV-2. *Modélisation d'une lampe de l'AS-One 150.*

IV.3. Choix des dimensions et des conditions aux limites

Les dimensions et les conditions aux limites de la portion sont choisies pour restituer au mieux **les conditions du four** selon les hypothèses suivantes (Figure IV-2 et Figure IV-3).

La portion correspond à une tranche du four prise entre les médiatrices d'une lampe considérée et ses voisines directes à droite et à gauche. Sa largeur est donc égale à la distance entre les centres de deux lampes voisines. Sa longueur est égale à un dixième de celle de la lampe. Enfin, sa hauteur vaut celle de la partie supérieure du four.

La représentation suivant la longueur d'un dixième de celle de la lampe est également fondées sur les résultats obtenus dans le travail de thèse de Caratini (chapitre III.1) *(Caratini 1988)*. Ces résultats indiquent que le flux émis par le filament reste quasiment uniforme le long de celui-ci. Même en présence des anneaux de soutien et à l'approche des bords de la lampe, le flux varie peu. Donc, l'hypothèse d'une **température uniforme le long du filament** est réalisée (Figure IV-3.a).

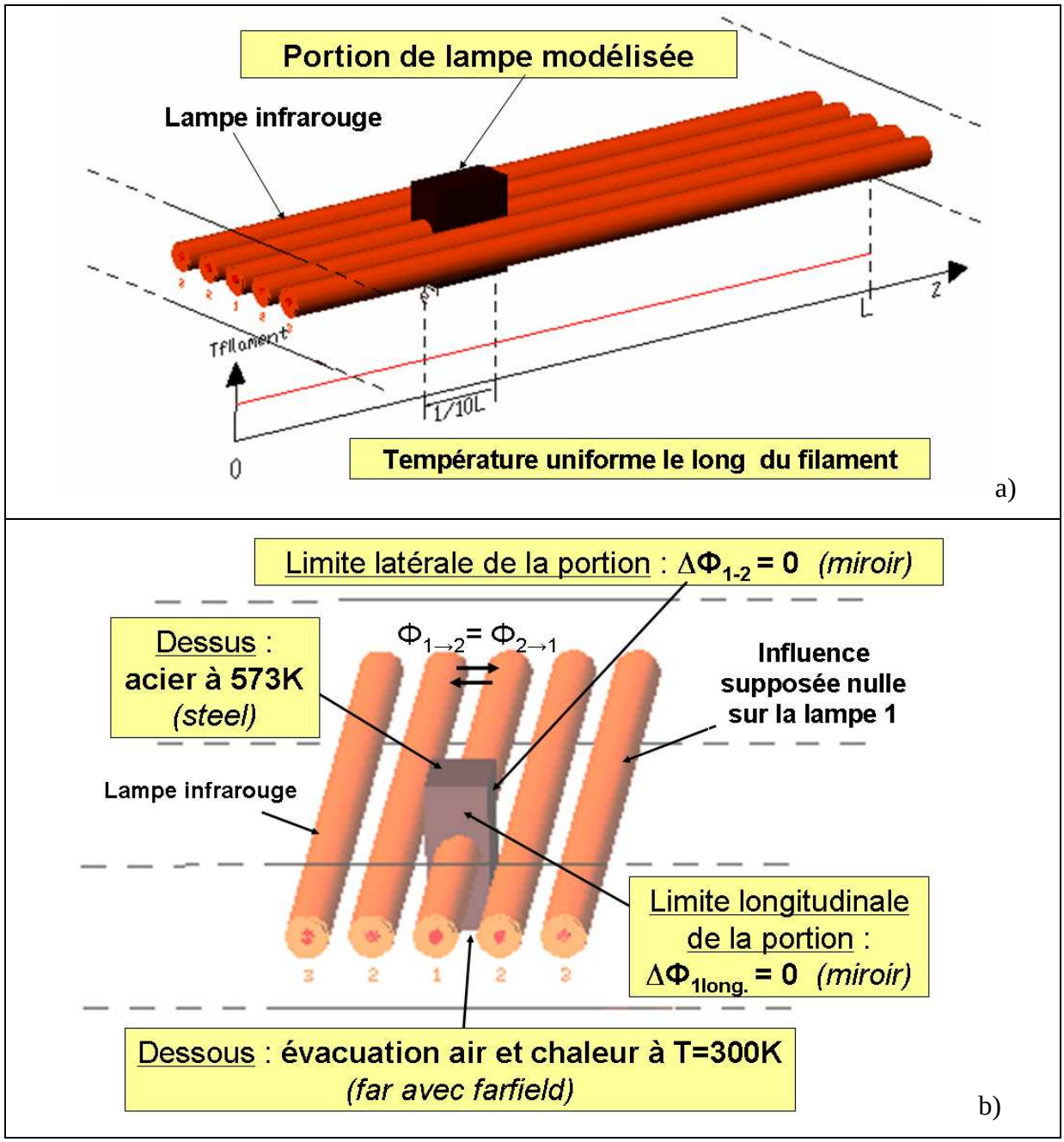


Figure IV-3. *Justification des conditions aux limites de la portion.*

Le choix de la largeur de la portion est lié aux conditions de flux présentées Figure IV-3.b. Toutes les conditions aux limites thermiques et radiatives de la portion sont indiquées sur les schémas de la Figure IV-2 et de la Figure IV-3.b.

Pour expliquer ces conditions aux limites, il faut s'appuyer sur la Figure IV-3.b où quelques lampes voisines dans un four sont considérées. Ce schéma permet de rendre compte de l'influence entre les lampes voisines. En effet, dans un four de système rapide thermique les lampes se chauffent mutuellement. Ce **chauffage mutuel** s'effectue surtout entre deux lampes en regard l'une de l'autre, soit une lampe et sa première voisine (lampes numéro 1 et 2 sur

la Figure IV-3.b). Sur un plan situé à mi-distance entre deux lampes voisines, le flux émis par une lampe à droite de la lampe 1 et celui reçu par cette dernière de la lampe voisine, notés respectivement $\Phi_{1\rightarrow2}$ et $\Phi_{2\rightarrow1}$ sont égaux de part et d'autre de ce plan et opposés. Le flux échangé $\Delta\Phi_{1\text{-}2}$ est donc nul au niveau de ce plan. Par conséquent, une condition aux limites **adiabatique** peut être choisie pour **la limite latérale**.

Une condition aux limites adiabatique peut être considérée pour les parois dites «longitudinales ». Quand on se déplace le long de l'axe de la lampe, le flux est uniforme. En considérant deux portions mises l'une à côté de l'autre, à la limite entre les deux portions, les flux émis et reçus vont s'annuler. D'où le choix d'une condition **adiabatique** $\Delta\Phi_{1\text{long.}} = 0$ pour **la limite longitudinale** (Figure IV-2 et Figure IV-3.b).

Enfin, la hauteur a été choisie égale à celle de la partie supérieure du four.

Les **propriétés radiatives des parois de la portion** ont été choisies comme suit.
Pour les parois adiabatiques longitudinales et latérales, une condition « **miroir** », autrement dit une surface parfaitement réfléchissante, a été considérée. Les rayons émis par la lampe voisine correspondent aux rayons réfléchis au niveau de la paroi.
La paroi au-dessous est en **acier** et sa température est estimée à 573 K.
Enfin, le rayonnement est en réalité évacué hors de la portion dans le reste du système thermique. Ainsi, la température à l'intérieur de la portion n'augmente pas indéfiniment. Pour restituer ces conditions, la température du dessous de la boîte est choisie à 300 K et la propriété optique de surface d'un **corps noir** est considérée. Dans un système RTP, il y a des rayonnements autres que celui des lampes centré sur 1µm comme par exemple ceux émis par le substrat ou le hublot. L'option « Farfield » est prise en compte pour rendre compte de ces rayonnements émis.

Remarque 1 : La modélisation est aussi valable pour les lampes proches des parois du four. La distance entre la lampe et la paroi est dans le même ordre de grandeur que celle séparant deux lampes voisines. Comme la paroi est très réfléchissante, la condition aux limites ayant les propriétés radiatives d'un miroir est adéquate.
Remarque 2 : Le choix des dimensions permet aussi de limiter le temps de calcul car la représentation du filament d'une lampe en entier impliquerait un très grand nombre de

cellules au vue du nombre très important de spires (de l'ordre de 500). Le présent modèle permet d'avoir un résultat précis avec une durée de calcul la plus petite possible.

IV.4. Géométrie, données et résultats numériques

IV.4.1. Géométrie

Le maillage de la modélisation réalisée pour la lampe est donné par la Figure IV-4.

Le **filament de la lampe** est réalisé grâce à l'option « Helix curve » qui permet de générer des hélices circulaires *(CFDRC, CFD'GEOM 2007)*. Le nombre de spires et la distance entre deux spires consécutives de 0,5 mm doivent être spécifiés (se reporter aux caractéristiques de la lampe présentée dans l'Annexe 2).

Le maillage est ici hybride. En effet, l'ampoule en quartz et l'air de la portion sont représentés par un maillage de type structuré. Celui du filament et de l'azote enfermé dans l'ampoule de quartz est non-structuré.

La taille des cellules a été choisie la plus équilibrée possible pour faciliter la résolution numérique.

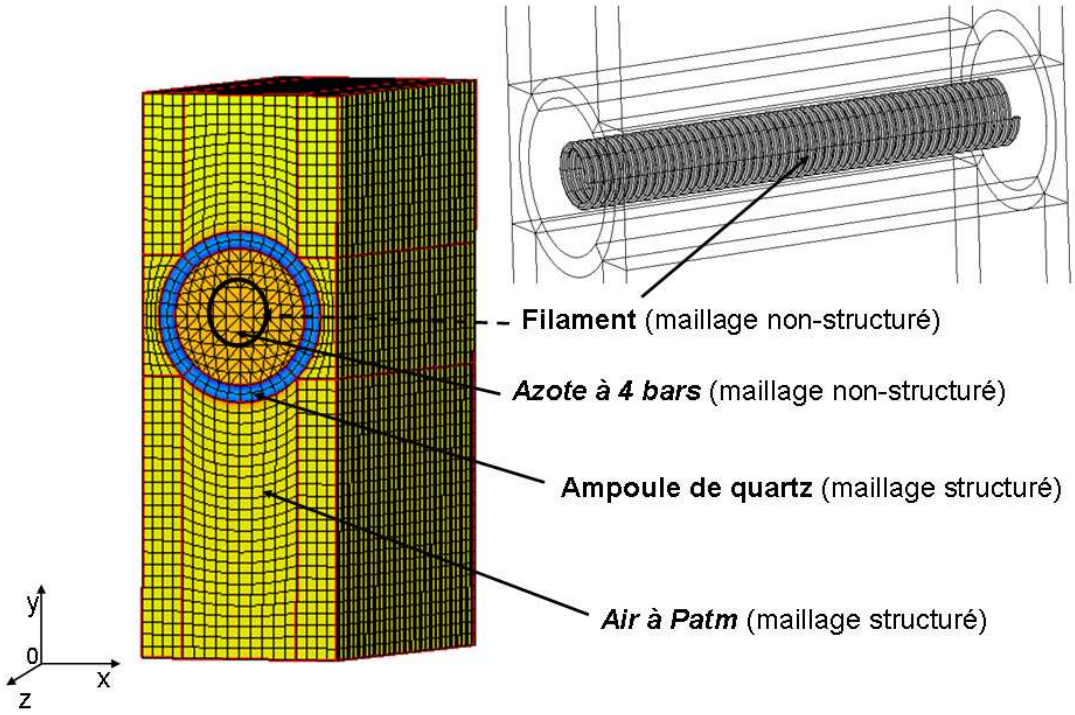


Figure IV-4. *Géométrie de la modélisation de la lampe avec son maillage.*

IV.4.2. Les données du modèle

Les **équations de conservation de la chaleur et du rayonnement** sont prises en compte pour traduire les phénomènes thermiques :

- échauffement du filament en présence d'une **puissance volumique appliquée**. C'est comme cela que la puissance électrique est entrée dans le modèle.
- **rayonnement** dans la portion
- **convection** dans les lampes et l'air
- **conduction** dans l'ampoule de quartz.

Les équations régissant les écoulements n'ont pas été considérées pour deux raisons. Premièrement, il n'y a pas d'écoulement particulier au niveau de la lampe. Deuxièmement, cela alourdirait inutilement le nombre de variables et en même temps la durée des calculs.

Outre les conditions aux limites déjà présentées, il y a les propriétés des **volumes**.
Pour les gaz (l'azote dans l'ampoule et l'air), ces propriétés sont les mêmes que celles présentées chapitre III.1. Il en va de même pour celles de l'ampoule en quartz.
Les propriétés thermiques du tungstène sont indiquées dans l'Annexe 4. Ces données sont disponibles sur le site http://cea.grc.nasa.gov/index.html.
Pour restituer la surpression dans les lampes qui est de quatre fois la pression atmosphérique, la densité de l'azote a été multipliée par quatre.

Comme pour la modélisation du système thermique rapide, la **méthode Monte-Carlo** est utilisée pour résoudre l'équation de transfert radiatif. Le nombre de rayons jetés est de 5 millions.

Pour une résolution en régime permanent, le calcul dure environ 4h (2000 itérations) avec une très bonne convergence de quatre ordres de grandeur.

IV.4.3. Résultats numériques

Le schéma de la Figure IV-5 montre le résultat d'un calcul en régime permanent pour une **puissance volumique**. On y voit le **filament incandescent** et le **gaz chaud** autour de celui-ci. Pour chaque puissance, la température du filament simulée varie d'environ ± 30 K soit moins de 2% autour d'une température moyenne qui sera prise en compte par la suite.

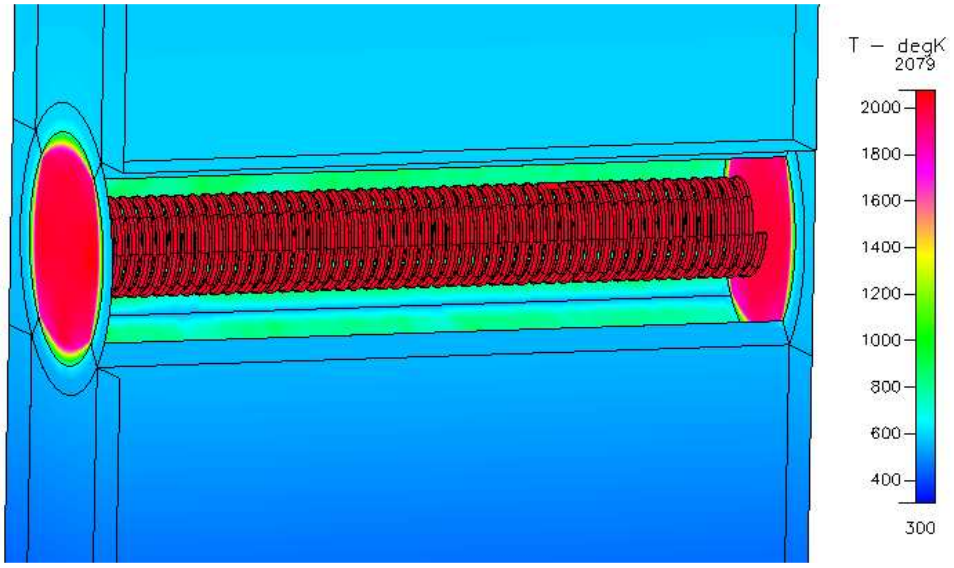


Figure IV-5. *Lampe dans une « portion du four » pour une puissance.*

IV.5. Discussion

Comparons le modèle réalisé à ceux présentés dans l'état de l'art.

Tout d'abord, la modélisation tient bien compte de l'**enroulement du filament**. Seuls Chang et Hwang en tiennent compte dans leur modèle *(Chang et Hwang 2006)*.

L'**influence mutuelle** du chauffage entre lampes voisines et l'influence du milieu extérieur sur la température du filament des lampes sont également prises en compte sans avoir recours à l'utilisation de points sources comme dans le modèle de Habuka et al. *(Habuka et al. 2000)*.

Le modèle permet de simuler le **comportement des lampes en dynamique**. Il suffit de réaliser les simulations en régime transitoire.

Par la suite, différentes perspectives peuvent être envisagées pour ce modèle.
Il serait intéressant de modéliser une **lampe entière** avec sa base pour voir la décroissance de la température aux bords de la lampe. Ici, une température uniforme a été considérée. Simuler **plusieurs lampes** entières voisines serait encore plus précis.

L'intérêt d'avoir une modélisation physique précise de la lampe est de pouvoir l'intégrer comme **modèle prédictif** avec la modélisation du système (Figure IV-6). L'ajout d'un modèle physique prédictif au régulateur d'une machine RTP permet d'optimiser le budget thermique reçu par le substrat. Plusieurs développements ont été réalisés à ce sujet, comme par exemple celui de Balakrishnan et Edgar *(Balakrishnan et Edgar 2000)*. Une montée progressive de la température du substrat, très conforme à la consigne, a été obtenue.

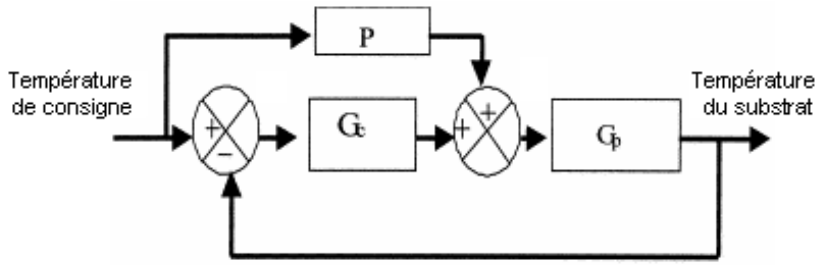


Figure IV-6. *Schéma en blocks d'un contrôleur avec feedback (P : Modèle prédictif, G_c : fonction de transfert du contrôleur, G_p : fonction de transfert du procédé).*

Références du chapitre IV

Balakrishnan, K.S., T.F. Edgar, (2000), *Model-based control in rapid thermal processing*, Thin Solid Films, 365, pp. 322-333.

Chao, C.K., S.Y. Hung, C.C. Yu, (2003), *The effect of lamps radius on thermal stresses for Rapid Thermal Processing system*, Journal of Manufacturing Science and Engineering, 125, pp. 504-511.

Caratini, Y., (1988), *Développement d'un four de recuit rapide, application à la croissance et à la nitruration de couches minces d'oxydes sur silicium*, thèse de l'Institut National Polytechnique de Grenoble.

CEA/NASA : http://cea.grc.nasa.gov/index.html .

CFD Research Corporation, (2007), *CFD'GEOM Tutorials*, Version 2007, Huntsville.

Chang, P.C., S.J. Hwang, (2006), *Simulation of a rapid surface heating for injection molding*, International Journal of Heat and Mass Transfer, 49, pp. 3846-3854.

Habuka, H., M. Shimada, K. Okuyama, (2000), *Thermal conditions in rapid thermal processing system using circular infrared lamp*, Journal of the Electrochemical Society, 147 (12), pp. 4660-4664.

Kersch, A., T. Schafbauer, (2000), *Thermal modelling of RTP and RTCVD processes*, Thin Solid Films, 365 (2), pp. 307-321.

Plévert, L., (1995), *Cristallisation par recuit rapide du silicium amorphe sur verre*, thèse de doctorat, Université de Rennes I.

CHAPITRE V

Validation de la modélisation du système thermique rapide et de la lampe infrarouge

Pour pouvoir utiliser une modélisation, celle-ci doit être ***validée à l'aide d'essais expérimentaux*** *(Logerais et al. 2005). C'est le but de ce chapitre.*

Pour cela, des essais expérimentaux ont été menés pour cinq puissances de chauffage constantes. ***Les profils de température du substrat*** *obtenus sont confrontés à ceux obtenus par le calcul. Les cinq puissances de chauffage sont choisies de manière à obtenir des températures du substrat se répartissant entre 800 à 1300 K. Les confrontations sont effectuées en régime permanent.*

Dans le même temps, ***les températures des filaments des lampes infrarouges*** *ont aussi été évaluées expérimentalement pour les cinq puissances. Ces résultats sont ensuite comparés aux températures des filaments entrés dans les modèles en deux et trois dimensions. Puis, ils sont comparés à ceux de la modélisation de la lampe afin de la valider. Les comparaisons sont toujours en régime permanent.*

L'obtention des ***résultats expérimentaux*** *est préalablement décrite.*

V.1. Essais expérimentaux

V.1.1. Mesure de la température du substrat

Les essais ont été effectués pour les **cinq puissances de chauffage** suivantes : 10, 15, 20, 25 et 30% de la puissance maximale appliquée aux lampes.

Les cinq essais sont menés avec une atmosphère d'azote sous une pression de 300 Pa (soit 3 mbars). Il n'y a pas de débit de gaz dans le réacteur.

Le substrat de silicium utilisé a une épaisseur de 500 µm. Il est de type N monocristallin avec une orientation (100).

Les mesures de températures du substrat sont réalisées à l'aide de **thermocouples**.
Les thermocouples utilisés sont de type K, de marque Oméga (http://www.omega.com/) avec un diamètre de fil de 0,127 mm. Leur précision est de ± 0,4% de la valeur lue en °C. Les soudures chaudes des thermocouples sont placées dans de petites cavités dans la face arrière du substrat. Ils sont ensuite noyés par un ciment ayant des propriétés thermiques proches de celles du silicium selon le savoir-faire de l'entreprise AnnealSys (Figure V-1).

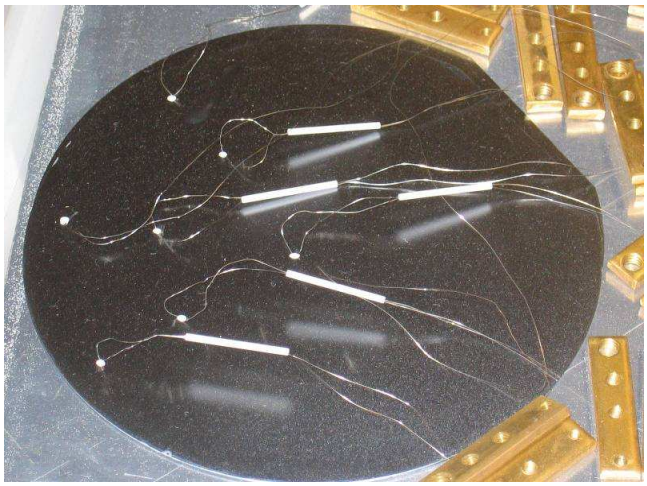


Figure V-1. *Soudures chaudes des thermocouples.*

La disposition des thermocouples est indiquée par la Figure V-2. Quatre des cinq thermocouples sont disposés suivant le **rayon du substrat** du côté de l'injection. Le cinquième thermocouple est situé proche du bord du substrat du côté opposé, celui de l'extraction. Des résultats complémentaires sont obtenus en effectuant une **rotation de 180°** du substrat. Les thermocouples 1 à 4 se retrouvent alors du côté de l'extraction.

Ce nombre de cinq thermocouples est un bon compromis pour tracer le **profil de température du substrat**. En effet, la répartition de température du substrat doit être obtenue en minimisant les interactions entre thermocouples voisins. De plus, cette répartition est choisie suivant l'axe pour lequel la modélisation en deux dimensions a été réalisée.

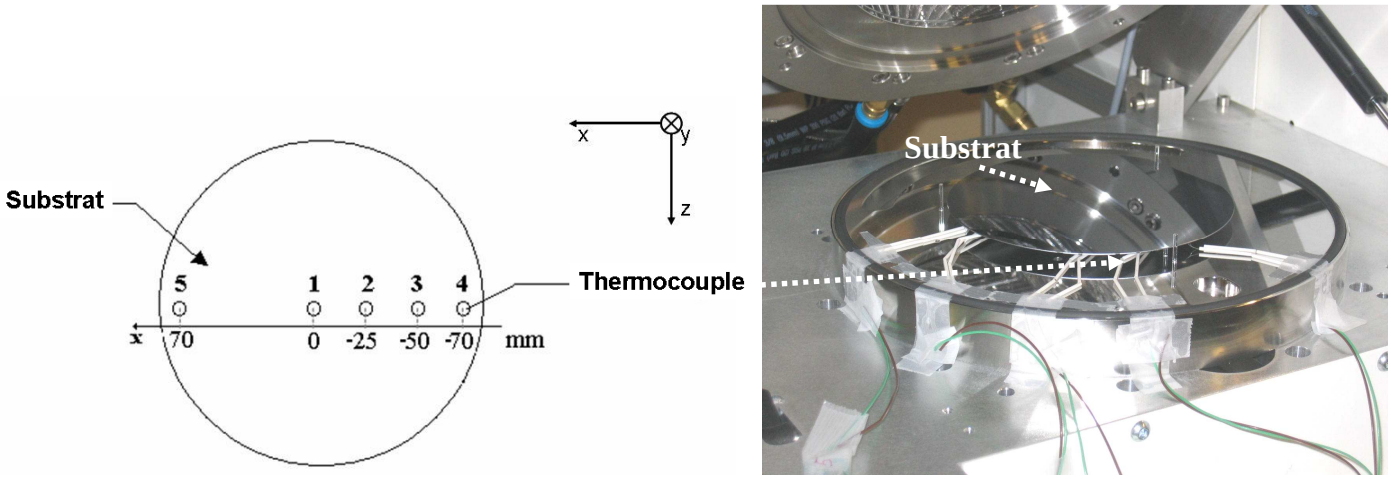


Figure V-2. *Emplacement des thermocouples.*

L'**évolution de la température du substrat** a été relevée toutes les secondes à l'aide d'une centrale Eurotherm (http://www.eurotherm.com/). Les données sont transférées dans un PC pour pouvoir être traitées. La durée des essais est de 900 secondes. Cette durée importante pendant laquelle le chauffage va être maintenu constant est nécessaire pour atteindre un régime quasi-stationnaire. Cette durée sera discutée plus loin au chapitre V.2.3.

V.1.2. Évaluation de la température des filaments des lampes

La méthodologie pour déterminer la température des filaments des lampes est la suivante. Les essais sont réalisés à **puissance constante**. Pour chaque essai, l'intensité de chacune des lampes est indiquée dans l'enregistrement des paramètres effectué à l'aide du PC de contrôle. La tension a été mesurée avec un voltmètre aux bornes d'une lampe pour chaque puissance après une durée de quelques centaines de secondes. L'intensité I_{exp} et la tension U_{exp} pour une

lampe étant connues, **la résistance électrique du filament** R_{exp} peut être déduite en utilisant la loi d'Ohm :

$$R_{exp} = \frac{U_{exp}}{I_{exp}} \qquad \text{(V-1)}$$

Or, la résistance R_{exp} du filament de tungstène peut s'exprimer au moyen de **la résistivité du tungstène** ρ_{tung}, de la section du filament s_{fil} et de sa longueur l_{fil} comme le précise l'expression V-2 :

$$R_{exp} = \frac{\rho_{tung}\, l_{fil}}{s_{fil}} \qquad \text{(V-2)}$$

Mais la résistivité du filament de tungstène est reliée à **sa température** comme le souligne la courbe de la Figure V-3. La relation est donnée par l'expression V-3 dans laquelle les coefficients a et b sont respectivement égaux à $5{,}92.10^{-11}$ et *1,2036 (Smithells 1953)* :

$$\rho_{tung} = a\, T_{fil}^{b} \qquad \text{(V-3)}$$

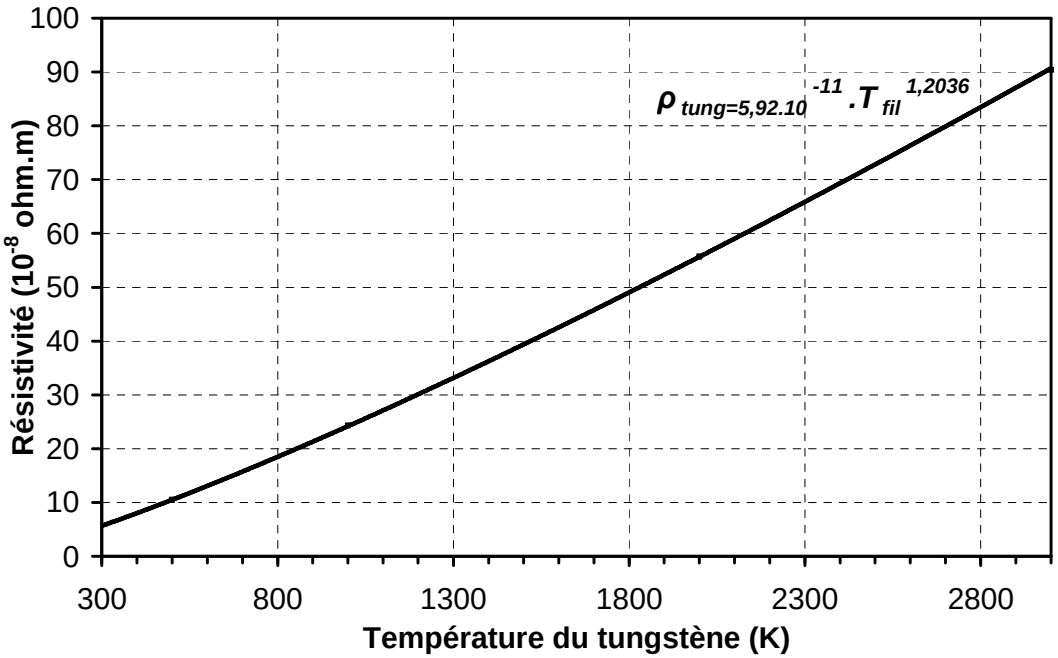


Figure V-3. *Résistivité du tungstène suivant sa température.*

En définitif, **la température du filament** T_{fil} est évaluée par l'expression V-4 :

$$T_{fil} = \left(\frac{R_{exp}\, s_{fil}}{a\, l_{fil}} \right)^{\frac{1}{b}} \qquad \text{(V-4)}$$

Pour comparer les résultats expérimentaux de la température des filaments à ceux des calculs, l'**incertitude sur la mesure de la température du filament** $u(T_{fil})$ doit être calculée pour chaque puissance considérée. La température du filament T_{fil} est fonction de plusieurs paramètres E_i indépendants. Ces paramètres sont indiqués dans l'expression V-5. L'incertitude est donc de type composé *(Bucher 2004)*. Elle se calcule par les expressions V-6 et V-7 :

$$T_{fil} = f(U_{exp}, I_{exp}, s_{fil}, l_{fil}) \tag{V-5}$$

$$u(T_{fil}) = \sqrt{\sum_{i=1}^{N} \left(\frac{\partial f}{\partial E_i} \right)^2 u^2(E_i)} \tag{V-6}$$

Comme la probabilité de trouver la vraie valeur est uniforme dans tout l'intervalle de précision, pour un paramètre E_i, l'incertitude $u(E_i)$ est :

$$u(E_i) = \frac{E_{i\,max}}{\sqrt{3}} \tag{V-7}$$

où $\pm E_{imax}$ correspond à la précision du paramètre concerné.

La section du filament s_{fil} et sa longueur l_{fil} ont été évaluées expérimentalement. La précision de ces mesures, ainsi que celles de l'intensité et de la tension est de ± 5% de la valeur mesurée. Les calculs d'incertitude sont faits par la suite pour des mesures en régime stabilisé, donc l'incertitude sur le temps de réponse est négligeable.

V.2. Résultats expérimentaux

V.2.1. Température du substrat

La Figure V-4 montre l'évolution de la **température expérimentale au centre du substrat** pour les cinq puissances de chauffage considérées (thermocouple numéro 1). Des évolutions de la même forme sont obtenues pour les autres positions.

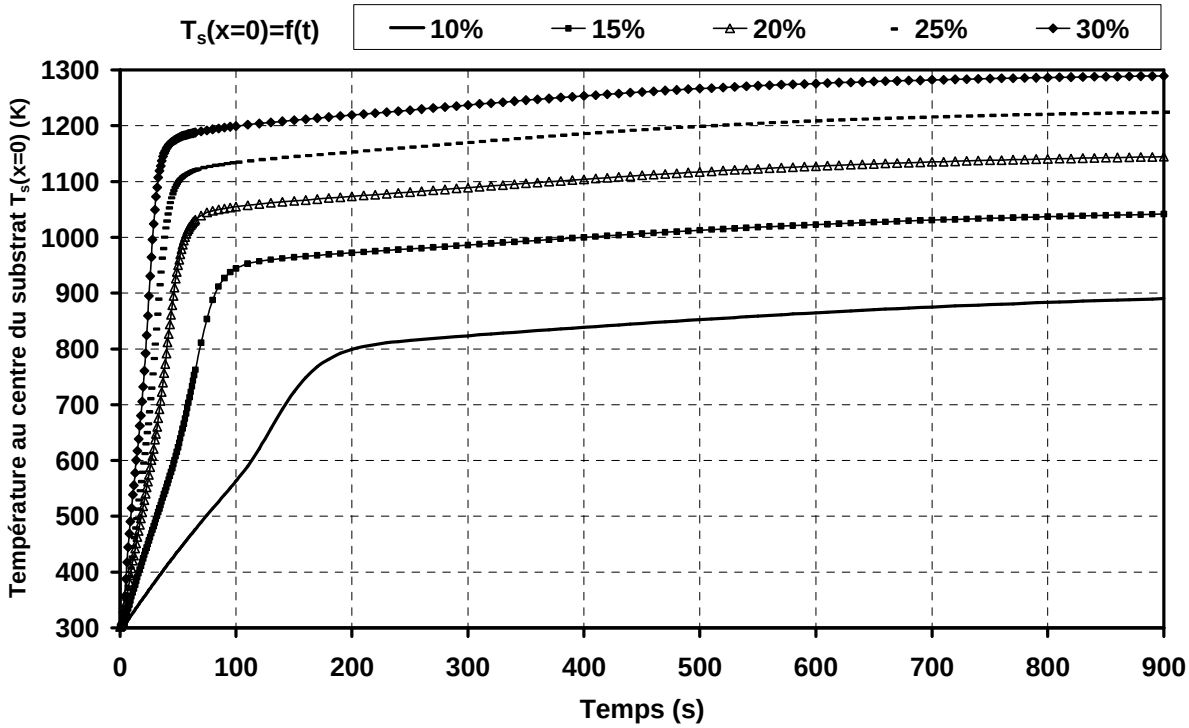


Figure V-4. *Évolution de la température expérimentale au centre du substrat pour les cinq puissances de chauffage considérées.*

V.2.2. Température des filaments des lampes

Les **évolutions de la température des filaments des lampes** sont représentées par la Figure V-5 pour les cinq puissances de chauffage.

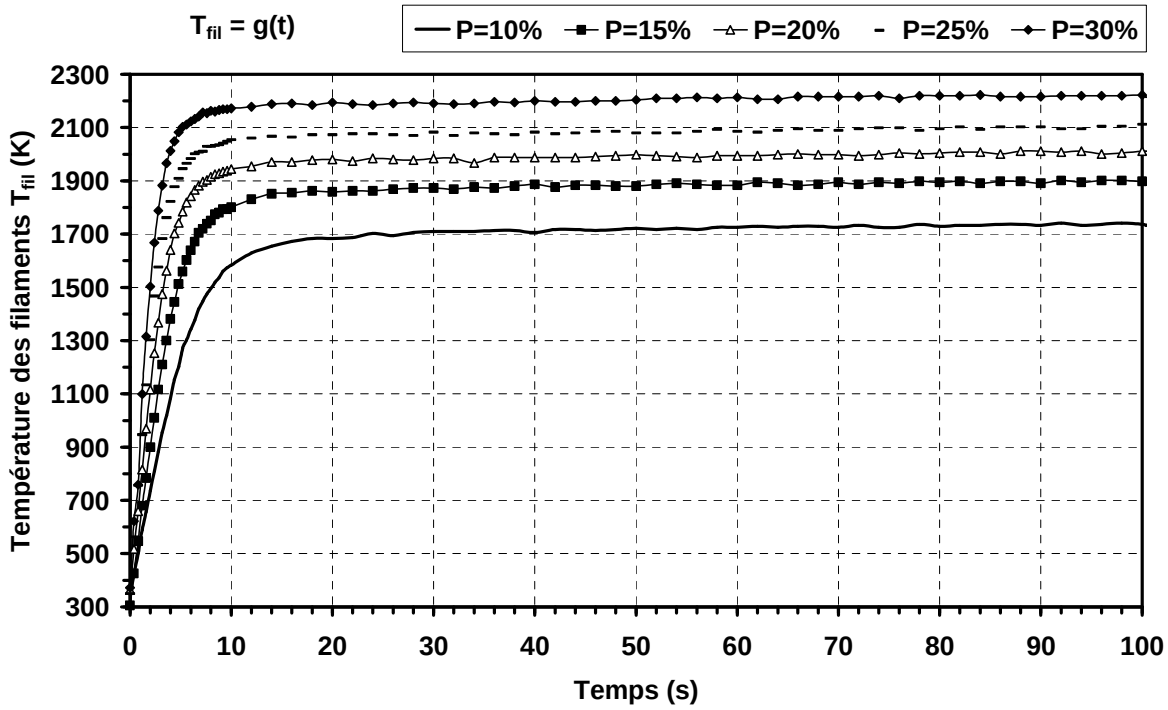


Figure V-5. *Évolution de la température expérimentale des filaments des lampes pour les cinq puissances de chauffage considérées.*

V.2.3. Hypothèse du régime permanent

La validation du modèle doit être effectuée en **régime permanent** parce que la température est **stable**. Une **meilleure précision** pour les mesures est alors obtenue.

La **durée de stabilisation** des températures expérimentales doit donc être déterminée. Pour cela, l'**évolution de la dérivée** de la température au centre du substrat (Figure V-6) et celle de la température des filaments des lampes (Figure V-7) sont analysées. La stabilisation de la température peut être considérée lorsque la variation est suffisamment **faible**.

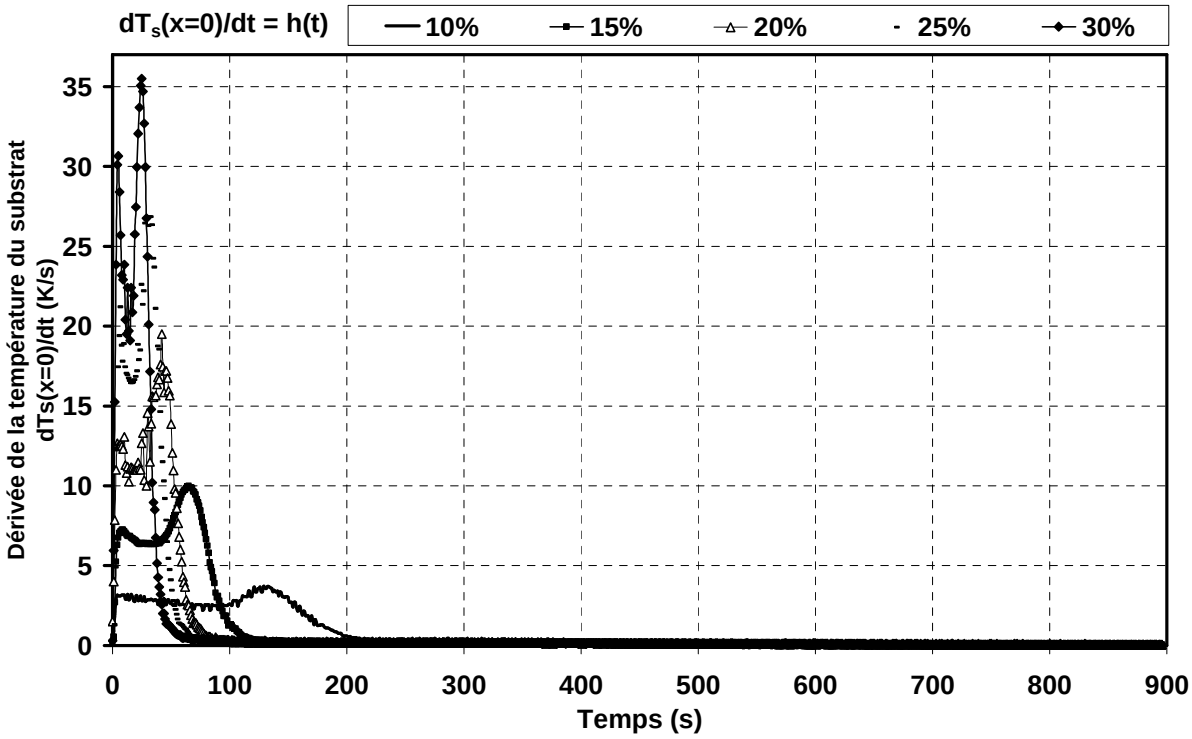


Figure V-6. *Évolution de la variation de la température expérimentale au centre du substrat pour les cinq puissances de chauffage considérées.*

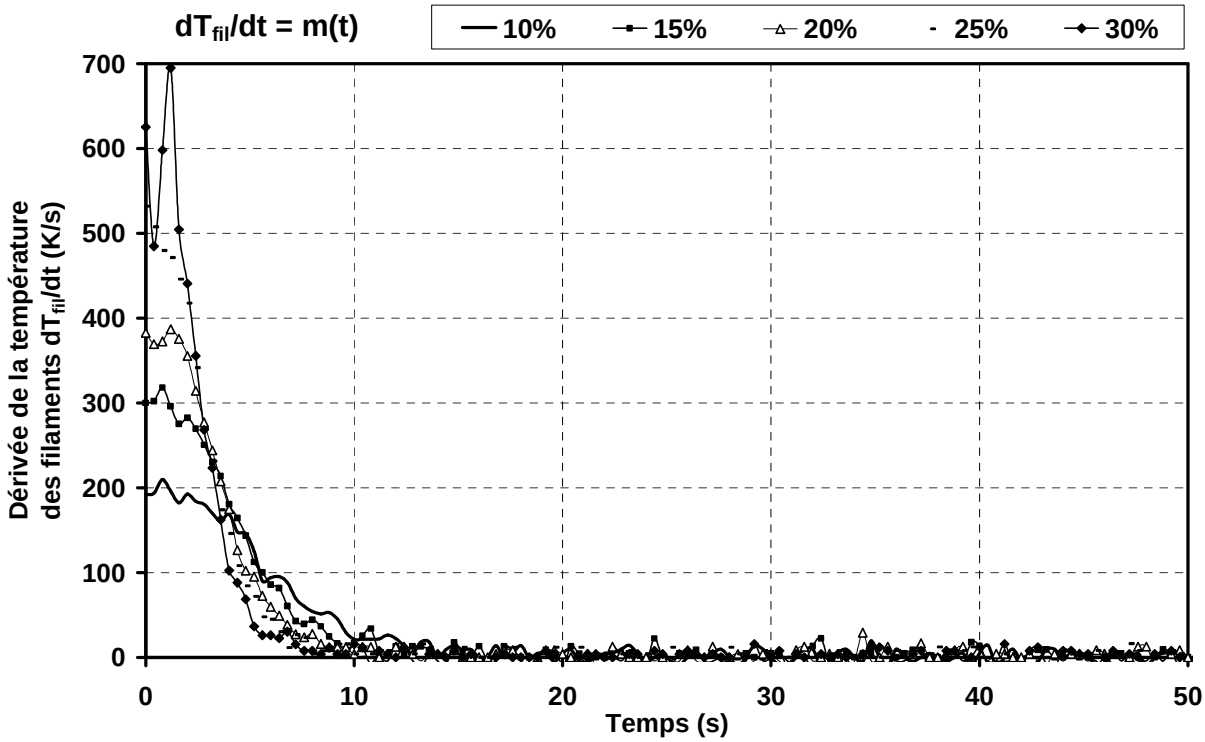


Figure V-7. *Évolution de la variation de la température expérimentale des filaments des lampes pour les cinq puissances de chauffage considérées.*

La variation de **la température expérimentale du substrat** est inférieure à 0,033 $K.s^{-1}$ après une durée de chauffage de 900 secondes. Cette variation est très faible puisqu'elle est inférieure à 4‰ de la température du substrat. L'hypothèse d'une température expérimentale du substrat **stabilisée** peut donc être faite pour cette **durée de 900 secondes**.

Pour **la température des filaments des lampes**, l'hypothèse de la **stabilisation** peut être faite après **10 secondes** d'alimentation en puissance électrique. En effet, pour cette durée, la variation est inférieure à 10 $K.s^{-1}$, soit à 0,6% de la température des filaments. On peut remarquer qu'après cette durée de 10 secondes d'alimentation, la température du filament fluctue dans un intervalle très restreint de ± 10 K, soit ± 0,5% de la température des filaments.

V.3. Validation de la modélisation du système thermique rapide

V.3.1. Confrontation des profils de température

Les profils de la température expérimentale du substrat à 900 secondes de chauffage sont ici comparés à ceux obtenus par simulation pour les cinq puissances appliquées aux lampes.
Le graphe de la Figure V-8 montre une confrontation pour 20% de puissance avec les modèles en deux et trois dimensions. Des résultats **similaires** sont obtenus pour les autres puissances. Une légère dissymétrie du profil d'un ordre de grandeur de 10 K est constatée du côté de l'extraction. Le profil de température en trois dimensions a été obtenu avec le même nombre de rayons que le profil en deux dimensions. Il peut être lissé en considérant un plus grand nombre de rayons. Cependant, le temps de calcul devient beaucoup plus important et les températures obtenues sont extrêmement proches.

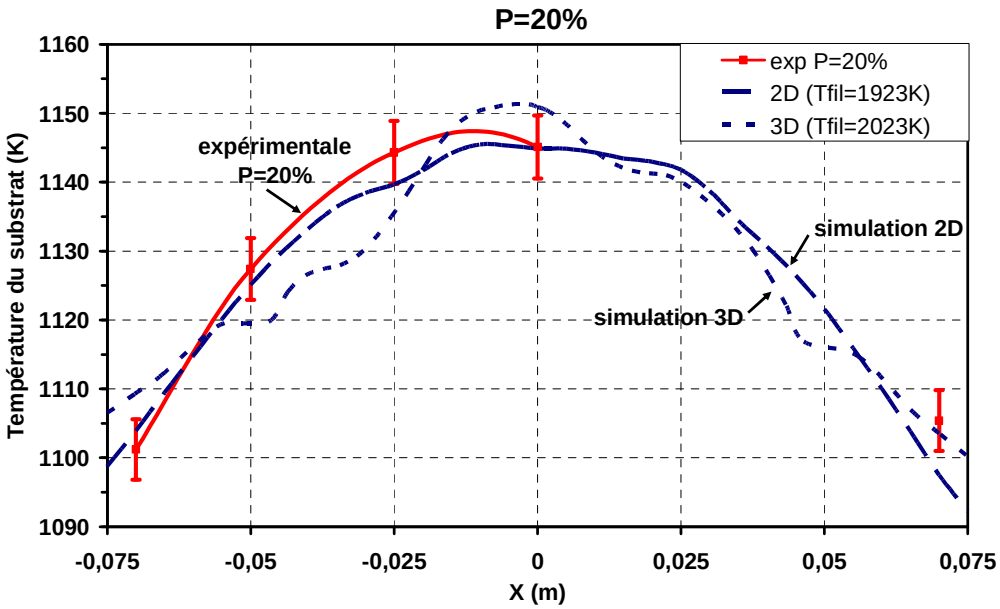


Figure V-8. *Confrontation entre le profil expérimental de la température à 20% de puissance avec ceux des simulations en deux et trois dimensions.*

Pour vérifier la concordance des résultats expérimentaux et des résultats calculés, il est intéressant de regarder les **différences de température relatives**.

Ces différences de températures sont données en valeur absolue par les graphiques de la Figure V-9. Les graphiques a, b, c et e montrent les différences pour les thermocouples 1 à 4 qui sont placés du côté de l'injection pour les puissances de chauffage de 10, 15, 20 et 25%. Pour les graphiques d et f, les thermocouples 1 à 4 ont été tournés de 180°. Ils sont placés du côté opposé, celui de l'extraction. Les puissances de chauffage sont respectivement de 20 et 30%.

Le Tableau V-1 indique les températures expérimentales des filaments et celles entrées dans les simulations numériques.

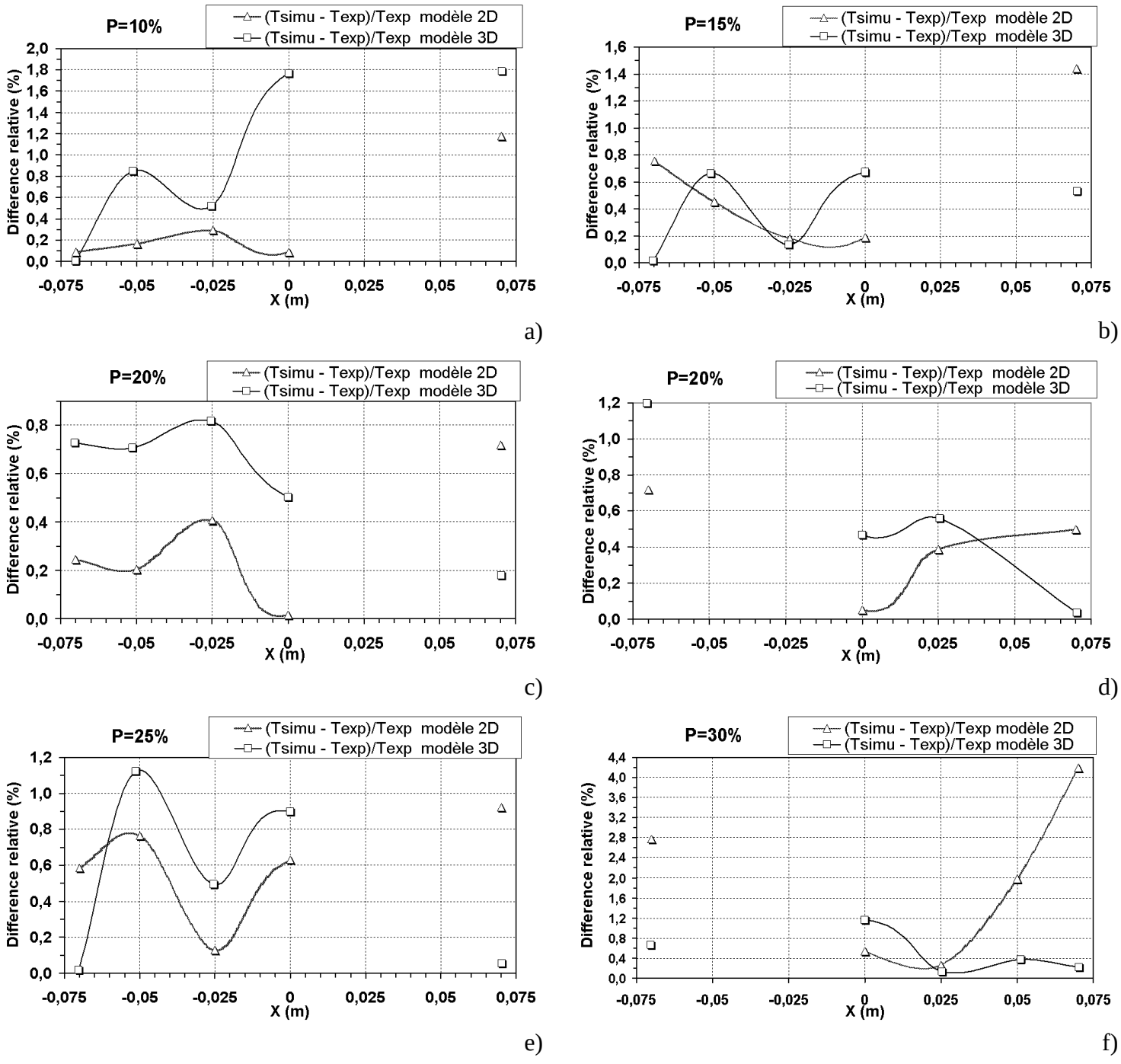


Figure V-9. *Différences relatives entre les températures expérimentales du substrat et celles calculées.*

Puissance appliquée aux lampes (%)	**Température des filaments**		
	Expérience	**Modèle 2D**	**Modèle 3D**
10	1757	1653	1698
15	1917	1778	1873
20	2028	1923	2023
25	2115	2013	2068
30	2235	2043	2098

Tableau V-1. *Températures des filaments.*

➢ **Analyse de la Figure V-9**

Les profils de température calculés sont en **bon accord** avec les résultats expérimentaux. En effet, la différence entre les températures calculées et mesurées est inférieure à 2% pour tous les thermocouples. Seul le modèle en deux dimensions pour la puissance élevée de 30% présente une différence légèrement supérieure. Cette dernière est située entre 2 et 4,3% pour les thermocouples proches du bord du substrat, ce qui reste un accord acceptable.

Pour la puissance de chauffage de 20%, le **bon accord** est également obtenu entre les températures mesurées et calculées quand les thermocouples sont **tournés de 180°**. Ainsi, la bonne concordance entre les températures expérimentales et calculées est confirmée sur une plage plus large de positions.

Par ailleurs, la plupart des valeurs mesurées se situe dans l'intervalle de précision des thermocouples. Cet intervalle de ± 0,4% de la température mesurée. Sur l'exemple de la Figure V-8, cet intervalle est représenté sous forme de barres.

V.3.2. Confrontation des températures des filaments

Les températures des filaments introduites dans les calculs (Tableau V-1) sont confrontées à celles obtenues expérimentalement sur le graphique de la Figure V-10.

L'**incertitude** est calculée en utilisant les expressions V-1 à V-7. Elle est indiquée sous forme de **barres** pour chacune des températures de filament mesurée.

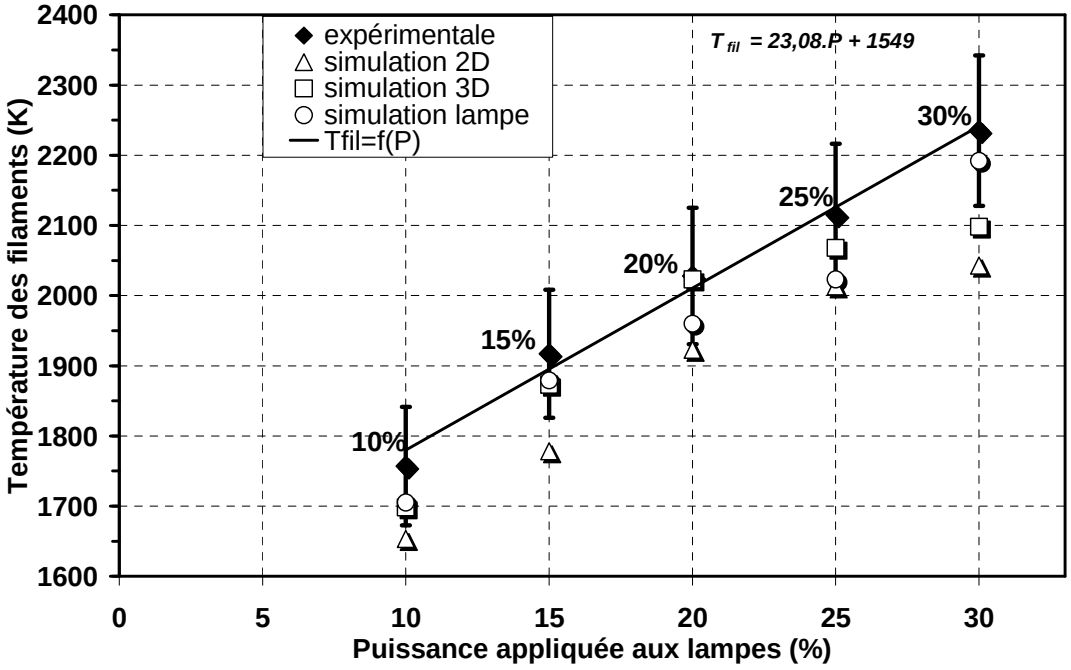


Figure V-10. *Comparaison entre les températures expérimentales des filaments et celles dans les calculs.*

Un **bon accord** est obtenu entre les températures des filaments de la modélisation en trois dimensions et celles évaluées expérimentalement. En effet, toutes les températures des filaments introduites se situent **dans l'intervalle d'incertitude** sauf pour la puissance de chauffage de 30%. Néanmoins, la différence avec la valeur expérimentale est de 6,1% pour cette puissance, ce qui peut être considéré comme un accord acceptable.

Pour le modèle en deux dimensions, les températures des filaments introduites dans les simulations sont toutes inférieures à celles de l'expérience. Pour le chauffage à 20% et à 25%, les valeurs sont **dans le domaine de l'incertitude**. Mais dans les trois autres cas elles ne le sont pas.

Pour avoir une meilleure appréciation, la différence avec les températures expérimentales des filaments est donnée en pourcentage dans le Tableau V-2.

Puissance (%)	**Différence de température des filaments Expérience - simulations 2D (%)**
10	5,9
15	7,3
20	5,2
25	4,8
30	8,6

Tableau V-2. *Comparaison entre les températures des filaments expérimentales et celles du modèle en deux dimensions.*

Pour toutes les puissances de lampe, les différences se situent entre 4,8 et 8,6% en dessous de la valeur expérimentale, ce qui reste inférieur à 10%. Un **accord acceptable** est donc obtenu. La différence doit être gardée à l'esprit quand des calculs sont réalisés en deux dimensions. Mais il faut interpréter cette **différence**.

Cette différence est due à **la représentation géométrique du modèle en deux dimensions**. Une coupe dans le plan (Oxy) a été réalisée (Figure III-1).

Cette représentation implique que la lampe et le substrat ont des longueurs infinies si on imagine la direction (Oz). Ceci n'est pas réaliste.

La géométrie en trois dimensions prend en compte avec précision la forme rectangulaire du four et la forme cylindrique du réacteur. Le réacteur est « fermé » par les parois dans cette représentation.

Par conséquent, les températures des filaments introduites dans les simulations en deux dimensions sont inférieures pour les mêmes températures du substrat à cause de la longueur infinie des lampes et du substrat.

V.3.3. Conclusions

En somme, les modèles en deux et trois dimensions sont **validés**, le modèle en trois dimensions étant validé avec plus de précision.

Cependant, la durée du calcul pour le modèle en deux dimensions est de seulement quinze minutes. Il faut compter dix fois plus de temps pour le modèle en trois dimensions. Les **simulations en deux dimensions** sont donc **pratiques** car elles donnent rapidement une idée du résultat. Une correction de 5 à 8% est à considérer pour la température des filaments. Les simulations en trois dimensions donnent un résultat très précis en un temps beaucoup plus long.

À travers cette étape de validation, **deux correspondances** sont établies. Une première indiquée par la Figure V-10 qui met en relation la puissance appliquée aux lampes et la température des filaments des lampes. La seconde relie la puissance appliquée aux lampes à la température du substrat. Elle est présentée Figure V-11.

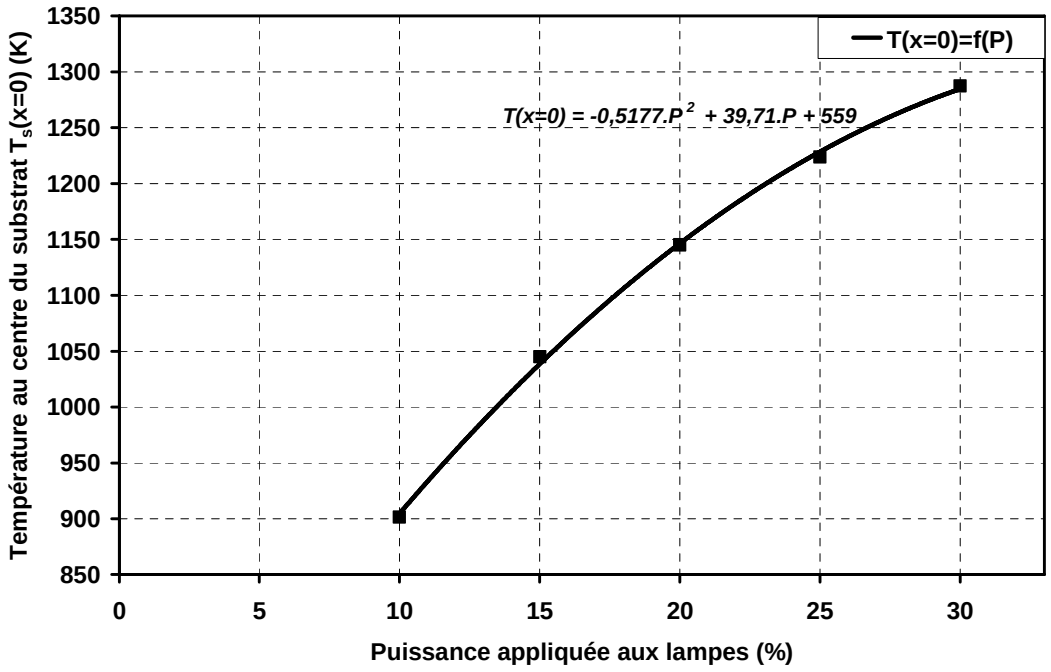


Figure V-11. *Relation entre la puissance appliquée aux lampes et la température expérimentale et simulée au centre du substrat.*

V.4. Validation de la modélisation approfondie de la lampe infrarouge

La **démarche** pour déterminer la puissance appliquée expérimentalement aux lampes infrarouges est la suivante. D'abord, les intensités et les tensions sont mesurées pour une lampe durant les essais en régime permanent. La puissance électrique dissipée dans le filament est ensuite calculée. Comme le filament a un volume de $5{,}67.10^{-7}$ m^3, la puissance volumique appliquée au filament des lampes infrarouges est déduite. Toutes les valeurs obtenues sont consignées dans le Tableau V-3.

Puissance expérimentale (%)	**Intensité expérimentale (A)**	**Tension expérimentale (V)**	**Puissance expérimentale (W)**	**Puissance volumique expérimentale ($x10^8$ $W.m^{-3}$)**
10	2,98	62,3	186	3,27
15	3,51	81,5	286	5,05
20	3,95	98,5	389	6,86
25	4,33	113,4	491	8,66
30	4,66	131,5	613	10,81

Tableau V-3. *Puissance appliquée expérimentalement.*

Les puissances volumiques expérimentales sont entrées dans le modèle approfondi de la lampe. Les résultats calculés pour la température des filaments sont confrontés aux résultats expérimentaux dans le Tableau V-4. Pour ce faire, **les différences entre les valeurs expérimentales et calculées** sont déterminées.

Puissance (%)	**Température filament (K)**		**Différence par rapport à la valeur expérimentale (%)**
	Expérimentale	**Modélisation lampe**	
10	1757	1705	3,0
15	1917	1879	2,0
20	2028	1960	3,4
25	2115	2023	4,3
30	2235	2192	1,9

Tableau V-4. Confrontation des températures des filaments.

Les résultats calculés pour la température du filament sont également reportés sur le graphique de la Figure V-10 où toutes les températures des filaments sont comparées.

- **Analyse du Tableau V-3, du Tableau V-4 et de la Figure V-10**

Les différences entre les valeurs expérimentales et calculées sont toutes inférieures à 5% (Tableau V-4).

De plus, les températures obtenues par simulation de la lampe sont toutes dans l'intervalle d'incertitude de la valeur expérimentale (Figure V-10).

Par conséquent, la modélisation de la lampe est **validée**.

Remarque : Comparaison avec les données du constructeur

Les températures des filaments expérimentales et simulées sont confrontées aux données du constructeur sur le graphe de la Figure V-12. Les températures du constructeur sont données suivant la tension (se référer à l'Annexe 2). La confrontation des températures est effectuée pour les mêmes tensions appliquées.

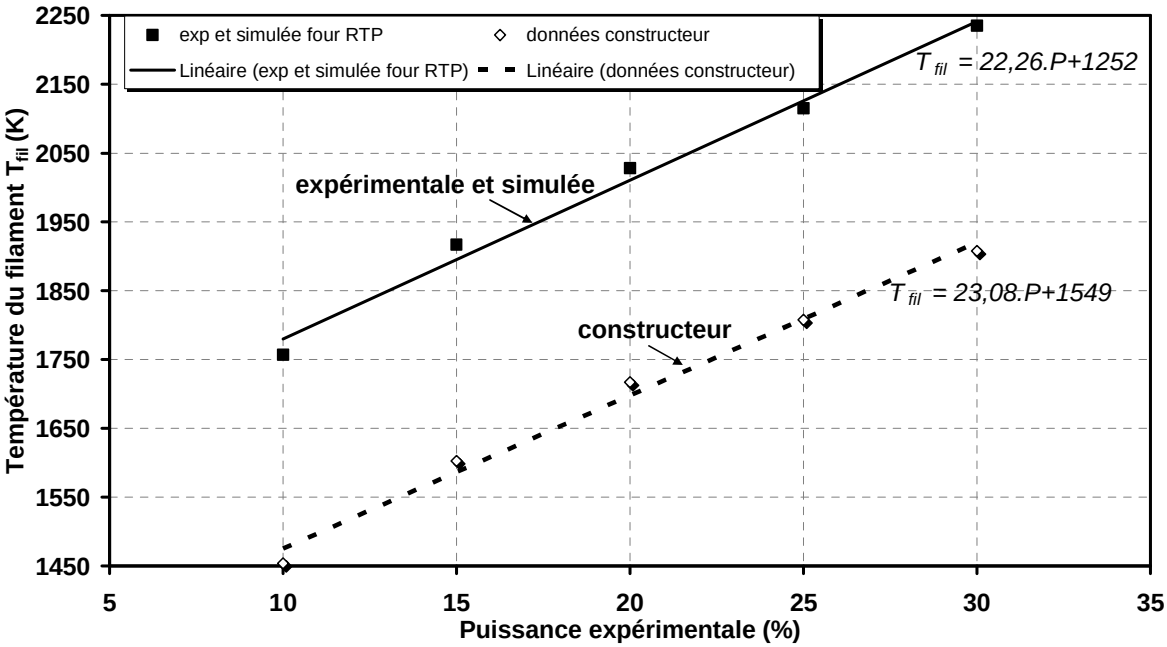


Figure V-12. *Températures des filaments expérimentales et simulées confrontées aux données du constructeur*.

Les courbes de la Figure V-12 montrent que les températures du constructeur sont plus basses d'environ 300 K à celles évaluées expérimentalement dans le four du système thermique rapide. **Deux raisons** peuvent être évoquées.

Tout d'abord, la formule donnée par le constructeur est assez générale puisqu'elle s'applique à un nombre important de modèles de lampes infrarouges. Elle a pour rôle de donner au client un ordre de grandeur de la température du filament en fonction de la tension qui lui est

appliquée. Par conséquent, les températures de filament données ont un écart plus ou moins important avec la température du constructeur selon le modèle.
La température du constructeur a été évaluée pour une lampe isolée tandis que dans le four d'un système RTP, les filaments sont soumis à l'influence d'un milieu confiné avec des parois réfléchissantes. De plus, les lampes voisines se chauffent mutuellement.

V.5. Conclusion

La **bonne concordance** entre les résultats expérimentaux et ceux des simulations en régime permanent conduit à **valider la modélisation du système thermique rapide et celle, approfondie de la lampe infrarouge**. Les températures des filaments à entrer dans ces modèles sont maintenant connues avec plus de précision.

Une **correspondance entre la puissance des lampes et la température du substrat** a été obtenue. La relation entre le chauffage des lampes et la température du substrat est donc mieux connue. Cette relation permettra d'avoir une meilleure connaissance du budget thermique pour le substrat.

L'intérêt majeur de disposer d'une modélisation validée de la simulation est de pouvoir faire varier à moindre coût les paramètres. Le but est de mieux cerner les phénomènes mis en jeu dans le système pour l'optimiser. Comme le modèle en **deux dimensions** donne des résultats équivalents à celui en trois dimensions en dix fois moins de temps, celui-ci doit être utilisé dans les calculs en première approche.

Il faut donc à présent **utiliser le modèle en deux dimensions** pour mieux **comprendre les phénomènes impliqués dans le chauffage du substrat**.

Références du chapitre V

Bucher, J., (2004), *The Metrology Handbook,* ASQ Quality Press, Milwaukee, Wisconsin.

Eurotherm : http://www.eurotherm.com/ .

Logerais, P.O., M. Girtan, A. Bouteville, (2005), *RTLPCVD modelling: Steady-state simulations*, Proceedings - Electrochemical Society, PV 2005-09, pp. 49-56.

Omega : http://www.omega.com/ .

Smithells, C.J., (1953), *Tungsten: Its Metallurgy, Properties, and Applications*, Chemical Publishing Company, New York. (http://www.tungsten.com/mtstung.html).

CHAPITRE VI

Corrélation entre la répartition de température du substrat de silicium et celle du hublot

Dans l'état de l'art du chapitre I, on a vu que le hublot chaud est l'une des causes principales de la non-uniformité de température du substrat de silicium lors d'un procédé thermique rapide. Pour mieux comprendre ***l'effet du hublot****, la modélisation en deux dimensions va être utilisée.*

L'objectif de cette étude est de ***mettre en évidence la relation entre la répartition de la température du substrat et celle du hublot****. Pour cela, des* ***simulations*** *de la modélisation en deux dimensions du système rapide thermique AS-One 150 sont effectuées. Certains paramètres de la modélisation vont être modifiés pour apprécier l'influence du hublot sur la température du substrat et inversement. Différentes situations, difficiles à envisager dans la réalité, sont envisagées. Les calculs sont tous réalisés en* ***régime permanent*** *pour les mêmes puissances (10 à 30%).*

Dans un premier temps, la répartition de température du substrat et celle du hublot sont comparées. Puis, l'influence du substrat sur la température du hublot est appréciée. L'inverse est ensuite réalisé. Les ***constatations*** *obtenues seront récapitulées dans la conclusion.*

VI.1. Observation des profils de température du substrat et du hublot

Les **profils de température calculés** à la surface du **substrat** et au niveau du **hublot** sont comparés pour les puissances considérées. La Figure VI-1 montre l'exemple de 15% de puissance. Des résultats de la même forme sont obtenus pour les autres puissances.

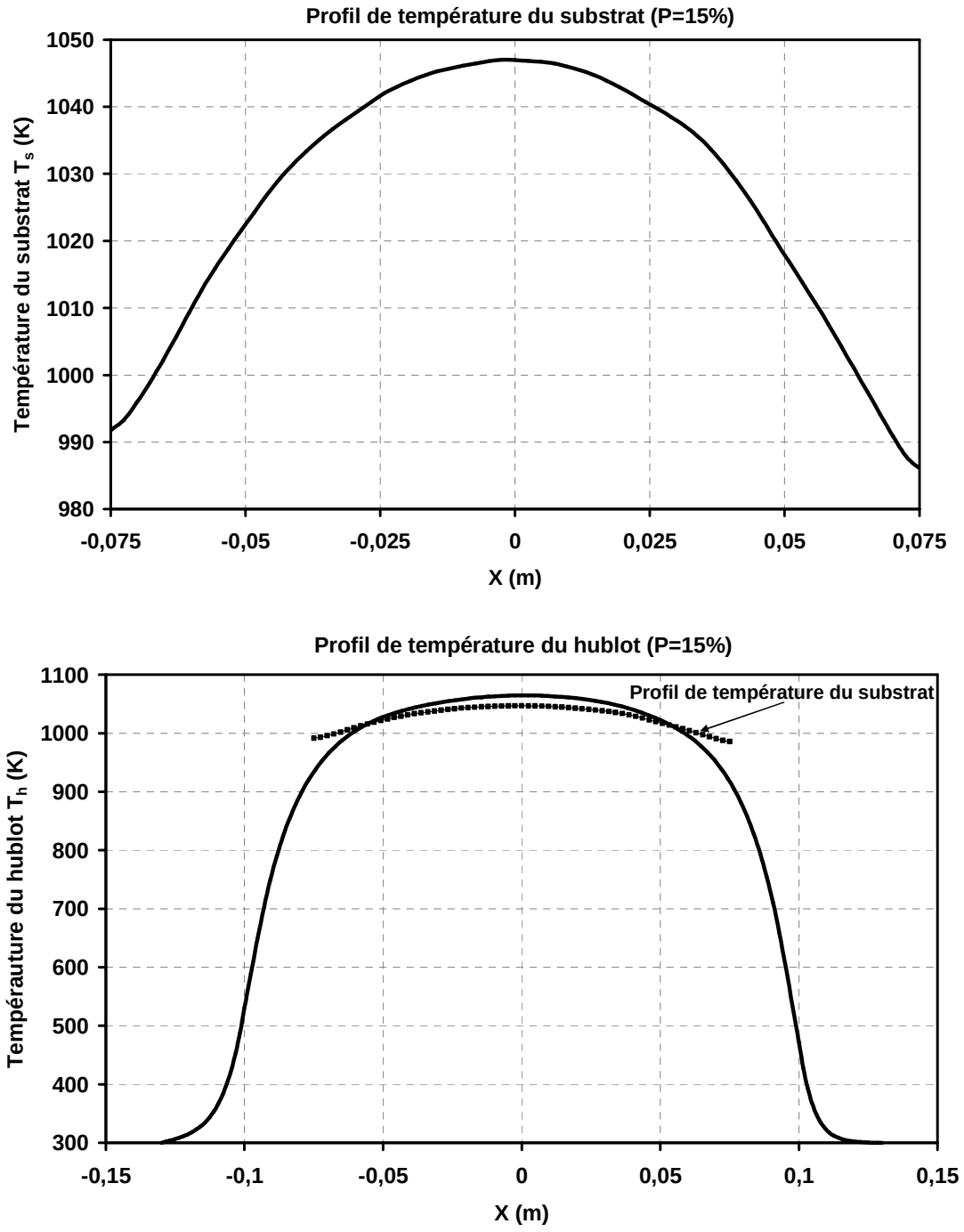


Figure VI-1. *Profils de température du substrat (en haut) et du hublot (en bas).*

On remarque que les profils de température du substrat et du hublot ont tous deux une **forme en cloche**. Il y a une **forte décroissance de la température vers le bord**.

Comparons les différences entre les températures au centre et au bord du substrat et du hublot. On choisit pour cela de **relever les températures en quatre points** :

- au centre du substrat $T_s(x=0)$;
- à 5 mm de son bord $T_s(x=-0{,}070m)$;
- au centre du hublot $T_h(x=0)$;
- et à une position proche de son bord intérieur $T_h(x=-0{,}0875m)$.

Ces points sont indiqués sur le schéma de la Figure VI-2. Les **écarts de température entre le centre et le bord** pour le substrat noté E_{cbs} et pour le hublot E_{cbh} ont alors pour expressions :

$$E_{cbs} = T_s(x=0) - T_s(x=-0{,}070m) \qquad \text{(VI-1)}$$

$$E_{cbh} = T_h(x=0) - T_h(x=-0{,}0875m) \qquad \text{(VI-2)}$$

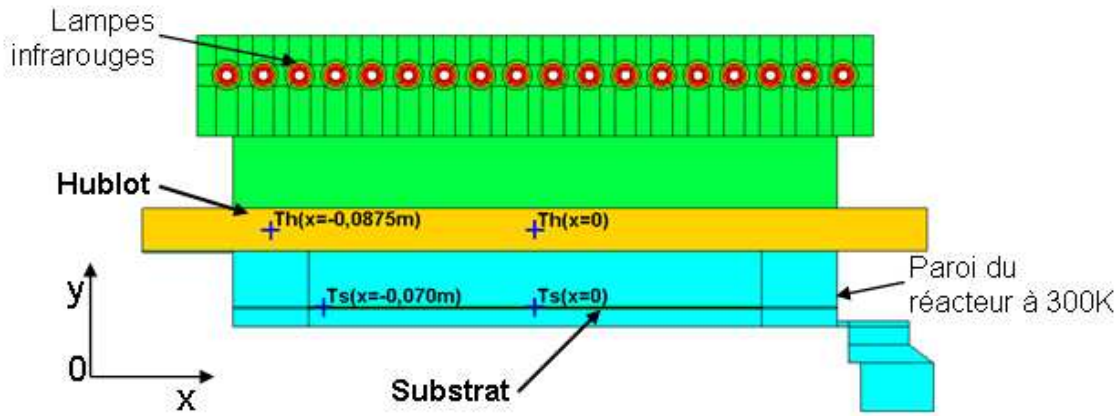


Figure VI-2. *Les quatre points de relevé de la température.*

La Figure VI-3 donne les écarts de la température entre le centre et le bord du substrat et du hublot suivant la puissance de chauffage. **Ces écarts augmentent tous les deux de manière linéaire suivant la puissance**.

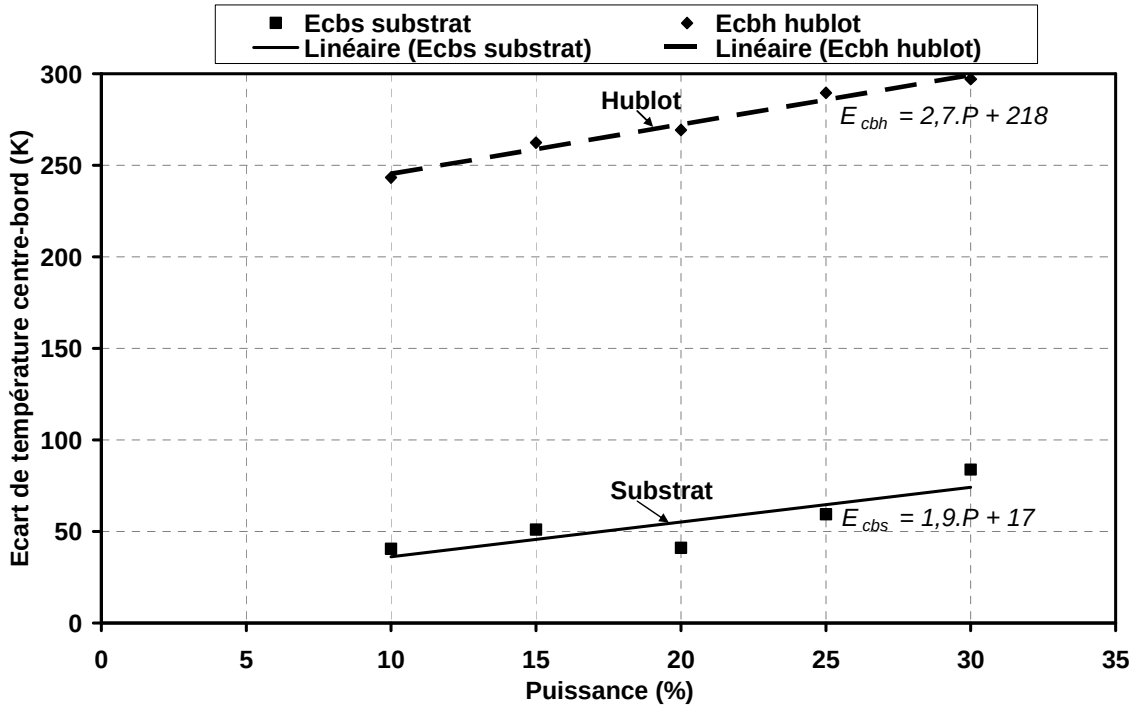


Figure VI-3. *Écarts de température centre-bord suivant la puissance.*

L'observation de la ressemblance ici constatée conduit à **plusieurs interrogations** :

- Y-a-t-il une **relation** entre la répartition de la température du substrat et celle du hublot ?
- Si oui, dans **quel sens** est-elle ? Le hublot chauffe-t-il le substrat ? Ou à l'inverse, le substrat chauffe-t-il le hublot ?
- Quelles sont alors **les conséquences sur** l'**uniformité de la température du substrat** ?

VI.2. Influence du substrat sur la température du hublot

VI.2.1. Température du hublot sans substrat

Le système AS-One 150 est simulé **sans la présence du substrat**. Dans le modèle, le substrat est remplacé par de l'azote à la pression de 300 Pa comme dans le reste du réacteur.

Les températures obtenues au centre du hublot avec et sans la présence du substrat sont confrontées sur la Figure VI-4.

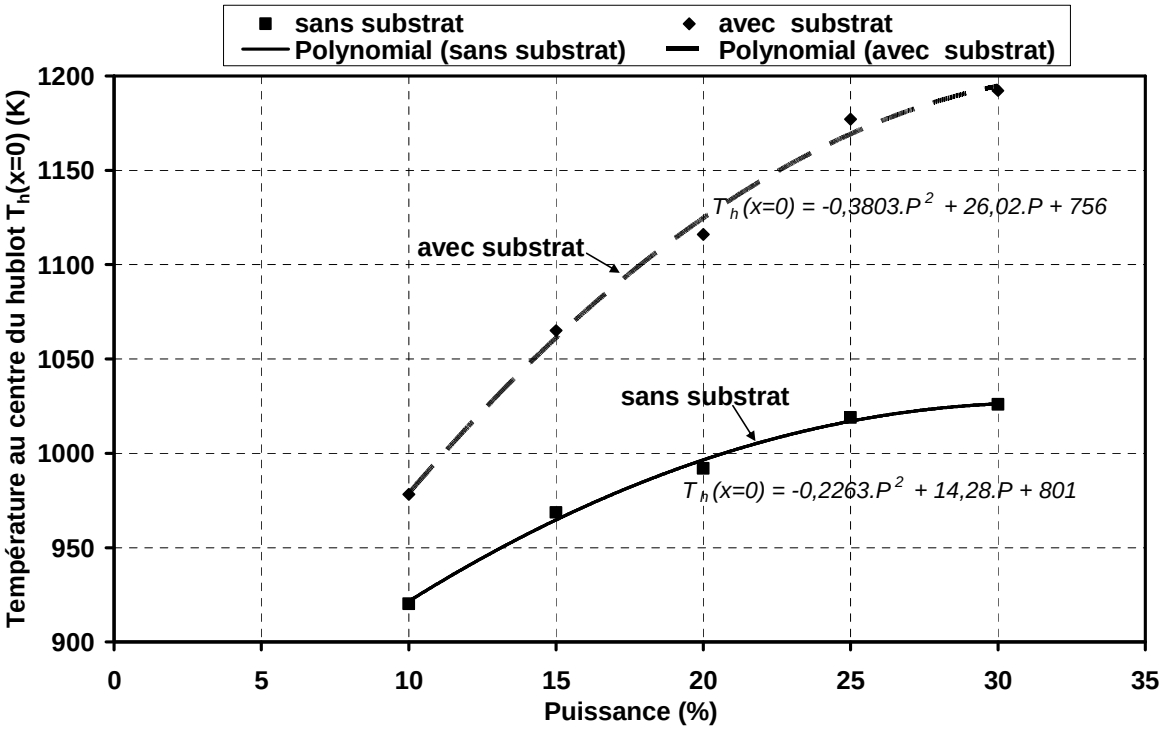


Figure VI-4. *Température au centre du hublot avec et sans substrat.*

La présence du substrat a pour effet d'augmenter la température au centre du hublot. L'augmentation est d'environ 125°C soit environ 10% de la température du hublot en l'absence de substrat.

Cette augmentation est relativement faible pour deux raisons. Les parois du réacteur sont très réfléchissantes. De plus, les simulations sont effectuées en régime permanent, c'est-à-dire pour une durée de chauffage infinie. Le hublot a suffisamment de temps pour accumuler une partie importante des rayonnements présents dans le système.

VI.2.2. Modification des propriétés radiatives du substrat

Pour compléter ce résultat, les simulations du système thermique rapide sont réalisées en modifiant **les propriétés radiatives du substrat**. Autrement dit, les propriétés en volume sont conservées mais les propriétés radiatives en surface sont modifiées. L'objectif est de savoir si les propriétés radiatives du substrat contribuent à l'élévation de la température du hublot.

Quatre cas sont considérés pour les propriétés radiatives du substrat :

- sans substrat, résultat obtenu précédemment
- propriétés radiatives du silicium
- celles d'un réflecteur parfait
- celles d'un corps noir qui absorbe parfaitement et émet dans tout le domaine infrarouge

Les ordres de grandeur de l'émissivité, de l'absorptivité et de la réflectivité sont indiqués dans le Tableau VI-1. On rappelle que l'émissivité est égale à l'absorptivité par la loi de Kirchhoff (relations III-26 et III-27).

Coefficient	**Parois du réacteur réfléchissante***	**Silicium**	**Réflecteur parfait**	**Corps noir**
Émissivité = absorptivité	0,25	0,7	0	1
Réflectivité	0,75	0,3	1	0

Tableau VI-1. *Propriétés radiatives de surface entrées pour le substrat.*

*sans substrat

Les températures au centre du hublot et du substrat ont été relevées suivant la puissance de chauffage (Figure VI-5 et Figure VI-6).

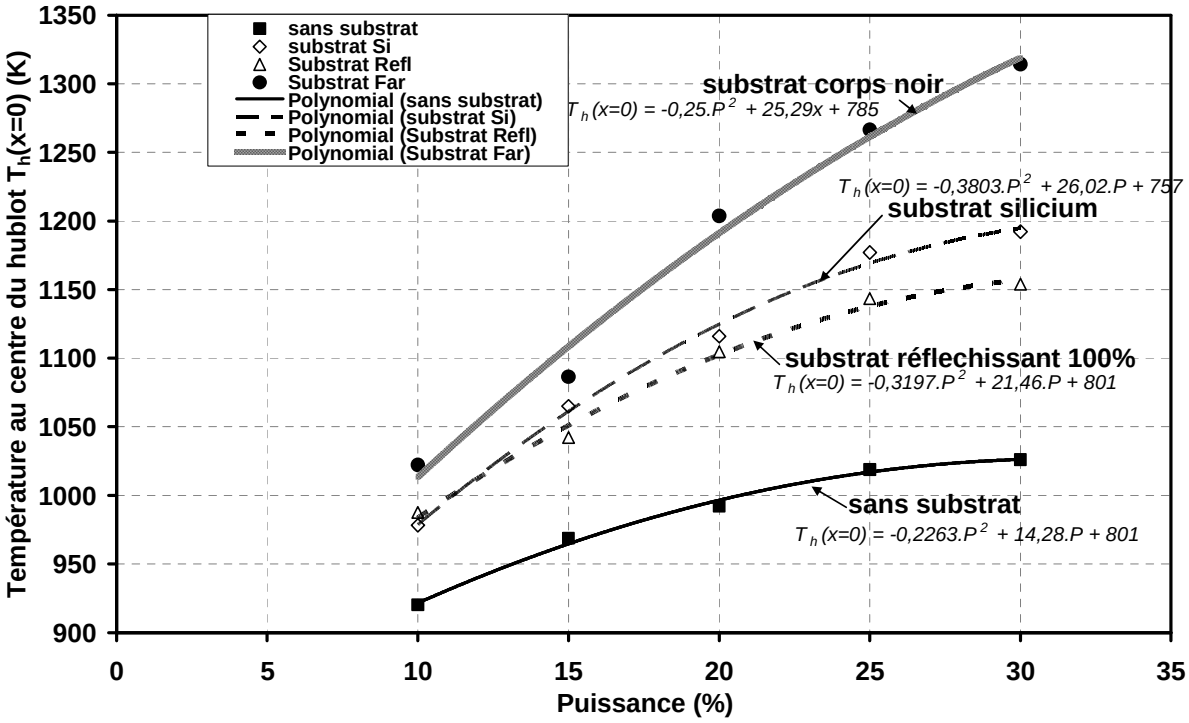


Figure VI-5. *Températures au centre du hublot suivant la puissance pour différentes propriétés radiatives du substrat.*

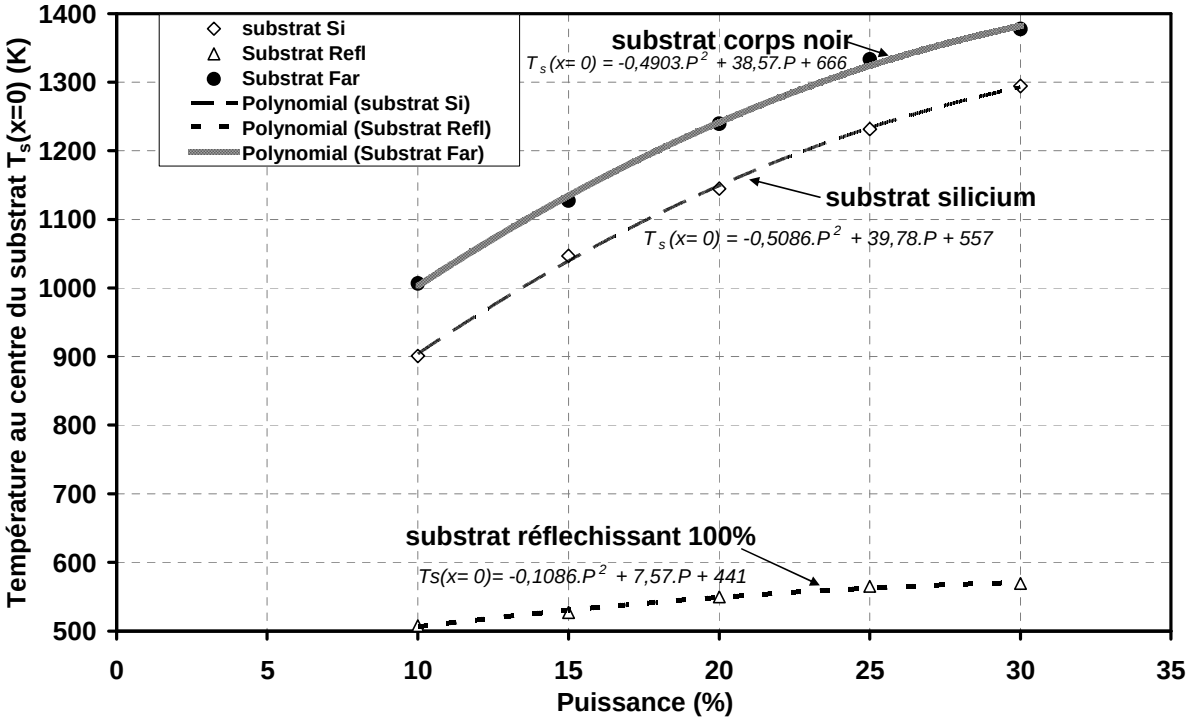


Figure VI-6. *Températures au centre du substrat suivant la puissance pour différentes propriétés radiatives du substrat.*

Le substrat et le hublot sont les plus chauds dans le cas où le substrat a la propriété d'un corps noir. **Les températures du substrat et du hublot suivent donc les propriétés d'absorption et d'émission du substrat**. Plus elles ont des coefficients élevés, plus les températures seront grandes. Le hublot est donc chauffé par le rayonnement émis par le substrat.

Lorsque le substrat a la propriété d'un réflecteur parfait, sa température est d'environ 520 K. Comme le substrat réfléchit dans tout le domaine spectral, on s'attendait à obtenir une température proche de 300 K. Le substrat est chauffé par convection car il y a de l'azote chaud dans le réacteur. La température du hublot est plus élevée que dans le cas où il n'y a pas de substrat car la réflectivité est plus importante. **La réflectivité du substrat a une influence sur la température du hublot : plus elle est importante et plus la température du hublot sera élevée**.

La réflectivité des parois peut aussi contribuer à élever la température du hublot.

- **<u>Constatation n°1</u> : L'émissivité et la réflectivité du substrat, voire celle des parois du réacteur ont un effet sur la température du hublot.**

VI.3. Influence du hublot sur la température du substrat

VI.3.1. Température du substrat sans hublot

On se place dans le cas contraire au précédent. Le système est simulé **sans la présence du hublot** afin d'apprécier son influence sur la température du substrat *(Logerais et al. 2006)*.

Le hublot a été remplacé par un volume contenant de l'azote dans le modèle en deux dimensions. Le réacteur est mis en commun avec le four. L'intérieur du système contient de l'azote à la pression de 300 Pa. Cette configuration n'est pas applicable en réalité car le hublot assure l'étanchéité du réacteur.

Les profils de température du substrat calculés sont comparés avec et sans la présence du hublot. La Figure VI-7 indique la température au centre du substrat pour les différentes puissances. L'écart de température entre le centre et le bord est montré sur la Figure VI-8.

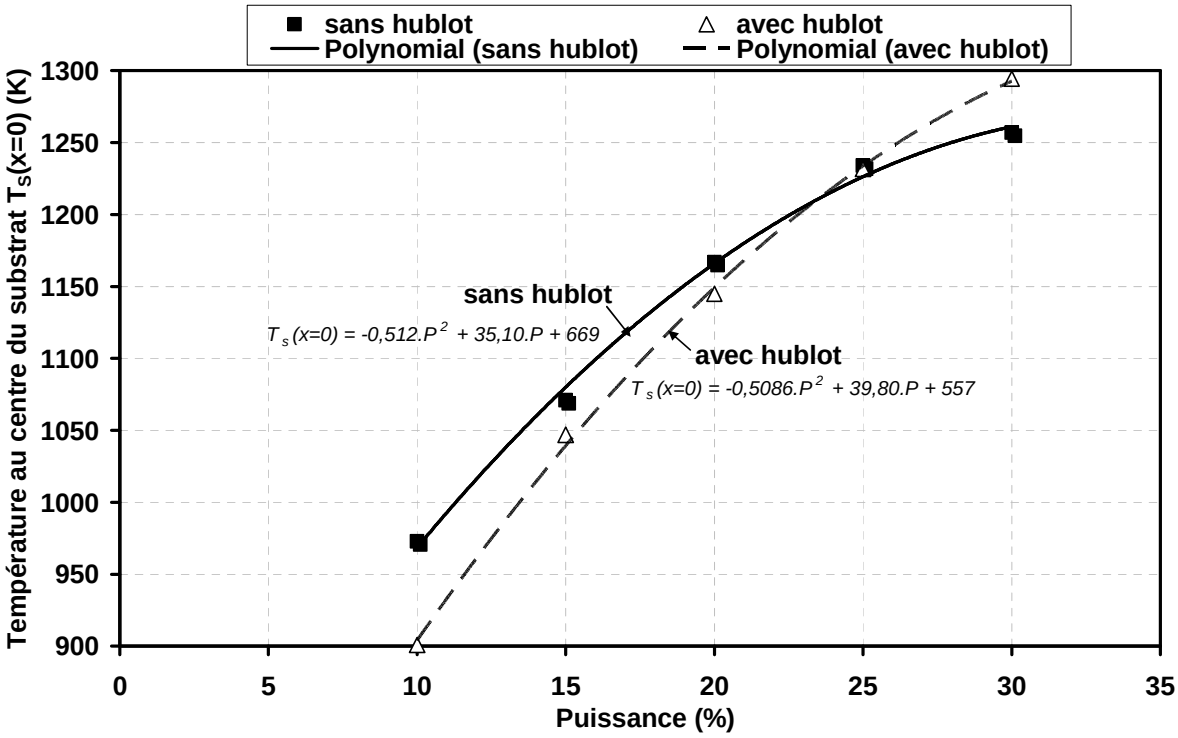


Figure VI-7**.** *Comparaison entre la température au centre du substrat avec et sans hublot.*

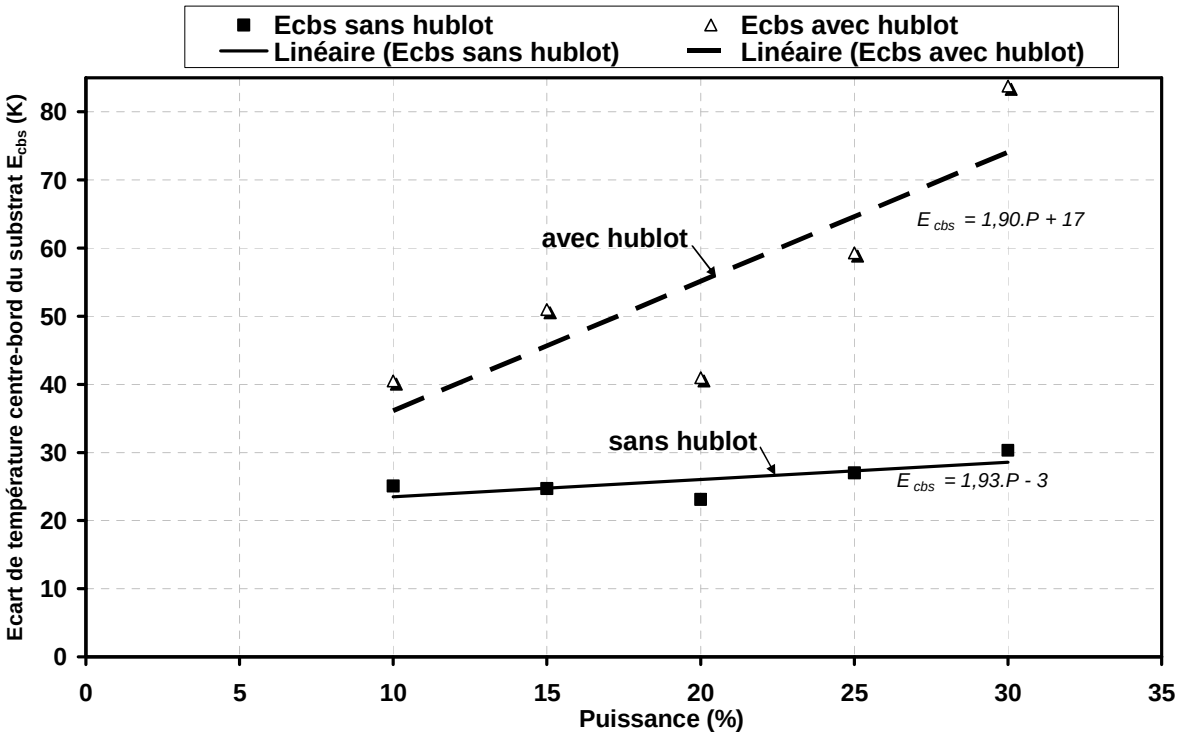


Figure VI-8. *Écart de température centre-bord du substrat avec et sans hublot.*

La température au centre du substrat est dans l'ensemble légèrement plus élevée sans hublot car le hublot absorbe un peu le rayonnement des lampes infrarouges et évacue un peu de chaleur vers la paroi froide en acier.

L'écart de la température entre le centre et le bord du substrat est diminué sans hublot. Cette diminution est de l'ordre de 20 K. En pourcentage, elle peut être estimée à 40%. Cependant, l'écart de température entre le centre et le bord n'est pas nul.

- **<u>Constatation n°2</u> : l'absence de hublot permet de réduire l'écart de température entre le centre et le bord du substrat de l'ordre de 40%.**

VI.3.2. Calcul de la température du substrat avec un hublot de diffusivité thermique élevée

Il a été observé dans la partie VI.1 portant sur la comparaison des profils thermiques qu'il y a un fort gradient de température entre le centre et le bord du hublot. Il en va de même pour le substrat. Le but recherché ici est de **réduire ce gradient** pour apprécier son influence sur la répartition de la température du substrat.

Les propriétés du quartz sont indiquées dans le Tableau VI-2. Des ordres de grandeurs sont donnés car ses propriétés varient suivant sa température (chapitre III-3.3.2). On constate que le hublot a une conductivité thermique faible et une capacité calorifique élevée. Sa diffusivité thermique est donc élevée : le hublot peut stocker facilement de la chaleur.

Pour réduire au maximum la température globale du hublot et son fort gradient, il faut **augmenter sa diffusivité thermique**. De cette façon, la chaleur reçue par le hublot sera évacuée rapidement vers la paroi froide.

Pour obtenir cette diminution de diffusivité, la conductivité thermique très importante du cuivre et la capacité calorifique très faible de l'or ont été considérées dans les calculs comme caractéristiques thermiques pour le hublot. Les ordres de grandeur de ces valeurs sont donnés dans le Tableau VI-2. La densité du quartz est gardée. La diffusivité est alors divisée par un facteur 1500.

	Caractéristiques du hublot (quartz)	**Caractéristiques remplacées**
Densité ($kg.m^{-3}$)	2649	2649
Capacité calorifique ($J.kg^{-1}K^{-1}$)	1000	130 (or)
Conductivité thermique ($W.m^{-1}K^{-1}$)	2	400 (cuivre)
Diffusivité ($m.s^{-2}$)	$7{,}6.10^{-7}$	$1{,}16.10^{-3}$

Tableau VI-2. *Propriétés thermiques du quartz constituant le hublot. (ordres de grandeurs tirés de l'ouvrage Heat Transfer (Bejan 1993)).*

La Figure VI-9 donne un exemple de comparaison pour les profils de température du substrat et du hublot pour 20% de puissance. Des résultats **analogues** sont obtenus pour les autres puissances.

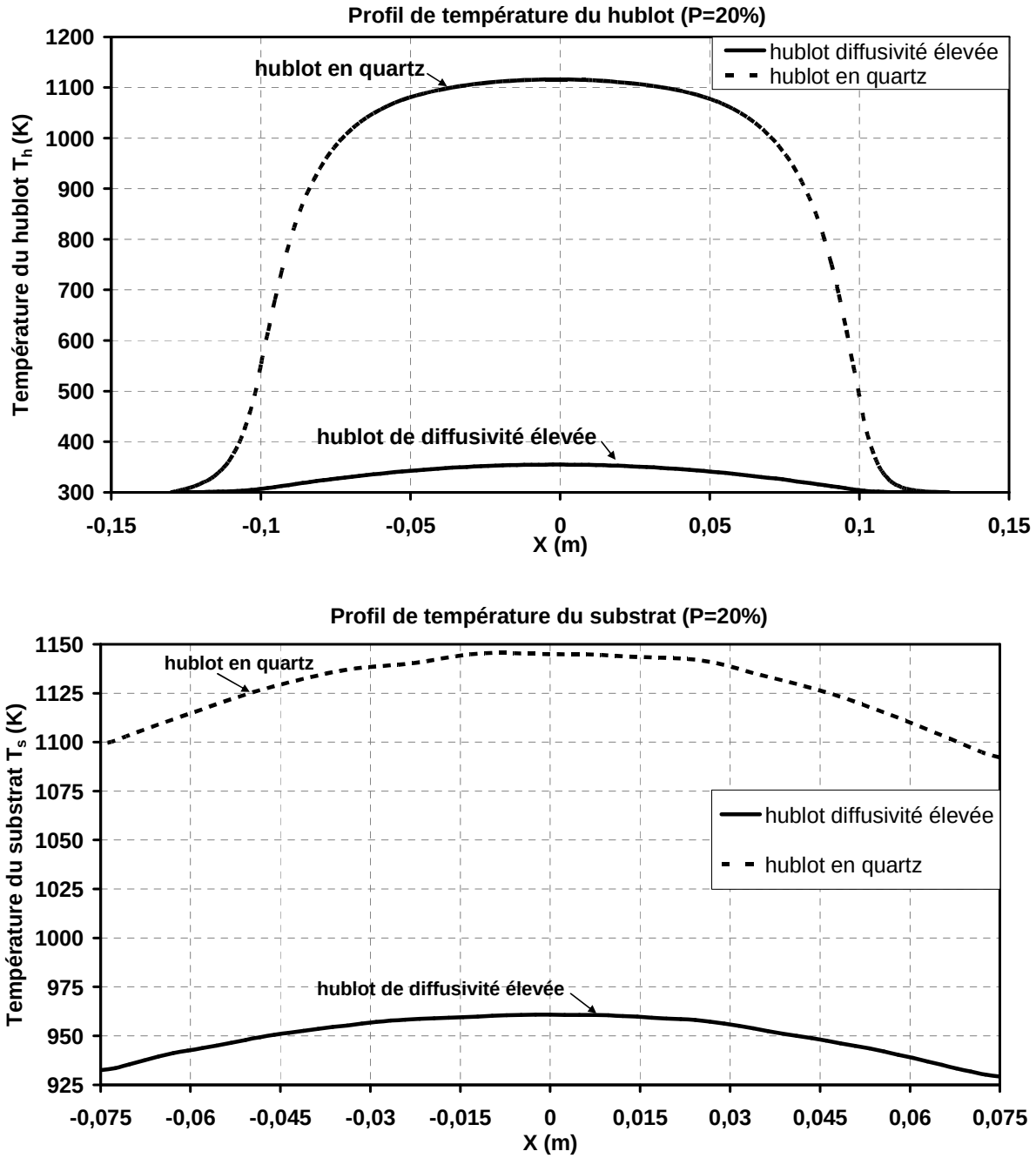


Figure VI-9. *Profils de températures du hublot (en haut) et du substrat (en bas) avec une diffusivité thermique élevée (modification) et faible (quartz) pour le hublot.*

Comme souhaité, la température globale du hublot est de l'ordre de sa température initiale de 300 K. **Pour la température du substrat, il y a un décalage des températures vers le bas.**

- **<u>Constatation n°3</u> : la diminution de la température globale du hublot entraîne une diminution de celle du substrat.**

Comme il y a un décalage, il est intéressant de comparer **l'écart de température centre-bord suivant la température au centre du substrat** obtenus avec le hublot modifié et celui en quartz. (Figure VI-10).

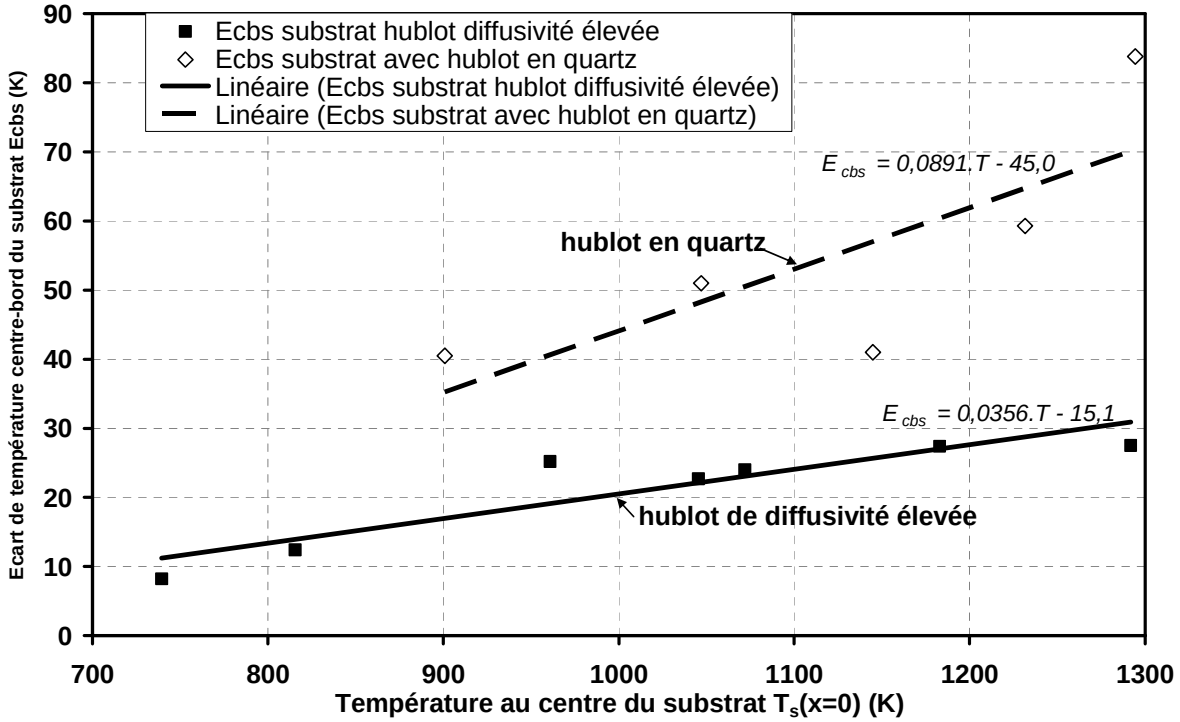


Figure VI-10. *Écart de température centre-bord du substrat suivant la température au centre de celui-ci avec une diffusivité thermique élevée (modification) et faible (quartz) pour le hublot.*

L'écart de température est réduit de moitié avec le hublot de diffusivité thermique élevée. Comme dans le cas de l'absence de hublot, l'écart de température entre le centre et le bord n'est pas nul.

➢ **<u>Constatation n°4</u> : l'écart de température entre le centre et le bord du hublot se répercute sur celui du substrat.**

VI.4. Conclusion

Les calculs en régime permanent réalisés dans cette étude ont permis de mettre en évidence une **corrélation entre la répartition de la température du substrat et celle du hublot**.

Les constations effectuées ont révélées que le hublot a une influence sur la température du substrat et inversement. Ces **constations** sont les suivantes :

- Les propriétés d'émission et de réflexion du substrat, ainsi que celles des parois du réacteur ont un effet sur la température du hublot.
- En l'absence de hublot, l'écart de température entre le centre et le bord du substrat est réduit d'environ 40%.
- La diminution de la température du hublot entraîne une diminution de celle du substrat.
- L'écart de température entre le centre et le bord du hublot se répercute sur celui du substrat.

Ces constatations doivent être **expliquées** pour comprendre la corrélation entre les profils de température du substrat et du hublot. **Les phénomènes impliqués** dans ces constatations permettront de comprendre **la forme du profil de température du substrat**.

Références du chapitre VI

Bejan, A., (1993), *Heat Transfer*, JohnWiley and Sons, Singapour.

Logerais, P.O., M. Girtan, A. Bouteville, (2006), *Influence of the quartz window in a Rapid Thermal Processing apparatus*, Journal of Optoelectronics and Advanced Materials, 8 (1), pp. 139-143.

CHAPITRE VII

Compréhension de la forme du profil de température du substrat de silicium

L'objectif de ce chapitre est d'expliquer la forme du ***profil de la température du substrat****. Pour y parvenir, il faut interpréter les constations obtenues dans le chapitre VI précédent. Cette interprétation s'appuie sur* ***les propriétés radiatives*** *du substrat et du hublot, ainsi que sur celles des autres surfaces du système de chauffage rapide étudié.*

La démarche est donc la suivante : les propriétés radiatives des surfaces du système sont d'abord décrites. Dans une seconde partie, ***les quatre constations*** *du chapitre VI vont être* ***interprétées****. Enfin,* ***une explication de la forme du profil de température*** *est proposée.*

VII.1. Propriétés radiatives des surfaces du système thermique rapide

L'**émissivité**, l'**absorptivité**, la **réflectivité** et le **coefficient de transmission** des différentes surfaces du système thermique rapide sont ici présentées. Leurs valeurs sont déterminées à partir des indices optiques complexes comme expliqué au chapitre III.4. Les indices optiques complexes proviennent de l'ouvrage *Handbook of Optical Constants of Solids (Palik 1998).*

L'émissivité, l'absorptivité, la réflectivité et le coefficient de transmission ont été déterminées pour des longueurs d'ondes allant de **0,5 à 100 µm**. Quand la courbe est coupée (par exemple à 20 µm), cela signifie que les valeurs des coefficients n'évoluent pas ou très peu. Il faut aussi garder en tête que **l'émissivité est égale à l'absorptivité** d'après la loi de Kirchhoff (relations III-26 et III-27).

Les spectres sont présentés dans le cas d'un rayonnement arrivant en incidence normale. Pour les rayons en incidence oblique, les valeurs restent dans le même ordre de grandeur.

VII.1.1. Le tungstène des filaments des lampes infrarouges

L'émissivité et la réflectivité du tungstène des filaments des lampes sont données par la Figure VII-1. Leurs valeurs varient très peu dans le domaine de température utilisé qui va de 1500 à 2300 K. Les lampes infrarouges, en raison des propriétés du quartz, émettent **un rayonnement infrarouge centré aux alentours de 1 µm de longueur d'onde**.

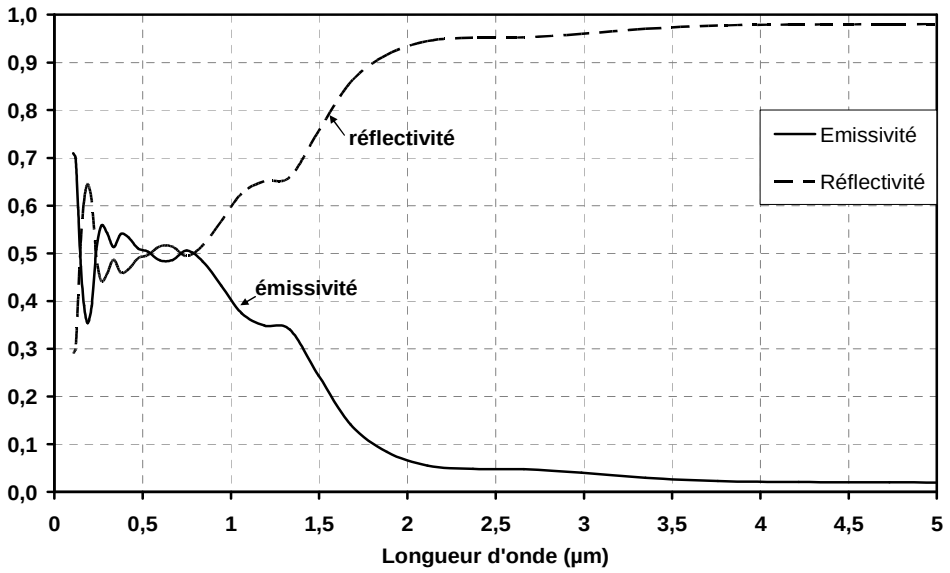


Figure VII-1. *Émissivité et réflectivité du tungstène des filaments des lampes (Palik 1998).*

VII.1.2. Le substrat de silicium

L'émissivité du substrat de silicium suivant sa température est donnée par la Figure VII-2. Les températures du substrat que l'on considère sont au-dessus de 800 K. Pour ce domaine de température, **l'émissivité du substrat de silicium est de l'ordre 0,7** dans tout le domaine infrarouge. **L'absorptivité est donc de l'ordre de 0,7** dans tout le domaine infrarouge.

La réflectivité et le coefficient de transmission sont indiqués sur la Figure VII-3 pour une température du substrat de silicium de 1000 K. Leurs valeurs ne varient quasiment pas au-dessus de 800 K. La **réflectivité est de l'ordre de 0,3**. Le coefficient de transmission est très faible.

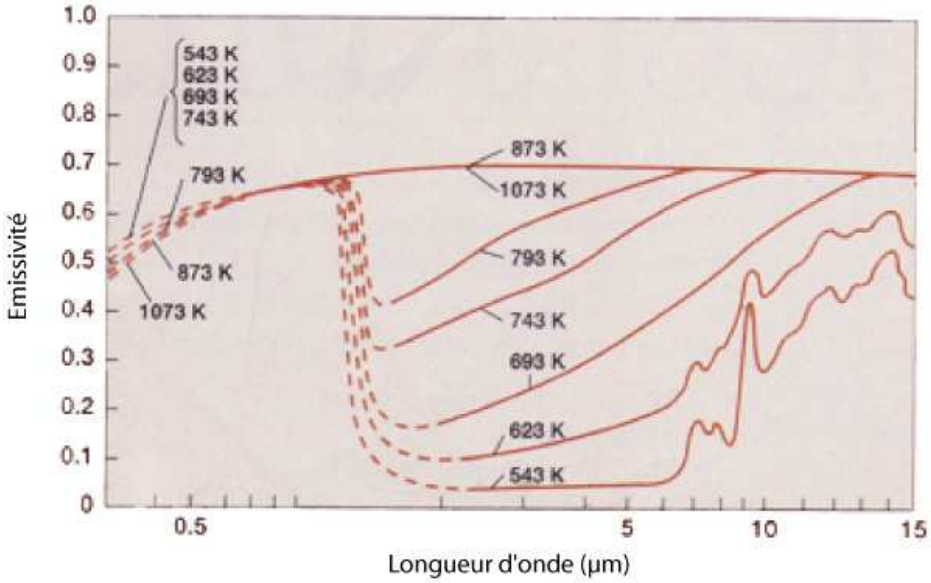


Figure VII-2. *Émissivité spectrale du substrat en silicium (Sato 1967).*

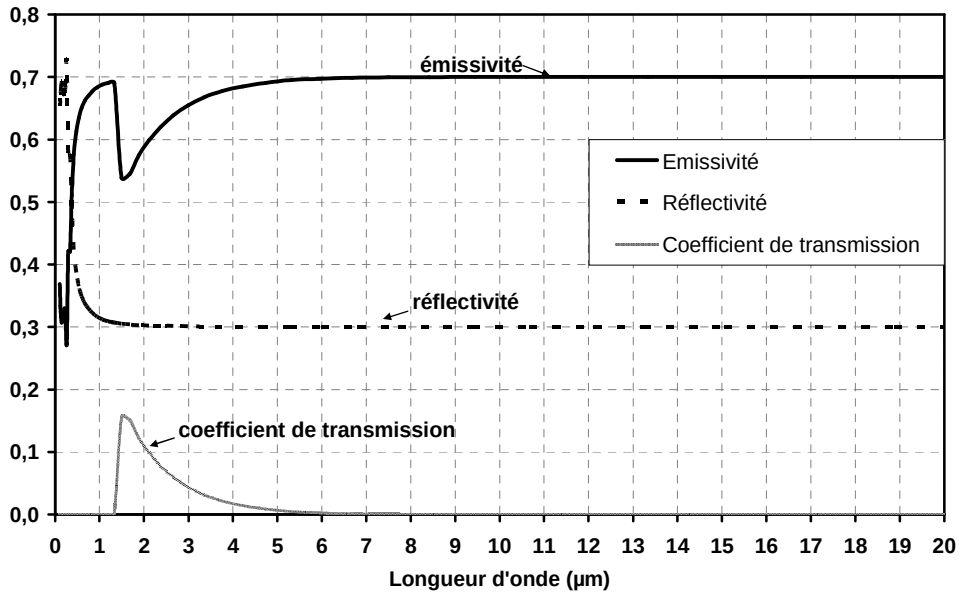


Figure VII-3. *Émissivité, réflectivité et coefficient de transmission du substrat de silicium à 1000 K (Palik 1998).*

VII.1.3. Le hublot en quartz

L'émissivité, la réflectivité et le coefficient de transmission du hublot en quartz sont données par la Figure VII-4. Leurs valeurs sont indépendantes de la température. L'ampoule en quartz des lampes a les mêmes propriétés.

Le hublot transmet le rayonnement infrarouge émis par le tungstène des filaments des lampes dans une fenêtre allant de 0,2 à 2,6 µm. Le coefficient de transmission est très élevé dans cette fenêtre, de l'ordre de 0,95.

Le hublot a une absorptivité très importante au-dessus de 2,6 µm. En moyenne, elle est de l'ordre de 0,8. Comme l'absorptivité est égale à l'émissivité, **le hublot émet de manière importante au-delà de 2,6 µm**.

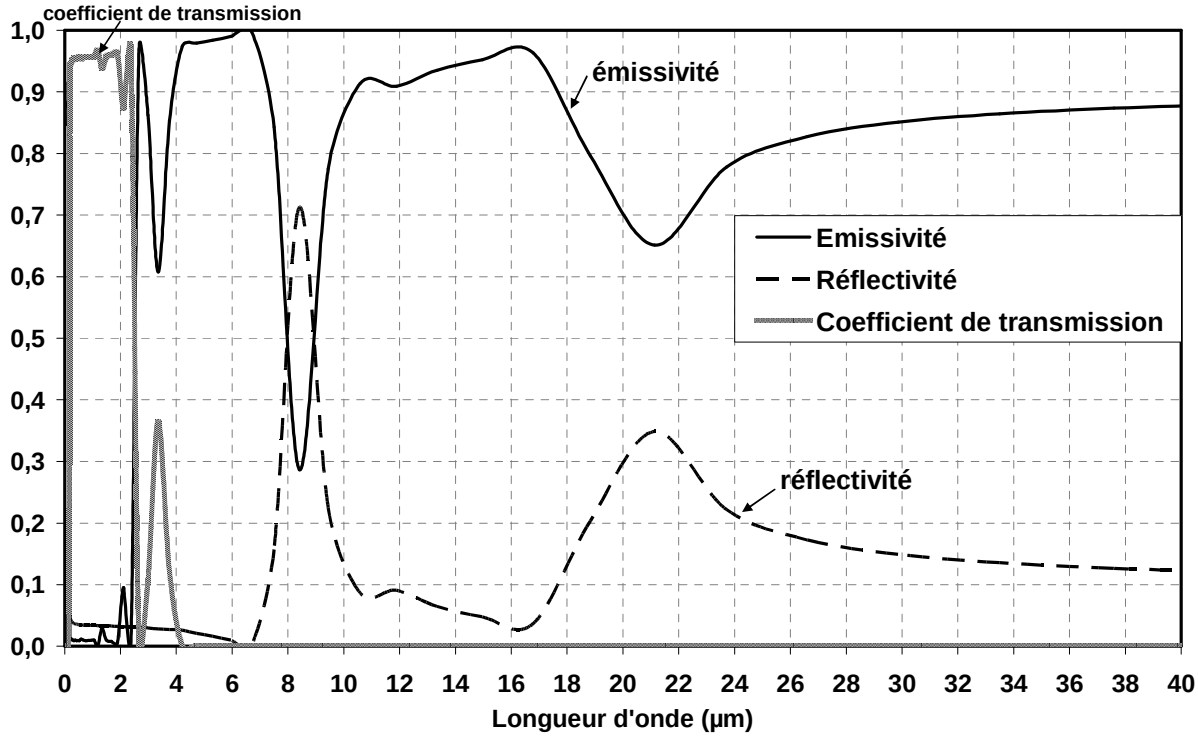


Figure VII-4. *Émissivité, réflectivité et coefficient de transmission du hublot en quartz (Palik 1998).*

VII.1.4. Les parois du système

L'émissivité et la réflectivité des parois du réacteur et du four sont montrées sur la Figure VII-5. **Les parois ont une réflectivité importante, de 0,75. L'émissivité et l'absorptivité sont de 0,25.** Ces coefficients sont indépendants de la température.

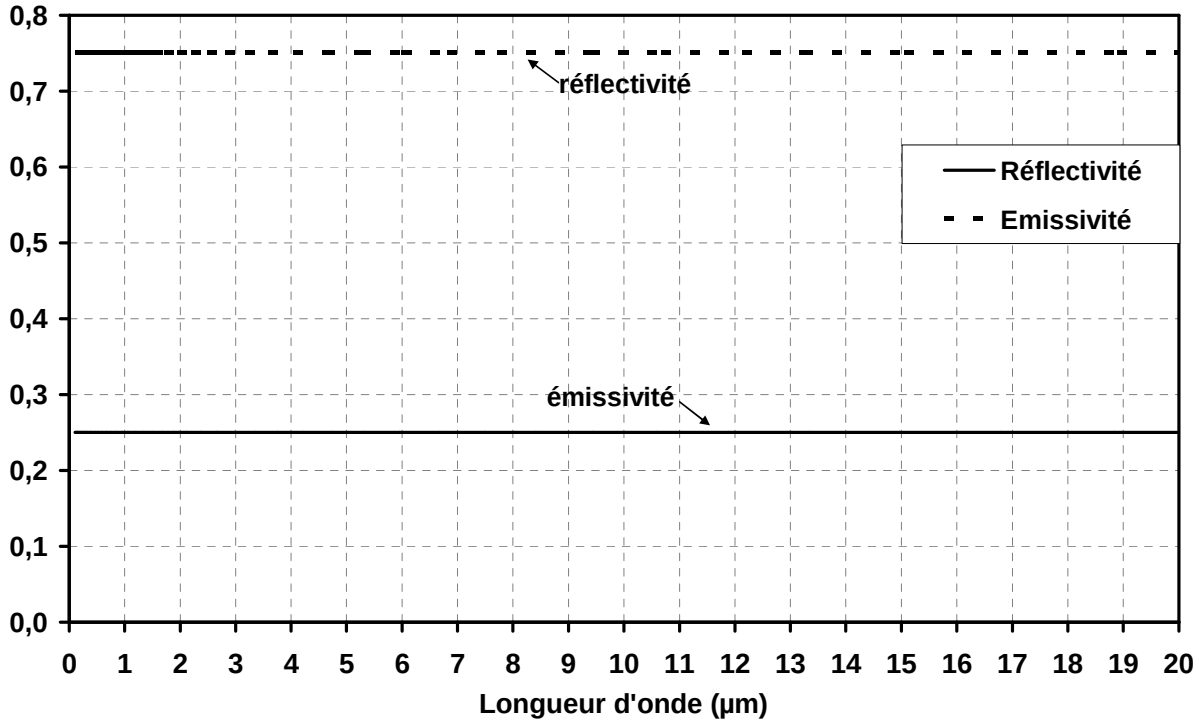


Figure VII-5. *Réflectivité et absorptivité des parois du réacteur et du four (Palik 1998).*

VII.2. Discussion des constatations à l'aide des propriétés radiatives

À l'aide des propriétés radiatives des surfaces présentées, les constatations du chapitre VI peuvent être interprétées une par une.

<u>Constatation n°1</u> : L'émissivité et la réflectivité du substrat, voire celle des parois du réacteur ont un effet sur la température du hublot.

Le cas où le substrat a les propriétés radiatives du corps noir et celui où il a celles du silicium sont d'abord confrontés. Le cas sans substrat est ensuite confronté à celui où le substrat est parfaitement réfléchissant.

- **Comparaison du cas où le substrat a les propriétés radiatives du corps noir à celui où il a celles du silicium**

Lorsque le substrat a la propriété d'un corps noir, il absorbe tout le rayonnement émis par les lampes qu'il reçoit. C'est pour cela qu'il est plus chaud que dans le cas du silicium où l'absorptivité est de 0,7.

Une fois le rayonnement absorbé, le substrat chaud émet dans tout le domaine spectral. L'émissivité du corps noir est supérieure à celle du silicium, 1 contre 0,7 dans tout le domaine infrarouge. Or, le hublot absorbe fortement au-delà de 2,6 µm. Le hublot est donc chauffé par le rayonnement émis par le substrat au-delà de 2,6 µm.

La température du hublot est donc plus élevée dans le cas du corps noir du fait de son émissivité plus importante. En définitif, **la température du hublot suit l'émissivité du substrat**.

- **Comparaison du cas sans substrat à celui où le substrat est parfaitement réfléchissant**

Le hublot absorbe avec un faible pourcentage, environ 5%, le rayonnement centré aux alentours de 1 µm émis par les lampes. Il peut absorber dans cette même proportion le rayonnement réfléchi par les parois du réacteur. Comme les calculs ont été réalisés en régime permanent, donc pour un temps supposé infini, le hublot a donc eu le temps d'absorber assez de rayonnement pour atteindre une température élevée.

La température du hublot est plus élevée quand le substrat est parfaitement réfléchissant. Celui-ci **renvoie plus de rayonnement** que dans le cas où il n'y a pas de substrat. Les parois du réacteur ont une réflectivité moins importante (0,75). Les parois absorbent le reste du rayonnement (0,25). Mais une fois absorbé, le rayonnement émis par les parois est faible car leur température est faible (300 K).

Le substrat de silicium réfléchit à 30% le rayonnement qu'il reçoit des lampes. Le hublot absorbe avec un faible taux (5%) dans ce domaine. Par conséquent, le rayonnement des lampes centré aux alentours de 1 µm qui est réfléchi par le substrat chauffe le hublot mais de manière beaucoup moins importante que le rayonnement émis par le substrat.

<u>Constatation n°2</u> : l'absence de hublot permet de réduire l'écart de température entre le centre et le bord du substrat de 40%.

Cela signifie que la présence du hublot n'est pas la seule cause de l'écart de température entre le centre et le bord du substrat. En l'absence de hublot, le substrat est placé dans un réacteur aux parois froides (300 K). **L'influence des parois relativement froides du réacteur est donc une cause plus importante de non-uniformité pour la température du substrat.** Par conséquent, une action au niveau du hublot aurait un résultat limité sur l'uniformité de la température du substrat.

<u>Constatation n°3</u> : la diminution de la température globale du hublot entraîne une diminution de celle du substrat.

On considère les longueurs d'onde au-delà de 2,6 µm.

Le hublot absorbe à 80% le rayonnement émis par le substrat chaud. Le hublot une fois chaud va émettre de manière importante vers le substrat. Or, le substrat absorbe à son tour à 70% le rayonnement reçu du hublot. Puis il va émettre de nouveau vers le hublot. De plus, le substrat réfléchit à 30% le rayonnement émis par le hublot. Il y a donc un **chauffage mutuel par émission, absorption, et réflexion entre le hublot et le substrat** *(Logerais et al. 2007)*.

Si la température du hublot est de l'ordre de 300 K, le flux de chaleur émis par le hublot vers le substrat, qui dépend de la température, est fortement réduit. La température du substrat est alors diminuée.

<u>Constatation n°4</u> : l'écart de température entre le centre et le bord du hublot se répercute sur celui du substrat.

On considère toujours les longueurs d'onde au-delà de 2,6 µm.

Pour interpréter cette constatation, il faut dans un premier temps expliquer pourquoi il y a un écart de température entre le centre et le bord du hublot. Pour y parvenir, utilisons les **dénominations** indiquées dans le schéma de la Figure VII-6 pour les différentes parties du hublot et du substrat.

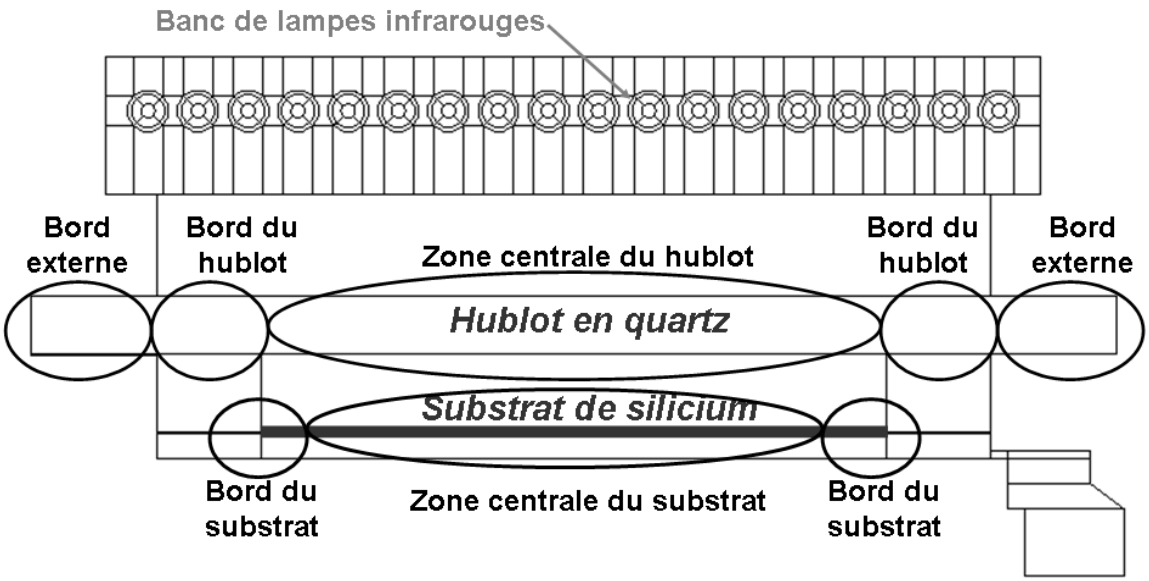


Figure VII-6. *Dénomination utilisée.*

- **Écart de température entre le centre et le bord du hublot**

Quatre raisons peuvent être évoquées pour expliquer la décroissance de la température du centre du hublot vers son bord.

- Comme le substrat et le hublot sont **en regard**, le hublot va recevoir de manière plus importante le rayonnement émis par le substrat dans sa zone centrale. Par conséquent, le bord du hublot va absorber moins de rayonnement.
- De plus, la température au bord du substrat est inférieure à celle en son centre à cause de **l'influence des parois froides**. Le substrat émet donc moins de rayonnement en son bord.
- Il y a aussi un **flux conductif** qui va de la zone centrale du hublot vers son bord externe. En effet, la température est élevée au centre du hublot et le bord externe est à la température de 300 K. Néanmoins, ce flux conductif est faible car le hublot est un mauvais conducteur de chaleur.
- Enfin, la raison majeure est **l'influence de la paroi du réacteur**. Plaçons-nous au niveau du bord du hublot. Dans cette zone, le bord du hublot est très proche de la paroi du réacteur à la température de 300 K. Il y a donc une **perte importante de chaleur du hublot chaud vers la paroi du réacteur à 300 K**. **Cette perte se fait par émission et par conduction.**

- **Influence sur l'écart de température entre le centre et le bord du substrat**

Comme la température au bord du hublot est diminuée, l'émission est moins importante au bord. Donc, le rayonnement qui est reçu au bord du substrat est plus faible qu'au centre. **La température du substrat est donc réduite au bord.** Cet effet s'ajoute à celui des parois froides du réacteur.

Quand on réduit l'écart de température centre-bord du hublot avec un hublot de diffusivité élevée, l'émission du hublot vers le substrat devient uniforme. Par conséquent, la température du substrat obtenue est plus uniforme. Cependant, on retrouve des résultats du même ordre de grandeur que dans le cas où on enlève le hublot. Cela confirme que les parois jouent un rôle non négligeable dans la différence de température centre-bord du substrat. Limiter au maximum les gradients de température du hublot ne conduira donc pas à une uniformité maximale de la température du substrat.

VII.3. Phénomènes intervenant dans la forme du profil de température du substrat et du hublot

En **réorganisant** les explications effectuées dans le chapitre VII.2 précédent, les phénomènes majeurs intervenant dans la forme des profils de température du substrat et du hublot en régime permanent peuvent être posés. D'autres commentaires sur l'effet des parois réfléchissantes du réacteur sont apportés.

L'explication de la forme des profils de température du substrat et du hublot peut être divisée **en quatre phases**. **Les phénomènes** se produisant dans ces phases sont représentés sur le **schéma** la Figure VII-7.

- **Phase 1 :** Les lampes émettent un flux radiatif centré aux alentours de 1 µm qui passe à 95% à travers le hublot.

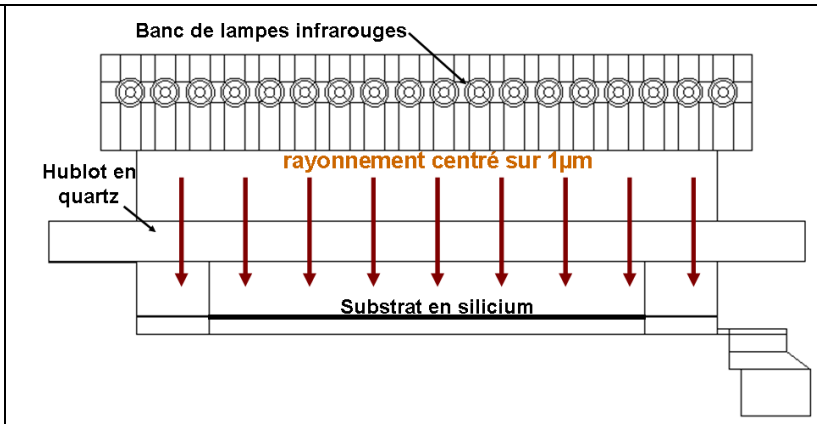
- **Phase 2 :** Ce flux est absorbé à 70% par le substrat de silicium et est réfléchi à 30% par celui-ci. Le substrat chaud émet alors un rayonnement dans tout le domaine infrarouge. Son émissivité est de 70%. Le flux émis prend la direction du hublot et celle de la paroi du réacteur à 300 K :

    - Le flux net échangé entre le bord du substrat chaud et la paroi à 300 K est important car la différence de température est très élevée. Par conséquent, la température du substrat devient moins élevée en son bord qu'en son centre.
    - Il y a un flux émis par le substrat vers le hublot. Comme la température du substrat est moins élevée en son bord, le flux émis par le substrat est plus important en son centre.
    - Il faut ajouter qu'une partie du rayonnement émis par le bord du substrat est réfléchie par la paroi du réacteur. Une grande partie de ce flux réfléchi arrive sur le bord du hublot.

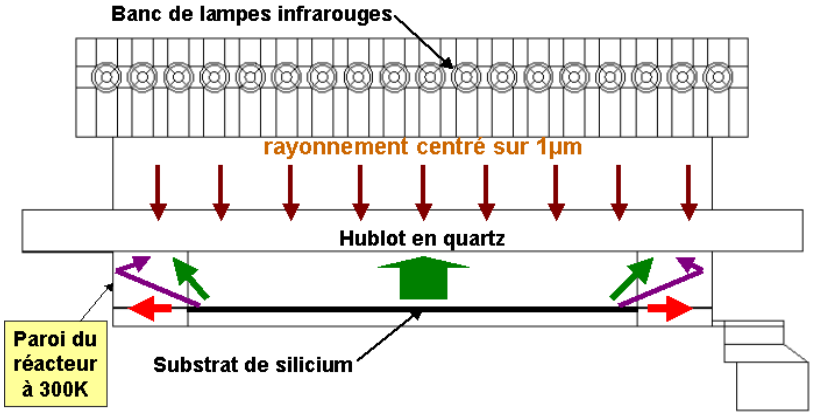
- **Phase 3 :** Le hublot absorbe à 80% les rayonnements émis par le substrat au-delà de 2,6 µm. Il réfléchit le reste. Puisque le flux reçu au centre du hublot est plus important qu'en son bord, la température du hublot est alors plus élevée en son centre. Cet écart est accru par la perte importante de chaleur par émission vers la paroi froide du réacteur et par conduction, en faible partie, vers le bord externe du hublot.

- **Phase 4 :** Le rayonnement absorbé par le hublot est aussi réémis en direction du substrat et de la paroi du réacteur. L'émissivité est de 80%.
  Comme la température du hublot est plus élevée en son centre, le flux émis par le hublot au centre du substrat est plus important qu'au bord du substrat. L'écart de température entre le centre et le bord du substrat est donc augmenté.
  Il faut signaler que l'émission vers la paroi du réacteur à 300 K est très forte au bord du hublot. Cependant, une grande partie de ces rayons sont réfléchis et retombent sur le bord du substrat. Mais cela n'est pas suffisant pour rééquilibrer la température du substrat.

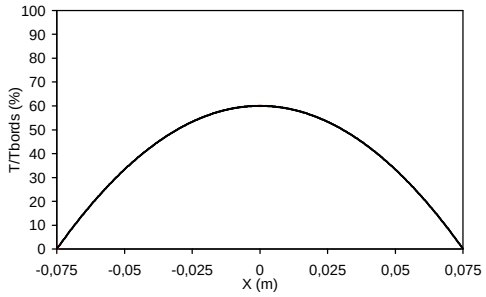
Phase 1



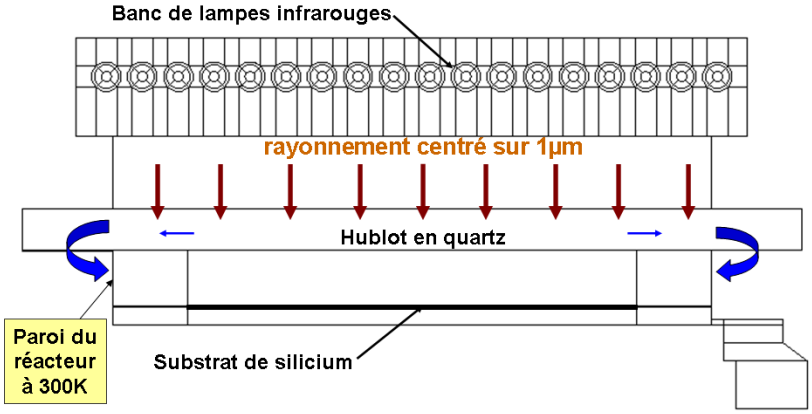
Phase 2



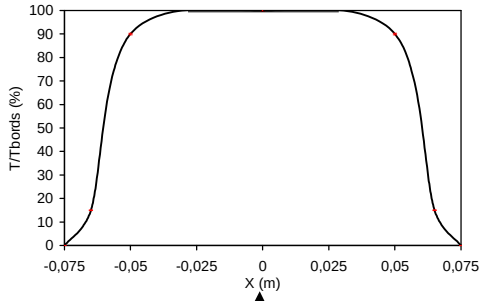
Profil «intermédiaire » de température du substrat



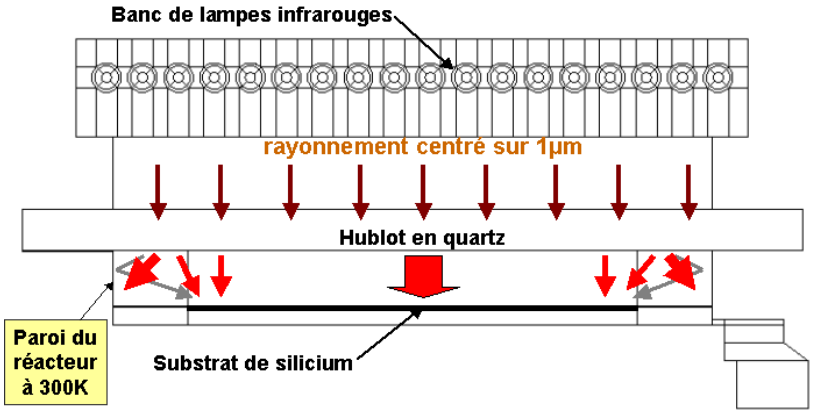
Phase 3



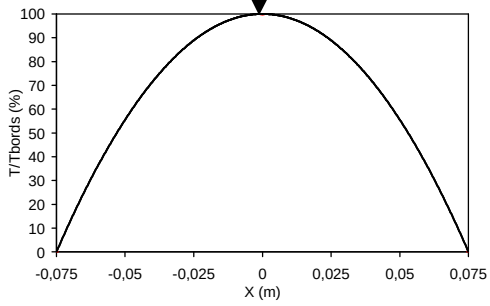
Profil de température du hublot



Phase 4



Corrélation



Profil de température du substrat

Figure VII-7. *Explication de la forme des profils de température du substrat et du hublot en régime permanent.*

VII.4. Idées pour uniformiser la température du substrat

Les différents phénomènes qui interviennent dans la forme du profil de température du substrat viennent d'être posés. Cependant, le défi est d'obtenir **une température uniforme** à la surface du substrat. Dans le schéma explicatif de la Figure VII-7, il faut déterminer les phénomènes sur lesquels on peut agir pour améliorer l'uniformité de la température du substrat. **Deux idées** sont ici proposées.

VII.4.1. Réflexion sur la surface inférieure du hublot des rayonnements émis et réfléchis par le substrat

On a vu que le flux émis par le hublot en son centre est plus important qu'en son bord (phase 4). L'écart de température entre le centre et le bord du substrat est alors augmenté.

Il serait donc intéressant de bloquer l'absorption du hublot au-delà de 2,6 µm. Pour cela, il faut trouver le moyen de **réfléchir les rayonnements émis par le substrat au-delà de 2,6 µm au niveau de la surface inférieure du hublot** (Figure VII-8). **Le rayonnement centré aux alentours de 1 µm émis par les lampes doit en même temps passer.**

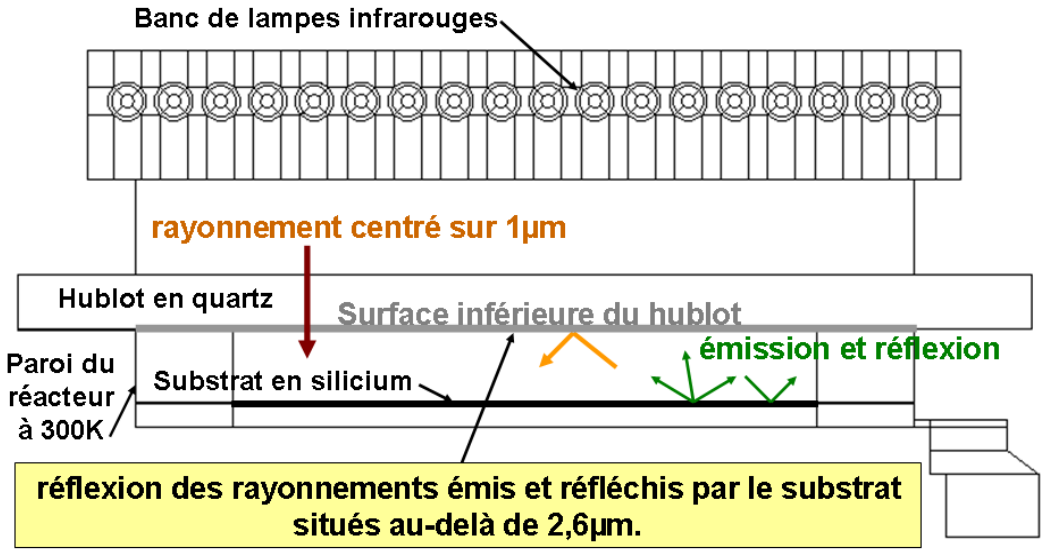


Figure VII-8. *Première idée pour améliorer l'uniformité de la température du substrat.*

Cette idée permettrait d'éliminer les gradients de température au niveau du hublot. La température du substrat va être plus uniforme. Cependant, cette amélioration serait partielle car l'effet de la paroi froide du réacteur est toujours présent. Il faut trouver une autre idée où l'effet de la paroi serait contrecarré.

VII.4.2. Réflexion au niveau du bord du hublot des rayonnements émis et réfléchis par le bord du substrat

Plaçons-nous dans la région au bord du substrat et du hublot.

Il a été montré dans la phase 2 que le flux reçu par le bord du hublot provient selon les **deux chemins** suivants :

- directement du bord du substrat
- une partie du rayonnement émis par le substrat est réfléchi par la paroi du réacteur et tombe sur le bord du hublot.

Le rayonnement une fois reçu par le bord du hublot est absorbé. Le flux qui est émis au bord du hublot est en conséquence inférieur au flux reçu. De plus, il y a des **pertes importantes** par émission vers la paroi froide du réacteur et par conduction, en faible partie, vers le bord externe du hublot.

Pour éviter ces pertes, l'idée serait de bloquer l'absorption au-delà de 2,6 µm **non plus sur toute la surface inférieure du hublot mais seulement au bord du hublot**. Comme précédemment, il faut trouver le moyen de réfléchir les rayonnements émis par le substrat au-delà de 2,6 µm mais seulement dans cette zone (Figure VII-8).

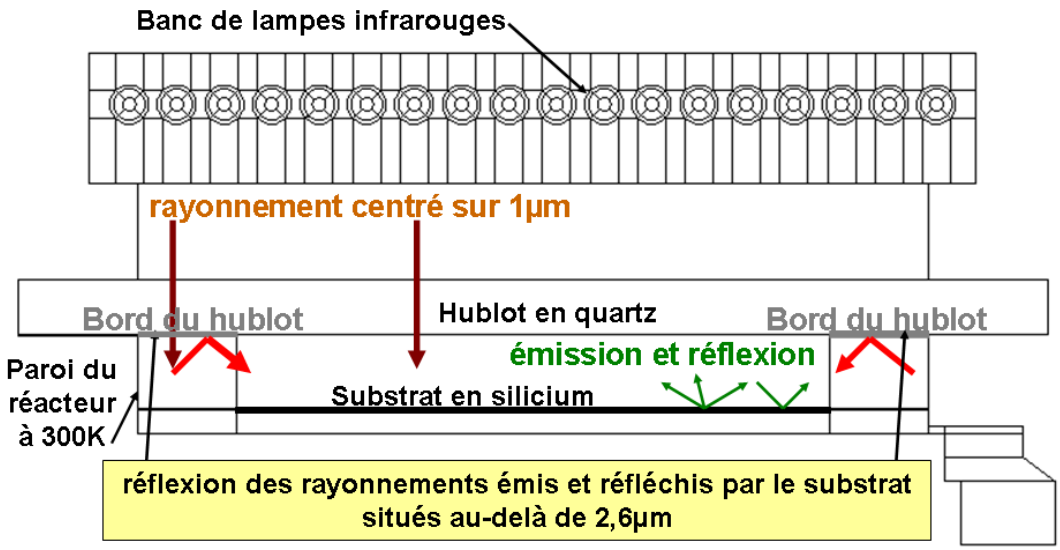


Figure VII-9. *Deuxième idée pour améliorer l'uniformité de la température du substrat.*

Ainsi, **le flux reçu par le bord du hublot est redirigé en grande partie vers le bord du substrat**. **Deux chemins** sont possibles pour les rayons réfléchis par le bord du hublot (Figure VII-10) :

- émission du substrat, réflexion sur le bord du hublot puis réflexion sur la paroi du réacteur et retour sur le bord du substrat *(chemin 1)*
- émission du substrat, réflexion sur la paroi du réacteur puis réflexion sur le bord du hublot et retour sur le bord du substrat *(chemin 2)*.

Cependant, à priori, on ne sait pas si ce flux doublement réfléchi arrivant au niveau du bord du substrat sera suffisant pour **compenser** les pertes causées par la paroi du réacteur.

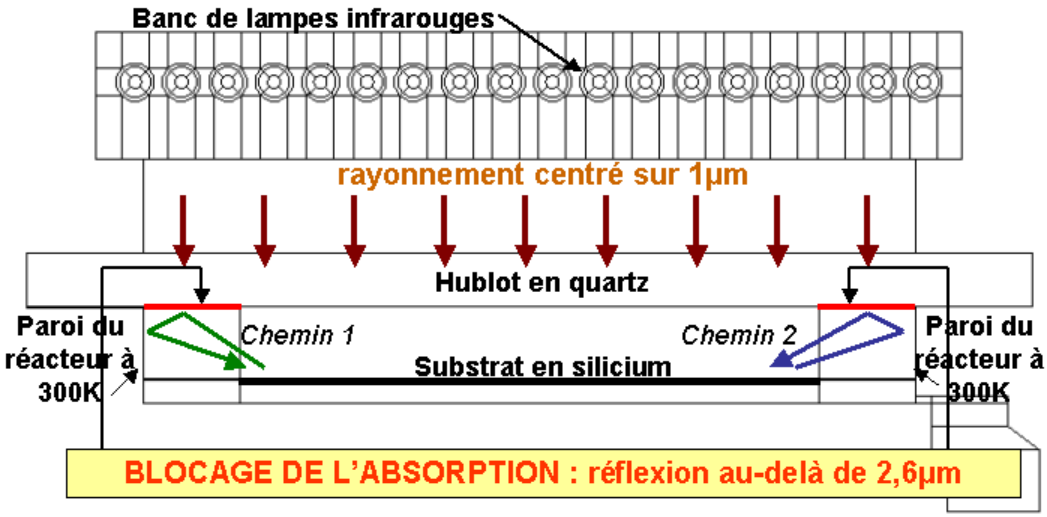


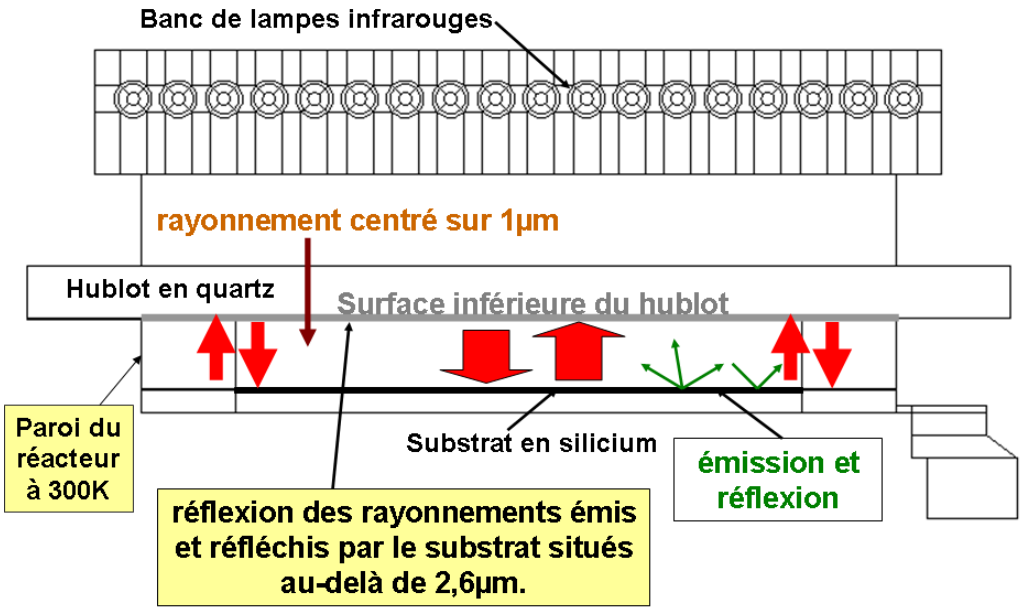
Figure VII-10. *Réflexion des rayons émis par le bord du substrat.*

Mais, **en raisonnant sur l'ordre de grandeur des flux radiatifs**, cette idée devrait être **efficace**. Pour s'en convaincre, comparons les ordres de grandeurs des flux radiatifs pour les deux idées proposées (schémas de la Figure VII-11).

Pour la première idée, le flux réfléchi par la surface inférieure du hublot vers le centre du substrat va être très important. Le flux réfléchi au bord du hublot vers le bord du substrat va être important. Il y a une différence.

Par contre, la deuxième idée implique un flux réémis par la surface inférieure du hublot vers le centre du substrat. Or, le hublot absorbe une partie du rayonnement qu'il reçoit du substrat. Par conséquent, le flux réémis vers le substrat est moins important que le flux reçu. D'autre part, les rayons émis par le bord du substrat sont renvoyés de manière importante vers le bord du substrat. Le flux arrivant sur le substrat devrait donc être **plus équilibré**. **L'écart de température entre le centre et le bord du substrat devrait être réduit notablement.**

Première idée



$\Phi_{\text{émis et réfléchi substrat centre}} = \Phi_{\text{réfléchi hublot centre}}$

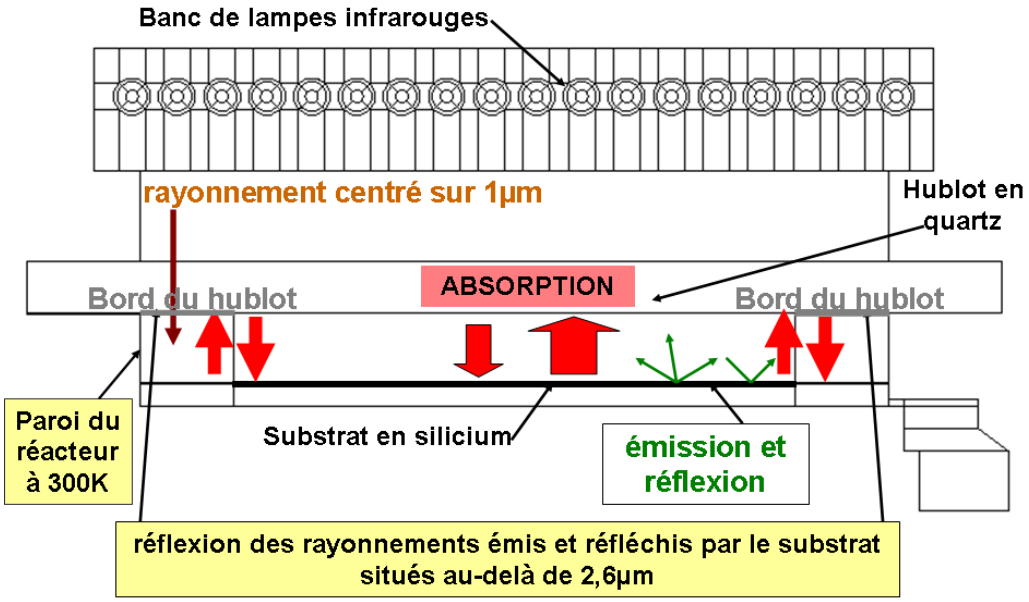
$\Phi_{\text{émis et réfléchi substrat bord}} = \Phi_{\text{réfléchi hublot bord}}$

et $\Phi_{\text{émis et réfléchi substrat bord}} < \Phi_{\text{émis et réfléchi substrat centre}}$

et $\underline{\Phi_{\text{réfléchi hublot bord}} < \Phi_{\text{réfléchi hublot centre}}}$

=> Le flux reçu par le substrat est plus uniforme, mais pas assez.

Deuxième idée



$\Phi_{\text{émis et réfléchi substrat centre}} = \Phi_{\text{absorbé hublot centre}} + \Phi_{\text{émis hublot centre}}$

donc $\Phi_{\text{émis hublot centre}} < \Phi_{\text{émis et réfléchi substrat centre}}$

et $\Phi_{\text{émis et réfléchi substrat bord}} = \Phi_{\text{réfléchi hublot bord}}$

on se rapprocherait de $\underline{\Phi_{\text{réfléchi hublot bord}} \approx \Phi_{\text{émis hublot centre}}}$

=> Le flux reçu par le substrat est plus uniforme.

Figure VII-11. *Comparaison entre les ordres de grandeurs des flux.*

VII.5. Conclusion

Les constatations effectuées au chapitre VI ont été expliquées une à une à l'aide des **propriétés radiatives des surfaces du système**. Ces explications ont permis de mettre en évidence **les différents phénomènes** qui interviennent dans la forme des profils de la température du substrat et du hublot. **Un schéma en quatre phases** montre ces différents phénomènes. La corrélation de la température du substrat avec celle du hublot est maintenant interprétée.

L'analyse des phénomènes expliquant la forme du profil du substrat a permis de proposer **deux idées** pour avoir **une meilleure uniformité de sa température**. Ces deux idées impliquent de **réfléchir le rayonnement infrarouge au-delà de 2,6 µm sur la surface inférieure du hublot tout en laissant passer le rayonnement émis par les lampes qui est centré aux alentours de 1 µm**.

Ces deux idées doivent maintenant être **vérifiées**. Si tel est le cas, il faut trouver le moyen de les mettre en œuvre expérimentalement.

Références du chapitre VII

Logerais, P.O., D. Chapron, A. Bouteville, (2007), *Transient simulations of a Rapid Thermal Processing apparatus*, Journal of Optoelectronics and Advanced Materials, 9 (4), pp. 1082-1086.

Palik, E.D., (1998), *Handbook of Optical Constants of Solids*, Academic Press, New York.

Sato, T., (1967), *Spectral Emissivity of Silicon*, Japanese Journal of Applied Physics, 6 (3), p. 339.

CHAPITRE VIII

Amélioration de l'uniformité de la température du substrat de silicium

Pour améliorer l'uniformité de la température du substrat, ***deux idées*** *ont été proposées au chapitre VII. Les rayonnements émis et réfléchis par le substrat au-delà de 2,6 µm doivent être réfléchis au niveau de la face inférieure du hublot. Cette réflexion peut être envisagée sur toute la surface ou uniquement sur le bord du hublot. Dans le même temps, le rayonnement émis par les lampes doit être transmis. La réflexion uniquement sur le bord du hublot permettrait un meilleur équilibre des flux arrivant sur le substrat. Cette dernière idée serait donc plus efficace.*

L'objectif de ce chapitre est de ***vérifier l'efficacité et la faisabilité de ces idées****.*

Dans un premier temps, ***la propriété radiative souhaitée*** *au niveau de la face inférieure du hublot est posée. Les* ***deux configurations*** *envisagées sont précisées.*

Puis, le modèle en deux dimensions de l'AS-One 150 est modifié. Les ***calculs*** *sont effectués en régime permanent pour les mêmes puissances de lampes (10 à 30%). Les résultats obtenus et la mise en œuvre expérimentale de ces idées sont alors* ***discutés****.*

VIII.1. Propriété radiative souhaitée

La propriété radiative voulue pour la surface inférieure du hublot est donnée par la Figure VIII-1. La réflectivité et le coefficient de transmission y sont représentés suivant la longueur d'onde.

Les rayonnements émis et réfléchis par le substrat au-delà de 2,6 µm sont réfléchis. Ceux émis par les lampes, centrés aux alentours de 1 µm, sont transmis.

Le changement de propriété radiative est appelé « **filtre** ».

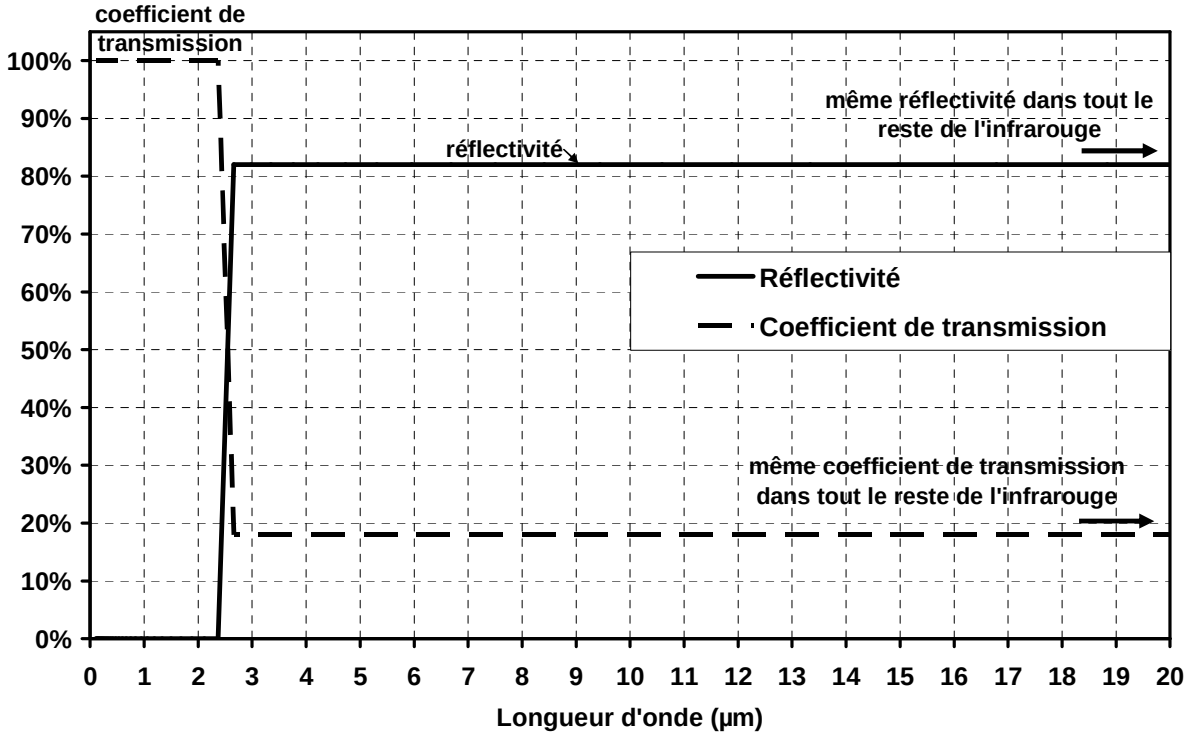
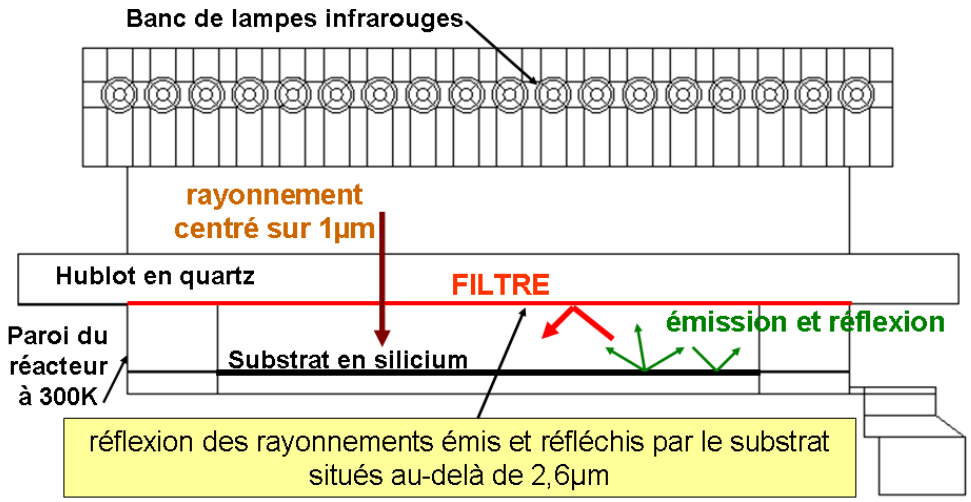


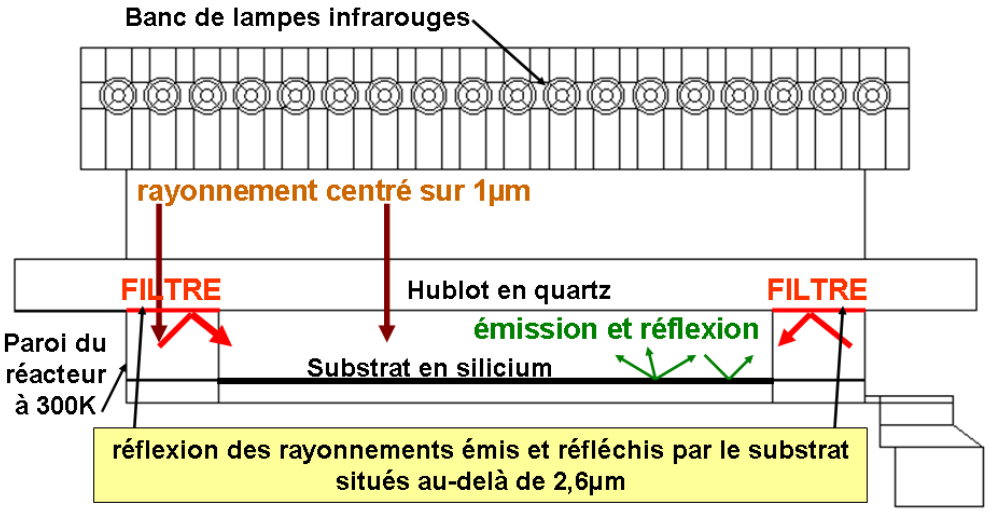
Figure VIII-1. *Propriété radiative souhaitée au niveau de la face inférieure du hublot.*

Deux configurations ont été proposées pour appliquer la propriété (le filtre) :

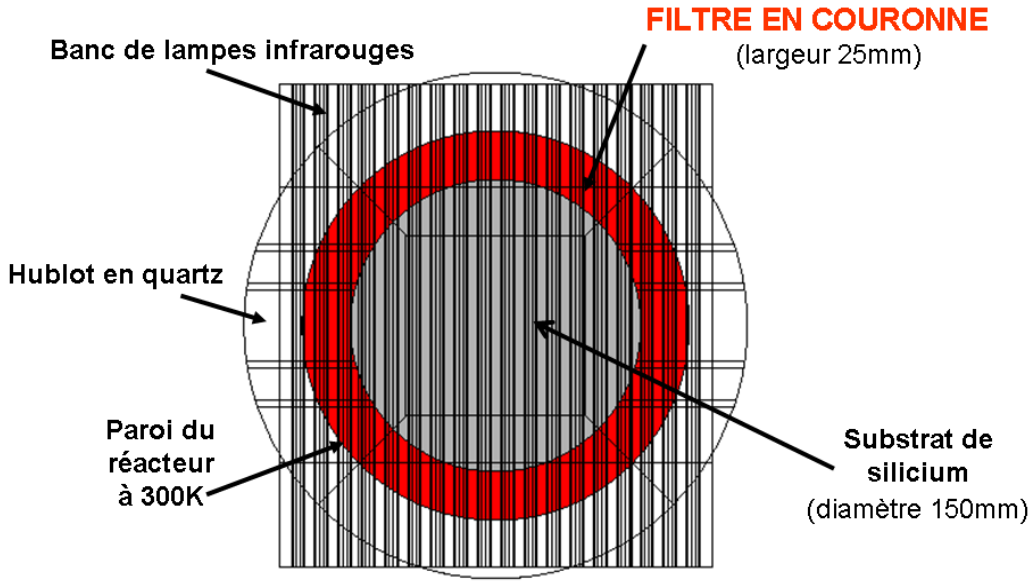
- **sur toute la face inférieure du hublot** (Figure VIII-2.a)
- **sur le bord du hublot**. Cette configuration correspond à une **couronne** sur la face inférieure du hublot (Figure VIII-2.b).



a)



b)



(vue de dessous)

Figure VIII-2. *Les deux configurations pour la propriété radiative souhaitée.*

VIII.2. Calculs avec le filtre sur toute la face inférieure du hublot

La propriété radiative souhaitée (le **filtre**) est appliquée sur la surface inférieure du hublot dans le modèle en **deux dimensions** de l'AS-One 150. Les calculs sont réalisés en **régime permanent**.

Les températures obtenues au centre du hublot et du substrat pour les différentes puissances considérées sont comparées avec et sans le filtre (Figure VIII-4).

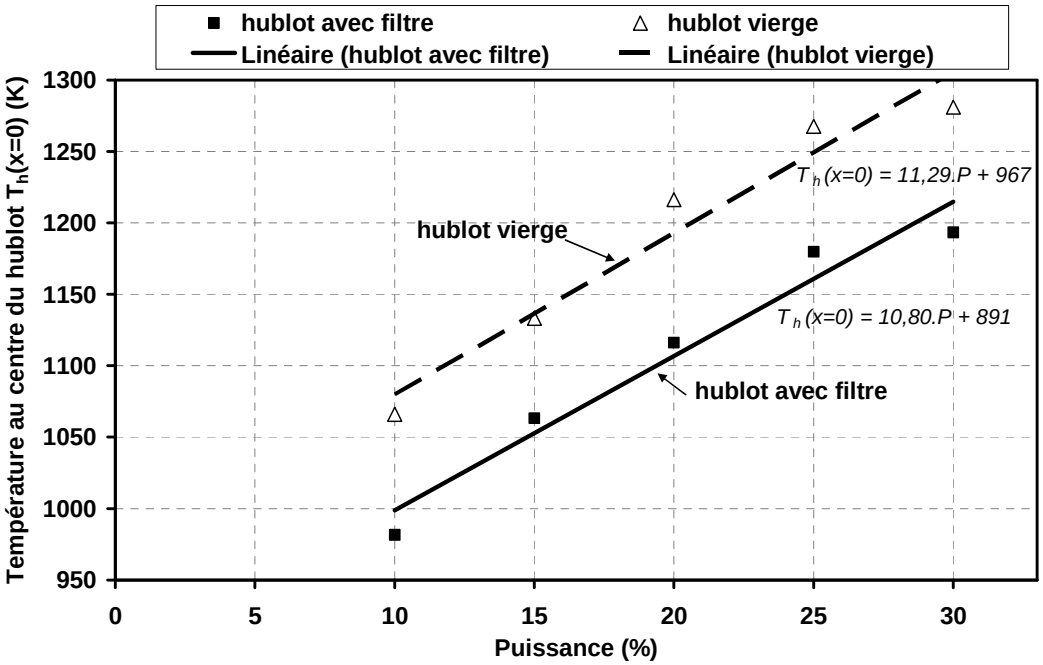


Figure VIII-3. *Température au centre du hublot avec et sans le filtre sur toute la surface.*

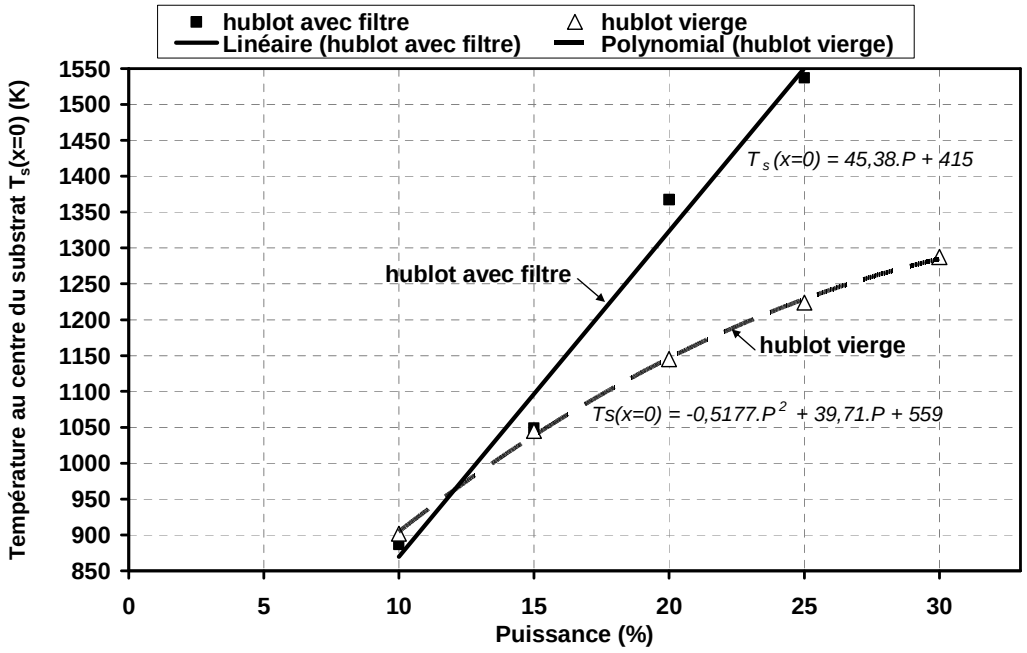


Figure VIII-4. *Température au centre du substrat avec et sans le filtre sur toute la surface.*

La température du hublot est diminuée en présence du filtre. Cependant, la différence est de l'ordre de 10%. Cette faible différence est due au fait que le hublot en quartz n'est pas totalement transparent au rayonnement des lampes sur sa face supérieure (95% de transmission pour un rayonnement centré aux alentours de 1 µm). Comme les calculs sont en régime permanent, donc pour un temps infini, le hublot a eu suffisamment de temps pour accumuler la chaleur.

Le filtre a pour effet d'**augmenter la température du substrat**. En même temps, il diminue la température du hublot.
L'augmentation de la température du substrat est très notable pour les puissances au-dessus de 15% car le nombre de rayons réfléchis et émis par le substrat est plus important.
En outre, la correspondance puissance-température du substrat obtenue avec un hublot vierge (Figure V-11 du chapitre V.3.2) est modifiée.

Puisque la correspondance puissance-température est modifiée, il est plus intéressant de représenter l'écart de température entre le centre et le bord du substrat suivant la température au centre du substrat (Figure VIII-5).

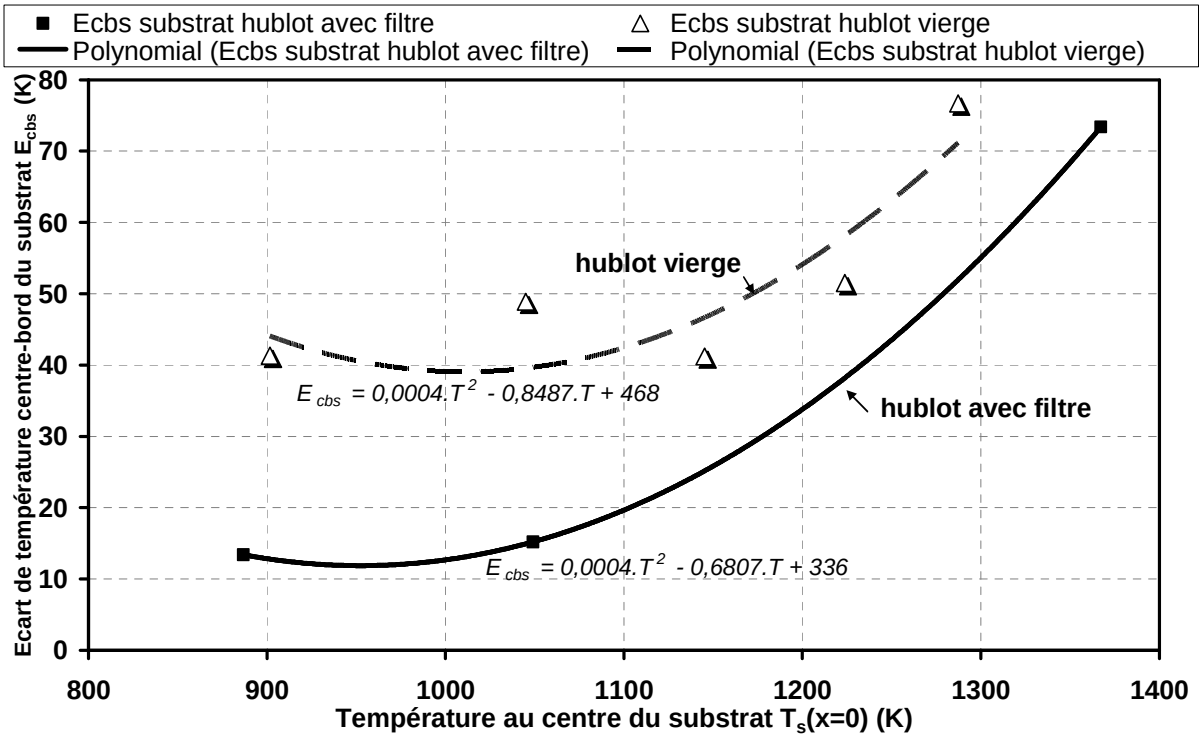


Figure VIII-5. *Écart de température centre-bord du substrat suivant sa température au centre avec et sans le filtre sur toute la surface.*

L'écart de température entre le centre et le bord du substrat est diminué d'environ de 30 K pour une température en-dessous de 1000 K et de 20 K pour une température au-dessus. Il y a bien **une réduction de l'écart de température entre le centre et le bord du substrat**. L'effet du filtre est donc **vérifié**.

VIII.3. Calculs avec le filtre disposé suivant une couronne sur la face inférieure du hublot

La propriété radiative souhaitée (le filtre) est à présent appliquée dans le modèle en **deux dimensions** de l'AS-One 150 selon la deuxième configuration, celle d'une **couronne** au bord de la partie inférieure du hublot. Le reste de la surface inférieure du hublot a les propriétés radiatives du quartz.

La température au centre du hublot est proche de celle obtenue avec un hublot vierge. Mais ce qui nous intéresse particulièrement est la température à la surface du substrat.

Les profils de température calculés pour un hublot avec et sans le filtre en couronne sont confrontés sur la Figure VIII-6 pour trois puissances de chauffage : une faible (10%), une moyenne (20%) et une forte (30%).

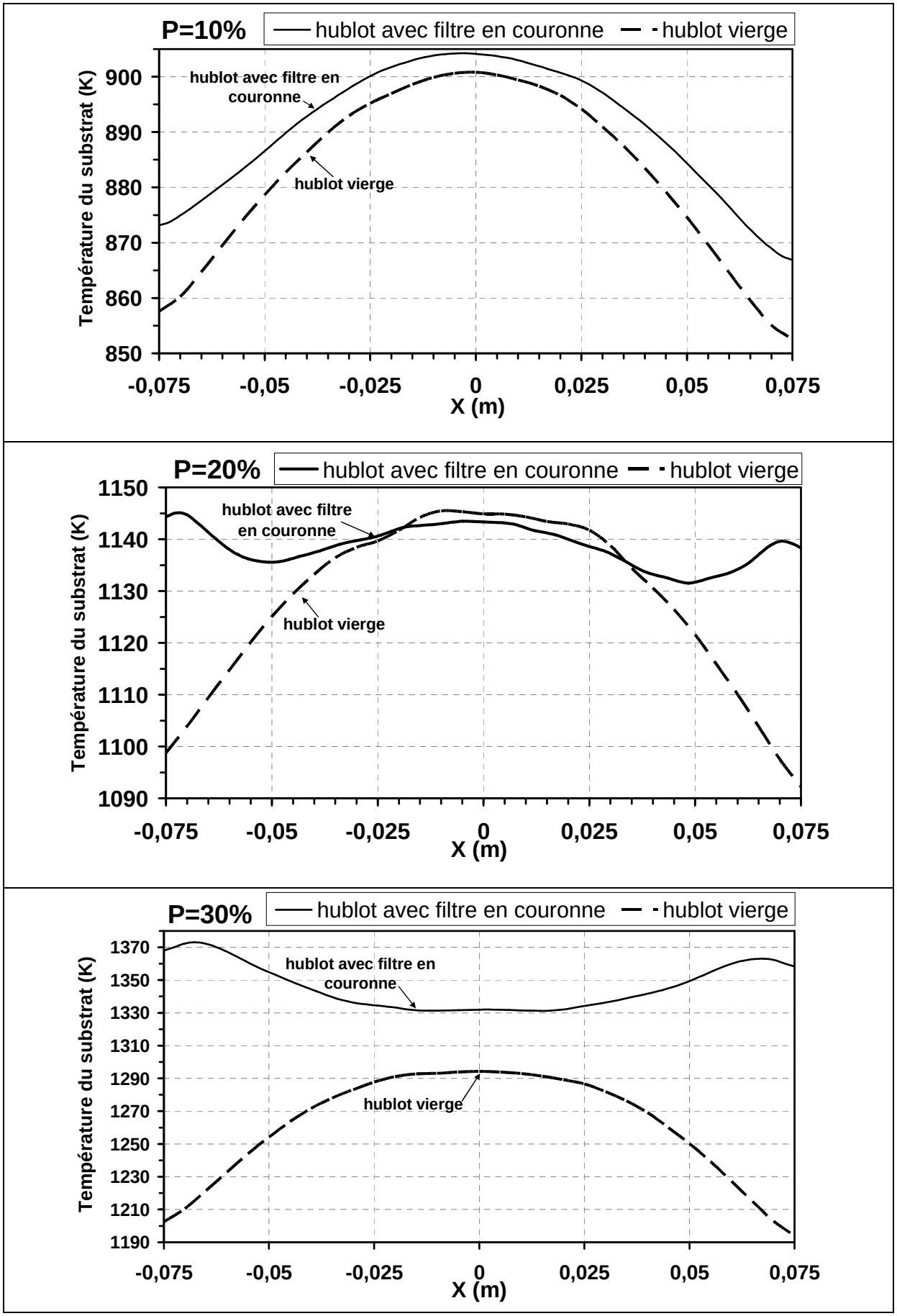


Figure VIII-6. *Comparaison des profils de température avec et sans le filtre en couronne.*

La température globale du substrat avec le filtre en couronne est légèrement rehaussée avec le filtre en couronne. Celui-ci renvoie une partie du rayonnement émis et réfléchi par le bord du substrat vers le centre du substrat.

L'écart de température entre le centre et le bord du substrat est modifié. Comme prévu, **la température au niveau du bord du hublot est rehaussée**. L'idée est **vérifiée**.

Pour mieux s'en rendre compte, les écarts de température obtenus suivant la puissance de chauffage sont reportés Figure VIII-7.

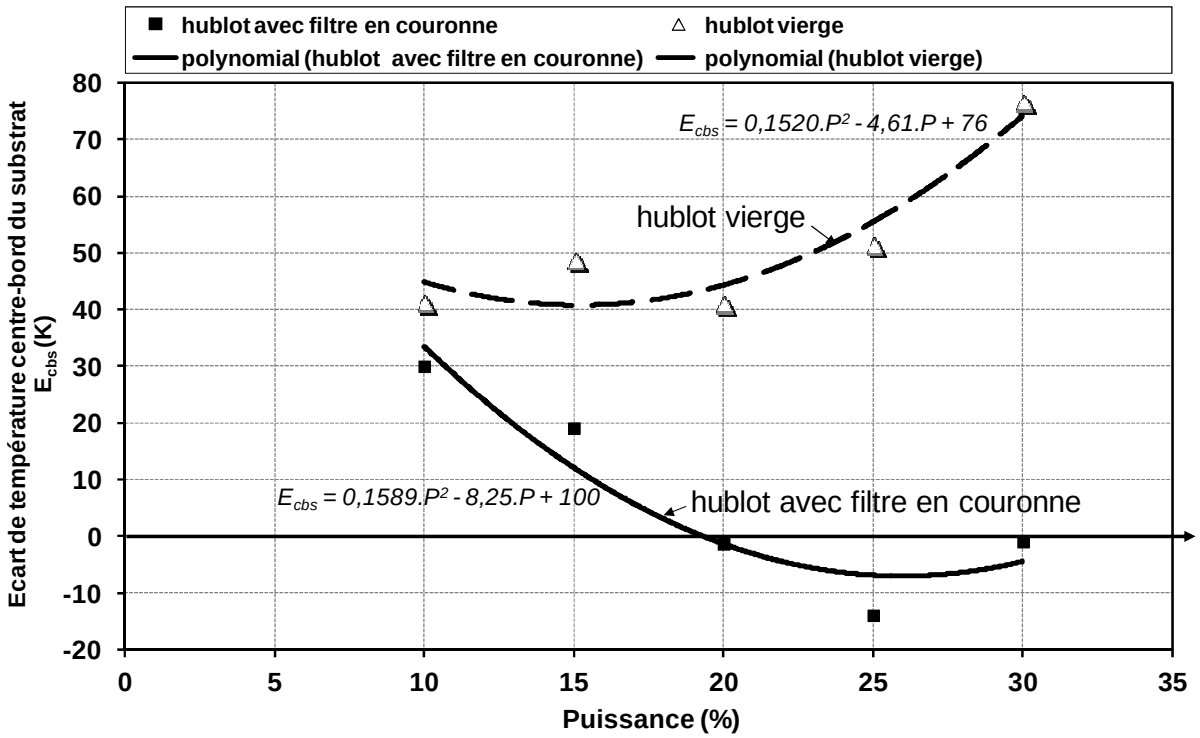


Figure VIII-7. *Écart de température centre-bord du substrat avec et sans le filtre en couronne.*

L'écart de température entre le centre et le bord du substrat est diminué. **La température est plus uniforme**.

L'effet du filtre est **optimal pour les puissances moyennes**, comme 20%.

Pour les faibles puissances (par exemple 10% et 15%), l'amélioration n'est pas aussi bonne. Cela est dû au nombre de rayons réfléchis par le filtre qui est moins important pour rehausser la température au bord du substrat.

À l'inverse, pour les fortes puissances (par exemple 30%), la température au bord du substrat est trop élevée car le nombre de rayons réfléchis est trop important.

VIII.4. Discussion

Pour vérifier si le filtre en couronne est plus **efficace** que le filtre sur toute la surface, l'écart de température entre le centre et le bord du substrat suivant la température au centre du substrat est comparé Figure VIII-8.

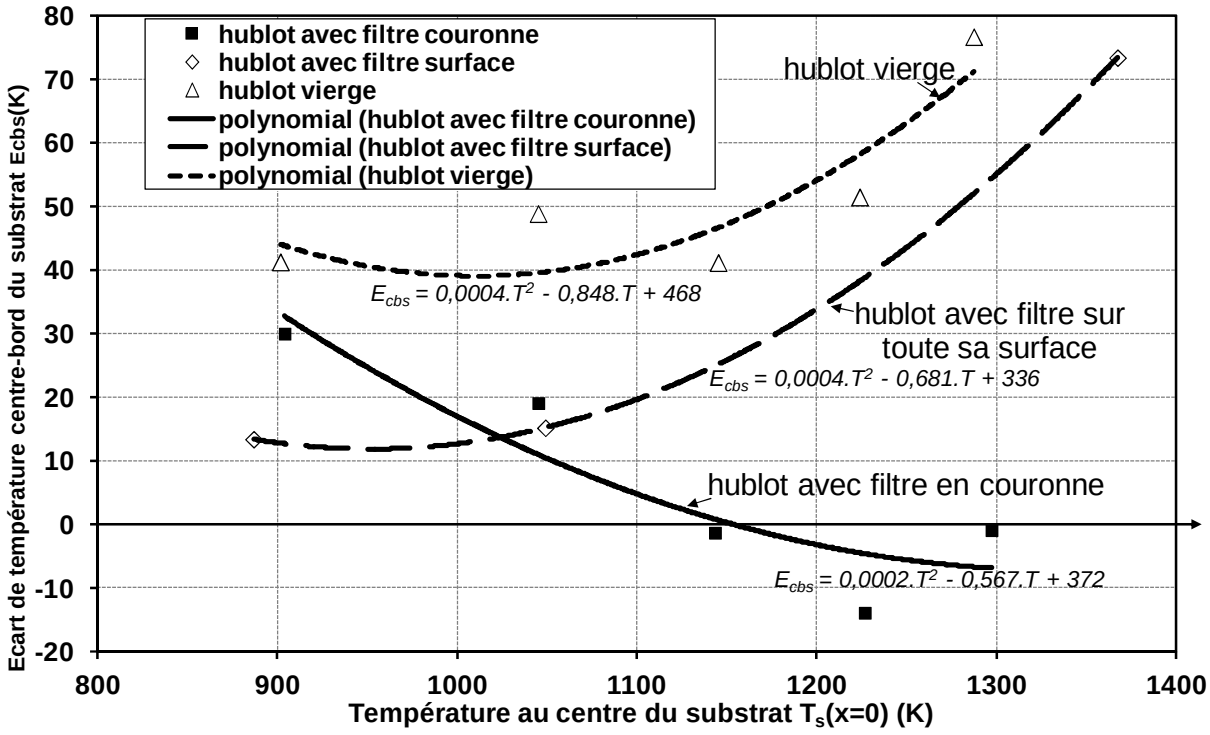


Figure VIII-8. *Écart de température centre-bord du substrat suivant sa température au centre avec les deux configurations du filtre et sans celui-ci.*

La configuration en **couronne** donne une température plus uniforme pour le substrat avec **les puissances moyennes et fortes**.

Pour les **faibles puissances**, l'amélioration est moins bonne. Par contre, la température est plus uniforme avec **le filtre sur toute la surface**. Il y a un meilleur équilibre des flux arrivant sur le substrat avec le filtre sur toute la surface.

La configuration où le **filtre est appliqué sur toute la surface inférieure du hublot** serait intéressante dans le cas d'un **procédé thermique rapide de dépôt chimique à partir de la phase vapeur** (**RTCVD**). La température du hublot est ainsi diminuée. Il y a donc moins de risque d'avoir des dépôts sur la surface inférieure du hublot. Ces dépôts sont susceptibles de provoquer un échauffement dangereux pour le hublot.

Pour les fortes puissances, une surélévation de la température au bord du substrat a été constatée. La **réflectivité du filtre au-delà de 2,6 µm** est trop forte. Il serait intéressant de l'**ajuster** suivant l'écart de température entre le centre et le bord du substrat (Figure VIII-9), et suivant la puissance de chauffage. Une optimisation de l'uniformité de la température du substrat pourrait alors être obtenue.

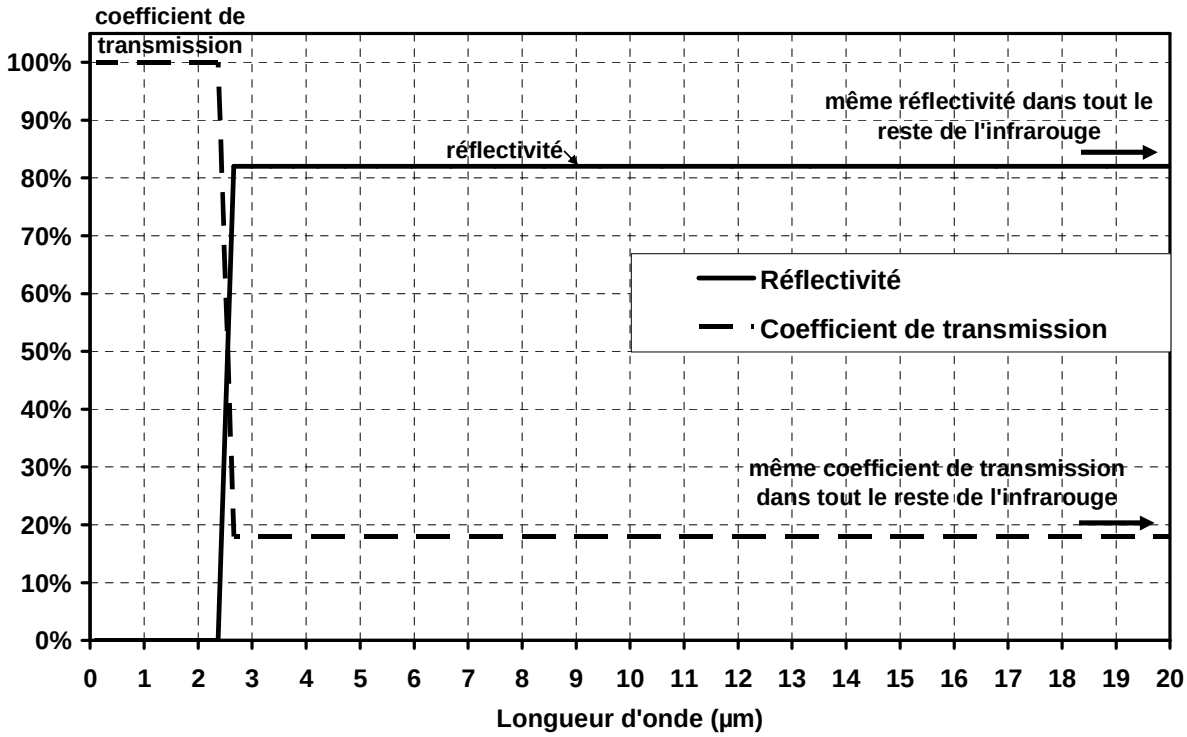


Figure VIII-9. *Modification de la réflectivité au-delà de 2,6 µm.*

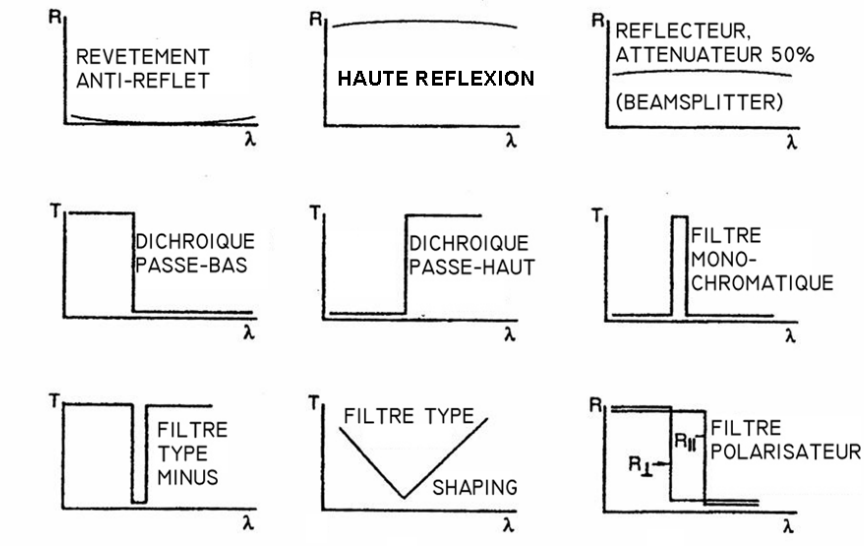
Enfin, comparées aux solutions pour améliorer l'uniformité de la température du substrat au niveau du hublot répertoriées dans l'état de l'art du chapitre I.2, les deux solutions proposées ici sont plus simples à mettre en œuvre. En effet, elles n'impliquent pas d'écoulements à générer au travers d'un double hublot qui absorbe une partie du rayonnement émis par les lampes. Ces solutions ne sont qu'une simple modification de la propriété de surface de la face inférieure du hublot.

VIII.5. Mise en œuvre expérimentale

VIII.5.1. Filtrage avec un empilement de couches minces

Pour mettre en œuvre ces deux idées, il faut trouver un moyen de jouer sur le rayonnement réfléchi et transmis par le hublot. Pour cela, des **empilements de couches minces** peuvent être déposés à la surface du hublot.

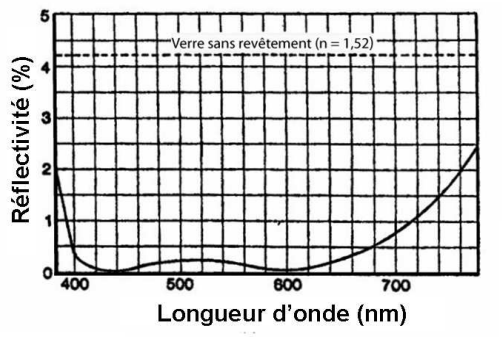
En effet, les empilements de couches minces sont généralement déposés sur du verre ou du quartz pour réaliser des fonctions déterminées. La Figure VIII-10 montre des exemples de fonctions suivant la longueur d'onde du rayonnement incident *(MacLeod 2001).* De nombreux exemples d'applications peuvent être trouvés : les traitements antireflets dans les musées (Figure VIII-11), les vitres avec des revêtements athermiques qui laissent passer dans le visible mais pas l'infrarouge (Figure VIII-11) …



R : Réflectivité ; T : Coefficient de transmission ; λ : longueur d'onde

Figure VIII-10. *Applications typiques des empilements de couches minces (MacLeod 2001).*

Filtre antireflet



Fenêtre athermique (vitrage intelligent)

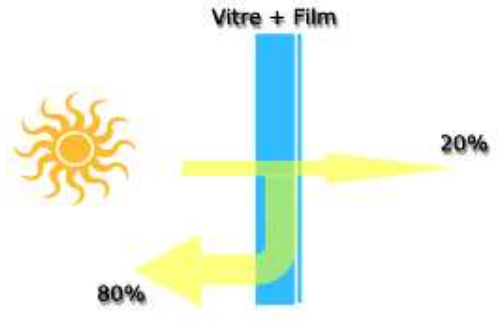


Figure VIII-11. *Deux exemples d'applications : traitement antireflet et propriété athermique.*

Parmi les fonctions proposées par la Figure VIII-10, celle qu'on souhaite avoir sur la surface inférieure du hublot (Figure VIII-1) est celle d'un **filtre de type dichroïde passe-bas**.

VIII.5.2. Proposition d'un empilement de couches minces

De manière pratique, le filtre correspondrait à un empilement de couches minces. Il faut trouver un empilement ayant les propriétés radiatives adaptées. En plus, il faut que cet empilement soit le plus **stable** possible **thermiquement et chimiquement** pour éviter la contamination des dépôts sur le substrat de silicium dans le cas d'un procédé RTCVD.

Les **oxydes transparents conducteurs (TCO : Transparent Conducting Oxide)** déposés sur du verre ou du quartz ont des propriétés très proches de celles du filtre que l'on souhaite. Ils sont également très stables thermiquement et chimiquement. De plus, ils peuvent être déposés sur des surfaces importantes *(Lu et al. 2007) (Lin et al. 2004)*. Ils conviennent donc particulièrement bien. La Figure VIII-12 montre l'exemple des propriétés optiques de films d'oxyde dopés avec du fluor et de l'étain qui ont été déposés sur du quartz *(Shanti et al. 1999) (Ngaffo et al. 2005)*.

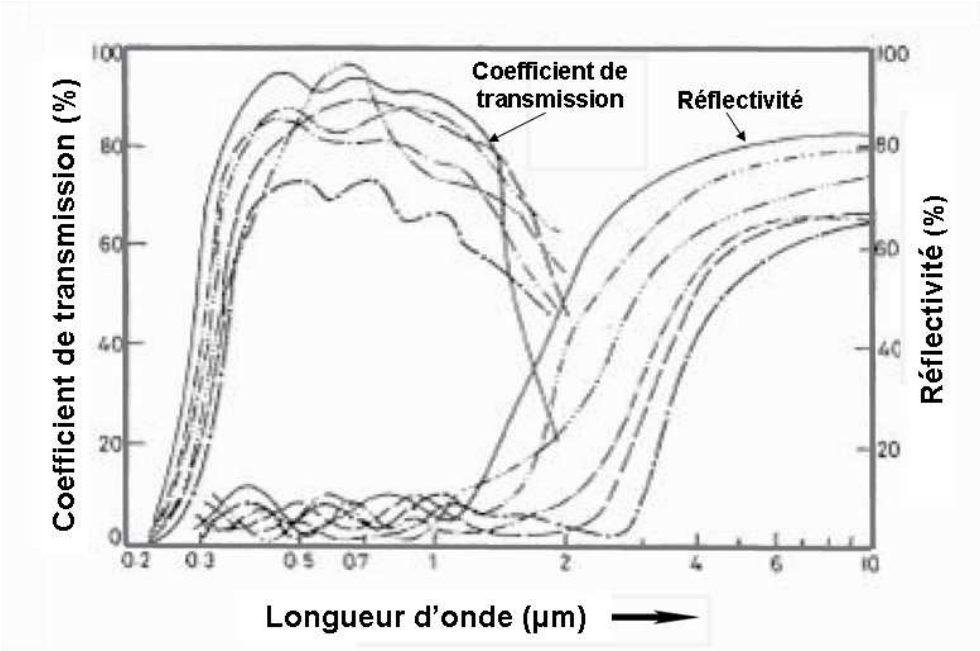


Figure VIII-12. *Exemple de propriétés optiques d'une couche mince d'oxyde transparent conducteur.*

VIII.6. Conclusion

Dans ce chapitre, l'idée d'un filtre sur la surface inférieure du hublot pour améliorer l'uniformité de la température du substrat a été **vérifiée**.

Deux configurations pour ce filtre ont été considérées dans les calculs : une où il est disposé sur toute la surface inférieure du hublot, l'autre selon une couronne proche de la paroi du réacteur. Conformément au chapitre VII.3, les différentes simulations réalisées ont montré que les dispositions permettent une **amélioration de l'uniformité de la température du substrat**. **Le filtre en couronne est plus efficace pour les puissances moyennes et fortes. Le filtre disposé sur toute la face l'est pour les faibles puissances.**

La configuration où le filtre est appliqué sur toute la surface inférieure est intéressante dans le cas d'**une application RTCVD (Rapid Thermal Chemical Vapour Deposition)**. Cette configuration limite davantage l'échauffement du hublot.

Pour la mise en œuvre expérimentale, le filtre serait un empilement de couches minces. Il serait de type dichroïde passe-bas. Un **revêtement d'oxyde transparent conducteur (TCO : Transparent Conducting Oxide)** serait très adapté.

Grâce aux simulations et à l'analyse des propriétés radiatives des surfaces, l'objectif de cette thèse d'améliorer l'uniformité de la température du substrat a été atteint. Par la suite, il faudra procéder à **la fabrication d'un hublot avec le filtre** et à **des essais expérimentaux** pour confirmer les résultats obtenus.

Références du chapitre VIII

Lin, H., T. Jin, A. Dmytruk, M. Saito, T. Yazawa, (2004), *Preparation of a porous ITO electrode*, Journal of Photochemistry and Photobiology A: Chemistry, 164 (1-3), pp. 173-177.

Lu, J.G., T. Kawaharamura, H. Nishinaka, Y. Kamada, T. Ohshima, S. Fujita, (2007), *ZnO-based thin films synthesized by atmospheric pressure mist chemical vapor deposition*, Journal of Crystal Growth, 299 (1), pp. 1-10.

Macleod, H.A., (2001), *Thin-Films Optical Filters*, Institute of Physics Publishing, Bristol et Philadelphie.

Shanthi, S., C. Subramanian, P. Ramasamy, (1999), *Investigations on the optical properties of undoped, fluorine doped and antimony doped tin oxide films*, Crystal Research and Technology, 34 (8), pp. 1037-1046.

Ngaffo, F.F., A.P. Caricato, A. Fazzi, M. Fernandez, S. Lattante, M., Martino, F., Romano, (2005), *Deposition of ITO films on SiO2 substrates*, Applied Surface Science, 248 (1-4), pp. 428-432.

Conclusion générale et perspectives

Le chauffage d'un substrat de silicium dans un système thermique rapide (RTP : Rapid Thermal Process) est mieux connu. Les objectifs de ce travail sont les suivants :

- **mieux comprendre les phénomènes impliqués dans la relation entre le chauffage des lampes et le profil thermique du substrat.**
- **proposer des solutions pour améliorer l'uniformité de la température du substrat.**

Pour atteindre ces objectifs, un système thermique rapide, type AS-One 150, a été modélisé par simulation numérique. La **démarche** suivante a été nécessaire.

Dans un premier temps, **la modélisation du système thermique rapide AS-One 150** a été réalisée en deux et trois dimensions. Les différentes étapes de la construction de la géométrie ont été présentées. Les équations de conservations qui rendent compte des échanges de masse et de chaleur (rayonnement, conduction et convection) dans le système ont été précisées.

Le transfert de chaleur par **rayonnement** est prépondérant au sein du système. L'équation de transfert radiatif est résolue à l'aide d'un **schéma utilisant la méthode Monte-Carlo**. Dans ce schéma, les surfaces sont discrétisées en patchs et les propriétés d'absorption, d'émission, de réflexion et de transmission sont déterminées pour chaque surface. Le calcul de l'échange d'énergie entre les patchs se fait par **traçage des rayons**. L'échantillonnage des rayons absorbés, émis, réfléchis et transmis par les surfaces est effectué à l'aide de la méthode Monte-Carlo.

Afin d'approfondir la relation entre la puissance électrique appliquée aux lampes et la température des filaments, **la modélisation d'une lampe infrarouge** du système AS-One 150

a été réalisée. Les spires du filament ont été restituées dans le modèle. Ainsi, les températures des filaments à considérer dans les modélisations du système rapide thermique en deux et trois dimensions sont connues avec précision.

Dans un deuxième temps, ces modélisations ont été **validées** à l'aide de résultats expérimentaux. Plusieurs essais ont été réalisés à puissance de chauffage constante. Les profils de température du substrat obtenus par l'expérience et la simulation ont été confrontés en régime permanent. Un **bon accord** entre les profils a été observé pour les modélisations du système en deux et trois dimensions. La température des filaments des lampes a été évaluée durant les essais expérimentaux. Une **très bonne correspondance** est obtenue avec les températures dans la modélisation en trois dimensions et la modélisation approfondie d'une lampe infrarouge. Un léger décalage, d'environ 5% vers le bas, est constaté pour les températures des filaments dans la modélisation en deux dimensions. Il s'explique par la représentation géométrique en coupe.

Dans le même temps, une **correspondance** entre la puissance des lampes et la température du substrat est obtenue. Cette relation permet d'avoir une meilleure connaissance du budget thermique à appliquer pour le substrat.

Par ailleurs, le modèle en deux dimensions donne des résultats pratiquement équivalents à ceux obtenus avec le modèle en trois dimensions en dix fois moins de temps de calcul. Le modèle en **deux dimensions** a donc été utilisé dans le reste de l'étude.

Différents calculs ont ensuite été réalisés en régime permanent.

Les formes des profils de température du substrat et du hublot ont été observées. L'hypothèse d'une **corrélation** entre leurs répartitions de température a été émise.

Cette hypothèse a été **mise en évidence** en modifiant les paramètres de la modélisation du système en deux dimensions. Ainsi, l'influence du substrat sur la répartition de la température du hublot a été montrée en enlevant le substrat et en changeant les propriétés radiatives de celui-ci dans les simulations. L'influence du hublot sur la répartition de la température du substrat a été appréciée en enlevant le hublot et en changeant sa diffusivité thermique par une valeur élevée dans les simulations.

Il découle des résultats de ces simulations **quatre constations**. Rappelons-les.

- Les propriétés d'émission et de réflexion du substrat, ainsi que celles de la paroi du réacteur ont un effet sur la température du hublot.

- En l'absence de hublot, l'écart de température entre le centre et le bord du substrat est réduit d'environ 40%.
- La diminution de la température du hublot entraîne une diminution de celle du substrat.
- L'écart de température entre le centre et le bord du hublot se répercute sur celui du substrat.

Ces quatre constations ont ensuite été **interprétées** une à une à l'aide des propriétés d'absorption, d'émission, de réflexion et de transmission des différentes surfaces du système. En réunissant ces interprétations, **la forme du profil de température du substrat et celle du hublot sont expliquées par un schéma en quatre phases** qui souligne les différents phénomènes intervenant dans la corrélation :

- **Phase 1 :** Les lampes émettent un flux radiatif centré aux alentours de 1 µm qui passe à 95% à travers le hublot.
- **Phase 2 :** Ce flux est absorbé à 70% par le substrat de silicium et est réfléchi à 30% par celui-ci. Le substrat chaud émet alors un rayonnement dans tout le domaine infrarouge avec une émissivité de 70%. Le flux émis prend la direction du hublot et de la paroi du réacteur à 300 K.
- **Phase 3 :** Le hublot absorbe à 80% les rayonnements émis par le substrat au-delà de 2,6 µm. Il réfléchit le reste. Puisque le flux reçu au centre du hublot est plus important qu'en son bord, la température du hublot est alors plus élevée en son centre. Cet écart est accru par la perte importante de chaleur par émission vers la paroi froide du réacteur et par conduction, en faible partie, vers le bord externe du hublot.
- **Phase 4 :** Le rayonnement absorbé par le hublot est aussi réémis en direction du substrat et de la paroi du réacteur. L'émissivité est de 80%.
  Comme la température du hublot est plus élevée en son centre, le flux émis par le hublot au centre du substrat est plus important qu'au bord du substrat. L'écart de température entre le centre et le bord du substrat est donc augmenté.

Dans la dernière étape de cette étude, **deux idées** ont été proposées pour améliorer l'uniformité de sa température en analysant le schéma expliquant la forme du profil de température du substrat. Ces deux idées consistent à **réfléchir le rayonnement infrarouge au-delà de 2,6 µm sur la surface inférieure du hublot tout en laissant passer**

le rayonnement émis par les lampes qui est centré aux alentours 1 µm suivant deux configurations : sur toute la surface inférieure du hublot ou sur une couronne proche de la paroi du réacteur maintenue à 300 K.

Des simulations ont été réalisées en tenant compte de ces propriétés. Le changement de propriétés est appelé **filtre**. Les résultats des **calculs confirment que l'uniformité de la température est meilleure** avec le filtre. Le filtre en **couronne** est plus efficace pour les puissances moyennes et fortes tandis que le filtre disposé sur **toute la face** l'est pour les faibles puissances. Ceci est dû à l'équilibre des flux de chaleur radiatifs arrivant sur le substrat. La configuration en couronne serait plus intéressante pour des recuits. La configuration où le filtre est appliqué sur toute la surface inférieure serait intéressante dans le cas d'une application de dépôt chimique à partir de la phase vapeur (RTCVD) car elle empêcherait un échauffement dangereux du hublot.

Enfin, pour la **mise en œuvre expérimentale**, le filtre correspondrait à **un empilement de couches minces**. Il serait de type dichroïde passe-bas. Un **revêtement d'oxyde transparent conducteur (TCO : Transparent Conducting Oxide)** serait très adapté en raison de sa grande stabilité thermique et chimique.

La **perspective immédiate** de ce travail est la **fabrication d'un hublot avec le filtre**. Des **essais expérimentaux** sont à entreprendre pour confirmer l'amélioration de l'uniformité de la température du substrat dans les calculs.

Sur l'ensemble de l'étude, de **nombreuses autres perspectives** peuvent être formulées.

Les résultats ont tous été obtenus en régime permanent, ce qui permet d'apprécier les tendances. Or, en pratique, le chauffage du substrat est réalisé dans un **régime transitoire**. Il serait intéressant de reprendre les simulations réalisées en régime transitoire pour confirmer les tendances obtenues.

Pour compléter les résultats obtenus avec le filtre, des simulations en **trois dimensions** permettraient d'avoir une idée plus précise sur la répartition de la température du substrat. Par ailleurs, une étude en considérant non plus les températures mais les flux de chaleur permettrait de comprendre complètement l'effet du filtre sur l'uniformité de la température du substrat.

Concernant **la modélisation de la lampe infrarouge** seule, rappelons les différentes perspectives qui peuvent être envisagées.

Il serait intéressant de modéliser une **lampe entière** avec sa base pour voir la décroissance de la température au bord de la lampe. La simulation de plusieurs lampes entières voisines permettrait d'apprécier l'influence d'une lampe sur ses voisines.

Cette modélisation précise de la lampe peut être intégrée comme **modèle prédictif** avec la modélisation du système. Ajouté au régulateur d'une machine rapide thermique, ce modèle prédictif pourrait améliorer le contrôle de la température du substrat.

Seul le chauffage du substrat de silicium par les lampes a fait l'objet de l'étude. Cependant, la modélisation permet aussi de traiter une injection et une extraction de gaz pour simuler les **écoulements**. La simulation d'un **dépôt de couches minces**, **procédé RTCVD**, peut être envisagée à titre d'exemple.

Enfin, l'influence d'autres paramètres sur la température du substrat comme la **réflectivité des parois du réacteur** ou **la hauteur du substrat** peut être appréciée.

ANNEXE 1. Caractéristiques de l'AS-One 150

Les données du constructeur AnnealSys sont les suivantes :

AS-ONE

Rapid Thermal Processing Furnace
4 and 6-inch low cost system



www.annealsys.com

APPLICATIONS

- RTA (Rapid Thermal Annealing)
- RTO (Rapid Thermal Oxidation)
- Diffusion
- Compound semiconductor annealing
- Nitridation, Silicidation
- Crystallization and Densification

SPECIFICATIONS

The AS-One systems are available with 4-inch and 6-inch wafer capability. They have been specially developed to meet the requirements of Universities, Research Laboratories, Quality Control and small-scale Production. The high reliability assures low cost of ownership.

The stainless steel cold wall chamber technology provides high process reproducibility under ultra clean and contamination-free environment. High cooling rates and low memory effect of the process chamber are key characteristics. A high vacuum version (10^{-6} mbar) is available for cleanest process conditions.

Both pyrometer and thermocouple temperature measurement are standard features. The fast digital PID temperature controller provides high and stable temperature accuracy (± 1°C) over the temperature range.

Edge pyrometer viewport insures enhanced temperature control of the susceptor for compound semiconductors and small samples.

PERFORMANCE CHARACTERISTICS

- Temperature range: RT to 1250°C
- Ramp rate up to 200°C/s
- Gas mixing capability with mass flow controllers
- Vacuum range: Atmosphere to 10^{-6} Torr

	General features
Maximum substrate diameter	4-inch or 6-inch
Process chamber	Water-cooled stainless steel with quartz window Low volume of the process chamber
Heating	Infrared tubular halogen lamp furnace Fan lamp air-cooling
Temperature control	Thermocouple temperature control Optical pyrometer control (2 positions) Fast digital PID temperature controller Optional additional pyrometer
Vacuum and gas	Purge gas line with needle valve Up to 5 process gas lines with mass flow controllers Vacuum valve Vacuum gauge Optional vacuum rotary or dry pump Optional turbo pump Optional pressure control with throttle valve
Control	Full PC control, up to 100 steps per recipe Ethernet connection to PC for fast control and data logging Wafer traceability and process historicals
Facilities	Electricity: 3x400V+N+Gr or 3x220V+Gr, 50/60 Hz Power: 30kW (4-inch system), 34 kW (6-inch system) Water: 2 to 6 bars, pressure drop 1 bar, 12 l/mn Compressed air: 6 bars (valve actuation) Process gas fittings: Swagelok ¼
Dimensions and weight	Width: 900 mm Depth: 800 mm Height: 700 mm Weight: 180 kg (4-inch system), 205 kg (6-inch system)

www.annealsys.com

ANNEXE 2. Caractéristiques de la lampe infrarouge

2.1. Données générales

Les principales données du constructeur des lampes infrarouges à halogène du four sont indiquées par le Tableau 2.1 et la Figure 2.1. Des données géométriques plus complètes sont indiquées dans le Tableau 2.2. Le tableau 2.3 donne les propriétés électriques de référence complètes. Le prix de la lampe est de 30 €.

Tension nominale	480 V
Puissance nominale	6000 W
Température couleur	3150 K
Dimension L1	300 mm
Dimension L2	248 mm
Dimension L3	44 mm

Tableau 2.1. *Les principales données du constructeur.*

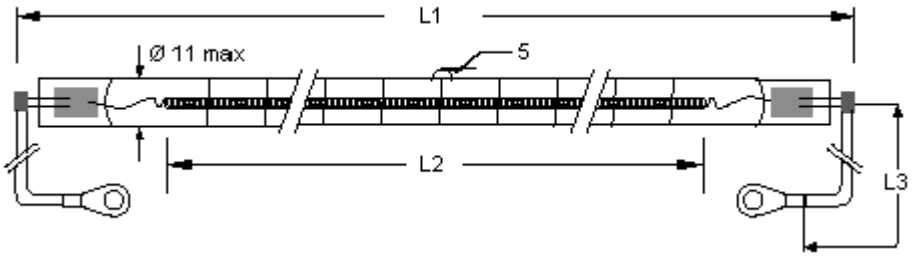


Figure 2.1. *Schéma des principales dimensions.*

Désignation	Dimension
Longueur de la lampe	248 mm
Longueur du fil (de tungstène)	4,8 m
Diamètre du fil	0,38 mm
Nombre de spires	470
Diamètre externe d'une spire	3,440 mm
Espacement entre deux spires consécutives	0,529 mm

Tableau 2.2. *Données géométriques d'une lampe du four.*

Désignation	Valeur
Tension	480 V
Puissance	6000 W
Intensité	12,5 A
Température de couleur du filament	3150 K

Tableau 2.3. *Données électriques de référence de la lampe.*

2.2. Caractéristique de la température du filament en fonction de la tension appliquée donnée par le constructeur de la lampe

2.2.1. Mesure de la température du filament

La température du filament n'est pas mesurée directement. En effet, les sources incandescentes de lumière comme le filament de tungstène de la lampe peuvent être assimilées à des corps noirs de même luminance et de même distribution spectrale. La composition de la lumière qu'elles émettent est liée à leur température.

La composition de la lumière fournie par une source à incandescence est donnée par la température de couleur. Elle est mesurée à l'aide d'un thermocalorimètre et s'exprime en Kelvin. Le thermocolorimètre possède pour cela un pyromètre optique qui donne la température de luminance. La température de couleur est déduite par calcul à partir de la température de luminance et de la distribution spectrale du corps noir correspondant. Elle est plus élevée que la vraie température. Par exemple, une lampe à filament de faible puissance (40 W) a une température de couleur de l'ordre de 2200 K, une lampe halogène de puissance élevée (500 W) 3200 K.

2.2.2. Caractéristique

La caractéristique du constructeur de la température de couleur des filaments en fonction de la tension appliquée est représentée sur la Figure 2.2. Elle a pour expression :

$$T_{couleur} = T_0 \left(\frac{V}{V_0} \right)^{0.37} \qquad (2\text{-}1)$$

où

$T_{couleur}$ est la température de couleur du filament

T_0 est la température de référence de la lampe égale à 3150 K pour la tension V_0 de 480 V.

La température de couleur $T_{couleur}$ doit ensuite être reliée à la vraie température du filament T_{fil} par la relation suivante :

$$T_{fil} = 0{,}964.T_{couleur} + 27 \qquad (2\text{-}2)$$

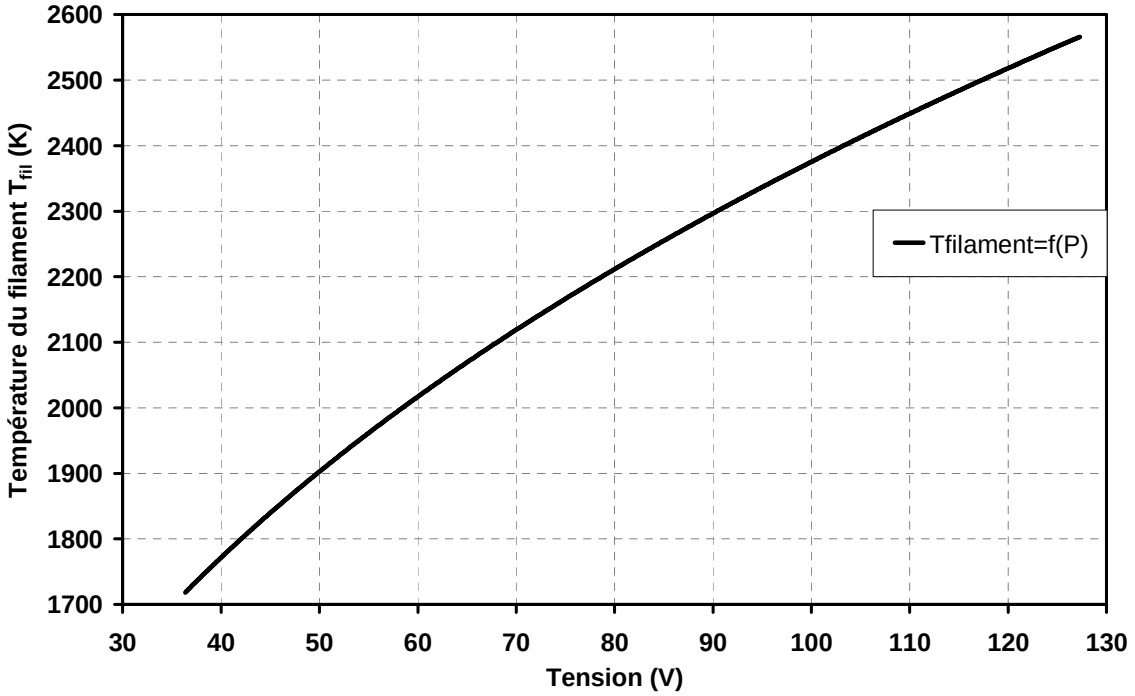


Figure 2.2. *Caractéristique du constructeur pour la température du filament en fonction de la tension appliquée aux bornes de la lampe.*

ANNEXE 3. Étapes de la construction de la géométrie en deux dimensions de l'AS-One 150

Un imprimé a été réalisé avec toutes les étapes de la construction et le programme Python correspondant. Les étapes sont les suivantes :

Étape préliminaire : Déclaration des variables

Étape 1 : LA CONSTRUCTION DES LIGNES DE LA GEOMETRIE

- Les points du réacteur
- Les lignes du réacteur
- Les centres des lampes
- Les cercles des lampes (les filaments, l'interface gaz-quartz et le quartz externe)
- Les points de projection des lampes (de gauche à droite)
- Les rayons des lampes (de gauche à droite)
- Les lignes de projection des lampes (de gauche à droite)
- Le substrat
- La projection du substrat

Étape 2 : LES EDGES

- Les filaments (de gauche à droite)
- Les rayons des lampes (gaz ; de gauche à droite)
- Les cercles des lampes représentant l'interface gaz-quartz
- Les rayons des lampes (quartz ; de gauche à droite)
- Les cercles des lampes représentant le quartz externe (de gauche à droite)
- Le four (les rectangles de la partie haute puis la partie basse)
    - Largeurs des grands rectangles
    - Les petits "raccords" pour les deux grands rectangles à la jonction de la partie basse du four
    - Les longueurs des grands rectangles du haut
    - Longueurs des grands rectangles du bas, les bords du four correspondant aux deux dernières instructions
    - Largeurs des rectangles aux quatre coins
    - Largeurs des petits rectangles restants
- La partie basse du four
- Le hublot
- L'injecteur
- Le réacteur (différents rectangles et le substrat)

- Rectangle à gauche en haut du réacteur
- Rectangle central au-dessus du substrat du réacteur
- Rectangle à droite en haut du réacteur
- Rectangle central à gauche du substrat
- Rectangle central à droite du substrat
- Le substrat
- Rectangle à gauche en bas du réacteur
- Rectangle central en-dessous du substrat du réacteur
- L'extraction (préalablement il y a des constructions supplémentaires et le rectangle à droite en bas du réacteur)
    - Constructions supplémentaires pour l'évacuation
    - Rectangle à droite en bas du réacteur
    - Extraction

Étape 3 : LES FACES

- Les lampes (d'abord le gaz puis le quartz ; de gauche à droite)
- Les rectangles du four
    - Les rectangles en haut du four (de gauche à droite)
    - Les rectangles en position centrale du four (de gauche à droite)
    - Les rectangles en bas du four (de gauche à droite)
- La partie basse du four
- Le hublot
- L'injecteur
- Le réacteur (les rectangles et le substrat)
- Les rectangles en haut du réacteur (de gauche à droite)
- Les rectangles en position centrale autour du substrat (de gauche à droite)
- Le substrat
- Les rectangles en-dessous du substrat (de gauche à droite)
- L'extraction constituée de 5 parties (de haut en bas)

Étape 4 : LES BLOCKS

- Les lampes (d'abord le gaz puis le quartz)
- Les rectangles du four
    - Les rectangles en haut du four (de gauche à droite)
    - Rectangles en position centrale du four (de gauche à droite)
    - Rectangles en bas du four (de gauche à droite)
- La partie basse du four
- Le hublot
- L'injecteur
- Le réacteur (les rectangles et le substrat)
    - Les rectangles
    - Le substrat
- L'extraction

Étape 5 : LES CONDITIONS AUX LIMITES (BOUNDARY CONDITIONS)

- LES LAMPES
  - Les filaments
  - Le gaz des lampes
  - Le quartz des lampes

- LE FOUR
  - La paroi du four
  - L'air du four

- LE HUBLOT
  - Le hublot externe
  - Le hublot interne

- L'INJECTION

- LE REACTEUR
  - Le réacteur
  - Les parois du réacteur
  - Le substrat

- L'EXTRACTION

Étape 6 : LES CONDITIONS DES VOLUMES (VOLUME CONDITIONS)

- LAMPES (de gauche à droite)
  - Le gaz des lampes
  - Le quartz des lampes
- L'AIR DU FOUR
- LE HUBLOT
- L'AZOTE DANS LE REACTEUR
- LE SUBSTRAT

ANNEXE 4. Propriétés thermiques et radiatives

La capacité calorifique et la conductivité thermique des solides et des gaz sont données ci-après. Celles du quartz ont déjà été présentées au chapitre III.3.3.2.

Les fichiers donnant les propriétés radiatives des surfaces sont ensuite détaillés.

4.1. Capacité calorifique et conductivité thermique

- **Tungstène des filaments des lampes :** les données sont disponibles sur le site http://cea.grc.nasa.gov/index.html.

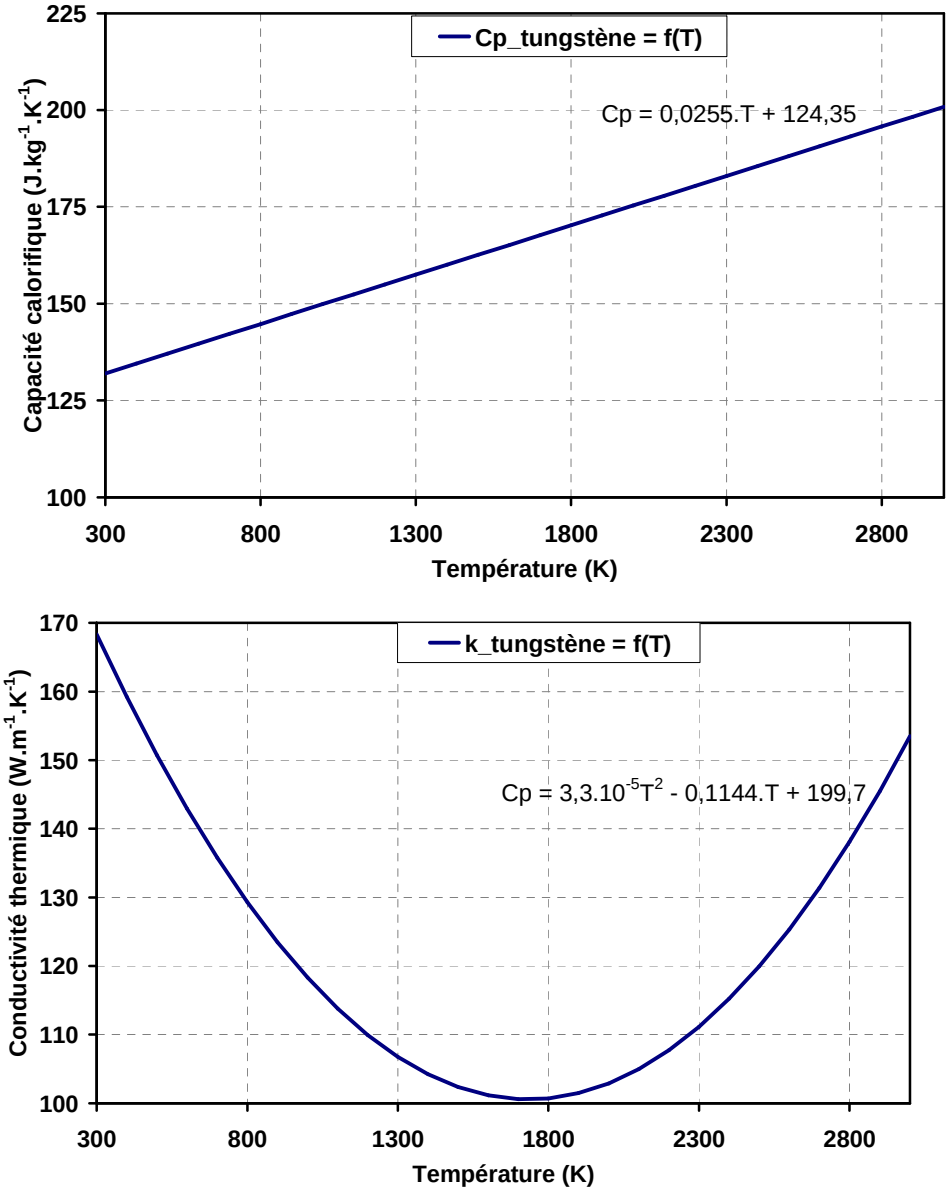


Figure 4.1. *Capacité calorifique et conductivité thermique du tungstène.*

- **Silicium du substrat** : la conductivité thermique du silicium est donnée par Glassbrenner et Slack *(Glassbrenner et Slack 1964)*, et sa capacité calorifique par Okhtin et al. *(Okhotin et al. 1972)*.

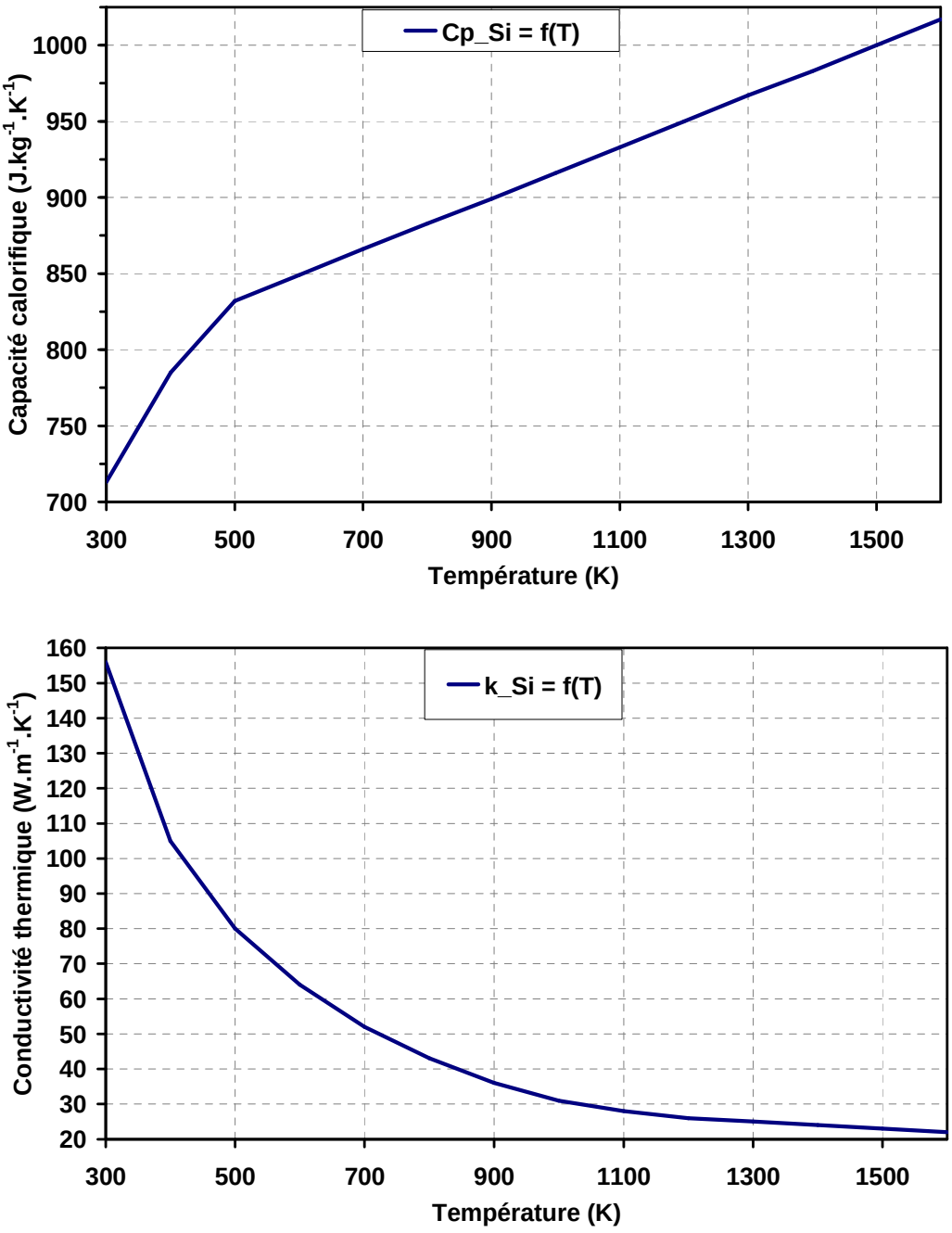
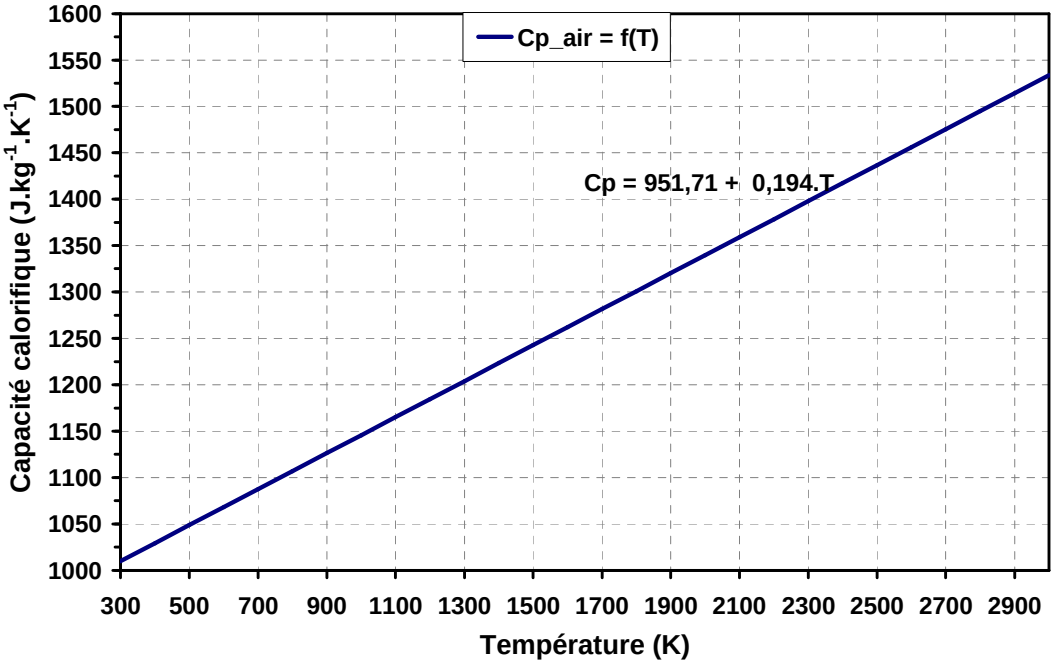


Figure 4.2. *Capacité calorifique et conductivité thermique du silicium.*

- **Air dans le four** : toutes les données proviennent du site http://webbook.nist.gov/chemistry/fluid/.



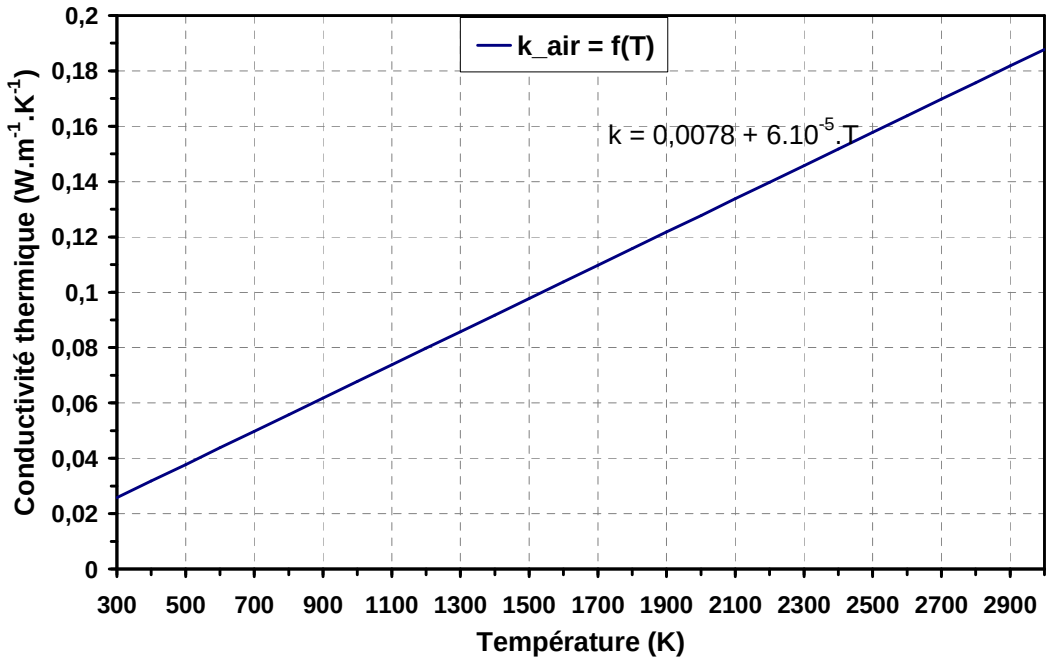
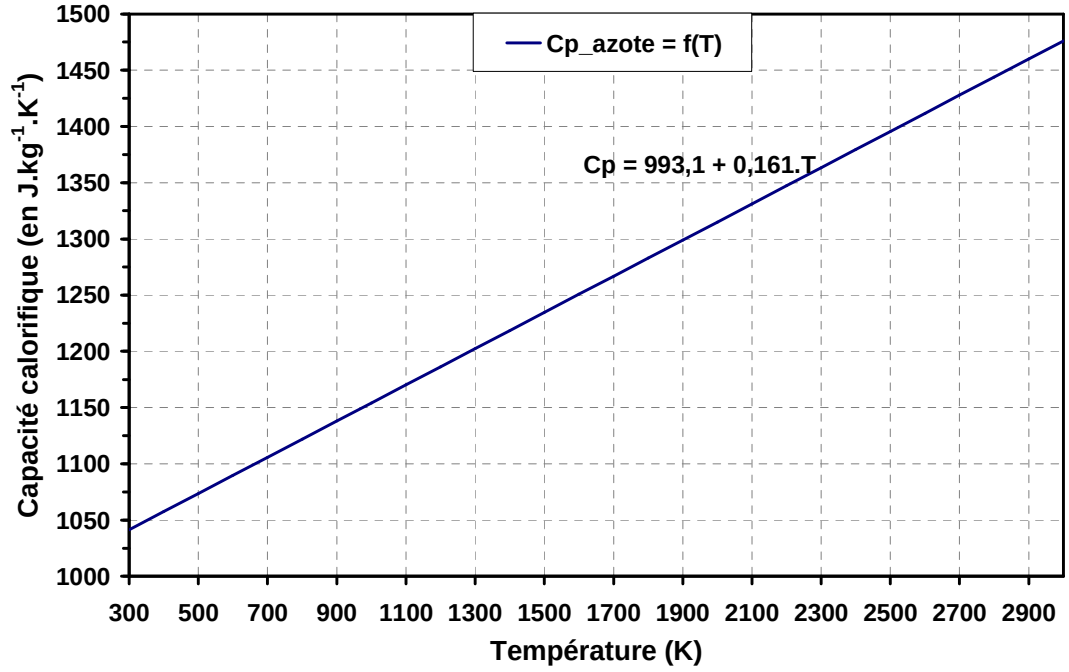


Figure 4.3 *Capacité calorifique et conductivité thermique de l'air.*

- **Azote dans le réacteur et dans les lampes** : toutes les données proviennent du site http://webbook.nist.gov/chemistry/fluid/.



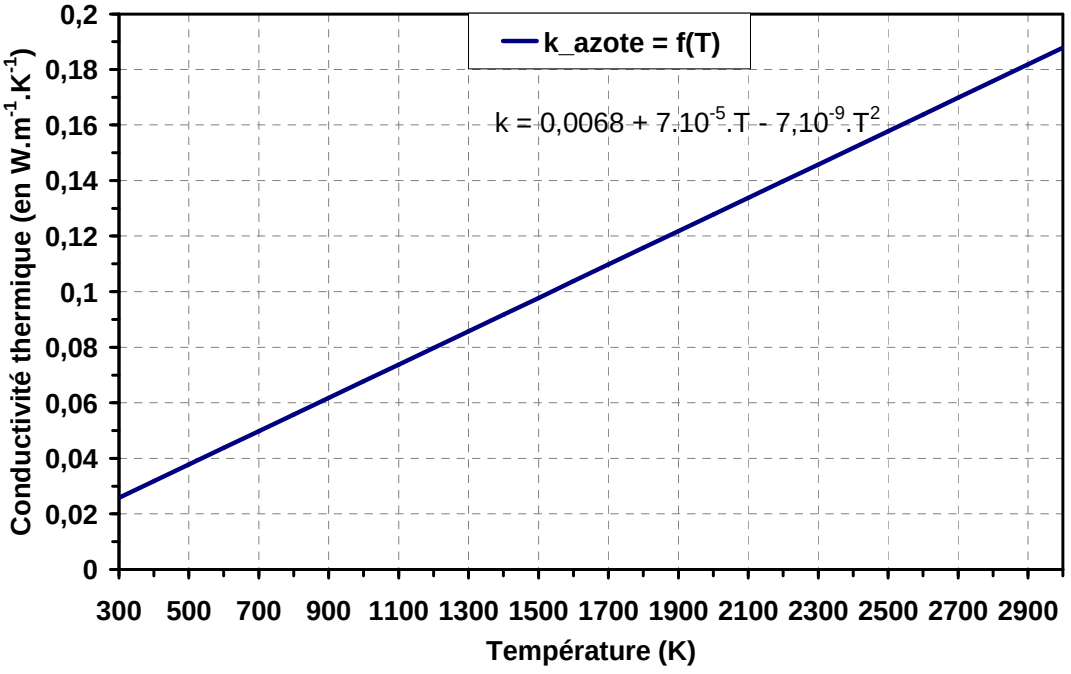


Figure 4.4.*Capacité calorifique et conductivité thermique de l'azote.*

4.2. Propriétés radiatives des surfaces

- Le **fichier PATCH** contient les propriétés radiatives. Les lignes à entrer dans le fichier sont précisées dans le manuel des modules du logiciel CFD'ACE *(CFDRC, CFD'ACE (U) Module Manual 2007).*

Filament des lampes	Ampoule en quartz	Hublot en quartz	Substrat en silicium	Paroi en acier	Injection
Filament TUNGSTEN DIFFUSE NONGRAY OPAQUE UNCOATED	Bulb SIO2 DIFFUSE NONGRAY ST* UNCOATED	Window SIO2 DIFFUSE NONGRAY ST* UNCOATED	Wafer SILICON DIFFUSE NONGRAY ST* UNCOATED	Steel STEEL DIFFUSE GRAY 0.25	Far DUMMY DIFFUSE GRAY 1.0

*Semi-Transparent

Le changement des propriétés radiatives du substrat au chapitre VI :

Substrat corps noir	Substrat parfaitement réfléchissant
Far DUMMY DIFFUSE GRAY 1.0	Reflecteur PERFECTREFL SPECULAR NONGRAY OPAQUE UNCOATED

Le changement des propriétés radiatives du hublot au chapitre VIII :

Filtre du hublot inférieur
Filtre IDEAL SPECULAR NONGRAY ST UNCOATED

- Le **fichier "Optical Database"** présente les coefficients sous forme de colonnes dans l'ordre $n_0, n_1, n_2, n_3, k_0, k_1, k_2, k_3$. Il y a 60 lignes qui correspondent chacune au centre d'une plage de longueurs d'onde.

Le centre de la plage est défini par la formule :

$$\eta_i = C\,10^{2+0,05i}$$

où

η_i est le nombre d'onde central de la *i*ème plage (en m^{-1})

C est égale à 94,40608.

Prenons l'exemple du substrat de silicium à la température de 1000 K. Son épaisseur est de 0,5 mm. Les coefficients $n_0, n_1, n_2, n_3, .k_0, k_1, k_2, k_3$ proviennent de l'ouvrage *Handbook of Optical Constants of Solids (Palik 1998).*

Rappel : L'indice de réfraction n_λ et l'indice d'absorption k_λ ont des expressions de la forme suivante :

$$n_\lambda = n_0 + n_1\theta + n_2\theta^2 + n_3\theta^3$$

$$k_\lambda = \left(k_1 + k_2\theta + k_3\theta^2\right).\exp[k_0\theta]$$

où

$n_0, n_1, n_2, n_3, .k_0, k_1, k_2, k_3$ sont les coefficients des monômes ;

θ correspond à la température sans dimension égale à $\frac{T-300}{1000}$.

i	Longueur d'onde λ (µm)	n0	n1	n2	n3	k0	k1	k2	k3	n	k	Réflectivité R_λ	Coefficient de transmission T_λ	Absorptivité $\varepsilon_\lambda = \alpha_\lambda$
1	94,40609526	3,418	0	0	0	10,67	0,0007515	0	0	3,418	1,317268996	0,35673048	5,41386E-39	0,643269522
2	84,13952096	3,419	0	0	0	10,65	0,0006071	0	0	3,419	1,049362634	0,33704088	6,15615E-35	0,66295912
3	74,98942699	3,419	0	0	0	10,65	0,0004822	0	0	3,419	0,833474983	0,32371493	3,17122E-31	0,676285068
4	66,83439716	3,419	0	0	0	10,65	0,0003831	0	0	3,419	0,662182219	0,31503715	6,30544E-28	0,684962851
5	59,56621917	3,42	0	0	0	10,65	0,0003043	0	0	3,42	0,52597768	0,30954607	5,54477E-25	0,690453931
6	53,08844871	3,42	0	0	0	10,64	0,0002444	0	0	3,42	0,419494724	0,30601972	1,90225E-22	0,693980275
7	47,31512972	3,42	0	0	0	10,64	0,0001942	0	0	3,42	0,333330096	0,30372853	4,15914E-20	0,696271473
8	42,16965375	3,42	0	0	0	10,64	0,0001542	0	0	3,42	0,264673021	0,30227049	5,21173E-18	0,697729509
9	37,58374347	3,42	0	0	0	10,64	0,0001225	0	0	3,42	0,21026229	0,30134966	3,78661E-16	0,69865034
10	33,49654662	3,42	0	0	0	10,6	0,0001002	0	0	3,42	0,167237157	0,30076965	1,66289E-14	0,699230346
11	29,8538286	3,42	0	0	0	10,6	0,00007955	0	0	3,42	0,132771616	0,30039991	5,11709E-13	0,699600092
12	26,60725275	3,42	0	0	0	10,6	0,00006319	0	0	3,42	0,105466227	0,30016709	1,06837E-11	0,69983291
13	23,71373897	3,42	0	0	0	10,6	0,00005019	0	0	3,42	0,083768792	0,30002006	1,60607E-10	0,69997994
14	21,13489211	3,42	0	0	0	10,58	0,0000405	0	0	3,42	0,066656109	0,29992785	1,73416E-09	0,700072148
15	18,83649242	3,42	0	0	0	10,58	0,00003217	0	0	3,42	0,052946346	0,2998691	1,49656E-08	0,700130885
16	16,78804154	3,421	0	0	0	10,58	0,00002556	0	0	3,421	0,042067411	0,29994411	1,01727E-07	0,700055791

17	14,96235777	3,421	0	0	0	10,58	0,0000203	0	0	3,421	0,033410346	0,29992071	5,64874E-07	0,70007873
18	13,3352154	3,421	0	0	0	10,58	0,00001612	0	0	3,421	0,026530777	0,29990594	2,60752E-06	0,700091457
19	11,88502323	3,421	0	0	0	10,58	0,00001281	0	0	3,421	0,02108308	0,29989664	1,01059E-05	0,70009325
20	10,59253811	3,421	0	0	0	10,58	0,00001017	0	0	3,421	0,01673809	0,29989076	3,41391E-05	0,700075103
21	9,440609526	3,421	0	0	0	10,58	0,000008082	0	0	3,421	0,013301597	0,29988706	0,000100097	0,700012843
22	8,413952096	3,422	0	0	0	10,58	0,000006419	0	0	3,422	0,010564582	0,29999677	0,000262344	0,699740882
23	7,498942699	3,422	0	0	0	10,58	0,000005099	0	0	3,422	0,008392086	0,2999953	0,00061851	0,69938619
24	6,683439716	3,423	0	0	0	10,58	0,00000405	0	0	3,423	0,006665611	0,30010639	0,001329103	0,698564502
25	5,956621917	3,424	0	0	0	10,58	0,000003217	0	0	3,424	0,005294635	0,3002178	0,002627056	0,69715514
26	5,308844871	3,424	0	0	0	10,58	0,000002556	0	0	3,424	0,004206741	0,30021743	0,004816073	0,694966492
27	4,731512972	3,426	0	0	0	10,6	0,000001972	0	0	3,426	0,003291334	0,30044109	0,008844024	0,690714883
28	4,216965375	3,429	0	0	0	10,6	0,000001567	0	0	3,429	0,002615376	0,30077658	0,014198248	0,685025169
29	3,758374347	3,429	0	0	0	10,6	0,000001244	0	0	3,429	0,002076278	0,30077649	0,021734161	0,677489346
30	3,349654662	3,431	0	0	0	10,6	9,885E-07	0	0	3,431	0,00164984	0,30100004	0,031656049	0,667343908
31	2,98538286	3,435	0	0	0	10,6	7,852E-07	0	0	3,435	0,001310525	0,30144686	0,044292479	0,654260656
32	2,660725275	3,438	0	0	0	10,6	6,237E-07	0	0	3,438	0,001040976	0,30178167	0,059758563	0,638459764
33	2,371373897	3,442	0	0	0	10,6	4,954E-07	0	0	3,442	0,000826839	0,30222769	0,078030684	0,61974163
34	2,113489211	3,443	0	0	0	10,6	3,935E-07	0	0	3,443	0,000656765	0,30233911	0,099011848	0,598649042
35	1,883649242	3,449	0	0	0	10,6	3,126E-07	0	0	3,449	0,00052174	0,30300708	0,122295007	0,574697916
36	1,678804154	3,459	0	0	0	10,65	2,363E-07	0	0	3,459	0,000408441	0,304118	0,150886379	0,544995625
37	1,496235777	3,473	0	0	0	11,59	1,069E-07	0	0	3,473	0,000356787	0,30566833	0,155195348	0,539136323
38	1,33352154	3,485	0	0	0	8,996	0,00000215	0	0	3,485	0,001167556	0,30699264	0,002828764	0,6901786
39	1,188502323	3,508	0	0	0	5,848	0,00008598	0	0	3,508	0,00515496	0,30951986	1,00826E-12	0,690480143
40	1,059253811	3,533	0	0	0	4,267	0,0006915	0	0	3,533	0,013708388	0,31225377	3,3353E-36	0,687746231
41	0,944060953	3,573	0	0	0	3,247	0,00287	0	0	3,573	0,027860559	0,31660077	2,02007E-81	0,68339923
42	0,84139521	3,632	0	0	0	2,624	0,007551	0	0	3,632	0,047393259	0,32294606	1,3434E-154	0,677053935
43	0,74989427	3,698	0	0	0	2,301	0,01448	0	0	3,698	0,072491433	0,32996501	1,0981E-264	0,67003499
44	0,668343972	3,774	0	0	0	2,054	0,02465	0	0	3,774	0,103811515	0,33794854	0	0,662051462
45	0,595662192	3,885	0	0	0	1,883	0,03766	0	0	3,885	0,140709647	0,34932863	0	0,650671367
46	0,530884487	4,047	0	0	0	1,752	0,05422	0	0	4,047	0,184832469	0,36533506	0	0,634664937
47	0,473151297	4,284	0	0	0	1,634	0,07535	0	0	4,284	0,236498987	0,38748785	0	0,612512153
48	0,421696538	4,71	0	0	0	1,566	0,09889	0	0	4,71	0,295955209	0,42370675	0	0,576293251
49	0,375837435	5,629	0	0	0	1,517	0,126	0	0	5,629	0,364374399	0,48915984	0	0,510840156
50	0,334965466	5,808	0	0	0	0	2,988	0	0	5,808	2,988	0,57971676	0	0,42028324
51	0,298538286	4,998	0	0	0	0	3,387	0	0	4,998	3,387	0,57865251	0	0,421347489
52	0,266072527	3,128	0	0	0	0	5,346	0	0	3,128	5,346	0,72573493	0	0,274265072
53	0,23713739	1,58	0	0	0	0	3,675	0	0	1,58	3,675	0,68653942	0	0,313460577
54	0,211348921	1,362	0	0	0	0	3,304	0	0	1,362	3,304	0,66972731	0	0,330272693
55	0,188364924	0,985	0	0	0	0	2,926	0	0	0,985	2,926	0,68484289	0	0,315157113
56	0,167880415	0,69	0	0	0	0	2,464	0	0	0,69	2,464	0,6908393	0	0,3091607
57	0,149623578	0,505	0	0	0	0	2,075	0	0	0,505	2,075	0,69257227	0	0,307427728
58	0,133352154	0,386	0	0	0	0	1,721	0	0	0,386	1,721	0,68379039	0	0,316209613
59	0,118850232	0,313	0	0	0	0	1,423	0	0	0,313	1,423	0,66603519	0	0,333964808
60	0,105925381	0,271	0	0	0	0	1,15	0	0	0,271	1,15	0,63103412	0	0,368965885

Références des annexes

CEA/NASA : http://cea.grc.nasa.gov/index.html .

CFD Research Corporation, (2007), *CFD'ACE (U) Module Manual*, Version 2007, Huntsville.

Glassbrenner, C.J., G.A. Slack, (1964), *Thermal Conductivity of Silicon and Germanium from 3°K to the Melting Point*, Phys. Rev, 134 (4 A), pp. 1058-1069.

NIST Webbook : http://webbook.nist.gov/chemistry/fluid/ .

Okhotin, A.S., A.S. Pushkarskii, V.V. Gorbachev, (1972), *Thermophysical Properties of Semiconductors* (en Russe), Russia : Atom, Moscou.

Palik, E.D., (1998), *Handbook of Optical Constants of Solids*, Academic Press, New York.

Glossaire

$A_{corps\ opaque}$	absorptivité d'un corps opaque
A_i	aire d'un patch *i*
A_λ	absorptivité suivant la longueur d'onde
A_{lame}	absorptivité d'une lame semi-transparente
α_λ	absorptivité suivant la longueur d'onde
$\alpha_{\theta,\lambda}$	absorptivité hémisphérique totale
CAO	Conception Assisté par Ordinateur
CFD	Computational Fluid Dynamics
CFDRC	Computational Fluid Dynamics Research Corporation
CMOS	Complementary Metal Oxide Semiconductor
DARTS	Direct Approach using Ray Tracing Simulation
δ_{ij}	symbole de Kronecker
$\Delta\xi_i$	quantité d'énergie transportée par un paquet de photon émis du patch i
$\Delta\Phi_{1\text{-}2}$	flux de chaleur échangé par deux lampes voisines
$\Delta\Phi_{1long.}$	flux de chaleur le long d'une lampe
Δt_f	pseudo pas de temps
E_{cbh}	écart de température entre le centre et le bord du hublot
E_{cbs}	écart de température entre le centre et le bord du substrat
E_i	grandeur avec une incertitude
$E_{i\ max}$	précision
E_λ	pouvoir émissif suivant la longueur d'onde λ
E_1^+	amplitude complexe du rayon incident
E_1^-	amplitude complexe du rayon réfléchi
E_2^+	amplitude complexe du rayon transmis
ε	émissivité
ε_i	émissivité du patch *i*
ε_j	émissivité du patch *j*
ε_λ	émissivité suivant la longueur d'onde
$\varepsilon_{\theta,\lambda}$	émissivité hémisphérique totale
η_i	nombre d'onde central de la *i*ème plage
$F_{i\to j}$	facteur d'échange
ϕ_p	variable au nœud P
$\Phi_{1\to 2}$	flux de chaleur émis par la lampe 1 vers la lampe 2
G_c	fonction de transfert du contrôleur,
G_p	fonction de transfert du précédé
h_0	enthalpie totale massique

i	énergie interne massique
I	intensité de l'énergie radiative
I	constante de sous relaxation
I_b	intensité de l'énergie radiative pour le corps noir
I_{exp}	intensité électrique expérimentale
ITRS	International Technology Roadmap for Semiconductors
k	conductivité thermique
k_λ	indice d'absorption (ou coefficient d'extinction) suivant la longueur d'onde
κ	coefficient d'absorption
l	épaisseur
l_{fil}	longueur du filament
λ	longueur d'onde
M_{ij}	matrice d'échange
MOS	Metal Oxide Semiconductor
MOSFET	Metal Oxide Semiconductor Field Effect Transistor
μ	viscosité dynamique du fluide
$\vec{n}$	vecteur unitaire normal à la surface
n_λ	indice de réfraction suivant la longueur d'onde
$\tilde{n_\lambda}$	indice de réfraction complexe suivant la longueur d'onde
n'_λ	indice de réfraction suivant la longueur d'onde (deuxième milieu)
N_i	nombre de paquets de photons émis du patch *i*
N_{ij}	nombre de paquets de photons émis du patch *i* et absorbés par le patch *j*
Ω	direction de propagation du faisceau
p	indice pour désigner une valeur au nœud P
p	pression statique
p	vibration parallèle au plan d'incidence
P	modèle prédictif
P	puissance de chauffage
P	fonction de densité de probabilité
P_{atm}	pression atmosphérique
ϕ	variable étudiée
PC	Personal Computer
PID	Proportionnel Intégral Dérivée
PME	Petites et Moyennes Entreprises
$\Phi(\Omega)$	fonction de phase
q_i	densité de flux de chaleur (pour un patch *i*)
Q_i	flux de chaleur (pour un patch *i*)
r	position
$R_{corps\ opaque}$	réflectivité d'un corps opaque
R_{exp}	résistance électrique du filament
R_λ	fonction de distribution cumulée suivant la longueur d'onde

R_{lame}	réflectivité d'une lame semi-transparente
R_ψ	fonction de distribution cumulée suivant l'angle azimutal ψ
R_θ	fonction de distribution cumulée suivant l'angle polaire θ
R_x	fonction de distribution cumulée suivant la coordonnée x
R_y	fonction de distribution cumulée suivant la coordonnée y
RAM	Random Access Memory
ρ	densité
ρ	réflectivité
ρ_λ	réflectivité suivant la longueur d'onde
ρ_{tung}	résistivité du tungstène
RTA	Rapid Thermal Annealing
RTCVD	Rapid Thermal Chemical Vapour Deposition
RTN	Rapid thermal Nitruration
RTO	Rapid thermal Oxidation
RTP	Rapid Thermal Process
s	vibration perpendiculaire au plan d'incidence
s_{fil}	section du filament
S	terme de source
SEMI	Semiconductor Equipment Manufacturing International
SIA	Semiconductor Industry Association
SICAS	Semiconductor International Capacity Statistics
σ	coefficient de diffusion
Substrat (ou wafer)	plaquette de constitution, de taille et d'épaisseur variables, destinée à subir un procédé
t	temps
T	température
$T_{corps\ opaque}$	coefficient de transmission d'un corps opaque
$T_{couleur}$	température de couleur
T_{fil}	température du filament
T_h	température du hublot
$T_h(x=0)$	température au centre du hublot
$T_h(x=-0{,}0875m)$	température à 12,5 mm du bord intérieur du hublot
T_i	température moyenne du patch i
T_j	température moyenne du patch j
T_{lame}	coefficient de transmission d'une lame semi-transparente
T_s	température du substrat
$T_s(x=0)$	température au centre du substrat
$T_s(x=-0{,}070m)$	température à 5 mm du bord du substrat
τ	tenseur
τ	coefficient de transmission
τ_λ	coefficient de transmission suivant la longueur d'onde
Γ	coefficient de diffusion
TCO	Transparent Conducting Oxide
θ	température sans dimension
θ_1	angle d'incidence
θ_2	angle de réfraction

u	composante de la vitesse suivant x
$u(E_i)$	incertitude sur la grandeur E_i
U_{exp}	tension électrique expérimentale
v	composante de la vitesse suivant y
$\vec{V}$	vecteur vitesse
VLSI	Very Large Scale Integration
w	composante de la vitesse suivant z
x	axe de coordonnée
y	axe de coordonnée
z	axe de coordonnée

Table des figures

Figure I-1. *Principe du procédé thermique rapide* 10
Figure I-2. *Exemple d'évolution de la température du substrat dans un procédé thermique rapide.* 11
Figure I-3. *Schéma d'un four résistif.* 11
Figure I-4. *Durées et températures des applications RTP.* 13
Figure I-5. *Exemples de solutions pour améliorer l'uniformité de la température du substrat.* 17
Figure I-6. *Solutions au niveau du hublot pour améliorer l'uniformité de la température du substrat.* 18
Figure I-7. *Stratégie pour améliorer l'uniformité de la température du substrat.* 21

Figure II-1. *L'équipement de chauffage thermique rapide type AS-One 150.* 26
Figure II-2. *Photo d'une lampe infrarouge à halogène du four et schéma de sa base.* 27
Figure II-3. *Le four abaissé avec le système de ventilation d'air pour refroidir les culots des lampes.* 27
Figure II-4. *Le réacteur en position relevée.* 28
Figure II-5. *Interactions et rôles des trois logiciels constitutifs de CFD'ACE.* 30

Figure III-1. *Modèles de l'AS-One 150 réalisés en deux et trois dimensions.* 36
Figure III-2. *Géométrie en deux dimensions de l'AS-One 150 avec son maillage.* 39
Figure III-3. *Géométrie en trois dimensions de l'AS-One 150 avec son maillage et les différentes parties de la construction.* 40
Figure III-4. *Forme de base avec anticipation sur le maillage du substrat (en rouge).* 40
Figure III-5. *Jonction entre le four inférieur et supérieur.* 42
Figure III-6. *Capacité calorifique et conductivité thermique du quartz (Sosman 1927).* 48
Figure III-7. *Transfert de chaleur par rayonnement pour un élément de solide qui absorbe et diffuse.* 50
Figure III-8. *Flux radiatif (à gauche) et les trois processus relatifs au rayonnement (à droite).* 52
Figure III-9. *Réfraction et réflexion d'un rayon incident à l'interface entre deux milieux d'indices différents.* 55
Figure III-10. *Réflectivité et coefficient de transmission d'une lame semi-transparente.* 56
Figure III-11. *Exemple de trajets pour les paquets de photons.* 58
Figure III-12. *Suivi de la résolution numérique : visualisation de la somme des résidus normalisée de chaque variable en fonction du nombre d'itérations.* 65
Figure III-13. *Visualisation de la température du système et de sa répartition pour le substrat.* 66

Figure IV-1. *Différentes modélisations des lampes infrarouges dans des systèmes thermiques rapides.* 73
Figure IV-2. *Modélisation d'une lampe de l'AS-One 150.* 75
Figure IV-3. *Justification des conditions aux limites de la portion.* 76
Figure IV-4. *Géométrie de la modélisation de la lampe avec son maillage.* 78
Figure IV-5. *Lampe dans une « portion du four » pour une puissance.* 80
Figure IV-6. *Schéma en blocks d'un contrôleur avec feedback (P : Modèle prédictif, G_c : fonction de transfert du contrôleur, G_p : fonction de transfert du procédé).* 81

Figure V-1. *Soudures chaudes des thermocouples.* 86
Figure V-2. *Emplacement des thermocouples.* 87
Figure V-3. *Résistivité du tungstène suivant sa température.* 88
Figure V-4. *Évolution de la température expérimentale au centre du substrat pour les cinq puissances de chauffage considérées.* 90
Figure V-5. *Évolution de la température expérimentale des filaments des lampes pour les cinq puissances de chauffage considérées.* 91
Figure V-6. *Évolution de la variation de la température expérimentale au centre du substrat pour les cinq puissances de chauffage considérées.* 92
Figure V-7. *Évolution de la variation de la température expérimentale des filaments des lampes pour les cinq puissances de chauffage considérées.* 92
Figure V-8. *Confrontation entre le profil expérimental de la température à 20% de puissance avec ceux des simulations en deux et trois dimensions.* 94
Figure V-9. *Différences relatives entre les températures expérimentales du substrat et celles calculées.* 95
Figure V-10. *Comparaison entre les températures expérimentales des filaments et celles dans les calculs.* 96
Figure V-11. *Relation entre la puissance appliquée aux lampes et la température expérimentale et simulée au centre du substrat.* 98
Figure V-12. *Températures des filaments expérimentales et simulées confrontées aux données du constructeur.* 100

Figure VI-1. *Profils de température du substrat (en haut) et du hublot (en bas).* 106
Figure VI-2. *Les quatre points de relevé de la température.* 107
Figure VI-3. *Écarts de température centre-bord suivant la puissance.* 108
Figure VI-4. *Température au centre du hublot avec et sans substrat.* 109
Figure VI-5. *Températures au centre du hublot suivant la puissance pour différentes propriétés radiatives du substrat.* 111
Figure VI-6. *Températures au centre du substrat suivant la puissance pour différentes propriétés radiatives du substrat.* 111
Figure VI-7**.** *Comparaison entre la température au centre du substrat avec et sans hublot.* 113
Figure VI-8. *Écart de température centre-bord du substrat avec et sans hublot.* 113
Figure VI-9. *Profils de températures du hublot (en haut) et du substrat (en bas) avec une diffusivité thermique élevée (modification) et faible (quartz) pour le hublot.* 116
Figure VI-10. *Écart de température centre-bord du substrat suivant la température au centre de celui-ci avec une diffusivité thermique élevée (modification) et faible (quartz) pour le hublot.* 117

Figure VII-1. *Émissivité et réflectivité du tungstène des filaments des lampes (Palik 1998).* 122
Figure VII-2. *Émissivité spectrale du substrat en silicium (Sato 1967).* 123
Figure VII-3. *Émissivité, réflectivité et coefficient de transmission du substrat de silicium à 1000 K* 123
Figure VII-4. *Émissivité, réflectivité et coefficient de transmission du hublot en quartz (Palik 1998).* 124
Figure VII-5. *Réflectivité et absorptivité des parois du réacteur et du four (Palik 1998).* 125
Figure VII-6. *Dénomination utilisée.* 128
Figure VII-7. *Explication de la forme des profils de température du substrat et du hublot en régime permanent.* 131
Figure VII-8. *Première idée pour améliorer l'uniformité de la température du substrat.* 132
Figure VII-9. *Deuxième idée pour améliorer l'uniformité de la température du substrat.* 133
Figure VII-10. *Réflexion des rayons émis par le bord du substrat.* 134
Figure VII-11. *Comparaison entre les ordres de grandeurs des flux.* 135

Figure VIII-1. *Propriété radiative souhaitée au niveau de la face inférieure du hublot.* 140
Figure VIII-2. *Les deux configurations pour la propriété radiative souhaitée.* 141
Figure VIII-3. *Température au centre du hublot avec et sans le filtre sur toute la surface.* . 142
Figure VIII-4. *Température au centre du substrat avec et sans le filtre sur toute la surface.* 142
Figure VIII-5. *Écart de température centre-bord du substrat suivant sa température au centre avec et sans le filtre sur toute la surface.* 143
Figure VIII-6. *Comparaison des profils de température avec et sans le filtre en couronne.* 145
Figure VIII-7. *Écart de température centre-bord du substrat avec et sans le filtre en couronne.* 146
Figure VIII-8. *Écart de température centre-bord du substrat suivant sa température au centre avec les deux configurations du filtre et sans celui-ci.* 147
Figure VIII-9. *Modification de la réflectivité au-delà de 2,6 µm.* 148
Figure VIII-10. *Applications typiques des empilements de couches minces (MacLeod 2001).* 149
Figure VIII-11. *Deux exemples d'applications : traitement antireflet et propriété athermique.* 149
Figure VIII-12. *Exemple de propriétés optiques d'une couche mince d'oxyde transparent conducteur.* 150

Index des principaux auteurs cités

Azzam, R.M.A.

Balakrishnan, K.S.

Bashara, N.M.

Borisenko, V.E.

Bouteville, A.

Caratini, Y.

CFD Research Corporation

Chang, P.C.

Chao C.K.,

Dassau, E.

Doering, R.

Edgar, T.F.

Habuka, H.

Hesketh, P.J.

Hwang, S.J.

Kersch, A.

Knutson, K.

Lojek, B.

Malalasekera, W.

Mazumder, S.

Modest, M.F.

Morokoff, W.J.

Niess, J.

Palik, E.D.

Patankar, S.V.

Plévert, L.

Sato, T.

Schafbauer, T.

Timans, P.J.

Versteeg, H.V.

Yoshio, N.

Publications

Procédé thermique rapide (RTP : Rapid Thermal Process)

Logerais, P.O., D. Chapron, A. Bouteville, (2007), *Transient simulations of a Rapid Thermal Processing apparatus*, Journal of Optoelectronics and Advanced Materials, 9 (4), pp. 1082-1086.

Logerais, P.O., M. Girtan, A. Bouteville, (2006), *Influence of the quartz window in a Rapid Thermal Processing apparatus*, Journal of Optoelectronics and Advanced Materials, 8 (1), pp. 139-143.

Logerais, P.O., M. Girtan, A. Bouteville, (2005), *RTLPCVD modelling: Steady-state simulations*, Proceedings - Electrochemical Society, PV 2005-09, pp. 49-56.

M. Girtan, P.O. Logerais, L. Avril, F. Gonzzatti, A. Bouteville, (2005), *Thermal profile evaluation of a silicon wafer in the apparatus for Rapid Thermal Chemical vapour Deposition*, Journal of Optoelectronics and Advanced Materials, 7 (2), pp. 665-670.

Procédé de Spray CVD (Chemical Vapour Deposition) par chauffage infrarouge

Girtan, M., P.O. Logerais, A. Bouteville, (2005), *Study on the possibilities of modelling the physical processes involved in spray CVD*, Proceedings - Electrochemical Society, PV 2005-09, pp. 181-188.

Girtan, M., P.O. Logerais, A. Bouteville, (2006), *Substrate thermal profiles in spray-CVD reactor*, Journal of Optoelectronics and Advanced Materials, 8 (1), pp. 144-147.

=> Consultables sur le site Internet

LPMI : http://www.angers.ensam.fr/recherche/lpmi/epcm/sommaire.htm

Congrès

Internationaux

Visite à l'Université de Pékin dans le cadre du voyage « 100 jeunes scientifiques français en Chine », 23-30 octobre 2006. *Présentation d'un poster sur la validation de la modélisation du système thermique rapide AS-One 150.*

7th International Balkan Workshop on Applied Physics, Constanța, Roumanie, 5-7 juillet 2006. *Communication (lecture session) sur les simulations en régime transitoire d'un système thermique rapide.*

6th International Balkan Workshop on Applied Physics, Constanța, Roumanie, 5-7 juillet 2005. *Communication sur l'influence du hublot de quartz dans un système thermique rapide.*

15th European Conference on Chemical Vapour Deposition, Bochum, Allemagne, 4-9 septembre 2005. *Communication sur les simulations d'un système thermique rapide RTLPCVD (Rapid Thermal Low Pressure Chemical Vapour Deposition).*

7th International Conference on Physics on Advanced Materials, Iaşi, Roumanie, 10-12 juin, 2004. *Poster présenté par M. Girtan sur l'évaluation du profil de température d'un substrat de silicium dans un système thermique rapide RTCVD (Rapid Thermal Chemical Vapour Deposition).*

Nationaux

Colloque SF2M, Angers, 16-17 mars 2005. *Présentation d'un poster sur la modélisation d'un système thermique rapide.*