

Atelier Dynamique Moléculaire

Réseau Plasmas Froids

Quels échanges avec les modèles « fluides » ?

J.M. Bauchire

28-30 octobre 2015, Orléans



## CONTEXTE – *Processus de simulation numérique*

$$E=mc^2$$
$$F=ma$$

### Problème physique

- Amélioration d'un procédés plasmas
- Compréhension d'un phénomène physico-chimique
- ...

### Hypothèses générales

- Paramètres opératoires (pression, gaz, alimentation électrique...)
- Disponibilités des données de base, complexité des phénomènes...
- Echelles (temps, espace) des processus physico-chimiques en jeu

### Modèle mathématique

- Approche particulière  $\Rightarrow$  Description Lagrangienne (DM)
- Approche continue  $\Rightarrow$  Description Eulérienne (fluide)
- Approches hybrides, couplage multi-échelles...

### Résolution

- Outils d'analyse numérique adaptés
- Contraintes propres à chaque approche  
 $\Rightarrow$  Approches généralement découplées

### Analyse des résultats

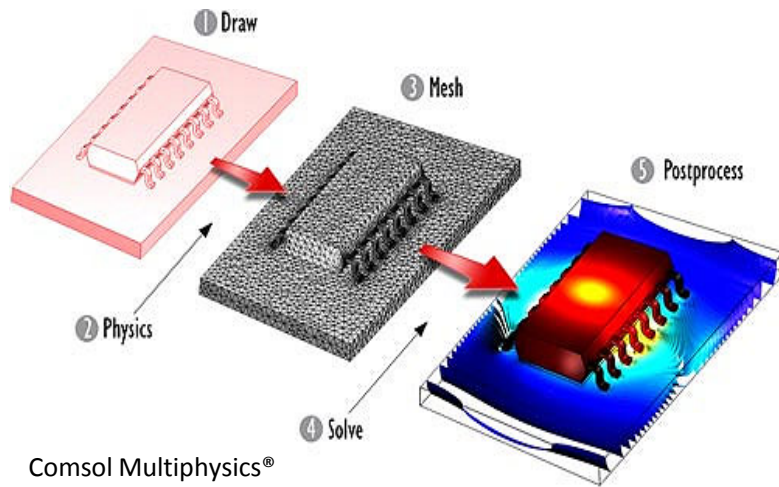
- Itération avec le problème et/ou les hypothèses générales  
 $\Rightarrow$  Quid du couplage entre deux approches différentes

## BASE DE L'APPROCHE FLUIDE – *Le concept de milieu continu*

- On admet que la matière et ses propriétés sont réparties de façon continue dans l'espace considéré (cela n'exclue pas les discontinuités).
- Cette approche permet la représentation des **propriétés macroscopiques**  $\Rightarrow$  Les échelles d'espace et de temps sont très grandes par rapport aux distances inter-particules et aux temps caractéristiques des interactions entre particules.
- Le concept de continuum présente l'avantage d'autoriser les **outils de calculs différentiel et intégral**.
- Concrètement on s'intéresse à une **particule fluide**, i.e. un volume de l'espace, suffisamment :
  - grand pour contenir un très grand nombre de particules,
  - petit pour définir une valeur locale et un volume infinitésimal pour justifier le calcul différentiel et intégral.
- Par exemple :
  - dans les conditions standards, le lpm est de l'ordre de  $10^{-9}$  m, et un volume de  $1 \text{ mm}^3$  d'air contient environ  $2.7 \times 10^{16}$  molécules.
  - la valeur locale macroscopique de la vitesse sera celle du centre de masse des  $N$  particules dans le volume considéré.

## SIMULATION FLUIDE – *Processus de base*

- Ces modèles sont résolus dans un domaine de calcul représentatif du dispositif utilisé.
- Ils nécessitent :
  - la connaissances de données de bases (coefficients de transport, taux de réaction...) en volume
  - des conditions physiques aux limites du domaine de calcul,
  - voire également d'un condition initiale.



- Ils présentent l'avantage :
  - de renseigner sur des volumes plus grand (/DM),
  - d'avoir des temps calculs réduits (/MC),
  - d'obtenir des résultats plus facilement « validables » par l'expérience (T, V...).
- Certains phénomènes « microscopiques » restent difficiles à modéliser, l'hypothèse de continuité n'est pas toujours vérifiée dans les plasmas basse-pression.

## EXEMPLES DE MODELES FLUIDES DANS UN PLASMA

(1) *Mass equation:*

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{V}) = 0. \quad (1)$$

(2) *Momentum equation:*

$$\frac{\partial(\rho v_i)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho v_i \vec{V}) = \nabla \cdot (\eta \nabla v_i) - \frac{\partial p}{\partial x_i} + (\vec{J} \times \vec{B})_i. \quad (2)$$

(3) *Energy equation:*

$$\frac{\partial(\rho H)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho H \vec{V}) = \nabla \cdot \left( \frac{\lambda}{c_p} \nabla H \right) + \sigma |E|^2 - q_{\text{rad}} + q_{\eta}. \quad (3)$$

(4) *Equation of state:*

$$\rho = \rho(p, T). \quad (4)$$

(5) *The potential vector equations to calculate the electromagnetic field. Potential equation:*

$$\vec{B} = \nabla \times \vec{A}, \quad (5)$$

$$\vec{E} = -\nabla \Phi, \quad (6)$$

$$\nabla^2 \vec{A} = -\mu \vec{J}, \quad (7)$$

$$\nabla \cdot (\sigma \nabla \Phi) = 0. \quad (8)$$

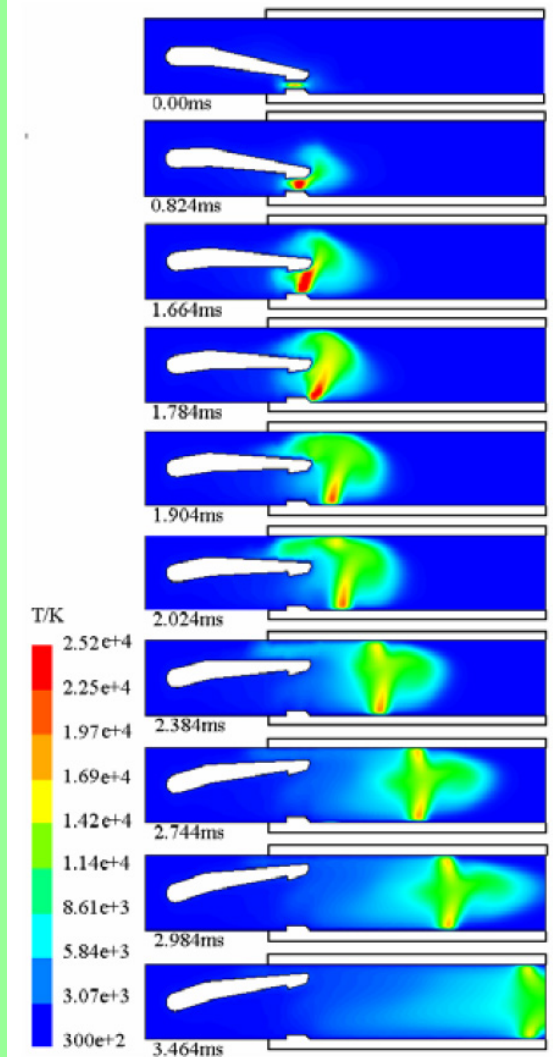
*Constitutive relationships:*

$$\vec{J} = \sigma \vec{E}, \quad (9)$$

$$\vec{B} = \mu \vec{H}. \quad (10)$$

### Simulation d'un arc dans un disjoncteur

- Pression atmosphérique
- Distance caractéristique : cm
- Temps caractéristique : ms
- Hypothèses simplificatrices
  - Déplacement des pieds d'arc
  - Absence de vapeurs métalliques



Température en fonction du temps dans le plan x-y plane (z = 0)



## EXEMPLES DE MODELES FLUIDES DANS UN PLASMA

$$\frac{\partial n_s}{\partial t} + \nabla \cdot \vec{\Gamma}_s = S, \quad (1a)$$

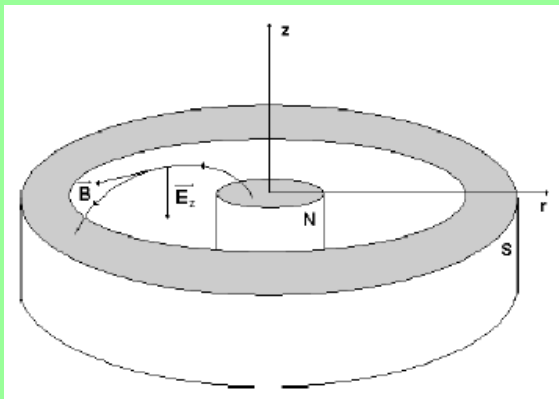
$$m_s n_s \left[ \frac{\partial \vec{v}_s}{\partial t} + (\vec{v}_s \cdot \nabla) \vec{v}_s \right] = q_s n_s (\vec{E} + \vec{v}_s \times \vec{B}) - \nabla \vec{P}_s - m_s n_s f_{ms} \vec{v}_s \left( 1 + \frac{n_e f_{iz}}{n_s f_{ms}} \right), \quad (1b)$$

$$\frac{\partial (n_e \epsilon_e)}{\partial t} + \nabla \cdot \vec{\Gamma}_{ee} = -\vec{\Gamma}_e \cdot \vec{E} - \theta_e n_e, \quad (1c)$$

The electric field and plasma potential are given by the Poisson equation:

$$\Delta V = -\frac{e}{\epsilon_0} (n_i - n_e), \quad (2)$$

$$\vec{E} = -\nabla V. \quad (3)$$

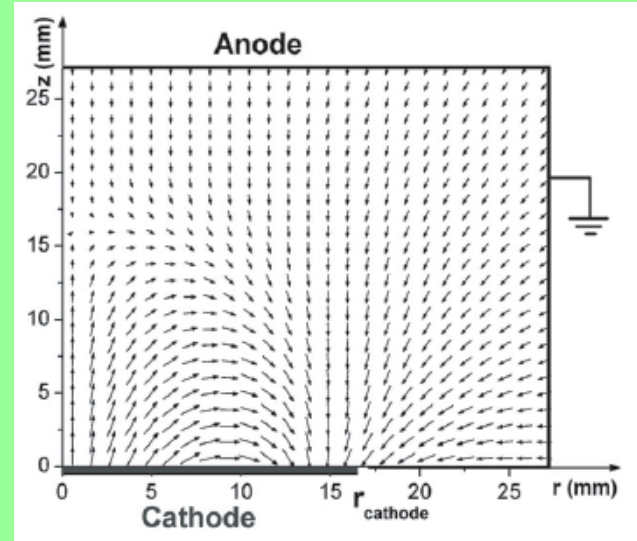


### Modélisation d'une décharge magnétron DC dans l'argon

- Pression : 10 mTorr
- Distance caractéristique : mm
- Temps caractéristique : stationnaire

### Hypothèses simplificatrices

- Distribution maxwellienne
- Termes d'inertie
- Influence du champ magnétique



Géométrie du réacteur et champ magnétique

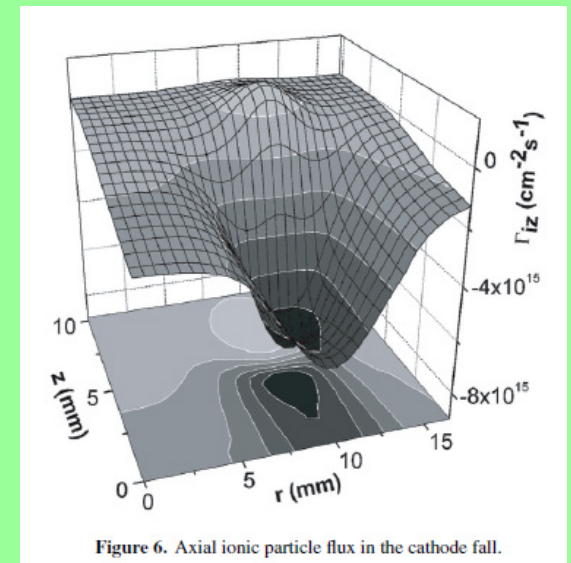


Figure 6. Axial ionic particle flux in the cathode fall.

Flux axial ionique dans la zone de chute cathodique

## QUELS LIENS AVEC LA DYNAMIQUE MOLECULAIRE ?

- Les deux approches sont complémentaires dans les résultats.
- Chaque approche étant basée sur des hypothèses simplificatrices, c'est généralement dans l'amélioration de ces hypothèses que les deux approches peuvent s'enrichir.
- Ces hypothèses portent souvent sur les conditions aux limites, les conditions initiales de calcul, et les propriétés en volume.
- Quelques exemples :
  - Intervention de T. Itina
  - DM→F : Condition de formation et nature de fumées en volume dans des conditions sévères (fortes températures, forts gradients..) dans les plasmas d'arc
  - DM→F : Quid des gaines dans les plasmas thermiques
  - DM→F : Taux d'érosion, composition et propriétés de la matière pulvérisée
  - F→DM : Densité, énergie, vitesses des espèces proche cible ou substrat dans le cas du dépôt magnétron
- Un rapprochement des communautés scientifiques et une meilleure connaissance des méthodes complémentaires devraient pouvoir faire émerger de nouvelles idées et lever certains verrous ⇒ Approche multi-échelle.