

UNIVERSITÉ DE SHERBROOKE  
Faculté de génie  
Département de génie mécanique

# INJECTEUR OPTIMISÉ POUR L'ÉPITAXIE PAR JET CHIMIQUE

Mémoire de maîtrise  
Spécialité : génie mécanique

Philippe-Olivier PROVOST

Directeur : Richard ARÈS



# RÉSUMÉ

L'épitaxie par jet chimique (ÉJC) est une méthode de fabrication de semi-conducteur qui permet d'amener à un volume de production des matériaux de pointes qui sont normalement limités aux réacteurs d'épitaxie par jet moléculaire (ÉJM). L'un des aspects à améliorer des réacteurs ÉJC est le faible pourcentage de gaz injecté, autour de 5 %[1], qui atteint le substrat afin de participer à la croissance du semi-conducteur. Mais comment améliorer l'efficacité d'injection des gaz de ces réacteurs? Tout d'abord, il a été possible d'adapter un outil de modélisation de performances d'injecteur afin de développer un nouveau concept. Cet outil a été validé par un prototype simplifié à l'intérieur d'une chambre d'essai équipée d'instruments de caractérisation. Par la suite, il y a eu la conception d'un injecteur optimisé, la conception d'un système d'assemblage, la conception d'un système de gestion de température et finalement, la validation expérimentale de tous les systèmes. Avec des efficacités d'injection d'environ 29 % pour les réactifs du groupe III et de 37 % pour le groupe V, ce projet permet de réaliser un réacteur améliorant l'efficacité d'injection, le taux de croissance, les coûts de production et diminuant les rejets chimiques. La non-uniformité d'injection est pour sa part en dessous des objectifs fixés avec 13 % pour le groupe III et de 24 % pour le groupe V. L'efficacité d'injection est définie comme étant le pourcentage de molécule injectée atteignant directement le substrat. La non-uniformité est définie comme étant le ratio entre l'écart-type du flux de gaz sur le substrat et l'intensité la plus faible atteignant celui-ci. Ce projet a permis de valider ou d'écarter plusieurs hypothèses initiales permettant ainsi d'améliorer les outils de simulations et de conceptions d'injection du laboratoire. La croissance sans rotation s'est avérée possible en atteignant des performances similaires à celles obtenues avec rotation. Pour ce qui est de la gestion de la température, les résultats étaient similaires aux simulations. Cependant, les températures des parois n'ont pu respecter les objectifs, car la température de croissance a été sous-évaluée. Finalement, ce projet, par le succès du nouveau réacteur LÉA, pourra influencer l'avenir de l'industrie de fabrication dans le domaine du vide, des semi-conducteurs et des matériaux réfractaires au Québec.

**Mots-clés :** Épitaxie par jet chimique, Croissance de semi-conducteur, Technologie sous vide, Injection de gaz, Dynamique des gaz raréfiés, Simulation numérique



# REMERCIEMENTS

Tout d'abord, je tiens à remercier tout le groupe du laboratoire LÉA de l'Université de Sherbrooke et de chez Osemi Canada, pour votre collaboration à l'élaboration de ce mémoire. Plus précisément, je tiens à exprimer ma reconnaissance à :

- Richard Arès, pour m'avoir donné la chance de travailler sur ce projet, ses nombreux conseils et son support au long de toutes ces années ;

- Christian Dubuc, pour sa disponibilité et ces réponses à mes nombreuses questions ;

- Hubert Pelletier, pour le soutien, l'accueil et la belle complicité développée pendant ces 4 dernières années;

Je remercie également le Fonds québécois de la recherche sur la nature et les technologies et le Conseil de recherches en sciences naturelles et en génie du Canada pour le soutien financier apporté à ce projet.



# TABLE DES MATIÈRES

RÉSUMÉ.....	i
REMERCIEMENTS.....	iii
LISTE DES FIGURES.....	vii
LISTE DES TABLEAUX.....	viii
CHAPITRE 1 INTRODUCTION.....	1
1.1 Laboratoire d'Épitaxie Avancée .....	1
1.2 L'Épitaxie et ses produits .....	1
1.3 Les objectifs du projet .....	3
CHAPITRE 2 ÉTAT DE L'ART.....	5
2.1 Le flux moléculaire et son modèle numérique.....	5
2.2 L'influence de l'efficacité sur le procédé.....	7
2.3 La conductance du circuit d'injection .....	7
2.4 Les échanges de chaleur .....	8
2.5 Les exemples d'injecteur d'ÉJC et de MOCVD.....	10
CHAPITRE 3 CONCEPTION DE LA FORME .....	15
3.1 Méthodologie .....	15
3.2 Cahier des charges.....	17
3.3 Concept de base de la forme de l'injecteur.....	19
3.4 Modèle numérique de simulation d'injection .....	20
3.4.1 Retour sur la théorie.....	21
3.4.2 Aperçu du modèle <i>Matlab</i> .....	21
3.4.3 Hypothèses .....	22
3.4.4 Définition de la forme des parois d'un injecteur .....	22
3.4.5 Définition du maillage .....	23
3.4.6 Paramètres de sorties d'une simulation.....	24
3.4.7 Conception et fabrication de l'injecteur préliminaire .....	24
3.4.8 Résultats et discussion de l'injecteur préliminaire .....	26
3.5 Optimisation et forme finale de l'injecteur.....	29
CHAPITRE 4 CONCEPTION DU SYSTÈME DE GESTION DE TEMPÉRATURE .....	33
4.1 Retour sur la théorie .....	34
4.2 Méthodologie .....	37
4.3 Cahier des charges.....	38
4.4 Concept de base du système de refroidissement.....	39
4.5 Modèle analytique .....	40
4.5.1 Facteur de forme .....	40
4.5.2 Calcul de la puissance transmise aux buses .....	41
4.5.3 Équilibre des parois .....	41
4.6 Modèle numérique .....	43
4.6.1 Modèles 3D de l'injecteur et du susceptible .....	44
4.6.2 Hypothèses .....	44
4.6.3 Paramètres du maillage .....	45
4.6.4 Définition des chargements et des conditions limites.....	45
4.6.5 Paramètres d'analyse .....	46
4.6.6 Solutions recherchées.....	46

4.7	Résultats préliminaires des simulations .....	46
4.8	Discussion .....	48
4.9	Optimisation .....	49
CHAPITRE 5 CONCEPTION DE L'ASSEMBLAGE .....		51
5.1	Analyse des besoins et cahier des charges .....	51
5.2	Concept de l'assemblage .....	52
5.2.1	La base de l'injecteur .....	52
5.2.2	La bobine de refroidissement .....	53
5.2.3	Les parois de l'injecteur .....	55
CHAPITRE 6 MÉTHODE DE CARACTÉRISATION DES RÉSULTATS .....		57
6.1	Validation de l'efficacité .....	57
6.2	Validation de l'uniformité .....	59
6.3	Validation de la température .....	61
CHAPITRE 7 RÉSULTATS ET DISCUSSION .....		63
7.1	Validation de l'assemblage .....	63
7.2	Validation des performances d'injection .....	65
7.2.1	Étude du profil de pression sous l'injecteur à l'aide d'une jauge à pression .....	65
7.2.2	Étude d'uniformité sur couche d'AlN .....	68
7.2.3	Modèle simple pour représenter les paramètres d'influence .....	73
7.2.4	Vérification de la rugosité de surface .....	75
7.2.5	Étude d'efficacité sur couche d'AlN .....	76
7.2.6	Vérification de l'efficacité de dépôt de GaN .....	78
7.2.7	Retour sur le cahier des charges de l'injection .....	80
7.3	Validation de la gestion de la température .....	81
7.3.1	Résultats et comparaison avec les simulations de températures de parois .....	81
7.3.2	Retour sur le cahier des charges .....	83
CHAPITRE 8 CONCLUSION .....		84
8.1	Résumé des travaux réalisés .....	84
8.2	Recommandations .....	85
8.2.1	L'assemblage .....	85
8.2.2	L'injection .....	86
8.2.3	Gestion de la température .....	87
8.2.4	Proposition de concept .....	88
LISTE DES RÉFÉRENCES .....		89
ANNEXE 1 – PLANS DE FABRICATION ABRÉGÉS DE L'INJECTEUR .....		91
ANNEXE 2 – CODE MATLAB .....		95



# LISTE DES FIGURES

Figure 1: échange de flux entre deux éléments respectant la distribution cosinusoidale .....	6
Figure 2: Parcours entre les différentes sources et l'injection .....	8
Figure 3: L'injecteur à haute efficacité refroidi à l'eau de Weyburne [1] .....	11
Figure 4: Représentation schématique du réacteur de Chinoy [5].....	12
Figure 5: Distribution du flux angulaire de sortie d'un injecteur conique pour 2 intensités de flux[6].....	13
Figure 6 : Schéma d'injecteur classique .....	19
Figure 7: Concept de base de la géométrie de l'injecteur.....	20
Figure 8: Schéma des dimensions de l'injecteur à définir dans le modèle <i>Matlab</i> .....	23
Figure 9: Exemple de maillage de paroi d'injecteur à l'aide du programme <i>Matlab</i> .....	23
Figure 10: Vue de coupe de l'injecteur test .....	25
Figure 11: Aperçu des composantes de la chambre sous vide expérimentale .....	26
Figure 12: Intensité relative du flux selon la rotation et la position radiale .....	27
Figure 13: Comparaison expérimentale/simulation du profil de l'intensité du flux .....	28
Figure 14: Profil d'injection simulé de l'injecteur groupe III .....	31
Figure 15: Profil d'injection simulé de l'injecteur groupe V .....	31
Figure 16: Schéma simplifié de la disposition de l'injecteur dans le réacteur.....	34
Figure 17: Conduction à une dimension [11] .....	35
Figure 18: Schéma de facteur de forme [11].....	36
Figure 19: Concept de gestion de la température .....	39
Figure 20: Les trois étapes du modèle analytique .....	40
Figure 21: Schéma de calcul de facteur de forme .....	40
Figure 22 : Bilan d'échange thermique des parois .....	42
Figure 23 : Schéma de l'échange radiatif entre deux cylindres concentriques.....	42
Figure 24: Modèle <i>Solidworks</i> , vue de coupe du modèle <i>Solidworks</i> et modèle <i>Ansys</i> des parois de l'injecteur .....	44
Figure 25: Aperçu du maillage par défaut de l'injecteur.....	45
Figure 26: Aperçu de la pièce brute et de la pièce usinée .....	53
Figure 27: Aperçu du tuyau de refroidissement plié.....	54
Figure 28: Aperçu du tuyau de refroidissement nettoyé et soudé .....	54
Figure 29: Aperçu de l'injecteur fabriqué, assemblé et avec le fini de surface modifié .....	55
Figure 30: Aperçu du montage avec jauge de pression pour flux d'injection de l'injecteur final .....	59
Figure 31: Image MÉB de l'interface de l'échantillon 71A GaN/AlN sur Si .....	60
Figure 32: Aperçu de la position du thermocouple sur la paroi extérieure de l'injecteur .....	62
Figure 33: Vues rapprochées de la sortie et l'entrée de l'injecteur avant son installation dans le réacteur.....	64
Figure 34: Première photo de l'injecteur installé dans le réacteur.....	64
Figure 35: Profils de pression de différentes configurations d'injection d'azote par l'injecteur du groupe V .....	66
Figure 36 : Profils de pression de différentes configurations d'injection d'azote par l'injecteur du groupe III.....	66
Figure 37 : Modèle des paramètres d'influence du 00104 .....	73

Figure 38: Modèle des paramètres d'influence du 00117 .....	73
Figure 39: Modèle des paramètres d'influence du 00303 et du 00310 .....	74
Figure 40: Modèle des paramètres d'influence du 00315 .....	74
Figure 41: Modèle des paramètres d'influence du 00349 .....	74
Figure 42: État de surface de l'échantillon 00104 .....	76
Figure 43: Aperçu du vieillissement des bouts d'injecteurs après deux ans .....	82
Figure 44: Concept de forme de parois améliorées .....	88

## LISTE DES TABLEAUX

Tableau 1 : Procédé de transfert de chaleur par convection et radiation dans les limites du réacteur de P. Chinoy [5] .....	9
Tableau 2: Cahier des charges fonctionnelles de la géométrie de l'injecteur .....	18
Tableau 3: Notes à la conception de la géométrie de l'injecteur .....	18
Tableau 4: Cahier des charges fonctionnelles du système de gestion de température .....	38
Tableau 5: Notes à la conception du système de gestion de température .....	38
Tableau 6: Exemple de chemins thermiques de l'injecteur .....	47
Tableau 7: Résultats des simulations analytiques et numériques pour 4 différentes situations .....	48
Tableau 8: Résultats des simulations avec une émissivité faible sur les buses et élevée sur les parois .....	49
Tableau 9: Cahier des charges fonctionnelles de l'assemblage .....	52
Tableau 10: Notes à la conception de l'assemblage .....	52
Tableau 11: Cahier des charges fonctionnelles de l'assemblage .....	63
Tableau 12: Notes à la conception de l'assemblage .....	63
Tableau 13: (Suite) Notes à la conception de l'assemblage .....	64
Tableau 14: Détails des configurations d'injecteur utilisées pour caractériser .....	65
Tableau 15: Conditions des 6 configurations différentes d'injection .....	69
Tableau 16 : Résultat de croissance des 6 configurations .....	70
Tableau 17: Rugosité RMS au centre des échantillons .....	75
Tableau 18: Exemple de calcul de masse d'aluminium et d'azote déposé sur l'échantillon 00104 .....	77
Tableau 19: Efficacité de dépôt des 6 croissances .....	77
Tableau 20: Détails de la section GaN de la recette de croissance du 00343 .....	79
Tableau 21: Épaisseur de GaN à différents endroits sur la gaufre 00343 .....	79
Tableau 22: Efficacité de dépôt de GaN sur l'échantillon 00343 .....	79
Tableau 23: Résultats face au cahier des charges fonctionnelles de l'injection .....	80
Tableau 24: Résultat par rapport aux notes à la conception de l'injection .....	80
Tableau 25: Température de la paroi extérieure de l'injecteur en fonction des températures de gaufres et des configurations de parois .....	82
Tableau 26: Cahier des charges fonctionnelles du système de gestion de température .....	83
Tableau 27: Notes à la conception du système de gestion de température .....	83

# CHAPITRE 1 INTRODUCTION

Ce chapitre met en contexte la problématique et présente la définition du projet de recherche. Une description du Laboratoire d'Épitaxie Avancée, une section sur l'épitaxie et ses produits et les objectifs du projet sont abordés.

## 1.1 Laboratoire d'Épitaxie Avancée

Afin de diminuer les coûts de production et de gaspillage des gaz réactifs nécessaires à la croissance du semi-conducteur, le Laboratoire d'Épitaxie Avancée (LÉA) du professeur Richard Arès s'attaque à l'amélioration de l'efficacité des réacteurs d'épitaxie à jet chimique (ÉJC). « LÉA s'intéresse à plusieurs aspects de la croissance épitaxiale par la technique d'épitaxie ÉJC. Le programme de recherche explore les limites du processus d'épitaxie afin de développer de nouvelles tactiques de dépôt de couches minces semi-conductrices ». Ce laboratoire de l'Université de Sherbrooke fondé en 2004 a travaillé entre autres sur des développements de procédés de microfabrication pour des composants III-V hybrides sur silice et des dispositifs novateurs d'imagerie médicale. Dernièrement, LÉA est actuellement en partenariat avec l'entreprise Osemi Canada Inc afin de développer un nouveau réacteur d'épitaxie par jet chimique pour croissance de GaN utilisant de nouvelles solutions à ce problème d'injection. Un système de contrôle optimisé, un système d'injection efficace et une gestion des flux gazeux rapide sont des exemples de nouveaux concepts implantés à ce réacteur.

## 1.2 L'Épitaxie et ses produits

Le domaine de l'épitaxie permet actuellement la fabrication de matériaux bruts pour plusieurs produits, tels que les panneaux solaires, l'électronique de puissance ou en hyperfréquence et l'éclairage à haut rendement. Différentes techniques d'épitaxie existent avec leurs forces et faiblesses. Les deux paramètres qui diffèrent entre les techniques sont le type de précurseur utilisé et la pression environnante lors de la réaction. Dans le cas de la

méthode *metalorganic vapor deposition* (MOCVD), la pression d'utilisation est normalement entre 100 mTorr et 300 torr avec un écoulement de précurseur organométallique et de gaz porteur. Cette technique permet d'avoir un taux de croissance très élevé, mais une qualité de couche potentiellement plus faible. Les réacteurs d'épitaxie par jet moléculaire (ÉJM) ont une pression d'utilisation très basse, autour de 1 nTorr avec des sources solides d'éléments purs se sublimant sur le substrat. Cette technique permet de faire des matériaux de hautes qualités, mais à une vitesse deux ordres de grandeur plus lente que le MOCVD. L'épitaxie à jet chimique (ÉJC) a l'avantage de permettre la production de masse de matériaux complexes actuellement limités aux réacteurs ÉJM. L'ÉJC ou communément appelé *chemical beam epitaxy* (CBE) est un procédé qui consiste à chauffer un disque d'un monocristal pur, appelé substrat, à des températures entre 500 et 1000°C dans un réacteur sous vide, puis à injecter différents gaz en même temps sur la surface afin qu'ils puissent réagir ensemble et y déposer une couche mince de matériau (de quelques nanomètres à micromètres d'épaisseur). Lors du dépôt, le paramètre de maille de cette couche s'agencera à celle du substrat. La compatibilité des paramètres de mailles est importante afin de maintenir de faibles contraintes à l'intérieur de la couche[2]. Un aspect important pour la qualité des dispositifs fait à partir de ces semi-conducteurs est l'uniformité d'épaisseur de la couche mince. L'un des paramètres guidant sa vitesse de croissance est le flux de gaz atteignant sa surface. Afin de maintenir une uniformité d'injection sur la surface, les réacteurs actuels doivent sacrifier la majorité des gaz en injectant sur une large plage s'étendant bien au-delà du substrat. Cela s'explique par le fait qu'il est difficile de contrôler le profil d'injection des gaz et qu'en étant loin de la cible, la petite partie qui la touchera est plus uniforme.

L'efficacité de l'injection, soit le pourcentage de gaz injecté atteignant le substrat, tourne autour de 5-10 %[1] pour les réacteurs ÉJC. D'une part, les gaz qui ne touchent pas le disque ne sont pas récupérables et ils nuisent également à la vitesse de croissance du matériau, car ils limitent le débit d'injection en surchargeant les pompes maintenant le vide. De plus, les gaz utilisés sont très dispendieux, rares et toxiques. Le but du projet actuel est d'améliorer l'efficacité d'injection des injecteurs à l'intérieur des réacteurs d'ÉJC afin d'améliorer la rentabilité du réacteur et de diminuer son impact écologique. C'est alors qu'une question se pose : comment améliorer l'efficacité d'injections des gaz des réacteurs par jet chimiques?

La faible efficacité d'injection des réacteurs ÉJC peut s'expliquer par quelques raisons. Tout d'abord, la technologie d'épitaixie par jet chimique est plus récente par rapport aux autres méthodes. Jusqu'à maintenant, l'utilisation principale de cette méthode était la recherche et non la production. Les besoins n'étant pas les mêmes, peu de chercheurs se sont penchés sur le sujet. Par la suite, la dynamique des gaz à très faible pression n'est pas comparable à celle utilisée par les logiciels de modélisation de flux visqueux tels qu'*Ansys* ou *Fluent 3D*. Alors, il n'est pas possible de modéliser un injecteur et de l'optimiser avec les outils communs. C'est pourquoi il y a quelques années, un étudiant de Richard Arès au doctorat, Laurent Isnard, a développé un outil de modélisation d'injecteur pour ce type de flux. Cet outil permet de développer une nouvelle forme d'injecteur qui pourrait atteindre des efficacités supérieures aux performances actuelles. Les travaux actuels valideront d'abord l'outil par un prototype simplifié à l'intérieur d'un réacteur d'essai équipé d'instruments de caractérisation. Par la suite, le projet consistera à concevoir, fabriquer et valider un injecteur optimal destiné à s'implanter à l'intérieur du nouveau réacteur de LÉA.

### 1.3 Les objectifs du projet

L'objectif principal de cette maîtrise est d'améliorer l'efficacité d'injection des gaz sur le substrat. Plus précisément, l'injection des gaz est séparée en deux catégories, soit celle des molécules contenant un élément du groupe III et du groupe V du tableau périodique. Chacune d'entre elles a des besoins différents. Les molécules V sont injectées en grande quantité et l'injection nécessite la plus grande efficacité possible. Pour les molécules du groupe III, la contrainte se situe davantage au niveau de l'uniformité de l'injection pour deux raisons. Ces molécules sont injectées en plus faible quantité et c'est le groupe de gaz qui guide principalement le taux de croissance du matériau. Cependant, le taux de croissance est influencé par plusieurs autres paramètres : la température de surface, le rapport des gaz de groupe V/III et la pression dans le réacteur. Les standards de l'industrie demandent une non-uniformité d'épaisseur de couche d'au plus 2% sur la zone utile de la gaufre. Pour respecter cette contrainte, le flux doit être égal ou plus uniforme à cette valeur pour minimiser les non-uniformités engendrées par les autres paramètres.

L'efficacité d'injection est définie comme étant le pourcentage de molécule injectée atteignant directement le substrat. La non-uniformité est définie comme étant le ratio entre l'écart-type du flux de gaz sur le substrat et l'intensité la plus faible atteignant celui-ci. Les objectifs principaux d'injection pour l'injecteur du groupe III et V sont présentés ci-dessous.

Pour le groupe III

- Augmenter l'efficacité à 10%
- Maintenir une non-uniformité inférieure à 2%

Pour le groupe V

- Augmenter l'efficacité à 20%
- Maintenir une non-uniformité inférieure à 10%

Pour atteindre ces cibles, il est nécessaire de faire deux injecteurs distincts, car les besoins sont différents et il se peut qu'il soit impossible de joindre haute efficacité et haute uniformité. Afin de diminuer au maximum les coûts, un objectif secondaire est d'éliminer le besoin d'une rotation du substrat pour une injection uniforme. Cet élément peut diminuer de 80 000 \$ le coût d'achat du réacteur. Un autre objectif est de développer une gestion efficace de la température de l'injecteur. Celle-ci est très importante, car une température trop élevée peut décomposer les gaz injectés avant qu'ils atteignent la gaufre et nuire à la croissance.

En somme, afin d'améliorer l'efficacité d'injection des réacteurs d'ÉJC, les objectifs de cette maîtrise sont de fabriquer un injecteur pour le nouveau réacteur d'épitaxie du laboratoire LÉA qui permet de faire passer l'efficacité d'injection de 5 % à 10 % pour le groupe III et de 5 % à 20 % pour le groupe V. Le tout en maintenant des non-uniformités maximales de 2 % pour le groupe III et 10 % pour le groupe V.

Ce document présentera le projet en huit sections : un état de l'art de l'injection de gaz dans l'ÉJC, la conception de la forme de l'injecteur, la conception du système de gestion de la température de l'injecteur, la conception de l'assemblage, la méthode de caractérisation des résultats, la présentation des résultats accompagnés d'une discussion, des recommandations et une conclusion.

## CHAPITRE 2      ÉTAT DE L'ART

Peu de travaux ont été effectués sur la modélisation d'injection de gaz pour l'épitaxie par jet chimique. Par contre, plusieurs travaux équivalents ont été effectués sur la méthode *metalorganic vapor deposition* (MOCVD)[1] [3]–[5]. La plupart des conclusions tirées de ces analyses de MOCVD peuvent quand même s'appliquer à l'ÉJC parce que malgré la différence de régime de flux, les problèmes de refroidissement et de conductance se comportent de façon semblable. Ces informations se retrouvent dans cet état de l'art. Celui-ci porte sur cinq sections essentielles à la compréhension du sujet : le flux moléculaire et son modèle numérique, l'influence de l'efficacité d'injection sur le procédé, les échanges de chaleur, la conductance et finalement, des exemples d'injecteurs d'ÉJC et de MOCVD.

### 2.1 Le flux moléculaire et son modèle numérique

Il existe plusieurs types de régimes d'écoulement gazeux[2]. Les éléments différenciant les uns des autres sont la nature du gaz et la densité de gaz se déplaçant dans un environnement, par rapport à sa géométrie. On définit normalement une quantité sans dimension, appelée "nombre de Knudsen" qui est le rapport entre le libre parcours moyen d'une molécule dans le système, par rapport à une distance caractéristique de ses dimensions.

$$Kn = \lambda/L$$

Le régime de flux moléculaire qui nous intéresse dans cette étude est invoqué lorsque  $Kn \gg 1$ , c'est-à-dire dans le régime où la majorité des molécules parviennent à se déplacer dans le volume du système sans avoir de collision avec d'autres molécules. Étant donné la vitesse de déplacement caractéristique qui est substantielle (de l'ordre de 100 m/s), les trajectoires moléculaires peuvent être considérées comme des lignes droites. Les interactions des molécules dans le système se limitent donc aux parois de celui-ci.

Nous ajoutons un élément aux conditions de notre système en considérant qu'une molécule qui atteint une paroi est éventuellement réémise dans une direction aléatoire, totalement indépendante de la direction de son arrivée sur la paroi [2].

Afin de bien représenter ce flux moléculaire dans un modèle numérique, Isnard et al. [6] a posé quelques hypothèses lui permettant de simplifier et de clarifier les limites de son modèle. Ces hypothèses sont présentées au chapitre 3. Ce modèle se base sur une équation d'échange gazeux entre deux éléments assumant la distribution cosinusoidale.

Les équations définissant le flux  $dF_{12}$  entre l'élément source  $dS_1$  et l'élément cible  $dS_2$  sont présentés ci-dessous.

$$dF_{12} = (I_1 dS_1 \cos \theta_1 d\Omega_{12}) / \pi$$

$$d\Omega_{12} = (dS_2 \cos \theta_2) / D^2$$

L'angle solide est représenté par  $d\Omega_{12}$ , l'intensité du flux par  $I_1$ , les angles par  $\theta_1$  et la distance la plus courte entre les éléments par  $D$ . La figure ci-dessous montre les angles en question.

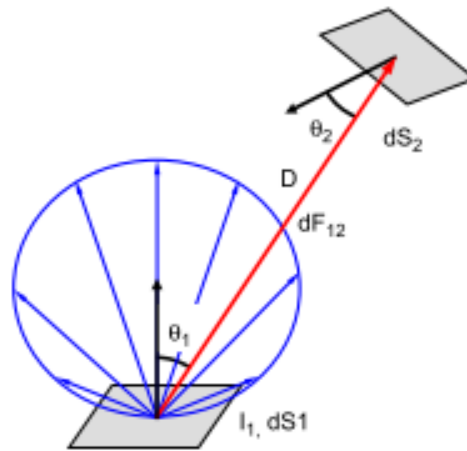


Figure 1: échange de flux entre deux éléments respectant la distribution cosinusoidale



## 2.2 L'influence de l'efficacité sur le procédé

La principale raison d'améliorer l'efficacité est de diminuer le gaspillage des réactifs envoyés directement à l'extérieur du réacteur, sans interaction préalable avec la surface de la gaufre. Cela a un impact économique et environnemental. Cependant, l'efficacité d'injection amène d'autres avantages au procédé. Par exemple, pour une pression à l'intérieur du réacteur équivalente, la vitesse de croissance du semi-conducteur dépend de la quantité de réactifs qui atteint la gaufre. Or, s'il y a plus de molécules qui touchent la gaufre, la croissance a lieu plus rapidement. Donc, l'augmentation de l'efficacité affecte directement le taux de croissance. De plus, pour avoir une vitesse de croissance de matériau équivalente, une efficacité accrue permettra d'effectuer le procédé de croissance en utilisant moins de flux de réactifs, et de diminuer la taille des pompes nécessaires pour maintenir la pression désirée avec une injection efficace, car une plus grande proportion de molécules injectées participera à la croissance.

## 2.3 La conductance du circuit d'injection

Un des aspects à prendre en considération dans la conception d'un injecteur est sa conductance. La conductance représente l'inverse de la résistance ou perte de charge d'une tuyauterie. Comme expliqué dans un article de Benchimol [7], les pertes de pression dans les lignes d'admissions des gaz dépendent principalement de la conductance de celles-ci. Or, dans un système d'épitaxie, plusieurs gaz doivent être injectés en même temps et dans la même ligne. Les gaz sont fournis par une cellule de contrôle et sont dirigés vers un collecteur au travers d'une restriction. La pression des cellules de contrôle est ainsi maintenue à un niveau supérieur à celle du collecteur. Dans un régime de pression très basse, il est possible que certaines molécules du collecteur puissent remonter par la restriction vers la cellule de contrôle, créant un problème de diaphonie. Afin de minimiser ce problème, il est impératif de maintenir une pression de collecteur la plus basse possible. Le schéma de la page suivante présente le parcours entre les sources et l'injection inspiré de l'article de Benchimol [7].

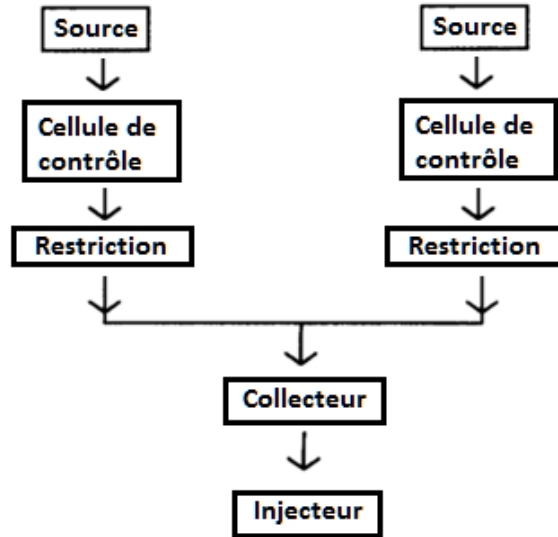


Figure 2: Parcours entre les différentes sources et l'injection

Une façon de diminuer le problème est d'avoir des lignes d'admission avec une conductance toujours croissante jusqu'au réacteur. Ainsi, en ayant un injecteur à faible perte de charge, les gaz auront tendance à se diriger plus vers le réacteur que vers d'autres sources.

## 2.4 Les échanges de chaleur

Sachant qu'il faut être près de la gaufre afin d'avoir une bonne efficacité d'injection des gaz, il est important de prendre en considération l'échange de chaleur entre l'injecteur et la gaufre. Typiquement[8], lors de la croissance de GaN, la gaufre peut atteindre des températures supérieures à 900°C. Cette température va varier en fonction du temps, mais sera maintenue suffisamment longtemps pour amener la température des éléments autour de la gaufre en régime établi. Il est important d'éviter que les réactifs ne se décomposent prématurément avant d'atteindre la gaufre. De ce fait, il faut analyser la température de paroi de l'injecteur. Une température supérieure à 300 °C favorisera la décomposition des réactifs et doit donc être évitée. Des analyses d'échange de chaleur ont été réalisées dans le procédé MOCVD[1] [4] [5] [8]. Les analyses affirment qu'environ 50 % du flux de chaleur transmis au réacteur est sous forme radiative pour un injecteur à 3 cm de la gaufre. Le tableau ci-dessous résume une analyse des différents chemins de pertes de chaleur par la gaufre à 700°C, avec un injecteur à 1 cm de celle-ci avec une pression ambiante de 0,5 atm.

Tableau 1 : Procédé de transfert de chaleur par convection et radiation dans les limites du réacteur de P. Chinoy [5]

Flux (standard l/min)	Puits de chaleur	Flux de chaleur en convection (W)	Flux de chaleur en radiation (W)	Flux total de chaleur (W)
6	Injecteur	89.9	86.6	176.7
	Mur	102.2	164.7	266.9
	Rebord	37.2	46.6	83.8
	Gaz d'échappement	6.4		6.4
	Total	235.7	298.1	533.8

Cependant, dans le réacteur LÉA, la pression lors de la croissance est plutôt de l'ordre de  $10^{-5}$  Torr. Cela équivaut à 5 ordres de grandeur inférieurs par rapport à la pression du réacteur MOCVD analysé. À cette pression, la densité du gaz n'est pas suffisamment élevée pour permettre la convection.

Dans le cas d'un réacteur ÉJC, la proportion est plutôt près de 99 % en radiation et le reste en conduction. Ainsi, l'analyse du transfert de chaleur peut se simplifier à un transfert thermique seulement radiatif. Dans le cas d'une gaufre de 2 pouces, si nous utilisons l'équation d'échange de chaleur par radiation, on peut observer qu'une puissance près de 300 W est envoyée en direction de l'injecteur pour une température de gaufre de 1000 °C. En supposant un injecteur de 10 cm de diamètre avec un facteur de forme de 0,4 par rapport à la gaufre, près de 120 W devra être géré.

Les analyses de la méthode MOCVD ont permis de conclure que l'injecteur se devait d'avoir un refroidissement forcé, car la puissance thermique envoyée à l'injecteur ne peut être enlevée par convection naturelle et conduction. La solution la plus fréquente est un refroidissement à l'eau à l'intérieur des parois de l'injecteur. Ainsi, la circulation d'eau froide permet d'absorber par conduction la majeure partie du flux de chaleur envoyé par la gaufre. De plus, si les parois extérieures du réacteur se maintiennent près de la température de la pièce, un refroidissement par radiation supplémentaire permettra de réduire la température de l'injecteur.

Pour le réacteur ÉJC, le problème sera très similaire. Aucune convection ne pourra refroidir l'injecteur. Or, il sera nécessaire d'avoir une forme permettant de bien retransmettre sa chaleur par radiation tout en ayant un refroidissement supplémentaire à l'eau. Il est toutefois dangereux d'utiliser de l'eau dans un tel procédé. Une fuite d'eau est néfaste pour la croissance et peut endommager plusieurs composantes à l'intérieur du réacteur, en plus de ruiner le vide. Il sera alors important de concevoir un système de refroidissement simple et robuste. Il est également possible de polir les surfaces de l'injecteur afin qu'il reflète la radiation (diminution de l'émissivité). Une analyse de Weyburne et Ahern [1] affirme qu'il est possible de réduire près de 25 % le flux de chaleur en radiation de cette façon, à condition que les parois de l'injecteur ne se couvrent pas de réactifs.

Par ailleurs, il faut concevoir le système qui assurera la symétrie afin d'éviter une mauvaise uniformité de la température au niveau de la gaufre. Une température environnante non uniforme influence l'échange radiatif qui résulte à une variation de la température sur la surface de croissance. Finalement, un des problèmes des injecteurs à haute efficacité en acier inoxydable est la libération de carbone à haute température. Lorsque l'acier est chauffé au-delà d'une certaine température, il libère du carbone qui se dépose dans le semi-conducteur, diminuant ainsi la qualité du matériau.

## 2.5 Les exemples d'injecteur d'ÉJC et de MOCVD

En 1997, l'équipe de Weyburne [1] a développé un injecteur à haute efficacité refroidi à l'eau permettant d'injecter les réactifs à environ 1 cm de la gaufre. Leur réacteur MOCVD permettait de faire croître une vaste gamme de semi-conducteurs III-V. La figure 3 représente un aperçu de leur réacteur.

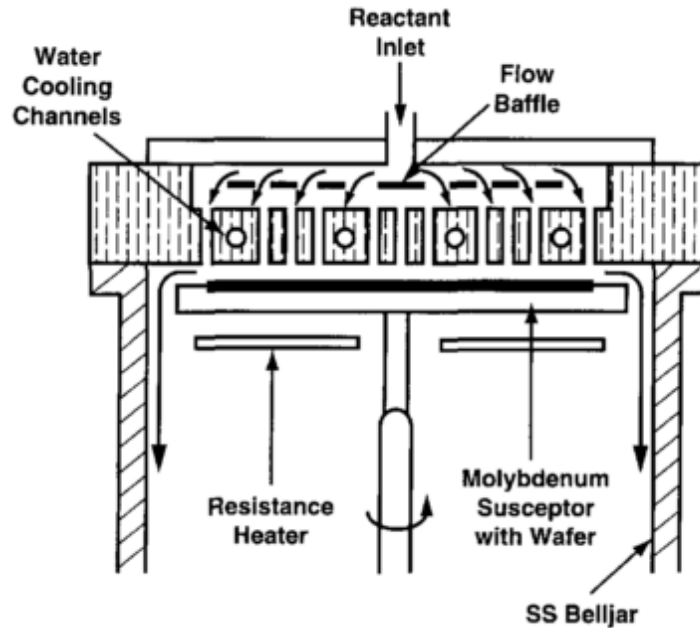


Figure 3: L'injecteur à haute efficacité refroidi à l'eau de Weyburne [1]

Normalement dans une configuration verticale d'injection en MOCVD, l'injecteur est typiquement à 10-15 cm de la gaufre afin d'éviter les préreactions et les décompositions des réactifs. Cependant, ce nouveau concept d'injecteur a permis d'éliminer ce problème tout en améliorant l'efficacité d'injection en étant très près de la gaufre. En effet, l'équipe de Weyburne a obtenu une efficacité de dépôt de 25 % pour la croissance de GaAs avec du TMG et AsH<sub>3</sub> tout en maintenant une uniformité de 1% sur l'épaisseur et la composition de la surface sur une gaufre de 4 pouces. Ce qui est à peu près le double de ce qui a été fait à ce moment. Certains travaux ont fortement influencé le concept de l'équipe de Weyburne. En 1990, l'équipe de Percy B. Chinoy [5] a développé un des premiers injecteurs à haute efficacité refroidis à l'eau. Leur réacteur à injection par le dessous a été conçu afin de croître le GaAs et le AlGaAs pour la fabrication de cellules solaires. La figure 4 représente leur concept.

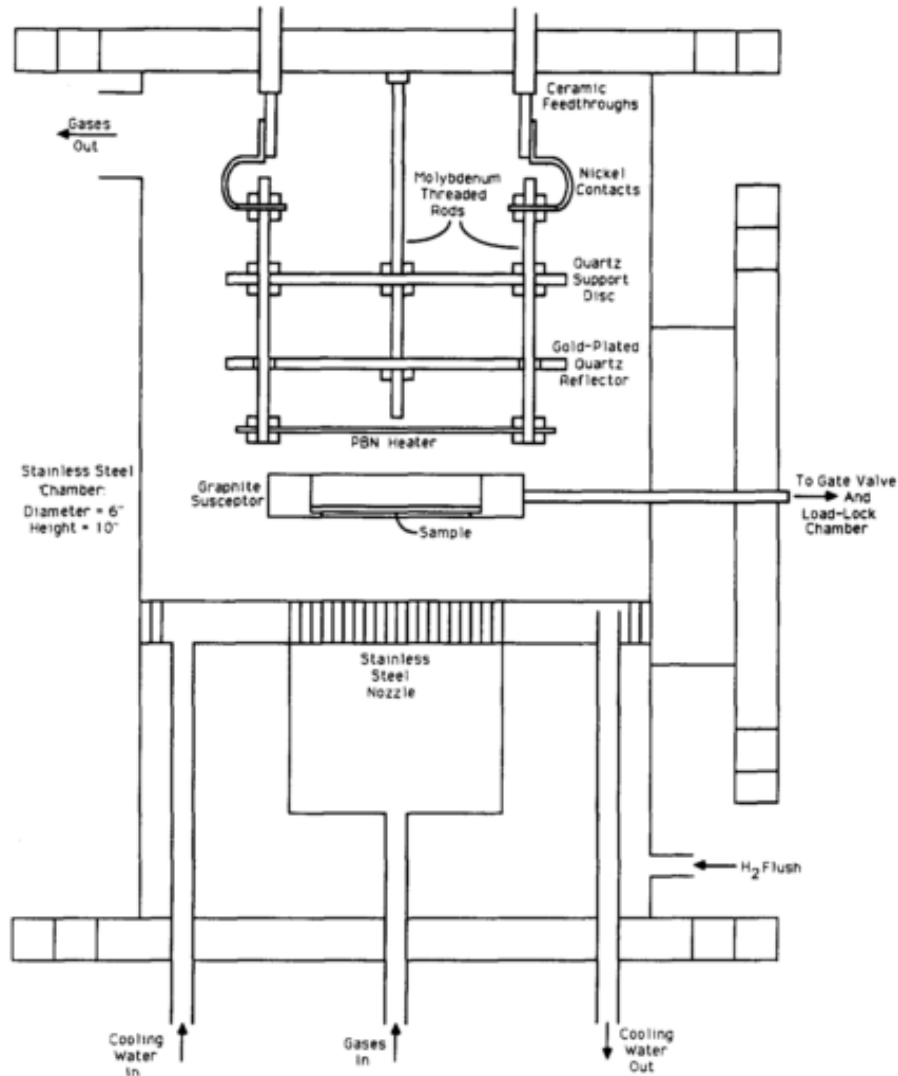


Figure 4: Représentation schématique du réacteur de Chinoy [5]

Le concept d'injection renversé leur permettait de diminuer la recirculation des gaz sur la surface due à la convection. Cela leur a également permis de diminuer le risque de contamination par particule se détachant de parois supérieures. Par ailleurs, le concept de refroidissement liquide fut un succès en maintenant une température maximale d'injecteur à 100°C. Par contre, les performances d'injection ont été moins bonnes malgré leur 15% d'efficacité. Le problème a été la faible uniformité (5%) obtenue qui a été causée par la forme du support à gaufre. Celle-ci influençait le flux sur les côtés de la gaufre et causait de la turbulence.

Pour ce qui est des injecteurs pour les réacteurs ÉJC, un seul injecteur à haute efficacité a été conçu, fabriqué et validé dans la littérature. Dans un des articles de Isnard [6], il fait l'analyse de la distribution du flux d'un injecteur conique afin de valider son modèle numérique. La figure 5 représente la forme de l'injecteur, la distribution 2D du flux angulaire et les trois régions d'intensité de flux.

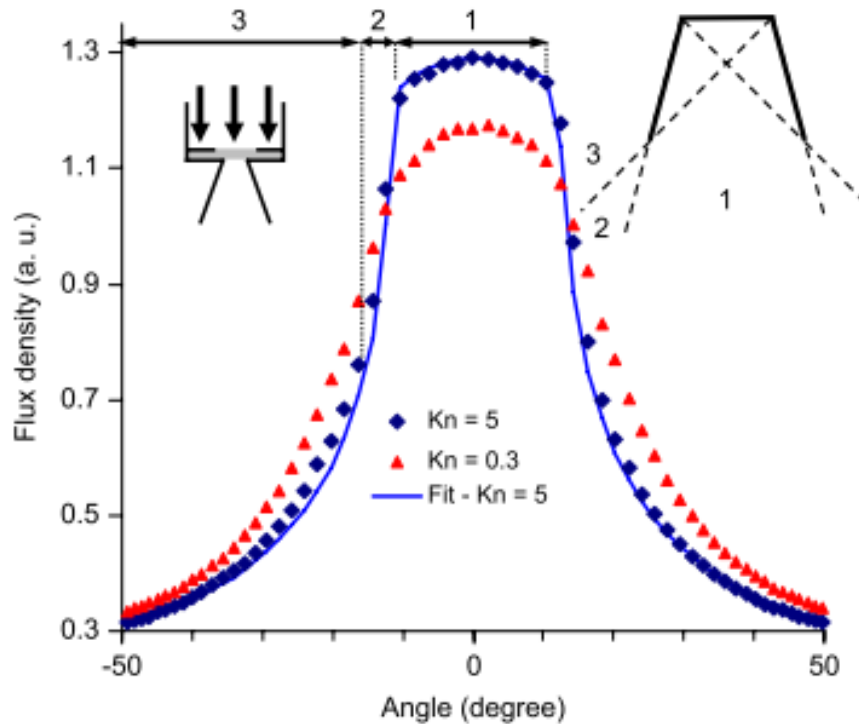


Figure 5: Distribution du flux angulaire de sortie d'un injecteur conique pour 2 intensités de flux[6]

En somme, on a pu observer que plusieurs aspects doivent être pris en considération dans la conception d'un injecteur pour réacteur d'ÉJC. En effet, en plus de concevoir l'injecteur pour un flux moléculaire, ces caractéristiques devront permettre d'avoir une très bonne conductance pour un contrôle optimal du débit de réactifs, une dissipation thermique efficace afin de maintenir la température des parois sous la température de pré réaction et une forme globale permettant d'atteindre les objectifs d'efficacité et d'uniformité.





## CHAPITRE 3 CONCEPTION DE LA FORME

Afin d'améliorer l'efficacité d'injection des gaz, nous devons maximiser les molécules qui atteignent directement la gaufre à leur entrée de la chambre de croissance tout en maintenant un flux uniforme. Pour contrôler leur trajectoire, seule la forme des parois de l'injecteur peut être modifiée. Ce chapitre fera un retour sur la théorie des déplacements des gaz en régime moléculaire, la méthodologie de conception, le cahier des charges, le concept simplifié de l'injecteur, le modèle numérique, sa validation et la forme finale de l'injecteur.

### 3.1 Méthodologie

La base de cette maîtrise est la modélisation en éléments finis dans Matlab d'un injecteur à forme cylindrique avec un bout conique. Il est possible de calculer la brillance (intensité du flux sur une paroi) de chaque point du modèle pour en ressortir un profil d'injection. Cet outil permet de définir un plan de source (brillance maximale), la forme d'un injecteur et le plan cible. Ainsi, on peut vérifier l'efficacité d'injection et son uniformité. Le modèle utilisé a été conçu à la base pour un injecteur en forme de buse, désaxé par rapport au substrat. Une modification du modèle pour la nouvelle forme sera nécessaire. Par la suite, deux premiers modèles ayant du potentiel seront développés et caractérisés à l'aide de l'outil informatique.

Afin de trouver les paramètres idéaux, il sera possible de débiter avec des formes influencées par les plus performantes développées dans les travaux de Isnard [6]. Par la suite, en analysant les contraintes géométriques données par le réacteur GaN, on diminuera les variables de l'analyse. Une série de premières simulations sera faite en modifiant une variable géométrique à la fois. Cela permettra de trouver les grandes tendances reliées à chacune d'entre elles. Ensuite, en s'inspirant des tendances, on simulera une vaste variété de formes. Un programme filtrant les meilleurs injecteurs du lot d'essais selon leur uniformité et leur efficacité permettra de recueillir de nouvelles solutions. Des filtres de performances seront développés pour le groupe III et V de gaz. Par la suite, de nouvelles simulations s'inspirant de

ces solutions seront faites et ainsi de suite. Cela permettra de converger vers les formes optimales. La compatibilité géométrique entre l'injecteur du groupe III et du groupe V sera nécessaire pour assurer la fiabilité des simulations.

Une fois cette étape complétée, un prototype identique au modèle devra être fabriqué. Le logiciel SolidWorks sera utilisé tout au long du projet pour modéliser les pièces et produire les mises en plan. L'injecteur fabriqué pour ces tests sera beaucoup plus simple que l'injecteur final. Plusieurs besoins tels que la résistance à haute température ou l'intégration du refroidissement ne seront pas tenus en compte pour des raisons économiques et de rapidité de fabrication. Par ailleurs, ce prototype sera caractérisé dans le réacteur expérimental. Ce petit réacteur est équipé d'une jauge de pression permettant de faire la lecture de pression à un point précis. Cette jauge sera déplacée afin de cartographier le profil d'injection en comparant la pression dans la jauge à la pression dans le réacteur. Cette étape permettra de valider la robustesse du modèle.

Une fois le modèle validé, nous incorporons dans la conception de la forme les différentes contraintes thermiques, chimiques, géométriques et de performance. Les deux injecteurs, soient le groupe III et V, ont des objectifs différents. Alors, ils auront probablement des formes idéales différentes, mais il sera nécessaire des harmoniser.

La conception finale sera un compromis entre les solutions idéales de chacune des contraintes et priorités. Par la suite, les injecteurs seront fabriqués et incorporés au nouveau réacteur d'épitaxie par jet chimique du laboratoire. Des tests d'injections seront utiles pour valider l'atteinte des objectifs. Ceux-ci peuvent être réalisés par la même méthode que dans le réacteur expérimental. Une jauge de pression peut être ajoutée à la fourchette de transfert du réacteur et en retirant le manipulateur du réacteur. Cependant, la méthode la plus fiable pour vérifier les performances de l'injection est en analysant des croissances. En effet, il est possible, par le biais de l'épaisseur de matériaux, de vérifier son uniformité et l'efficacité de dépôts. En supposant un pourcentage de réaction sur la surface et en conservant la quantité de chaque gaz injecté durant la croissance, il est possible de calculer la quantité de chacun des gaz atteignant le substrat.

## 3.2 Cahier des charges

L'injection des gaz est séparée en deux catégories, soit celle des molécules contenant un élément du groupe III et du groupe V du tableau périodique. Le processus de dépôt des semi-conducteurs à base d'ammoniaque est principalement dirigé par le flux des molécules de groupe III [9]. Cela s'explique par le fait que les molécules de ce groupe se décomposent facilement autour de 700 à 800°C et qu'elles sont en partie responsables de la décomposition des molécules de groupe V voisines par effet catalytique. Ainsi, il est très important d'avoir un flux uniforme pour garantir un dépôt uniforme, car c'est ce groupe qui dirige la croissance. Cependant, le taux de croissance est influencé par plusieurs autres paramètres: la température de surface, le ratio des gaz groupe V/III et la pression dans le réacteur.

Les standards de l'industrie demandent une non-uniformité d'épaisseur de couche d'au plus 2%. Pour respecter cette contrainte, le flux doit être égal ou plus uniforme à cette valeur pour minimiser les non-uniformités engendrées par les autres paramètres. Pour les molécules de groupes V, les besoins sont différents. Dans le cas du GaN, les molécules d' $\text{NH}_3$  ne se décomposent pas efficacement aux températures de croissance. Ainsi, beaucoup plus de molécules doivent être présentes pour combler les groupes III ce qui met l'accent sur une injection efficace. De plus, une variation du ratio de molécule V/III a une influence sur le taux de croissance, mais cela est inférieur à celle du flux de groupe III ce qui permet d'avoir une non-uniformité plus importante.

L'efficacité d'injection est définie comme étant le pourcentage de molécule injectée atteignant directement le substrat. La non-uniformité est définie comme étant le ratio entre l'écart-type du flux de gaz sur le substrat et l'intensité la plus faible atteignant celui-ci.

Pour atteindre ces cibles, il sera nécessaire de faire deux injecteurs distincts, car les besoins sont différents et il se peut qu'il soit impossible de joindre haute efficacité et haute uniformité. La page suivant présente le cahier de charges fonctionnelles pour la géométrie de l'injecteur ainsi que les notes à la conception.

Tableau 2: Cahier des charges fonctionnelles de la géométrie de l'injecteur

Fonction	Spécification	Niveau	Flexibilité	Mesure	Raison
Injecter les gaz	Non-uniformité d'injection Gr III	2 %	Maximum	Épaisseur dépôt Ellipsomètre MEB	Faisabilité des dispositifs faits sur le semi-conducteur dépend de l'uniformité de dépôt
	Non-uniformité d'injection Gr V	10%	Maximum	Épaisseur dépôt Ellipsomètre MEB	Le flux du Gr V à moins d'influence que Gr III. Permits de mettre l'emphase sur l'efficacité
	Efficacité d'injection Gr III	10%	Minimum	Épaisseur dépôt Ellipsomètre MEB	Amélioration de 3X par rapport au réacteur standard
	Efficacité d'injection Gr V	20%	Minimum	Épaisseur dépôt Ellipsomètre MEB	Amélioration de 6X par rapport au réacteur standard

Tableau 3: Notes à la conception de la géométrie de l'injecteur

Fonction	Spécification	Niveau	Flexibilité	Raison
Conservé accès optique au centre de la gaufre	Positionnement	-	-	Utilisation d'un pyromètre pour évaluer la température de la gaufre. L'accès perpendiculaire à la surface est nécessaire
Être réalisable	Usinabilité	-	-	Une pièce simple est moins dispendieuse à produire. Elle a également une meilleure répétabilité pour un même coût.
Maintenir les gaz III et V séparés jusqu'à la surface de la gaufre	Deux injecteurs indépendants	-	-	Préréactions possibles des gaz sur les parois chaudes de l'injecteur
Installable dans le réacteur	Positionnement	-	-	Le réacteur a une paroi supérieure à 20 centimètres de la gaufre avec un diamètre d'entrée d'environ 4 pouces.
Rotation de la gaufre non nécessaire	Positionnement	-	-	Diminuer les coûts du réacteur

### 3.3 Concept de base de la forme de l'injecteur

La géométrie classique des injecteurs d'ÉJC est un tuyau coupé en angle. Ceux-ci sont placés légèrement en angle et désaxés par rapport au centre de la gaufre. Avec la rotation de la surface de croissance, une uniformité maximale est atteinte. Les points faibles de ce concept sont la faible efficacité et la faible conductance.

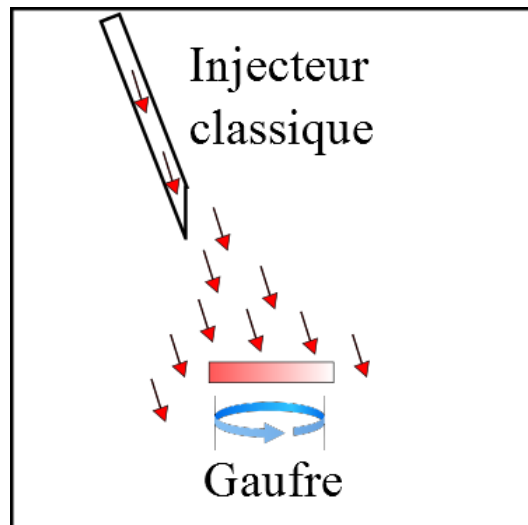


Figure 6 : Schéma d'injecteur classique

L'augmentation du nombre de tuyaux permet d'augmenter la conductance, car elle augmente la surface de transport du gaz. De plus, l'uniformité est plus facilement atteinte, car il devient possible de combiner les profils d'injection de chacun des tuyaux. En ayant un plus grand contrôle sur le profil final, il est également possible d'augmenter l'efficacité. En augmentant le nombre de tuyaux à l'extrême, nous obtenons les meilleurs résultats, soit une bonne efficacité, une grande conductance et une bonne uniformité. Un concept équivalant à une densité très élevée de tuyau est deux tuyaux concentriques avec des buses à leur extrémité. Le schéma de la page suivante présente cette idée avec deux injecteurs indépendants.

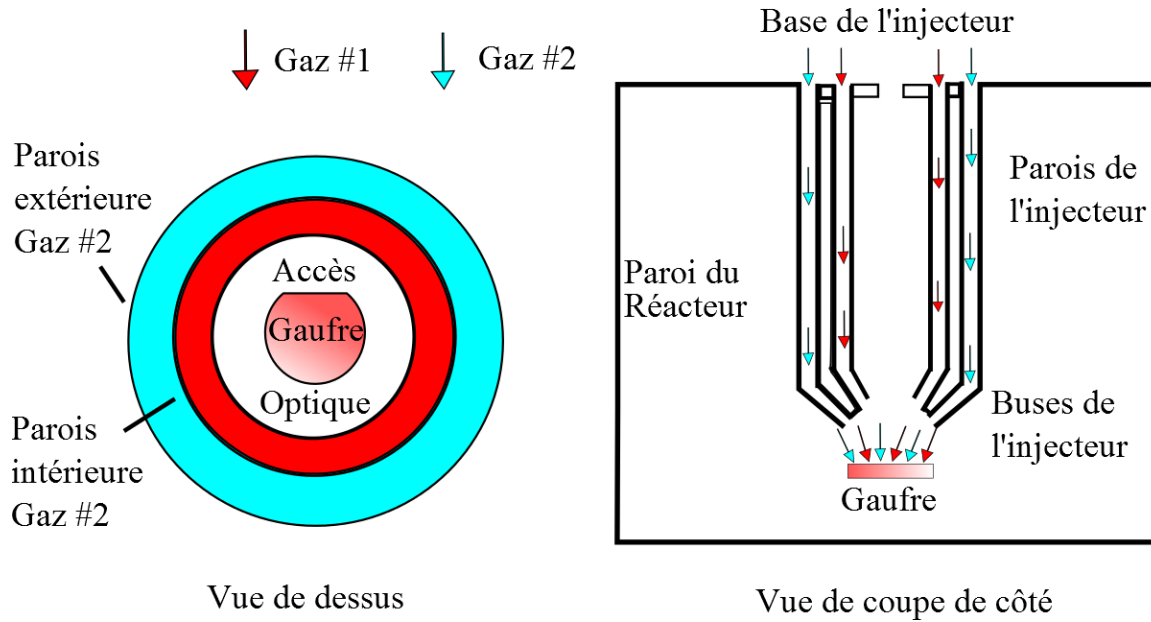


Figure 7: Concept de base de la géométrie de l'injecteur

En plus d'avoir un potentiel élevé d'efficacité et d'uniformité, ce concept permet de respecter la contrainte d'accès optique sur la gaufre en plus d'éliminer potentiellement le besoin de rotation de la gaufre. Par ailleurs, le réacteur GaN a été construit avant la conception de l'injecteur. Des contraintes géométriques et dimensionnelles restreignent dorénavant les buses et longueurs d'injecteur possibles. Le point d'attache, le diamètre maximal, la longueur et le diamètre minimal ont été fixés.

### 3.4 Modèle numérique de simulation d'injection

Le modèle numérique est réalisé sur le logiciel *Matlab*. Le laboratoire LÉA par le biais des travaux de l'un de ses étudiants, Laurent Isnard, a développé et validé un outil de modélisation d'injecteur et simulation de flux moléculaire. Au début de cette maîtrise, le script *Matlab* permettait de simuler des injecteurs de types classiques. Ce chapitre présentera en détail les étapes qui ont fait le lien entre ce script et le choix final de la géométrie de l'injecteur.

### 3.4.1 Retour sur la théorie

Une description complète du régime moléculaire est disponible au chapitre 2.1 de ce document. Voici un résumé. Le régime de flux moléculaire a lieu lorsque  $Kn \gg 1$ , c'est-à-dire dans le régime où la majorité des molécules parviennent à se déplacer dans le volume du système sans avoir de collision avec d'autres molécules. Étant donné qu'il n'a plus de collision pour influencer leurs déplacements, les trajectoires moléculaires peuvent être considérées comme des lignes droites entre les contacts sur les parois. Les interactions des molécules dans le système se limitent donc aux parois de celui-ci. De plus, une molécule atteignant une paroi colle sur celle-ci et est éventuellement réémise dans une direction aléatoire, totalement indépendante de la direction de son arrivée sur la paroi [2]. Les principes de cette théorie sont la base du modèle numérique, celui-ci sera expliqué plus profondément ainsi que les hypothèses lui étant reliées.

### 3.4.2 Aperçu du modèle *Matlab*

Les équations mathématiques pour simuler le déplacement de flux sont les mêmes dans ce modèle que dans celui que Isnard a utilisé dans son précédent simulateur. Il est possible de voir cette approche en détail au chapitre 2.1 de ce mémoire. De plus, afin de bien représenter ce flux moléculaire dans un modèle numérique, Isnard [6] a posé quelques hypothèses lui permettant de simplifier et de clarifier les limites de son modèle. Ces hypothèses sont présentées à la section suivante de ce chapitre. Voici un aperçu du modèle *Matlab*,

Le modèle numérique est séparé en trois sections. La première section consiste à la création du maillage 2D des parois de l'injecteur, du plan de la source et de la cible. La deuxième section consiste au calcul du déplacement du flux à l'intérieur de l'injecteur suivi du calcul du flux atteignant la cible. Le calcul à l'intérieur de l'injecteur amène à la brillance d'un élément. En effet, la brillance de celui-ci est la somme de toutes les molécules provenant de la source et des autres éléments ayant eu 0 à une infinité de collisions. Le programme émet à la première itération les premières molécules à partir de la source, puis à chaque itération, il calcule le déplacement de celle-ci jusqu'à ce qu'il ne reste qu'une quantité négligeable de

molécules n'ayant pas atteint l'entrée ou la sortie. Or, à chaque itération, le calcul devient plus simple, car il reste moins de molécules à l'intérieur de l'injecteur. Les résultats importants de ce modèle permettent d'observer une distribution relative du flux sur la cible et un pourcentage de molécule ayant atteint la cible.

### 3.4.3 Hypothèses

Afin de simplifier et accélérer le code, certaines hypothèses doivent être posées. Tout d'abord, le code simule les déplacements de molécules selon le modèle de flux moléculaire. Cela implique que l'injecteur est opéré avec un flux de gaz qui permet de maintenir un libre parcours moyen beaucoup plus grand que les dimensions de celui-ci afin de respecter les limites du flux moléculaire. Par la suite, nous supposons que toutes les molécules à l'entrée de l'injecteur ont une direction complètement aléatoire. Cette hypothèse est respectée à condition que les ports d'admission de l'injecteur contiennent une chambre de mélange pour diffuser le flux avant son injection. Une fois les molécules sorties de la buse, nous posons qu'elles ne peuvent pas revenir dans l'injecteur. La majorité des molécules sont considérées comme pompées hors de la chambre de croissance. De plus, les molécules de groupes III ayant un taux de transfert d'atome (*sticking coefficient*) élevé [10], les éléments rejetés par la réaction chimique sont considérés comme inertes et passifs à de futures réactions sur la surface. Ainsi, ils ne sont plus considérés dans le profil d'injection. Finalement, cela nous permet également de poser que l'environnement et la géométrie de la chambre ont un effet négligeable sur le profil d'injection.

### 3.4.4 Définition de la forme des parois d'un injecteur

Les premiers paramètres à fixer pour une simulation sont les dimensions et orientations des parois de l'injecteur. La géométrie de base de l'injecteur étant préalablement fixée, le modèle doit restreindre la définition des paramètres afin d'éviter de créer des injecteurs impossibles à fabriquer ou ayant des parois qui se croisent. Dix paramètres doivent être fixés. Un schéma représentant chacune d'entre elles est présent à la page suivante.



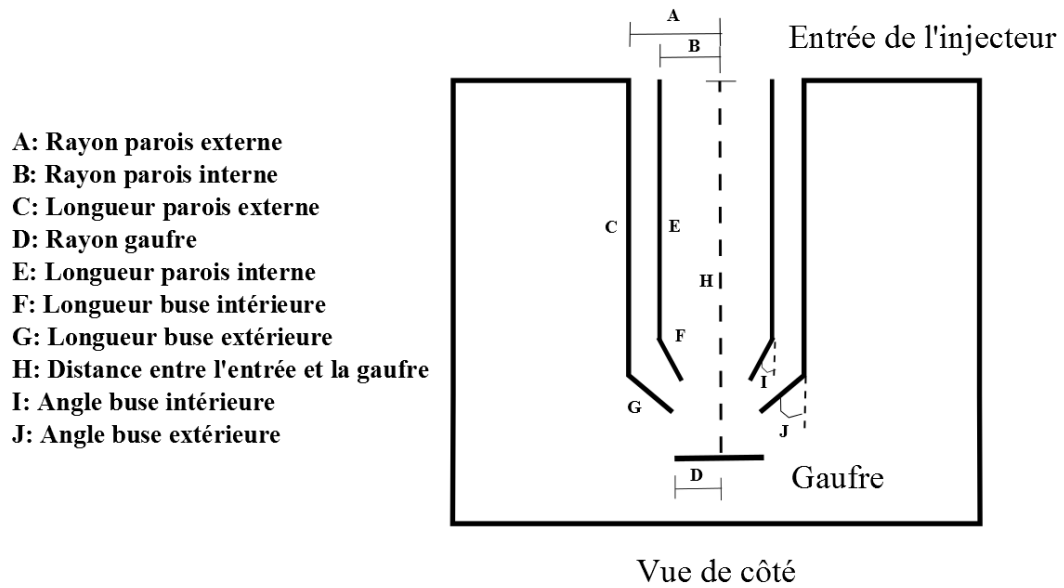


Figure 8: Schéma des dimensions de l'injecteur à définir dans le modèle *Matlab*

### 3.4.5 Définition du maillage

Pour simuler le flux, un maillage est nécessaire. L'injecteur étant axisymétrique, il est possible de simplifier le profil du flux à une vue de coupe selon l'axe de l'injecteur. Cependant, pour inclure l'effet d'un cylindre et non de deux parois parallèles infinies, la section d'équilibrage du flux est réalisée avec une symétrie selon deux plans de l'injecteur. Voici un exemple du maillage réalisé sur un injecteur.

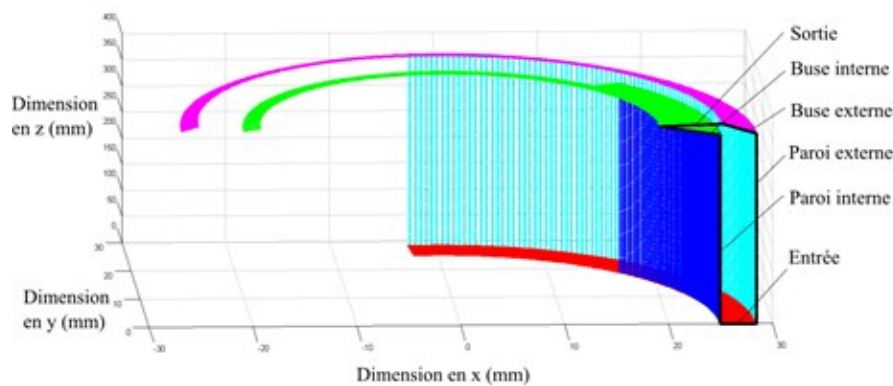


Figure 9: Exemple de maillage de paroi d'injecteur à l'aide du programme *Matlab*

Il est possible de choisir la densité de maillage pour chaque paroi, que ce soit l'entrée, la sortie, la cible ou une paroi de la buse. Chacun de ces murs est constitué d'un cylindre ou d'un cône. Alors, le maillage se définit en nombre d'anneaux par surface et de points par anneaux. Finalement, avant de lancer la simulation, il est nécessaire de spécifier le critère d'arrêt de la série de convergente d'échange de flux entre les parois.

### 3.4.6 Paramètres de sorties d'une simulation

Les paramètres de sorties sont très importants pour vérifier si la simulation s'est bien déroulée et qu'elle n'a pas divergé. Trois types d'informations sont donnés. La première information est le flux atteignant la cible provenant de l'entrée, de la paroi extérieure et de la paroi intérieure de l'injecteur. Il est utile pour développer des règles de pouces pour observer les proportions de la provenance du flux. Par la suite, il y a les coefficients de transmission. Ceux-ci permettent de calculer la fraction de molécule ayant traversé au complet l'injecteur. Une conductance élevée est préférable. Ces coefficients peuvent être obtenus de deux façons, par la fraction de molécule rétrodiffusée à l'entrée et par la fraction de molécules sortantes. Lorsque ces valeurs sont très différentes, c'est qu'il a eu un problème avec la simulation. La troisième information est l'efficacité d'injection. Celle-ci est calculée à partir du flux total atteignant la cible, le flux total injecté et les coefficients de transmission.

Afin d'avoir le maximum d'information sur le profil d'injecteur, il est possible de modéliser une cible beaucoup plus grande. Cela permet de savoir à quel point le flux diminue après notre réelle cible. Cependant, il devient nécessaire de recalculer l'efficacité, celle-ci n'étant plus représentative. Finalement, la dernière étape est de calculer la non-uniformité du profil sur la cible. La section suivante présente le premier cas appliqué de ce modèle.

### 3.4.7 Conception et fabrication de l'injecteur préliminaire

Avant d'investir plus de temps et d'argent dans ce concept d'injecteur, il devenait essentiel de valider la précision des résultats obtenus par simulation. Il a alors été décidé de simuler des géométries inspirées des meilleurs résultats contenus dans les travaux de M.

Isnard, de fabriquer un injecteur modulaire et de l'intégrer à l'intérieur du réacteur équipé du système pour vérifier le profil de pression d'injection. Le but n'est pas de trouver le profil idéal, mais un profil intéressant et crédible. Le meilleur résultat obtenu de cette première série de simulation est présenté dans la prochaine section accompagnée des résultats expérimentaux.

Afin de simplifier la série de tests, il a été décidé de fabriquer un seul injecteur et non un double comme le concept final oblige. L'injecteur contient les parois simulées avec buses interchangeables, une chambre de mélange en amont de l'entrée de l'injecteur et un élément de fixation. Voici une vue de coupe de l'injecteur préliminaire.

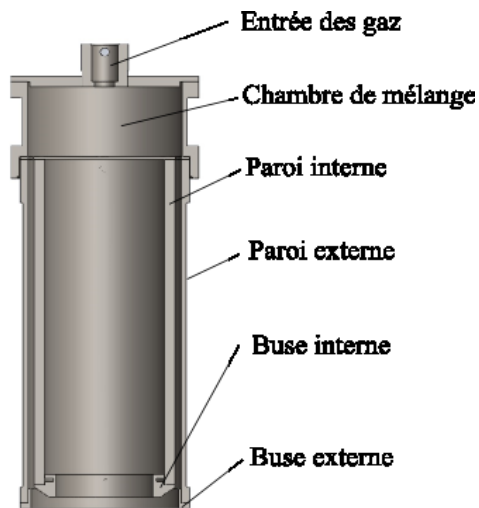


Figure 10: Vue de coupe de l'injecteur test

Pour sa part, le banc d'essai est constitué de l'injecteur, d'une jauge de pression déplaçable, d'un tuyau d'admission des gaz rotatif, d'un système d'alimentation en azote et d'un système complet de pompage. Le schéma du banc d'essai est présenté à la page suivante.

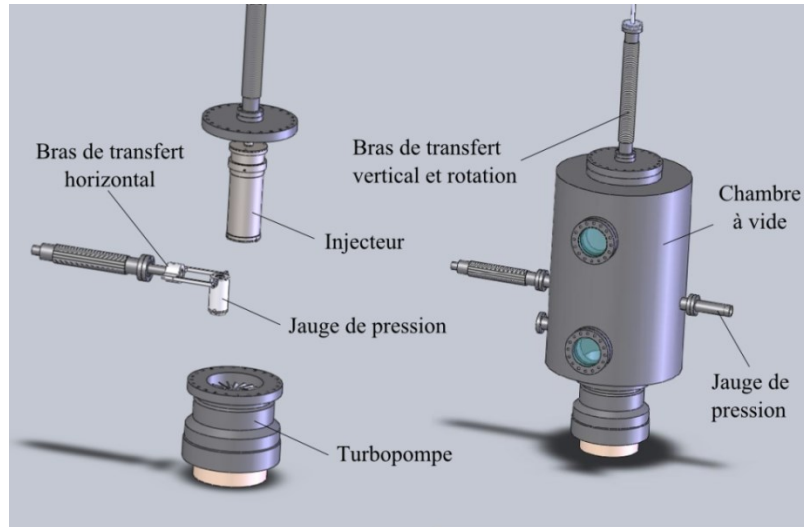


Figure 11: Aperçu des composants de la chambre sous vide expérimentale

Le réacteur est équipé d'une jauge de pression permettant de faire la lecture de pression à un point précis. Cette jauge est déplaçable radialement afin de cartographier le profil de pression. Une pression plus élevée révèle un flux plus élevé. En comparant la pression à un point précis à la pression du réacteur, il est possible de retrouver le flux d'injection. Pour ce qui est du système rotatif, le tuyau d'admission des gaz permet de tourner l'injecteur sur lui-même pour vérifier si le profil est le même, peu importe l'angle de rotation.

### 3.4.8 Résultats et discussion de l'injecteur préliminaire

Les essais de l'injecteur préliminaire permettent de vérifier deux aspects : le profil radial d'injection et la précision de l'outil de simulation.

Les tests ont été réalisés avec la buse extérieure de 30 degrés et la buse intérieure de 60 degrés avec un flux de 1 sccm d'azote. Pour vérifier le profil radial, des données ont été recueillies à une rotation de 0, 30, 60 et 90 degrés sur l'axe de l'injecteur. Les données sont présentées dans le graphique de la page suivante.

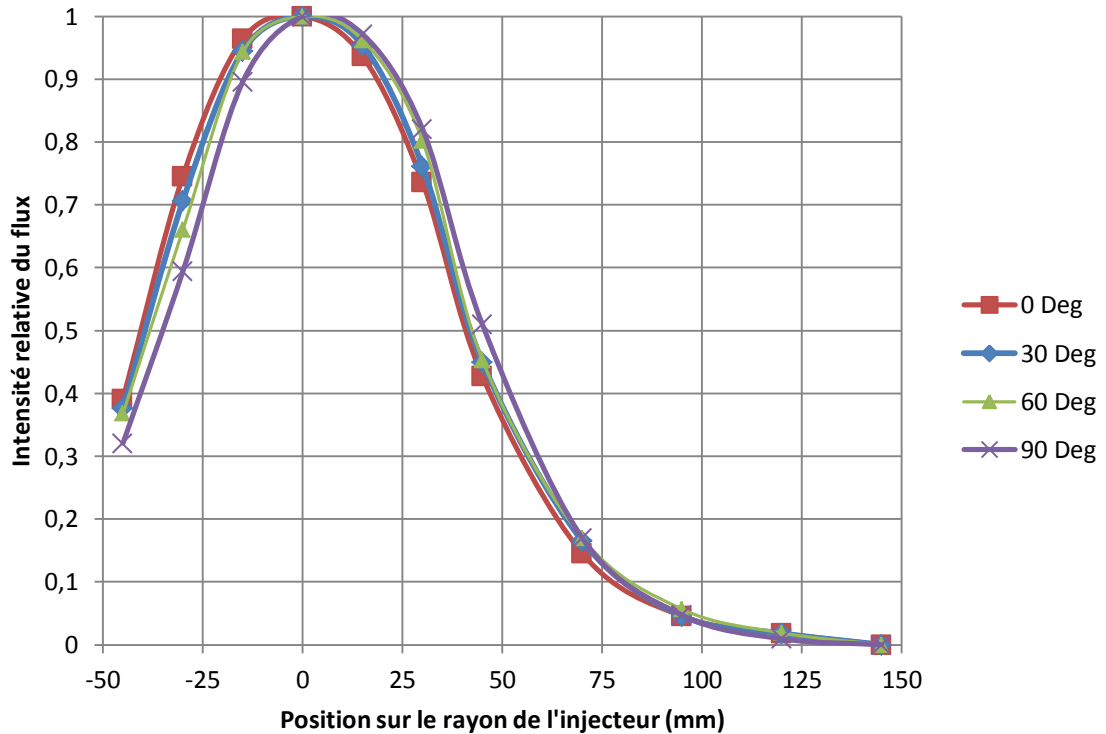


Figure 12: Intensité relative du flux selon la rotation et la position radiale

Ces résultats montrent que l'injecteur a un profil radial et qu'une rotation au niveau du flux n'est plus nécessaire pour uniformiser. Un écart moyen de 7% entre deux mesures à une même position entre deux angles de rotation peut s'expliquer par une imprécision de la position de la jauge par rapport à l'injecteur. Si l'injecteur n'est pas parfaitement centré avec l'outil de rotation, une erreur inconnue peut s'insérer dans la position réelle du capteur de pression, surtout s'il y a rotation.

Le deuxième aspect des tests vérifie la précision de l'outil de simulation. Le profil recueilli à 0 degré de rotation a été comparé à la simulation. Un flux de 1 sccm d'azote dans l'injecteur a été utilisé. Les données d'efficacité et de non-uniformité ont également été calculées sur un rayon de 20 mm. Ces résultats sont présentés à la page suivante.

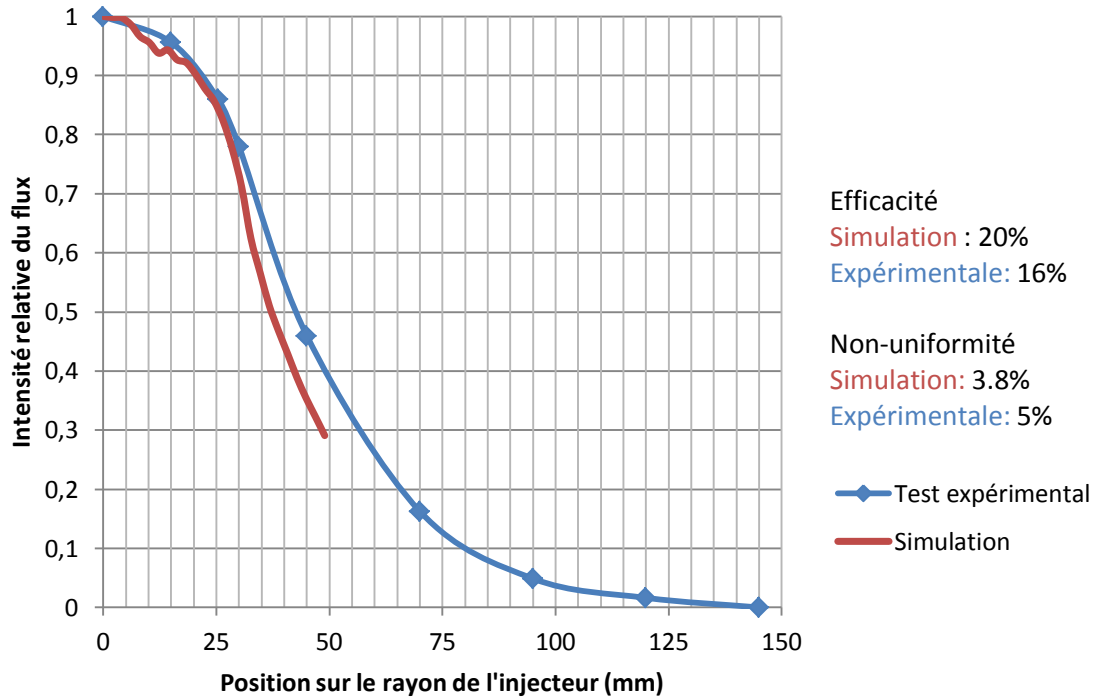


Figure 13: Comparaison expérimentale/simulation du profil de l'intensité du flux

Il est possible d'observer que les deux courbes coïncident sur les 30 premiers millimètres. Par la suite, la courbe expérimentale est légèrement au-dessus. Cette différence peut également être observée avec l'efficacité sur un rayon de 20 mm qui est près de 20% plus basse que la valeur simulée. Cela peut s'expliquer par la présence de réémission de gaz près des parois qui augmente la pression locale. Si le gaz n'est pas efficacement pompé, il est possible qu'il y ait une pression résiduelle de gaz dans la chambre qui a pour effet d'avoir une pression supérieure aux simulations après l'injecteur. Pour ce qui est de la non-uniformité sur un rayon de 20 mm, les données ont seulement 1,2 % de non-uniformité de différence. Les résultats sont encourageants et ils exposent le potentiel de l'outil de simulation. Il est également possible d'observer que la courbe de la simulation est plus bruitée. Cela peut s'expliquer par sa résolution beaucoup plus élevée et le maillage insuffisant de la buse de l'injecteur. L'efficacité et la non-uniformité des données ci-dessus ont été calculées avec les équations présentées à la page suivante. L'efficacité (Eff) est calculée par le rapport entre le volume d'intensité du flux à un certain rayon ( $r$ ) sur le volume d'intensité de flux total. En

supposant que l'intensité du flux est parfaitement radiale, elle peut se calculer avec l'intégrale suivante.

$$Eff_{0 \rightarrow r} = \frac{\text{Volume d'intensité de flux (r)}}{\text{Volume d'intensité de flux total}} = \frac{\int_0^r (P_{flux\_radial}(r) * 2\pi * r * dr)}{\int (P_{flux\_radial}(r) * 2\pi * r * dr)} \quad (3.1)$$

La non-uniformité (NUnf) est calculée avec le rapport de l'écart type de l'intensité des flux entre 0 et le rayon choisi sur la valeur de la plus faible d'intensité du flux dans cette région.

$$NUnf_r = \frac{\sigma Flux_{0 \rightarrow r}}{Flux_{min}} \quad (3.2)$$

En somme, il est possible d'affirmer que l'outil de simulation est suffisamment robuste pour investir du temps supplémentaire pour optimiser une géométrie atteignant les objectifs. La réelle validation de l'outil de simulation sera faite avec le profil de croissance dans le réacteur.

### 3.5 Optimisation et forme finale de l'injecteur

Suite aux résultats encourageants obtenus avec l'injecteur préliminaire, il devenait intéressant de poursuivre les simulations pour obtenir les meilleurs résultats possibles. L'optimisation a débuté avec des simulations itératives afin de couvrir le maximum de formes possibles. Les résultats ont été traités afin de faire ressortir les règles de pouces afin de diriger les simulations. Voici une liste des règles obtenues :

- Plus l'injecteur est loin de la cible, plus le flux est uniforme,
- Plus l'injecteur est proche de la cible, plus le flux est efficace,
- Plus la distance entre les deux parois est grande, plus la buse doit être longue,
- Le diamètre intérieur de l'injecteur doit être plus grand que le diamètre de la gaufre pour améliorer l'uniformité,

- Plus la distance entre les deux parois est grande, meilleure est la conductance,
- Les paramètres de la paroi intérieure de la buse à moins d'influence que la paroi extérieure.

Par la suite, une optimisation pour obtenir la meilleure uniformité possible et la meilleure efficacité possible a été réalisée. Cela permet de vérifier les limites possibles à atteindre avec cette forme générale. Les résultats étaient très impressionnants, une efficacité de 70% des gaz et une non-uniformité de 0,3% ont été atteintes sur deux géométries différentes. Cependant, ces chiffres avaient peu de valeurs, car l'augmentation d'un paramètre était au détriment de l'autre. C'est alors que des contraintes ont été ajoutées lors des itérations. Voici une liste de celle-ci :

- Les deux injecteurs ne doivent pas influencer le flux de l'autre, c'est-à-dire que leurs flux principal et secondaire ne doivent pas toucher une autre paroi (voir schéma page 11),
- Non-uniformité maximale de 10% pour l'injecteur groupe V,
- Non-uniformité maximale de 2% pour l'injecteur groupe III,
- Diamètre maximal de 4 po et diamètre minimal de 1 po.
- Aucun contact entre les parois des deux injecteurs

Les géométries possibles étaient réduites. Avec toutes les règles de pouces et les contraintes maintenant posées, deux voies d'optimisations ont été réalisées en parallèle. L'optimisation de tous les paramètres de l'injecteur du groupe III en conservant ceux du groupe V aux limites des contraintes. La meilleure combinaison d'injecteurs qui respectait toutes les contraintes a été choisie comme géométrie finale. Les performances simulées de la géométrie finale sont présentés à la page suivante. Une efficacité de 12% sur 20 mm a été obtenue pour l'injecteur groupe III et une efficacité de 22,4% pour l'injecteur groupe V. Une non-uniformité de 2% sur 2 pouces a été obtenue pour l'injecteur groupe III et 4,3% pour le groupe V. Par ailleurs, il n'a pas été possible à ce jour d'expliquer la présence des pics d'intensités sur les profils. Cet élément devra être abordé dans les prochains travaux.



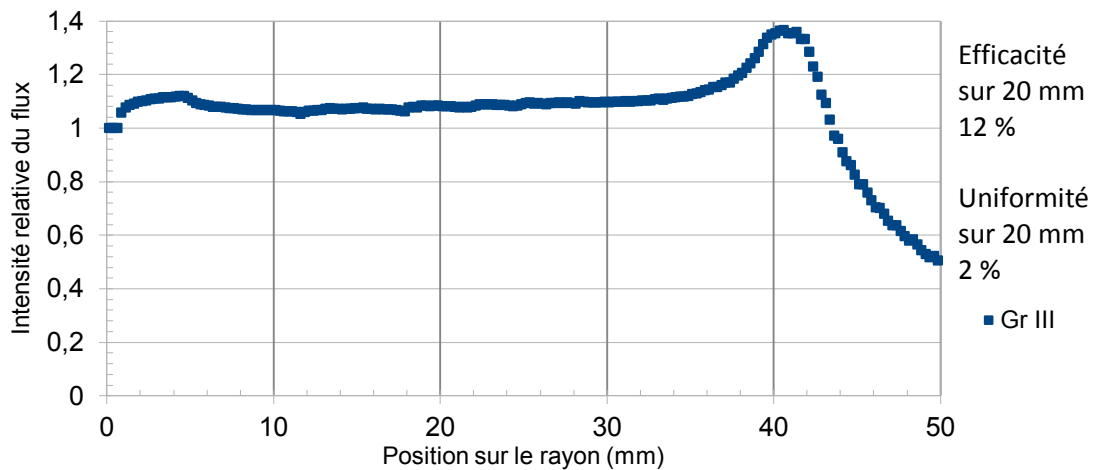


Figure 14: Profil d'injection simulé de l'injecteur groupe III

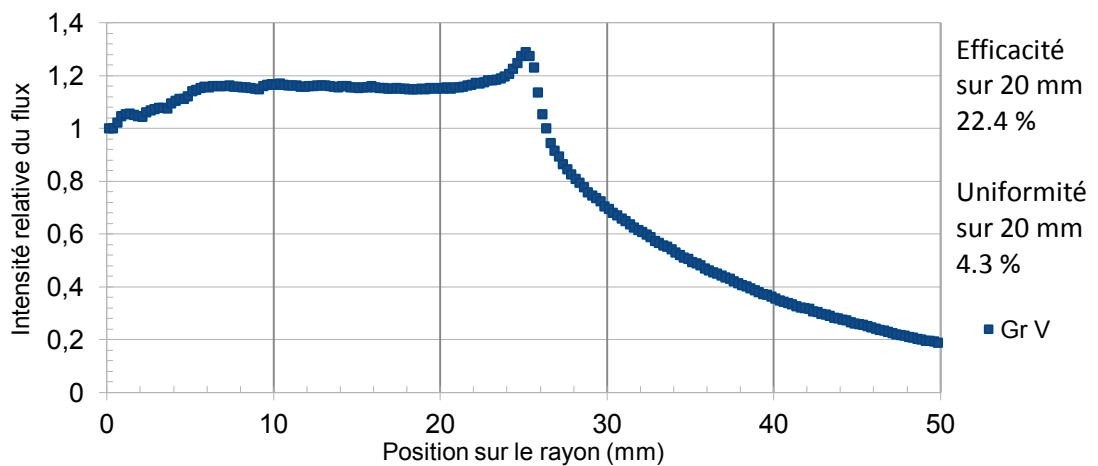


Figure 15: Profil d'injection simulé de l'injecteur groupe V

En somme, il a été vu que le modèle *Matlab* a été préalablement modifié pour être en mesure de simuler la géométrie préliminaire développée. Par la suite, ce modèle a été validé à l'aide d'un banc d'essai pour mesurer le flux d'un injecteur simplifié. Cela a permis de développer avec plus de confiance la géométrie finale de l'injecteur. Finalement, les performances de l'injecteur final ont été présentées et ceux-ci respectent le cahier des charges. Avant de commencer la conception détaillée et la fabrication de cet injecteur, une analyse thermique doit être réalisée. Celle-ci est présentée au prochain chapitre.



# CHAPITRE 4 CONCEPTION DU SYSTÈME DE GESTION DE TEMPÉRATURE

La température des parois de l'injecteur doit être contrôlée pour diverses raisons. Les composés chimiques injectés sont sensibles à la température. Avec suffisamment d'énergie, ceux-ci peuvent être cassés avant d'atteindre la surface de croissance et se recomposer en une autre molécule. De plus, à haute température, les parois de l'injecteur peuvent dégazer des composés chimiques pouvant créer des défauts dans le semi-conducteur. Ainsi, il est nécessaire de maintenir les parois de l'injecteur les plus froides possible. Ce chapitre fera un retour sur la théorie d'échange thermique, la méthodologie de conception, le cahier des charges, le concept simplifié de refroidissement, le modèle analytique, le modèle numérique, les résultats des simulations et l'optimisation finale du système.

L'injecteur se situe dans un réacteur ÉJC. La pression atteinte dans le réacteur, même pendant l'injection de gaz, est pratiquement toujours en dessous de  $10^{-3}$  Torr. À cette pression, les effets de la convection sont négligeables, car il n'y a plus suffisamment de gaz pour transférer la chaleur. Par ailleurs, la principale source de chaleur dans le réacteur est l'élément chauffant sous la gaufre. Celui-ci permet à la gaufre de varier sa température en fonction des étapes de croissances du semi-conducteur. Les températures peuvent atteindre  $900^{\circ}\text{C}$  dans certains cas de la croissance de GaN. À cette température, les échanges radiatifs sont très intenses. Par contre, la surface à haute température est faible par rapport aux surfaces de l'injecteur et la pompe cryogénique sous la gaufre. Ainsi, les parois du réacteur resteront tout au plus autour de  $60^{\circ}\text{C}$ .

Selon la configuration du réacteur, l'injecteur sera fixé au mur du réacteur et son bout sera près de la gaufre. Il est déjà possible de voir que le bout de l'injecteur sera chauffé par radiation, le corps refroidi par radiation et que sa base le refroidira par conduction. La figure 16, présentée à la prochaine page, montre le positionnement simplifié de l'injecteur dans le réacteur.

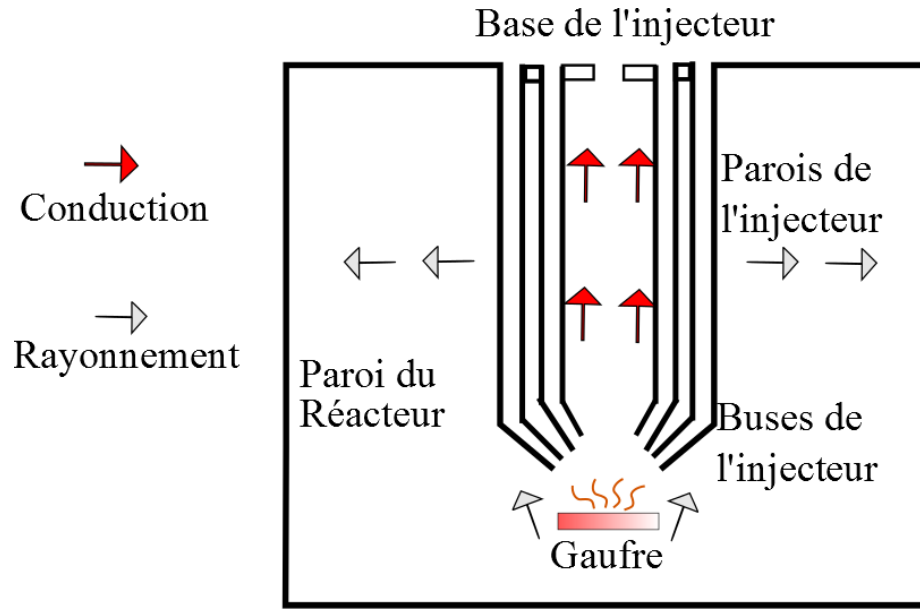


Figure 16: Schéma simplifié de la disposition de l'injecteur dans le réacteur

## 4.1 Retour sur la théorie

Partout où il y a une différence de température dans un même matériau ou entre deux objets, il y aura un transfert thermique. L'un des modes de transfert est la conduction. Selon la définition de Moran et Shapiro [11], la conduction est le transfert de chaleur à l'intérieur d'un liquide ou d'un solide stationnaire lorsque celui-ci est soumis à un gradient de température. Ce phénomène peut être représenté par la loi de Fournier :

$$q_x'' = -k \frac{dT}{dx} \quad (4.1)$$

Le flux thermique  $q_x''$  ( $\text{W}/\text{m}^2$ ) est le transfert thermique dans la direction des  $x$  par unité de surface perpendiculaire à cette direction, et il est proportionnel au gradient de température  $dT/dx$ . Le terme  $k$  est une constante de proportionnalité appelée *conductivité thermique* ( $\text{W}/\text{m}\cdot\text{K}$ ). Le signe négatif est dû au fait que le transfert thermique se fait dans le sens décroissant de la température. La figure suivante présente un schéma de conduction à travers un mur ayant des parois à des températures différentes.

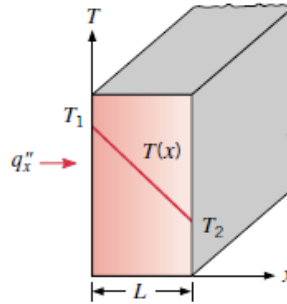


Figure 17: Conduction à une dimension [11]

Par la suite, il y a une autre mode d'échange thermique, la radiation. Toutes les surfaces ayant une température plus élevée que 0 K émettent de l'énergie sous la forme d'ondes électromagnétiques. Ainsi, les surfaces à des températures différentes dans un même espace ont un échange net vers les surfaces les plus froides. Comparativement à la convection et la conduction, la radiation n'a pas besoin de matériel pour faire le transfert. La puissance radiative quittant une surface est selon la loi Stefan-Boltzmann. Cette situation peut être obtenue à condition d'avoir une surface de transfert idéale, un corps noir. Cependant, pour une vraie surface, la puissance transférée dépend de l'émissivité de la surface :

$$E = \varepsilon A \sigma T_s^4 \quad (4.2)$$

La lettre  $E$  représente la puissance radiative totale quittant la surface (W);  $A$  est l'aire de la surface ( $m^2$ );  $\sigma$  est la constante de Stefan-Boltzmann ( $5,67 \times 10^{-8} \text{ W/m}^2 \cdot \text{K}^4$ );  $T_s$  est la température absolue de la surface (K) et la lettre  $\varepsilon$  est l'émissivité de la surface. Celle-ci se situe entre 0 et 1 et représente l'efficacité de transmission de l'énergie par radiation par rapport à un corps noir. Elle dépend du type de matériau, le fini de surface, des longueurs d'onde et de la température. La radiation peut également être absorbée. Dans ce cas, l'absorption dépend de la source des radiations et l'état des surfaces. Lorsque la radiation n'est pas totalement absorbée, elle peut être réfléchie ou transmise. Dans le cas d'une petite surface totalement englobée d'une surface plus grande et isotherme, il est possible d'approximer que la surface environnante se comporte comme un corps noir. Peu importe l'émissivité de l'environnement, le rapport de surface est si grand que l'échange radiatif est pratiquement maximal.

Or, pour deux surfaces de températures  $T_s$  et  $T_{env}$  ayant les mêmes caractéristiques, si on assume que leur absorptivité et leur émissivité sont identiques (appelé une surface diffuse et grise), la puissance nette d'échange radiatif ( $W/m^2$ ) quittant la surface est de :

$$q_{rad}'' = \frac{q}{A} = \varepsilon E_b(T_s) - \alpha G = \varepsilon \sigma (T_s^4 - T_{env}^4) \quad (4.3)$$

Une surface est grise lorsque son émissivité et son absorptivité ne dépendent pas de la longueur d'onde. Une surface est dite diffuse lorsque celle-ci émet et réfléchit uniformément, leur émissivité et absorption spectrale sont égales. Un autre élément est très important pour les échanges radiatifs entre deux surfaces. C'est le facteur de forme. Il est défini comme étant la portion de radiation quittant la source qui atteint la cible :

$$F_{ij} = \frac{q_{i \rightarrow j}}{A_i J_i} \quad (4.4)$$

L'élément  $q_{ij}$  représente le flux radiatif quittant la surface  $A_i$  qui atteint  $A_j$ ;  $J_i$  est le flux de chaleur quittant l'élément  $A_i$  dans toutes les directions. Cela est vrai si les surfaces sont diffuses et si elles ont une radiation uniforme.

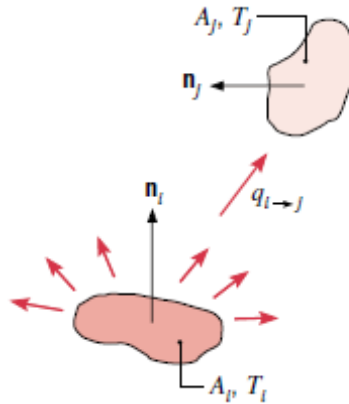


Figure 18: Schéma de facteur de forme [11]

Finalement, l'échange radiatif entre deux surfaces peut être représenté par ceci [11] :

$$q_1 = \frac{\sigma(T_1^4 - T_2^4)}{\frac{1 - \varepsilon_1}{\varepsilon_1 A_1} + \frac{1}{A_1 F_{12}} + \frac{1 - \varepsilon_2}{\varepsilon_2 A_2}} \quad (4.5)$$

## 4.2 Méthodologie

Afin d'obtenir la meilleure gestion de température des parois, il est nécessaire de bien définir les températures cibles, les sources, les puits de chaleur, les méthodes de refroidissement possibles et l'intégration de celles-ci dans un réacteur ÉJC.

Une fois cette étape complétée, un modèle simple d'échange de chaleur doit être réalisé afin de vérifier si les parois ont besoin d'un refroidissement forcé. Les calculs préliminaires ont démontré qu'il était nécessaire de refroidir activement les parois sans quoi la température des parois au centre serait nettement trop élevée dû au fait que les parois s'isolent les unes des autres des parois froides du réacteur. Les résultats de ce calcul ne sont pas présentés dans ce document, car le modèle utilisé est la version simplifiée du modèle analytique présenté un peu plus loin dans ce chapitre.

Sachant que les parois nécessitent un refroidissement actif, le développement d'une configuration optimale doit avoir lieu. Celle-ci permet de poser les frontières finales des modèles. Le modèle analytique a comme but d'observer les tendances sur la température des parois en fonction de différents éléments tels que l'émissivité, l'épaisseur des parois, un système de refroidissement par conduction ou par radiation, la longueur de l'injecteur, les facteurs de formes et la température de la gaufre. La résolution rapide du modèle analytique par un logiciel tel qu'*Excel* est un net avantage par rapport au modèle numérique. Ces observations permettront de définir rapidement la majorité des choix sur le concept. Par la suite, un modèle numérique sera développé afin de prendre en compte le mieux possible la forme complexe de l'injecteur et d'améliorer les facteurs de formes calculés. Ceux-ci permettront de comparer les résultats des deux modèles et de vérifier leur robustesse. Finalement, des tests expérimentaux permettront la validation des modèles et la suggestion d'amélioration.

### 4.3 Cahier des charges

Les réacteurs d'épitaxie sont très sensibles aux fuites de gaz ou de liquide dans le réacteur. Le différentiel de pression cause qu'une simple fissure permet à des éléments de se frayer un chemin jusqu'à l'intérieur du réacteur. Par la suite, de la difficulté à maintenir une pression très basse ou de l'incorporation d'éléments détruisant la qualité des cristaux fabriqués sont des exemples de problèmes qui peuvent survenir. La fiabilité du système est une chose, mais le rôle est principalement de maintenir la température des parois à l'intérieur d'un certain intervalle de température. Une température trop chaude provoquera la décomposition des molécules et une température trop froide fera de la rétention de certains gaz par condensation. Ainsi, il faut éviter les points chauds ou froids. Du point de vue géométrique, il faut conserver un accès optique au centre du réacteur pour un pyromètre. Voici le cahier de charges fonctionnelles pour la gestion de la température suivie des notes à la conception.

**Tableau 4: Cahier des charges fonctionnelles du système de gestion de température**

Fonction	Spécification	Niveau	Flexibilité	Mesure	Raison
Évacuer la chaleur	Température des buses de l'injecteur	300°C	Maximum	Thermocouple	Risque de décomposition du TEGa au-dessus de cette température
Maintenir une température	Température des parois de l'injecteur	60°C	Minimum	Thermocouple	Risque de condensation de certains gaz sur les parois avant d'atteindre la gaufre

**Tableau 5: Notes à la conception du système de gestion de température**

Fonction	Spécification	Niveau	Flexibilité	Raison
Conserver un accès optique au centre de l'injecteur	Positionnement	-	-	Utilisation d'un pyromètre pour évaluer la température de la gaufre. L'accès perpendiculaire à la surface est nécessaire
Être fiable	Résistance aux fissures	0	Maximum	Introduction de molécules néfaste à l'intérieur du réacteur et dans la gaufre
Éviter les points chauds ou froids	Uniformité de la température des parois	Entre 60°C et 300°C	-	Condensation des gaz ou décomposition des molécules



## 4.4 Concept de base du système de refroidissement

Afin d'être le plus efficace possible, le système de refroidissement doit être situé près de la zone la plus chaude de l'injecteur. Dans la configuration actuelle, le centre de l'injecteur est le point le plus chaud, car la chaleur est principalement extraite par rayonnement vers les parois du réacteur. Or, la paroi interne est isolée par les autres parois. Une paroi refroidie à l'eau froide au milieu de l'injecteur permettrait de soutirer le maximum de chaleur. En étant de forme hélicoïdale, il permet de maintenir un accès optique en son centre. Par ailleurs, le contact entre deux parois dans le vide offre un très mauvais transfert par conduction. Cela s'explique par le fait qu'il y a peu de points de contacts entre les deux surfaces non parfaitement lisses et qu'il n'y a pas de gaz entre ceux-ci pour faire un transfert. Cet élément rend tout concept de refroidissement par contact peu efficace. Les objectifs de faible masse et de simplicité nous amène au concept ci-dessous :

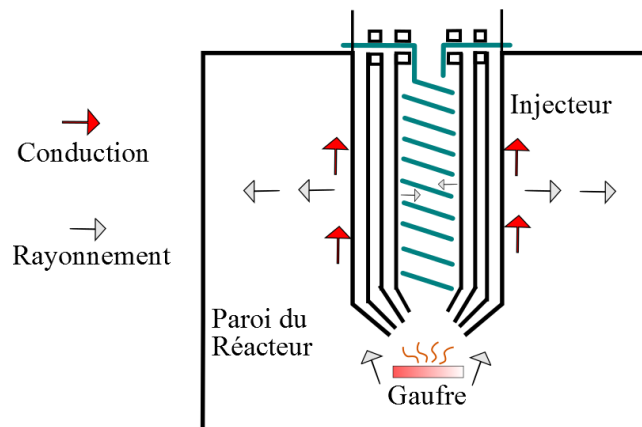


Figure 19: Concept de gestion de la température

Le concept du système de refroidissement a été également choisi en fonction de sa simplicité. En effet, son installation est très simple. Les bouts de la bobine sont soudés à la pièce d'alignement des parois d'injecteur. Ainsi, après avoir installé toutes les parois sur celle-ci, l'assemblage de l'injecteur et son système de refroidissement est prêt à être installé dans le réacteur. À l'aide d'un conduit machiné dans la pièce d'alignement, seulement deux soudures au bout du tuyau de forme hélicoïdale permettent d'avoir un circuit d'eau froide dans l'injecteur avec un minimum de soudure.

## 4.5 Modèle analytique

Le modèle analytique est divisé en trois sections. Elles sont présentées dans ce chapitre avec leurs hypothèses et leurs calculs. Voici un schéma représentant les diverses étapes.

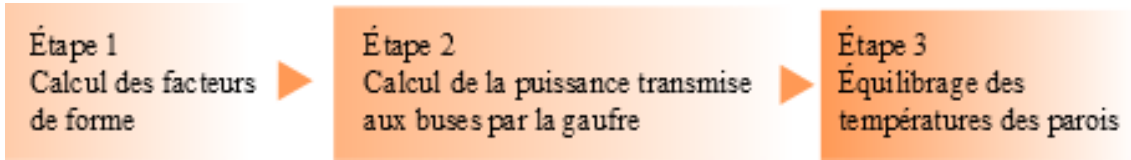
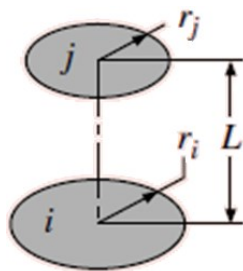


Figure 20: Les trois étapes du modèle analytique

### 4.5.1 Facteur de forme

Cette section obtient les facteurs de forme entre la gaufre et chacune des parois de l'injecteur. Ce calcul permet de déterminer la portion de radiation quittant la gaufre qui atteint les parois. La gaufre étant la surface la plus chaude, elle est considérée comme la source. Afin de simplifier le calcul, une hypothèse a été posée; les buses des injecteurs sont des surfaces parallèles à la gaufre. Des équations tirées du livre de Moran et Shapiro [11] sont utilisées pour ce calcul. La surface  $i$  représente la source.



$$F_{ij} = \frac{1}{2} \left\{ S - \left( S^2 - 4 \left( \frac{r_j}{r_i} \right)^2 \right)^{\frac{1}{2}} \right\} \quad (4.6)$$

$$S = 1 + \frac{1 + R_j^2}{R_i^2} \quad (4.7)$$

$$R_i = r_i / L ; R_j = r_j / L \quad (4.8)$$

Figure 21: Schéma de calcul de facteur de forme

Les parois concentriques de l'injecteur, vues de la gaufre, ne sont pas des disques, mais des anneaux. Or, nous ne pouvons pas utiliser directement les valeurs des équations pour obtenir le résultat du facteur de forme entre la gaufre et une paroi. Il faut plutôt calculer la

différence entre les résultats de deux disques : le diamètre extérieur et intérieur de l'anneau représentant une paroi. En somme, cette étape permet de calculer les quatre facteurs de formes entre la gaufre et chacune des parois de l'injecteur.

#### 4.5.2 Calcul de la puissance transmise aux buses

Pour calculer la puissance émise par la gaufre à chacune des parois, l'équation 4.5 est utilisée. Il faut alors définir l'aire de la gaufre, son émissivité, sa température et l'émissivité de la buse de l'injecteur. Par la suite, il faut estimer la température finale de la buse de l'injecteur en fonction de la température de la gaufre. Avec la valeur du facteur de forme calculé précédemment, il est possible de calculer la puissance transférée à chaque buse.

$$q_1 = \frac{\sigma(T_1^4 - T_2^4)}{\frac{1 - \varepsilon_1}{\varepsilon_1 A_1} + \frac{1}{A_1 F_{12}} + \frac{1 - \varepsilon_2}{\varepsilon_2 A_2}} \quad (4.5)$$

Deux hypothèses ont été posées dans ce calcul :

- La puissance transmise par la gaufre est envoyée au bout des buses de l'injecteur;
- La surface de la buse est égale à la surface de l'anneau utilisé pour calculer le facteur de forme;
- Le système est en régime établi et les corps sont considérés comme gris et diffus.

#### 4.5.3 Équilibre des parois

En sachant la puissance injectée dans chaque paroi, il faut maintenant calculer leur température d'équilibre. Un bilan de transfert thermique sur chacune des parois est nécessaire. La figure 22 de la page suivante représente les entrées et les sorties de chaleur de chacune des parois.

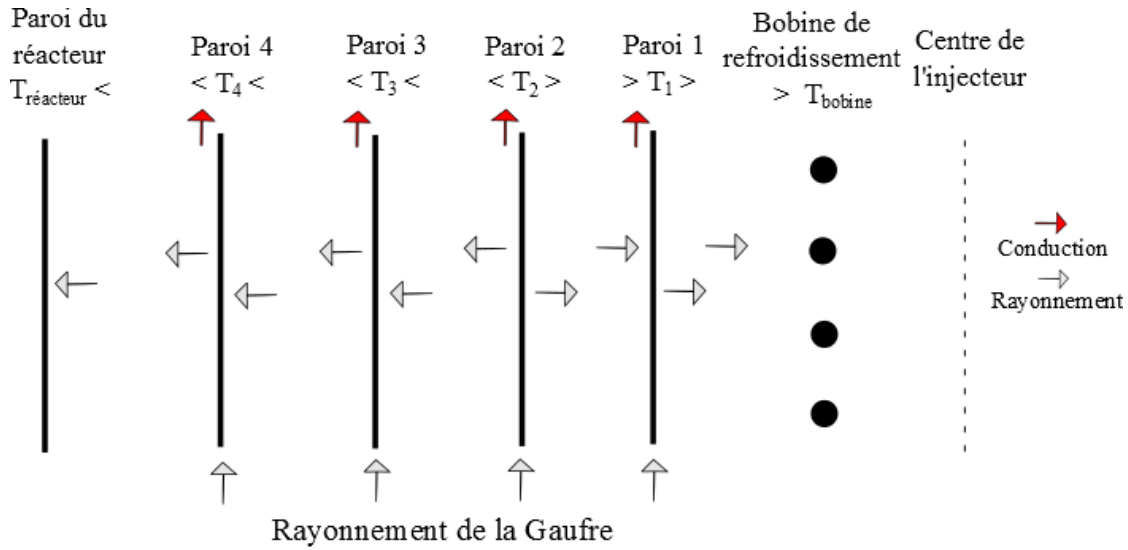


Figure 22 : Bilan d'échange thermique des parois

Afin de calculer l'échange radiatif entre chacune des parois, une relation pour des cylindres concentriques a été utilisée. Les équations sont tirées du livre de Moran et Shapiro [11].

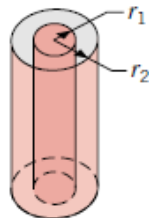


Figure 23 : Schéma de l'échange radiatif entre deux cylindres concentriques

$$\frac{A_1}{A_2} = \frac{r_1}{r_2}; \quad F_{12} = 1 \quad (4.9)$$

$$q_{12} = \frac{\sigma A_1 (T_1^4 - T_2^4)}{\frac{1}{\varepsilon_1} + \frac{1 - \varepsilon_2}{\varepsilon_2} \left( \frac{r_1}{r_2} \right)} \quad (4.10)$$

Pour la conduction entre la buse et la base des parois, l'équation (4,1) a été utilisée. Après avoir posé les constantes géométriques et les propriétés des matériaux, il est nécessaire de poser une température fixe de paroi de réacteur et de bobine de refroidissement. Par la suite, une étape d'équilibrage des températures moyennes des parois de l'injecteur a lieu par itération. Le solveur avec le logiciel Excel converge vers un équilibre des entrées et des sorties thermiques des quatre parois de l'injecteur.

Voici les hypothèses utilisées lors de cette étape :

- La géométrie des buses et de la bobine de refroidissement sont négligées, toutes les parois sont considérées comme des cylindres concentriques de longueur infinie;
- Le système est en régime établi et les corps sont considérés comme gris et diffus;
- Les températures de la bobine de refroidissement, de la paroi du réacteur et de la base des parois de l'injecteur sont considérées fixes;
- Le profil de température entre la buse de l'injecteur et sa base est linéaire;
- La température médiane entre la buse de l'injecteur et sa base est utilisée pour l'échange radiatif entre les parois.

Plusieurs hypothèses diminuent la précision du modèle, mais le simplifie considérablement. Le modèle analytique est seulement une solution rapide pour obtenir un ordre de grandeur sur les températures possibles des buses. Des résultats préliminaires permettront d'ajuster certains paramètres tels que l'émissivité de l'acier inoxydable électro-poli, la surface équivalente de la bobine de refroidissement et la température de la base de l'injecteur. Par exemple, les premières simulations ont permis de démontrer que la conduction est responsable du retrait de 10 à 20 % de la chaleur selon la paroi. En somme, ce modèle est une version simple et rapide de l'échange thermique dans l'injecteur. Une fois appuyé par un modèle numérique, il sera très rapide d'observer les paramètres à modifier pour diminuer la température de l'ensemble.

## 4.6 Modèle numérique

Le modèle numérique est réalisé sur le logiciel *Ansys*. Des analyses thermiques stationnaires par conduction, radiation et convection sont modélisables. Dans notre cas, il est intéressant de vérifier le régime permanent du système. Les sections suivantes présenteront en détail le modèle.

### 4.6.1 Modèles 3D de l'injecteur et du suscepteur

Le modèle utilisé dans le logiciel *Ansys* a été importé du logiciel *Solidworks*. Le modèle est constitué des parois de l'injecteur, de la bobine de refroidissement et du suscepteur. Cette dernière est la pièce qui permet le transfert de la gaufre à l'intérieur du réacteur. Cette pièce atteint les mêmes températures que la gaufre. Étant légèrement plus grande que la gaufre, elle représente plus précisément la source de chaleur des parois de l'injecteur. Des images des modèles 3D du logiciel *Solidworks* et *Ansys* sont présentées ci-dessous.

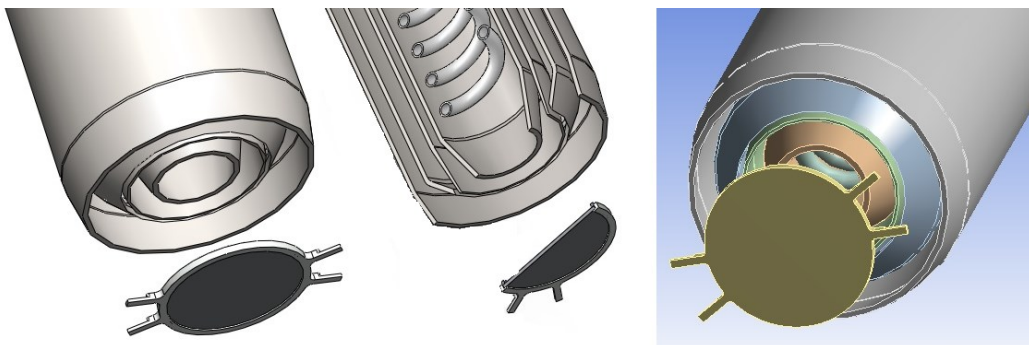


Figure 24: Modèle *Solidworks*, vue de coupe du modèle *Solidworks* et modèle *Ansys* des parois de l'injecteur

L'acier inoxydable 304 a été appliqué comme matériau à chacune des géométries du modèle. Pour le suscepteur, la sorte de matériau n'est pas importante, car sa température et son émissivité seront fixées tout au long de la simulation.

### 4.6.2 Hypothèses

Voici les hypothèses utilisées pour ce modèle :

- La présence du bouclier de chaleur de l'élément chauffant est négligeable pour la température finale de l'injecteur;
- Les températures de la bobine de refroidissement, de la paroi du réacteur et de la base des parois de l'injecteur sont considérées fixes et uniformes;
- L'émissivité du suscepteur est 1.

### 4.6.3 Paramètres du maillage

Le maillage par défaut a été utilisé. Un raffinement général du maillage n'a montré aucun changement majeur des résultats malgré un temps de résolution plus long. Un aperçu du maillage des parois est présenté à la page suivante.

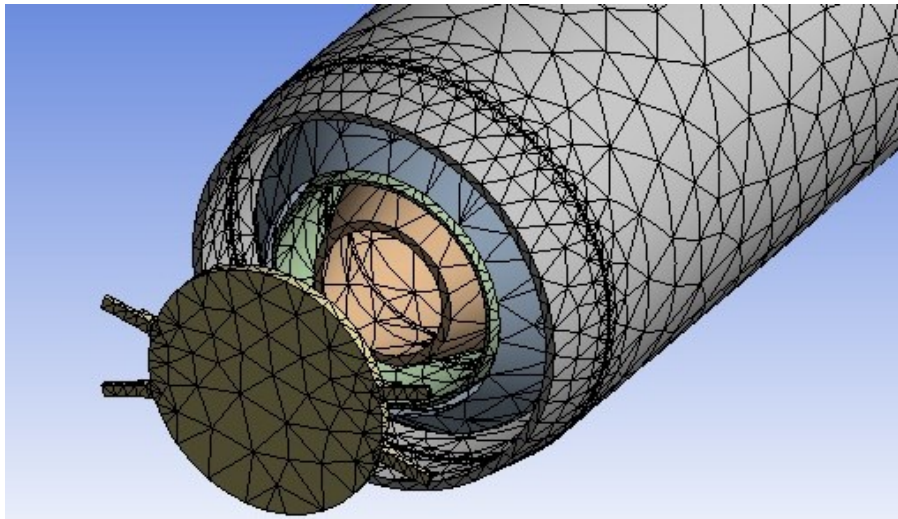


Figure 25: Aperçu du maillage par défaut de l'injecteur

### 4.6.4 Définition des chargements et des conditions limites

Pour l'analyse thermique stationnaire, les températures de différentes parois ont été fixées. Cette analyse permet d'avoir un profil de température initiale pour l'analyse thermique transitoire. Les températures de la bobine de refroidissement et de la base de l'injecteur sont des hypothèses choisies en fonction de la température et du débit du liquide de refroidissement. Pour les buses de l'injecteur, les résultats du modèle analytique sont utilisés. Finalement, la température du susceptible est choisie.

### 4.6.5 Paramètres d'analyse

Afin d'atteindre un régime permanent, on peut fixer la durée de l'analyse transitoire à 1 heure. Malgré des températures initiales erronées, les températures des parois ont le temps de converger. Pour le reste des paramètres, les valeurs par défaut sont sélectionnées.

### 4.6.6 Solutions recherchées

La solution cherchée pour l'analyse thermique stationnaire est le profil de température de l'ensemble des parois. Il est inutile de diviser la solution en plusieurs sections, car la vue d'ensemble est suffisante pour valider l'analyse. De plus, il est intéressant d'observer le flux de chaleur des conditions limites telles que le suscepteur et la bobine de refroidissement. Cela permet de vérifier la puissance radiative dégagée par les sources de chaleur et celle absorbée par les puits de chaleurs. Finalement, l'outil de rayonnement permet d'avoir un bilan d'échange radiatif sur chacune des parois désirées.

Ce modèle permet de développer les grandes lignes d'un système de refroidissement final. Les résultats des premières analyses ont permis d'améliorer la compréhension du système.

## 4.7 Résultats préliminaires des simulations

Certains résultats des simulations peuvent aider à mieux comprendre le comportement thermique de l'injecteur. En vérifiant la quantité de chaleur retirée par conduction et par radiation de chacune des parois de l'injecteur, il est possible de vérifier l'importance de chacun de ces paramètres pour mieux diriger ces choix. Le tableau 6 de la page suivante présente les résultats d'un exemple de simulation analytique ayant une source de chaleur de 2 po de diamètre à 925°C avec une émissivité de 1. La température du réacteur est de 60°C et la bobine de refroidissement de 25°C. L'émissivité de la bobine, de l'injecteur et du réacteur sont de 0,45. Il est possible de voir la quantité de chaleur absorbée provenant de la gaufre et des



parois voisines, la chaleur retirée par conduction et par radiation. Les dimensions utilisées pour les simulations sont présentées dans les plans de fabrication abrégés dans l'annexe 1.

**Tableau 6: Exemple de chemins thermiques de l'injecteur**

	Injecteur 1	Injecteur 2	Injecteur 3	Injecteur 4
Température buse (°C)	348	368	330	228
Radiation injectée de la gaufre (W)	23,2	24,2	28,7	26,1
R injectée de paroi(s) voisine(s) (W)	5,9	0	12,7	35,0
R rejetée vers paroi(s) voisine(s) (W)	24,9	18,7	35,0	56,4
Puissance rejetée par conduction (W)	4,2	5,5	6,3	4,8

Ces résultats démontrent bien l'impact de la radiation entre les parois. La faible conductivité thermique de l'acier inoxydable, la faible épaisseur et les longues parois sont responsable de ce comportement.

Par la suite, afin de comparer les modèles analytique et numérique, deux températures différentes de gaufre ont été utilisées avec deux émissivités différentes. Les deux températures sont 500°C et 800°C. Cela permet de vérifier que la température des parois de l'injecteur varie proportionnellement à la variation de la température de la gaufre. La température de la bobine de refroidissement et de la base de l'injecteur est fixée à 20°C et 25°C, soit la température de l'eau de refroidissement. La température de paroi du réacteur est estimée à 20°C et 40°C. Pour l'émissivité, cela permettra de vérifier s'il est mieux d'avoir une surface polie ou rugueuse pour l'injecteur. L'émissivité de l'acier inoxydable 304<sup>1</sup> poli est d'environ 0,25 et de 0,6 pour une surface sablée à 200°C. Ces deux valeurs sont utilisées. Pour le suscepteur, l'émissivité a été fixée à 1 tandis que la bobine de refroidissement a été fixée à 0,45. Les résultats obtenus sont présentés au tableau 7 de la page suivante.

<sup>1</sup> Table of total emissivity – [www.monarchinstrument.com](http://www.monarchinstrument.com)

Tableau 7: Résultats des simulations analytiques et numériques pour 4 différentes situations

	Analytique				Numérique			
Température du réacteur (°C)	20	20	40	40	20	20	40	40
Température bobine (°C)	20	20	25	25	20	20	25	25
Température gaufre (°C)	500	500	800	800	500	500	800	800
Émissivité Bobine & Réacteur	0,45	0,45	0,45	0,45	0,45	0,45	0,45	0,45
Émissivité Injecteur	0,25	0,6	0,25	0,6	0,25	0,6	0,25	0,6
Émissivité Gaufre	1	1	1	1	1	1	1	1
Température paroi 4 injecteur (°C)	73	65	199	168	78	80	200	202
Température paroi 3 injecteur (°C)	113	100	299	251	98	97	252	240
Température paroi 2 injecteur (°C)	124	115	322	281	113	115	284	277
Température paroi 1 injecteur (°C)	106	109	275	266	113	117	277	278

## 4.8 Discussion

Il est possible d'observer par les deux modèles qu'une émissivité élevée permet d'augmenter la transmission entre les parois car la différence de température entre les parois adjacentes diminuent lorsque l'émissivité est augmentée. Cependant, les résultats ne montrent pas clairement une réduction de la température des buses. Cela est dû au fait que l'injecteur absorbe plus de chaleur avec une émissivité plus élevée. Entre 500°C et 800°C, le profil de température reste semblable, pour les deux modèles. Il est alors possible d'estimer le profil avec la température d'une seule paroi; ce qui est un avantage pour les tests physiques.

Par ailleurs, le concept de refroidissement de base est restreint par plusieurs contraintes géométriques. Par exemple, la bobine de refroidissement est limitée par l'accès optique en son centre et la difficulté de sa fabrication. Un seul facteur peut être modifié pour modifier l'absorption et la transmission de chaleur provenant du susceptible, l'émissivité des parois. En minimisant l'émissivité des buses de l'injecteur, une quantité inférieure de chaleur est absorbée dans l'injecteur. En augmentant l'émissivité des parois de l'injecteur, la transmission de chaleur est augmentée ce qui permet de réduire la différence de température entre les parois de la bobine de refroidissement, les parois du réacteur et les parois de l'injecteur. En somme, les parois de l'injecteur et la bobine de refroidissement doivent avoir la plus grande émissivité possible. Pour les buses et le dessus du susceptible, une émissivité très faible est l'idéal.

## 4.9 Optimisation

Afin de vérifier le concept proposé à la section précédente, un modèle numérique a été réalisé avec des émissivités différentes au niveau de la buse et de la paroi du réacteur. Les résultats de ces simulations sont présentés au tableau 8.

**Tableau 8: Résultats des simulations avec une émissivité faible sur les buses et élevée sur les parois**

	Numérique	
Température du réacteur (°C)	20	40
Température bobine (°C)	20	25
Température gaufre (°C)	500	800
Émissivité Bobine & Réacteur	0,45	0,45
Émissivité Buses/Parois Injecteur	0,25/0,6	0,25/0,6
Émissivité Gaufre	1	1
Température paroi 4 injecteur (°C)	70	182
Température paroi 3 injecteur (°C)	87	222
Température paroi 2 injecteur (°C)	102	257
Température paroi 1 injecteur (°C)	106	261

La température a diminué pour toutes les parois par rapport aux meilleurs résultats obtenus dans les analyses numériques. Cette diminution est d'au moins 5°C pour les parois à 500°C et un minimum de 15°C à 800°C. Suite à l'optimisation, les températures obtenues lors des simulations atteignent les objectifs. Il est alors possible de passer à la fabrication. Cependant, si les températures des buses atteignent des températures plus élevées, il est possible qu'un dépôt se forme et augmente leur émissivité. Une vérification des buses sera nécessaire après 1 an.



# CHAPITRE 5      CONCEPTION DE

## L'ASSEMBLAGE

Après avoir obtenu une forme optimale pour l'injecteur et un concept de refroidissement, un nouveau défi est lancé; la fabrication. Malgré le fait qu'un des critères de la forme était qu'elle soit réalisable, une série de concepts doit être lancée afin de diminuer au maximum les coûts de fabrication, assurer la répétabilité et la fiabilité en plus d'être facilement installable dans le réacteur. Ce chapitre présentera le cahier de charge et le concept de cet assemblage.

### 5.1 Analyse des besoins et cahier des charges

Les performances de l'injecteur dépendent de la géométrie de celui-ci. Afin de s'assurer d'obtenir des résultats similaires aux simulations, l'injecteur se doit d'être identique à celui qui a été simulé. Pour ce faire, il faudra choisir les tolérances dimensionnelles et géométriques qui permettront d'avoir le meilleur compromis entre coût de fabrication, précision et reproductibilité. Par ailleurs, le port de 4 pouces de diamètre du dessus est le seul endroit où l'injecteur peut être inséré dans le réacteur. Or, la base de l'injecteur devra se fixer facilement à ce port de type *Conflat*. Le poids doit permettre l'installation et la manutention par une seule personne. De plus, chaque paroi de l'injecteur doit être usinée indépendamment à cause de leur forme complexe. Afin de bien positionner les parois, la base de l'injecteur doit fixer en place chacune de celle-ci tout en permettant au pyromètre et au capteur de réflectivité un accès au centre de la gaufre. Afin de nuire au minimum au déplacement des gaz, la base de l'injecteur doit séparer les deux injecteurs tout en maintenant une conductance maximale.

Finalement, une entrée d'eau ainsi qu'une sortie doit alimenter le tuyau hélicoïdal de refroidissement. Le cahier de charges fonctionnelles pour l'assemblage ainsi que les notes à la conception sont présentées à la page suivante.

Tableau 9: Cahier des charges fonctionnelles de l'assemblage

Fonction	Spécification	Niveau	Flexibilité	Mesure	Raison
Installable par une personne	Poids	8 kg	Maximum	Balance	Un poids trop élevé rend la manœuvre plus difficile
Installable dans le port 4 pouces	Dimension hors tout	4 po	Maximum	Vernier	C'est le point de fixation de l'injecteur
Fixer la position de l'injecteur par rapport à la gaufre	Tolérance de positionnement	+/- 0,005 pouce	Maximum	Vernier	Représenter au maximum le résultat des simulations faites par ordinateur

Tableau 10: Notes à la conception de l'assemblage

Fonction	Spécification	Niveau	Flexibilité	Raison
Conserver un accès optique au centre de l'injecteur	Positionnement	-	-	Utilisation d'un pyromètre pour évaluer la température de la gaufre. L'accès perpendiculaire à la surface est nécessaire
Être fiable	Résistance aux fissures	0	Maximum	Introduction de molécules néfaste à l'intérieur du réacteur et dans la gaufre
Posséder une entrée/sortie d'eau de refroidissement	-	-	-	L'alimentation en eau pour le circuit de refroidissement doit se faire par cet assemblage
Conserver une conductance élevée	Conductance	-	-	La conductance de la base de l'injecteur doit être supérieure à celle des tuyaux d'admission des gaz

## 5.2 Concept de l'assemblage

L'assemblage est divisé en trois sections : la base, la bobine de refroidissement et les parois.

### 5.2.1 La base de l'injecteur

La pièce maîtresse de l'assemblage est la base de l'injecteur. Elle provient d'une pièce brute de port *Conflat* double face faite d'acier inoxydable 304. L'avantage de cette pièce est que l'usinage de précision pour se fixer au port *Conflat* du réacteur a déjà été réalisé. Grâce à

des appuis radiaux et des trous de fixation, la base de l'injecteur permet de positionner précisément les parois de l'injecteur rapidement et de façon reproductible. Pour ce qui est des trous d'injection, des rainures radiales de la largeur de chaque injecteur ont été réalisées afin de maximiser la conductance. Des renforts étaient nécessaires pour supporter les sections centrales de la pièce. Ainsi, il était alors possible d'avoir de la matière pour faire un conduit d'alimentation en eau jusqu'au milieu de l'injecteur. Voici quelques images de la base de l'injecteur.



Figure 26: Aperçu de la pièce brute et de la pièce usinée

### 5.2.2 La bobine de refroidissement

La bobine de refroidissement est essentielle au contrôle en température de l'injecteur. La bobine doit absorber le maximum de chaleur au centre de l'injecteur. Or, pour le refroidissement, il est possible d'augmenter la surface de la bobine pour augmenter son absorption. Cependant, le système actuel est limité par le fait qu'il faut conserver le chemin optique au centre de la bobine pour le fonctionnement du pyromètre et du laser. Dû à la méthode de fabrication, il est plus difficile de maintenir un nombre élevé de tour de tuyau comparativement à une autre méthode qui obstrue partiellement le centre de la bobine.

Par ailleurs, la fixation du tuyau se fait à la base de l'injecteur par la soudure de ses deux embouts. Cela permet d'avoir le minimum de soudure possible sur le circuit de refroidissement. Deux images du tuyau de refroidissement sont présentées à la page suivante.



Figure 27: Aperçu du tuyau de refroidissement plié



Figure 28: Aperçu du tuyau de refroidissement nettoyé et soudé



### 5.2.3 Les parois de l'injecteur

Pour être fidèle au modèle numérique, une paroi dans la base de l'injecteur doit être usinée précisément afin de permettre un bon alignement. L'épaisseur des parois est un compromis entre l'usinabilité, le poids et la conduction thermique. Les parois étant très longues, il est difficile pour un tour d'usiner précisément l'intérieur. Lorsque l'outil de coupe est au bout de la paroi, des vibrations peuvent nuire au fini de surface. Une paroi plus épaisse permet de diminuer ces vibrations. De plus, une paroi épaisse permet d'augmenter la conduction de la chaleur vers la base de l'injecteur, qui est refroidi à l'eau. Le matériel utilisé est l'acier inoxydable 304 pour sa résistance à la corrosion, son prix abordable, son usinabilité et son faible taux de désorption. Un fini électro-poli a été choisi pour le bout des parois afin de diminuer au maximum l'émissivité. Le restant des parois a été sablé par jet de sable afin d'avoir une émissivité plus élevée pour augmenter le refroidissement par échange radiatif. Voici quelques images des parois.

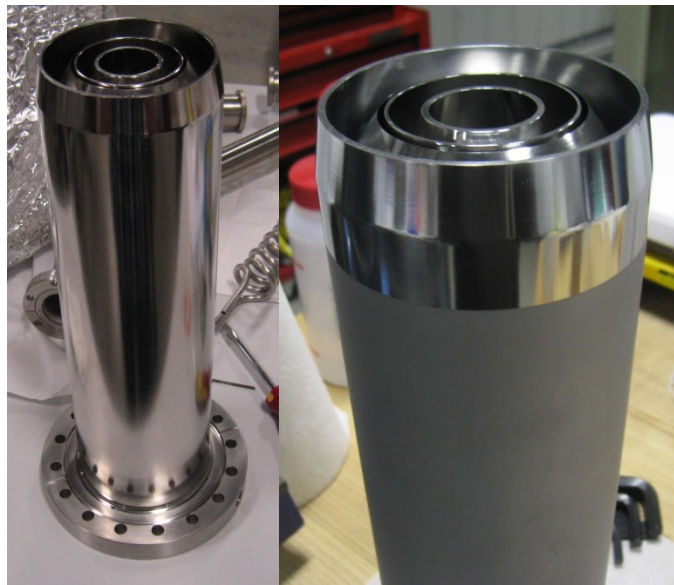


Figure 29: Aperçu de l'injecteur fabriqué, assemblé et avec le fini de surface modifié

La prochaine étape consiste à amorcer les tests de l'injecteur dans le réacteur. Les méthodes de caractérisation des résultats sont présentées au prochain chapitre.



# CHAPITRE 6 MÉTHODE DE CARACTÉRISATION DES RÉSULTATS

Certains aspects d'un dépôt de GaN sont difficilement caractérisables. De plus, il est nécessaire de trouver des moyens de comparer les résultats de différentes techniques de croissance. Ce chapitre discutera des méthodes qui seront utilisées afin de vérifier l'efficacité du dépôt et d'injection, l'uniformité du dépôt et d'injection, l'influence de la rotation et le refroidissement des parois de l'injecteur.

## 6.1 Validation de l'efficacité

L'efficacité d'injection peut être définie de différentes façons. Dans le cadre des simulations, l'efficacité d'injection est définie comme étant le pourcentage de molécule injectée atteignant directement le substrat. Cependant, dans le réacteur, des molécules qui ont touché le substrat peuvent ne pas participer à la réaction chimique. Même que certaines qui proviennent des parois du réacteur peuvent réagir. Or, la précédente définition de l'efficacité est adéquate pour les simulations, mais ne représente pas directement ce qui peut se produire dans le réacteur. Ainsi, le pourcentage de molécule injectée se déposant sur la gaufre est une définition plus appropriée.

En sachant la taille de la gaufre, il est possible d'avoir le taux volumique de croissance. Ainsi, le rapport de taux volumique de croissance sur les débits de gaz injectés permettrait de comparer les efficacités d'incorporation. Finalement, il y a la densité de défaut de la couche mince. Une couche très rugueuse et poreuse aura une densité volumique plus faible et une épaisseur très variable. Ces défauts rendent la densité difficile à calculer précisément. Dans le cadre de ces travaux, les échantillons très rugueux et poreux ne seront pas utilisés dans la comparaison des performances.

L'équation ci-dessous présente la différence entre l'efficacité d'injection ( $Eff_{injection}$ ) et l'efficacité de dépôt ( $Eff_{dépôt}$ ). Cela est également un résumé des mécanismes entre l'injection d'une molécule et son incorporation dans la couche tel que, le pourcentage d'incorporation et le pourcentage de désorption.

$$Eff_{dépôt} = \frac{\text{Molécule incorporées}}{\text{Molécule injectées}} = Eff_{injection} * (\%_{incorporation} - \%_{désorption}) \quad (6.1)$$

Pour la validation du modèle numérique du groupe III, en posant les hypothèses que la molécule a un taux d'incorporation de 100%, un taux de désorption de 0%, il est possible de comparer l'efficacité de dépôt et l'efficacité d'injection. Ces hypothèses sont possibles à condition de maintenir une température de croissance suffisamment élevée pour avoir un taux de décomposition d'ammoniaque élevé et un taux de désorption faible. Dans tous les cas, cette comparaison sera une évaluation pessimiste de l'efficacité d'injection, car l'incorporation est en réalité inférieure à 100% et la désorption supérieure à 0%.

Une autre méthode peut vérifier les performances de l'injecteur. En utilisant une jauge ionique de pression et en mesurant l'intensité du flux sous l'injecteur, il est possible d'avoir un profil de pression. La pression est directement reliée au flux des gaz entrant dans la jauge. C'est la même méthode que celle utilisée dans le réacteur expérimental. En supposant que le flux est pratiquement nul lorsqu'on est loin de l'injecteur, la pression de base est obtenue et il est possible d'obtenir le profil d'injection net. Cependant, cette méthode contient plusieurs sources d'erreurs : le flux atteignant la jauge peut provenir des murs du réacteur, la forme géométrique de la jauge influence le flux et la précision de la jauge varie en fonction de la pression. Toutefois, ce test permettrait de valider le modèle numérique, car l'influence de la température, le taux d'incorporation et de désorption n'aurait pas lieu. Il est possible de vérifier d'une part l'efficacité et l'uniformité du flux. Une image du montage de la jauge est présentée à la page suivante.

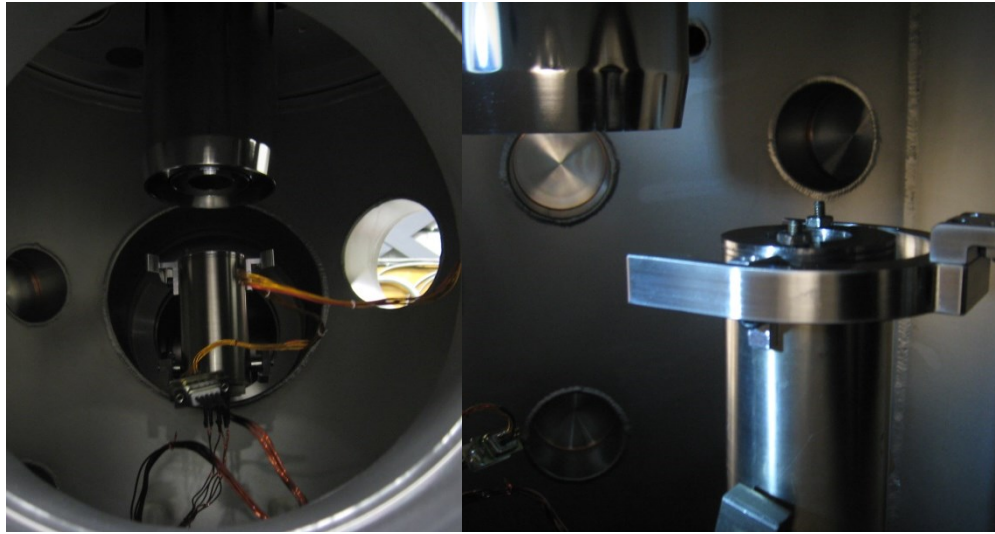


Figure 30: Aperçu du montage avec jauge de pression pour flux d'injection de l'injecteur final

## 6.2 Validation de l'uniformité

L'uniformité est un élément important pour la fabrication de dispositif sur le semi-conducteur. Peu de méthodes permettent de mesurer celle-ci sans détruire la gaufre. La contrainte due à la différence de largeur de maille entre la gaufre et le semi-conducteur courbe la gaufre ce qui ne permet pas à un profilomètre de mesurer précisément la couche déposée. Il est possible d'utiliser des masques qui traversent la gaufre afin de mesurer la différence d'épaisseur à plusieurs endroits. Cependant, il est possible que ce masque ait modifié l'état de la surface et du coup, la croissance. De plus, ces masques rendent la gaufre plus ou moins utilisable.

Lorsqu'on clive la gaufre, il est possible d'observer une coupe transversale. Des appareils tels que la microscopie électronique à balayage (MÉB) permettent d'obtenir une image de l'interface et de mesurer l'épaisseur de la couche déposée en chaque point. Un exemple d'image de MÉB sur une couche de GaN/AlN/Si réalisée avec le réacteur LÉA-GaN est présenté à la page suivante. On peut vérifier précisément l'épaisseur des couches.

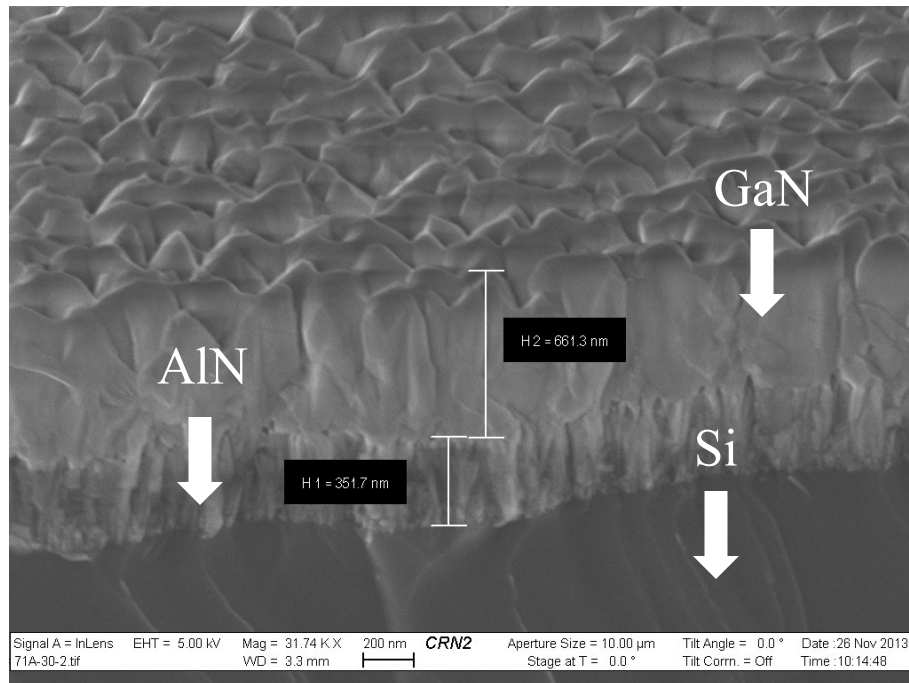


Figure 31: Image MEB de l'interface de l'échantillon 71A GaN/AlN sur Si

Une autre méthode est l'ellipsométrie. La difficulté de cette méthode est qu'un modèle doit être créé afin de convertir les données optiques brutes en une épaisseur totale. En combinant cette méthode optique non destructive au MEB, il est ainsi possible de développer des modèles fiables et d'arrêter de cliver les échantillons pour obtenir des mesures d'épaisseur.

Par ailleurs, la rugosité de surface est un indice de qualité au niveau de la croissance. Cette rugosité peut être obtenue par profilomètre pour de grandes dimensions. Pour une évaluation de l'ordre du nanomètre, un microscope à force atomique (MFA) est l'idéal. Une mesure sera réalisée afin de confirmer que la rugosité n'affecte pas les mesures d'épaisseurs.

Une mince couche d'AlN sur silicium sera utilisée afin de vérifier les performances de dépôts. La faible épaisseur permet de diminuer l'effet de porosification et de croissance 3D. Le dépôt de GaN aurait permis une analyse plus près de l'application finale, mais le dépôt d'une couche d'AlN de transition avec le GaN augmente le nombre de variable. Des tests de dépôt de GaN sur GaN ont été évalués, mais la variance au niveau de l'épaisseur de la couche initiale ne permet pas une mesure précise du matériel déposé.

En sommes, pour valider la performance de l'injecteur, la caractérisation débutera avec un profil d'injection obtenu avec la jauge ionique. Par la suite, une analyse par MÉB sur les échantillons d'AlN permettra d'obtenir les premières données d'uniformités et de bâtir des modèles pour l'ellipsomètre. Finalement, une analyse par MFA recueillera la rugosité de surface du semi-conducteur.

### 6.3 Validation de la température

Des simulations ont été réalisées afin de s'assurer que les parois de l'injecteur n'atteignent pas une température suffisante pour décomposer les molécules chimiques. Pour valider ces simulations, il faut surveiller la température des parois en fonction des températures de gaufre simulée. Des données recueillies autour de 800°C permettront de comparer avec les simulations. L'endroit d'intérêt sur les parois est les buses parce qu'elles sont le point le plus chaud. Cependant, l'accès à ces buses est très restreint. Certaines parois n'ont aucun chemin optique. La seule paroi accessible est l'extérieur. Afin d'avoir un suivi constant de la température de la paroi, l'utilisation d'un thermocouple de type C (pour le vide et la haute température) est envisagée. Ce thermocouple surveillera en tout temps la température de la paroi extérieure et la valeur sera enregistrée dans le registre de l'ordinateur.

Le défaut principal de cette installation est qu'il mesure le point le plus froid et non le plus chaud. De plus, il est impossible de vérifier l'exactitude de la différence de température entre la paroi du milieu et l'extérieur de l'injecteur. Néanmoins, en comparant les résultats avec ceux des simulations, il est possible d'estimer la paroi intérieure et de vérifier si elle est loin ou près des températures critiques. Dans le cas où les valeurs estimées seraient trop près des valeurs critiques, il faudrait envisager une nouvelle installation pour vérifier ces températures, surtout si le système a de mauvaises performances. L'image ci-dessous présente la position du thermocouple sur la paroi de l'injecteur extérieur.

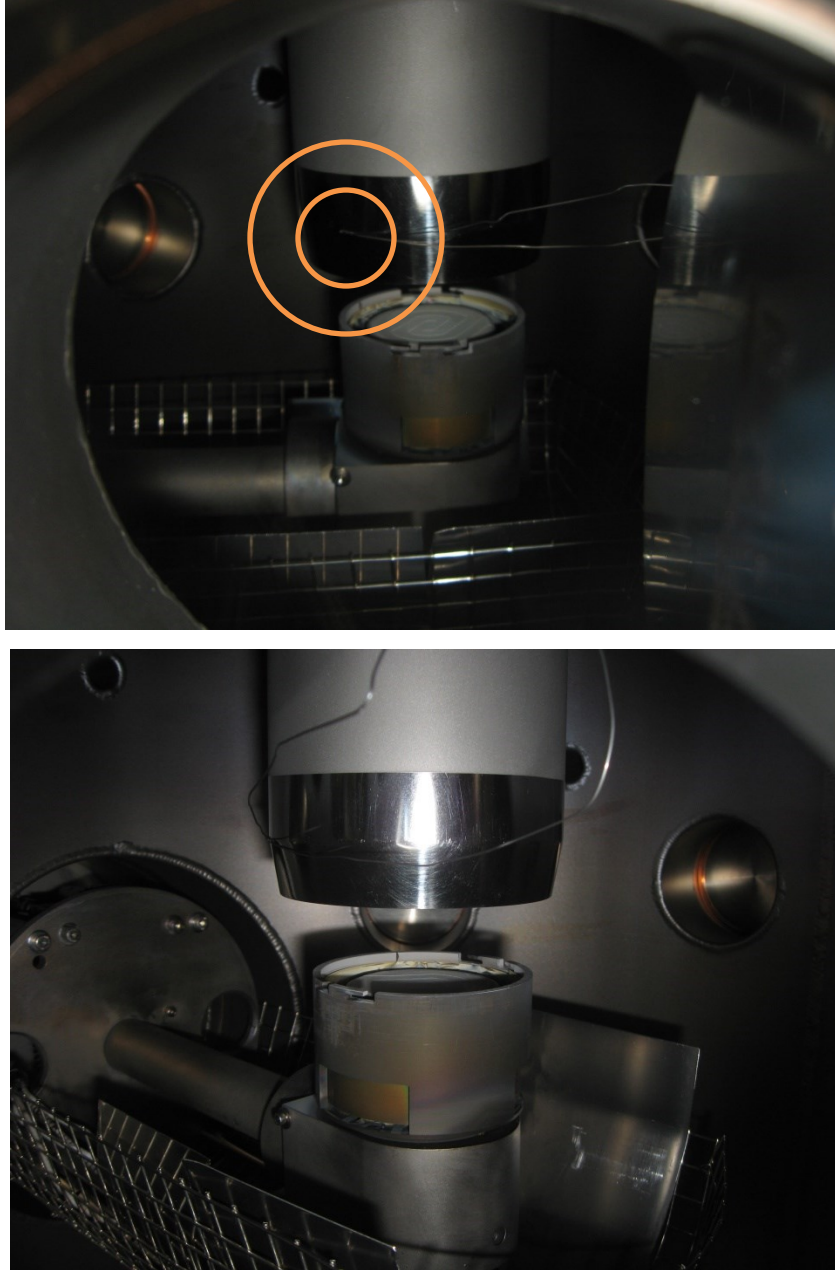


Figure 32: Aperçu de la position du thermocouple sur la paroi extérieure de l'injecteur

En somme, les outils pour évaluer les performances ont été définis pour chacun des aspects de l'injecteur. Le chapitre suivant présentera les résultats sur la performance de l'injecteur et une discussion de ceux-ci.



# CHAPITRE 7 RÉSULTATS ET DISCUSSION

Après environ 2 ans, la conception et la construction du réacteur furent complétées. Les essais ont pu débuter. Les résultats et les discussions seront présentés en trois sections : la validation de l'assemblage, la validation des performances d'injection et la validation de la gestion de la température.

## 7.1 Validation de l'assemblage

La première étape est d'installer les parois sur la base de l'injecteur et de l'installer à l'intérieur. Les critères à vérifier lors de l'assemblage sont présentés ci-dessous. Des détails de l'état de leur réussite sont également présentés.

**Tableau 11: Cahier des charges fonctionnelles de l'assemblage**

Fonction	Spécification	Niveau	Résultat	Détails
Installable par une personne	Poids	8 kg	7,6 kg	Le poids était suffisamment léger pour qu'une personne seule puisse installer facilement l'injecteur dans le réacteur. Les sorties des tuyaux de refroidissement donnent une bonne prise.
Installable dans le port 4 pouces	Dimension hors tout	4 po	3,74 po	Le diamètre extérieur de l'injecteur de 3,74 po permet une installation simple dans le réacteur.

**Tableau 12: Notes à la conception de l'assemblage**

Fonction	Spécification	Résultat	Détails
Conserver un accès optique au centre de l'injecteur	Positionnement	Réussi	Un accès optique de 1,15 po a été conservé au milieu de l'injecteur et du tuyau de refroidissement. Des mesures de pyrométrie et de réflectivité ont été réalisées avec succès
Être fiable	Résistance aux fissures	Réussi	Après 2 ans et près de 200 croissances, aucune fissure n'a été détectée.

Tableau 13: (Suite) Notes à la conception de l'assemblage

Fonction	Spécification	Résultat	Détails
Fixer la position de l'injecteur par rapport à la gaufre	Tolérance de positionnement	Réussi	La position des parois de l'injecteur a une tolérance de positionnement de +/-0,004 pouce.
Posséder une entrée/sortie d'eau de refroidissement	Géométrie	Réussi	L'alimentation en eau pour le circuit de refroidissement fonctionne.
Conserver une conductance élevée	Conductance	Réussi	La conductance de la fin de l'injecteur est supérieure à celle des tuyaux d'admission des gaz.

Voici différentes images liées à l'assemblage de l'injecteur dans le réacteur.

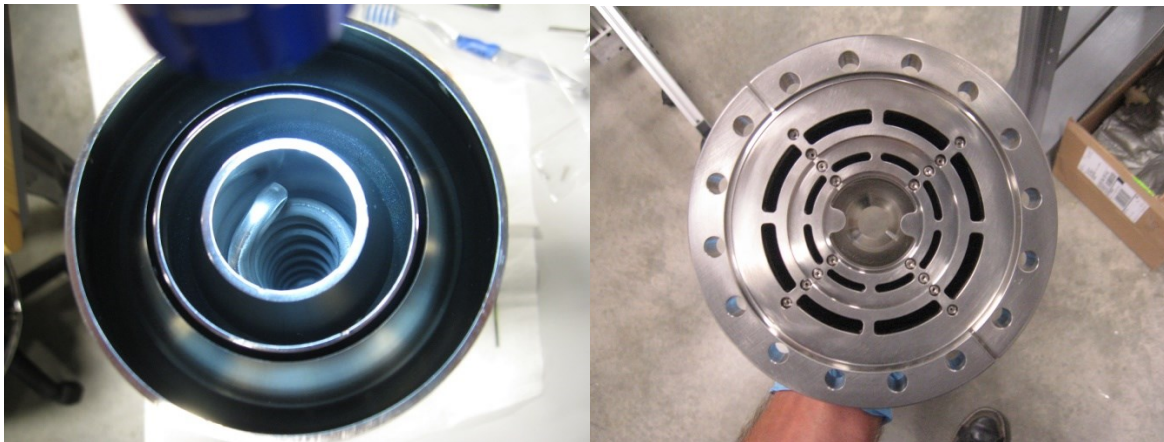


Figure 33: Vues rapprochées de la sortie et l'entrée de l'injecteur avant son installation dans le réacteur



Figure 34: Première photo de l'injecteur installé dans le réacteur

En somme, l'installation de l'injecteur a été une réussite et respecte son cahier de charge. La prochaine section discutera des performances de l'injection.

## 7.2 Validation des performances d'injection

Plus de 200 croissances ont été réalisées au courant des dernières années, celles-ci ont permis de vérifier les performances du réacteur dans son ensemble, les performances d'injection, mais surtout d'améliorer la compréhension de la dynamique de croissance du GaN à l'aide de l'ammoniaque et de triméthylgallium dans un réacteur ÉJC. Par exemple, la température de la gaufre s'est révélée un paramètre majeur dans la poursuite d'un dépôt uniforme et compliquera la vérification des performances directes de l'injection des gaz. Cette section présentera l'ensemble de la démarche afin de vérifier, comprendre et améliorer les performances de l'injecteur.

### 7.2.1 Étude du profil de pression sous l'injecteur à l'aide d'une jauge à pression

La première méthode utilisée pour vérifier les performances de l'injecteur dans le réacteur a été l'étude de profil de pression sous l'injecteur tel que présenté au chapitre 6. Les premiers profils mesurés ont présenté un grand écart par rapport aux résultats de simulations. Afin de recueillir le maximum d'information pour expliquer ces résultats, 9 configurations différentes d'injection d'azote ont été réalisées. Celles-ci sont présentées dans le tableau ci-dessous.

**Tableau 14: Détails des configurations d'injecteur utilisées pour caractériser**

Configuration	Distance jauge de pression et buse d'injecteur (pouces)	Parois injecteur	Injection	Débit injecté (Sccm)	Pompe turbo au centre de l'injecteur
A	2	III et V	Par V	5 à 200	Non
B	1.3	III et V	Par V	5 à 200	Non
C	2	III et V	Par III	5 à 200	Non
D	1.3	III et V	Par III	5 à 200	Non
E	2	III et V	Par III	0.2 à 5	Non
F	2	III	Par III	0.2 à 5	Non
G	2	III	Par III	0.2 à 5	Oui
H	2	III et V	Par III	0.2 à 5	Oui
I	2	III et V	Par V	0.2 à 5	Oui

Les graphiques ci-dessous présentent les résultats de profils de pression des différentes configurations ainsi que les résultats de simulation.

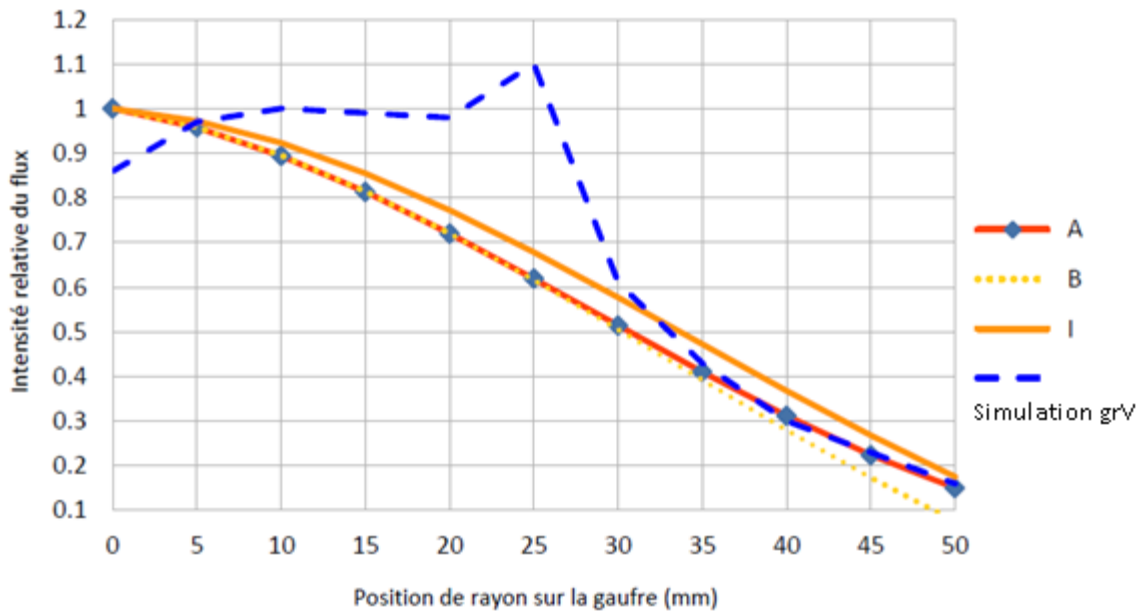


Figure 35: Profils de pression de différentes configurations d'injection d'azote par l'injecteur du groupe V

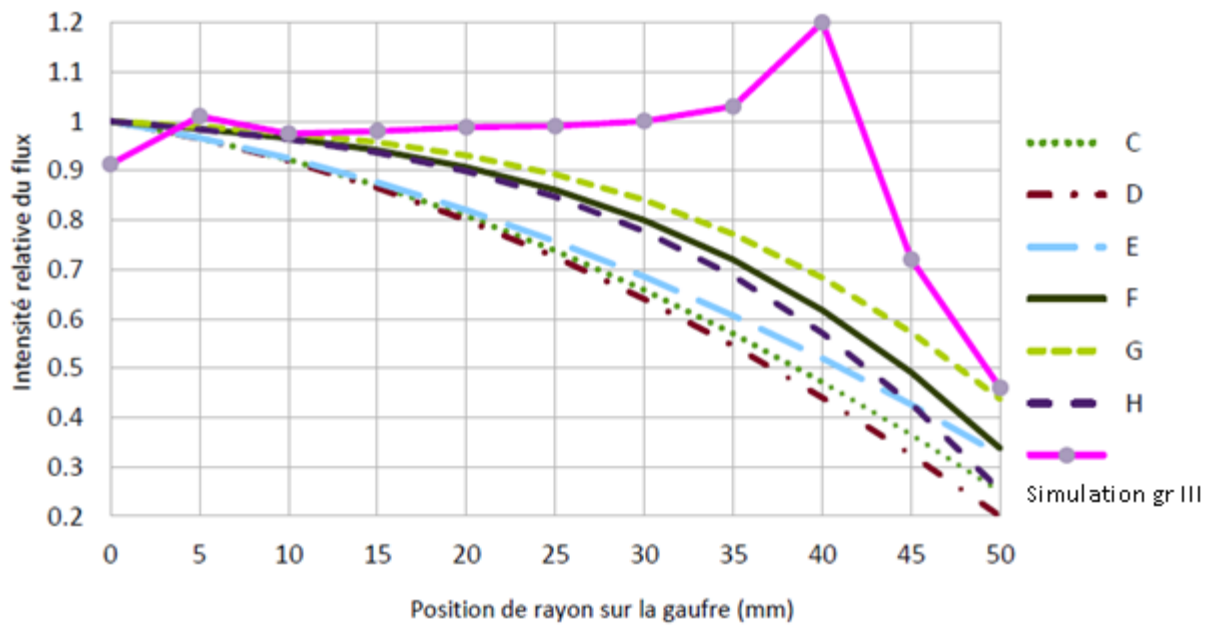


Figure 36 : Profils de pression de différentes configurations d'injection d'azote par l'injecteur du groupe III

Les premières configurations testées, A à B, ont indiqué que la distance entre la gaufre et la sortie de l'injecteur n'a pas besoin d'être très précise, car les profils à 1,3 ou 2 pouces de distance de la sortie de l'injecteur sont identiques. Par ailleurs, ceux-ci ont également démontré que les profils étaient identiques, peu importe la valeur du flux utilisée entre 20 et 200 sccm. Cependant, dans les deux configurations, le profil d'injection est différent de la simulation. Pour la configuration A, le profil donne une non-uniformité de 24% sur un rayon de 20 mm tandis que celui de la simulation donne 4.3%. Le même phénomène se produit avec la configuration C avec une non-uniformité de 13% au lieu de 2 %.

La première hypothèse était que le régime dynamique des gaz n'était plus moléculaire, mais plutôt transitoire. Pour une injection de 200 sccm d'azote, la pression dans le réacteur était de 0,3 mTorr. À cette pression, le libre parcours moyen de l'azote à température normale est 2 mètres ce qui est 2 ordres de grandeur plus grands que la largeur radiale entre les parois de l'injecteur. Cependant, il se peut que la pression locale dans les injecteurs soit plus élevée. Lors des mesures de pressions pour le profil, il a été possible d'observer que la pression était 15 fois à 30 fois plus élevée à la sortie de l'injecteur que dans le réacteur. Or, il devient alors possible que le régime soit près de devenir transitoire dans l'injecteur considérant que la pression à l'intérieur de celui-ci soit encore plus élevée. Un nouveau test d'injection (configuration E) a été réalisé à plus faible flux avec des pressions dans le réacteur autour de 3  $\mu$ Torr. Le profil s'est légèrement amélioré en passant d'une non-uniformité sur 20 mm de 13% à 12%. Le gain étant très faible, il n'est pas possible de confirmer que le problème soit lié au régime de pression.

Une deuxième hypothèse pourrait expliquer ces profils : l'équilibrage des pressions crée une surpression au centre de l'injecteur. En effet, le pompage des molécules n'est pas parfait et les molécules réémises par les surfaces de la jauge et du réacteur peuvent se diriger au centre de l'injecteur et même retourner dans les injecteurs. Le centre de l'injecteur est un volume plus difficile à pomper, car la jauge bloque sa sortie. De cette façon, le profil de pression peut être affecté par ce volume. Afin de diminuer cet effet, une configuration (F) sans paroi d'injecteur central (groupe V) a été réalisée. Le diamètre central étant plus gros, le volume serait plus facile à pomper. Cette modification a eu un plus grand impact, la non-

uniformité est passée de 13 à 6 %. Pour tenter de diminuer l'effet au maximum, une pompe turbo a été installée sur le dessus de la chambre de mélange afin de pomper le centre de l'injecteur. La non-uniformité est passée de 6% à 4%. Encore une fois, ces modifications ont prouvé qu'il y a bien une surpression au centre de l'injecteur.

Pour vérifier les performances d'un réacteur équipé d'une pompe pour diminuer la surpression centrale, les parois de l'injecteur groupe V ont été réinstallées (H et I). La non-uniformité pour l'injection groupe III était de 7%, soit trois fois la valeur obtenue par simulation. Pour le groupe V, elle était de 18%, soit plus que quatre fois la valeur simulée. Le profil abrupt de pression a toutefois un avantage. L'efficacité d'injection est plus élevée. Dans les configurations A et C, elles ont atteint respectivement 37% et 29% d'efficacité sur 20 mm de rayon, représentant 15% de plus pour le groupe V et 17% de plus pour que le groupe III.

Lors de la croissance, le profil risque d'être différent. Les précédents tests ont démontré qu'une bonne partie de la pression ne provient pas directement de l'injecteur. Dans le contexte de croissance, les molécules directes et indirectes ne participeront pas de manière identique au dépôt. Lorsque les molécules frappent la surface chaude de la gaufre, la majorité d'entre elles se décomposent. Or, les molécules indirectes seront principalement de l'ammoniaque non décomposée et des composés de post réactions. Leurs compositions différentes aux gaz injectés auront moins d'impact sur le taux de croissance. Pour vérifier davantage les performances, des résultats des croissances sont nécessaires.

### 7.2.2 Étude d'uniformité sur couche d'AIN

La deuxième méthode utilisée pour vérifier les performances de l'injecteur dans le réacteur a été l'étude d'uniformité de croissance d'AIN sur substrat de silicium. Les précurseurs utilisés sont le dimethyl aluminium hydride (DMAIH) et l'ammoniaque (NH<sub>3</sub>). Six croissances différentes ont été réalisées selon les paramètres indiqués dans le tableau de la page suivante. Ces différentes conditions permettent de vérifier l'influence du profil de température, le profil d'injection distinct des deux groupes, la surpression causée par

l'injecteur central et une croissance sans injecteur. L'influence de chacun de ces paramètres sera par la suite démontrée.

Tableau 15: Conditions des 6 configurations différentes d'injection

Numéro de l'échantillon	Substrat	T (°C)	P réacteur en croissance (Torr)	Flux injecté		
				Précurseur	Précroissance	Croissance
00104	Si <111> 2in 500um p- type 2-3 ohm-cm	740 TC 793 PYRO	1.30E-06	DMAIH (Torr)	1.41 (120 sec)	0.53 (360 sec)
				NH <sub>3</sub> (Sccm)	0	1.7 (360 sec)
Modification du système : Ajout d'isolation thermique autour de l'élément chauffant						
00117	Si <111> 2in 500um p- type 2-3 ohm-cm	830 TC 793 PYRO	1.00E-06	DMAIH (Torr)	1.41 (120 sec)	0.53 (360 sec)
				NH <sub>3</sub> (Sccm)	0	1.7 (360 sec)
Modification du système : Injection de tous les gaz dans l'injecteur groupe III						
00303	Si <111> 2in 300um n- type 1-3 ohm-cm	830 TC 796 PYRO	1.20E-06	DMAIH (Torr)	1.41 (120 sec)	0.53 (360 sec)
				NH <sub>3</sub> (Sccm)	0	1.7 (360 sec)
Modification du système : Un joint d'étanchéité a été réparé						
00310	Si <111> 2in 300um n- type 1-3 ohm-cm	817 TC 794 PYRO	3.20E-07	DMAIH (Torr)	1.41 (120 sec)	0.53 (360 sec)
				NH <sub>3</sub> (Sccm)	0	1.7 (360 sec)
Modification du système : Retrait des parois de l'injecteur V et injection séparée gr III et gr V						
00315	Si <111> 2in 300um n- type 1-3 ohm-cm	817 TC 790 PYRO	3.80E-07	DMAIH (Torr)	1.41 (120 sec)	0.53 (360 sec)
				NH <sub>3</sub> (Sccm)	0	1.7 (360 sec)
Modification du système : Retrait des toutes les parois, arrêt de la rotation de l'injecteur et arrêt du flux d'ammoniaque durant le refroidissement						
00349	Si <111> 2in 300um n- type 1-3 ohm-cm	790 TC 788 PYRO	2.30E-07	DMAIH (Torr)	2e 0.03 (50 sec)	1.41 (1200 sec)
				NH <sub>3</sub> (Sccm)	1er 0.75 (50 sec)	5 (1200 sec)

Les résultats d'épaisseur et d'uniformité de ces croissances sont présentés à la page suivante.

Tableau 16 : Résultat de croissance des 6 configurations

Numéro d'échantillon		00104						00117					
Position rayon (mm)		0	5	10	15	20	Non Uniformité (%)	0	5	10	15	20	Non Uniformité (%)
Épaisseur couche (nm)	-> haut	196	196	195	191	180	3.78	158	159	155	145	136	7.25
	-> gauche	196	196	196	195	186	2.36	158	159	160	154	140	5.90

Numéro d'échantillon		00303						00310					
Position rayon (mm)		0	5	10	15	20	Non Uniformité (%)	0	5	10	15	20	Non Uniformité (%)
Épaisseur couche (nm)	-> haut	184	183	177	161	154	8.80	193	190	182	176	152	10.73
	-> gauche	184	182	176	159	145	11.53	193	191	184	173	147	12.80

Numéro d'échantillon		00315						00349					
Position rayon (mm)		0	5	10	15	20	Non Uniformité (%)	0	5	10	15	20	Non Uniformité (%)
Épaisseur couche (nm)	-> haut	138	137	136	133	128	3.15	114	108	112	123	137	10.71
	-> gauche	138	138	135	131	125	4.40	114	124	133	146	160	15.88

Plusieurs paramètres influencent en même temps l'épaisseur : le rapport des flux gazeux du groupe III et V, le flux du groupe III et la température. Sans parler d'uniformité, il est possible d'observer des différences d'épaisseurs sur les échantillons, celles-ci s'expliquent par le fait que différentes configurations peuvent engendrer différentes conditions de croissance et ainsi modifier l'épaisseur totale. De plus, la précision obtenue par ellipsométrie peut faire varier l'uniformité de plusieurs nanomètres.

Au niveau de l'uniformité, le 00104 et le 00315 ont permis d'obtenir des performances près des simulations. Cependant, le système lors de la croissance du 00104 a démontré une non-uniformité au niveau de l'élément chauffant et beaucoup de perte thermique latérale. Afin d'améliorer l'efficacité thermique et l'uniformité de l'élément chauffant, des feuillards de molybdène ont été ajoutés afin de diminuer le flux thermique radial. Cette modification a amélioré l'uniformité thermique, mais l'effet inverse s'est transmis au niveau de la croissance. La non-uniformité moyenne s'est dégradée de 3,1% à 6,6%. La température plus froide sur l'extérieur du substrat aurait permis un taux de croissance plus élevé.



Cela voudrait dire que la température de la gaufre serait supérieure à la température idéale de croissance[12]. Par ailleurs, il a été possible d'observer que l'échantillon 00104 a obtenu un meilleur taux de croissance. La seule différence entre les deux croissances est l'isolation thermique. Celle-ci a eu un impact sur la température du support de l'échantillon et de l'injecteur. Durant la croissance du 00104, la paroi extérieure de l'injecteur a atteint une température de 302°C. Lors du 00117, la température n'a pas excédé 162°C. De plus, la croissance du 00104 était la deuxième de la journée comparativement aux autres croissances qui sont les premières des journées. Il est possible que les parois plus chaudes du réacteur et de l'injecteur aient permis une dynamique des gaz plus élevée. Il se peut également que les parois très chaudes de l'injecteur aient décomposé les composés du groupe III.

Par la suite, pour diminuer l'effet d'un ratio d'injection de groupe III et groupe V variable, l'injecteur a été modifié pour injecter tous les gaz par les parois du groupe III. La non-uniformité du 00303 s'est encore une fois dégradée, passant de 6.6% à 10,2% soit presque le double. Un phénomène peut expliquer cette variation; l'influence du ratio V/III sur la dynamique de croissance. Des travaux ont démontré qu'un ratio très riche en groupe V peut ralentir le taux de croissance par un effet de surpression de molécule. Un ratio trop pauvre en groupe V peut également ralentir le taux de croissance par l'effet d'un manque d'azote disponible[13].

Dans le cas du 00117, la gaufre était entièrement trop riche en groupe V. Le bord de la gaufre aurait un taux de croissance plus élevé parce qu'il a un ratio V/III plus faible. En injectant les deux précurseurs dans le même injecteur, cet effet serait diminué. De plus, en utilisant l'injecteur groupe III, l'efficacité de l'injection est réduite. En ayant moins de molécules de groupe V en général, un nouveau profil a lieu pour le 00303 : le centre est près du ratio idéal et le côté est pauvre en azote.

Suite à la réparation d'une fuite, le 00310 a été réalisé. Sa croissance a donné des résultats semblables au 00303 avec 11.8%.

Pour diminuer l'effet de la surpression, empêcher une pré réaction entre les précurseurs et maintenir une meilleure uniformité d'injection du groupe V, les parois de l'injecteur groupe V ont été retirés. La non-uniformité passa de 11% à 3,8%. Dans la modification précédente, un profil injecté plus plat pour le groupe V a engendré une diminution de l'uniformité. La modification pour le 00315 améliore le profil du groupe V, mais améliore également le profil du groupe III à l'encontre d'une des hypothèses initiales. Le groupe III serait ainsi influencé par la surpression au centre. En améliorant le profil du groupe III et celui du groupe V, il est possible de revenir à une croissance plus uniforme. De plus, cette modification réduit l'efficacité du groupe V. Considérant qu'il y a moins d'azote que le 00303, le ratio V/III est alors plus pauvre que le ratio idéal et a un profil décroissant vers le côté.

La dernière croissance a été réalisée sans aucune paroi d'injecteur, sans flux d'ammoniaque lors de la descente en température et sans aucune rotation. Cette fois, le côté de la gaufre est plus épais que le centre. Trois hypothèses peuvent l'expliquer. Il est possible que le tuyau de refroidissement ait causé un ombrage à l'injection et ainsi diminuer le flux de groupe III vers le centre. La deuxième hypothèse est que le retrait du flux d'ammoniaque pour la descente en température aurait permis une désorption à la surface durant cette période. Cependant, ce phénomène a été plutôt remarqué dans ce réacteur à des températures près de 850°C et la température serait trop faible pour expliquer une aussi grande différence d'épaisseur. La troisième hypothèse serait que la non-rotation de la gaufre accentue les effets de la non-uniformité de la température de l'élément chauffant sur la croissance.

Finalement, il est possible d'observer sur le 00349 que le dépôt a été radial, mais pas à partir du centre de la gaufre. Il est possible que le centre de l'injecteur ne soit pas parfaitement le centre de la gaufre et que celle-ci n'ait pas un profil de température centré. Des vérifications mécaniques ont confirmé ces deux hypothèses, d'environ de 2 à 5 mm dans les deux cas.

### 7.2.3 Modèle simple pour représenter les paramètres d'influence

Afin de résumer l'effet de tous les éléments, des modèles simples ont été réalisés selon les trois paramètres principaux d'influences ; la température, le flux du groupe III et le ratio V/III. Ceux-ci sont basés sur les profils de pression obtenus et les résultats des croissances. L'ensemble des paramètres en fonction des différents scénarios est présenté ci-dessous et à la page suivante.

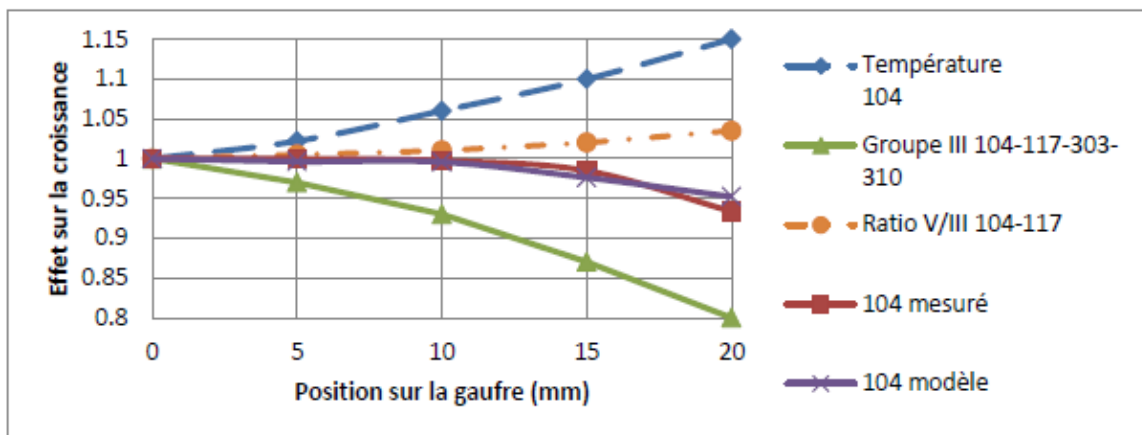


Figure 37 : Modèle des paramètres d'influence du 00104

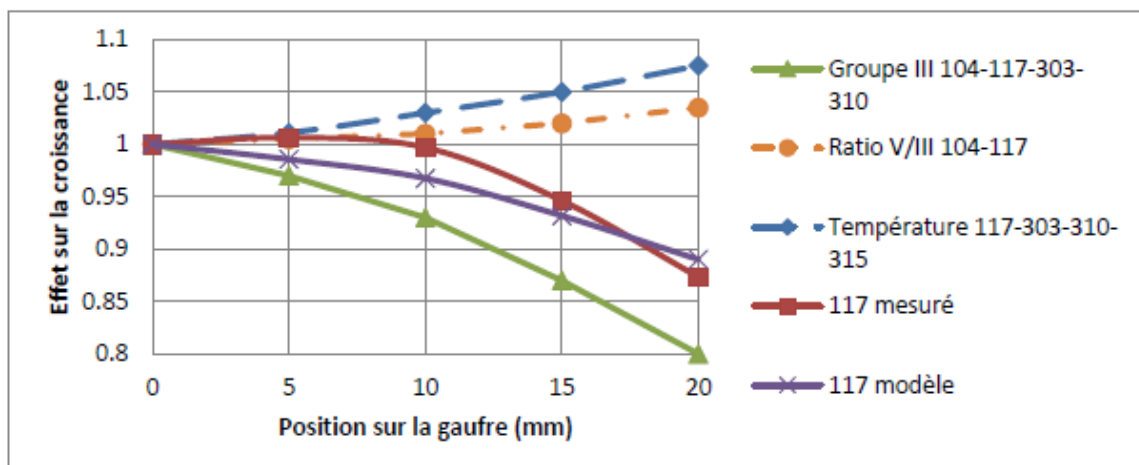


Figure 38: Modèle des paramètres d'influence du 00117

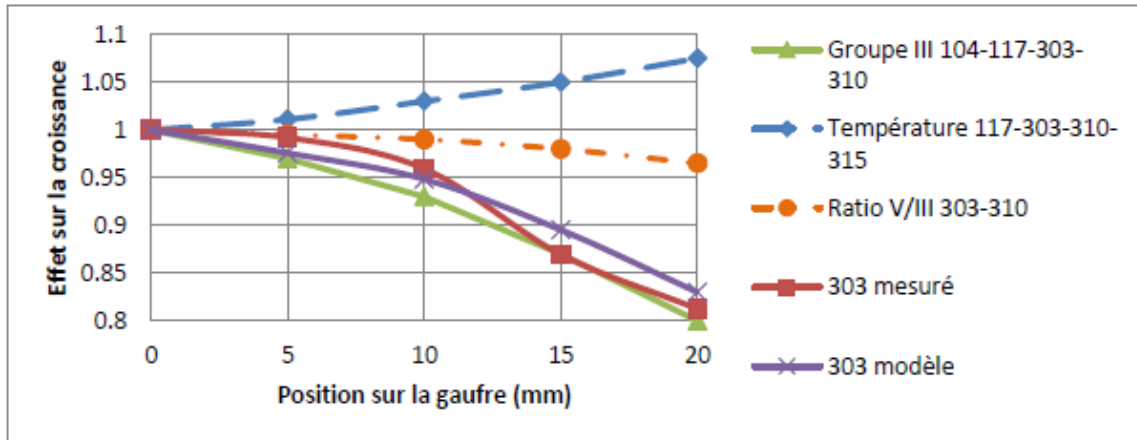


Figure 39: Modèle des paramètres d'influence du 00303 et du 00310

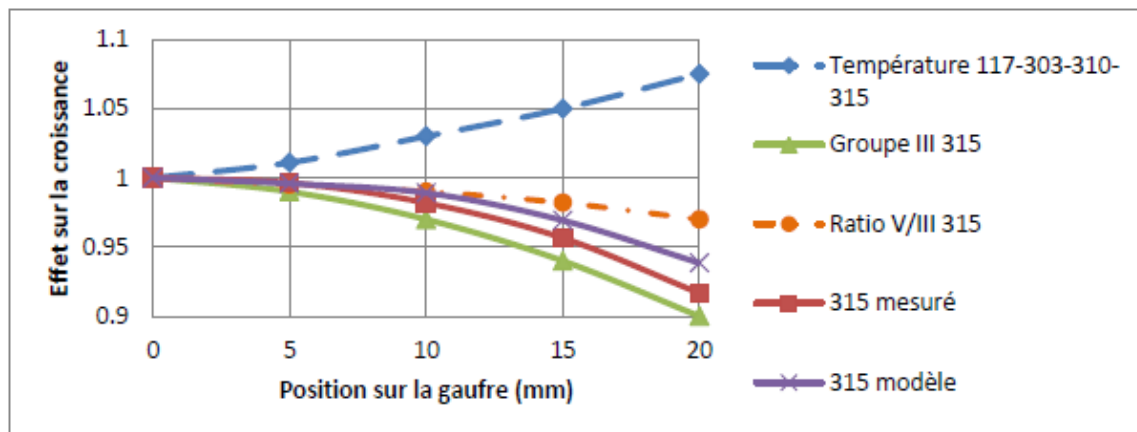


Figure 40: Modèle des paramètres d'influence du 00315

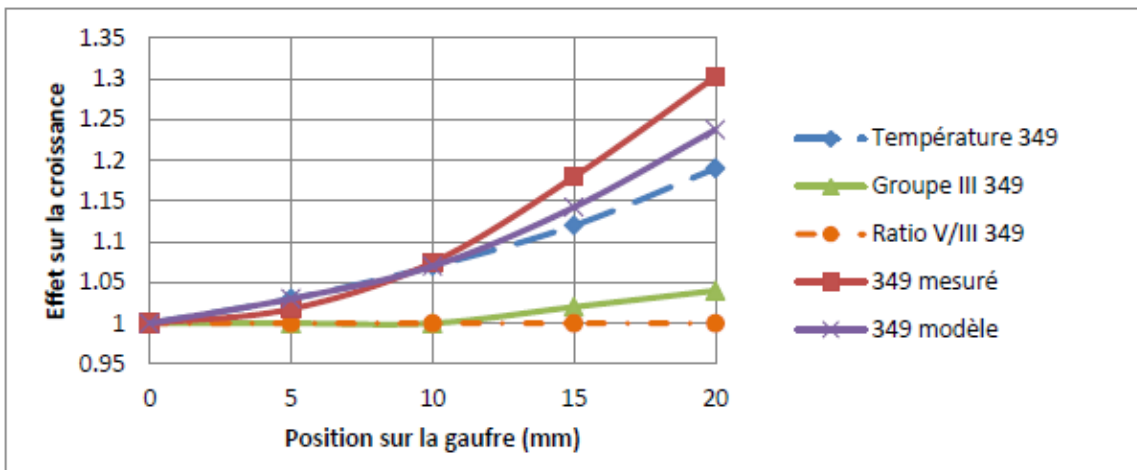


Figure 41: Modèle des paramètres d'influence du 00349

En ayant cinq situations inter-reliées, il est possible de vérifier la solidité des courbes supposées pour chacun des paramètres. Dans le cas de la température, le profil a toujours été dans la même direction, mais à des impacts différents. La température sur les côtés est plus froide et cela a eu comme effet d'améliorer la croissance. La modification au niveau de l'isolation entre l'échantillon 104 et le 117 a eu comme effet d'améliorer l'uniformité de la température. Dans le cas du 349, l'arrêt de la rotation a fortement diminué l'uniformité de la température parce que la gaufre et l'élément chauffant n'était pas concentrique. Cela explique également pourquoi les mesures d'épaisseurs sont différentes selon les deux axes pour le 349. Dans le cas des paramètres liés au groupe III et du ratio V/III, les variations des courbes entre les différents modèles sont simplement basées sur les profils mesurés préalablement avec la jauge de pression.

En somme, les non-uniformités des flux injectés sont plus près des profils de pression recueillis que les profils de flux simulés. Cependant, la non-uniformité de dépôt peut atteindre 3,1% comme dans le cas du 00104 qui a la même configuration que les simulations.

#### 7.2.4 Vérification de la rugosité de surface

Afin de vérifier l'état de surface des échantillons, des mesures ont été réalisées avec un microscope à force atomique. Un tableau résumant les rugosités de chacun des échantillons en valeur RMS est présenté ci-dessous.

**Tableau 17: Rugosité RMS au centre des échantillons**

Numéro d'échantillon	104	117	303	310	315	349	Moyenne
Rugosité au centre RMS (nm)	6.31	5.5	4.79	4.93	4.2	3.65	4.90

Voici un aperçu en trois dimensions de la surface de l'échantillon 00104 pris à partir du MFA.

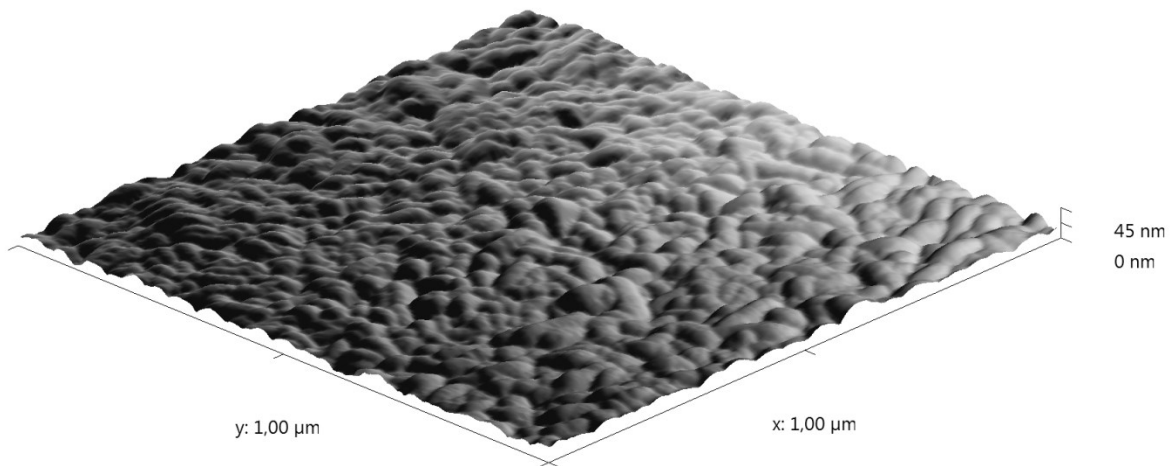


Figure 42: État de surface de l'échantillon 00104

La moyenne des rugosités est de 4.9 nm. Cette valeur n'est pas élevée considérant l'épaisseur du dépôt et le désaccord de maille. Lorsqu'on compare avec d'autres travaux, l'état de surface confirme que les conditions de croissance sont bonnes[14]. Pour faire des études d'uniformité et d'efficacité, la rugosité ne sera pas un problème. De plus, la différence entre les états de surfaces entre les échantillons est à moins de 3 nm RMS. On peut toutefois observer que la surface peut varier jusqu'à 45 nm sur une épaisseur de 160 nm. Pour les mesures d'épaisseur et d'efficacité, un facteur de réduction de densité d'environ 0,8 doit être ajouté.

### 7.2.5 Étude d'efficacité sur couche d'AlN

Pour l'étude de l'efficacité, les croissances de l'étude de l'uniformité seront utilisées. En vérifiant les recettes d'injection de gaz, il est possible de calculer la masse d'aluminium et d'azote injecté dans le réacteur. À l'aide des épaisseurs de couches, il est possible d'estimer la quantité d'aluminium et d'azote déposée. Un exemple de calcul réalisé avec l'échantillon 00104 est présenté ci-dessous. Les surfaces considérées proviennent d'une division en quatre

anneaux de la gaufre entre les rayons où les mesures ont été réalisées. L'épaisseur moyenne de deux positions est calculée et utilisée pour le volume de cet anneau.

**Tableau 18: Exemple de calcul de masse d'aluminium et d'azote déposé sur l'échantillon 00104**

Rayon considéré (cm)	0.00	0.50	1.00	1.50	2.00
Épaisseur d'AlN - mesure 1 (nm)	196	196	195	191	180
Épaisseur d'AlN - mesure 2 (nm)	196	196	196	195	186
Surface considérée (cm <sup>2</sup> )	0.785	2.356	3.927	5.498	
Moyenne épaisseur d'AlN (cm)	1.96E-05	1.96E-05	1.94E-05	1.88E-05	
Volume d'AlN (cm <sup>3</sup> )	1.54E-05	4.61E-05	7.62E-05	1.03E-06	
					Total
Volume d'AlN avec facteur de porosité (20% vide) (cm <sup>3</sup> )	1.23E-05	3.69E-05	6.10E-05	8.27E-05	1.93E-04
Masse d'AlN (g)	4.00E-05	1.20E-04	1.98E-04	2.69E-04	6.27E-04
Masse d'Al dans la couche (g)	2.63E-05	7.89E-05	1.31E-04	1.77E-04	4.13E-04
Masse de N dans la couche (g)	1.37E-05	4.10E-05	6.78E-05	9.18E-05	2.14E-04

En ayant la quantité déposée et la quantité injectée de gaz, il est possible de calculer l'efficacité de dépôt pour l'aluminium et l'azote. À l'aide du ratio d'injection V/III, il est possible de recalculer l'efficacité nette d'injection des parois du groupe V. Le tableau de la page suivante présente les efficacités d'injection pour chacun des échantillons.

**Tableau 19: Efficacité de dépôt des 6 croissances**

Efficacité de dépôt	Numéro d'échantillon					
	104	117	303	310	315	349
AlN	9.34%	7.33%	8.05%	8.46%	6.45%	0.71%
Al (Gr III)	38.09%	29.86%	32.83%	34.48%	26.31%	5.55%
N	3.81%	2.99%	3.28%	3.45%	2.63%	0.26%

Pour des configurations similaires, l'efficacité peut varier près de 30% comme pour le groupe V du 104 et du 117. Cela démontre que le taux de croissance est dépendant des conditions de croissance. Pour les quatre premières configurations, les efficacités pour le groupe III se situent entre 30 et 40%. Dans le cas du 315, l'effet de surpression est réduit et cela diminue l'efficacité de l'injection. Il est important de rappeler que les performances

d'injection dépendent également des recettes utilisées. Dans les six configurations différentes, le flux atteignant la surface et les conditions de croissances ne sont plus les mêmes. Certaines obtenaient un taux de croissance élevé, mais il n'y avait pas nécessairement plus de molécules qui atteignaient la surface

Pour ce qui est des efficacités des dépôts d'azote, ceux-ci dépendent principalement du ratio V/III utilisé pour la croissance. Il devient ainsi difficile de trouver l'efficacité d'injection du groupe V. La valeur de l'efficacité est influencée par la fraction des molécules qui sont décomposées sur la surface. Cette fraction étant bien inférieure à 100%, l'efficacité mesurée devient différente de l'efficacité d'injection. De plus, les variations de température de surface, et aussi de l'intensité des flux, peut affecter le taux de décomposition. Pour réellement avoir un aperçu de l'effet de l'efficacité d'injection d'un groupe V, il serait nécessaire de trouver les conditions idéales de croissances dans deux configurations différentes et vérifier leurs efficacités d'incorporation. Ces optimisations demanderaient beaucoup de temps et d'investissement. Elles ne seront pas réalisées dans le cadre de ce projet. En somme, même si la valeur d'efficacité mesurée pour l'ammoniaque semble basse. Elle constitue une valeur minimale pour l'efficacité d'injection car la décomposition partielle de la molécule fait baisser la valeur mesurée. Les mesures de quelques % restent fortement supérieures à celles obtenues en MOCVD.

Pour sa part, la configuration du 00349 permet de vérifier le réel effet des parois de l'injecteur. En ayant des parois qui amènent le gaz plus près de la gaufre, il est possible d'augmenter d'au moins 1 ordre de grandeur l'efficacité de dépôt. Cela a un réel impact sur le taux de croissance et la consommation des gaz.

### 7.2.6 Vérification de l'efficacité de dépôt de GaN

Pour l'étude de l'efficacité sur couche de GaN, une croissance sur silicium avec une couche de transition d'AlN sera utilisée. Les méthodes de calculs seront les mêmes qu'à la section 7.2.5. Les détails de la croissance sont présentés dans le tableau ci-dessous.



Tableau 20: Détails de la section GaN de la recette de croissance du 00343

Numéro de l'échantillon	Substrat	Parois injecteur	Flux injecté		
			Précurseur	Étape 1 (20 min)	Étape 2 (74 min)
00303	Si <111> 2in 300um n-type 1-3 ohm-cm	Tel que 00315	TEGa (Sccm)	0.126	0.246
			NH <sub>3</sub> (Sccm)	30	50

Les mesures d'épaisseurs ont été réalisées par le microscope électronique à balayage pour augmenter la précision. La présence d'une couche épaisse et de deux couches différentes diminue la précision de l'ellipsomètre. Les deux tableaux de la page suivante présentent les épaisseurs en 5 mesures à différente position sur la gaufre et l'efficacité d'injection sur la gaufre 00343.

Tableau 21: Épaisseur de GaN à différents endroits sur la gaufre 00343

Épaisseur de GaN	Position sur la gaufre (cm)				
	0	0.5	1	1.5	2
mesure 1 (nm)	1228	1228	1313	1351	1412
mesure 2 (nm)	1200	1222	1308	1346	1390
mesure 3 (nm)	1178	1216	1302	1318	1385
mesure 4 (nm)	1167	1216	1302	1312	1346
mesure 5 (nm)	1161	1205	1279	1306	1329
Moyenne (nm)	1187	1217	1301	1327	1372

Tableau 22: Efficacité de dépôt de GaN sur l'échantillon 00343

Efficacité de dépôt	
GaN	0.42%
Ga	14.83%
N	0.06%

Dans le cas du gallium, l'efficacité de dépôt est inférieure à l'efficacité trouvée par la croissance d'AlN. En ayant des conditions et des dynamiques de croissances différentes, tel qu'un taux de désorption plus élevé, il est possible qu'une même injection ne donne pas de résultat similaire.

### 7.2.7 Retour sur le cahier des charges de l'injection

Après avoir recueilli les performances de l'injection, il faut les remettre en perspective avec les objectifs du projet. Les critères à vérifier pour l'injection et les résultats sont présentés ci-dessous.

**Tableau 23: Résultats face au cahier des charges fonctionnelles de l'injection**

Fonction	Spécification	Niveau	Résultat	Détails
Injecter les gaz	Non-uniformité d'injection Gr III	2 %	13 %*	Celle-ci dépend de plusieurs paramètres. Selon les modèles d'influence, la non-uniformité est plus près des profils de pression mesurés.
	Non-uniformité d'injection Gr V	10 %	24 %*	La non-uniformité du groupe V est encore plus difficile à mesurer que le groupe III. La valeur retenue est alors celle des profils de pression mesurés.
	Efficacité d'injection Gr III	10 %	29 %*	L'efficacité réelle de cette injection est difficile à mesurer par le dépôt. La valeur retenue est alors celle des profils de pression mesurés.
	Efficacité d'injection Gr V	20 %	37 %*	L'efficacité réelle de cette injection est difficile à mesurer par le dépôt. La valeur retenue est alors celle des profils de pression mesurés.

\* Résultat selon les profils de pression avec un injecteur ayant toutes ses parois

**Tableau 24: Résultat par rapport aux notes à la conception de l'injection**

Fonction	Spécification	Résultat	Raison
Rotation de la gaufre non nécessaire	Positionnement	Réussi	La croissance sans rotation a donné un dépôt radial. Cependant, les tolérances de l'assemblage affectent le résultat et un dépôt non centré s'en suit. Ce test a également démontré l'importance d'une uniformité en température.

En somme, il a été possible d'observer qu'un phénomène de surpression au centre de l'injecteur vient modifier le profil d'injection des gaz. Celui-ci a comme effet d'avoir une efficacité supérieure aux simulations, mais une non-uniformité près de 6 fois plus élevée dans

le cas du groupe III. Il a également été possible d'observer que les hypothèses suivantes se sont également révélées inexactes :

- Il est possible de négliger les molécules provenant des autres parois du réacteur et la réintroduction de molécule dans l'injecteur.
- Toutes les molécules de groupe III sont décomposées lorsqu'elles touchent la gaufre et le phénomène de surpression n'a pas lieu pour ce groupe.

Finalement, il a été possible de remarquer la complexité de la dynamique de croissance liée à ces trois paramètres principaux ayant tous un impact significatif sur la croissance. La prochaine section discutera du système de gestion de la température de l'injecteur.

## 7.3 Validation de la gestion de la température

Afin de maintenir l'état de l'injecteur à travers le temps, la température de ses parois doit être contrôlée. D'une part, cela permet de minimiser la pré réaction des gaz injectés, le dépôt sur celui-ci et le dégazage de molécules indésirables. Cette section présentera l'ensemble de la démarche afin de vérifier et améliorer le contrôle en température de l'injecteur.

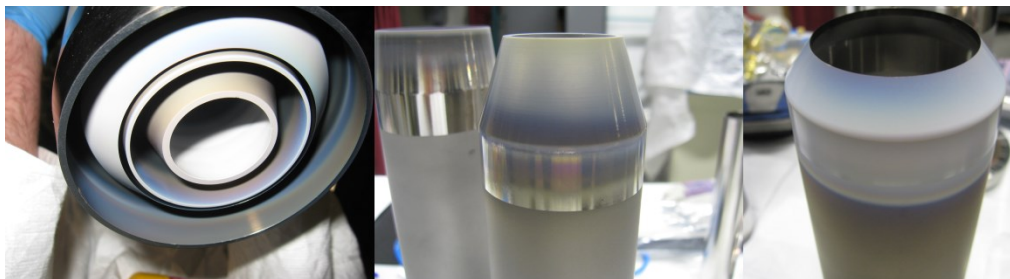
### 7.3.1 Résultats et comparaison avec les simulations de températures de parois

Près de 300 croissances ont été réalisées. Différentes configurations d'injecteur ont permis d'obtenir une plus grande variété de résultats. Le tableau de la page suivante présente la moyenne des températures de parois en régime établies recueillies selon 3 configurations différentes et à 4 températures différentes.

**Tableau 25: Température de la paroi extérieure de l'injecteur en fonction des températures de gaufres et des configurations de parois**

Température de la gaufre	Température en fonction du type de configuration de parois (°C)		
	Toutes les parois Sans isolation latérale	Toutes les parois Avec isolation latérale	Sans les parois du groupe V
880	348	233	238
825	317	195	186
790	308	167	163
740	263	142	N/A

Il est possible d'observer que la température de la paroi extérieure peut atteindre 348°C si l'élément chauffant à 880°C n'est pas isolé. La paroi du centre peut atteindre plusieurs dizaines de degrés plus chauds que la paroi extérieure et dépasser grandement les températures critiques. Pour cette raison, l'isolation a été ajoutée. Les simulations prévoient une température de paroi extérieure de 182°C pour une température de gaufre de 800°C. En interpolant, les données de température de parois extérieures avec injecteur complet seraient de 175°C, soit 7°C sous celles simulées. Les simulations prévoient une température de 80°C plus chaude au centre. En supposant le même écart de température, le centre aurait alors une température de 255°C. Dans le cas extrême de 880°C, il est possible de poser l'hypothèse que la différence de température entre le centre et le côté est encore plus élevée, disons de 120°C. La température au centre de l'injecteur serait alors de 353°C. Il est possible de remarquer que cette température s'avère trop élevée, car un dépôt a pu se former sur les injecteurs à travers les croissances. Voici une image des bouts d'injecteur après 2 ans.



**Figure 43: Aperçu du vieillissement des bouts d'injecteurs après deux ans**

En somme, le système a suivi les performances prévues par simulation. Cependant, le système a été conçu pour des croissances à 800°C. L'optimisation du procédé a démontré que certaines croissances nécessitaient des températures de l'ordre de 880°C. À cette température, le système ne permet pas de maintenir les parois en dessous de 300°C.

### 7.3.2 Retour sur le cahier des charges

Les critères à vérifier au niveau de la gestion de la température sont présentés ci-dessous. Des détails de l'état de leur réussite sont également présentés.

**Tableau 26: Cahier des charges fonctionnelles du système de gestion de température**

Fonction	Spécification	Niveau	Résultat	Détails
Évacuer la chaleur	Température des buses de l'injecteur	300°C	353°C	La température au centre de l'injecteur dépasse l'objectif lorsque la gaufre atteint 880°C. Cependant, cette température est seulement utilisée pour la couche d'AIN et cette couche est rapide.
Maintenir une température	Température des parois de l'injecteur	60°C	N/A	Cette mesure nécessitait un deuxième thermocouple.

**Tableau 27: Notes à la conception du système de gestion de température**

Fonction	Spécification	Niveau	Résultat	Détails
Conserver un accès optique au centre de l'injecteur	Positionnement	-	Réussi	Le tuyau de refroidissement n'a pas affecté l'accès optique. Des mesures ont été réalisées avec succès.
Être fiable	Résistance aux fissures	0	0	Aucune fissure n'a été détectée sur 2 ans d'utilisation.
Éviter les points chauds ou froids	Uniformité de la température des parois	Entre 60°C et 300°C	N/A	Ces mesures nécessitaient plusieurs thermocouples.

En somme, il a été possible d'observer une température supérieure sur les parois par rapport aux objectifs établis. Les simulations ont donné de bons résultats, mais la température de la gaufre et la puissance injectée ont été sous-évaluées par rapport aux conditions idéales de croissance. La prochaine section du mémoire présente la conclusion.

# CHAPITRE 8 CONCLUSION

La conclusion sera formée de trois sections : un résumé des travaux réalisés, les recommandations et les perspectives futures.

## 8.1 Résumé des travaux réalisés

Il a été possible d'observer que ce projet était formé de 6 éléments : la modification d'un outil existant de modélisation de flux d'injecteur dans un réacteur ÉJC, la validation expérimentale de cet outil par un prototype, la conception d'un injecteur optimisé, la conception d'un système d'assemblage, la conception d'un système de gestion de température et finalement, la validation expérimentale de tous les systèmes. Avec des efficacités d'injection d'environ 29 % pour les réactifs du groupe III et de 37 % pour le groupe V, ce projet a permis de réaliser un réacteur améliorant l'efficacité d'injection, le taux de croissance, les coûts de production et diminuant les rejets chimiques. La non-uniformité d'injection a été pour sa part en dessous des objectifs fixés avec 13 % pour le groupe III et de 24 % pour le groupe V. L'hypothèse que les molécules réémises par la gaufre seraient inertes s'est révélée fautive. Une surpression s'est créée au centre de l'injecteur modifiant le flux d'injection final. Cette expérience a permis ainsi de valider ou d'écarter plusieurs hypothèses initiales permettant d'améliorer nos outils de simulations et de conceptions d'injection. La croissance sans rotation s'est avérée possible en atteignant les mêmes performances. Cependant, cette croissance demande une précision d'assemblage très élevée du réacteur. Pour ce qui est de la gestion de la température, les résultats étaient similaires aux simulations. Cependant, les températures des parois n'ont pu respecter les objectifs, car la température de croissance a été sous-évaluée. Des parois d'injecteurs plus courtes, plus épaisses et un système de refroidissement à l'eau avec contact augmenteraient le contrôle de la température.

## 8.2 Recommandations

La réalisation d'un projet d'une telle ampleur permet de recueillir une expérience incroyable et un retour sur la conception d'une grande richesse. Les hypothèses simplificatrices ne permettent pas toujours des simulations adéquates à moins d'avoir été validées à l'avance. Cette section présentera les diverses leçons apprises lors de ce projet et les recommandations au niveau de l'assemblage, l'injection et la gestion de la température.

### 8.2.1 L'assemblage

L'assemblage est l'une des sections qui se sont le mieux déroulées. Il est possible de prévoir précisément les étapes d'installations et d'ajuster la conception en fonction des différents problèmes. Cependant, ce réacteur n'a pas été conçu entièrement avant sa fabrication. Pour diminuer les coûts, certaines sections provenaient de d'autres réacteurs. Cela a empêché d'avoir une conception intégrée de l'injecteur et de la chambre de croissance. La géométrie de la chambre est bonne pour l'épitaxie à jet moléculaire où il est important d'avoir des sources loin de la gaufre pour augmenter l'uniformité. Dans ce projet, cette distance a plutôt nui, car elle imposait un injecteur à longues parois. Cette géométrie crée une surpression au centre, augmente les coûts de fabrication et complexifie la gestion de température de ces parois. De plus, lors de la croissance sans rotation, il a été possible d'observer que l'élément chauffant et l'injection n'étaient pas centrés sur la gaufre. Cela démontre la difficulté d'obtenir une précision de l'assemblage si la pièce de fixation elle-même n'est pas fixée précisément sur le réacteur. Les pièces soudées sont toujours difficiles à être fixées de façon précise. La solution à ce problème serait d'ajouter des ajustements mécaniques.

### 8.2.2 L'injection

L'injection est une partie critique d'un réacteur. Les outils développés par le laboratoire permettent d'améliorer le processus de conception de ceux-ci. Dans ce projet, la méthodologie de conception nous permettait de valider les outils de simulation par le biais du montage expérimental. Cependant, celui-ci n'a pu être exploité suffisamment, car la pompe turbo moléculaire est tombée en panne après un seul test. Par ailleurs, le profil d'injection de l'injecteur expérimental ne permettait pas de vérifier le phénomène de surpression au centre, car ses parois étaient plus larges. 8 configurations différentes avaient été fabriquées pour valider la robustesse du modèle, dont des parois plus courtes. Il aurait été bénéfique de réparer le réacteur et poursuivre les essais. Cela aurait permis d'invalider certaines hypothèses émises pour le modèle de simulation utilisé. Du moins, ces hypothèses ne sont pas valables pour les configurations finales des parois de l'injecteur. Afin d'améliorer les outils de simulations, ceux-ci doivent prendre en compte les éléments suivants :

- Seulement une partie des molécules atteignant la surface s'y dépose;
- Le profil final comprend les molécules provenant de l'injecteur, des zones difficiles à pomper et des molécules réémises par la gaufre, le suscepteur et l'isolation thermique de l'élément chauffant.
- Valider le format final à faible coût avec un réacteur expérimental et des injecteurs fabriqués par imprimante 3D.
- Ne pas négliger l'uniformité en température de la gaufre
- Concevoir la forme de l'injecteur en intégrant le système de transfert, le système de chauffage et le pompage dans l'équation. Une conception en parallèle avec tous les systèmes est nécessaire. Ne pas développer un concept trop loin sans une vision complète du système.



### 8.2.3 Gestion de la température

La gestion de température s'est avérée complexe dans un environnement sous vide. Le transfert thermique est majoritairement de la radiation, ce qui peut créer des points chauds dans le réacteur. L'injection efficace demande un injecteur très près de la gaufre ce qui l'expose directement à une surface à haute température. De plus, plusieurs parois concentriques forment un environnement idéal pour isoler les parois du centre, celles qui sont également les plus exposées à la haute température. Afin d'améliorer la gestion de la température, celle-ci doit prendre en compte les éléments présentés à la page suivante :

- Des parois les plus courtes possibles ou en contact direct avec un circuit de refroidissement liquide;
- Éviter d'avoir des parois d'injecteurs refroidis à l'azote liquide;
- Le moins de parois concentriques possible, par exemple, les parois 2 et 3 peuvent être une même paroi;
- Épaissir les parois pour améliorer leur conductivité thermique;
- Éviter les joints soudés près des zones à hautes variations de température;
- Avoir une surface électropolie pour augmenter la réflectivité de la chaleur.

### 8.2.4 Proposition de concept

Pour compléter ce chapitre, voici la proposition de concept qui permettrait de respecter les contraintes tout en incluant le maximum de recommandations.

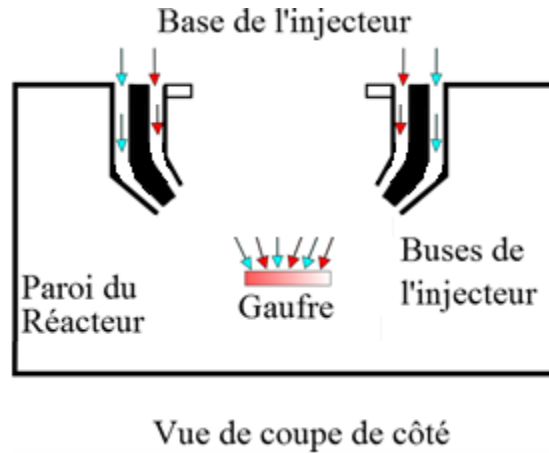


Figure 44: Concept de forme de parois améliorées

Voici pourquoi ce concept est une version améliorée:

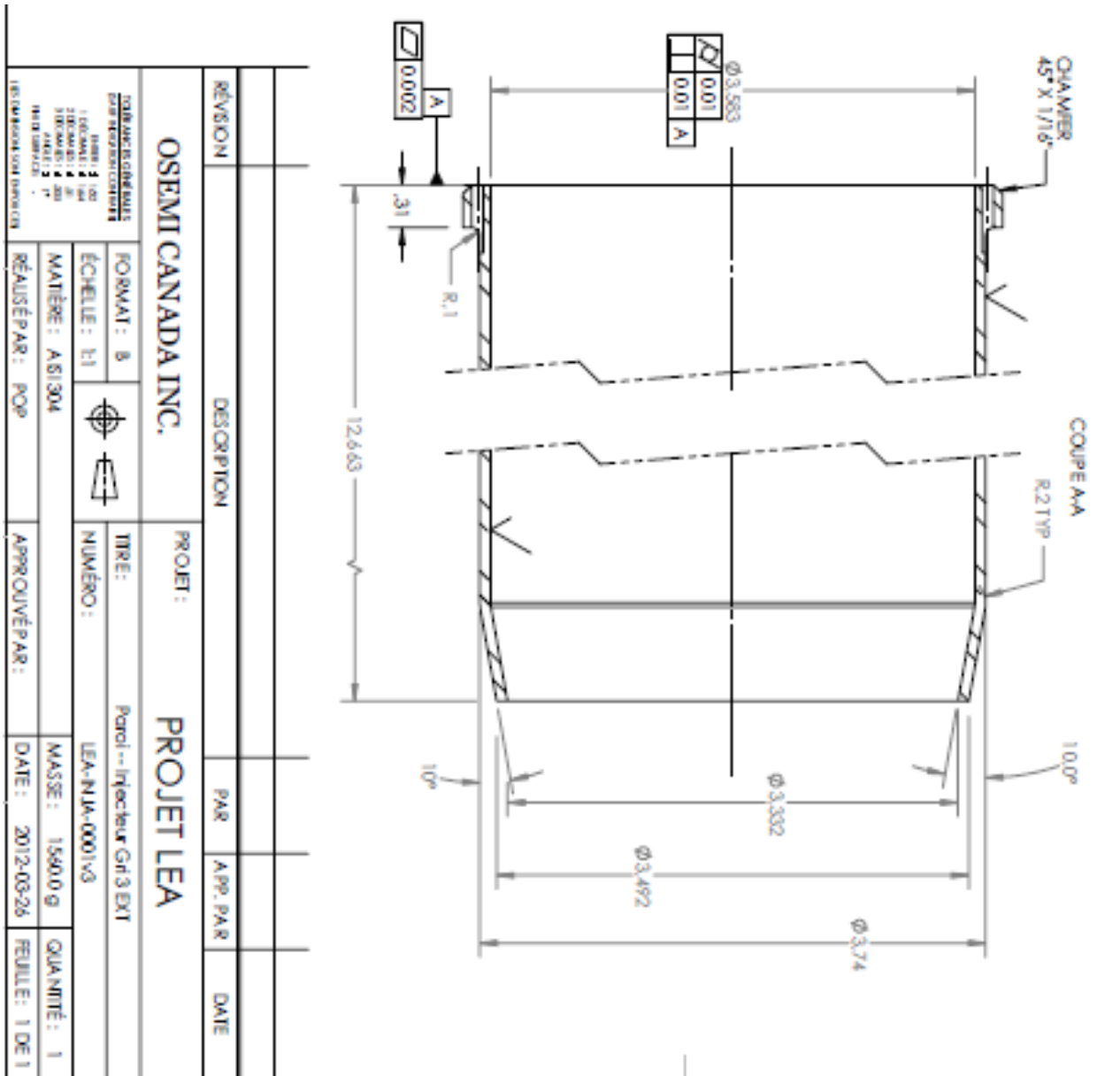
- Des parois plus courtes et plus épaisses permettent un flux plus diffus, un meilleur contrôle de la température par conduction grâce à une base refroidie à l'eau, un ensemble plus léger et moins dispendieux, une fabrication plus simple et une diminution de la surface de l'injecteur;
- Des parois 2 et 3 combinées en une seule paroi permettent un système plus compact et plus simple à refroidir;
- Un diamètre interne plus grand permet de diminuer l'effet de surpression au centre, d'avoir de l'espace pour plus d'instrument et d'y ajouter potentiellement des pompes;
- Le dégagement au-dessus de la gaufre permet de réutiliser le même système de transfert et de minimiser l'impact sur l'uniformité de la température de la gaufre;
- Des parois arrondies permettent d'avoir des transitions plus douces au niveau de l'injection.

## LISTE DES RÉFÉRENCES

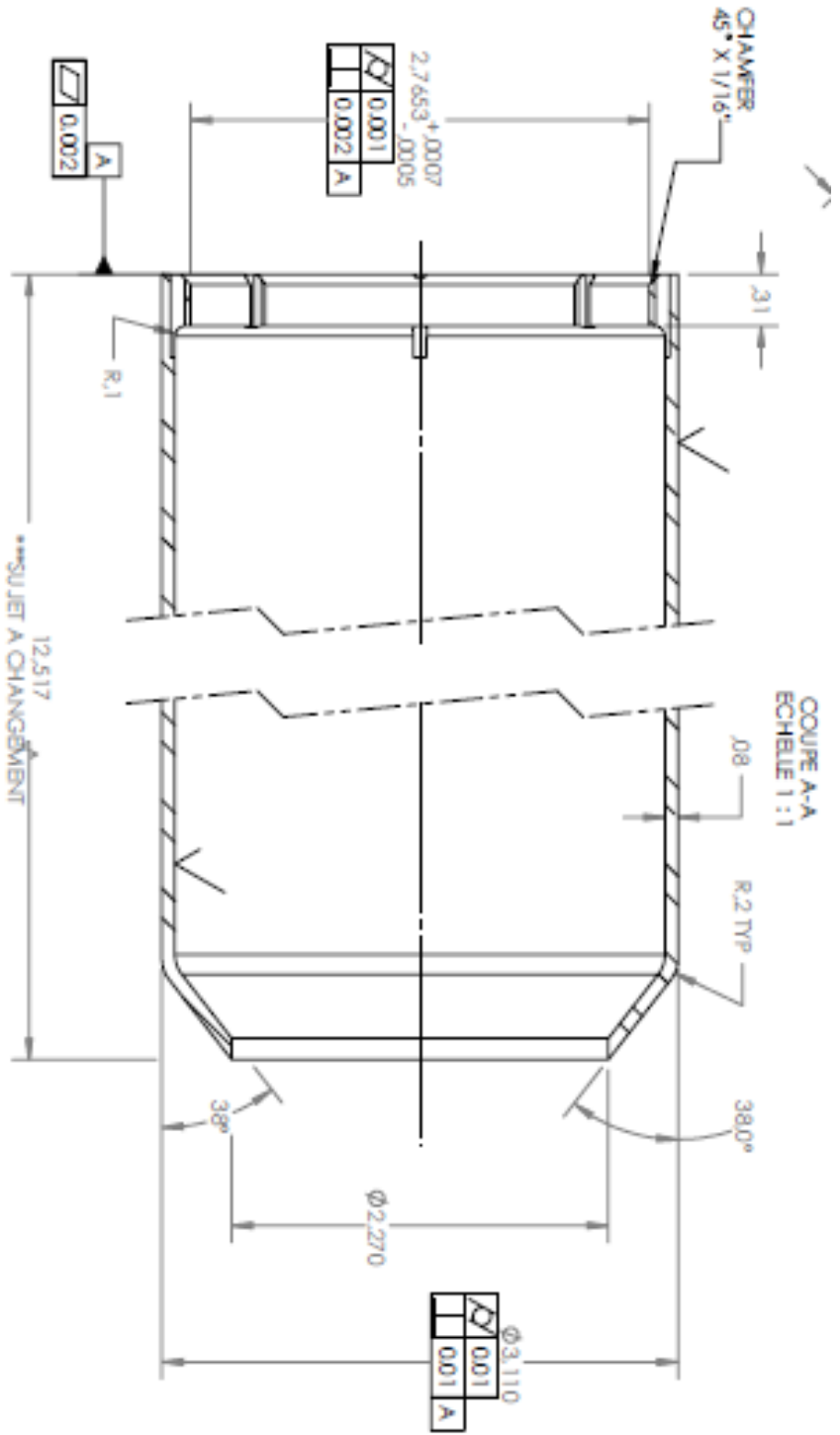
- [1] D. W. Weyburne and B. S. Ahern, "Design and operating considerations for a water-cooled close-spaced reactant injector in a production scale MOCVD reactor BT - Proceedings of the 1996 8th International Conference on Metallorganic Vapour Phase Epitaxy, June 9, 1996 - June 13, 1996," *J. Cryst. Growth*, vol. 170, no. 1–4, pp. 77–82, 1997.
- [2] J. F. O'Hanlon, *A user's guide to vacuum technology*, Second edi. John Wiley and Son's, 1989, p. 481.
- [3] T. G. Mihopoulos, S. G. Hummel, and K. F. Jensen, "Simulation of flow and growth phenomena in a close-spaced reactor," *J. Cryst. Growth*, vol. 195, no. 1–4, pp. 725–732, Dec. 1998.
- [4] C. Martin, M. Dauelsberg, H. Protzmann, a. R. Boyd, E. J. Thrush, M. Heuken, R. a. Talalaev, E. V. Yakovlev, and a. V. Kondratyev, "Modelling of group-III nitride MOVPE in the closed coupled showerhead reactor and Planetary Reactor®," *J. Cryst. Growth*, vol. 303, no. 1, pp. 318–322, May 2007.
- [5] P. B. Chinoy, D. A. Kaminski, and S. K. Ghandhi, "A novel reactor for large-area epitaxial solar cell materials," in *Solar Cells*, 1991, vol. 30, no. 1–4, pp. 323–335.
- [6] L. Isnard and R. Arès, "Theoretical and experimental molecular beam angular distribution studies for gas injection in ultra-high vacuum," *J. Cryst. Growth*, vol. 311, no. 7, pp. 1640–1645, Mar. 2009.
- [7] J. L. Benchimol and M. Ancilotti, "Simple high conductance gas line for high growth rate and low transient," in *Journal of Crystal Growth*, 1996, vol. 164, no. 1–4, pp. 22–27.
- [8] M. Kappers, J.-L. Guyaux, J. Olivier, R. Bisaro, C. Grattepain, and J.-C. Garcia, "Chemical beam epitaxy of GaN on (0001) sapphire substrate," *Mater. Sci. Eng. B*, vol. 59, no. 1–3, pp. 52–55, May 1999.
- [9] X. . Shen, S. Tanaka, S. Iwai, and Y. Aoyagi, "Chemical beam epitaxy of GaN using triethylgallium and ammonia," *J. Cryst. Growth*, vol. 188, no. 1–4, pp. 86–91, Jun. 1998.
- [10] E. Kim, I. Berishev, a. Bensaoula, S. Lee, S. S. Perry, K. Waters, and J. a. Schultz, "Nucleation and growth of chemical beam epitaxy gallium nitride thin films," *Appl. Phys. Lett.*, vol. 71, no. 21, p. 3072, 1997.

- [11] M. J. Moran, H. N. Shapiro, B. R. Munson, D. P. Dewitt, J. Wiley, K. Hepburn, H. Grossman, and L. Fleming, *Introduction to Thermal Systems Engineering : and Heat Transfer*. John Wiley and Son's, 2003, p. 562.
- [12] I. Gherasoiu, S. Nikishin, G. Kipshidze, B. Borisov, a Chandolu, C. Ramkumar, M. Holtz, and H. Temkin, "Growth mechanism of AlN by metal-organic molecular beam epitaxy," *J. Appl. Phys.*, vol. 96, no. 11, pp. 6272–6276, 2004.
- [13] I. Gherasoiu, S. Nikishin, and H. Temkin, "Metal-organic molecular-beam epitaxy of GaN with trimethylgallium and ammonia: Experiment and modeling," *J. Appl. Phys.*, vol. 98, no. 2005, pp. 10–15, 2005.
- [14] E. Calleja, M. . Sánchez-García, F. . Sánchez, F. Calle, F. . Naranjo, E. Muñoz, S. . Molina, a. . Sánchez, F. . Pacheco, and R. García, "Growth of III-nitrides on Si(111) by molecular beam epitaxy Doping, optical, and electrical properties," *J. Cryst. Growth*, vol. 201–202, pp. 296–317, 1999.

# ANNEXE 1 – PLANS DE FABRICATION ABRÉGÉS DE L'INJECTEUR



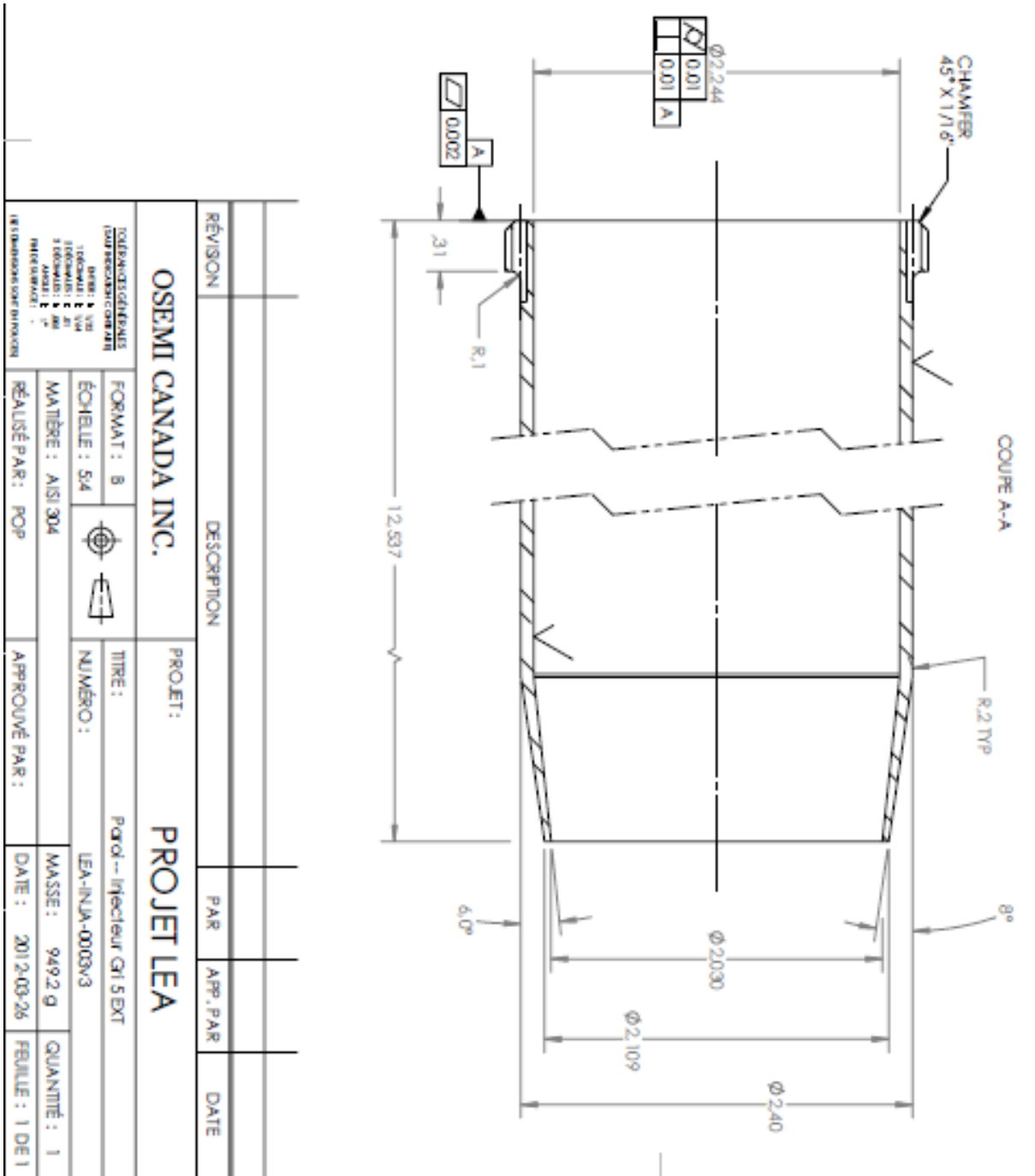
ANNEXE 1 - PLANS DE FABRICATIONS ABRÉGÉS



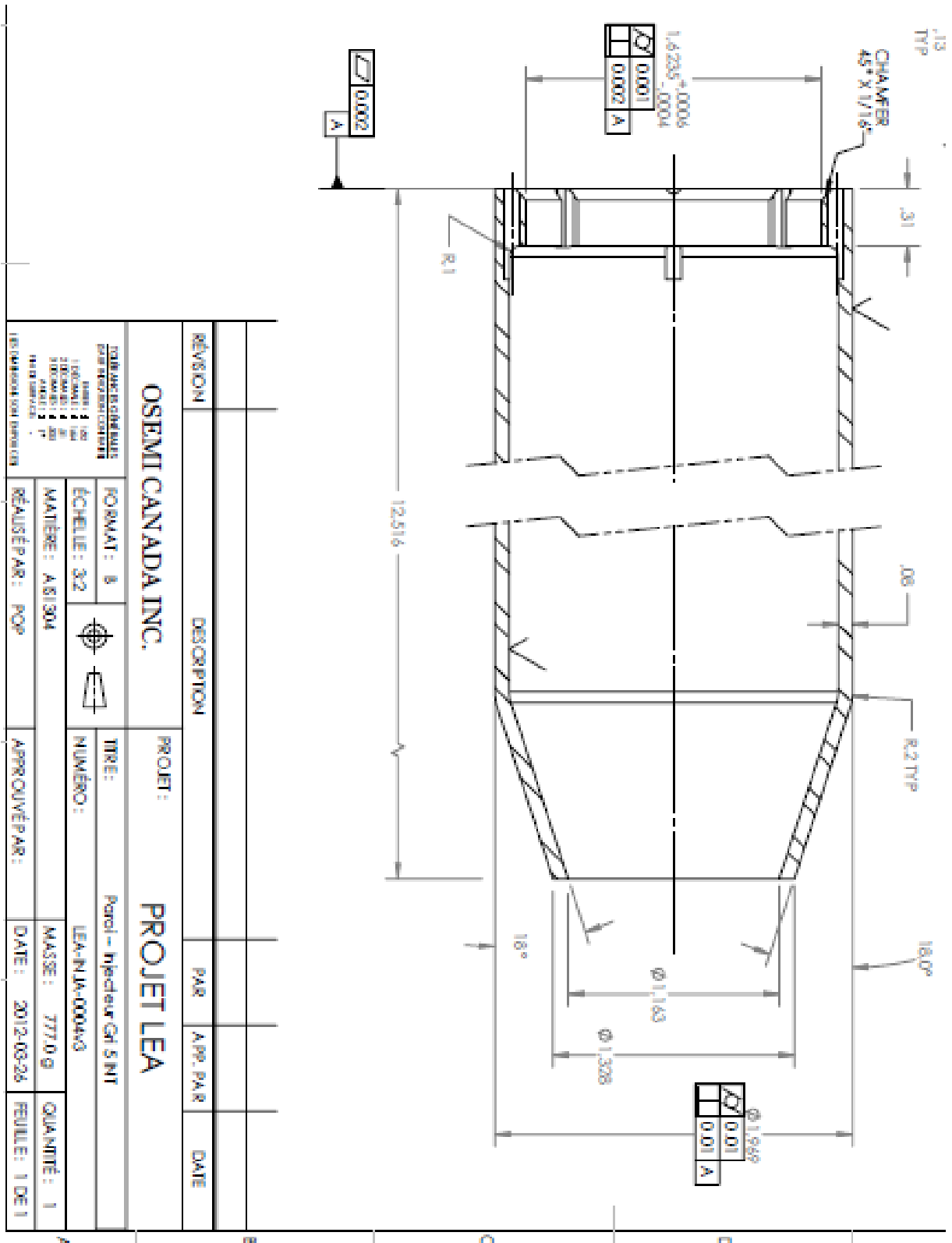
RÉVISION		DESCRIPTION		PAR	APP. PAR	DATE

<b>OSEMI CANADA INC.</b>		<b>PROJET :</b>		<b>PROJET LEA</b>		
TOUTES DIMENSIONS EN MILLIMÈTRES (TOUT REQUIS EN CHANGEMENT)		FORMAT : B		TITRE : <b>Parol -- injecteur G11 3 INT</b>		
DRESS : 4 VIB		ÉCHELLE : 1:1		NUMÉRO : <b>LEA-INJA-0002A3</b>		
TÉCHNICIEN : E. VAN		MATIÈRE : AISI 304		MASSE : <b>1260.5 g</b>		
5 TÉCHNICIENS : E. AM		RÉALISÉ PAR : POP		DATE : <b>2012-03-26</b>		
ANALYSE : E. P.		APPROUVÉ PAR :		QUANTITÉ : <b>1</b>		
PRELIMINAIRE :				FEUILLE : <b>1 DE 1</b>		
REVISIONS NON APPROUVÉES :						



ANNEXE 1 - PLANS DE FABRICATIONS ABRÉGÉS



OSEMI CANADA INC.

PROJET : PROJET LEA

REVISION	DESCRIPTION	PAR	APP. PAR	DATE

<b>OSEMI CANADA INC.</b> 1500 AVENUE DU COMMERCE SUITE 102 ST-BASILE-LE-GRAND, Q.C. CANADA J5L 1Y1 TEL: (438) 304-1111		TITRE : Paroi - injecteur GI SINT
FORMAT : B ÉCHELLE : 3:2 MATIÈRE : A.SI.304 RÉALISÉ PAR : POP	NUMÉRO : LEA-NIJA-000403	DATE : 2012-03-24
APPR. QUÉBÉ PAR :		QUANTITÉ : 1
RÉVISÉ PAR :		FEUILLE : 1 DE 1



## ANNEXE 2 – CODE MATLAB

```
function [Niter,W1,W2,EffG1,EffG2,EffDS1,EffDS2,RayGau,BriGauEn,BriGauMi,BriGauMe,BriGau] = stab2
tubes2b(Rdi,Rde,Lti,Lte,Ai,Ae,Lci,Lce,Dg)
% [FMintot,FMextot,Fouttot,Frettot,W1,W2,Err,Entcib,Mincib,Mexcib,Sorcib]
% [Entsou,Tinsou,Cinsou,Texsou,Cexsou,Entcib,Tincib,Cincib,Texcib,Cexcib,Sorcib]
% [Ent2Min,Ent2Mex,Ent2Sor,Min2Ent,Min2Mex,Min2Sor,Mex2Ent,Mex2Min,Mex2Mex,Mex2Sor]
% [theta,Arccib,BriArcEn,BriArcMi,BriArcMe,W1,W2,Err,Eff1,Eff2,FMintot,FMextot,Fouttot,Frettot]
% [RayGau,BriGauEn,BriGauMi,BriGauMe,W1,W2,Err,EffG1,EffG2,FMintot,FMextot,Fouttot,Frettot]
% [W1,W2,Eff1,Eff2,RenF1,RenF2,RenF3]

% Cette fonction effectue un calcul itératif des flux échangés à l'intérieur d'un injecteur (stab
ilisation) puis de ceux envoyés de l'injecteur vers une cible.
% L'injecteur est constitué de deux tubes concentriques finissant par des embouts coniques différ
ents. La cible peut être un disque de même axe (gaufre) ou un demi-sphère.
% L'ensemble injecteur+cible doit être axisymétrique. La rotation de la gaufre n'apporte donc auc
un modification aux performances simulées.
% L'axisymétrie de l'injecteur permet de réduire toutes les cibles à des segments parallèles à l'
axe Ox (azimut=0) et discrétisés à haute résolution.
% Ceci simplifie les calculs et évite la divergence des flux aux points communs (intersections)
entre source et cible.
% Deux angles polaires maximaux pour lequel des flux non nuls sont échangés entre source et cible
sont utilisés pour discrétiser toutes les sources.
% Les deux embouts conique ne finissant pas forcément à la même hauteur, il existe une zone exemp
te d'ombrage qui doit être discrétisée sans restriction d'azimut.
% On utilise alors seulement la symétrie par rapport au plan xOz pour éviter les calculs pour la
moitié des pts des sources (de 0 à pi).
% L'écoulement net circule depuis le plan xOy (source) suivant les z positifs.
% On choisit donc de discrétiser les parois du + petit z (par convention leur entrée) au + grand
z (par convention leur sortie).
% Les normales aux parois de l'injecteur sont toujours dirigées vers l'intérieur de celui-ci.
% ON DISCRÉTISE LES SOURCES EN DÉCOMPTANT LES POINTS 'OMBRAGÉS PAR DÉFAUT' VIA DEUX ANGLES POLAIR
ES MAXIMAUX COMMUNS À TOUTES LES SOURCES

% RESTRICTIONS GÉOMÉTRIQUES IMPOSÉES
% - La source primaire est un anneau circulaire droit qui définit le plan xOy (0 est son centre e
t Oz son axe de symétrie);
% - Les deux tubes d'axe Oz débutent au niveau du plan xOy et sont donc raccordés directement à l
a source primaire;
% - Les deux embouts coniques d'axe Oz sont raccordés directement aux extrémités des tubes sans c
hangement de diamètre;
% - Les deux embouts coniques ne peuvent pas se croiser ni même se rejoindre car cela fermerait l
a sortie;
% - La gaufre ne peut ni toucher ni croiser une partie de l'injecteur;
% - La différence de hauteur entre les parois interne et externe doit être suffisante (2*hi-he>0)
pour pouvoir utiliser le concept d'angle polaire maximal

% L'injecteur est composé de 2 parois virtuelles et 2 parois réelles:
% - La source primaire (anneau circulaire de centre 0 qui permet l'entrée des flux);
% - La sortie (cône ou anneau circulaire constitué par la fin des deux embouts coniques);
% - Les parois internes (tube de plus petit diamètre et son embout conique) qui émettent vers leu
r extérieur;
% - Les parois externes (tube de plus grand diamètre et son embout conique) qui émettent vers leu
r intérieur.

% REPÈRES UTILISÉS
% Repère fixe lié à l'injecteur: 0,x,y,z
% Repère mobile lié à la gaufre (si nécessaire): C(centre de la gaufre),x',y',z'

% DÉFINITION DES PARAMÈTRES D'ENTRÉE
% Rdi: rayon minimal de l'anneau d'entrée = rayon du tube interne = rayon du début du cône intern
e
```

```

% Rde: rayon maximal de l'anneau d'entrée = rayon du tube externe = rayon du début du cône externe
% lti,lte: longueurs des tubes interne, externe respectivement
% Ai,Ae: demi-angles d'ouverture des embouts coniques des tubes interne, externe respectivement
% Ces angles sont saisis en DEGRÉS, ils peuvent être >0 (cône divergent), <0 (cône convergent) =0
(cylindre)
% lci,lce: longueurs des embouts coniques des tubes interne, externe respectivement

% TOUS LES ANGLES SONT ENTRÉS DANS LES FONCTIONS EN DEGRÉS
% Ils sont convertis en radians à l'intérieur des sous-fonctions, mais pas dans cette fonction.

% DÉFINITION DES PARAMÈTRES DE SORTIE
% cible: matrice de 8 colonnes contenant les informations sur les points de la surface cible
% W1: coefficient de transmission calculé via la fraction de molécules rétrodiffusées
% W2: coefficient de transmission calculé via la fraction de molécules sortantes
% Eff1,2: efficacités (fraction des molécules arrivant sur la gaufre) calculées via W1,2
% Rendement (uniformité des brillance): fraction des éléments voyant une brillance comparable (à
un facteur 'cutoff' près) à la brillance de référence
% Par défaut, la brillance de référence utilisée sera la brillance moyenne sur la gaufre
% RenF: rendement pour une gaufre fixe
% RenT: rendement pour une gaufre en rotation (si nécessaire)

% PARAMÈTRES FIXÉS PAR L'OPÉRATEUR
Nannen = 15; % nombre d'anneaux sur l'anneau circulaire d'entrée (= la source primaire)
Nsegen = 90; % nombre de points sur la source primaire réduite à un segment
Nannti = 100; % nombre d'anneaux suivant la longueur du tube interne
Ncirti = 60; % nombre de points par anneaux sur le tube interne
Nsegti = 300; % nombre de points sur le tube interne réduit à un segment
Nannte = 100; % nombre d'anneaux suivant la longueur du tube externe
Ncirte = 90; % nombre de points par anneaux sur le tube externe
Nsegte = 300; % nombre de points sur le tube externe réduit à un segment
Nannci = 20; % nombre d'anneaux suivant la longueur du cône interne
Ncirci = 60; % nombre de points par anneaux à l'entrée du cône interne
Nsegci = 60; % nombre de points sur le cône interne réduit à un segment
Nannce = 20; % nombre d'anneaux suivant la longueur du cône externe
Ncirce = 90; % nombre de points par anneaux à l'entrée du cône externe
Nsegce = 60; % nombre de points sur le cône externe réduit à un segment
Nsegso = 100; % nombre de points sur le cône de sortie réduit à un segment
F_in = 1; % flux total (en molécules par seconde) émis par la source primaire
centre=[0 0 0]; % coordonnées du centre de l'anneau circulaire d'entrée de l'injecteur (source pri
maire)
precision=1e-7; % critère d'arrêt de la série convergente d'échanges de flux entre les parois (val
eur relative à partir de laquelle on néglige les termes additionnels)
% cutoff = 0.01; % différence de brillance relative au delà de laquelle le point est rejeté dans
le calcul du rendement

% PARAMÈTRES GÉOMÉTRIQUES DE LA CIBLE FINALE (gaufre ou arc de sphère)
Ntheta = 90; % nombre de points sur un arc de sphère cible (test du code)
Nsegga = 300; % nombre d'anneaux sur la gaufre réduite à un rayon
Rg = 100; % rayon de la gaufre (diamètre de 4")
% Dg = 265.76; % distance du centre de l'anneau circulaire d'entrée au centre de la gaufre

tic
% Calcul des coordonnées des extrémités des embouts coniques (sont aussi celles de la surface de
sortie)
Rfi = Rdi+lci*sind(Ai); % rayon de fin du cône interne
Rfe = Rde+lce*sind(Ae); % idem cône externe
zfi = lti+lci*cosd(Ai); % cote (z) de fin du cône interne
zfe = lte+lce*cosd(Ae); % idem cône externe

% Test sur les paramètres d'entrée
if Rdi <= 0 || Rde <= 0 || Rdi >= Rde || Ai<=-90 || Ai>=90 || Ae<=-90 || Ae>=90 || Dg<=max(zfe,zfi

```

```

) || 2*zfi-zfe<=0
    error('Un des paramètres d'entrée est mal défini !')
end

% Test sur le croisement des deux embouts coniques
if Ae==Ai % condition d'existence d'un point d'intersection dans le plan xOz entre des cônes semi-
-infinis (non tronqués vers z>0)
    zinter = (tand(Ae)*Lte-tand(Ai)*Lti-Rde+Rdi)/(tand(Ae)-tand(Ai)); % cote z du point d'interse-
ction
    % Il y a croisement si ce point se trouve plus bas que le plus long des 2 tubes et si les deu-
x extrémités du segment de sortie sont plus basses que lui
    if zinter >= max(Lte,Lti) && zfi >= zinter && zfe >= zinter
        error('Les deux embouts coniques se croisent => pas de surface de sortie réelle !')
    end
end

% On force tous les ratios Nseg/Nann à être des entiers car ils seront utilisés comme indices lors
de la redistribution sur les sources des flux reçus par les cibles
Nsegen = round(Nsegen/Nannen)*Nannen;
Nsegti = round(Nsegti/Nannti)*Nannti;
Nsegci = round(Nsegci/Nannci)*Nannci;
Nsegte = round(Nsegte/Nannte)*Nannte;
Nsegce = round(Nsegce/Nannce)*Nannce;

% DISCRÉTISATION DES SOURCES
% On utilise deux angles polaires maximaux établis au départ (gammax et 2*gammax) pour discrétise-
r toutes la sources.
% Si les cônes sont très ouverts, ça implique le calcul de bcp de pts inutiles, mais ça a l'avant-
age de garder les choses simples.
% Détermination de l'angle polaire maximal utilisé pour la discrétisation des sources (en radians
)
% Il vaut au plus pi à cause de la symétrie par rapport au plan xOz, mais on le choisit plus peti-
t en tenant compte des zones d'ombrage minimales dues aux parois internes.
gammax = acos(min(Rdi,Rfi)/max(Rde,Rfe)); % angle polaire maximal pour les parois internes subiss-
ant de l'ombrage
% DISCRÉTISATION DE L'ANNEAU D'ENTRÉE
[Entsou,Nptsen,rhoen] = ann_circ0(Rdi,Rde,Nannen,2*gammax,centre,F_in,+1); % normales dirigées ve-
rs les z>0
% DISCRÉTISATION DES PAROIS TUBULAIRES ET CONIQUES
% Certaines zones proches de la sortie peuvent être exemptes d'ombrage: il faut donc les identifi-
er et les discrétiser de 0 à pi.
% Cas où le cône d'ombrage dépasse les parois externes suivant z (zfi>=zfe) => toutes les parois
sont ombragées au complet
APMti = gammax*ones(1,Nannti); APMci = gammax*ones(1,Nannci); % vecteurs d'angles polaires ma-
ximums par défaut pour les parois internes
APMte = 2*gammax*ones(1,Nannte); APMce = 2*gammax*ones(1,Nannce); % même chose pour les parois ex-
ternes
[Tinsou,Nptsti] = parois_chem(Rdi,Lti,0,Nannti,Ncirti,APMti,centre,0,+1); % tube interne avec OMB-
RAGE
[Texsou,Nptste] = parois_chem(Rde,Lte,0,Nannte,Ncirte,APMte,centre,0,-1); % tube externe avec OMB-
RAGE
[Cinsou,Nptsci] = parois_chem(Rdi,Lci,Ai,Nannci,Ncirci,APMci,[0 0 Lti],0,+1); % cône interne avec
OMBRAGE
[Cexsou,Nptsce] = parois_chem(Rde,Lce,Ae,Nannce,Ncirce,APMce,[0 0 Lte],0,-1); % cône externe avec
OMBRAGE
% Cas contraire (zfi<zfe)
% Il existe des zones non ombragées => trois sous-cas suivant où la hauteur où se trouve la fin d-
e la zone d'ombrage
% Trois sous-cas pour la discrétisation des parois externes avec et sans ombrage
deltazce = Lce/Nannce*cosd(Ae); % résolution suivant z sur le cône externe
deltazte = Lte/Nannte; % idem pour le tube externe
Ncirceso = round(Ncirce*pi/2/gammax); % nbe de pts par anneau (cône ext.) ajusté pour une circonf

```

```

érence complète (zones sans ombrage)
Ncirteso = round(Ncirt* $\pi$ /2/ $\gamma$ max); % idem pour tube externe
zlim = 2*zfi-zfe; % cote z en dessous de laquelle les parois internes ne font plus un ombrage sur
toute la plage angulaire de  $\theta$  à 2* $\gamma$ max
if zlim<zfe-deltazce/2 && zlim>Lte+deltazce/2 % une fraction seulement du cône est ombragée
    Rde2 = Rde+(zlim-Lte)*tand(Ae);
    Lce1 = (zlim-Lte)/cosd(Ae); Lce2 = Lce-Lce1;
    Nannce1 = round(Nannce*Lce1/Lce); Nannce2 = Nannce-Nannce1;
    APMce1 = 2* $\gamma$ max*ones(1,Nannce1); APMce2 =  $\pi$ *ones(1,Nannce2);
    [Cexsou1,Nptsce1] = parois_chem(Rde,Lce1,Ae,Nannce1,Ncirteso,APMce1,[0 0 Lte],0,-1); % partie d
u cône externe avec OMBRAGE
    [Cexsou2,Nptsce2] = parois_chem(Rde2,Lce2,Ae,Nannce2,Ncirteso,APMce2,[0 0 zlim],0,-1); % part
ie du cône externe sans OMBRAGE
    Cexsou = [Cexsou1;Cexsou2]; Nptsce = [Nptsce1 Nptsce2]; APMce = [APMce1 APMce2]; % cône compl
et
elseif zlim<=Lte+deltazce/2 && zlim>=Lte-deltazce/2 % pas d'ombrage pour tout le cône, ombrage po
ur tout le tube
    APMce =  $\pi$ *ones(1,Nannce);
    [Cexsou,Nptsce] = parois_chem(Rde,Lce,Ae,Nannce,Ncirteso,APMce,[0 0 Lte],0,-1); % cône extern
e sans OMBRAGE
elseif zlim<Lte-deltazce/2 % pas d'ombrage pour tout le cône, une fraction du tube sans ombrage
    Nannte1 = round(Nannt* $\pi$ /2/zlim/Lte); Nannte2 = Nannte-Nannt1;
    APMte1 = 2* $\gamma$ max*ones(1,Nannt1); APMte2 =  $\pi$ *ones(1,Nannt2);
    [Texsou1,Nptste1] = parois_chem(Rde,zlim,0,Nannt1,Ncirteso,APMte1,centre,0,-1); % tube externe
avec OMBRAGE
    [Texsou2,Nptste2] = parois_chem(Rde,Lte-zlim,0,Nannt2,Ncirteso,APMte2,[0 0 zlim],0,-1); % tu
be externe sans OMBRAGE
    Texsou = [Texsou1;Texsou2]; Nptste = [Nptste1 Nptste2]; APMte = [APMte1 APMte2]; % tube compl
et
    APMce =  $\pi$ *ones(1,Nannce);
    [Cexsou,Nptsce] = parois_chem(Rde,Lce,Ae,Nannce,Ncirteso,APMce,[0 0 Lte],0,-1); % cône extern
e sans OMBRAGE
end
% Trois sous-cas pour la discrétisation des parois internes avec et sans ombrage
deltazci = Lci/Nannci*cosd(Ai); % résolution suivant z sur le cône interne
deltazti = Lti/Nannti; % idem pour le tube interne
Ncirtiso = round(Ncirti* $\pi$ /2/ $\gamma$ max); % nbe de pts par anneau (cône int.) ajusté pour une circonfé
rence complète (zones sans ombrage)
Ncirtiso = round(Ncirti* $\pi$ /2/ $\gamma$ max); % idem pour tube interne
if zlim<zfi-deltazci/2 && zlim>Lti+deltazci/2 % une fraction seulement du cône est ombragée
    Rdi2 = Rdi+(zlim-Lti)*tand(Ai);
    Lci1 = (zlim-Lti)/cosd(Ai); Lci2 = Lci-Lci1;
    Nannci1 = round(Nannci*Lci1/Lci); Nannci2 = Nannci-Nannci1;
    APMci1 =  $\gamma$ max*ones(1,Nannci1); APMci2 =  $\pi$ *ones(1,Nannci2);
    [Cinsou1,Nptsce1] = parois_chem(Rdi,Lci1,Ai,Nannci1,Ncirtiso,APMci1,[0 0 Lti],0,+1); % partie d
u cône interne avec OMBRAGE
    [Cinsou2,Nptsce2] = parois_chem(Rdi2,Lci2,Ai,Nannci2,Ncirtiso,APMci2,[0 0 zlim],0,+1); % part
ie du cône interne sans OMBRAGE
    Cinsou = [Cinsou1;Cinsou2]; Nptsce = [Nptsce1 Nptsce2]; APMci = [APMci1 APMci2]; % cône compl
et
elseif zlim<=Lti+deltazci/2 && zlim>=Lti-deltazti/2 % pas d'ombrage pour tout le cône, ombrage po
ur tout le tube
    APMci =  $\pi$ *ones(1,Nannci);
    [Cinsou,Nptsce] = parois_chem(Rdi,Lci,Ai,Nannci,Ncirtiso,APMci,[0 0 Lti],0,+1); % cône intern
e sans OMBRAGE
elseif zlim<Lti-deltazti/2 % pas d'ombrage pour tout le cône, une fraction du tube sans ombrage
    Nannti1 = round(Nannti* $\pi$ /2/zlim/Lti); Nannti2 = Nannti-Nannti1;
    APMti1 =  $\gamma$ max*ones(1,Nannti1); APMti2 =  $\pi$ *ones(1,Nannti2);
    [Tinsou1,Nptsti1] = parois_chem(Rdi,zlim,0,Nannti1,Ncirtiso,APMti1,centre,0,+1); % tube interne
avec OMBRAGE
    [Tinsou2,Nptsti2] = parois_chem(Rdi,Lti-zlim,0,Nannti2,Ncirtiso,APMti2,[0 0 zlim],0,+1); % tu
be interne sans OMBRAGE

```

```

    Tinsou = [Tinsou1;Tinsou2]; Nptsti = [Nptsti1 Nptsti2]; APMti = [APMti1 APMti2]; % tube compl
    et
    APMci = pi*ones(1,Nannci);
    [Cinsou,Nptsci] = parois_chem(Rdi,Lci,Ai,Nannci,Ncirciso,APMci,[0 0 Lti],0,+1); % cône intern
    e sans OMBRAGE
end

% DISCRÉTISATION DES CIBLES (réduites à des segments)
[Entcib] = ann_circ0(Rdi,Rde,Nsegen,0,centre,0,+1); % normales dirigées vers les z>0
[Tincib] = parois_seg(Rdi,Lti,0,Nsegti,centre,+1);
[Texcib] = parois_seg(Rde,Lte,0,Nsegte,centre,-1);
[Cincib] = parois_seg(Rdi,Lci,Ai,Nsegci,[0 0 Lti],+1);
[Cexcib] = parois_seg(Rde,Lce,Ae,Nsegce,[0 0 Lte],-1);
% La fonction parois_chem.m peut aussi être utilisée (voir les lignes qui suivent), mais la notat
ion est plus lourde

% Discrétisation de la surface de sortie (réduite à un segment)
% Coordonnées des deux extrémités du segment définissant la surface de sortie réduite
parsor = [Rfi Rfe;0 0;zfi zfe];
if parsor(3,1)==parsor(3,2) % les deux embouts coniques se terminent à la même hauteur => la sort
ie est un anneau circulaire (cône aplati de demi-angle 90 deg)
    [Sorci] = ann_circ0(min(parsor(1,:)),max(parsor(1:)),Nsegso,0,[0 0 parsor(3,1)],0,-1); % no
rmales dirigées vers les z<0
else % calcul des paramètres géométriques du cône de sortie non aplati
    Zs = min(parsor(3,:)); % choix du plus petit z comme début du cône de sortie
    Rs1 = parsor(1,parsor(3,:)==Zs); % rayon d'entrée correspondant au plus petit z
    Rs2 = parsor(1,parsor(3,:)-=Zs); % rayon de sortie correspondant au plus grand z
    Ls = norm(parsor(:,1)-parsor(:,2));% distance entre les extrémités des cônes interne et exter
ne
    As = asind((Rs2-Rs1)/Ls); % d'après la formule Rout = Rin + L*sind(alpha) pour un cô
ne
    sensso = parsor(3,2)-parsor(3,1); % parois de la sortie est interne/externe suivant le signe
de deltax
    [Sorci] = parois_seg(Rs1,Ls,As,Nsegso,[0 0 Zs],sensso);
end

% Dessin 3D des surfaces sources de l'injecteur (rouge,bleu,vert,cyan,magenta) et des surfaces ci
bles (noir)
cibles = [Entcib;Tincib;Cincib;Texcib;Cexcib;Sorci];
figure
plot3(Entsou(:,1),Entsou(:,2),Entsou(:,3),'r'); hold on
plot3(Tinsou(:,1),Tinsou(:,2),Tinsou(:,3),'b')
plot3(Cinsou(:,1),Cinsou(:,2),Cinsou(:,3),'g')
plot3(Texsou(:,1),Texsou(:,2),Texsou(:,3),'c')
plot3(Cexsou(:,1),Cexsou(:,2),Cexsou(:,3),'m')
plot3(cibles(:,1),cibles(:,2),cibles(:,3),'k')
xlabel('X'); ylabel('Y'); zlabel('Z'); grid on; hold off

% CERTAINES MATRICES D'ÉCHANGE SONT NULLES SYSTÉMATIQUEMENT OU DANS DES CONDITIONS SPÉCIALES À DÉ
TERMINER
% Les matrices Ent2Ent, Tin2Tin et Cin2Cin sont nulles systématiquement car l'entrée est plane et
les 2 parois internes ne se 'voient' pas elles-mêmes.

% CALCUL DES 27 MATRICES D'ÉCHANGE DES FLUX ENTRE LES ÉLÉMENTS DES DIFFÉRENTES PARDIS
Ent2Tin = mat_echange_flux(Entsou,Tincib);
Ent2Cin = mat_echange_flux(Entsou,Cincib);
Ent2Tex = mat_echange_flux(Entsou,Texcib);
Ent2Cex = mat_echange_flux(Entsou,Cexcib);
Ent2Sor = mat_echange_flux(Entsou,Sorci);

Tin2Ent = mat_echange_flux(Tinsou,Entcib);
if Ai<=0

```

```

    Tin2Cin = zeros(length(Tinsou),Nsegci);
else
    Tin2Cin = mat_echange_flux(Tinsou,Cincib); % Tin2Cin est nulle lorsque Ai<=0
end
Tin2Tex = mat_echange_flux(Tinsou,Textcib);
Tin2Cex = mat_echange_flux(Tinsou,Cexcib);
Tin2Sor = mat_echange_flux(Tinsou,Sorcib);

Cin2Ent = mat_echange_flux(Cinsou,Entcib);
if Ai<=0
    Cin2Tin = zeros(length(Cinsou),Nsegti);
else
    Cin2Tin = mat_echange_flux(Cinsou,Tincib); % Cin2Tin est nulle lorsque Ai<=0
end
Cin2Tex = mat_echange_flux(Cinsou,Textcib);
Cin2Cex = mat_echange_flux(Cinsou,Cexcib);
Cin2Sor = mat_echange_flux(Cinsou,Sorcib);

Tex2Ent = mat_echange_flux(Texsou,Entcib);
Tex2Tin = mat_echange_flux(Texsou,Tincib);
Tex2Cin = mat_echange_flux(Texsou,Cincib);
Tex2Tex = mat_echange_flux(Texsou,Textcib);
Tex2Cex = mat_echange_flux(Texsou,Cexcib);
Tex2Sor = mat_echange_flux(Texsou,Sorcib);

Cex2Ent = mat_echange_flux(Cexsou,Entcib);
Cex2Tin = mat_echange_flux(Cexsou,Tincib);
Cex2Cin = mat_echange_flux(Cexsou,Cincib);
Cex2Tex = mat_echange_flux(Cexsou,Textcib);
Cex2Cex = mat_echange_flux(Cexsou,Cexcib);
Cex2Sor = mat_echange_flux(Cexsou,Sorcib);

% CERTAINES MATRICES D'OMBRAGE SONT NULLES SYSTÉMATIQUEMENT OU DANS DES CONDITIONS SPÉCIALES À DÉ
% TERMINER

% CALCUL DES 38 MATRICES D'OMBRAGE ET CORRECTION DES MATRICES D'ÉCHANGES
% L'effet d'ombrage est dû aux parois internes seulement qui présentent deux géométries différent
% es (tube et cône). Il faut donc calculer 2 matrices d'ombrage par matrice d'échange
% Dans les cas où la surface d'ombrage coïncide avec la source ou la cible, les calculs d'ombrage
% ne sont pas nécessaires.

Omb_Cin = ombrage_cone(Entsou(:,1:3),Tincib(:,1:3),Rdi,Lci,Ai,[0 0 Lti]); % ombrage dû au cône in
terne
Ent2Tin = Ent2Tin.*Omb_Cin; % correction de la matrice d'éch
ange
Omb_Tin = ombrage_cone(Entsou(:,1:3),Cincib(:,1:3),Rdi,Lti,0,centre);
Ent2Cin = Ent2Cin.*Omb_Tin;
Omb_Tin = ombrage_cone(Entsou(:,1:3),Textcib(:,1:3),Rdi,Lti,0,centre);
Omb_Cin = ombrage_cone(Entsou(:,1:3),Textcib(:,1:3),Rdi,Lci,Ai,[0 0 Lti]);
Ent2Tex = Ent2Tex.*Omb_Tin.*Omb_Cin;
Omb_Tin = ombrage_cone(Entsou(:,1:3),Cexcib(:,1:3),Rdi,Lti,0,centre);
Omb_Cin = ombrage_cone(Entsou(:,1:3),Cexcib(:,1:3),Rdi,Lci,Ai,[0 0 Lti]);
Ent2Cex = Ent2Cex.*Omb_Tin.*Omb_Cin;
Omb_Tin = ombrage_cone(Entsou(:,1:3),Sorcib(:,1:3),Rdi,Lti,0,centre);
Omb_Cin = ombrage_cone(Entsou(:,1:3),Sorcib(:,1:3),Rdi,Lci,Ai,[0 0 Lti]);
Ent2Sor = Ent2Sor.*Omb_Tin.*Omb_Cin;

Omb_Cin = ombrage_cone(Tinsou(:,1:3),Entcib(:,1:3),Rdi,Lci,Ai,[0 0 Lti]);
Tin2Ent = Tin2Ent.*Omb_Cin;
% Tin2Cin: aucun calcul d'ombrage nécessaire puisque source et cible sont aussi l'une ou l'autre
des surfaces d'ombrage
Omb_Cin = ombrage_cone(Tinsou(:,1:3),Textcib(:,1:3),Rdi,Lci,Ai,[0 0 Lti]);

```

```

Tin2Tex = Tin2Tex.*Omb_Cin;
Omb_Cin = ombrage_cone(Tinsou(:,1:3),Cexcib(:,1:3),Rdi,Lci,Ai,[0 0 Lti]);
Tin2Cex = Tin2Cex.*Omb_Cin;
Omb_Cin = ombrage_cone(Tinsou(:,1:3),Sor cib(:,1:3),Rdi,Lci,Ai,[0 0 Lti]);
Tin2Sor = Tin2Sor.*Omb_Cin;

Omb_Tin = ombrage_cone(Cinsou(:,1:3),Entcib(:,1:3),Rdi,Lti,0,centre);
Cin2Ent = Cin2Ent.*Omb_Tin;
% Cin2Tin: aucun calcul d'ombrage nécessaire puisque source et cible sont aussi l'une ou l'autre
des surfaces d'ombrage
Omb_Tin = ombrage_cone(Cinsou(:,1:3),Texcib(:,1:3),Rdi,Lti,0,centre);
Cin2Tex = Cin2Tex.*Omb_Tin;
Omb_Tin = ombrage_cone(Cinsou(:,1:3),Cexcib(:,1:3),Rdi,Lti,0,centre);
Cin2Cex = Cin2Cex.*Omb_Tin;
Omb_Tin = ombrage_cone(Cinsou(:,1:3),Sor cib(:,1:3),Rdi,Lti,0,centre);
Cin2Sor = Cin2Sor.*Omb_Tin;

Omb_Tin = ombrage_cone(Texsou(:,1:3),Entcib(:,1:3),Rdi,Lti,0,centre);
Omb_Cin = ombrage_cone(Texsou(:,1:3),Entcib(:,1:3),Rdi,Lci,Ai,[0 0 Lti]);
Tex2Ent = Tex2Ent.*Omb_Tin.*Omb_Cin;
Omb_Cin = ombrage_cone(Texsou(:,1:3),Tincib(:,1:3),Rdi,Lci,Ai,[0 0 Lti]);
Tex2Tin = Tex2Tin.*Omb_Cin;
Omb_Tin = ombrage_cone(Texsou(:,1:3),Cincib(:,1:3),Rdi,Lti,0,centre);
Tex2Cin = Tex2Cin.*Omb_Tin;
Omb_Tin = ombrage_cone(Texsou(:,1:3),Texcib(:,1:3),Rdi,Lti,0,centre);
Omb_Cin = ombrage_cone(Texsou(:,1:3),Texcib(:,1:3),Rdi,Lci,Ai,[0 0 Lti]);
Tex2Tex = Tex2Tex.*Omb_Tin.*Omb_Cin;
Omb_Tin = ombrage_cone(Texsou(:,1:3),Cexcib(:,1:3),Rdi,Lti,0,centre);
Omb_Cin = ombrage_cone(Texsou(:,1:3),Cexcib(:,1:3),Rdi,Lci,Ai,[0 0 Lti]);
Tex2Cex = Tex2Cex.*Omb_Tin.*Omb_Cin;
Omb_Tin = ombrage_cone(Texsou(:,1:3),Sor cib(:,1:3),Rdi,Lti,0,centre);
Omb_Cin = ombrage_cone(Texsou(:,1:3),Sor cib(:,1:3),Rdi,Lci,Ai,[0 0 Lti]);
Tex2Sor = Tex2Sor.*Omb_Tin.*Omb_Cin;

Omb_Tin = ombrage_cone(Cexsou(:,1:3),Entcib(:,1:3),Rdi,Lti,0,centre);
Omb_Cin = ombrage_cone(Cexsou(:,1:3),Entcib(:,1:3),Rdi,Lci,Ai,[0 0 Lti]);
Cex2Ent = Cex2Ent.*Omb_Tin.*Omb_Cin;
Omb_Cin = ombrage_cone(Cexsou(:,1:3),Tincib(:,1:3),Rdi,Lci,Ai,[0 0 Lti]);
Cex2Tin = Cex2Tin.*Omb_Cin;
Omb_Tin = ombrage_cone(Cexsou(:,1:3),Cincib(:,1:3),Rdi,Lti,0,centre);
Cex2Cin = Cex2Cin.*Omb_Tin;
Omb_Tin = ombrage_cone(Cexsou(:,1:3),Texcib(:,1:3),Rdi,Lti,0,centre);
Omb_Cin = ombrage_cone(Cexsou(:,1:3),Texcib(:,1:3),Rdi,Lci,Ai,[0 0 Lti]);
Cex2Tex = Cex2Tex.*Omb_Tin.*Omb_Cin;
Omb_Tin = ombrage_cone(Cexsou(:,1:3),Cexcib(:,1:3),Rdi,Lti,0,centre);
Omb_Cin = ombrage_cone(Cexsou(:,1:3),Cexcib(:,1:3),Rdi,Lci,Ai,[0 0 Lti]);
Cex2Cex = Cex2Cex.*Omb_Tin.*Omb_Cin;
Omb_Tin = ombrage_cone(Cexsou(:,1:3),Sor cib(:,1:3),Rdi,Lti,0,centre);
Omb_Cin = ombrage_cone(Cexsou(:,1:3),Sor cib(:,1:3),Rdi,Lci,Ai,[0 0 Lti]);
Cex2Sor = Cex2Sor.*Omb_Tin.*Omb_Cin;

clear Omb_Tin Omb_Cin

% Concaténation des points des murs latéraux (tubes+cônes) discrétisés en tant que cibles
Mincib = [Tincib;Cincib]; Nsegmi = Nsegti+Nsegci; % murs internes cibles
Mexcib = [Texcib;Cexcib]; Nsegme = Nsegte+Nsegce; % murs externes cibles

% CALCUL ITÉRATIF DES FLUX ÉCHANGÉS DANS L'INJECTEUR
% Définition des conditions initiales
i = 1; % numéro du jet/étape (i est le nbe de collisions avec les parois des sources secondair
es + 1)
prop = 1; % proportion de particules s'échangeant dans l'injecteur lors du 1er jet

```

```

% Initialisation des matrices utilisées dans la boucle 'while' (on présume qu'il y aura au plus 3
%% itérations)
F_Min = zeros(Nsegmi,300); % flux incidents sur les murs internes lors de chaque étape
F_Mex = zeros(Nsegme,300); % même chose pour les murs externes
F_out = zeros(Nsegso,300); % même chose pour la surface de sortie (flux sortants)
F_ret = zeros(Nsegen,300); % même chose pour la surface d'entrée (flux rétrodiffusés)

% CALCUL DES FLUX REÇUS LORS DU 1er JET (correspondant à 0 collision à l'intérieur de l'injecteur
)
% Flux reçus par les parois latérales et la sortie provenant directement de la source primaire (e
ntrée)
Mincib(1:Nsegti,8) = (Ent2Tin'*(Entsou(:,8))).*Tincib(1:Nsegti,4);
Mincib(Nsegti+1:Nsegmi,8) = (Ent2Cin'*(Entsou(:,8))).*Cincib(1:Nsegci,4);
Mexcib(1:Nsegte,8) = (Ent2Tex'*(Entsou(:,8))).*Texcib(1:Nsegte,4);
Mexcib(Nsegte+1:Nsegme,8) = (Ent2Cex'*(Entsou(:,8))).*Cexcib(1:Nsegce,4);
Sorciib(:,8) = (Ent2Sor'*(Entsou(:,8))).*Sorciib(:,4);
% Élimination des matrices d'échange devenues inutiles
clear Ent2Tin Ent2Cin Ent2Tex Ent2Cex Ent2Sor

% Mise en mémoire des résultats dans des matrices
F_Min(:,i) = Mincib(:,8); % flux reçus par les parois internes lors du 1er jet
F_Mex(:,i) = Mexcib(:,8); % flux reçus par les parois externes lors du 1er jet
F_out(:,i) = Sorciib(:,8); % flux sortant de l'injecteur lors du 1er jet
F_ret(:,i) = zeros(Nsegen,1); % flux retournant dans l'entrée lors du 1er jet (nul par définition
)

%% Distribution de brillance en fn de rho et z sur l'entrée (vert), les parois internes (bleu),
externes (rouge) et la sortie (noir) après le premier jet
% figure
% plot3(Entcib(:,1),Entcib(:,3),F_in/pi/(Rde^2-Rdi^2)*ones(Nsegen,1),'g. '); hold on
% plot3(Mincib(:,1),Mincib(:,3),Mincib(:,8)./Mincib(:,4),'b. ')
% plot3(Mexcib(:,1),Mexcib(:,3),Mexcib(:,8)./Mexcib(:,4),'r. ')
% plot3(Sorciib(:,1),Sorciib(:,3),Sorciib(:,8)./Sorciib(:,4),'k. ')
% xlabel('Rayon (rho)'); ylabel('Hauteur (z)'); zlabel('Brillance'); hold off

% BOUCLE DE CALCUL DES FLUX ÉCHANGÉS À L'INTÉRIEUR DE L'INJECTEUR (série convergente)
while prop > precision

% Redistribution sur les parois internes sources des flux reçus lors de l'étape précédente par le
s parois internes cibles
% L'utilisation d'une interpolation + intégration numérique est + souple, mais il faudra se méfie
r de la discontinuité à la frontière cylindre-cône.
% Redistribution sur le tube interne
saut = cumsum([0 Nptsti]); % donne l'indice du dernier point pour démarrer à l'anneau suivant
for n = 1:Nannti
ind1 = (1:Nptsti(n))+saut(n); % nbe de pts par anneau sur le tube interne (on tient compt
e des variations d'un anneau à l'autre)
ind2 = (1:Nsegti/Nannti)+(n-1)*Nsegti/Nannti;
Tinsou(ind1,8) = sum(F_Min(ind2,i))/Nptsti(n)*APMti(n)/pi; % chaque anneau de Tinsou ne r
eprésente qu'une fraction APMti/pi de la circonférence complète (contrairement à F_Min ou Tincib)
end
% Redistribution sur le cône interne
saut = cumsum([0 Nptsci]);
for n = 1:Nannci
ind1 = (1:Nptsci(n))+saut(n); % nbe de pts par anneau sur le cône interne (même remarque
que précédemment)
ind2 = Nsegti+(1:Nsegci/Nannci)+(n-1)*Nsegci/Nannci;
Cinsou(ind1,8) = sum(F_Min(ind2,i))/Nptsci(n)*APMci(n)/pi; % même remarque pour Cinsou qu
e précédente pour Tinsou
end

```



```

% Redistribution sur les parois externes sources des flux reçus lors de l'étape précédente par les
% parois externes cibles
% L'utilisation d'une interpolation + intégration numérique est + souple, mais il faudra se méfier
% de la discontinuité à la frontière cylindre-cône.
% Redistribution sur le tube externe
    saut = cumsum([0 Nptste]);
    for n = 1:Nannte
        ind1 = (1:Nptste(n))+saut(n); % nbe de pts par anneau sur le tube externe (même remarque
        que précédemment)
        ind2 = (1:Nsegte/Nannte)+(n-1)*Nsegte/Nannte;
        Texsou(ind1,8) = sum(F_Mex(ind2,i))/Nptste(n)*APMte(n)/pi; % même remarque pour Texsou q
        ue précédente pour Tinsou
    end
% Redistribution sur le cône externe
    saut = cumsum([0 Nptsce]);
    for n = 1:Nannce
        ind1 = (1:Nptsce(n))+saut(n); % nbe de pts par anneau sur le cône externe (même remarque
        que précédemment)
        ind2 = Nsegce+(1:Nsegce/Nannce)+(n-1)*Nsegce/Nannce;
        Cexsou(ind1,8) = sum(F_Mex(ind2,i))/Nptsce(n)*APMce(n)/pi; % même remarque pour Cexsou q
        ue précédente pour Tinsou
    end

    % CALCUL DES FLUX ÉCHANGÉS DURANT CETTE ÉTAPE
    % Flux allant des parois latérales vers l'entrée
    F_ret(:,i+1) = (Tin2Ent'*Tinsou(:,8)+Tex2Ent'*Texsou(:,8)+Cin2Ent'*Cinsou(:,8)+Cex2Ent'*Cexso
    u(:,8)).*Entcib(:,4);
    % Flux allant des parois latérales vers la sortie
    F_out(:,i+1) = (Tin2Sor'*Tinsou(:,8)+Tex2Sor'*Texsou(:,8)+Cin2Sor'*Cinsou(:,8)+Cex2Sor'*Cexso
    u(:,8)).*Sorcib(:,4);
    % Flux allant des parois latérales vers le tube et le cône internes
    F_Min(1:Nsegti,i+1) = (Tex2Tin'*Texsou(:,8)+Cin2Tin'*Cinsou(:,8)+Cex2Tin'*Cexsou(:,8)).*Tinci
    b(:,4);
    F_Min(Nsegti+1:Nsegmi,i+1) = (Tin2Cin'*Tinsou(:,8)+Tex2Cin'*Texsou(:,8)+Cex2Cin'*Cexsou(:,8))
    .*Cincib(:,4);
    % Flux allant des parois latérales vers le tube et le cône externes
    F_Mex(1:Nsegte,i+1) = (Tin2Tex'*Tinsou(:,8)+Tex2Tex'*Texsou(:,8)+Cin2Tex'*Cinsou(:,8)+Cex2Tex
    '*Cexsou(:,8)).*Texcib(:,4);
    F_Mex(Nsegte+1:Nsegme,i+1) = (Tin2Cex'*Tinsou(:,8)+Tex2Cex'*Texsou(:,8)+Cin2Cex'*Cinsou(:,8)+
    Cex2Cex'*Cexsou(:,8)).*Cexcib(:,4);

    % Calcul du ratio du flux total reçu par les parois durant cette étape sur celui reçu/accumul
    é jusqu'à présent (i.e. durant cette étape et toutes les précédentes)
    prop = (sum(F_Min(:,i+1))+sum(F_Mex(:,i+1)))/(sum(sum(F_Min))+sum(sum(F_Mex)));
    i=i+1;
end

% Élimination des matrices d'échange devenues inutiles pour alléger la mémoire vive
clear Tin2Ent Cin2Ent Tex2Ent Cex2Ent Tin2Sor Cin2Sor Tex2Sor Cex2Sor
clear Tin2Tex Tin2Cex Cin2Tex Cin2Cex Tex2Tin Tex2Cin Cex2Tin Cex2Cin
clear Tin2Cin Cin2Tin Tex2Tex Tex2Cex Cex2Tex Cex2Cex

% Suppression de l'espace réservé et non utilisé dans les matrices de flux
F_ret(:,i+1:end) = [];
F_out(:,i+1:end) = [];
F_Min(:,i+1:end) = [];
F_Mex(:,i+1:end) = [];

Niter = i; % nombre d'itérations

% Calculs d'erreur relative - Fraction des flux non comptabilisés
Err = zeros(i,1);

```

```

Err(1) = (F_in-sum(F_Min(:,1))-sum(F_Mex(:,1))-sum(F_out(:,1))-sum(F_ret(:,1)))/F_in;
for j = 1:i-1
Err(j+1) = (sum(F_Min(:,j))+sum(F_Mex(:,j))-sum(F_Min(:,j+1))-sum(F_Mex(:,j+1))-sum(F_out(:,j+1))
-sum(F_ret(:,j+1)))/(sum(F_Min(:,j))+sum(F_Mex(:,j)));
end

% Calcul de la fraction des flux transmis à travers l'injecteur (aka facteur de Clausing ou proba
bilité de transmission)
W1 = (F_in-sum(sum(F_ret)))/F_in; % en utilisant la somme des flux retournant vers l'entrée
W2 = sum(sum(F_out))/F_in; % en utilisant la somme des flux sortant de l'injecteur

% Flux totaux reçus par les parois après stabilisation de l'injecteur
FMintot = sum(F_Min,2); % parois internes
FMextot = sum(F_Mex,2); % parois externes

% % Distribution de la brillance due au flux reçus par les parois latérales après stabilisation
% BMin = FMintot./Mincib(:,4); % parois internes
% BMex = FMextot./Mexcib(:,4); % parois externes
%
% % Distribution de la brillance due au flux reçus par les parois virtuelles après stabilisation
% BRet = sum(F_ret,2)./Entcib(:,4); % surface d'entrée
% BOut = sum(F_out,2)./Sor cib(:,4); % surface de sortie

% % Distribution de la brillance 'finale' sur l'entrée (vert), les parois internes (bleu), extern
es (rouge) et la sortie (noir)
% figure
% plot3(Entcib(:,1),Entcib(:,3),F_in/pi/(Rde^2-Rdi^2)*ones(Nsegen,1),'g-'); hold on
% plot3(Entcib(:,1),Entcib(:,3),BRet,'g-')
% plot3(Mincib(:,1),Mincib(:,3),BMin,'b-')
% plot3(Mexcib(:,1),Mexcib(:,3),BMex,'r-')
% plot3(Sorcib(:,1),Sor cib(:,3),BOut,'k-')
% xlabel('Rayon (rho)'); ylabel('Hauteur (z)'); zlabel('Brillance'); grid on; hold off

clear F_ret F_out F_Min F_Mex % élimination des matrices donnant les flux partiels devenues inuti
les
toc

% CALCUL DES FLUX ENVOYÉS VERS LA CIBLE (gaufre ou arc de sphère)
% Je n'ai pas encore réussi à trouver une méthode générale pour éliminer du calcul une partie des
points ombragés
% Il faut donc utiliser les parois émettrices complètes (sans restriction d'angle => de 0 à pi)

% Discrétisation des parois émettrices de l'injecteur sans restriction d'angle
[Entsou,Nptsen,rhoen] = ann_circ0(Rdi,Rde,Nannen,pi,centre,F_in,+1); % entrée (source pri
maire)
[Tinsou,Nptsti] = parois_chem(Rdi,Lti,0,Nannti,Ncirti,pi*ones(1,Nannti),centre,0,+1); % tube i
nterne
[Texsou,Nptste] = parois_chem(Rde,Lte,0,Nannte,Ncirte,pi*ones(1,Nannte),centre,0,-1); % tube e
xterne
[Cinsou,Nptsci] = parois_chem(Rdi,Lci,Ai,Nannci,Ncirci,pi*ones(1,Nannci),[0 0 Lti],0,+1);% cône i
nterne
[Cexsou,Nptsce] = parois_chem(Rde,Lce,Ae,Nannce,Ncirce,pi*ones(1,Nannce),[0 0 Lte],0,-1);% cône e
xterne

% Concaténation des points des parois internes et externes en tant que sources
Minsou = [Tinsou;Cinsou]; Nannmi = Nannti+Nannci; % murs internes
Mexsou = [Texsou;Cexsou]; Nannme = Nannte+Nannce; % murs externes
NEnt = length(Entsou); NMin = length(Minsou); NMex = length(Mexsou);

% Redistribution sur les parois internes sources (Minsou) des flux reçus par les parois internes
cibles (Mincib) lors de la stabilisation de l'injecteur
% On pourrait aussi utiliser une interpolation et une intégration numérique (voir lignes suivante

```

```

s)
%% Interpolation des flux sur les anneaux du réflecteur (vs. ceux du réflecteur simplifié)
% flux_ann = interp1(ref_seg(:,3),ref_seg(:,8),refl(:,3),'cubic'); % => tester les autres types d
'interpolation
Nptsmi = [Nptsti Nptscli]; % nbe de pts par anneau sur les parois internes (tient compte des varia
tions d'un anneau à l'autre)
saut = cumsum([0 Nptsmi]);
for n = 1:Nannmi
    ind1 = (1:Nptsmi(n))+saut(n);
    ind2 = (1:Nsegmi/Nannmi)+(n-1)*Nsegmi/Nannmi;
    Minsou(ind1,8) = sum(FMintot(ind2))/Nptsmi(n); % chaque anneau de Minsou représente la circonfé
rence complète => pas de facteur correctif (APM)
end

% Redistribution sur les parois externes sources (Mexsou) des flux reçus par les parois externes
cibles (Mexcib) lors de la stabilisation de l'injecteur
% On pourrait aussi utiliser une interpolation et une intégration numérique (voir lignes suivante
s)
Nptsme = [Nptste Nptsce]; % nbe de pts par anneau sur les parois externes (tient compte des varia
tions d'un anneau à l'autre)
saut = cumsum([0 Nptsme]);
for n = 1:Nannme
    ind1 = (1:Nptsme(n))+saut(n);
    ind2 = (1:Nsegme/Nannme)+(n-1)*Nsegme/Nannme;
    Mexsou(ind1,8) = sum(FMextot(ind2))/Nptsme(n); % chaque anneau de Mexsou représente la circonfé
rence complète => pas de facteur correctif (APM)
end

% CALCUL DES FLUX ALLANT DE L'INJECTEUR VERS DEUX TYPES DE CIBLES (disque ou demi-sphère)

% CAS OU LA CIBLE EST UN DISQUE D'AXE Oz (GAUFRE)
% Discrétisation de la gaufre placée à incidence normale (réduite à son rayon suivant Ox)
Gaucib = ann_circ0(0,Rg,Nsegga,0,[0 0 Dg],0,-1); % normales dirigées vers les z<0 (i.e. vers l'in
jecteur)
RayGau = Gaucib(:,1);

% Calcul des matrices d'échanges entre les parois de l'injecteur et la gaufre
Ent2Gau = mat_echange_flux(Entsou,Gaucib);
Min2Gau = mat_echange_flux(Minsou,Gaucib);
Mex2Gau = mat_echange_flux(Mexsou,Gaucib);

% Calcul des matrices d'ombrage pour les flux allant vers la gaufre
% L'effet d'ombrage est dû aux parois internes et externes qui présentent chacune deux géométries
différentes (tube et cône). Il faut donc calculer 4 matrices d'ombrage différentes
% On assemble toutes les parois de l'injecteur en une seule grosse matrice afin de pouvoir calcul
er les effets d'ombrage en une seule fois
Injsou = [Entsou(:,1:3);Minsou(:,1:3);Mexsou(:,1:3)]; % coordonnées des pts des parois de tout l'
injecteur
OInjGau1 = ombrage_cone(Injsou,Gaucib(:,1:3),Rdi,Lti,0,centre); % ombrage dû au tube interne
OInjGau2 = ombrage_cone(Injsou,Gaucib(:,1:3),Rdi,Lci,Ai,[0 0 Lti]); % ombrage dû au cône interne
OInjGau3 = ombrage_cone(Injsou,Gaucib(:,1:3),Rde,Lte,0,centre); % ombrage dû au tube externe
OInjGau4 = ombrage_cone(Injsou,Gaucib(:,1:3),Rde,Lce,Ae,[0 0 Lte]); % ombrage dû au cône externe
OInjGau = OInjGau1.*OInjGau2.*OInjGau3.*OInjGau4; % matrice d'ombrage 'totale'
clear OInjGau1 OInjGau2 OInjGau3 OInjGau4 % élimination des matrices devenues inutiles

% Correction des matrices d'échanges entre l'injecteur et la gaufre
Ent2Gau = Ent2Gau.*OInjGau(1:NEnt,:);
Min2Gau = Min2Gau.*OInjGau(NEnt+1:NEnt+NMin,:);
Mex2Gau = Mex2Gau.*OInjGau(NEnt+NMin+1:NEnt+NMin+NMex,:);
clear OInjGau

% Calcul de la brillance en chaque point de la gaufre

```

```

% On a séparé les contributions des 3 parois émettrices (entrée, murs internes et externes) afin
de mieux évaluer l'effet de chacun
BriGauEn = Ent2Gau'*Entsou(:,8);
BriGauMi = Min2Gau'*Minsou(:,8);
BriGauMe = Mex2Gau'*Mexsou(:,8);
BriGau = BriGauEn+BriGauMi+BriGauMe;

% Calcul de l'efficacité pour la gaufre
% Somme des flux incidents divisée par le coefficient de transmission et par le flux total émis p
ar la source primaire
EffG1 = sum(BriGau.*Gaucib(:,4))/W1/F_in; % W1 calculé via les flux rétrodiffusés vers l'entrée
EffG2 = sum(BriGau.*Gaucib(:,4))/W2/F_in; % W2 calculé via les flux sortant de l'injecteur

% Distribution radiale normalisée de la brillance sur la gaufre
figure
plot(RayGau,BriGauEn/max(BriGau),'g-',RayGau,BriGauMi/max(BriGau),'b-',RayGau,BriGauMe/max(BriGau
),'r-',RayGau,BriGau/max(BriGau),'k-')
xlabel('Distance radiale sur la gaufre (mm)'); ylabel('Brillance normalisée')
title(['Rdi=' num2str(Rdi) ' Rde=' num2str(Rde) ' Lti=' num2str(Lti) ' Lte=' num2str(Lte) ' Lci='
num2str(Lci) ' Lce=' num2str(Lce) ' Ai=' num2str(Ai) ' Ae=' num2str(Ae) ' Dg=' num2str(Dg)])
legend('Entrée','Murs int.','Murs ext.','Total'); axis([0 Rg 0 1]); grid on
toc

% CAS OU LA CIBLE EST UNE DEMI-SPHÈRE ENGLOBANT TOUTE LA SORTIE DE L'INJECTEUR
% Discrétisation de la demi-sphère (réduite à un demi-arc dans le plan xOz)
Rarc = 1.1*max(Rfi,Rfe); % ajout d'un facteur de sécurité de 10% pour éviter que l'arc de sphère
ne touche l'extrémité d'un des cônes
zarc = min(zfi,zfe);
[Arccib,theta] = arc_sphere(Rarc,Ntheta,0,90,[0 0 zarc],-1); % normales dirigées vers les z<0 - 1
es angles theta sont exprimés en degré

% Calcul des matrices d'échanges entre les parois de l'injecteur et la demi-sphère
Ent2Arc = mat_echange_flux(Entsou,Arccib);
Min2Arc = mat_echange_flux(Minsou,Arccib);
Mex2Arc = mat_echange_flux(Mexsou,Arccib);

% Calcul des matrices d'ombrage pour les flux allant vers la demi-sphère
% L'effet d'ombrage est dû aux parois internes et externes qui présentent chacune deux géométries
différentes (tube et cône). Il faut donc calculer 4 matrices d'ombrage différentes
% On assemble toutes les parois de l'injecteur en une seule grosse matrice afin de pouvoir calcul
er les effets d'ombrage en une seule fois
Injsou = [Entsou(:,1:3);Minsou(:,1:3);Mexsou(:,1:3)]; % coordonnées des pts des parois de tout l'
injecteur
OInjArc1 = ombrage_cone(Injsou,Arccib(:,1:3),Rdi,Lti,0,centre); % ombrage dû au tube interne
OInjArc2 = ombrage_cone(Injsou,Arccib(:,1:3),Rdi,Lci,Ai,[0 0 Lti]); % ombrage dû au cône interne
OInjArc3 = ombrage_cone(Injsou,Arccib(:,1:3),Rde,Lte,0,centre); % ombrage dû au tube externe
OInjArc4 = ombrage_cone(Injsou,Arccib(:,1:3),Rde,Lce,Ae,[0 0 Lte]); % ombrage dû au cône externe
OInjArc = OInjArc1.*OInjArc2.*OInjArc3.*OInjArc4; % matrice d'ombrage 'totale'
clear OInjArc1 OInjArc2 OInjArc3 OInjArc4 % élimination des matrices devenues inutiles

% Correction des matrices d'échanges entre l'injecteur et la demi-sphère
Ent2Arc = Ent2Arc.*OInjArc(1:NEnt,:);
Min2Arc = Min2Arc.*OInjArc(NEnt+1:NEnt+NMin,:);
Mex2Arc = Mex2Arc.*OInjArc(NEnt+NMin+1:NEnt+NMin+NMex,:);
clear OInjArc

% Calcul de la brillance en chaque point de la demi-sphère
% On a séparé les contributions des 3 parois émettrices (entrée, murs internes et externes) afin
de mieux évaluer l'effet de chacun
BriArcEn = Ent2Arc'*Entsou(:,8);
BriArcMi = Min2Arc'*Minsou(:,8);
BriArcMe = Mex2Arc'*Mexsou(:,8);

```

```

BriArc = BriArcEn+BriArcMi+BriArcMe;

% Calcul de l'efficacité pour la demi-sphère
% Somme des flux incidents divisée par le coefficient de transmission et par le flux total émis par la source primaire
EffDS1 = sum(BriArc.*Arccib(:,4))/W1/F_in; % W1 calculé via les flux rétrodiffusés vers l'entrée
EffDS2 = sum(BriArc.*Arccib(:,4))/W2/F_in; % W2 calculé via les flux sortant de l'injecteur

%% Distribution polaire normalisée de la brillance (sur le demi-arc de sphère)
% figure
% plot(theta,BriArcEn/max(BriArc),'g-',theta,BriArcMi/max(BriArc),'b-',theta,BriArcMe/max(BriArc),'r-',theta,BriArc/max(BriArc),'k-')
% xlabel('Angle polaire (degré)'); ylabel('Brillance normalisée')
% title(['Rdi=' num2str(Rdi) ' Rde=' num2str(Rde) ' Lti=' num2str(Lti) ' Lte=' num2str(Lte) ' Lci=' num2str(Lci) ' Lce=' num2str(Lce) ' Ai=' num2str(Ai) ' Ae=' num2str(Ae) ' Dg=' num2str(Dg)])
% legend('Entrée','Murs int.','Murs ext.','Total'); axis([0 90 0 1]); grid on
toc

```

*Published with MATLAB® 7.5*

```

function [BriGauEnmod,BriGauMemod,BriGauMimod] = transformationmat(BriGauEn,BriGauMe,BriGauMi)
%Utiliser pour transformer les 3 matrices selon un ordre que le fichier
%excel est capable de prendre
BriGauEnmod = BriGauEn';
BriGauMemod = BriGauMe';
BriGauMimod = BriGauMi';

```

*Published with MATLAB® 7.5*

```

function [StoC,gamma] = mat_echange_flux(source,cible)

% Cette fonction calcule la matrices d'échange de flux entre une surface source et une surface cible en supposant qu'il n'y a aucun obstacle entre elles.
% Les surfaces discrétisées sont données sous forme de matrices ayant le format habituel:
% N lignes x 8 colonnes ou N représente le nombre de points sur la surface et les données des colonnes donnent les paramètres géométriques de chaque élément discrétisé.
% Contenu des colonnes:
% Coordonnées du point dans repère cartésien de référence, surface de l'élément associé, direction de sa normale sortante, flux reçu/envoyé.
% On présume que:
% - les normales originant de la source sont grossièrement dirigées vers la cible;
% - les normales originant de la cible sont grossièrement dirigées vers la source.
% Ce qui revient à dire que toutes les normales sont dirigées vers l'intérieur de l'injecteur.
% Copyright Laurent Isnard

% Paramètres d'entrée
% source: matrice des points de la surface source
% cible: matrice des points de la surface cible
% La matrice d'échange étant par définition symétrique, la désignation d'une source et d'une cible est purement arbitraire.

% Paramètres de sortie
% StoC: matrice des coefficients d'échange de flux entre la source et la cible (sans effet d'ombrage)

Ncib = size(cible,1);
Nsou = size(source,1);

% Initialisation de la matrice d'échange de flux
StoC = zeros(Nsou,Ncib);
% Initialisation de la matrice des angles d'incidence
gamma = zeros(Nsou,Ncib);

for n = 1:Nsou
% Vecteurs allant des points de la source vers les points de la cible
D = cible(:,1:3)-repmat(source(n,1:3),length(cible),1);
% Normes des vecteurs précédents au carré
D2 = sum(D.*D,2);
% Produits scalaires entre les D et les normales aux points de la source
P1 = D*source(n,5:7)'; % les normales vont dans le même sens que D => signe + (voir dans la description de la fonction)
% Tests sur les normales aux points de la source
P1(P1<0) = 0; % P1<0 signifie que les molécules doivent traverser une paroi de la source
% Produits scalaires entre les D et les normales aux points de la cible
P2 = -sum(D.*cible(:,5:7),2); % les normales vont dans le sens opposé à D => signe - (voir dans la description de la fonction)
% Tests sur les normales aux points de la cible
P2(P2<0) = 0; % P1<0 signifie que les molécules doivent traverser une paroi de la cible
% Calcul des angles d'incidence sur les points de la cible
gamma(n,:) = acos(P2./D2.^0.5);
% Calcul des coefficients d'échange (Source to Cible)
StoC(n,:) = (P1.*P2./D2./D2)';
end

% Normalisation des coefficients d'échange
StoC = StoC/pi;

% N.B.: Pour éliminer les produits scalaires négatifs, on pourrait aussi utiliser: P1=(P1+abs(P1))/2 (ça prend à peu près le même tps de calcul);

```

```

% % DESSINS MONTRANT LES COEFFICIENTS D'ÉCHANGE VERS LES POINTS DE LA CIBLE À PARTIR D'UN POINT D
ONNÉ DE LA SOURCE
% maxi = max(max(StoC));
% n=1; % point de référence sur la source (premier)
% null = cible((StoC(n,:)==0),:);
% faible = cible((StoC(n,:)~=0&&StoC(n,:)<=maxi/3),:);
% moyen = cible((StoC(n,*)>maxi/3&&StoC(n,*)<=maxi*2/3),:);
% fort = cible((StoC(n,*)>maxi*2/3),:);
% figure
% plot3(faible(:,1),faible(:,2),faible(:,3),'b. '); grid on; hold on
% plot3(moyen(:,1),moyen(:,2),moyen(:,3),'g. ')
% plot3(fort(:,1),fort(:,2),fort(:,3),'r. ')
% plot3(null(:,1),null(:,2),null(:,3),'c. ')
%
% n=Nsou; % point de référence sur la source (dernier)
% null = cible((StoC(n,:)==0),:);
% faible = cible((StoC(n,*)>0&&StoC(n,*)<=maxi/3),:);
% moyen = cible((StoC(n,*)>maxi/3&&StoC(n,*)<=maxi*2/3),:);
% fort = cible((StoC(n,*)>maxi*2/3),:);
% figure
% plot3(faible(:,1),faible(:,2),faible(:,3),'b. '); grid on; hold on
% plot3(moyen(:,1),moyen(:,2),moyen(:,3),'g. ')
% plot3(fort(:,1),fort(:,2),fort(:,3),'r. ')
% plot3(null(:,1),null(:,2),null(:,3),'c. ')

```

*Published with MATLAB® 7.5*

```

function [ombre] = ombrage_cone(source,cible,Rc,Lc,Ac,Centree)

% Cette fonction calcule la matrice d'ombrage entre deux ensembles de points (ceux de la source et ceux de la cible).
% Les positions des points sont données par leur coordonnées dans le repère de référence Oxyz.
% Les géométries de la source et de la cible sont complètement arbitraires.
% L'effet d'ombrage étant symétrique, la désignation de source et de cible est purement arbitraire et peut être inversée.
% L'obstacle créant l'ombrage est un cône circulaire droit à double troncation perpendiculaire à son axe (qui est parallèle à Oz).
% Ses paramètres sont Rc > 0 (rayon d'entrée, + petit z), Lc > 0 (longueur de paroi) et Ac >= 0 (demi-angle).
% Les coordonnées du début du cône d'ombrage est donnée par Centree et la normale sortante en ce point est donnée par Nentree.
% Pour utiliser cette fonction dans le cas d'un cône d'axe différent, on suggère d'exprimer les coordonnées des points dans un nouveau repère pour lequel l'axe z est parallèle à celui du cône.
% On se garde la possibilité que la sortie du cône soit tronqué à l'oblique (cf. paramètre tronc)
%
% Copyright Laurent Isnard

% IL SERAIT TRÈS SOUHAITABLE POUR SIMPLIFIER LES CALCULS D'EFFECTUER UN CHANGEMENT DE REPÈRE DE FAÇON À CE QUE:
% - LE POINT D'INTERSECTION DES DIRECTRICES DU CÔNE DEVIENNE L'ORIGINE O DU REPÈRE;
% - L'AXE DE SYMÉTRIE DU CÔNE DEVIENNE L'AXE Oz DU REPÈRE.
% DANS CE CAS, IL FAUT FAIRE UNE EXCEPTION POUR LES CYLINDRES CAR TAN(Ac) EST NUL

% Paramètres d'entrée:
% Les surfaces discrétisées (source et cible) sont données sous forme de matrices de N lignes par 3 colonnes (x,y,z) ou N représente le nombre de points sur la surface.
% source, cible: matrice des coordonnées des points de la surface de la source et de la cible.
% Rc: rayon du cône d'ombrage à son entrée (définie par le plus petit z)
% Lc: longueur du côté du cône d'ombrage
% Ac: demi-angle d'ouverture du cône d'ombrage (en degrés)
% Centree: coordonnées du centre du disque d'entrée du cône

% Paramètres gardés en réserve => troncation oblique
% tronc: angle de troncation du cône d'ombrage (en degrés)
% orient: direction donnant l'orientation de la troncation
% Paramètres gardés en réserve => dessin
% Rg: Rayon de la cible (cas où c'est un disque)
% Npts: Distribution des points sur la cible (cercles concentriques)

% Paramètres de sortie:
% ombre: matrice d'ombrage entre la source et la cible
% Pour chaque couple de points, ombre vaut 1 si il n'y pas d'obstacle entre eux ou bien 0 si il y en a un.

% Test sur les variables d'entrée
if Rc <= 0 || Lc <= 0 % On s'assure que les paramètres géométriques ont un sens
    error('Un paramètre géométrique est mal défini !')
end

Ncib = size(cible,1);
Nsou = size(source,1);

% Calcul des matrices d'ombrage
ombre = ones(Nsou,Ncib);

% ANCIENS CALCULS POUR UN CÔNE TRONQUÉ À L'OBLIQUE EN SORTIE
% % Coordonnées du point central du plan de troncation (i.e. x=y=0)

```



```

% Centronc = [0 0 Lc*cosd(Ac)-(Rc+Lc*sind(Ac))*tand(tronc)];
% % Calcul de l'angle de rotation de la troncation
% khi = atan2(orient(2),orient(1));
% % Orientation de la normale au plan de troncation sortant du cone
% Ntronc = [-sind(tronc)*cos(khi);-sind(tronc)*sin(khi);cosd(tronc)];

% Direction de la normale sortante au plan de troncation à l'entrée du cône
Nentree = [0;0;-1];
% Coordonnées du point central du plan de sortie du cône
Csortie = Centree - Lc*cosd(Ac).*Nentree';
% Vecteur normé donnant la direction de la normale sortante au plan de troncation à la sortie du
cône
Nsortie = - Nentree;

% CALCUL DES ÉLÉMENTS DE LA MATRICE D'OMBRAGE
% consiste à chercher si il existe des solutions à l'équation du 2e degré donnant l'intersection
entre la droite reliant un point-source à un
% point-cible et le cône d'ombrage, puis à vérifier si ces solutions se trouvent bien entre les d
eux points précités.
for n = 1:Nsou
    StoC = cible - repmat(source(n,:),Ncib,1); % Vecteurs allant des points de la source à ceux d
e la cible
    ECtoS = source(n,:) - Centree; % Vecteurs allant du centre du disque d'entrée du cône aux poi
nts de la source
% Coefficients de l'équation polynomiale du 2e degré donnant les points d'intersection entre le c
ône et la droite
    A = sum(StoC(:,1:2).^2,2)-(StoC(:,3)*tand(Ac)).^2;
    B = StoC(:,1:2)*ECtoS(1:2)'+tand(Ac)*StoC(:,3)*(Rc+ECtoS(3)*tand(Ac));
    C = sum(ECtoS(1:2).^2,2)-Rc^2-tand(Ac)*ECtoS(3)*(2*Rc+tand(Ac)*ECtoS(3));
    delta = B.^2 - A.*C; % Discriminant RÉDUIT de l'équation (B est la moitié du paramètre habitu
el)
% Si delta>=0 et A~=0, il y a deux solutions par couple de points source-cible (les cas delta<0 e
t A=0 sont traités + tard)
    lambdas = [(-B - delta.^0.5) (-B + delta.^0.5)]./repmat(A,1,2);
% Dans les cas où A est nul, ces solutions ne sont pas valables et il faut recalculer la véritabl
e solution
    [row] = find(A==0 & B~=0); % Lorsque A et B sont tous les deux nuls, on garde les NaNs déjà e
n place
    lambdas(row,:) = -C(row)./B(row)/2; % On remplace par la racine double -C/2B
% Lorsque la source ou la cible est aussi la surface créant l'ombrage, les valeur 0 ou 1 pour lam
bda sont automatiquement des solutions
% Les calculs donnent alors des valeurs très proches de 0 ou de 1, mais néanmoins pas assez préci
ses pour faire une test fiable (du type <0 ou >0)
% On doit donc forcer ces lambdas à 0 ou à 1
    lambdas(abs(lambdas)<1e-8)=0;
    lambdas(abs(lambdas-1)<1e-8)=0;
% Coordonnées des points d'intersection entre la droite et le cône
    inters1 = repmat(source(n,:),Ncib,1) + repmat(lambdas(:,1),1,3).*StoC; % 1er lambda
    inters2 = repmat(source(n,:),Ncib,1) + repmat(lambdas(:,2),1,3).*StoC; % 2eme lambda
% Tests via produits scalaires pour voir si les points d'intersection sont situés sur le cône réè
l (qui est doublement tronqué)
    test1s = (inters1-repmat(Csortie,Ncib,1))*Nsortie<0; % teste si le point se trouve après la s
ortie du cône (1er lambda)
    test2s = (inters2-repmat(Csortie,Ncib,1))*Nsortie<0; % même chose pour le 2eme lambda
    test1e = (inters1-repmat(Centree,Ncib,1))*Nentree<0; % teste si le point se trouve avant l'en
trée du cône (1er lambda)
    test2e = (inters2-repmat(Centree,Ncib,1))*Nentree<0; % même chose pour le 2eme lambda
% Test sur les valeurs des lambdas (racines de l'équation donnant les pts d'intersection)
% Il ne peut y avoir d'ombrage que si l'un des points d'intersection se trouve entre les points s
ource et cible, soit 0<lambda<1
% Les cas où lambda = 0 ou 1 impliquent que le point faisant obstacle coincide avec le point sour
ce ou cible, ce qui n'est pas un véritable ombrage

```

```

    testv = lambdas>0 & lambdas<1;
    % testv = lambdas>200*eps & lambdas<1-200*eps; % le facteur 200*eps permettait de tenir compte des incertitudes de calcul
    % Double test sur l'appartenance du point d'intersection au cône réel et sur la condition 0<lambdas<1
    ombre(n,(test1e&test1s&testv(:,1))|(test2e&test2s&testv(:,2))) = 0;
    % Quand delta<0, le test précédent n'a pas de sens (car les lambdas sont des nombres complexes)
    % Dans ce cas, on force ombre à 1 car il n'y a pas de point d'intersection
    ombre(n,delta<0) = 1;
    % Cas improbables où A=B=0 et C~0 (il n'y a pas de solution et donc pas d'ombrage)
    ombre(n,A==0&&B==0&C~=0) = 1;
    % Cas improbables où A=B=C=0 (il y a une infinité de solutions et donc de l'ombrage)
    ombre(n,A==0&&B==0&C==0) = 0;
end

% % DESSINS MONTRANT QUELS POINTS DE LA CIBLE SONT VUS OU NON PAR UN POINT DONNÉ DE LA SOURCE
% n=1; % point de référence sur la source (premier)
% ptsvus = cible((ombre(n,:)==1),:);
% ptscaches = cible((ombre(n,:)==0),:);
% figure
% plot3(ptsvus(:,1),ptsvus(:,2),ptsvus(:,3),'.',ptscaches(:,1),ptscaches(:,2),ptscaches(:,3),'r.'
% )
% grid on
%
% n=Nsou; % point de référence sur la source (dernier)
% ptsvus = cible((ombre(n,:)==1),:);
% ptscaches = cible((ombre(n,:)==0),:);
% figure
% plot3(ptsvus(:,1),ptsvus(:,2),ptsvus(:,3),'.',ptscaches(:,1),ptscaches(:,2),ptscaches(:,3),'r.'
% )
% grid on;

```

Published with MATLAB® 7.5

```

function [anneaux,Npts,rmed] = ann_circ0(Ri,Re,Nann,themax,centre,F_in,sens)

% Discrétise un anneau circulaire (ou un disque) parallèle au plan xOy en éléments de surfaces si-
milaires.
% Procédure: on découpe le disque en anneaux espacés de la résolution delr; on découpe alors cha-
que anneau en éléments de longueur d'arc proche de delr (pas exactement delr car le nbe de points
est un entier).
% A chaque élément de surface est associé un point qui se trouve sur le rayon médian de l'anneau
(médiane de l'élément de surface et non son centre).
% Tous les éléments ont des surfaces similaires (+/- = à cause des erreurs d'arrondi)
% Cette méthode de discrétisation ne permet pas d'utiliser la symétrie de révolution.
% Les normales aux éléments de l'anneau sont dirigées suivant les z>0.
% Copyright Laurent Isnard

% Repère cartésien fixe utilisé
% L'origine 0 se trouve au centre du disque d'injection.
% Le plan (xOy) est celui dans lequel se trouve le disque .
% L'axe z est la direction de la normale au disque.

% Paramètres d'entrée
% Ri et Re: rayon interne et externe de l'anneau
% Nann: nombre de petits anneaux concentriques découpés sur l'anneau
% themax: angle polaire maximal utilisé pour la discrétisation (en radians)
% centre: coordonnées du centre de l'anneau
% F_in: flux total (nombre de molécules par seconde) émis par l'anneau
% sens: indique quel côté de la paroi émet vers l'intérieur de l'injecteur (+/-: côté inférieur/s-
upérieur émet vers z positif/négatif)

% Paramètres de sortie
% anneaux: matrice de 8 colonnes dont chaque ligne donne les paramètres des points discrétisés su-
r l'anneau.
% Contenu des colonnes: Coordonnées du point, Surface de l'élément associé, Direction de sa norma-
le, Flux reçu/envoyé.

% Paramètres intermédiaires:
% delr : résolution radiale et circonférentielle absolue (DeltaRho)
% delT : résolution angulaire absolue (DeltaThéta, qui est relié à DeltaRho)

% Test sur les variables d'entrée
if Ri < 0 || Re <= 0 || Ri >= Re || Nann <= 5 || themax < 0 || (Nann ~= round(Nann)) % On s'assur-
e ainsi que le nombre d'anneaux est un entier
    error('Un paramètre est mal défini ou la résolution est trop grande !')
end

delr = (Re-Ri)/Nann; % calcul de la résolution suivant r (intervalle entre 2 anneaux consécutifs)

% Découpe en anneaux circulaires plus petits
rint = Ri + delr*(0:1:Nann-1); % rayons internes des anneaux (de Ri à Re-delr)
rext = rint + delr; % rayons externes des anneaux (de Ri+delr à Re)
% Le calcul suivant est approximatif car le centre de masse de chaque élément est un peu plus ver-
s l'extérieur.
rmed = (rint+rext)/2; % rayons médians des anneaux

% Calculs du rayon moyen pour chaque anneau
% L'utilisation des rayons médians au lieu des rayons moyens entraîne des erreurs négligeables (e-
nviron 0.2%) sur l'évaluation des rendements
% s = rext + rint;
% p = rext.*rint;
% rmoy = 2*(s - p./s)/3; % rayons moyens des anneaux (cf. centres de masse)

```

```

% Division des anneaux en éléments de surface équivalente
Npts = fix(themax.*rmed./delr)+ones(1,Nann); % nombres de points par anneau (pour chaque anneau)
% A cause de cet arrondi, les surfaces des éléments diffèrent légèrement d'un anneau à l'autre.
delT = themax./Npts; % intervalles en theta => plage/(nbe de pts)
% Valeurs de theta à l'origine: décale les points de delT/2 w.r.t. l'origine theta=0 (axe x>0)
the0 = delT/2; % permet d'utiliser la symétrie par rapport au plan xOz et facilite le dessin des
frontières entre éléments.

% Initialisation des vecteurs et matrices
coor = zeros(sum(Npts),3);
delS = zeros(sum(Npts),1);

% Calcul des coordonnées cartésiennes des points du disque
saut = cumsum([0 Npts]); % donne l'indice du dernier point pour démarrer à l'anneau suivant
for n = 1:Nann
    theta = (0:Npts(n)-1)*delT(n) + the0(n); % the0 est la phase à l'origine
    ind = (1:Npts(n)) + saut(n);
    coor(ind,1:2) = rmed(n)*[cos(theta') sin(theta')];
    % Calcul de la surface EFFECTIVE des éléments => un nombre réduit d'éléments représente la su
rface entière de l'anneau
    delS(ind) = delT(n)*(rext(n)^2-rint(n)^2); % 2*delT(n)*rmed(n)*delr convient aussi
end

% Cas où l'anneau est réduit à un segment suivant l'axe x>0 car c'est une cible dont l'axe de sym
étrie commun avec les sources
% Chaque point représente alors la surface entière de l'anneau qui lui est associé
if themax==0
%   coor = [rmed' zeros(Nann,1) zeros(Nann,1)];
    delS = pi*(rext.^2-rint.^2)';
end

% Calcul du flux EFFECTIF associé à chaque élément (normalisé pour que la somme donne le flux tot
al émis => Intensité constante)
flux = F_in*delS/(pi*(Re^2-Ri^2));

% Définition des normales aux éléments du disque (vecteurs normés)
dirN = repmat(sign(sens)*[0 0 1],sum(Npts),1);

% Translation des points du disque depuis l'origine du repère jusqu'à son centre
% Il est plus prudent de faire cette opération en dernier
coor = coor + centre(ones(length(coor),1),:);

anneaux = [coor delS dirN flux];

% figure
% % Représentation des points du disque
% plot3(anneaux(:,1),anneaux(:,2),anneaux(:,3),'.','markersize',12)
% xlabel('X'); ylabel('Y'); zlabel('Z')
% axis([centre(1)-Re centre(1)+Re centre(2)-Re centre(2)+Re centre(3)-1 centre(3)+1])
% hold on; grid on
% % Représentation des normales aux éléments du disque
% plot3(anneaux(:,5)+anneaux(:,1),anneaux(:,6)+anneaux(:,2),anneaux(:,7)+anneaux(:,3),'r.')
% hold off

```

Published with MATLAB® 7.3

```

function [parois,Npts] = parois_chem(Rd,L,alpha,Nann,Ncirc,phimax,centre,F_in,sens)

% Version analogue à parois0: le nombre d'éléments par anneau varie en fonction de la circonféren
ce de l'anneau
% pour assurer des surfaces similaires pour tous les éléments.
% => la surface des éléments augmente (alpha>0) ou diminue (alpha<0) à mesure qu'on s'éloigne de
l'entrée du cône
% Cette fonction discrétise les parois d'un cône doublement tronqué perpendiculairement à son axe
qui est parallèle à (Oz).
% Chaque point est situé sur la médiane des rayons et non au centre de masse de chaque élément de
surface.
% Le cône peut être convergent (-) ou divergent (+) suivant le signe de 'alpha'.
% Les normales aux parois sont orientées vers l'intérieur (-) ou l'extérieur (+) suivant le signe
de 'sens'.
% Les résolutions latérales et circonférentielles sont indépendantes (et non relié à celle de l'e
ntrée)
% Tous les éléments de surface sont de surface similaire.
% Copyright Laurent Isnard

% Paramètres d'entrée:
% Rd: rayon du disque au début du cône (correspondant à la plus petite cote z)
% L: longueur du côté du cône
% alpha: demi-angle d'ouverture du cône (>0 pour cône divergent, <0 pour cône convergent, =0 pour
cylindre)
% alpha est saisi en degrés, mais converti en radians à l'intérieur de la fonction.
% Nann: nombre d'anneaux suivant le côté du cône (L)
% Ncirc: nombre de points suivant la circonférence du disque qui débute le cône.
% phimax: vecteur ligne d'angles polaires maximaux utilisés pour la discrétisation (en radians)
% F_in: flux total envoyé par le cône.
% centre: coordonnées du centre de l'entrée du cône (point de plus petit z)
% sens: permet d'orienter les normales vers l'intérieur de l'injecteur (-/+ : parois externes/inte
rnes)
% ATTENTION: les parois internes émettent vers l'extérieur et vice-versa.
% Les normales aux parois doivent toujours pointer vers l'intérieur de l'injecteur pour être com
patible avec la fonction mat_echange_flux.m

% Paramètres suggérés: Rd=50;L=10;alpha=15;Nann=30;Ncirc=90;

% Paramètres de sortie:
% parois: matrice de 8 colonnes dont chaque ligne donne les paramètres reliés à un point du cône
discrétisé.
% Contenu des colonnes: Coordonnées du point, Surface de l'élément associé, Direction z' de sa no
rmale, Flux reçu/envoyé.

% Test sur les variables d'entrée
if Rd<=0 || L<=0 || Nann<1 || Ncirc<10 || alpha<=-90 || alpha>=90 || Rd+L*sind(alpha)<=0 || sens
==0
    error('Un paramètre clé est défini improprement !')
end

alpha = alpha*pi/180; % conversion de l'angle alpha en radians
Rf = Rd + L*sin(alpha); % rayon du disque à la fin du cône (correspondant à la plus grande cote z
)

% Découpe du cône en anneaux consécutifs de même longueur latérale
dl = L/Nann; % Pas entre les anneaux suivant le côté du cône (L)

% Calcul de la position des anneaux
lmed = (0.5:Nann-0.5)*dl; % position médiane de chaque anneau suivant le côté du cône
rmed = Rd+lmed*sin(alpha); % rayon médian de chaque anneau (rmax+rmin)/2

```

```

% r moy = r med + dr^2/12/r med; % rayon moyen (centre de masse) de chaque anneau

% Découpe de chaque anneau en éléments de surface similaire
Npts = round(Ncirc.*rmed/min(Rd,Rf)); % nombre de points par anneau (varie d'un anneau à l'autre
en fonction de leur surface)
dphi = phimax./Npts; % intervalle angulaire entre les éléments d'un anneau (suivant l'azimut phi)
% Valeurs de phi à l'origine: décale les points de dphi/2 par rapport à l'origine phi=0 (axe x>0)
phi0 = dphi/2; % permet d'utiliser la symétrie par rapport au plan xOz et facilite le dessin des
frontières entre éléments

% Initialisation des matrices
coor = zeros(sum(Npts),3);
dirN = zeros(sum(Npts),3);
delS = zeros(sum(Npts),1);

% Calcul des coordonnées et de la surface des éléments de paroi
saut = cumsum([0 Npts]); % donne l'indice du dernier point pour démarrer à l'anneau suivant
for n = 1:Nann
    phi = (0:Npts(n)-1)*dphi(n) + phi0(n); % phi0 = phase à l'origine
    ind = (1:Npts(n)) + saut(n);
    % Calcul des coordonnées (x,y,z) de chaque élément (approximation au 1er ordre)
    coor(ind,:) = [rmed(n)*cos(phi') rmed(n)*sin(phi') lmed(n)*cos(alpha)*ones(Npts(n),1)];
    % Surface des éléments pour chaque anneau (j'ai vérifié analytiquement que la formule pour de
ltaS fini est la même que pour dS infinitésimal)
    delS(ind) = 2*dphi(n)*rmed(n)*dl;
    % Normales aux éléments de paroi allant de la surface émettrice vers l'extérieur (sens>0) ou
l'intérieur (sens<0)
    dirN(ind,:) = sign(sens)*[cos(alpha)*cos(phi') cos(alpha)*sin(phi') -sin(alpha)*ones(Npts(n),
1)];
end

% Translation des points du cône de l'origine du repère jusqu'au centre de son disque d'entrée
coor = coor + centre(ones(sum(Npts),1),:);

% Cas où le cône est réduit à un segment dans le plan xOz car c'est une cible dont l'axe de symétrie
commun avec les sources
% Chaque point représente alors la SURFACE ENTIÈRE de l'anneau qui lui est associé
if phimax==zeros(1,Nann)
    coor = [rmed' zeros(Nann,1) lmed'*cos(alpha)] + centre(ones(Nann,1),:);
    delS = 2*pi*rmed'*dl;
    dirnorm = [cos(alpha) 0 -sin(alpha)];
    dirN = sign(sens)*dirnorm(ones(Nann,1),:);
end

% Calcul du flux EFFECTIF associé à chaque élément (normalisé pour que la somme donne le flux tot
al émis => Intensité constante)
flux = F_in*delS/(pi*L*(Rd+Rf)); % surface latérale du cône: pi*L*(Rd+Rf)

% Assemblage de la matrice d'information sur les éléments de paroi
parois = [coor delS dirN flux];

% Dessin des points
% figure
% plot3(parois(:,1),parois(:,2),parois(:,3),'.','markersize',12)
% xlabel('X'); ylabel('Y'); zlabel('Z'); grid on
% hold on
% % Représentation des normales à la gaufre dans l'espace
% plot3(parois(:,1)+parois(:,5),parois(:,2)+parois(:,6),parois(:,3)+parois(:,7),'r.')
% hold off

% % Dessin des anneaux
% da = 1/100; % résolution angulaire des cercles pour le graphique

```

```

% cercle = ones(1/da+1,3);
% rcerc = [Rd rmed+dr/2];
% hcerc = [0 lmed+d1/2]*cos(alpha);
% for n = 1:nbran+1;
%     theta = (0:da:1)*2*pi; % length(theta) = 1/da+1
%     cercle(1:1/da+1,:) = [rcerc(n)*cos(theta) rcerc(n)*sin(theta) hcerc(n)*ones(1/da+1,1)];
%     plot3(cercle(:,1),cercle(:,2),cercle(:,3),'-', 'markersize',12)
% end
% % Dessin des frontières entre éléments
% for n = 1:nbran;
%     haut = hcerc(n):da:hcerc(n+1);
%     Nha = length(haut);
%     rho = haut*tan(alpha) + Rd*ones(1,Nha);
%     for m = 1:Npts(n)
%         phi = m*dphi(n);
%         front = [rho*cos(phi) rho*sin(phi) haut'];
%         plot3(front(:,1),front(:,2),front(:,3),'-', 'markersize',12)
%     end
% end

```

Published with MATLAB® 7.5

```

function [arc,thetad] = arc_sphere(Rs,NTh,Thmin,Thmax,centre,sens)

% Le repère utilisé est celui qui a été défini lors de la discrétisation de l'injecteur.
% Repère: x vers la droite, y sort de l'écran, z vers le bas
% On discrétise un portion d'arc de sphère située dans le plan xOz et délimitée par les angles Th
min et Thmax.
% On présume la symétrie axiale => l'azimut ne joue aucun rôle et l'aire des anneaux sphériques e
st intégrée entre 0 et 2*pi.
% L'aire associé à chaque élément d'arc est celle d'un anneau sphérique complet.
% C'est l'angle theta moyen (et non médian) de chaque élément qui est utilisé pour en calculer l'
aire.
% L'angle theta (min=0, max=pi/2) est celui de la rotation autour de l'axe Oy dans le sens positi
f (trigo) à partir de Oz
% Le vecteur 'centre' donne les coordonnées du centre de la sphère.
% Les angles Thmin et Thmax sont entrés en degrés, mais sont convertis en radians à l'intérieur d
e cette fonction.
% Le signe de 'sens' donne l'orientation des normales aux éléments de surface (vers z>0 quand sen
s>0 et vice versa)

% Test sur les variables d'entrée
if Thmin<0 || Thmax>90 || Thmin>=Thmax % la plage angulaire balayée doit être située entre 0 et p
i/2 radians
    error('Un paramètre angulaire est mal défini !')
end

% Conversion des angles en radians et calcul du pas angulaire
Thmin = Thmin*pi/180;
Thmax = Thmax*pi/180;
delTh = (Thmax-Thmin)/NTh;

Thm = Thmin:delTh:Thmax-delTh; % valeurs basses de théta
ThM = Thm + delTh;           % valeurs hautes de théta
% D'OÙ PROVIENT LA FORMULE BIZARRE QUI SUIT ???
% sinTh = (2*(ThM-Thm)-sin(2*ThM)+sin(2*Thm))./(cos(Thm)-cos(ThM))/4; % sinus de la colatitudo mo
yenne
% cosTh = (1-sinTh.^2).^0.5; % cosinus de la colatitudo moyenne
% theta = asin(sinTh);      % angle theta moyen (pondération par la surface)

cosTh = (cos(ThM)+cos(Thm))/2; % cosinus de la colatitudo moyenne (pour un anneau sphérique)
theta = acos(cosTh); thetad = theta*180/pi;
sinTh = (1-cosTh.^2).^0.5; % on peut aussi utiliser sin(theta);

% Calcul de l'aire de chaque élément d'arc de sphère
aire = 2*pi*Rs^2*(cos(Thm)-cos(ThM)); % aire de l'anneau sphérique associé à l'élément

% % Coordonnées polaire du centre de l'élément (DANS LE REPÈRE LIÉ AU CENTRE DE LA SPHÈRE)
% % coordpol(i,:)= [Rs theta(i) 0];% ici, phi est gardé constant à 0 (axe x)

% Calcul des coordonnées cartésiennes du centre de chaque élément d'arc
coord = Rs*[sinTh' zeros(NTh,1) cosTh'];

% Normale sortante à chaque élément de surface
dir_norm = sign(sens)*coord/Rs; % vecteur normé dirigé vers les z>0 quand sens>0 et vice versa
% La normale à l'arc est toujours dirigée vers son centre et on divise par Rs car les points sont
tous à cette distance du centre.
% Après cela, on peut effectuer une translation pour changer l'origine du repère mais les vecteur
s de base restent les mêmes.

% Translation des points de l'arc depuis l'origine du repère jusqu'à son centre (A VÉRIFIER)
% Il est plus prudent de faire cette opération en dernier

```



```

coord = coord + centre(ones(Nth,1),:);

arc = [coord aire dir_norm zeros(Nth,1)];

% figure
%% Représentation des points de l'arc de sphère
% plot3(arc(:,1),arc(:,2),arc(:,3),'.','markersize',12)
% xlabel('X'); ylabel('Y'); zlabel('Z')
% axis([centre(1) centre(1)+Rs+1 centre(2) centre(2)+Rs centre(3) centre(3)+Rs+1])
% hold on; grid on
%% Représentation des normales aux éléments de l'arc
% plot3(arc(:,5)+arc(:,1),arc(:,6)+arc(:,2),arc(:,7)+arc(:,3),'r. ')
% hold off

```

*Published with MATLAB® 7.3*

```

function [parois,rmed] = parois_seg(Rd,L,alpha,Nann,centre,sens)

% Cette fonction discrétise un segment représentant un cône doublement tronqué perpendiculairement à son axe.
% Ce segment sera utilisé comme cible calculer les flux émis vers le cône par des surfaces émettrices.
% Cela implique que l'ensemble cône + surfaces émettrices possèdent un axe de symétrie commun (Oz).
% A chaque point du segment est associé un anneau conique complet et donc sa surface.
% Le cône peut être convergent (-) ou divergent (+) suivant le signe de 'alpha'.
% Les normales aux parois sont orientées suivant l'intérieur ou l'extérieur suivant le signe de 'sens'.
% Chaque point est situé sur la médiane des anneaux et non sur le cercle moyen (centre de masse).
% Copyright Laurent Isnard

% Paramètres d'entrée:
% Rd: rayon du disque à la base du cône
% L: longueur du côté du cône
% alpha: angle d'ouverture du cône (>0 pour cône divergent, <0 pour cône convergent, =0 pour cylindre)
% ATTENTION: alpha est saisi en degrés, mais converti en radians à l'intérieur de la fonction.
% Nann: nombre d'anneaux suivant le côté du cône (L)
% F_in: flux total envoyé par l'émetteur
% centre: coordonnées du centre de l'entrée du cône (point de plus petit z)
% sens: permet d'orienter les normales vers l'intérieur de l'injecteur (-/+ : parois externes/internes)

% Paramètres suggérés: Rd=50;L=10;alpha=15;Nann=30;

% Paramètres de sortie:
% parois: matrice de 8 colonnes dont chaque ligne donne les paramètres reliés à un point du cône discrétisé.
% Contenu des colonnes: Coordonnées du point, Surface de l'élément associé, Direction z' de sa normale, Flux reçu/envoyé.

% Test sur les variables d'entrée
if Rd<=0 || L<=0 || Nann<10 || alpha<=-90 || alpha>=90 || Rd+L*sind(alpha)<=0 || sens==0
    error('Un paramètre clé est défini improprement !')
end

% Conversion de l'angle alpha en radians
alpha = alpha*pi/180;

% Découpe du cône en anneaux consécutifs
dl = L/Nann; % Pas entre les anneaux suivant le côté du cône (L)

% Découpe du cône en anneaux cylindriques
lmed = (0.5:Nann-0.5)*dl; % position médiane de chaque anneau suivant le côté du cône
rmed = Rd+lmed*sin(alpha); % rayon médian de chaque anneau (rmax+rmin)/2
% rmo = rmed + dl^2/12/rmed; % rayon moyen (centre de masse) de chaque anneau

% On prend un point pour représenter chaque anneau et on utilise l'axisymétrie pour obtenir le flux reçu en tout point
phi0 = 0; % angle azimutal unique

% Initialisation des matrices (vitesse de calcul)
coor = zeros(Nann,3);
deIS = zeros(Nann,1);
dirN = zeros(Nann,3);
flux = zeros(Nann,1); % flux émis par chaque élément

```

```

% Calcul des coordonnées, de la surface et des normales aux éléments de paroi
for n = 1:Nann
% Calcul des coordonnées (x,y,z) de chaque élément (approximation au 1er ordre ?)
    coor(n,:) = [rmed(n)*cos(phi0) rmed(n)*sin(phi0) lmed(n)*cos(alpha)];
% Vecteurs normés perpendiculaires aux éléments de paroi allant vers les surfaces émettrices
% Le signe de 'sens' indique vers où les normales aux parois pointent (-/+ : intérieur/extérieur d
u cône)
    dirN(n,:) = sign(sens)*[cos(alpha)*cos(phi0) cos(alpha)*sin(phi0) -sin(alpha)];
% Surface des éléments pour chaque anneau (vérifié analytiquement)
    delS(n) = 2*pi*rmed(n)*dl; % comme si la surface entière de l'anneau était concentrée en un s
eul point
end

% Translation du disque de l'origine du repère jusqu'à son centre
% Il est plus prudent de faire cette translation en dernier
coor = coor + centre(ones(Nann,1),:);

% Assemblage de la matrice d'information sur les éléments de paroi
parois = [coor delS dirN flux];

% figure
%% Dessin des points
% plot3(parois(:,1),parois(:,2),parois(:,3),'.','markersize',12)
% xlabel('X'); ylabel('Y'); zlabel('Z')
% hold on; grid on
%% Représentation des normales à la gaufre dans l'espace
% plot3(parois(:,5)+parois(:,1),parois(:,6)+parois(:,2),parois(:,7)+parois(:,3),'r.')
% hold off
%% Dessin des anneaux
% da = 1/100; % résolution angulaire des cercles pour le graphique
% cercle = ones(1/da+1,3);
% rcerc = [Rd rmed+dr/2];
% hcerc = [0 lmed+dl/2]*cos(alpha);
% for n = 1:nbran+1;
%     theta = (0:da:1)*2*pi; % length(theta) = 1/da+1
%     cercle(1:1/da+1,:) = [rcerc(n)*cos(theta) rcerc(n)*sin(theta) hcerc(n)*ones(1/da+1,1)] + ce
ntre(ones(1/da+1,1),:);
%     plot3(cercle(:,1),cercle(:,2),cercle(:,3),'-','markersize',12)
% end
%% Dessin des frontières entre éléments
% for n = 1:nbran;
%     haut = hcerc(n):da:hcerc(n+1);
%     Nha = length(haut);
%     rho = haut*tan(alpha) + Rd*ones(1,Nha);
%     for m = 1:Npts(n)
%         phi = m*dphi(n);
%         front = [rho*cos(phi) rho*sin(phi) haut] + centre(ones(Nha,1),:);
%         plot3(front(:,1),front(:,2),front(:,3),'-','markersize',12)
%     end
% end
% ***** %

```