

---

# 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.

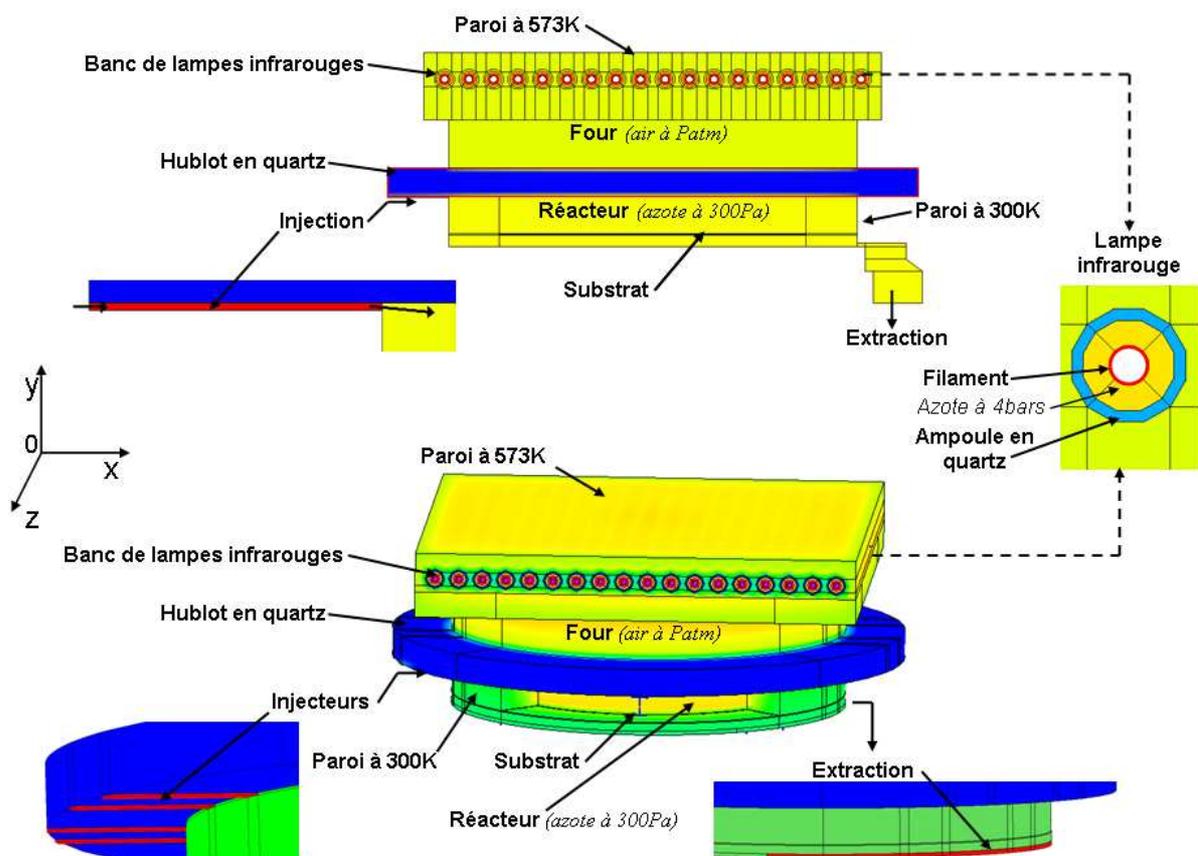


Figure III-1. Modèles de l'AS-One 150 réalisés en deux et trois dimensions.

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 décroît 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  $105^\circ$ , 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.

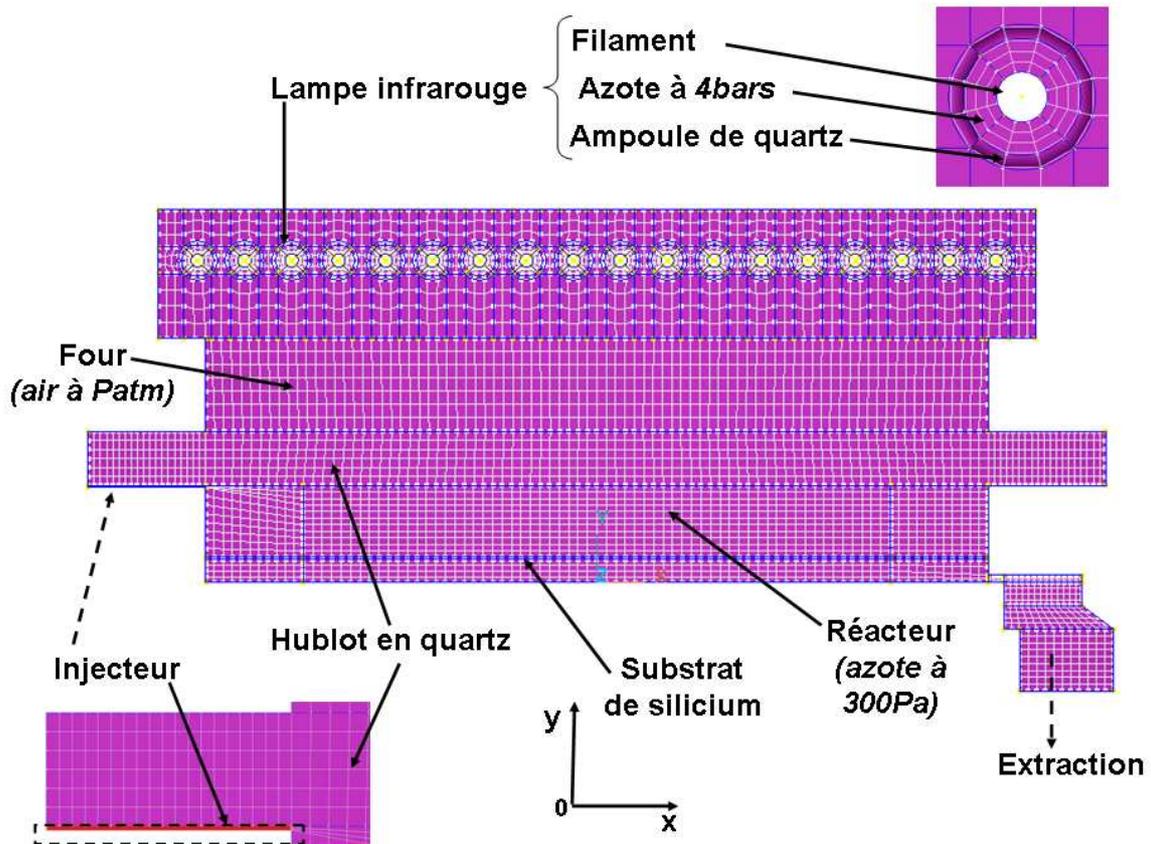


Figure III-2. Géométrie en deux dimensions de l'AS-One 150 avec son maillage.

### 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.

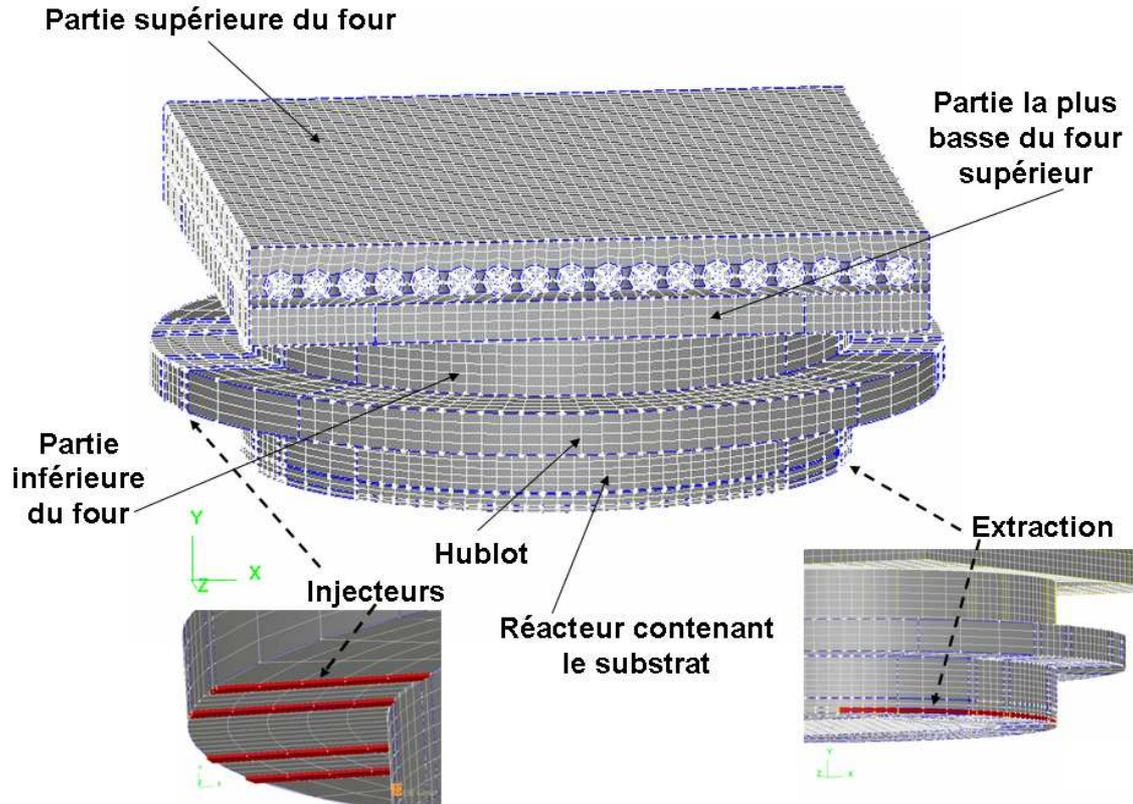


Figure III-3. Géométrie en trois dimensions de l'AS-One 150 avec son maillage et les différentes parties de la construction.

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  $27 \text{ mm}^3$  (cube de 3 mm de côté). Il y a peu de cellules déformées.

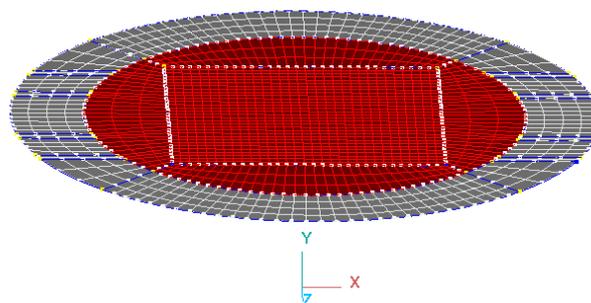


Figure III-4. Forme de base avec anticipation sur le maillage du substrat (en rouge).

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  $105^\circ$  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 translaturée et dupliquée 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.

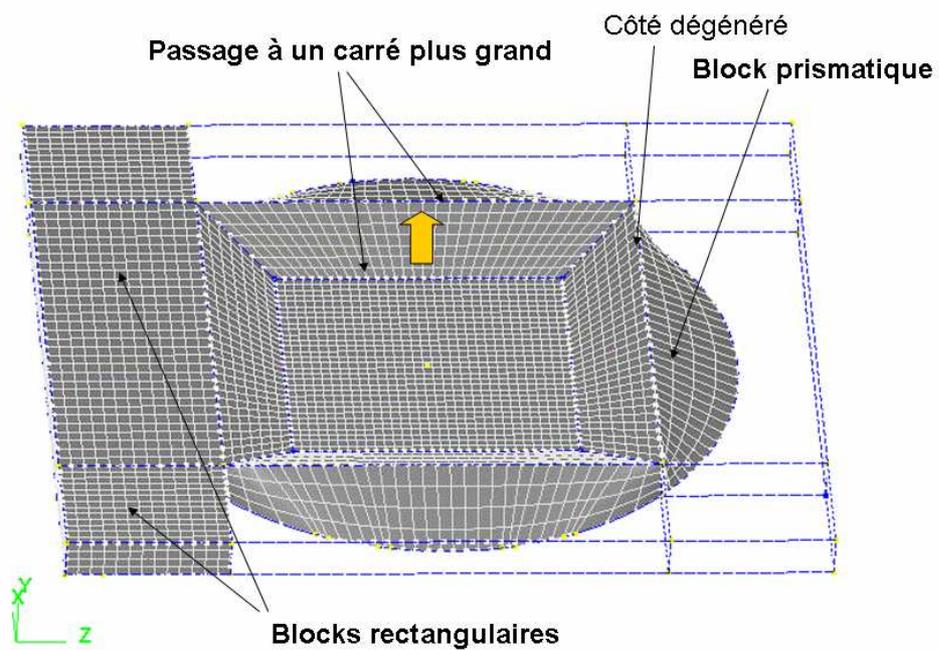


Figure III-5. Jonction entre le four inférieur et supérieur.

### 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 :

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

où

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

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

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

$S_\phi$  est le terme de source ;

$\phi$  correspond à la variable étudiée,  $\rho$  à la densité,  $\vec{V}$  à la vitesse et  $\Gamma$  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**

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

où

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

$\text{div}(\rho \vec{V})$  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 :

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

où

$p$  est la pression statique ;

$\tau_{ij}$  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 :

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

où

$\mu$  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  $\rho$ , de la viscosité  $\mu$  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  $9,81 \text{ m.s}^{-2}$ . Elle est orientée suivant l'axe  $y$ .

Composition	État	Masse molaire (en $\text{g.mol}^{-1}$ )	Viscosité cinématique (en $\text{m}^2.\text{s}^{-1}$ )	Pression (en $\text{N.m}^{-2}$ )
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 <sup>-2</sup> )	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 :

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

où

l'enthalpie totale massique est :

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

$i$  est l'énergie interne massique. C'est une variable qui dépend de la densité  $\rho$  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 ;

$\tau_{ij}$  est le tenseur 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  $\rho$  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 $\text{kg.m}^{-3}$ )
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/>.

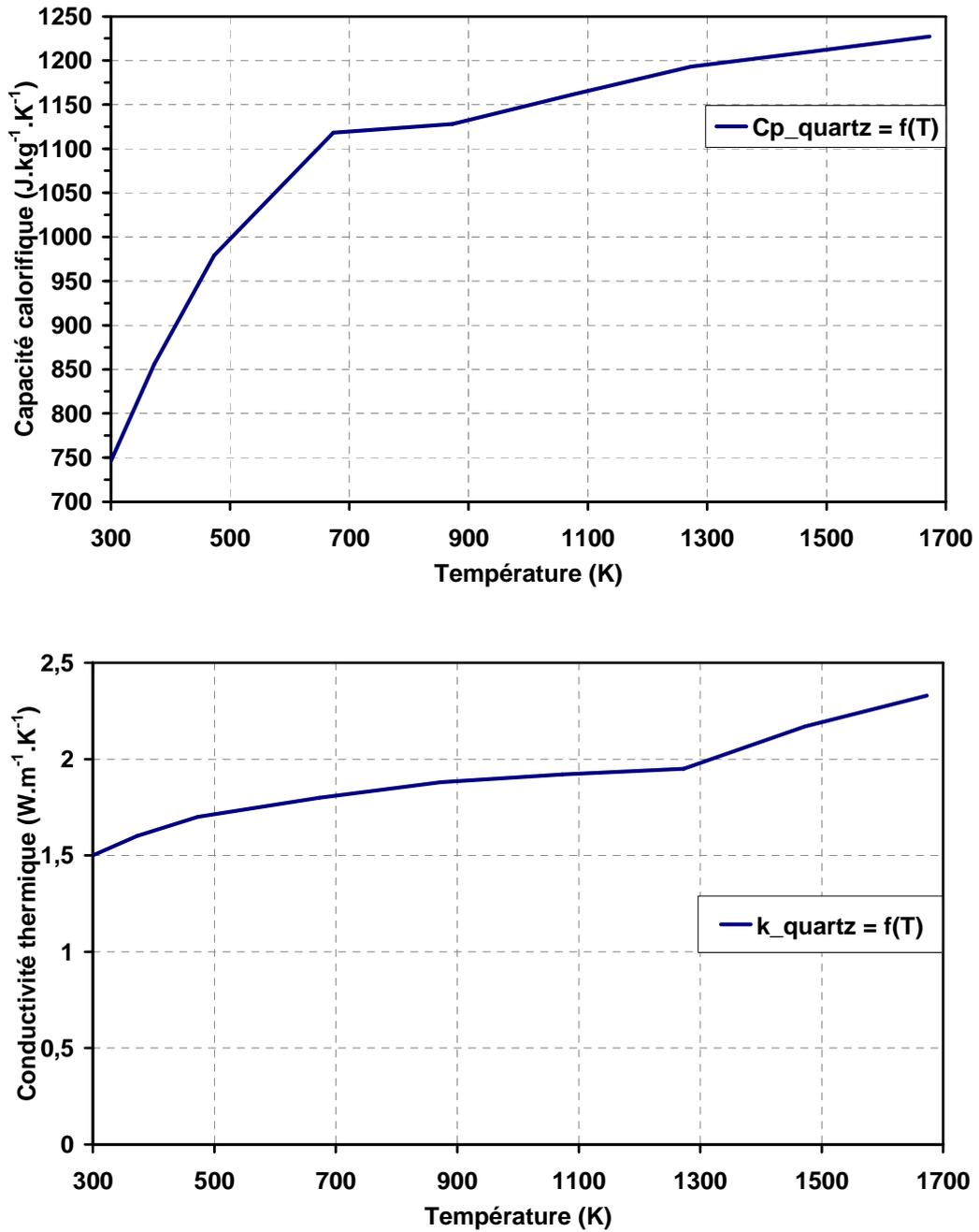


Figure III-6. Capacité calorifique et conductivité thermique du quartz (Sosman 1927).

### 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 :

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

où

$\Omega$  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  $\Omega$  ;

$\kappa$  et  $\sigma$  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  $\Omega'$  à la direction de sortie  $\Omega$  ;

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

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

$\kappa I_b(r)$  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.

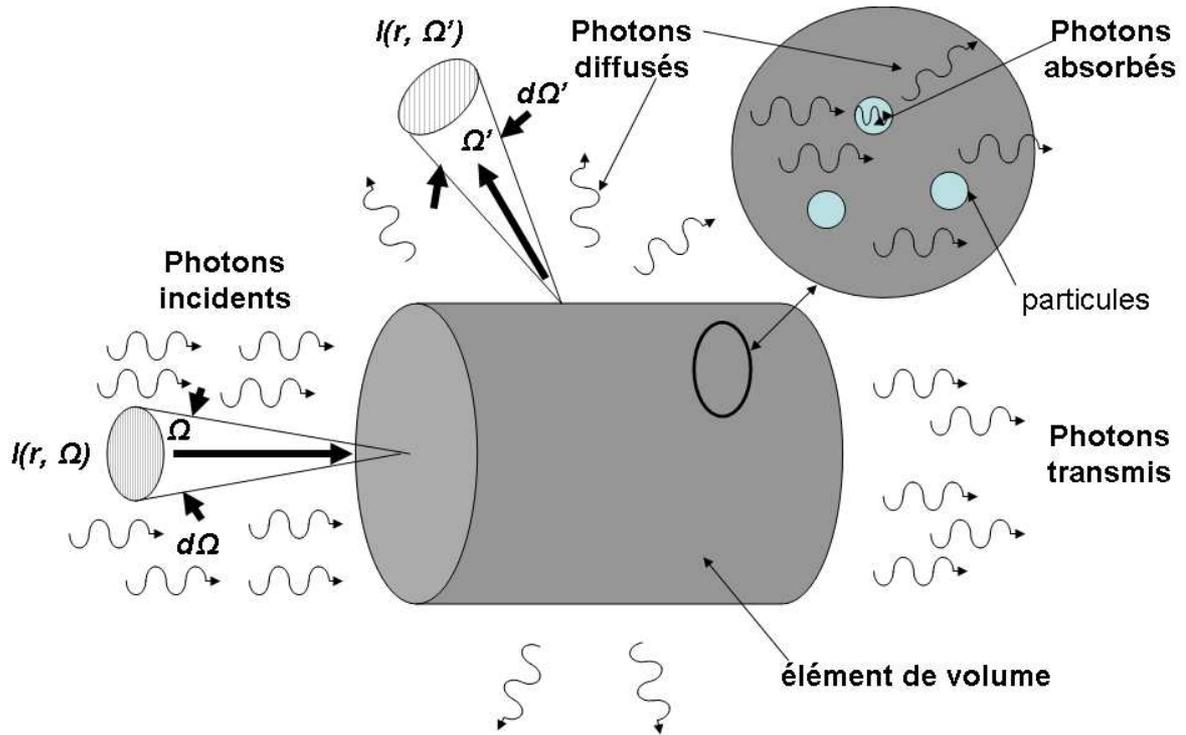


Figure III-7. Transfert de chaleur par rayonnement pour un élément de solide qui absorbe et diffuse.

À la surface, on a pour l'intensité :

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

avec

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

$\varepsilon$  est l'émissivité de la surface ;

$\rho$  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 « patches ». Le flux de chaleur radiatif pour un patch  $i$  est le bilan des rayonnements incidents provenant de tous les autres patches  $j$  et de sa propre émission. La **solution discrète** a alors pour expression :

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

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 ;

$\delta_{ij}$  est le symbole de Kronecker ;

$\varepsilon_j$  est l'émissivité du patch  $j$  ;

$\sigma$  est la constante de Stefan-Boltzmann qui vaut  $5,669 \cdot 10^{-8} \text{ W} \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{K}^{-4}$  ;

$T_j$  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.

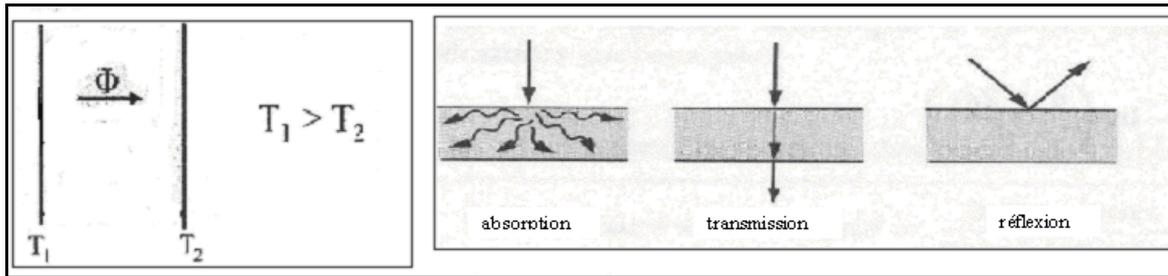


Figure III-8. Flux radiatif (à gauche) et les trois processus relatifs au rayonnement (à droite).

Chacun de ces événements va dépendre de plusieurs facteurs : **la longueur d'onde du rayon, la direction de propagation du rayon, l'orientation des patches 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**  $\lambda$  du rayonnement incident et s'exprime alors comme suit :

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

où

$n_\lambda$  est l'indice de réfraction ;

$k_\lambda$  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  $n_\lambda$  et l'indice d'absorption  $k_\lambda$ , la courbe de tendance de forme polynomiale ayant la forme suivante peut être considérée :

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

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

où

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

$\theta$  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 transmittivité 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 McMahan
- 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  $\lambda$ , notée  $\alpha_\lambda$ , est constante dans tout le matériau, le coefficient de transmission  $\tau$  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  $\alpha_\lambda$  est liée au coefficient d'extinction  $k_\lambda$  par la relation II-14.

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

avec

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

- 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  $\theta_1$  et l'angle de réfraction  $\theta_2$  pour un rayon incident réfracté lors de son passage du milieu diélectrique d'indice de réfraction  $n_\lambda$  à celui d'indice de réfraction  $n'_\lambda$  :

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

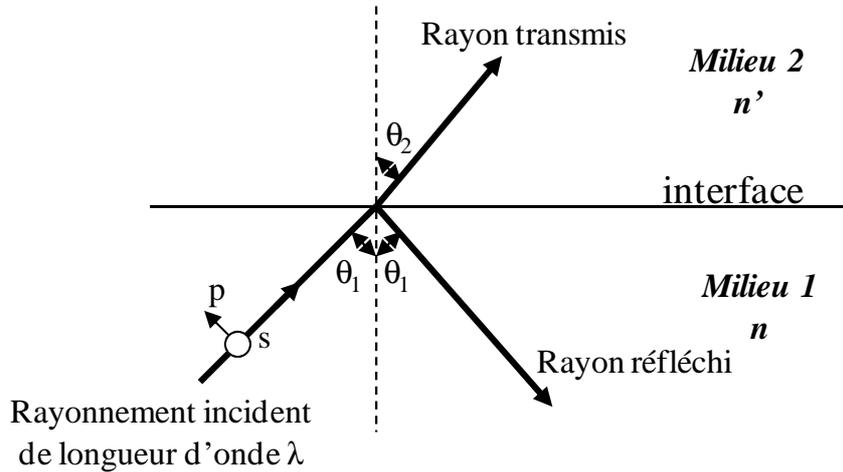


Figure III-9. Réfraction et réflexion d'un rayon incident à l'interface entre deux milieux d'indices différents.

**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  $\rho$  à la surface est alors :

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

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 réflectivité  $\rho$  et du coefficient de transmission  $\tau$  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) :

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

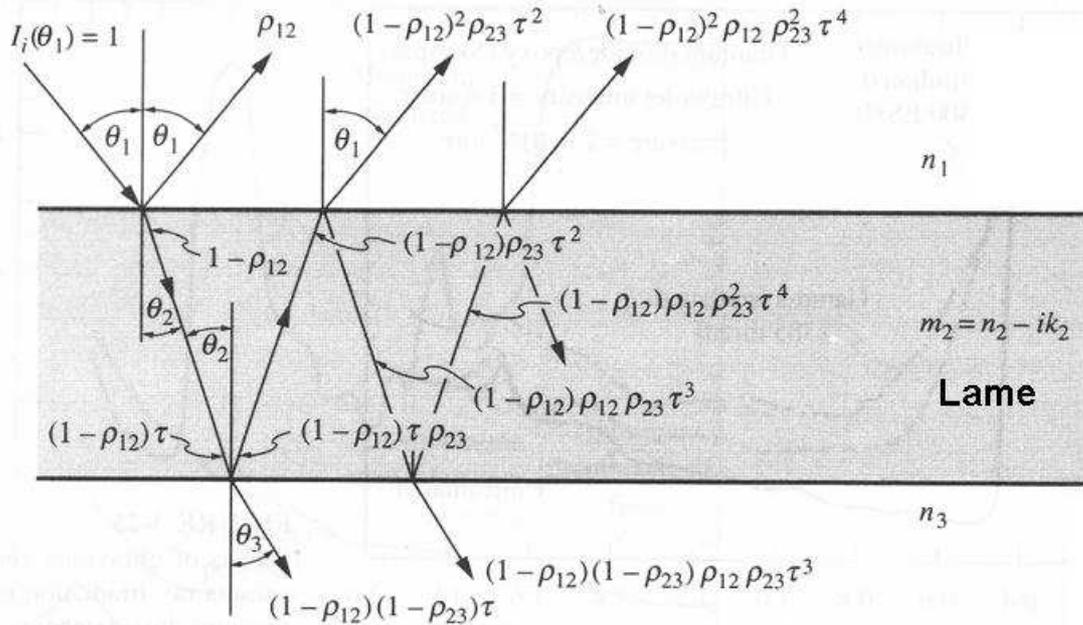


Figure III-10. Réflectivité et coefficient de transmission d'une lame semi-transparente.

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

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

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

$$T_{lame} = (1 - \rho_{12})(1 - \rho_{23})\tau [1 + \rho_{12} \rho_{23} \tau^2 + (\rho_{12} \rho_{23} \tau^2)^2 + \dots] \quad (III-19)$$

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

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

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

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

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 :

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

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

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

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  $\lambda$  considérée (expression III-27) :

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

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

#### 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 :

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

#### 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  $\alpha_{\lambda}$ , tend vers 0 :

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

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

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

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  $\lambda$  donnée :

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

### 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.

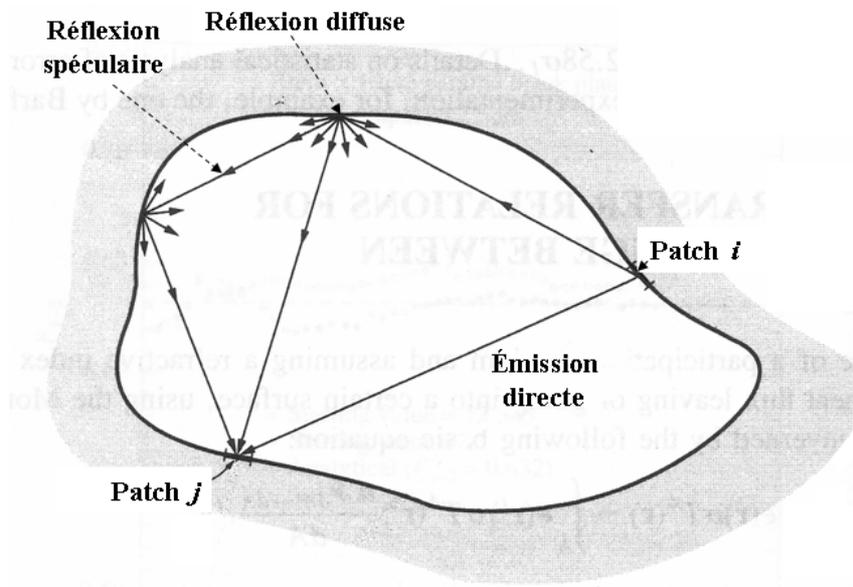


Figure III-11. Exemple de trajets pour les paquets de photons.

Les surfaces de ce système sont divisées en **patches**. 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 patches  $j$  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 :

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

où  $\varepsilon_i$  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 :

$$F_{i \rightarrow j} = \left( \frac{N_{ij}}{N_i} \right)_{N_i \gg 1} \quad (\text{III-33})$$

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  $\lambda$ . La probabilité pour qu'un paquet de photons ait une longueur d'onde entre  $0$  et  $\lambda$  est donnée par **la fonction de distribution cumulée** :

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

où

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

$E_\lambda$  est le pouvoir émissif suivant la longueur d'onde  $\lambda$ .

La fonction de distribution cumulée  $R_\lambda$  varie entre 0 et 1. Elle correspond à une distribution normalisée. De ce fait, générer de manière aléatoire  $R_\lambda$  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  $\lambda_0$ . 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 :

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

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

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

- 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  $\theta$  et azimutal  $\psi$ . Les fonctions de distribution cumulées suivant ces angles, respectivement  $R_\theta(\theta)$  et  $R_\psi(\psi)$ , sont inversées :

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

- 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  $\alpha_\lambda$  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  $\rho_\lambda$  vaut  $1 - \alpha_\lambda$ . Il faut générer des nombres aléatoires  $\rho_\lambda$  et les comparer à  $\alpha_\lambda$ . 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-transparentes. 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
<b>Tungstène des filaments des lampes</b>	Diffus Non gris Opaque	Wall Tfilament variable*
<b>Quartz du hublot et des lampes</b>	Diffus Non-gris Semi-transparent	Interface 500K < T < 1000K
<b>Silicium du substrat</b>	Diffus Non-gris Semi-transparent	Interface 300K < T < 1300K
<b>Acier des parois</b>	Diffus Gris Émissivité 0,25	Wall Four : T = 573K Reste des parois : T = 300K
<b>Injection</b>	Diffus Gris Émissivité 1 + Farfield	Inlet T = 300K
<b>Extraction</b>	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 :

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

où

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

$a_p$  est un coefficient ;

$\phi_p$  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 :

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

où

$\phi_p^*$  est la valeur de  $\phi_p$  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  $\Delta t_f$ . Si  $\Delta t_f$  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 patches). 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 patches ;
  - les rayons sont jetés toutes les 400 itérations afin de rafraîchir 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.

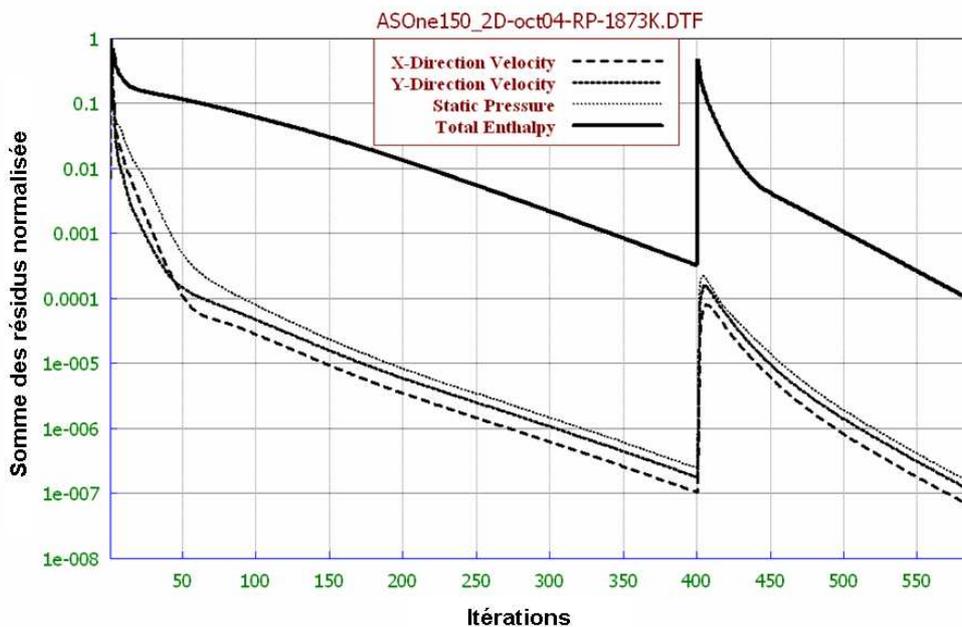


Figure III-12. Suivi de la résolution numérique : visualisation de la somme des résidus normalisée de chaque variable en fonction du nombre d'itérations.

### 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**.

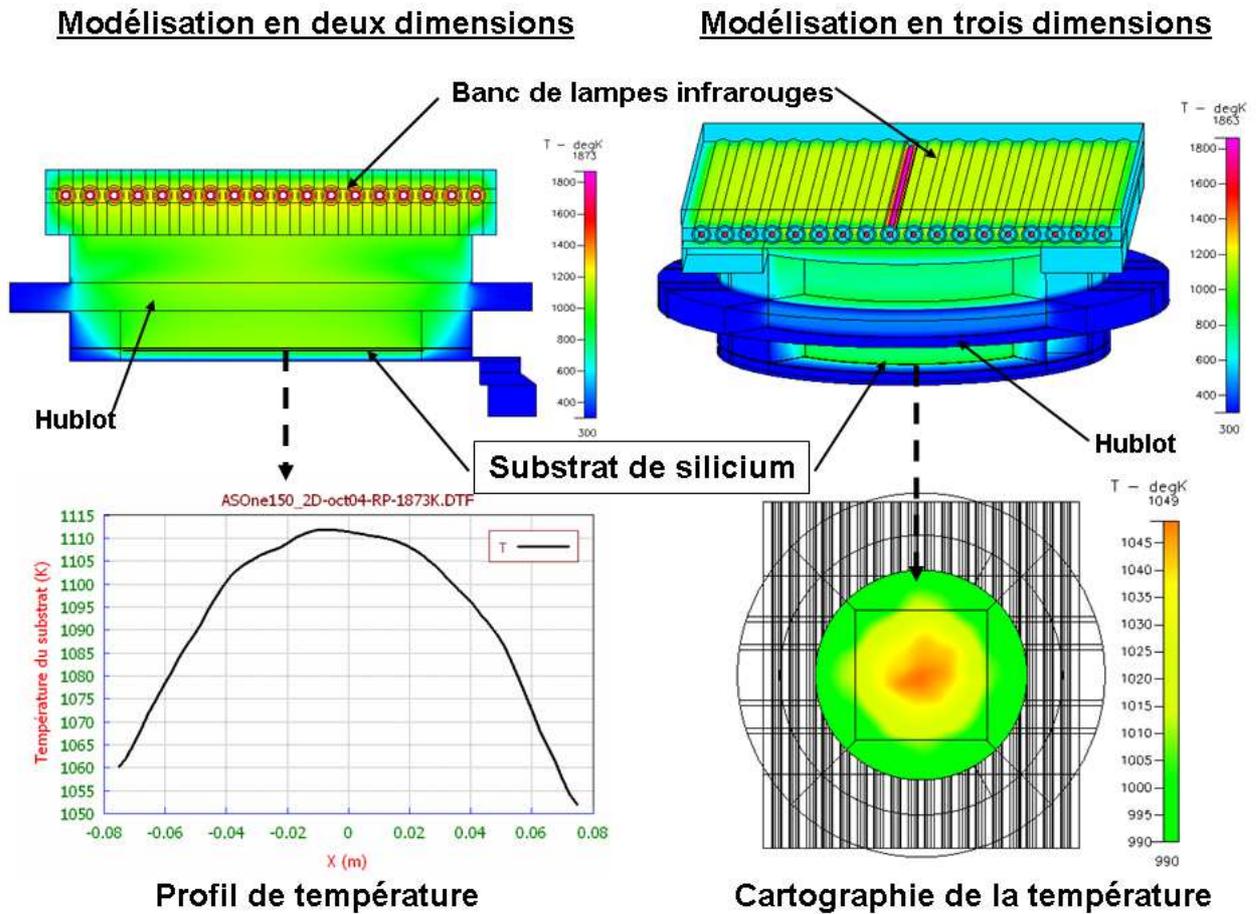


Figure III-13. Visualisation de la température du système et de sa répartition pour le substrat.

### 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 **patches** ;
- 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 patches 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.