



Université de Batna 2 – Mostefa Ben Boulaïd
Faculté de Technologie
Département de Mécanique



Thèse

Préparée au sein du LESEI (Laboratoire Etudes des Systèmes Energétiques Industriels).

Présentée pour l'obtention du titre de :
Docteur en Sciences en Mécanique
Option : Energétique

Sous le Thème :

**ETUDE DES INSTABILITES CONVECTIVES DANS LA
CONFIGURATION DE CZOCHRALSKI**

Présentée par :

SOLTANI Nouara

Devant le jury composé de :

M. BRIOUA Mourad	Prof.	Université de Batna 2	Président
M. RAHAL Samir	Prof.	Université de Batna 2	Rapporteur
M. BOUGRIOU Cherif	Prof.	Université de Batna 2	Examineur
M. BRIMA Abdelhafid	Prof.	Université de Biskra	Examineur
M. MASMOUDI Kamel	MCA	Université de Batna 1	Examineur
M. BENMACHICHE Abdelhakiman	MCA	Université de Biskra	Examineur

Avril 2018

DEDICACES

A ma très chère mère

A la mémoire de mon père

A mon mari

A Mes enfants Mohamed Yahia et Fedoua

Remerciements

Je tiens, en premier lieu, à remercier sincèrement mon Directeur de thèse, le Professeur Samir RAHAL pour ses conseils et sa disponibilité durant toutes les étapes de réalisation de cette thèse. Ses encouragements étaient l'élan qui m'a permis de finir ce travail.

Je tiens aussi à remercier le Professeur Mourad BRIOUA de l'université Mostefa Ben Boulaid Batna2 pour m'avoir fait l'honneur de présider le jury de ma soutenance, et les membres du jury, le professeur Cherif BOUGRIOU de l'université Mostefa Ben Boulaid Batna 2, le professeur Abdelhafid BRIMA de l'université Mohamed Khider de Biskra, Dr Kamel Mesmoudi de l'université Hadj Lakhdar de Batna1, ainsi que Dr AbdelHakim BENMACHICHE de l'université Mohamed Khider de Biskra, pour avoir accepté d'examiner mon travail de thèse.

Je tiens à remercier Dr Titouna.D, Dr Nezar.D, Dr Mebarki.G, Dr Djouimaa.S, Dr Demagh.Y, Dr Naoun.M, Dr Bouzghaia.N, Dr Lahbari.N et Dr Nezar.M pour leur aide et leurs encouragements.

Je remercie chaleureusement mes amies Sabah, Nora et sa fille Yasmine, Fattouma Hafida, Fatima, Badra, Khamssa, Naima, Malika pour leur soutien moral.

Je remercie chaleureusement Madame Azoui.H pour son aide et son soutien.

Je remercie mes collègues de l'université de Batna2 pour leur soutien, ainsi que tous ceux qui ont contribué de près ou de loin à la réalisation de ce travail.

Je remercie du fond du cœur mon mari pour son soutien, ses encouragements et pour m'avoir permis de réaliser ces études dans de bonnes conditions.

Je remercie sincèrement mon neveu Abderahim pour son aide précieuse.

Enfin, je tiens à remercier tous les membres de ma famille qui ont vécu avec moi, toutes les étapes de ce travail

N. Soltani

Table des matières

Table des matières	I
Nomenclature	V
Introduction générale	
	1
Chapitre 1: Techniques d'élaboration des monocristaux massifs	
	5
I.1 Introduction	5
I.2. Principales méthodes d'élaboration des monocristaux massifs.....	6
I.2.1 La méthode Verneuil:.....	6
I.2.2 La méthode de la Zone Flottante (FZ).....	7
I.2.3 La méthode Bridgman.....	8
I.2.4 La technique micro-pulling down μ -PD	9
I.2.5 La technique Czochralski.....	10
I.3. Paramètres de la croissance	14
I.3.1 Paramètres liés au matériau.....	14
I.3.2 Paramètres de tirage.....	14
I.3.3 Vitesse de rotation du cristal.....	15
I.3.4 Paramètres géométriques.....	16
I.4 Origine des défauts structuraux dans les cristaux	16
I.4.1 Origine des défauts	17
I.5 Les instabilités thermoconvectives dans le procédé de Czochralski.....	18
I.5.1 Introduction	18
I.5.2 La convection naturelle	19
I.5.3 La convection forcée et convection mixte	20
I.5.4 Notions de stabilité hydrodynamique	20

I.5.4.1 Instabilités thermo-Convective de Rayleigh-Bénard.....	20
I.5.4.2 Instabilité thermoconvective de Rayleigh-Bénard-Marangoni.....	21
I.5.4.3 Rouleaux stationnaires et ondes hydrothermales.....	22
I.6 Conclusion	22

Chapitre II : Etat de l'art

II.1 Introduction	23
II.2 Modèles expérimentaux	24
II.3 Travaux de modélisation et de simulations.....	29
II.4 Etude des instabilités	31
II.5 Les techniques de stabilisation de l'écoulement de Czochralski.....	34
II.5.1 Introduction	34
II.5.2 Application d'un champ magnétique	34
II.5.3 Croissance en microgravité	36
II.5.4 Contrôle des vitesses de rotations	36
II.5.5 Effet de la forme du fond du creuset.....	37
II.6 Conclusion.....	38

Chapitre III : Modélisation et procédure numérique.

III.1 Introduction	41
III.2 L'écoulement dans le liquide (simulant la masse fondue)	41
III.3 Position du problème et modèle physique.....	42
III.3.1 Position du problème.....	42
III.3.2 Hypothèses simplificatrices.....	42
III.4 Approximation de Boussinesq.....	43
III.5 Propriétés thermo physiques.....	44

III.6 Equations gouvernantes.....	44
III.6.1 En coordonnées cylindriques.....	45
III.6.2 Condition initiale et conditions aux limites	46
III.6.2.1 Condition initiale.....	46
III.6.2.2 Conditions aux limites.....	46
III.6.3 Choix des grandeurs de référence	47
III.6.4 Paramètres adimensionnels	48
III.6.5 Discrétisation des équations	50
III.7 Méthode numérique de résolution	51
III.7.1 Introduction.....	51
III.7.2 Méthode numérique..adopté par le code Fluent.....	51
III.7.3 Principe da la méthode des volumes finis.....	51
III.7.4 Logiciel FLUENT.....	52
III.7.5 Qualité de maillage.....	52
III.7.6 Schémas d'interpolation.....	55
III.8 Conclusion.....	58
Chapitre IV : Résultats et discussions cas :Huile silicone	59
IV.1 Introduction	59
Partie 1:Cas d'un fluide à grand nombre de Prandtl (huile de silicone)	60
IV.2 Etude de l'effet de maillage.....	60
IV.2.1 Effet de maillage sur les contours de la vitesse axiale.....	63
IV.2.2 Effet de maillage sur les contours de température.....	64
IV.2.3 Conclusion	65
IV.3 Les nombres adimensionnels.....	66

IV.4 Résultats et analyse.....	66
IV.4.1 Validation qualitative de la procédure numérique.....	66
IV.4.2 Analyse des instabilités convectives.....	69
IV.5. Observations qualitatives de l'écoulement	71
IV.5.1 L'écoulement de base	71
IV.6 Analyse spectrale.....	72
IV.7 Effet du nombre de Reynolds sur les champs thermique et dynamique.....	76
IV.7.1 Visualisation de l'écoulement.....	76
IV.8 Effet du nombre de Reynolds de Marangoni.....	79
IV.9 Effet du nombre de Biot.....	83
IV.10 Conclusion.....	84
Chapitre V : Résultats et discussions cas: Gallium	85
Partie 2: Cas d'un fluide à faible nombre de Prandtl (Gallium)	85
V.1 Introduction	85
V.2 L'écoulement de base.....	86
V.3 Effets du nombre de Rayleigh.....	87
V. 3.1 Visualisation de l'écoulement pour différents nombres de Rayleigh dans différents plan horizontaux	88
V. 3.2 Visualisation de l'écoulement pour différents nombres de Rayleigh dans le plan vertical médian.....	89
V.3.3 Effet du nombre de Rayleigh sur les profils de Température.....	91
V.4 Effet de la vitesse de rotation du cristal sur le champ de l'écoulement	93
V.4.1 Visualisation du champ de température dans le plan horizontal.....	94
V.4.2 Visualisation du champ de température dans le plan vertical médian	95
V.4.3 Effet de la vitesse de rotation du cristal sur le profil radial de température..	96
V.4.4 Effet de la vitesse de rotation du cristal sur le profil de la vitesse axiale.....	96

V.4.5 Effet de la vitesse de rotation du cristal sur le profil de la vitesse tangentielle..	97
V.4.6 Effet de la vitesse de rotation du cristal sur le profil de la vitesse radiale.....	97
V.5 Analyse des instabilités	98
V.6 Conclusion	100
Conclusion générale et perspectives	101
Références bibliographie.....	103

Nomenclature

Symboles Latins

Propriétés	Signification	Unité (S.I)
C_p	Chaleur spécifique du fluide à pression constante.	$J. kg^{-1} .K^{-1}$
D	Diamètre	m
g	Accélération de la pesanteur	$m.s^{-2}$
h	Coefficient de transfert de chaleur par convection	$W.m^{-2} . K^{-1}$
H	Hauteur	m
J	Flux total (convection+diffusion)	W
P	Pression	Pa
Q	flux de chaleur	W
r, θ, z	Coordonnées cylindriques	
t	Temps	s
T	Température	K
S	Terme source	Sans dimension
u	Vitesse radiale	$m.s^{-1}$
v	Vitesse axiale	$m.s^{-1}$
V	Volume	m^3
w	Vitesse azimutale	rad/s
U, V, W	Composantes adimensionnelles du vecteur vitesse	Sans dimension

Symboles grecs

α	Diffusivité thermique	$m^2.s^{-1}$
β	Coefficient d'expansion thermique à pression constante	K^{-1}
γ	Coefficient de tension superficielle	$N.m.kg^{-1}$
δr	Distance dans la direction r entre deux nœuds consécutifs.	m
δz	Distance dans la direction z entre deux nœuds consécutifs	m
$\delta \theta$	Distance dans la direction θ entre deux nœuds consécutifs	
λ	Conductivité thermique	$W.m^{-1} . K^{-1}$
μ	Viscosité dynamique	$kg .m^{-1} .s^{-1}$
ν	Viscosité cinématique	$m^2.s^{-1}$
Γ	Coefficient de diffusion	$m^2.s^{-1}$

ρ	Masse volumique	kg. m ⁻³
\emptyset	Variable intervenant dans l'équation de transport	
Ω	Vitesse de rotation	Tr.min ⁻¹
ΔT	Différence de température	K

Indices

a	ambient
c	Creuset, chaud
e, w, n, s, t, b	évalué sur la face correspondante du volume de contrôle entourant le point P.
f	froid
0	Paramètre de référence
N, S, E, W, T, B	évalué sur le point correspondant entourant le point P.
s	cristal

Nombres Adimensionnels

A	Facteur de forme
Bi	Nombre de Biot
Bo	Nombre de Bond dynamique
Gr	Nombre de Grashof
Ma	Nombre de Marangoni
Nu	Nombre de Nusselt
Pr	Nombre de Prandtl
Ra	Nombre de Rayleigh
Re	Nombre de Reynolds
Ri	Nombre de Richardson	

Introduction générale

L'Algérie est dotée d'un ensoleillement exceptionnel dont l'intensité et la durée sont parmi les plus élevées au monde; atteignant par endroits 3500 heures d'ensoleillement par an et un rayonnement solaire de 2650 kilowatt heure par mètre carré par an.

En 2011, le gouvernement a adopté un programme national pour le développement des énergies renouvelables et de l'efficacité énergétique jusqu'à l'horizon 2030. Il vise à installer une puissance en énergies renouvelables de 12 000 mégawatts. Une possibilité de doubler la capacité, pour atteindre 22 000 MW, est en discussion. [1]

Depuis l'adoption du programme, il a été recensé la mise en service en 2014 d'une centrale solaire photovoltaïque (PV) multi technologique pilote de 1,1 MW à Ghardaïa. et une vingtaine de centrales en solaire photovoltaïque de capacité 233 MW sont installées en 2015 dans le sud et les hauts plateaux, selon le ministère de l'Energie. Par ailleurs, le ministère de l'Agriculture et du Développement rural a renforcé l'installation de kits solaires pour l'électrification et pour le pompage d'eau dans les hauts plateaux et les sites isolés [1].

On notera qu'étant donné la raréfaction prévue des sources d'énergie fossile, la production d'énergie par conversion photovoltaïque est appelée donc à jouer un rôle majeur dans le futur.

Ces dernières années ont connu un accroissement rapide des activités de recherche dans le domaine de l'industrie photovoltaïque qui impose une production importante de monocristaux de qualité. Actuellement la demande pour l'industrie photovoltaïque est quasiment équivalente à la demande de l'industrie électronique (ordinateurs, la téléphonie mobile, etc...) **Bensalah [2]**.

Les monocristaux sont aujourd'hui les éléments de base les plus utilisés pour la production des composants électroniques (transistors, mémoires, etc.) et la production des cellules solaires. La méthode de tirage de Czochralski (CZ) est l'une des techniques pour produire des monocristaux de grande taille et de bonne qualité optique qui sont utilisés dans les dispositifs à semi-conducteur pour application dans le domaine photovoltaïque.

La technique de Czochralski (Cz) consiste à faire croître un cristal dans un four à partir d'une masse fondue ("melt"), qui est maintenue un peu au-dessus de la température de fusion. Cette technique permet de produire de grands monocristaux dont la longueur peut varier entre 1 et 2 m et le diamètre peut atteindre 20 à 30 cm. Dans la croissance cristalline de Cz, le cristal est tiré à partir d'un germe trempé dans le bain contenu dans un creuset chauffé.

La croissance des monocristaux est gouvernée par une physique complexe qui fait intervenir de multiples modes de transfert de chaleur: le rayonnement dans l'ensemble du four, la convection dans la masse fondue (où se superposent les effets de convection naturelle résultant des gradients thermiques, la convection forcée créée par les vitesses de rotation imposées au cristal et au creuset, la convection solutale résultant des gradients de concentration et enfin la convection de Marangoni causée par des gradients de tension superficielle), la solidification (libération de la chaleur à l'interface masse fondue-cristal)

Sylla [3].

La structure de l'écoulement de la masse fondue dans ce procédé induit des oscillations de température, ces dernières on a démontré que sont le facteur le plus important responsable des micro défauts et des striations qui apparaissent dans la structure finale du cristal formé. La présence de ces défauts structuraux diminue fortement la durée de vie des cellules solaires **Tavakoli [4]**. De plus, de récentes études montrent que les propriétés optoélectroniques des cristaux sont influencées par l'existence des dislocations. Leur présence dans les cristaux est essentiellement due aux contraintes thermiques existantes pendant la croissance **Lévy [5], Jordan et al. [6] et Gallien [7]**.

La Production d'un monocristal de bonne qualité en quantité industrielle représente donc un problème technologique très complexe car il faut impérativement réduire les défauts cristallins (interstitiels, lacunes et autres) qui apparaissent au cours de la croissance sous l'effet de réactions complexes gouvernées par la thermique. Seul un contrôle précis des transferts de chaleur dans l'ensemble du four de croissance et de la convection dans le bain (qui gouverne la forme de l'interface liquide-solide) permet alors d'atteindre la qualité des monocristaux requise.

Pour prédire la dynamique des transferts thermiques, l'écoulement de la masse fondue dans le bain et la qualité du cristal tiré, on a recours dans cette thèse à la simulation numérique.

Pour le procédé Cz, le facteur le plus difficile à contrôler pendant la croissance est l'écoulement de la masse fondue à partir de laquelle le cristal est tiré. Parmi les moyens proposé pour contrôler l'écoulement on distingue:

1. L'application des champs magnétiques continus de diverses natures ("verticaux", "horizontaux", ...). Ces champs ont pour effet de freiner l'écoulement et de réduire sa turbulence par la force de Lorentz exercée sur les courants de Foucault induits.
2. La réalisation de la croissance en microgravité.
3. Le contrôle de la vitesse de rotation du cristal.

Le but de ce travail est de mener une étude des phénomènes thermiques et hydrodynamiques dans le procédé de croissance cristalline de **Czochralski**. L'apparition de la convection pendant la croissance peut conduire à des inhomogénéités qui conduisent à des striations et à des défauts qui affectent la qualité des cristaux obtenus. Les oscillations de températures dues aux instabilités de l'écoulement dans la masse fondue induisent également un refroidissement non uniforme au niveau du front de solidification. .

Le modèle adopté pour simuler le procédé de CZ dans l'étude envisagée est un écoulement induit par la rotation d'un cylindre dans une cavité cylindrique en présence d'une surface libre plane. Cette dernière fait suite à un travail expérimental effectué par **Rahal.S et al. [8]** dans lequel des résultats importants furent mis en évidence et n'ont jusque l'à pas fait l'objet d'une étude numérique.

Le but de ce travail de thèse est donc de trouver les conditions les plus appropriées afin d'optimiser la procédure d'obtention des cristaux par la technique CZ. Le travail se fera par expérimentation numérique.

Notre étude est présentée en cinq chapitres:

Dans le premier chapitre, on répertorie les méthodes de croissance cristalline les plus utilisées. Nous décrirons plus particulièrement les méthodes faisant appel à une transformation liquide-solide, en particulier la méthode de Czochralski. On parlera aussi de la convection dans la configuration de Czochralski, parce que comme déjà mentionné que la convection dans la zone fondue pendant la croissance affecte la qualité cristalline de manière significative.

Le deuxième chapitre est réservé à une revue bibliographique approfondie des différents travaux effectués durant ces dernières années consacré à l'étude des écoulements thermos-convectifs dans le procédé de Czochralski. Un intérêt particulier est consacré aux instabilités induites par la convection instationnaire et les moyens stabilisants proposés par les

différentes approches. Une petite introduction aux instabilités thermo-convectives et aux phénomènes physiques rencontrés dans le procédé Cz.

Le troisième chapitre est consacré à la modélisation mathématique du procédé Cz en présentant les équations qui régissent le problème en introduisant les hypothèses simplificatrices et les conditions aux limites. L'étude numérique du modèle physique, la méthode de résolution et les schémas choisis pour la discrétisation des équations seront également décrits.

Les résultats de cette étude et leur exploitation seront présentés en deux parties (pour l'huile silicone et le Gallium) dans le quatrième et cinquième chapitres. Les résultats obtenus seront argumentés et interprétés. Finalement on donnera une conclusion générale dans laquelle on relèvera les particularités des résultats obtenues permettant de situer ce travail et aussi préciser notre contribution dans ce domaine de recherche. On développera aussi quelques perspectives qui peuvent s'ouvrir suite à ce travail.

Chapitre I

Techniques
d'élaboration des
monocristaux massifs

Chapitre I

Techniques d'élaboration des monocristaux massifs

I.1 Introduction:

La recherche de nouvelles techniques d'élaboration dans le domaine des matériaux, en particulier des cristaux, est un domaine en pleine effervescence et reste une des sources d'innovation pour le développement des systèmes optiques et électroniques. Les recherches scientifiques ont été principalement concentrées sur l'amélioration de ces techniques en vue de l'obtention de cristaux de hautes performances. Ces cristaux sont utilisés en effet dans la plupart des systèmes optiques, électroniques ou électro-optiques dans les technologies de pointe. Le succès des lasers à l'état solide n'a ainsi été possible que grâce à la qualité cristalline des cristaux obtenus en utilisant ces nouvelles techniques.

Les cristaux massifs (Figure I.1), sont produits à partir d'un bain fondu en utilisant des techniques de croissance cristalline diverses telles que les méthodes de Verneuil, Bridgman Horizontale et Verticale, Zone Flottante, micro-pulling down et Czochralski qui est la technique principale de croissance cristalline utilisées actuellement. Nous allons dans cette partie décrire quelques techniques.



Figure I.1: Exemples de monocristaux massifs obtenus par tirage Czochralski [9]

I.2. Principales méthodes d'élaboration des monocristaux massifs

I.2.1 La méthode Verneuil:

Au début du 20^{ème} siècle, le professeur A. Verneuil (Le fondateur de la cristallogénèse scientifique) décrit une technique de croissance par fusion à la flamme qui lui permet d'obtenir les premiers monocristaux de saphir et de rubis. Ce procédé de fusion à la flamme est resté pratiquement inchangé jusqu'à ce jour. Les cristaux de bijoux sont largement fabriqués par cette méthode **Verneuil** [10].

Dans cette technique, la fusion de la poudre se fait dans la flamme d'un chalumeau Oxyhydrique pouvant générer une flamme de très haute température (Jusqu'à plus de 2700°C). La poudre est introduite par la buse amenant l'oxygène. Les gouttes ainsi produites au cœur de la flamme tombent sur un cristal d'amorce et y cristallisent, formant au fur et à mesure un cylindre du cristal (Figure I.2) **Belt et al.**[11].

Le premier cristal laser a été découvert en 1960 (le rubis ou alumine dopée chrome), est obtenu par la croissance Verneuil, le développement de la cristallogénèse des cristaux pour l'optique est lancé par cette dernière et c'est grâce au rubis que fut mis en évidence expérimentalement l'effet Laser **Brice** [12].

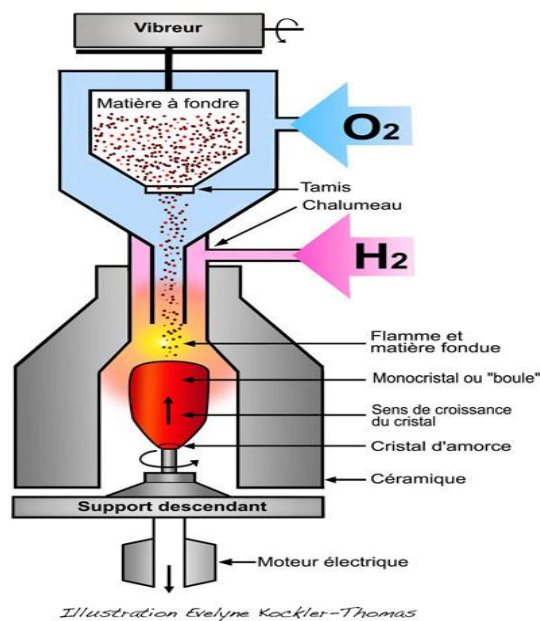


Figure I.2: Principe de la méthode Verneuil [9].

Les avantages de la méthode de Verneuil sont:

1. L'absence de creuset.
2. La possibilité d'obtenir de très hautes températures ($> 2000^{\circ}\text{C}$).
3. Sa simplicité qui lui a conféré un développement industriel exceptionnel.

Les inconvénients de la méthode sont **Brice [12]**:

1. La grande vitesse de croissance qui est de l'ordre du cm/h, ce qui génère des contraintes, dans le cristal.
2. les forts gradients thermiques génèrent des contraintes et des inclusions de gaz.

I.2.2 La méthode de la Zone Flottante (FZ):

La croissance débute par la fusion locale d'un germe monocristallin. L'élément chauffant (le plus souvent un inducteur électromagnétique) est fixe, alors que le poly cristallin et le germe sont déplacés vers le bas tout en assurant la fusion locale du matériau. Le diamètre du cristal entrain de croître peut être modifié en diminuant ou en augmentant la vitesse et les dimensions de la zone fondue (Voir Figure 1.3). **Herrmann et al.[13]**

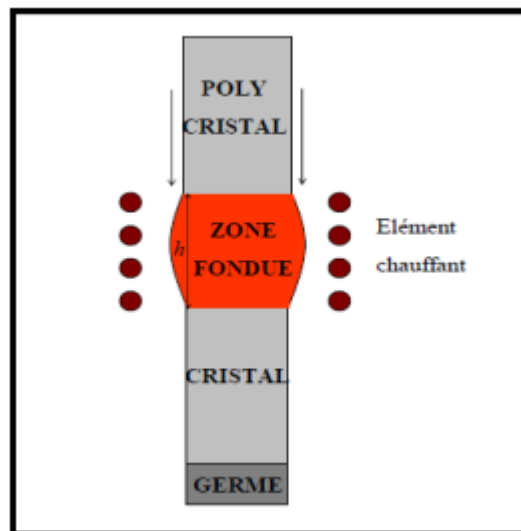


Figure I.3: Schéma de principe de la méthode de la Zone Flottante (FZ) **Sylla[3]**.

L'avantage majeur de ce procédé est l'absence de contact du liquide et du solide avec un creuset, ce qui évite la contamination. Le contrôle de la composition chimique du liquide par l'ajout d'une source externe d'élément volatil est facilité par le rapport surface/volume important

de la méthode. Cette méthode présente un inconvénient majeur de par la limitation du diamètre des échantillons. Par exemple, le diamètre est inférieur à 7-8 mm pour le GaAs. En effet, la tension superficielle est à l'origine des forces capillaires qui maintiennent la cohésion de la zone fondue. L'énergie correspondante varie comme la surface du liquide. Les forces antagonistes de gravité varient avec le volume. Si le volume de la zone liquide est trop important, les forces de tension superficielle ne peuvent plus la contenir et elle coule. Par contre en micropesanteur où les forces capillaires dominent, un cristal de 20 mm de GaAs a été obtenu pendant la mission Spacelab **Herrmann et al. [13]**.

Un autre inconvénient est l'existence de la convection de Marangoni, résultant du gradient de tension interfaciale sur les surfaces libres et son influence sur les profils de concentration.

I.2.3 La méthode Bridgman

La spécificité de la méthode Bridgman est l'emploi d'un creuset qui contient la charge polycristalline et un germe monocristallin. Cette charge polycristalline est fondue ainsi qu'une partie du germe, puis le creuset est déplacé dans un gradient de température à une vitesse contrôlée. La solidification s'opère ainsi à partir du germe orienté. On distingue la méthode Bridgman verticale (VB) (Figure I.4) de la méthode Bridgman horizontale (HB) (Figure I.5).

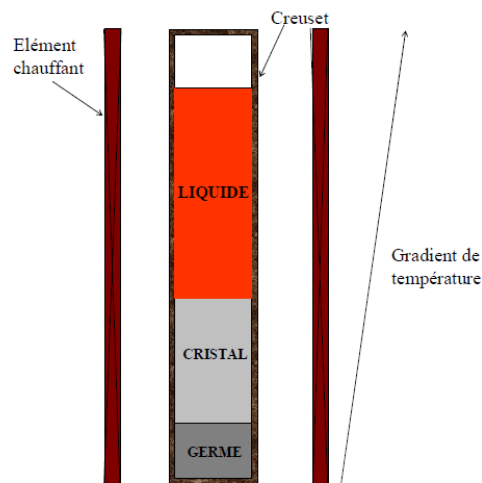


Figure I.4 Schéma de principe de la méthode Bridgman verticale (VB).Sylla [3]

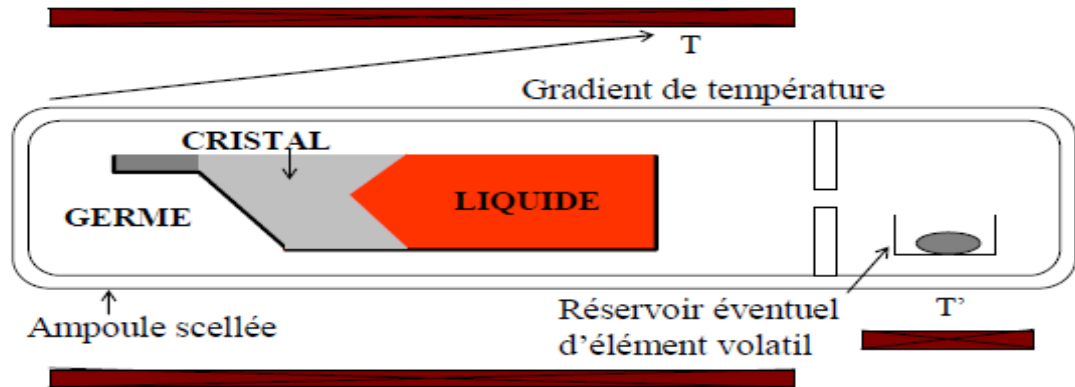


Figure I.5 Schéma de principe de la méthode Bridgman horizontale (HB) Sylla [3].

La méthode Bridgman présente plusieurs avantages dont le principal est le contrôle du gradient de température indépendamment de la vitesse de solidification. Les valeurs du gradient de température imposées peuvent être faibles et sont plus souvent inférieures à $10^{\circ}\text{C}/\text{cm}$. Le creuset permet de contrôler facilement les dimensions et la forme du cristal.

L'inconvénient majeur du procédé est l'emploi d'un creuset qui constitue une source de pollution et produit des nucléations parasites, des contraintes thermiques dans les cristaux et des contraintes de dilatation différentielle Sylla[3].

I.2.4 La technique micro-pulling down μ -PD:

La technique « micro-Pulling Down » (μ -PD) est une technique utilisée pour tirer vers le bas des cristaux et des fibres monocristallines. Elle est devenue une des méthodes principales pour la croissance des fibres cristallines de bonne qualité avec des formats contrôlés imposés par la géométrie du capillaire au fond du creuset Fourmigue et al.[14]. Le tirage des fibres monocristallines se fait à partir d'un germe orienté, qui est en connexion avec une goutte pendante. Plusieurs types de fibres et de monocristaux ont été obtenus en utilisant cette méthode avec une bonne maîtrise du diamètre et une homogénéité de concentration Kerek et al.[15]. Cette méthode est limitée à la croissance de fibres de quelques centimètres de longueur, ce qui limite leur domaine d'application.

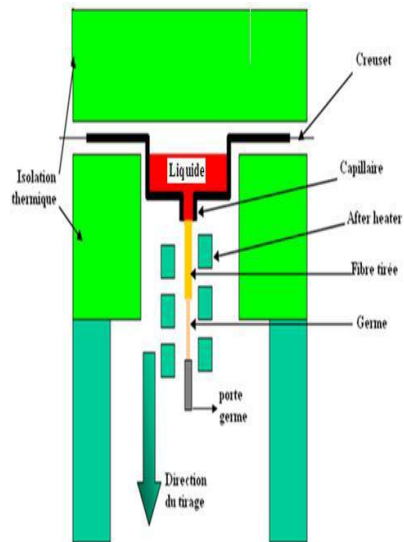


Figure I.6: Principe de la technique de micro-pulling down. **Azoui [16]**.

I.2.5 La technique de Czochralski:

La première expérience du tirage par cette méthode a été réalisée par Jan Czochralski en 1916, il a réalisé le tirage d'un fil d'étain monocristallin à partir d'un bain fondu.

Cette technique de tirage à partir d'un bain est une des plus répandues. Elle permet d'obtenir des cristaux de bonne qualité optique et de grande taille.

La méthode CZ consiste à mener un germe monocristallin animé d'un mouvement de rotation, à la surface du matériau fondu dans un creuset (de platine ou d'iridium) dont la température est proche de sa température de fusion (Figure I.7). Par capillarité le liquide monte de quelques millimètres et reste accroché, créant ainsi une interface triple: solide-liquide-vapeur. Le germe, toujours en rotation, est ensuite tiré lentement vers le haut pour former le cristal. L'interface triple est maintenue à proximité de la surface du bain, de sorte que le liquide extrait se solidifie sur le germe. L'ensemble de la croissance est effectué en maintenant le cristal en rotation, de manière à homogénéiser le bain. Dans de bonnes conditions, la totalité de la masse ainsi extraite du bain forme un monocristal.

La figure I.7 montre les conditions thermiques typiques d'un four Czochralski. Ainsi la mise

en contact du germe avec la surface est effectuée au point froid du liquide, c'est-à-dire au centre de la surface du bain en fusion.

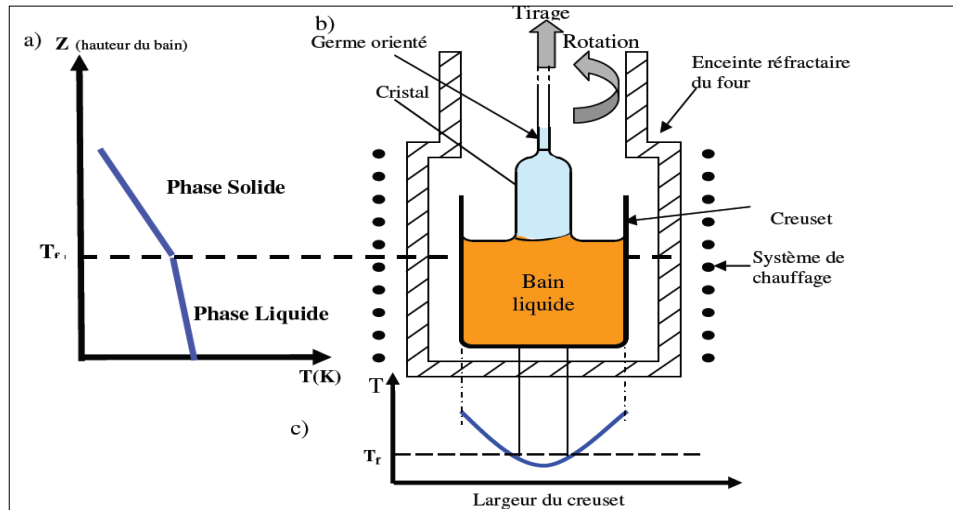


Figure I.7: Profils thermiques caractéristiques dans un four Czochralski **Brandle** [17]
 a) Profil thermique longitudinal, b) Schéma d'un four Czochralski; c) Profil thermique transversal

Le bain se solidifie sur le germe légèrement plus froid. Le cristal formé est extrait en tirant lentement ce germe vers le haut. On peut contrôler le diamètre de croissance du cristal en faisant varier la température du bain ou la vitesse de tirage. Aujourd'hui une pesée du cristal (ou du creuset) est utilisé pour contrôler le diamètre du cristal. La température du bain, du moins à l'interface, est fixée par l'équilibre solide-liquide. En réalité, on fait varier l'apport de puissance au bain, le cristal compensant la différence en générant plus ou moins de chaleur latente de solidification, donc en modifiant son diamètre. (Figure I.8).

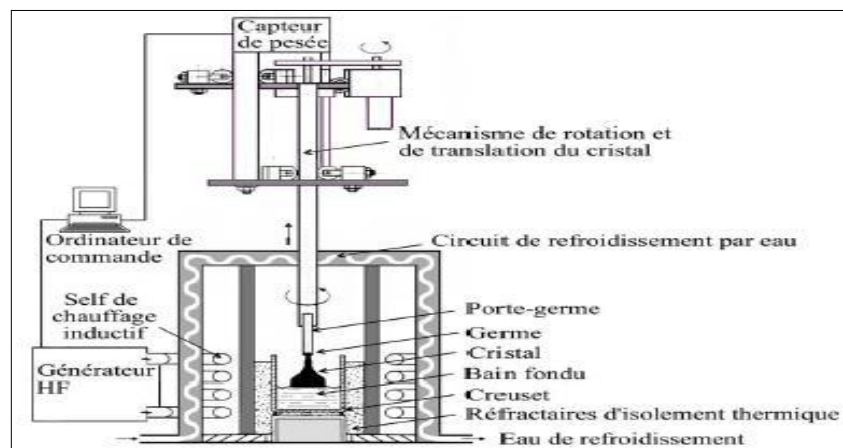


Figure I.8: Principe de la méthode de tirage Czochralski **Haumesser** [18]

Plus de détails sur la méthode Czochralski peuvent être trouvés dans un certain nombre d'ouvrages spécialisés en croissance cristalline **Spiesser [19,20]**.

Les différentes étapes de la croissance d'un cristal par la méthode de Czochralski sont mentionnés dans la Figure I.9.

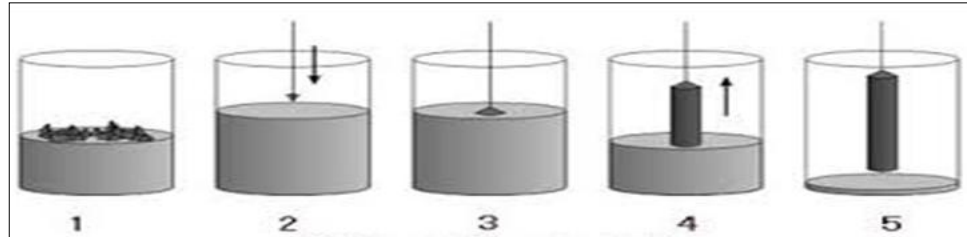


Figure I.9: Les différentes étapes de la croissance d'un cristal par la méthode de Czochralski [21]

La méthode Czochralski nécessite l'utilisation d'un germe monocristallin permettant d'amorcer la croissance. Dans le cas où il n'existe pas de germe du composé à croître, une croissance sur fil de platine est réalisée. La nucléation hétérogène de germe puis la croissance de ceux-ci sont alors effectuées sur le fil de platine. Par la suite, les nucléés obtenus sur le fil de platine servent de germes de croissance. Après la mise en contact du germe avec le bain liquide au point froid, quatre étapes sont distinguées lors de la formation d'un cristal qui sont détaillés ci dessous (Figure I.10).

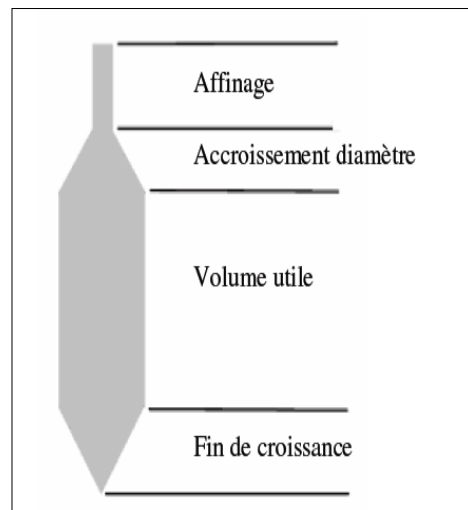


Figure I.10: Schéma de la géométrie d'un cristal tiré par la méthode de Czochralski **Chavoutier [22]**.

- Affinage: La croissance s'effectue de manière constante avant d'élargir le diamètre, de façon à éliminer les centres de nucléations parasites apparus lors de la mise en contact du germe avec le bain et aussi de façon à supprimer les dislocations à la surface du germe. Si la croissance est réalisée sans germe, l'affinage est alors primordial pour éliminer le maximum de nucléés à l'interface et de ne conserver que le plus gros grain afin d'éviter les croissances parasites.
- Accroissement du diamètre: Le diamètre du cristal est augmenté progressivement en contrôlant les paramètres tels que la vitesse de refroidissement et de tirage de façon à obtenir un volume utile suffisant.
- Volume utile: Les paramètres comme la vitesse de tirage, de rotation et de refroidissement sont régulés par le contrôle de la prise de poids de façon à obtenir un diamètre constant avec une forme de révolution plus ou moins cylindrique (due à la rotation). Ce volume, comme l'indique son nom, détermine le volume utile à partir duquel il sera possible de sélectionner des zones de bonne qualité pour de futures applications.
- Fin de croissance: Le diamètre du cristal est diminué progressivement par une augmentation lente de la température. Cette diminution permet un décrochement plus aisé du cristal avec un minimum de tension de surface. Ainsi la création et la propagation des dislocations dans le cristal sont minimisées lors de l'extraction. Une fois le cristal séparé du bain, il est refroidi lentement jusqu'à la température ambiante de façon homogène afin d'éviter clivages et fractures.

Cette méthode présente de nombreux avantages tels que:

1. Sa grande adaptabilité à la diversité des matériaux
2. Une vision directe de l'interface solide-liquide et la possibilité de suivre directement la croissance. Le contrôle visuel permet d'agir en temps réel sur les conditions de croissance (température, vitesse de tirage).
3. L'absence de contact entre le cristal et le creuset pendant la nucléation permet une meilleure qualité cristalline par rapport à d'autres méthodes telle que la technique Bridgman,
4. La direction de croissance peut être contrôlée en utilisant un germe orienté.

5. La vitesse de tirage peut être très rapide (jusqu'à 1 cm/h) et la dimension des monocristaux peut être très importante (jusqu'à plusieurs mètres de longueur pour le tirage de barreau de silicium en milieu industriel).
6. Un dopage aisé des cristaux

L'inconvénient le plus notable de cette technique est qu'elle est inadaptée à la fabrication des fibres de petits diamètres.

I.3 Paramètres de la croissance

Plusieurs paramètres interviennent lors de la croissance par la méthode de Czochralski. La qualité des cristaux élaborés par cette technique dépend d'autant d'éléments (Figure I.11).

I.3.1 Paramètres liés au matériau:

Ce sont la masse volumique du liquide et du solide et l'intensité de la force de capillarité.

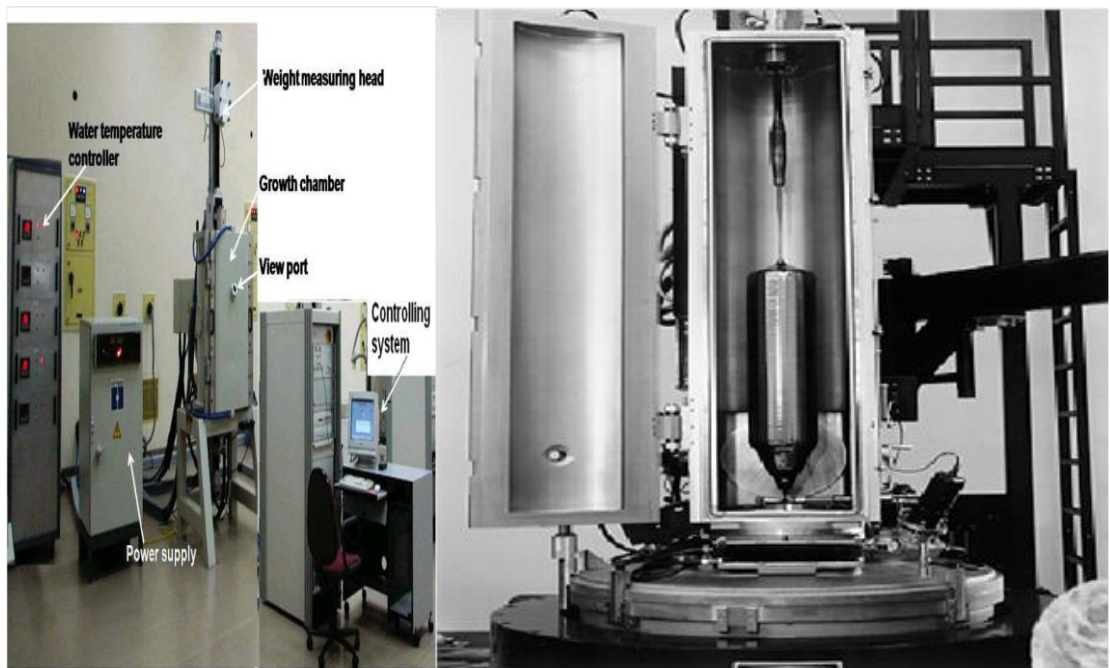


Figure I.11: Photographie du système de régulation et d'extraction du cristal [23]

I.3.2 Paramètres de tirage:

Ce sont le diamètre du creuset, la vitesse de tirage et la vitesse de rotation du cristal. Les deux premiers paramètres permettent de calculer la vitesse de cristallisation à tout instant.

Certains cristaux doivent croître très rapidement pour éviter la présence de défauts, d'autres au contraire exigent une croissance très lente pour être de bonne qualité. Or, la vitesse de cristallisation dépend des vitesses de tirage de la broche et de la baisse du niveau du bain liquide. La vitesse de cristallisation d'après **Lucian [24]** s'écrit comme suit:

$$v_c = \frac{v_t}{1 - \frac{\rho_s}{\rho_l} \cdot \frac{r^2}{R_c^2}} \quad (1.1)$$

Où v_t et v_c sont respectivement les vitesses de tirage et de cristallisation, ρ_s et ρ_l sont les masses volumiques du matériau à l'état solide et liquide respectivement, r est le rayon du cristal en cours de croissance et R_c est le rayon du creuset. L'accroissement théorique de poids pendant une période Δt dépend de cette vitesse de cristallisation, du diamètre du cristal et de la masse volumique du matériau à l'état solide .

I.3.3 Vitesse de rotation du cristal

Elle influence fortement la qualité du cristal et offre la possibilité d'exercer un contrôle direct sur l'ensemble du processus. Cela est bénéfique à deux égards. La première utilité de cette rotation est de s'affranchir des inévitables écarts à la symétrie thermique du système **Sylla [3]**. La symétrie de révolution du processus s'en trouve donc renforcée, et cela permet d'obtenir des cristaux de section circulaire. Le cristal en rotation entraîne une partie du liquide dans son mouvement. Cela bouleverse localement les mouvements de convection naturelle, ce qui a pour effet de considérablement modifier l'interface solide-liquide. l'effet sera d'autant plus important que le diamètre du cristal sera grand et que la vitesse de rotation élevée. Si on Raisonne à diamètre du cristal constant, lorsque la vitesse de rotation du cristal est faible, seuls les mouvements de convection naturelle sont présents dans le bain. La forme de l'interface solide-liquide qui en résulte est convexe (Figure I.12) **Ren [25]**. Une rotation plus importante du cristal amorce un mouvement de succion du liquide situé sous le cristal vers l'interface solide-liquide. Le liquide ainsi aspiré est éjecté tangentiellement à la surface du cristal. Cela va à l'encontre des mouvements de convection naturelle avec pour résultat d'adoucir la forme de l'interface.

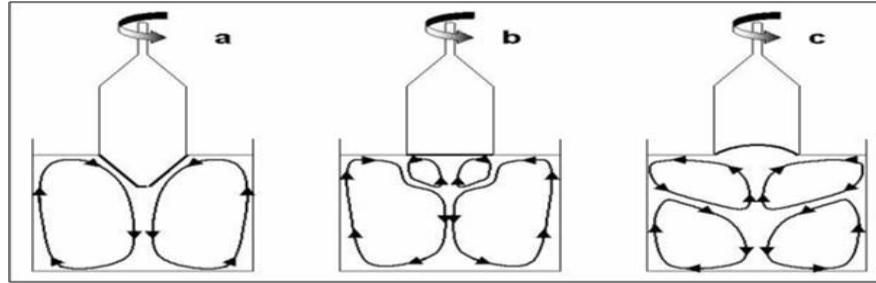


Figure I.12: Schéma des courants de convection dans le bain fondu **Lucian[24]**
 (a) rotations lentes, interface convexe.(b) rotations idéales, interface plane.(c) rotations rapides, interface concave.

I.3.4 Paramètres géométriques:

Ce sont toutes les dimensions géométriques qui permettent de définir la forme du cristal généré. L'expérimentateur les fixe en fonction du volume de cristal utile dont il souhaite disposer, mais également en fonction du matériau. En effet, si le risque de générer différentes directions de croissance est grand pour un matériau, il faut alors imposer un diamètre d'affinage petit. Au contraire, s'il existe des plans de clivage, en particulier si ceux-ci sont normaux à la direction de croissance, il convient d'augmenter le diamètre d'affinage et de limiter le poids total du cristal en fin de croissance de façon à ce qu'aucune fracture n'occasionne la chute du cristal dans le bain. Les paramètres géométriques sont donc **Ilas [26]**:

- diamètre d'affinage
- demi-angle conique de la tête.
- diamètre du corps.
- demi-angle conique du pied.

Pour définir complètement la forme du cristal visée, il reste à imposer les longueurs de l'affinage et du corps. En fonction des diamètres des parties cristallines considérées et de la vitesse de cristallisation, les grandeurs imposées dans la pratique sont les durées des phases d'affinage et de corps.

I.4 Origine des défauts structuraux dans les cristaux

Il existe plusieurs types de défauts structuraux qui altèrent la qualité des cristaux:

- Ponctuels: atome interstitiel, lacunes et impuretés.

- Linéaires: dislocations.
- Bidimensionnels: macles et joints de grains.
- Volumiques localisés: bulles et précipités.
- Volumiques diffus: contraintes résiduelles et hétérogénéité chimique.

Le type de défaut et sa fréquence dans un cristal déterminent les modifications des propriétés mécaniques, électriques, magnétiques ou optiques du solide.

1.4.1 Origine des défauts:

Jordan et al.[6] sont les premiers à expliquer théoriquement, la formation des contraintes et des dislocations dans le cristal, en proposant que la formation de la dislocation soit causée par la présence des contraintes thermo élastiques dans le cristal. Quand la contrainte thermique dépasse la contrainte critique de cisaillement, les dislocations commencent à se former et se multiplient par glissement dans les directions de glissement. Ils ont supposé que lors du tirage, le cristal est une longue tige cylindrique. Ils ont calculé la distribution de la température par conduction et les composantes de la contrainte thermique. La distribution de densité a montré un bon accord qualitatif avec celle observée sur des sections prises de la partie cylindrique des vrais cristaux. Après le travail de Jordan et al., beaucoup d'autres chercheurs ont consacré leurs études pour le calcul de la distribution des contraintes thermiques dans le cristal **Benmeddour [27]**, **Gallien [28]**.

Le tableau I.1 résume la nature des différents défauts, leur origine et les paramètres qui influent sur leur apparition . La plupart des défauts cristallins ont pour origine la thermique, la vitesse de tirage et la présence du creuset.

Tableau I.1: Origine des différents défauts de réseaux cristallin Benmeddour [27]

DEFAUTS	ORIGINES	PARAMETRES INFLUENTS
Ponctuels	Stœchiométrie, pollution, composition initiale, chemin de solidification.	Produit de départ, thermique, creuset.
Dislocations	Germes, lacunes, plasticité liée aux contraintes thermiques, chimiques ou d'adhésion.	Thermique, creuset, vitesse de tirage.
Joints de grains et macles	Nucléations parasites, alignement de dislocations, facettes à l'interface	Creuset, thermique, fluctuations de température, vitesse de tirage.
Précipités et bulles	Pollution, impuretés, réactions chimiques, chemin de solidification.	Creuset, vitesse de tirage, thermique.
Contraintes résiduelles et hétérogénéité chimique	Plasticité, convection et diffusion dans le liquide, rejet de soluté.	Thermique, vitesse de tirage, creuset.

I.5 Les instabilités thermoconvectives dans le procédé de Czochralski

I.5.1 Introduction

La convection est un mode de transport d'énergie dans lequel la chaleur est entraînée par le mouvement d'un fluide. On distingue deux types de convection: la convection naturelle qui est occasionnée par la poussée d'Archimède, et la convection forcée qui est due à une force extérieure. La convection intervient dans de nombreux phénomènes naturels. À titre illustratif, nous pouvons citer la circulation océanique; les masses d'air dans l'atmosphère chauffées par le soleil).

Le transfert de chaleur par convection thermique occupe une place importante dans les activités de recherche. En effet, de nombreux procédés industriels mettent en jeu des fluides qui peuvent être le siège de gradients thermiques. Dans certaines conditions particulières, les forces de flottabilité provoquent le développement d'instabilités thermo convectives.

Les instabilités thermoconvectives concernent des problèmes se produisant dans des systèmes non-linéaires. Il s'agit de phénomènes apparaissant dans des configurations dominées par la convection. D'un point de vue thermique, ces instabilités thermoconvectives peuvent conduire à de grandes modifications des processus de transfert avec des conséquences pratiques

qui peuvent être importantes dans certaines applications (déplacement de points chauds, blocages, modification des circulations des fluides...). La connaissance des phénomènes liés au développement d'instabilités thermoconvectives doit contribuer à l'élaboration de stratégies de contrôle des transferts ou transport de chaleur et de masse.

I.5.2 La convection naturelle

Pour comprendre le mécanisme fondamental de la convection naturelle dans une couche fluide contenue entre deux plaques horizontales maintenues à deux températures différentes, chauffée uniformément par le bas et refroidie par le haut. Ceci produira un mouvement du fluide, au dessus d'un certain seuil de température. Si l'écart de température est faible, la couche fluide est sans mouvement et stratifiée verticalement en température ceci correspond à un état conductif stable. La moindre perturbation de température ou de vitesse est atténuée par la diffusion thermique (qui diffuse la perturbation de température) ou la viscosité (qui atténue la perturbation de vitesse) avant que la poussée d'Archimède n'ait eu le temps d'intervenir. Lorsque le gradient de température excède un seuil critique, appelé seuil critique d'instabilité, l'état conductif devient instable et des mouvements thermo-convectifs s'installent **Benderradji [29]** .

La stabilité de l'état conductif ne dépend que de la valeur d'un nombre sans dimension appelé nombre de Rayleigh noté Ra. Il traduit la compétition entre la poussée d'Archimède et les effets dissipatifs de la traînée visqueuse et de la diffusion de chaleur.

Le nombre de Rayleigh est défini par :

$$Ra = \frac{g\beta\Delta TH^3}{\alpha\nu^2} \quad (1.2)$$

Tant que la différence de température $\Delta T = T_1 - T_2$, entre les plaques horizontales, (T_1 température de la paroi chaude, T_2 température de la paroi froide), est maintenue au dessous d'une certaine valeur critique ΔT_{cr} correspondant à $Ra < Ra_{cr}$, (Ra_{cr} est le nombre de Rayleigh critique), les échanges convectifs sont purement diffusifs. A une valeur de $\Delta T > \Delta T_{cr}$, ($Ra > Ra_{cr} = 1708$), on assiste à une mise en mouvement du fluide, alors la convection apparaît suffisamment au dessus de cette valeur, des cellules thermo-convectives prennent forme selon la géométrie de la cavité contenant le fluide.

I.5.3 La convection forcée et convection mixte

Contrairement aux mouvements convectifs induits naturellement (CN) au sein du fluide, les écoulements convectifs provoqués par des moyens mécaniques (pompes, ventilateurs, compresseurs), sont des mouvements de convection forcée (CF). Quand les mouvements convectifs sont dus à la fois à des causes internes (gradients de température, gradients de tensions superficielle ...) et externes, on rentre dans le cadre de la convection mixte (CM). L'écoulement dans un procédé de Czochralski est un écoulement de convection mixte. Les limites de ces trois domaines, la convection naturelle, la convection forcée et la convection mixte, sont approximativement fixées par un nombre adimensionnel dit nombre de Richardson Ri , défini par l'expression:

$$Ri = \frac{g\beta\Delta TH}{v^2} \quad (1.3)$$

Ce nombre est égal au rapport des carrés des vitesses associées à la convection naturelle et à la convection forcée. Il tend vers zéro dans le cas de la convection forcée pure (CF) et vers l'infini dans la Convection naturelle uniquement (CN) .

I.5.4 Notions de stabilité hydrodynamique

Partant d'un écoulement laminaire stationnaire donné, on peut définir des paramètres de contrôle (qui sont en fait des nombres sans dimensions comme le nombre de Reynolds, Rayleigh, Marangoni...). Un exemple connu de la thermique est celui de "Rayleigh- Bénard": une certaine épaisseur de fluide au repos est chauffée à sa base et refroidie à la surface. La solution "laminaire" (solution de "base") est la solution de conduction pure: la température varie linéairement, la vitesse est nulle. Cependant, on observe l'apparition de rouleaux qui détruisent cet état de base lorsque l'écart de température dépasse un certain seuil ($Ra_c = 1708$). C'est ce que l'on appelle la perte de stabilité.

I.5.4.1 Instabilités thermo-Convective de Rayleigh-Bénard

La convection de Rayleigh-Bénard; correspond à la situation où un volume de fluide est confiné dans une enceinte (dite « cellule ») formée de deux plans rigides horizontaux. Aux frontières latérales, le fluide est limité par des parois rigides verticales. Partant de conditions initiales de stratification thermique, le fluide est stable, au repos, et ne s'écoule pas. Dans le

champ de la pesanteur, quand simultanément le fluide est chauffé par le bas et refroidi par le haut, cette configuration est instable, en raison du gradient de masse volumique au sein du fluide. Ce gradient de masse volumique est engendré par la différence de température entre le haut et le bas de la cellule. Les masses chaudes se dilatent, deviennent plus légères que les masses froides et tendent à s'élever sous l'effet de la poussée d'Archimède. Cette force motrice s'oppose à deux autres forces de résistance, la dissipation visqueuse et la dissipation thermique voir Figure I.13 **Abdelali [30]**

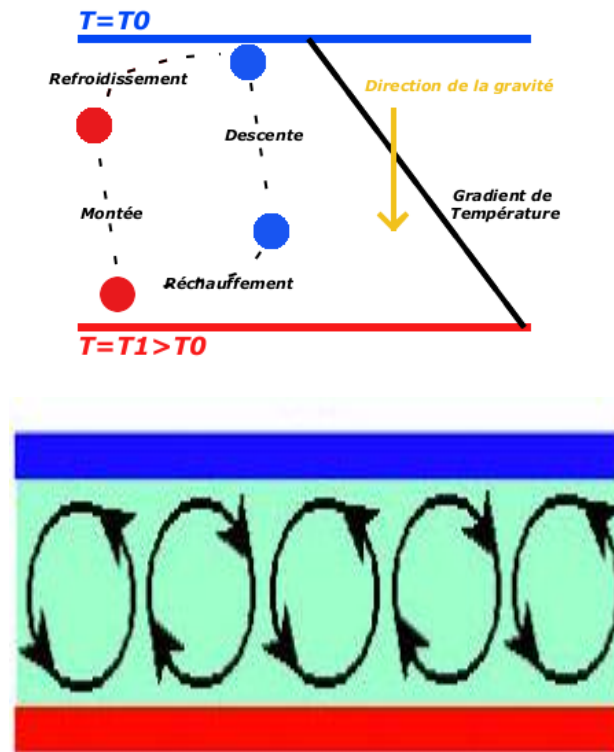


Figure I.13 Instabilité de Rayleigh-Bénard [31]

I.5.4.2 Instabilité thermoconvective de Rayleigh-Bénard-Marangoni

L'instabilité de Rayleigh-Bénard-Marangoni survient dans des couches horizontales de fluide soumises à des gradients verticaux de température suffisamment importants. L'instabilité résulte de la poussée d'Archimède, à laquelle s'ajoute l'effet Marangoni lorsque la couche de fluide possède une surface libre (cet effet de tension de surface est prépondérant pour des films liquides minces et il constitue le seul moteur de l'instabilité dans des conditions de microgravité). Des arrangements de cellules de convection prenant la forme de rouleaux, d'hexagones, de carrés

ou de spirales sont observés (Figure I.14). On peut également rencontrer des structures convectives variables dans le temps ainsi que du chaos spatio-temporel.

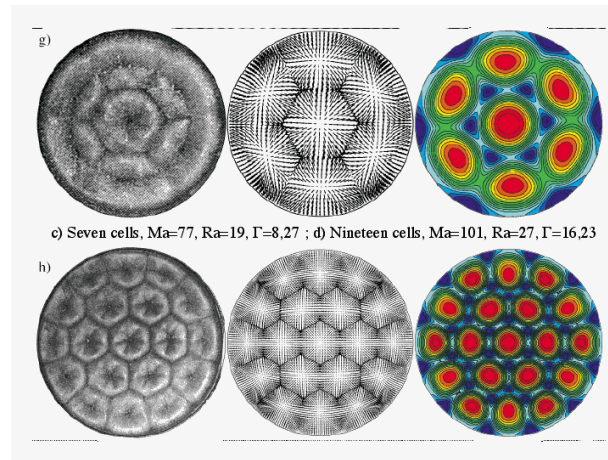


Figure I.14 Exemple d'instabilité de Rayleigh-Bénard-Marangoni

I.5.4.3 Rouleaux stationnaires et ondes hydrothermales

Contrairement aux rouleaux stationnaires de convection de Rayleigh-Bénard, qui prennent naissance par déstabilisation d'une couche de fluide soumise à un gradient vertical de température, les ondes hydrothermales sont issues de la déstabilisation d'une couche de fluide avec surface libre soumise à un gradient horizontal de température. Dans le premier cas, l'écoulement du fluide avant l'instabilité est inexistant: le fluide a une vitesse nulle en tout point. Dans le second cas, l'écoulement avant l'instabilité est à vitesse non nulle, mais stationnaire.

I.6 Conclusion

Dans ce chapitre, nous nous sommes attachés à introduire les généralités liées à notre travail qui se ramène au procédé de croissance cristalline de Czochralski. Une description générale et détaillée de ce dernier et de quelques techniques d'élaboration des monocristaux massifs ainsi que l'origine des défauts structuraux dans les cristaux a été ainsi présentée. Une brève description des instabilités thermoconvectives dans ce processus est donné.

Chapitre II

Etat de l'art

Chapitre II

Etat de l'art

II.1 Introduction

La méthode de Czochralski (Cz) est l'une des méthodes les plus importantes pour produire des monocristaux à partir d'une masse fondue. Dans ce procédé, l'écoulement, le transfert de chaleur et de masse dans le creuset sont fortement influencés par la non linéarité des phénomènes physiques régissant l'état de fonctionnement du tirage, tel que le transfert de chaleur par rayonnement, la conduction et la convection, le transfert de masse, l'écoulement du fluide, le phénomène de changement de phases (la solidification) ainsi que la présence de la surface libre. voir **Li et al. [33]** pour plus de détails. L'observation expérimentale par rayon X, faite par **D.T.J.Hurle [34]** a également montré le comportement complexe de l'écoulement de la masse fondue dans le procédé de Czochralski.

La production des cristaux par ce procédé exige donc un contrôle strict de l'écoulement pour obtenir des cristaux avec des propriétés électriques, mécaniques et optiques adéquates. En effet, les fluctuations de vitesse et de température rencontrées dans le procédé ont été identifiées comme étant l'un des facteurs conduisant à des inhomogénéités dans le cristal formé. Les mesures de la température par **Kuroda et al. [35]** montrent que les fluctuations de température de grandes amplitudes sont responsables de l'augmentation de la concentration des micro-défauts dans le cristal.

Kanda T et al. [36] ont étudié les effets des fluctuations de la température sur la formation des striations dans un système de croissance industriel en utilisant la transformée de Fourier rapide (FFT). La période des stries de croissance observée dans les cristaux correspondait exactement à celle des fluctuations de température dans la masse fondue.

Pour des raisons techniques, il est difficile d'étudier le mécanisme de transport dans un procédé réel de Cz. Le modèle de Czochralski est assez compliqué, les études récentes sont à la recherche de modèles caractéristiques simples dans l'intention d'obtenir un aperçu plus physique du phénomène. Compte tenu de plusieurs exemples d'écoulements engendrés par la convection et la rotation, le modèle le plus simple présentant une déstabilisation analogue est celui de la combinaison de deux cas bien étudiés: l'écoulement convectif dans un cylindre vertical avec un chauffage à la paroi latérale et au fond, et l'écoulement dans un cylindre (simulant le creuset) avec une partie du couvercle rotative (simulant le cristal). C'est le modèle proposé par **Rahal.S et al. [8]** avec des paramètres géométriques semblables à ceux d'un système réel de croissance.

II.2 Modèles expérimentaux

Dans le but de mieux comprendre le mécanisme complexe de l'écoulement dans le procédé de Czochralski, les expériences réelle et numérique sont des approches complémentaires pour identifier la dynamique de l'écoulement et le transfert de chaleur dans la masse fondue. La procédure expérimentale fournit des données qui peuvent être utilisées pour valider les modèles numériques.

Plusieurs modèles expérimentaux utilisant des fluides transparents (l'eau, l'huile silicone, mélange d'eau + Glycérol...), ont été utilisés pour simuler l'écoulement.

La convection d'un fluide transparent ayant un nombre de Prandtl égal à 1, forcée par la rotation du cristal dans un creuset stationnaire chauffé a été étudiée pour la première fois dans l'expérience de **Jones [37]**. Il a observé des fluctuations de température de grandes amplitudes à proximité du cristal.

Pour le Silicium (Si) fondu, **Elwell et al. [38]** ont réalisé des mesures de température pour un creuset tournant et un cristal stationnaire. Ils ont trouvé que les fluctuations de température varient fortement dans l'espace et avec la vitesse de rotation du creuset.

Kobayashi et al. [39] ont effectué des mesures de la température dans le procédé Czochralski pour la production du silicium et ont présenté les résultats en termes de solutions analytiques basées sur les modèles standards $k-\epsilon$. Cependant, leur approche, qui est obtenue à partir de l'analyse des écoulements de la couche limite, peut ne pas être appropriée pour les écoulements dans les enceintes.

Visman et al. [40] ont rapporté des mesures de températures à différents endroits d'une masse fondue de silicone maintenue dans un petit creuset de rayon $R_c = 0,17m$.

Hintz et al.[41] ont mené des expériences pour étudier l'influence du gradient de température sur la convection d'huile silicone liquide sans rotation du cristal pour un creuset de diamètre $d = 40$ mm et une Hauteur $H = 20$ mm, pour différentes valeurs de ΔT . Il a été trouvé qu'avec une différence de température très élevée, une structure multiroll et "d'onde" est observée et l'effet "flou" a été attribué aux caractéristiques d'écoulement instationnaire.

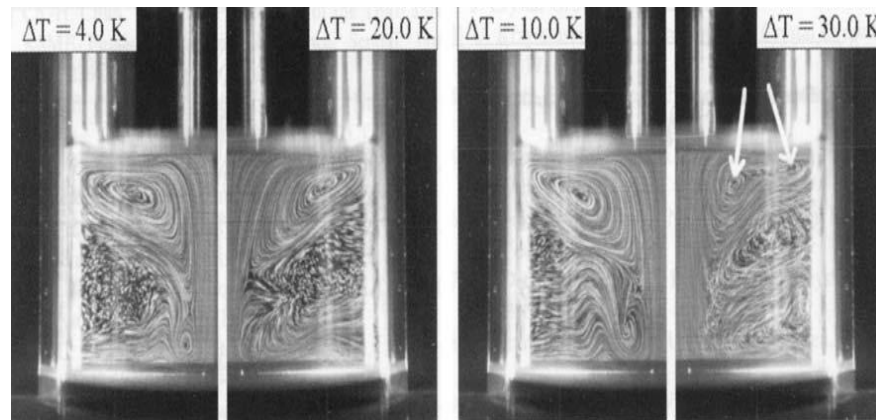


Figure II.1 Lignes de courant pour un creuset de $d = 40$ mm, Hauteur $H = 20$ mm, pour différentes valeurs de ΔT , montrant la convection de Marangoni, **Hintz P et al. [41]**.

Schwabe [42] a présenté un travail expérimental basé sur des données théoriques et des observations effectuées sur des instabilités thermocapillaires. Il a entamé l'étude de l'instabilité thermocapillaire d'un système simple. Ensuite, il s'est penché sur l'analyse des cas complexes réel, en ajoutant au système initial, soit: la force de gravité, un gradient de température incliné, une déformation statique et dynamique de la surface libre, ou encore, l'effet soluto-capillaire... etc. Quant à l'interprétation de ses observations: l'auteur a commenté celles résultants du système complexe entre autres: ondes hydrothermiques; rouleaux linéaires ou cellules de Bénard dans les couches d'extensions infinies, comme des dérivées du cas simple.

Dans ce travail, Schwabe a considéré principalement les liquides de nombre de Prandtl $Pr > 1$. En ce qui concerne le domaine d'application, la croissance cristalline de ce « melt » est le domaine en perspective pour l'application des connaissances retenus des instabilités thermocapillaires (Marangoni) et ce pour deux raisons :

1. Le métal adjacent au cristal en phase de croissance possède une surface libre comme dans le cas de la technique de Czochralski ou celle de la zone flottante
2. Les gradients de température élevés au voisinage de l'interface du cristal.

Schwabe [42] a constaté que le système dépend du nombre de Bond dynamique:

$$BO = \frac{Ra}{Ma} \quad (\text{II. 1})$$

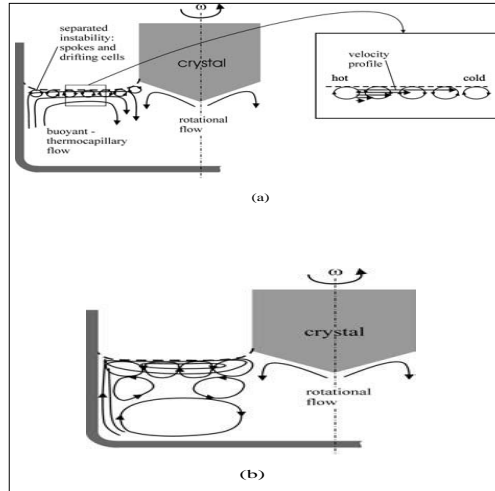


Figure II.2 Régimes d'écoulements pour un nombre de Prandtl $Pr \gg 1$. (a) cellules de Bénard-Marangoni b) Séparation des deux écoulements. Schwabe [42]

1/ Pour les faibles nombres de Bond (l'influence de la flottabilité est minime), l'écoulement de base est stable (stationnaire). Les structures observées sont:

- Les cellules de Bénard-Marangoni
- Dérivées des cellules de Bénard-Marangoni

2/ Pour les plus grands nombres de Bond (l'influence de la gravité devient considérable). Il ya apparition de nouvelles structures convectives nommées par Schwab "surface longitudinal rolls" et "surface drifting cells". Ces structures n'existent que dans la partie de la surface où l'écoulement est thermocapillaire tandis que l'écoulement de retour reste stable.

Rahal.S et al. [8] ont utilisé une nouvelle méthode pour étudier les aspects généraux de l'écoulement convectif dans un système de Czochralski. ils ont considéré l'influence de la rotation du cristal (pour des nombres de Reynolds allant de 0 à 3900) et la flottabilité (pour des nombres de Rayleigh allant de 0 à 2.7×10^7). Les champs de vitesses, obtenus par ultrasons, ont été utilisés avec les spectres de Fourier 2D correspondants et une fonction de corrélation. Des états stationnaires, quasi périodiques ou turbulents ont été reconnus. La dynamique spatio-temporelle complexe a été réduite à un code binaire des champs de vitesses. Grâce à la représentation binaire, on a identifié que la transition vers la turbulence dans l'écoulement de

Czochralski s'est produit par intermittence spatio-temporelle. La méthode de décomposition orthogonale a été appliquée et le nombre de modes, impliqués dans la dynamique des écoulements turbulents, calculé. L'augmentation des effets de la flottabilité induit plus de modes à impliquer dans la dynamique. La rotation, quant à elle, réduit le nombre de modes et d'oscillations.

R. Nowak et al. [43] ont présenté une analyse expérimentale de la convection naturelle et mixte dans un système de Czochralski pour un mélange (eau+Glycérol) avec un nombre de Prandtl $Pr = 14.5$. L'influence de certains paramètres (gradient de température, les vitesses de rotation du cristal et de creuset ainsi que le rapport d'aspect (H/R_c)) ont été examinées. Deux méthodes ont été utilisées pour étudier les champs de température et de vitesse – DPIT (Digital Particle Image Thermometry) et DPIV (Digital Particle Image Velocimetry). Les résultats sont présentés sous forme de contour de températures et champs de vitesse. L'influence de la différence de températures entre les parois du creuset et le cristal sur les champs de température a été étudiée (voir Figure II.3).

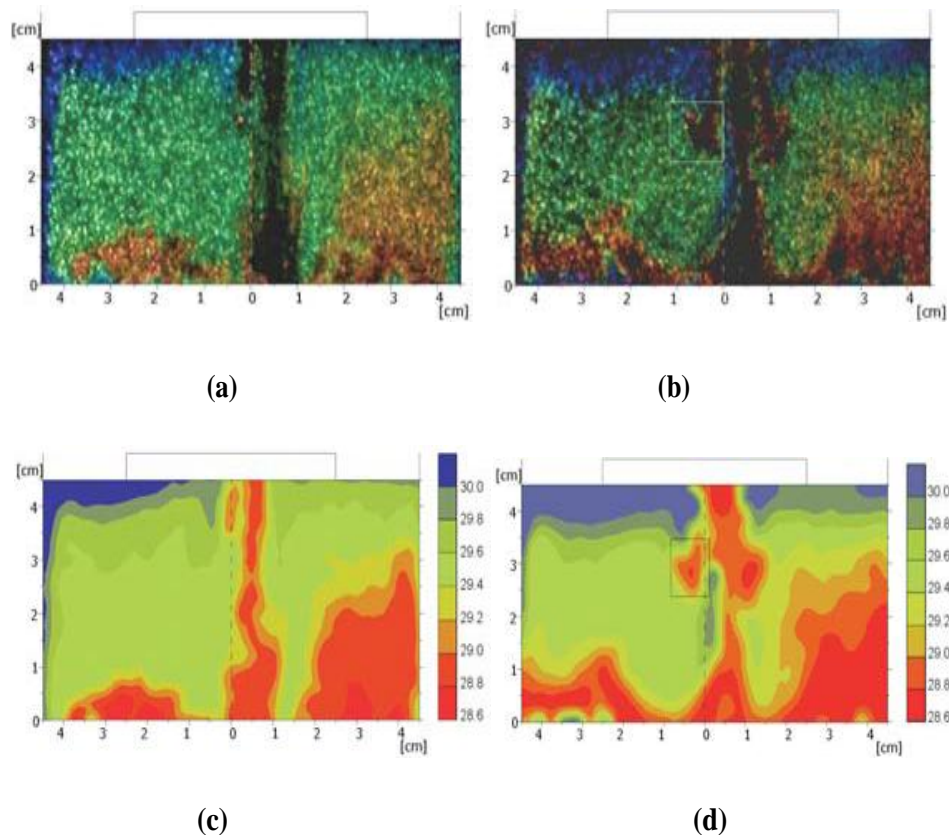


Figure II.3: Effet de la différence de température sur le champ de température; (a)(c), $H/R_c = 1.0$, $\Delta T = 8$ K, $Gr = 6.5 \cdot 10^5$; (b)(d) $H/R_c = 1.0$, $\Delta T = 10$ K, $Gr = 8.1 \cdot 10^5$. [43]

Les visualisations faites par **Teitel et al. [44]**, pour un nombre de Prandtl $Pr = 23.9$, ont révélé la présence de l'instabilité "panache froid", où le fluide froid se trouvant près du cristal, descend vers le bas. Une instabilité similaire a été observé par **Munakata et al.[45]**, pour un grand nombre de Prandtl ($Pr = 1000$) est obtenue aussi par nos simulations numériques Figure II.4.

Haslavsky V, Miroshnichenko E [46] ont examiné l'effet des faibles vitesses de rotation du cristal sur l'instabilité oscillatoire tridimensionnelle. Les mesures ont confirmé, en partie, la déstabilisation de l'écoulement.

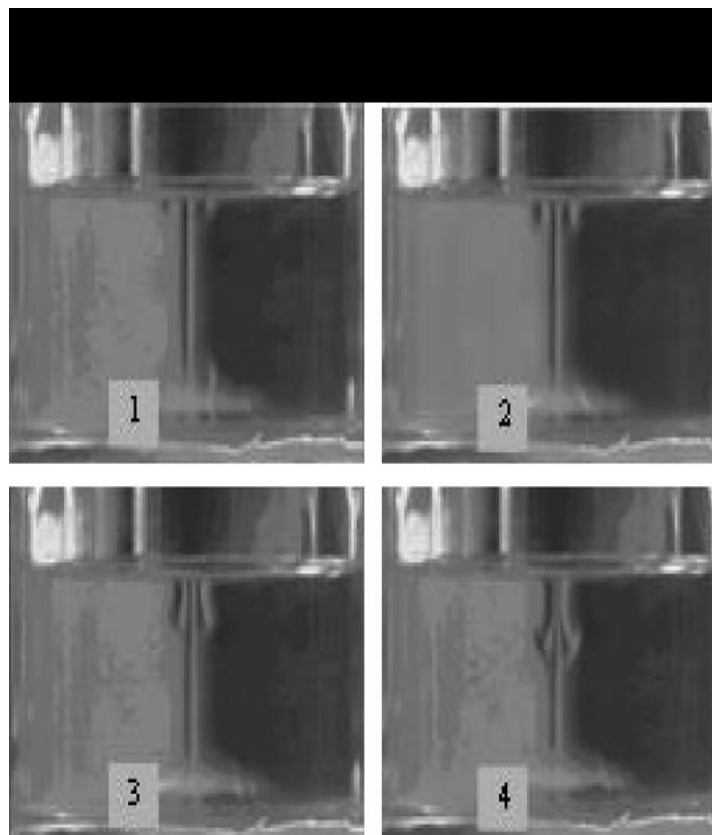


Figure II.4: Instabilité «panache froid». Huile 2cSt, $\Delta T = 20$ K. Le rapport des rayons est de 0,35[45].

Haslavsky V, Miroshnichenko E [47] ont développé un nouveau dispositif expérimental qui permet de mesurer le seuil d'instabilité oscillatoire dans un modèle d'écoulement de la masse fondue de Czochralski. La fluctuation critique de la température a été considérablement réduite sous l'effet d'une faible rotation.

Malgré les grands travaux expérimentaux menés pour comprendre les phénomènes de transport au cours de la croissance des monocristaux en détail, la connaissance de la convection dans la masse fondue est encore insuffisante. D'autres méthodes de prédiction et de compréhension de ces phénomènes de transport qui comprennent les simulations numériques ont été largement développées dans les dernières décennies. Ces simulations peuvent fournir des informations détaillées et supplémentaires sur l'écoulement et le transfert de chaleur, ce qui permettra d'optimiser les conditions de croissance.

II.3 Les travaux de modélisation et de simulation numérique

Il est difficile d'observer le comportement de la masse fondue dans un procédé de croissance cristalline de Czochralski expérimentalement pour plusieurs raisons. Tout d'abord, l'écoulement ne peut généralement être visualisé à cause de l'opacité de la masse fondue. Deuxièmement, les thermocouples utilisés pour détecter les fluctuations de température, sont souvent protégés contre l'agressivité chimique de la masse fondue par des tubes de quartz de silice. Les tubes de quartz de silice ont des effets sur la structure d'écoulement, en outre, les amplitudes et les fréquences des fluctuations de température sont amorties en raison de la faible conductivité thermique du quartz de silice. Les hautes températures sont inadaptées pour les particules utilisées comme traceurs. Dans cette situation critique, la simulation numérique devient un outil très utile.

Beaucoup de variables ne peuvent être mesurées dans des expériences réelles de croissance. Par conséquent, les modèles mathématiques sont utilisés pour des situations précises. Cependant, ces modèles sont limités par la complexité des équations décrivant la physique du processus. Des simplifications sont donc nécessaires et les équations régissant peuvent négliger des interactions importantes. (**Benmeddour [27]**).

Micheleic et al. [48] sont parmi les premiers à tenter la simulation tridimensionnelle en étudiant la structure de l'écoulement et la transition d'un écoulement bidimensionnel vers un écoulement tridimensionnel pour l'écoulement de Si à faibles nombres de Grashof.

Bottaro et Zebib [49] ont simulé la convection libre tridimensionnelle instationnaire d'un fluide à faible nombre de Prandtl dans une cavité cylindrique sans tenir compte de la rotation du cristal ni celle du creuset. Ils ont constaté que la convection libre axisymétrique est instable aux perturbations azimutales. A des nombres de Rayleigh importants, le mouvement azimutal persiste

et se concentre près de l'axe du cylindre. L'écoulement bicellulaire prédit par des simulations bidimensionnelles axisymétriques est trouvé. Lorsque le nombre de Rayleigh est supérieur à une valeur critique, la convection oscillatoire apparaît, et cette valeur critique est proche de celle prédite par les expériences numériques bidimensionnelles, alors que la fréquence critique est plus élevée.

Kopetsch [50,51] était le premier à employer les formes déformables de l'interface solide/liquide et celle de la surface libre liquide/gaz ambiant dans la simulation du procédé CZ. Il a employé une transformation algébrique pour le domaine du cristal et une transformation numérique pour le domaine du liquide.

Dans **K.Iliev et al. [52]**, les fluctuations de température dans la phase liquide et, surtout, au-dessous de l'interface cristal / liquide, sont étudiées par simulation numérique du système creuset-masse fondu- cristal pendant la croissance des cristaux d'oxyde par la technique de Czochralski, en faisant varier les paramètres géométriques et physiques du système. Le changement de l'aspect des fluctuations avec la rotation du cristal est étudié. Ils ont montré que l'apparition de fluctuations périodiques de température est due à l'interaction entre la convection libre et la convection forcée dans le liquide. Ces fluctuations sont observées principalement dans la région limite entre les deux écoulements. Le site de cette région est déterminé par les valeurs des nombres adimensionnels (Re et Gr). Ils ont montré que l'amplitude maximale des fluctuations dépend principalement de la différence de température entre la paroi du creuset et celle du cristal, tandis que la période des fluctuations maximale est déterminée par le diamètre du creuset et la valeur du nombre de Grashof (Gr). La comparaison des résultats obtenus par simulation avec des résultats de la croissance réelle montre un bon accord.

En se rendant compte de l'importance du nombre de Grashof élevé dans les cristaux de grands diamètres dans les systèmes de croissance, plusieurs chercheurs ont essayé de présenter des modèles de turbulence pour traiter l'écoulement complexe du liquide.

Avec un modèle thermique-capillarité-hydrodynamique de la croissance de Czochralski, pour les cristaux de silicium de grand diamètre, **Kinney et al. [53]** ont employé un modèle de turbulence $k-\epsilon$ pour prédire l'écoulement dans la masse fondue. Les calculs sont présentés pour un écoulement gouverné par la flottabilité seule et pour un écoulement entraîné par la combinaison de la rotation du cristal et du creuset, la flottabilité et les gradients de tension de surface. Ces résultats montrent une amélioration du transfert de chaleur et de masse avec l'augmentation de la

vitesse de rotation du creuset, ce qui n'est pas prévu par les simulations d'écoulement laminaire. Les champs de température calculés et les formes d'interface sont en bon accord avec les mesures rapportées précédemment par **Kinney et al. [54]**.

Wagner et al. [55] ont calculé les seuils de la perte de symétrie axiale (breakdown of axisymetry) dans une cavité cylindrique verticale chauffée par le bas, contenant un fluide ayant un nombre de Prandtl égal à 6,7 et un facteur de forme égal à l'unité, sous les effets de la convection naturelle et la thermocapillarité. Ils ont observé une transition directe d'un état stationnaire vers un écoulement tridimensionnel.

Xiao et Derby [56] ont effectué des simulations afin d'étudier l'écoulement tridimensionnel oscillatoire de type Cz pour un grand nombre de Prandtl $Pr = 8$. Un modèle global négligeant l'effet thermocapilaire et le transfert de chaleur à travers la surface libre, est utilisé pour un nombre de Grashof $Gr = 2,5 \cdot 10^5$. L'étude a permis l'investigation de la transition d'un écoulement axisymétrique vers un écoulement asymétrique et la forte influence de cette transition sur la distribution de température.

Touihri et al. [57] ont effectué une simulation tridimensionnelle de l'écoulement dans un cylindre avec chauffage vertical. Dans leurs simulations ils ont observé des configurations axisymétrique et asymétrique.

Visman et al.[58] ont réalisé des simulations numériques afin de prédire la convection oscillatoire d'une masse fondue de silicium induite par convection naturelle et convection forcée due à la rotation du creuset et celle de cristal dans une configuration de Czochralski. Le champ thermique prédit est comparé aux observations expérimentales du champ thermique et aux fluctuations de température dans la masse fondue. Les fluctuations de température ont été mesurées pendant un processus de croissance cristalline utilisant un thermocouple. Les équations gouvernantes ont été résolues numériquement à l'aide du code STHAMAS 3D, basé sur un solveur de Navier-Stokes à volume fini structuré par blocs. La simulation tridimensionnelle de l'écoulement a été faite sans aucun modèle de turbulence.

Enger et al. [59], ont effectué des simulations numériques sur la même configuration que celle de **Visman et al. [58]**, pour des nombres de Grashof allant jusqu'à $Gr = 10^9$. Ils ont montré que les températures calculées concordent assez bien avec celles données par Visman et al.

Zhong Zeng et al. [60] ont trouvé numériquement la vitesse de rotation optimale du cristal dans le cas de la croissance des cristaux de LiCAF par la technique CZ. L'étude du modèle

avec un fond adiabatique indique qu'une interface relativement plane (2 pouces) est obtenue par la rotation du cristal. La valeur critique de la vitesse de rotation du cristal augmente avec la diminution de la hauteur de la masse fondue et de la taille des cristaux. Ils ont trouvé une vitesse de rotation optimale proche de 14 tr/min pour un facteur de forme égal à 1 et $\Delta T = 50$. L'effet de la convection de Marangoni sur la structure d'écoulement est aussi étudié et les résultats indiquent que la négligence de cette dernière entraîne une déviation importante des résultats.

Kumar et al. [61] ont employé une approche directe de simulations numériques pour étudier l'influence de la convection thermocapillaire sur la croissance des cristaux de silicium dans un creuset type Czochralski industriel. Ils ont montré qu'en raison de la présence de gradients de tension de surface, la vitesse radiale en direction du cristal devient élevée à la surface libre et la température augmente. Ainsi, la convection thermocapillaire réduit les fluctuations de température au-dessous du cristal et de la surface libre de la masse fondue.

Wagner et al. [62] ont étudié la dynamique turbulente et le transport de chaleur dans des configurations de croissance cristalline de CZ par simulation numérique directe. Leur analyse s'est concentrée sur les effets des vitesses de rotation du cristal et du creuset sur la structure de l'écoulement et le développement des fluctuations de température. La simulation a été faite avec des données issues de l'expérimentation. Ils ont constaté que la contre rotation du cristal et du creuset conduit à un écoulement complexe et que les fluctuations maximales de températures sont à proximité de l'interface de solidification. Cette position est décalée lorsque le rayonnement thermique à travers la surface libre est pris en compte.

Gelfgat [63] a observé l'effet de l'excitation de l'écoulement en convection libre par les faibles vitesses de rotation. Après avoir étudié plusieurs modèles dans lesquels les écoulements sont entraînés simultanément par convection libre et forcée, il a conclu que la déstabilisation est observée dans les cas où la force centrifuge agit contre la circulation convective principale. L'effet a été étudié en considérant l'écoulement en convection mixte dans un cylindre avec un couvercle tournant et un profil de température parabolique sur la paroi latérale.

Plusieurs études numériques instationnaires et tridimensionnelles sur les instabilités des écoulements de la masse fondue dans un système de croissance cristalline de Cz ont été menées au cours des dernières années. Néanmoins, la plupart des études ont discuté des instabilités pour des nombres de Prandtl élevés ($Pr > 10$). Il y a peu de travaux sur l'origine des instabilités des

écoulements pour les écoulements à faibles nombres de Prandtl ($Pr < 1$), tel que pour le Si, le Ga et l' GaAs.

Shuxian CHEN et al. [64] ont étudié numériquement le cas de l' GaAs en tenant compte de la flottabilité, Marangoni et la rotation du cristal dans la configuration de Czochralski en utilisant une simulation instationnaire et tridimensionnelle pour la première fois. Le passage de l'écoulement axisymétrique à l'écoulement asymétrique pour revenir ensuite de nouveau à l'écoulement axisymétrique avec l'augmentation des forces centrifuges en augmentant la vitesse de rotation du cristal a été numériquement observée. Plusieurs caractéristiques importantes de l'instabilité barocline dans la croissance cristalline de l' GaAs par le procédé de CZ ont été prédites. Ces caractéristiques sont en accord avec les observations expérimentales.

Polezhaev et al. [65] ont étudié les instabilités thermo-convectives dans la configuration de Cz pour l'GaAs. Ils ont utilisé le modèle laminaire pour simuler l'écoulement alors qu'il est turbulent au delà de Grashof égal à 10^7 . Ils ont discuté le cas d'une convection naturelle pure sans tenir compte de l'interaction complexe de la flottabilité, la convection de Marangoni et la convection forcée.

Hoyas et al. [66,67] ont analysé, par la méthode de la stabilité linéaire, les instabilités de la thermoconvection dans un récipient cylindrique, pour différents nombres de Bond dynamique (Bd) et de Biot (Bi), et ce, en utilisant deux nombres de Prandtl. Le cylindre était chauffé par le bas avec un profile linéaire de température décroissant de l'intérieur vers l'extérieur. Quant à la surface supérieure, elle était exposée à l'atmosphère, alors que la surface latérale était maintenue adiabatique. Les résultats ont confirmé que le contrôle de l'état de base était principalement gouverné par le nombre de bond dynamique « Bo ». Pour les nombres de Prandtl élevés, il a été possible d'identifier, dans cette géométrie, l'intervalle du nombre de Bond où soit la gravité ou bien la thermocapillarité présentait un effet dominant.

C .M. Wu et al.[68] ont étudié dans une configuration numérique 3D les caractéristiques fondamentales d'un écoulement instationnaire complexe. Ce dernier a été induit par les effets de rotation et de tension superficielle. La configuration utilisée correspond à un récipient cylindrique peu profond avec une surface partiellement libre. Les résultats obtenus ont montré que: lorsque les forces motrices sont faibles, l'écoulement de base est stationnaire et axisymétrique. Mais, lorsque le nombre de Reynolds dépasse une valeur critique, l'écoulement passe vers un état oscillatoire tridimensionnel. En conséquence plusieurs structures ont été obtenues dans

différentes directions. Quant aux effets relatif à la force thermocapillaire et à la vitesse angulaire, l'étude a été exhaustive et son intérêt s'est étalé aux mécanismes de l'écoulement instationnaire oscillatoire 3D.

II.5 Les techniques de stabilisation de l'écoulement de Czochralski

II.5.1. Introduction

Plusieurs modifications de la technique de base de Czochralski ont été introduites pour améliorer la qualité du cristal. Parmi ces techniques de contrôle de la convection dans la masse fondue l'application des champs magnétiques. Le concept de base est de réduire la convection dans la masse fondue, où une amélioration de la micro-homogénéité de la distribution des dopants peut être obtenue en modifiant l'orientation et la force du champ magnétique. Cependant, cette technique n'a pas été utilisée pratiquement dans l'industrie.

Une autre approche pour atténuer les fluctuations est la croissance des cristaux dans un environnement de microgravité. Cependant, cette méthode est également coûteuse en raison des difficultés à réduire la gravité. Comme alternative prometteuse de la croissance de Czochralski, l'introduction de la convection forcée par la rotation du cristal, cette approche est utilisée dans la présente étude. Il convient de noter que, puisque la variation de la vitesse de rotation est facilement manipulé par un dispositif électronique simple et des moyens mécaniques, il est possible de faire des économies par rapport aux techniques précédentes.

II.5.2 Application d'un champ magnétique

Le champs magnétique a été suggéré pour supprimer la convection et les fluctuations de températures. Cependant la réalisation technologique a été réalisé seulement récemment pour le Silicium puis l'Arséniure de Gallium dans le cadre d'un projet Japonais **Hans J., et al.[69]**. L'orientation du champs magnétique doit être perpendiculaire aux interfaces de fusion chaude et froide pour être plus efficace. L'efficacité d'amortissement, c'est à dire l'augmentation du nombre critique de Rayleigh pour le début de la convection entraînée par la flottabilité, est définie par le nombre de Hartmann Ha. L'influence du champ magnétique sur la convection est étudiée par un ensemble de simulations numériques.

Dans (**Lee Y.S., et al. [70]. Munakata T., et al. [45]**), la force de Lorentz induite par un champ magnétique en mouvement (en anglais TMF, Travelling Magnetic Field) dans une

enceinte cylindrique a été discutée. Les auteurs ont montré que cette force de Lorentz peut être employée pour contrôler l'écoulement des métaux fondus, électriquement conducteurs et la direction de l'écoulement résultant de l'application du champ magnétique peut être complètement changée. Un champ TMF peut être employé pour éviter partiellement l'écoulement conduit par les forces de flottabilité.

Ben Hadid et al. [71] dans leur investigation, ont employé une méthode numérique spectrale afin de résoudre directement les équations de Navier-Stokes de l'écoulement tridimensionnel oscillatoire d'un métal liquide conducteur confiné dans une cavité cylindrique horizontale. Ainsi, ils ont examiné les signaux temporels, les propriétés de symétrie et les bilans d'énergie caractérisant les oscillations de l'écoulement. Ils ont montré que le champ magnétique entraîne une diminution de la convection et cause des modifications dans la structure de l'écoulement. Le champ magnétique vertical stabilise l'écoulement et augmente le nombre de Gr critique.

Davoust et al.[72] ont étudié expérimentalement l'écoulement magnétohydrodynamique laminaire dans une cavité cylindrique remplie de Mercure et soumise à un champ magnétique uniforme et vertical. Ils ont trouvé à partir des mesures de température que pour un Hartmann de l'ordre de 10, l'écoulement MHD se stabilise.

Bessaih et al. [73] ont mené une étude numérique sur l'écoulement MHD laminaire d'un métal liquide contenu dans une enceinte cylindrique, ayant un rapport d'aspect égal à 1, dont la paroi supérieure est en rotation. L'ensemble est soumis à un champ magnétique externe vertical. Un bon accord entre les résultats asymptotiques et numériques est obtenu par les auteurs, ces derniers ont montré qu' on peut contrôler l'écoulement primaire par un bon choix de la conductivité électrique des parois de l'enceinte.

L'écoulement incité par un champ magnétique tournant, d'un métal liquide remplissant une enceinte cylindrique avait sa part dans le champ des études des procédés de stabilisation des écoulements industriels, tel que l'étude entreprise par **Marty et al.[74]** pour connaître les détails de l'interaction du champ magnétique tournant avec l'écoulement du fluide étudié. Ils ont montré que l'application d'un champ magnétique en rotation très modéré à un mouvement convectif du fluide au commencement instable, est capable de reconstituer la stabilité de l'écoulement. Des travaux expérimentaux et numériques récents soutiennent cette idée comme ceux faits par: **Juel et al. [75,76]**, **Bessaih [77]**, en montrant l'effets d'un champ magnétique orthogonal à la

direction principale de l'écoulement du Gallium liquide en convection tridimensionnelle. Une fois le champ magnétique est appliqué, la convection sera réduite, ainsi que les oscillations, trouvées aux gradients élevés de température, peuvent être supprimées, tandis que sans application de champ magnétique, l'écoulement est amené à une structure complexe qui favorise la transition à la convection oscillatoire.

II.5.3 Croissance en microgravité

Une façon de supprimer la convection est de produire des cristaux dans des conditions de très faible champ gravitationnel (Microgravité) et réduire ainsi les effets de la flottabilité. La microgravité offre une possibilité unique pour séparer les deux mécanismes mis en jeu (la convection forcée couplés aux effets de la gravité).

II.5.4 Contrôle des vitesses de rotations

Dans (**Fontaine [78]**) l'étude concerne l'analyse des régimes d'écoulement qui se développent au cours d'un processus de croissance de Czochralski, modélisée avec ou sans liquide encapsulant. Le modèle mathématique repose sur les équations couplées de Navier-Stokes et d'énergie avec l'approximation de Boussinesq. Le système d'équations est résolu à l'aide d'une méthode d'éléments finis. Les effets combinés du gradient thermique et de la rotation sur l'écoulement et sur le champ de température sont considérés pour une configuration axisymétrique. Une attention particulière est portée à l'influence du liquide encapsulant (fort nombre de Prandtl $Pr = 3270$) sur un bain fondu métallique (faible nombre de Prandtl $Pr = 0,015$). Divers régimes d'écoulements créés par la variation du nombre de Grashof (jusqu'à $Gr = 1,9 \cdot 10^7$) et des nombres de Reynolds de rotation du cristal (jusqu'à $Re_s = 10^4$) et du creuset (jusqu'à $Re_c = 1,5 \cdot 10^4$) ont été considérés. Ces paramètres limites correspondent à des situations réelles de croissance. Dans une seconde partie un modèle tridimensionnel, de type Czochralski sans encapsulant, simplifié a été considéré. Le fluide est soumis à un faible gradient thermique et à la rotation du cristal. La résolution des équations, formulées en vorticité-vitesse, est effectuée avec une méthode de différences finies. L'écoulement obtenu reste axisymétrique et stationnaire (ce qui correspond à un mouvement en spirale régulier) pour les faibles vitesses de rotation; puis devient instationnaire et tridimensionnel ($Re_s = 500$) comprenant une structure à 7 vagues suivant l'azimut.

Un autre mécanisme d'entraînement d'écoulement important dans le processus CZ est les rotations du cristal et du creuset. Dans le meilleur des cas, les vitesses les plus élevées de rotation peuvent considérablement améliorer l'homogénéité azimutale. Cependant, il y a des limitations pratiques et théoriques sur la vitesse de rotation. La dépression dans la hauteur du creuset due à la rotation est donnée par **R.B. Brid et al. [79]**. Deuxièmement, les vitesses de rotation élevées du cristal amplifieront l'effet de l'excentricité, la création de l'écoulement ondulé rend le système fortement asymétrique et peu convenable pour la croissance de bons cristaux. Ladeinde et al. [80] ont trouvé que les écoulements asymétriques commencent dans le système industriel CZ quand la vitesse de rotation est de 20-30 tr/min.

Parasad [81] a constaté, expérimentalement, que des rotations du creuset d'environ 5-6 tr/min réduisent au minimum la quantité de l'oxygène incorporée au creuset, et qu'une vitesse de rotation d'environ 10 tr/min est optimale pour une meilleure structure cristalline.

Benmeddour [27] a démontré que la forme de l'interface cristal/liquide n'est pas sensiblement affectée par la variation de la vitesse de rotation du cristal. La déflexion maximale de l'interface augmente de -8,2 à 5,4 mm, en variant la vitesse de rotation du cristal de 1 à 15 tr/min. La forme de l'interface change d'une forme concave à une forme convexe avec l'augmentation de la vitesse de rotation du cristal. Quand la vitesse de rotation est faible ($\Omega_s = 1$ tr/min), l'interface est concave. Dans le cas où la vitesse de rotation atteint la valeur critique de 10 tr/min, la forme de l'interface liquide/cristal est presque plate. Quand la vitesse de rotation devient plus grande ($\Omega_s = 15$ tr/min.), l'interface devient convexe dans le cristal.

II.5.5 Effets de la forme du fond du creuset

Les travaux qui incluent une comparaison directe entre un système cylindrique et un fond du creuset courbé sont rares. Un modèle bidimensionnel de faible facteur de forme $0,125 \leq A \leq 0,25$ a été étudié numériquement par **A. Anselmo et al. [82]**. Dans ce modèle, la condition thermique à la surface libre est soit adiabatique ou libre de l'énergie par rayonnement. Le fond et la paroi latérale, sont à température homogène. Le gradient horizontal de température rend ainsi ce modèle différent d'un système de Rayleigh-Bénard. La courbure du fond du creuset se révèle avoir un effet d'amortissement sur les oscillations induites par la flottabilité. Avec la diminution de facteur de forme (A), un changement dans le mode de convection d'un écoulement de recirculation vertical à la paroi latérale à une convection de Bénard. Ils ont noté que, pour une

valeur de (A) égale à 0,25, la forme inférieure se révèle n'avoir aucune influence marquée sur la structure d'écoulement et le transfert de chaleur.

H. Saeedi et al. [83] ont étudié l'influence de la forme du fond du creuset sur la croissance cristalline. Deux travaux expérimentaux avec un creuset de diamètre $D = 120$ mm et un facteur de forme $A = 1$ ont été menés. Le chauffage par induction par une bobine entourant axialement le creuset a été utilisé, ce qui implique un gradient horizontal de température. Ce gradient induit une convection naturelle qui est contrariée par la convection forcée causée par la rotation du cristal. Pour la même puissance de chauffage, la différence de température ΔT entre les parois du creuset et le cristal est de 59 K et 77.75 K pour un fond plat et un fond courbé respectivement. La conséquence de l'augmentation de ΔT dans le cas du fond courbé est une convection naturelle plus importante. Cela contredit les conclusions de **A. Anselmo et al. [82]**. Toutefois, la forme de l'interface du cristal était presque plate pour un creuset à fond plat et convexe dans le cas du fond courbé. La différence de déviation entre 1mm et 11mm soutient l'hypothèse des plus grandes vitesses d'écoulement dans le cas du fond courbé. La contradiction évidente entre **A. Anselmo et al.[82]** et **H. Saeedi et al.[83]**, laisse la question à propos de l'influence d'un fond courbé sur la nature de l'écoulement. Un effet d'amortissement et de stabilisation trouvé par A. Anselmo et al. [82] serait la situation souhaitée pour la croissance cristalline.

Aucune étude n'a pris en compte la forme du fond du creuset pour voir l'influence d'un champ magnétique sachant que l'écoulement induit par un champ magnétique doit être différent dans un creuset réel de Cz et un creuset cylindrique.

II.6 Conclusion

Nous avons présenté une revue sur les différents travaux sur le procédé de Cz. Les recherches, qu'elles soient numériques ou expérimentales, ont été consacrées à l'amélioration de la qualité cristalline du cristal élaboré ainsi que la compréhension de l'interaction complexe des phénomènes physiques dans ce type de système.

Les publications récentes visent les écoulements à haut nombre de Prandtl ($Pr \geq 10$). Les simulations numériques modernes utilisent plusieurs modèles globaux qui sont très compliqués

pour une analyse détaillée des instabilités de l'écoulement. Leurs validations avec des données expérimentales nécessitent des moyens technologiques énormes.

Des écarts importants ont été rencontrés dans la comparaison entre les résultats expérimentaux et les simulations numériques tridimensionnelles des écoulements et l'application de l'hypothèse de parois isothermes trop souvent non représentative des conditions réelles.

Un champ magnétique peut être utilisé pour amortir les fluctuations de température. mais plusieurs études ont montré que ce dernier ne fournit pas l'amortissement souhaité dans la plage de paramètres pris en considération.

Les travaux antérieurs portant sur les instabilités thermiques fait apparaître une grande variété de méthodes et d'approches, par ailleurs aucune publication récente ne s'efforce de faire la synthèse des résultats obtenus.

La qualité et la géométrie du cristal formé par le procédé de Czochralski dépend des phénomènes physique très complexe de la masse fondue, spécialement à proximité de l'interface solide -liquide. La compréhension de la distribution de température dans le bain fondu est indispensable pour l'optimisation du procédé.

L'amélioration du rendement du procédé peut être obtenue en réduisant la convection dans le bain fondu et minimiser les fluctuations de température et de vitesse avec la variation de la vitesse de rotation du cristal, cette procédure non couteuse est prometteuse; ainsi le troisième chapitre est réservé à la modélisation

En dépit de ces nombreux travaux effectués sur la modélisation de Czochralaski, nous avons remarqué que ce type de problème traitant l'effet de la vitesse de rotation du cristal sur les fluctuations de températures pour des grands nombres de Rayleigh (généralement exigé dans la croissance cristalline de Cz pour l'obtention de cristaux avec de grands diamètres) n'a pas été beaucoup abordé. Du point de vue de la simulation numérique, nous avons réalisé un modèle numérique avec des conditions imposées en accords avec celles expérimentales dont nous disposons. Enfin, dans le cadre du post-traitement des résultats, nous pouvons explorer plus profondément les résultats obtenus numériquement par une visualisation des structures d'écoulement issues des champs de vitesse et de température. Nous jugeons qu'avec cette modélisation on peut situer les valeurs optimales des vitesses de rotation du cristal qui permettent de réduire les fluctuations de températures néfastes à la bonne qualité des structures des cristaux.

Chapitre III

Modélisation et méthode numérique

Chapitre III

Modélisation et procédure de simulation numérique

III.1 Introduction

Dans cette partie on a considéré les phénomènes thermique et hydrodynamique dans une enceinte cylindrique simulant un procédé de Czochralski. Les équations qui régissent ce problème ont été résolues par une approche numérique, basée sur la méthode des volumes finis en utilisant le code Fluent.

L'écoulement dans la configuration simulée dans ce qui suit, sera modélisé en se servant des lois de conservation en introduisant des hypothèses simplificatrices. Les conditions aux limites et les conditions initiales qui régissent ce problème seront exposées. Ces équations nous permettent de rendre compte des mouvements de convection rencontrés au sein du fluide, notamment l'évolution de la vitesse, de la température et les fluctuations de température.

L'étude a été réalisée en utilisant un liquide de modélisation (huile silicone 2 cSt ou du gallium). Le liquide remplit le creuset cylindrique du rayon $R_c = 0,05 \text{ m}$ jusqu'à la hauteur 0,1 m. Le disque du rayon $R_s = 0,015 \text{ m}$ est situé sur la surface du liquide coaxialement au creuset (simule le cristal). Les conditions thermiques sont les suivantes: le disque est refroidi à la température T_f , le fond du creuset et sa paroi latérale sont chauffés à la température $T_c = T_f + \Delta T$.

III.2 L'écoulement dans le liquide (simulant la masse fondue):

Le phénomène le plus important dans le processus de Czochralski (CZ) est l'écoulement de la masse fondue. Plusieurs mécanismes sont responsables de l'écoulement: Le cristal et le creuset tournants, exercent des forces de cisaillement (effet de la viscosité) sur le liquide, de sorte que le liquide est conduit dans la direction azimutale (écoulement azimutal). En outre, les forces centrifuges induites par la rotation du cristal et celle du creuset, mènent le liquide au voisinage de l'interface cristal/liquide et au fond du creuset. Le cristal tournant, améliore l'uniformité de la structure dans le bain du liquide et la rotation du creuset permis

d'éviter les irrégularités dans le chauffage (elle garantit la symétrie thermique).

Le chauffage du creuset et le refroidissement du cristal causent des gradients de température à travers le liquide. Et par conséquent un gradient de masse volumique, ce qui conduit à un mouvement du liquide (convection naturelle).

Les variations de la tension superficielle le long de la surface libre du liquide, conduisent un autre type d'écoulement appelé la convection de Marangoni. Puisque le coefficient de tension superficielle de la plupart des matériaux, sous leur forme fondue, varie avec la température, un gradient de température différent de zéro le long de la surface libre, cause le cisaillement sur celle-ci.

III.3 Position du problème et modèle physique

III.3.1 Position du problème

Pour le domaine d'étude nous avons adopté la même géométrie et les mêmes dimensions que celles du modèle expérimental utilisé par **Rahal.S et al. [8]**. La Figure III.1 présente la configuration étudiée. Le creuset de hauteur H et de Rayon R_c contient de l'huile de silicone ou du Gallium, le cristal est un cylindre de rayon R_s en rotation, avec une vitesse angulaire Ω_s . L'interface solide-liquide est supposé plane avec une température T_f , le fond et la paroi latérale du creuset sont maintenues à une température T_c , la surface libre est supposée plane avec un échange convectif très faible avec l'air environnant ($T_a = \frac{T_c + T_f}{2}$). La convection de Marangoni est prise en compte.

III.3.2 Hypothèses simplificatrices

Afin de pouvoir résoudre les équations régissant l'écoulement, nous avons adopté les hypothèses simplificatrices suivantes:

- Le fluide est incompressible et Newtonien.
- L'écoulement dans le creuset est supposé laminaire.
- La masse volumique est supposée varier linéairement avec la température dans le terme de force de gravité (approximation de Boussinesq). De même, si les variations de la tension de surface sont faibles, on peut adopté une approximation similaire à celle de Boussinesq (III.1 et III.2)

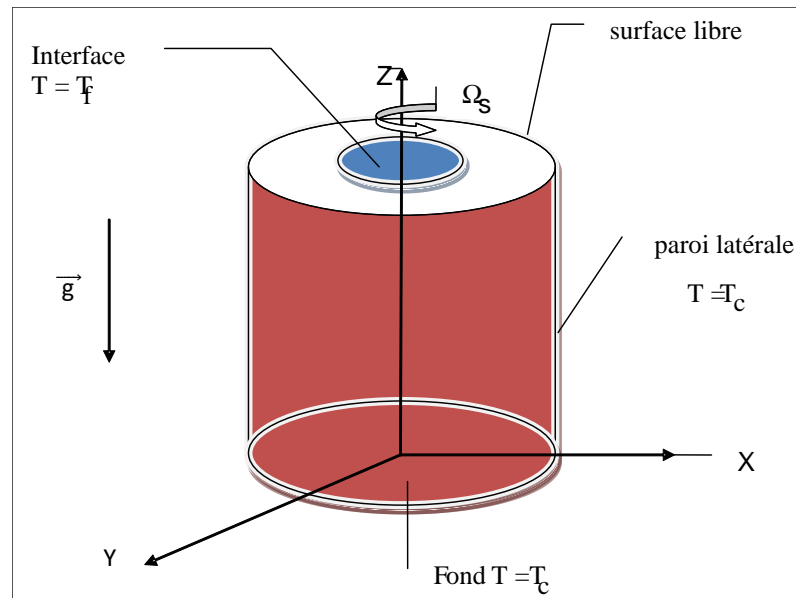


Figure III.1: Géométrie simplifiée du problème

- L'effet du rayonnement thermique est négligeable
- La conductivité thermique du solide (cristal) est comparable à celle du liquide (melt).
- L'interface solide-liquide est plane.
- La surface libre est supposée plane et légèrement refroidie par convection.
- Le cristal n'est pas simulé mais traité comme condition aux limites.

III.4 Approximation de Boussinesq

Les bases de cette approximation font que dans de nombreuses situations pratiques les équations de Navier-Stokes peuvent être considérablement simplifiées. Il s'agit notamment d'écoulements dans lesquels la température varie peu, ce qui résulte que (ρ) varie peu également, pas suffisamment pour que la poussée d'Archimède ne déclenche un mouvement. Par conséquent, les variations de (ρ) sont négligées dans les équations de conservations, sauf dans le terme de poussée d'Archimède (ρg) . Dans ce terme, (ρ) est fonction de la température uniquement. Toutes les autres propriétés thermophysiques du fluide (β , μ , κ , γ , C_p) sont supposées constantes. La puissance volumique liée aux variations de pression et la dissipation

visqueuse dans l'équation de l'énergie, sont négligeables devant le flux de chaleur diffusé par conduction.

III.5 Propriétés thermo physiques

Les propriétés thermo physiques de l'huile silicone et le Gallium sont regroupés dans les tables III.1 et III.2.

Table III.1: Propriétés thermo physiques de l'huile silicone 2 cSt à 25°C [8].

Propriété Fluide	α [m ² /s]	ρ [Kg/ m ³]	ν [m ² /s]	λ [W/m . k]	β [1/K]	σ [N . m ⁻¹]	$\frac{\partial \sigma}{\partial T}$ [N . m ⁻¹ K ⁻¹]	Pr
Huile silicone 2 cSt	7,1 × 10 ⁻⁸	873	2 × 10 ⁻⁶	0.15	0.24 × 10 ⁻³	0.0187	-6,28 × 10 ⁻⁵	28

Table III.2: Propriétés thermo-physiques du gallium à T_m = 302.78 K [84]

Fluide	α [m ² /s]	ρ [Kg/ m ³]	ν [m ² /s]	λ [W/m . k]	β [1/K]	σ [N . m ⁻¹]	$\frac{\partial \sigma}{\partial T}$ [N . m ⁻¹ K ⁻¹]	Pr
Gallium	1,28 × 10 ⁻⁵	6095	3.2 × 10 ⁻⁷	31	1.27 × 10 ⁻⁴	2,06	0,0068	0.025

III.6 Equations gouvernantes

Les équations régissant l'écoulement sont les équations de continuité, de Navier-Stokes et l'équation d'énergie, qui expriment la conservation de masse, de quantité de mouvement et d'énergie. Pour une formulation simple du problème, nous allons considérer quelques approximations entre autres les approximations de Boussinesq (Les forces à l'origine du mouvement sont la force thermocapillaire et la force d'Archimède.) (III.1) (III.2)

Nous supposons alors que l'influence de la variation de la masse volumique n'est prise en compte que par l'intermédiaire des forces de volume. La masse volumique du fluide varie linéairement avec la température et elle est donnée par la relation suivante:

$$\rho = \rho_0[1 - \beta(T - T_0)] \quad (\text{III.1})$$

où

β : coefficient de dilatation thermique.

ρ_0 : masse volumique de référence.

T_0 : température de référence.

De même pour la tension superficielle:

$$\sigma = \sigma_0 - \gamma(T - T_0) \quad (\text{III.2})$$

γ : coefficient de tension superficielle.

σ_0 : tension superficielle de référence.

T_0 : température de référence.

Les équations de base régissant l'écoulement et les transferts de chaleur sont données respectivement par:

1. Equation de continuité :

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \vec{\nabla}(\rho \vec{U}) = 0 \quad (\text{III.3})$$

2. Equations de quantité de mouvement :

$$\frac{\partial(\vec{U})}{\partial t} + (\vec{U} \cdot \vec{\nabla})\vec{U} = -\frac{1}{\rho}\vec{\nabla}p + \mu\Delta\vec{U} + g\beta(T - T_0)\vec{e}_z \quad (\text{III.4})$$

3. Equation de conservation d'énergie :

$$\frac{\partial T}{\partial t} + (\vec{U} \cdot \vec{\nabla})T = \alpha\Delta T \quad (\text{III.5})$$

où α est la diffusivité thermique

$$\alpha = \frac{\lambda}{\rho C_p}$$

III.6.1 En coordonnées cylindriques:

➤ **Equation de continuité**

$$\frac{\partial(ru)}{\partial r} + \frac{1}{r}\frac{\partial v}{\partial \theta} + \frac{\partial w}{\partial z} = 0 \quad (\text{III.6})$$

➤ **Equation de quantité de mouvement radiale**

$$\begin{aligned} \frac{\partial u}{\partial t} + \left[\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (ruu) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} (uv) + \frac{\partial}{\partial z} (uw) - \frac{v^2}{r} \right] \\ = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial r} + \frac{\mu}{\rho} \left[\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial u}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\frac{\partial u}{\partial \theta} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{\partial u}{\partial z} \right) - \frac{2}{r^2} \frac{\partial v}{\partial \theta} \right] \end{aligned} \quad (\text{III.7})$$

➤ **Equation de quantité de mouvement azimutale**

$$\begin{aligned} \frac{\partial v}{\partial t} + \left[\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (ruv) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} (vv) + \frac{\partial}{\partial z} (vw) - \frac{uv}{r} \right] \\ = -\frac{1}{\rho r} \frac{\partial p}{\partial \theta} + \frac{\mu}{\rho} \left[\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial v}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\frac{\partial v}{\partial \theta} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{\partial v}{\partial z} \right) - \frac{v}{r^2} - \frac{2}{r^2} \frac{\partial u}{\partial \theta} \right] \end{aligned} \quad (\text{III.8})$$

➤ **Equation de quantité de mouvement axiale**

$$\begin{aligned} \frac{\partial w}{\partial t} + \left[\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (ruw) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} (vw) + \frac{\partial}{\partial z} (wu^2) \right] \\ = -\frac{1}{\rho_0} \frac{\partial p}{\partial z} + \frac{\mu}{\rho_0} \left[\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial w}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\frac{\partial w}{\partial \theta} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{\partial w}{\partial z} \right) - \frac{u}{r^2} - \frac{2}{r^2} \frac{\partial v}{\partial \theta} \right] \\ - g\beta(T - T_0) \end{aligned} \quad (\text{III.9})$$

➤ **Equation de l'énergie**

$$\frac{\partial T}{\partial t} + \left[\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (ruT) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} (vT) + \frac{\partial}{\partial z} (wT) \right] = -\frac{\lambda}{\rho c_p} \left[\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial T}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\frac{\partial T}{\partial \theta} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{\partial T}{\partial z} \right) \right] \quad (\text{III.10})$$

III.6.2 Condition initiale et conditions aux limites:

III. 6.2.1 Condition initiale:

A $t = 0$, l'écoulement est purement conductif d'où $u = v = w = 0$ (III.11)

$$\alpha \left(\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial T}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\frac{\partial T}{\partial \theta} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{\partial T}{\partial z} \right) \right) = 0 \quad (\text{III.12})$$

$$\alpha = \frac{\lambda}{\rho c_p} \quad (\text{III.13})$$

III. 6.2.2 Les conditions aux limites:

➤ Au fond du creuset ($z = 0; 0 \leq \theta \leq 2\pi$ et $0 \leq r \leq R_c$)

$$u = v = w = 0; T = T_c \quad (\text{III.14})$$

➤ A la paroi latérale ($r = R_c; 0 \leq \theta \leq 2\pi$ et $0 \leq z \leq H$)

$$u = v = w = 0; T = T_c \quad (\text{III.15})$$

➤ A l'interface ($z = H; 0 \leq \theta \leq 2\pi$ et $0 \leq r \leq R_s$) ($z = H; 0 \leq \theta \leq 2\pi$ et $0 \leq r \leq R_s$)

$$u = w = 0; v = R_s \Omega_s; T = T_f \quad (\text{III.16})$$

La rotation du cristal apparaît comme condition aux limites dans la composante azimutale de la vitesse.

➤ A la surface libre ($z = H; 0 \leq \theta \leq 2\pi$ et $R_s \leq r \leq R_c$)

La convection thermo capillaire à la surface libre (interface liquide / gaz) est décrite par les équations suivantes:

$$\frac{\partial u}{\partial z} = -\frac{1}{\mu} \frac{\partial \sigma}{\partial T} \frac{\partial T}{\partial r} \quad (\text{III.17})$$

$$\frac{\partial v}{\partial z} = -\frac{1}{\mu r} \frac{\partial \sigma}{\partial T} \frac{\partial T}{\partial \theta} \quad (\text{III.18})$$

$$w = 0 \quad (\text{III.19})$$

$$\lambda \frac{\partial T}{\partial z} = h(T - T_a) \quad (\text{III.20})$$

III.6.3 Choix des grandeurs de référence

Pour mettre les équations précédentes sous formes adimensionnelles, on introduit les variables adimensionnelles, en choisissant les échelles caractéristiques suivantes d'après

Gelfgat [63]:

– R_c comme longueur de référence

– R_c^2/ν comme temps de référence

– ν/R_c comme vitesse de référence

– $\rho(\nu R_c)^2$ comme pression de référence

– La température est rendue adimensionnelle par l'expression suivante: $T = \frac{T - T_f}{T_c - T_f}$

III.6.4 Paramètres adimensionnels:

L'écoulement et le transfert de chaleur dans la configuration de Czochralski sont décrits par un certain nombre de paramètres de contrôle.

Le premier paramètre est le nombre de Rayleigh, qui traduit la compétition entre la poussée d'Archimède et les effets dissipatifs de la traînée visqueuse et de la diffusion de la chaleur.

Le nombre de Rayleigh est défini par :

$$Ra = \frac{\text{poussé d'archimede}}{\text{force de traînée visqueuse X taux de diffusion de la chaleur}}$$

Le deuxième paramètre est le nombre de Prandtl, qui prend en compte le transport de la chaleur, il représente le rapport de l'épaisseur de la couche limite visqueuse et la couche limite thermique. Pour les métaux liquides (Gallium) et les semi-conducteurs, il est de l'ordre de 10^{-2} , ce qui signifie que la chaleur diffuse rapidement en comparaison avec le transport convectif.

Le troisième paramètre est le nombre de Reynolds, qui représente le rapport entre les forces d'inertie et les forces de dissipation visqueuse (diffusion de la quantité de mouvement) au sein du fluide :

$$Re = \frac{\text{forces d'inertie}}{\text{forces de dissipation visqueuse}}$$

Le quatrième paramètre est le nombre de Marangoni, qui représente le rapport entre les effets relatifs de la tension de surface et des forces visqueuses.

$$Ma = \frac{\text{force de tension de surface}}{\text{forces visqueuses}}$$

Les expressions des nombres adimensionnels utilisés sont:

Nombre de Rayleigh

$$Ra = \frac{g\beta\Delta TH^3}{\alpha\nu} \quad (\text{III-21})$$

Nombre de Reynolds du cristal

$$Re_s = \frac{\Omega_s R_s^2}{\nu} \quad (\text{III.22})$$

Nombre de Prandtl

$$Pr = \frac{\nu}{\alpha} \quad (\text{III.23})$$

Nombre de Marangoni

$$Ma = \frac{\partial \sigma}{\partial T} \frac{(R_c - R_s) \Delta T}{\mu \alpha} \quad (\text{III.24})$$

α Diffusivité thermique,

β Coefficient Volumétrique d'expansion thermique,

μ Viscosité dynamique,

ν Viscosité cinématique,

σ Tension de surface,

$\frac{\partial \sigma}{\partial T}$ Coefficient de tension superficielle ,

ΔT Différence de température appliquée entre le creuset et le cristal,

Le rapport d'aspect qui représente une caractéristique géométrique de la configuration:

$$A = \frac{H}{D_c} \quad (\text{III.25})$$

En se basant sur ses hypothèses sus cités et sur les variables adimensionnelles, les équations couplées de Navier-Stokes et de l'énergie (III.3), (III.4), (III.5), préalablement établies deviennent:

$$\begin{cases} \vec{\nabla}(\vec{U}) = 0 \\ \frac{\partial(\vec{U})}{\partial t} + (\vec{U} \cdot \vec{\nabla})\vec{U} = -\vec{\nabla}p + \Delta\vec{U} + \frac{Ra}{Pr} T \vec{e}_z \\ \frac{\partial T}{\partial t} + (\vec{U} \cdot \vec{\nabla})T = \frac{1}{Pr} \Delta T \end{cases} \quad (\text{III.26})$$

Les équations décrites ci - dessus sont des équations différentielles aux dérivées partielles non linéaires, couplées. En raison de leur complexité, ces équations sont résolues à

l'aide d'une méthode numérique. Dans notre cas la méthode utilisée est celle des volumes finis (MVF).

III.6.5 Discrétisation des équations

Les équations de conservation présentées ci-dessus, peuvent être écrites sous une forme générale. L'équation du transport, en coordonnées cylindrique pour un écoulement incompressible tridimensionnel est donnée par:

$$\underbrace{\frac{\partial}{\partial t}(\rho\phi)}_T + \underbrace{\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial\theta}(\rho v.\phi) + \frac{\partial}{\partial z}(\rho w.\phi)}_C = \underbrace{\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left[r\Gamma_\phi\frac{\partial\phi}{\partial r}\right] + \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial\theta}\left[\Gamma_\phi\frac{\partial\phi}{\partial\theta}\right] + \frac{\partial}{\partial z}\left[\Gamma_\phi\frac{\partial\phi}{\partial z}\right]}_D + \underbrace{S_\phi}_S \quad (\text{III.27})$$

Avec :

ϕ : La propriété transportée.

Γ_ϕ : Le coefficient de diffusion.

S_ϕ : Le terme source qui inclut également le gradient de pression.

T : Terme transitoire;

C : Terme de convection;

D : Terme de diffusion;

S : Terme source.

Les termes de l'équation généralisée (III.27), sont groupés dans le tableau III.1

Tableau III.1: Termes de l'équation de transport généralisée

Equation	ϕ	Γ_ϕ	S_ϕ
continuité	1	0	0
Quantité de mouvement suivant r	u	v	$-\frac{1}{\rho}\frac{\partial p}{\partial r} - v\left[\frac{u}{r^2} + \frac{2}{r^2}\frac{\partial v}{\partial\theta}\right] + \frac{v^2}{r}$
Quantité de mouvement suivant θ	v	v	$-\frac{1}{\rho r}\frac{\partial p}{\partial\theta} + v\left[-\frac{v}{r^2} + \frac{2}{r^2}\frac{\partial u}{\partial\theta}\right] - \frac{uv}{r}$
Quantité de mouvement suivant z	w	v	$\frac{1}{\rho}\frac{\partial p}{\partial z} - g\beta(T - T_0)$
Energie	T	$\frac{\lambda}{\rho C_p}$	0

III.7 Méthode numérique de résolution

III.7.1 Introduction

Les écoulements des fluides, sont décrits par un système d'équations aux dérivées partielles. Ce système formé par les équations de continuité, de quantité de mouvement et d'énergie, qu'il convient de résoudre pour déterminer les champs thermique et dynamique.

Pratiquement il est impossible de trouver une solution analytique exacte à de tels systèmes du fait que les équations citées précédemment soient très complexes, c'est-à-dire non-linéaires d'une part et couplées d'autre part. Dans ce cas, le recours à la résolution numérique s'impose et nous incite à choisir la méthode numérique adéquate pour obtenir les meilleures approximations.

III.7.2 Méthode numérique adopté par le code Fluent:

Pour obtenir une solution numérique du problème étudié, on doit transformer les équations différentielles du modèle mathématique au moyen d'un processus de discrétisation en un format facile pour le processus numérique. Ce format n'est autre que le système d'équations algébriques obtenues après discrétisation.

Parmi les techniques et les méthodes de discrétisation les plus fréquemment utilisées dans les problèmes d'écoulements et de transferts thermiques, on peut citer la méthode des différences finies, la méthode des volumes finis et la méthode des éléments finis.

Le code Fluent utilise la méthode des volumes finis, Cette méthode présente des avantages considérables du fait qu'elle soit simple, qu'elle garantisse la conservation de masse et de la quantité de mouvement dans chaque volume de contrôle et dans tout le domaine de calcul et est applicable pour les géométries complexes.

III.7.3 Principe de la méthode des volumes finis:

La méthode des volumes finis consiste à transformer les dérivées en expressions algébriques faciles à résoudre. la résolution par cette méthode passe par quatre étapes principales [85]:

a) Effectuer un maillage du domaine d'étude: ceci se fait en plaçant un certain nombre de nœud dans ce domaine et en construisant un volume fini ou un volume de contrôle autour de chaque nœud. Ce volume de contrôle est délimité par des interfaces.

b) Intégrer l'équation aux dérivées partielles sur chaque volume de contrôle.

c) Choisir un profil de variation de la quantité à trouver (par exemple: température, pression, etc...) entre deux nœuds consécutifs pour pouvoir évaluer les dérivées à l'interface. Ceci nous conduit à l'obtention d'une équation algébrique simple appelé « équation discrétisée » qui est propre à chaque nœud du domaine. Donc, si celui-ci est constitué de n-nœuds, on aura n-équations algébriques à résoudre, il y a donc, autant de nœuds que volumes de contrôle d'où la performance de la méthode des volumes finis comparativement aux autres méthodes.

d) Résoudre le système d'équations obtenu par l'une des méthodes de résolution des équations algébriques linéaires.

III.7.4 Logiciel FLUENT:

Fluent est un logiciel de simulation numérique de mécanique des fluides. Ce logiciel est juste le solveur, il ne maille pas le système. Le maillage doit être réalisé avec un mailleur, Gambit par exemple. Fluent est intégré dans la fameuse suite de logiciel de simulation ANSYS. Il dispose d'un très grand nombre de modèles, pouvant faire face à de très nombreux aspects de la mécanique des fluides: Ecoulement diphasique (miscible, non miscible, cavitation, solidification), turbulence (LES, $K\epsilon$, Kw , ...), combustion, transport de particules, écoulement en milieux poreux, maillages mobiles et dynamiques avec reconstruction du maillage...

Les schémas temporels et spatiaux peuvent de plus être modifiés pour améliorer la convergence.

Le logiciel Fluent est basé sur la Méthode des Volumes Finis, qui permet la résolution des équations qui régissent l'écoulement (équation de conservation de la masse, équation de quantité de mouvement, équation de l'énergie). Fluent est associé à Gambit, à l'aide duquel on va définir la géométrie, le maillage, et les conditions aux limites [86, 87].

III.7.5 Qualité de Maillage:

La qualité du maillage joue un rôle significatif dans la précision et la stabilité du calcul numérique. Le maillage adopté pour cette simulation numérique est représenté dans la Figure III.2.

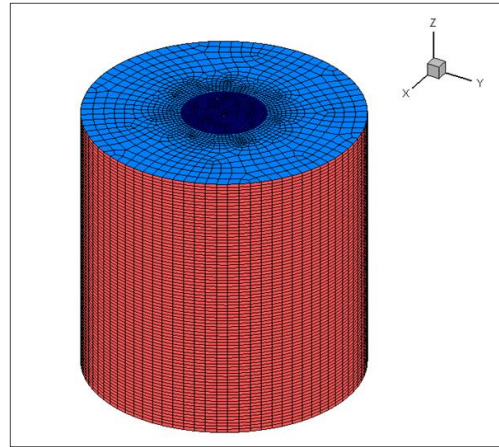


Figure III.2: Le maillage de notre étude

Le maillage adopté est du type décalé, proposé par **Patankar et Spalding [89]**. Le centre d'un volume fini typique est un point P, et les centres de ses faces latérales est, ouest, nord, sud, front et arrière sont les points respectivement e, w, n, s, t et b. Chacun des volumes de contrôle est entouré de six autres volumes de contrôle dont les centres sont les points E, W, N, S, T et B. Dans ces points sont stockées les variables scalaires (pression P et température T). Cependant, les composantes de la vitesse u, v et w sont stockées aux centres des faces latérales des volumes de contrôle.

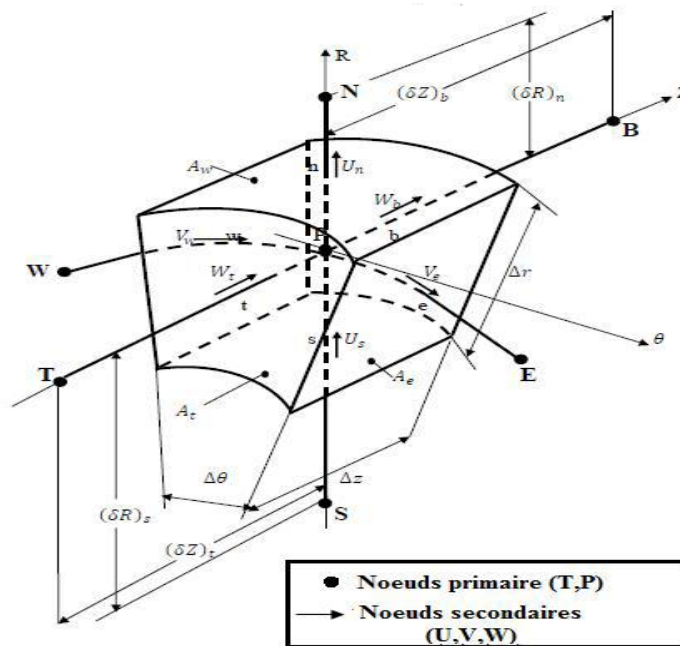


Figure III.3 Volume de contrôle principal tridimensionnel [88]

Considérons le volume de contrôle sur la figure (III.3)

Les Figures (III.5), (III.6) et (III.7), illustrent respectivement, les projections suivant les trois plans : (r, θ) , (θ, z) et (r, z) .

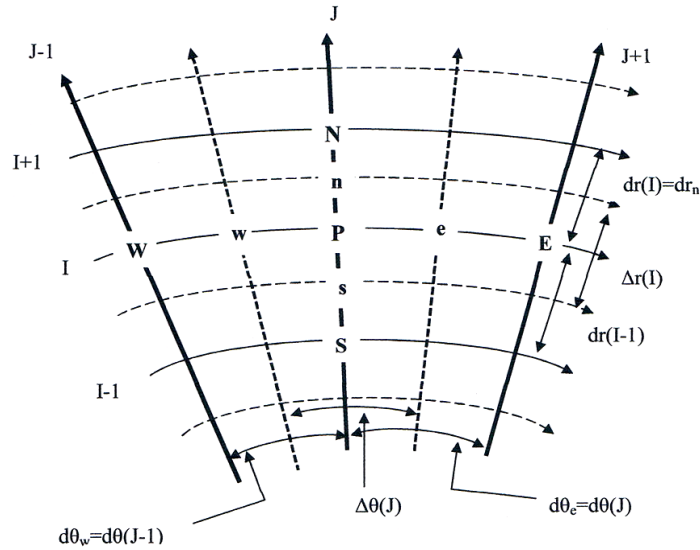


Figure III.4 Projection du Volume de contrôle dans le plan (r, θ) [88]

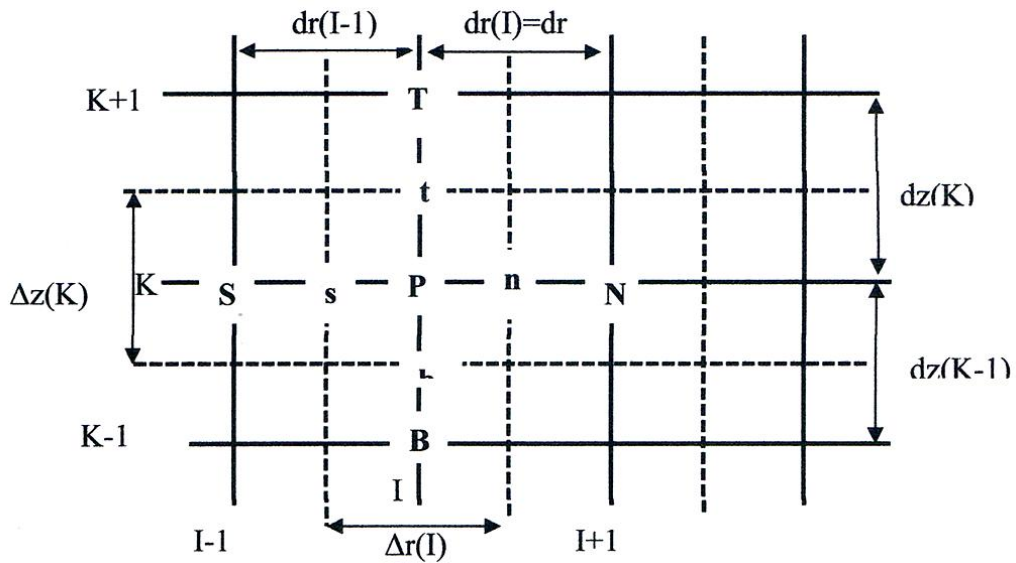
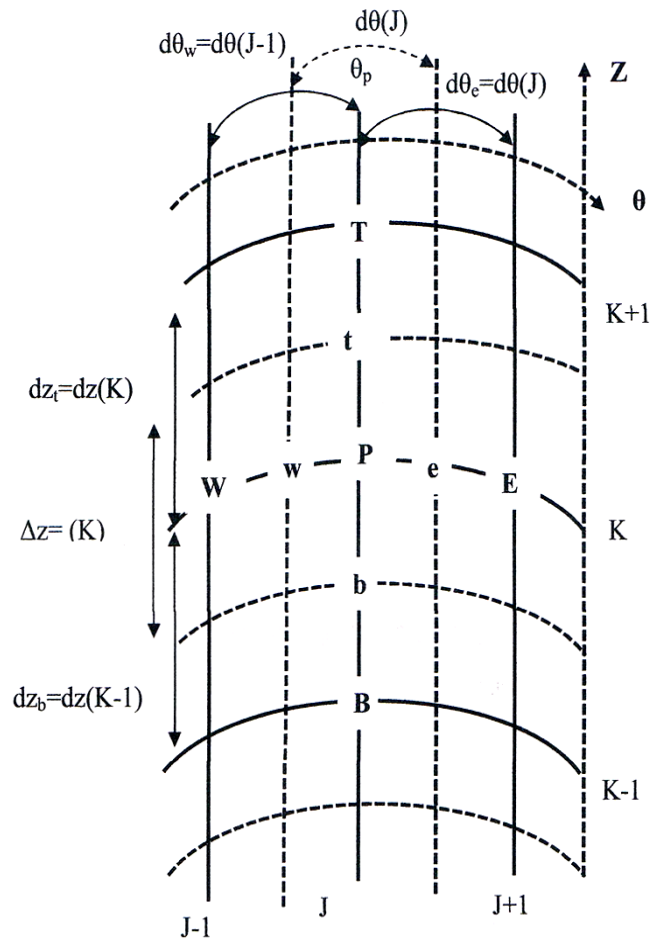


Figure III.5 Projection du Volume de contrôle dans le plan (r, z) [88]

Figure III.6 Projection du Volume de contrôle dans le plan (z, θ) [88]

III.7.6 Schémas d'interpolation:

Par défaut FLUENT stocke les valeurs discrètes de la pression, de la vitesse et de la température au centre des cellules, schéma collocatif décrit par **Rhie et Chow [90]**. Comme le calcul de la pression, de la vitesse et de la température sur les faces est nécessaire pour exprimer le terme de convection et de pression, ces valeurs vont être interpolées à partir des valeurs au centre des cellules. Ceci est accompli en utilisant un schéma décentré. FLUENT dispose de plusieurs schémas décentrés: 1^{er} ordre, second ordre, loi de puissance, schéma type Quick.

Nous développerons dans cette partie les schémas utilisés lors de notre étude.

1. Pour le calcul de la vitesse sur les faces:

Le schéma utilisé est le schéma « upwind », ce schéma prend en considération la direction de l'écoulement pour déterminer les grandeurs convective sur les faces des volumes

de contrôles. Le schéma amont d'ordre un permet une certaine stabilité mais il est responsable de diffusion numérique, donc on a choisi le schéma du 2nd ordre (schéma décentré amont), ce dernier minimise la diffusion numérique.

2. Pour le calcul de la pression sur les faces:

L'équation exige que la valeur de la pression soit à la face entre les cellules donc on doit faire une interpolation en utilisant le schéma "PRESTO" (Pressure Staggering Option). Ce type de schéma est approprié pour les écoulements hautement tourbillonnaires à grande vitesse de rotation, ou les écoulements dans des domaines fortement courbés.

3. Couplage pression-vitesse:

Afin de résoudre l'équation de Navier-Stokes, il est nécessaire de connaître le terme de pression. Malheureusement, on ne dispose d'aucune équation de transport pour cette variable qu'est la pression. Un champ de vitesse donné peut satisfaire l'équation de continuité sans pour autant vérifier les équations de transport de quantité de mouvement. Cette particularité des équations rend nécessaire l'utilisation d'un algorithme de couplage pression-vitesse. L'algorithme le plus universel et le plus utilisé est sans doute l'algorithme SIMPLE de Patankar et Spalding [91] et il est utilisée dans notre étude.

4. Critère de convergence

La Convergence est quantifiée par l'intermédiaire de résidus normalisés (définis pour chaque grandeur ϕ comme la somme, sur tous les volumes de contrôles, des erreurs sur le bilan de ϕ rapportée à la somme des termes de l'équation discrétisée qui concernent le centre des volumes. Il permet de suivre la convergence des calculs au fur et à mesure des itérations.

Ce résidu est défini par:

$$R_{\phi} = \frac{\sum |\sum nb a_{nb} + S_c - a_p \phi_p|}{F_{in,\phi}} \quad (\text{III.28})$$

Où:

R_{ϕ} : est la somme absolue des résidus correspondant à la variable ϕ ;

$F_{in,\phi}$: est le flux total à l'entrée de la variable ϕ .

Le procédé itératif est lancé par la solution de l'équation d'énergie, suivi par les équations de quantité de mouvement et continue jusqu'à ce que la convergence soit réalisée.

Les résidus normalisés doivent être inférieurs à 10^{-4} et des itérations supplémentaires ne doivent pas modifier les résultats une fois la convergence atteinte.

5. Méthode de sous relaxation:

Pour des équations non linéaires, il est nécessaire de contrôler le changement d'un scalaire ϕ lors de la résolution. La sous relaxation réduit ce changement durant chaque itération. Pour améliorer la stabilité de calcul pendant le processus itératif, nous utilisons la sous relaxation suivante:

$$P^{nouv} = P^* + a_p P' \quad (\text{III.29})$$

Où : $0 < a_p < 1$ est le facteur de sous relaxation.

Les composantes de la vitesse (u, v et w) seront relaxées comme suit:

$$\begin{cases} u^{nouv} = a_u u + (1 - a_u)u^{(n-1)} \\ v^{nouv} = a_v v + (1 - a_v)v^{(n-1)} \\ w^{nouv} = a_w w + (1 - a_w)w^{(n-1)} \end{cases} \quad \text{III.30}$$

Où: a_u, a_v et a_w sont les facteurs de sous relaxation pour les composantes de la vitesse.

u, v et w sont les composantes corrigées sans relaxation, tandis que $u^{(n-1)}, v^{(n-1)}$ et $w^{(n-1)}$ représentent leurs valeurs à l'itération précédente.

Pour les différents cas simulés, les critères de résolution (préconisés par FLUENT dans le cas de la convection) et les coefficients de sous-relaxation utilisés sont présentés dans le tableau III.2.

Tableau III.2: Critères de résolution et coefficients de sous-relaxation utilisés

	Facteur de relaxation	Type de discrétisation
Pression	0.3	PRESTO
Masse volumique	1	x
Force de gravité	1	x
Quantité de mouvement	0.7	2 nd ordre upwind
Energie	0.9	2 nd ordre upwind
Couplage pression-vitesse	x	simple

III.5 Conclusion:

A travers ce chapitre, nous avons présenté brièvement la méthode des volumes finis, les étapes de discrétisation du modèle mathématique, ainsi que la résolution des équations algébriques.

Une résolution numérique tridimensionnelle des équations de conservation de la masse, de quantité de mouvement et de l'énergie a été mise en œuvre pour simuler l'écoulement et le transfert de chaleur dans le procédé de Czochralski. La résolution est effectuée par le code CFD « FLUENT », basé sur la méthode des volumes finis. Les résultats obtenus par ce code sont présentés dans les chapitres suivants.

Chapitre IV

Résultats et discussions cas: Huile silicone

Chapitre IV

Résultats et discussions cas: Huile silicone

IV.1 Introduction

Dans cette partie on va considéré les phénomènes thermiques dans une enceinte cylindrique simulant le procédé de Czochralski. Les équations qui régissent ce phénomène ont été résolues par une approche numérique, basée sur la méthode des volumes finis en utilisant le code Fluent et le mailleur Gambit. Pour pouvoir exploiter les résultats, nous avons tout d'abord chercher à mettre en évidence leurs validité. Pour ce faire, nous nous sommes appuyer sur les résultats expérimentaux de **Rahal. S et al. [8]** et nous nous sommes mis dans les mêmes conditions pour pouvoir comparer les résultats.

Par la suite, on a fait varier les conditions de travail, tel que le gradient de température appliqué, la vitesse de rotation du cristal, les conditions thermiques à la surface libre, le facteur de forme et le nombre de Prandtl. L'influence de ces paramètres sur les champs de température et de vitesse a été ainsi considérée afin d'obtenir les conditions optimales de croissance et minimiser les fluctuations de températures. On fait varier le paramètre de stabilisation représenté par le nombre de Reynolds (équivalent à la vitesse de rotation du cristal) pour une différence de température fixe (qui représente la partie perturbatrice).

La transition des écoulements est obtenu en variant le nombre de Rayleigh ($\Delta T = 5 \text{ K}$ et 10 K) et le nombre de Reynolds de rotation (0 - 2900).

Partie 1: Cas d'un Fluide à grand nombre de Prandtl (huile silicone)

Le nombre de Prandtl compare la rapidité des phénomènes thermiques et des phénomènes hydrodynamiques dans un fluide. Un nombre de Prandtl élevé indique que le profil de température dans le fluide sera fortement influencé par le profil de vitesse. Un nombre de Prandtl faible (exemple: métaux liquides) indique que la conduction thermique est tellement rapide que le profil de vitesse a peu d'effet sur le profil de température. On note ainsi que pour les fluides de grand nombre de Prandtl (huiles silicones très visqueuses par exemple), le temps thermique est plus grand que le temps visqueux et que les processus de diffusion de la chaleur pilotent le mouvement du fluide. Pour les faibles valeurs du nombre de Prandtl (métaux liquides par exemple), les effets thermiques s'amenuisent et le comportement du fluide est essentiellement hydrodynamique.

Dans cette étude envisagée on va considéré deux fluides différents, le premier à grand nombre de Prandtl (l'huile silicone 2 cSt), utilisée dans l'expérience de **Rahal.S et al.[8]** et un deuxième fluide à faible nombre de Pr (Gallium) qui représente la catégorie des semi-conducteurs.

IV.2 Etude de l'effet du maillage

Pour analyser l'effet du raffinement du maillage sur les résultats de la simulation numérique, nous avons défini 6 maillages, le premier étant le plus grossier et le dernier le plus fin. Ces maillages ont été testés dans le cas du régime stationnaire. Les détails des maillages testés sont donnés dans le tableau IV.1

Tableau IV.1 : Taille des maillages testés

Maillages	M1	M2	M3	M4	M5	M6
Nombres de Nœuds	32104	95904	149040	322142	695183	1058832

Les figures (IV.1) et (IV.2) montrent les courbes de variation de la température, la vitesse tangentielle, la vitesse axiale et la vitesse radiale le long de l'axe horizontal $z = 0.098 \text{ mm}$ (2 mm

au dessous de l'interface, partie critique concernée par les fluctuations) et le long de l'axe vertical (axe de symétrie), pour les différents maillages.

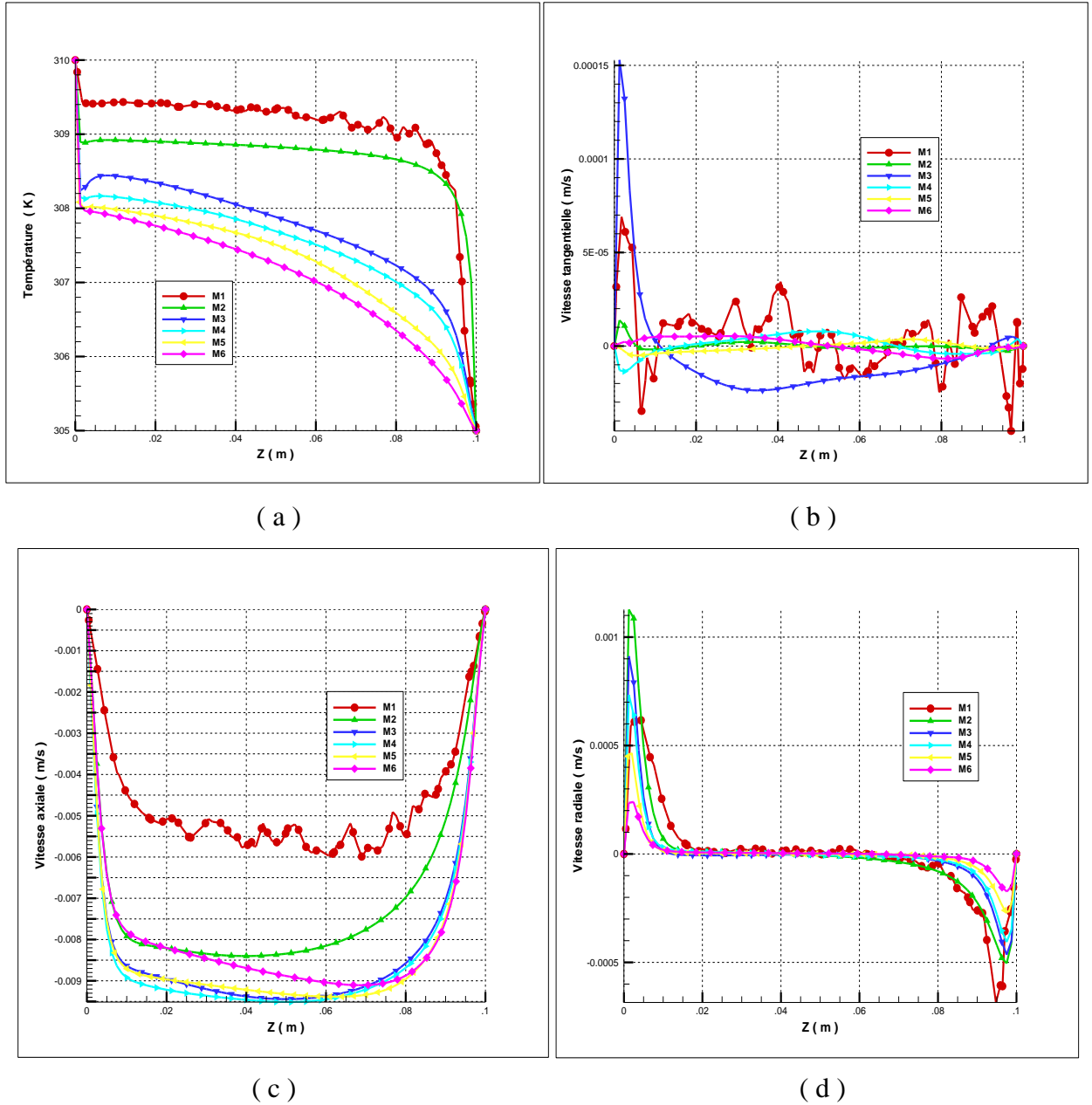
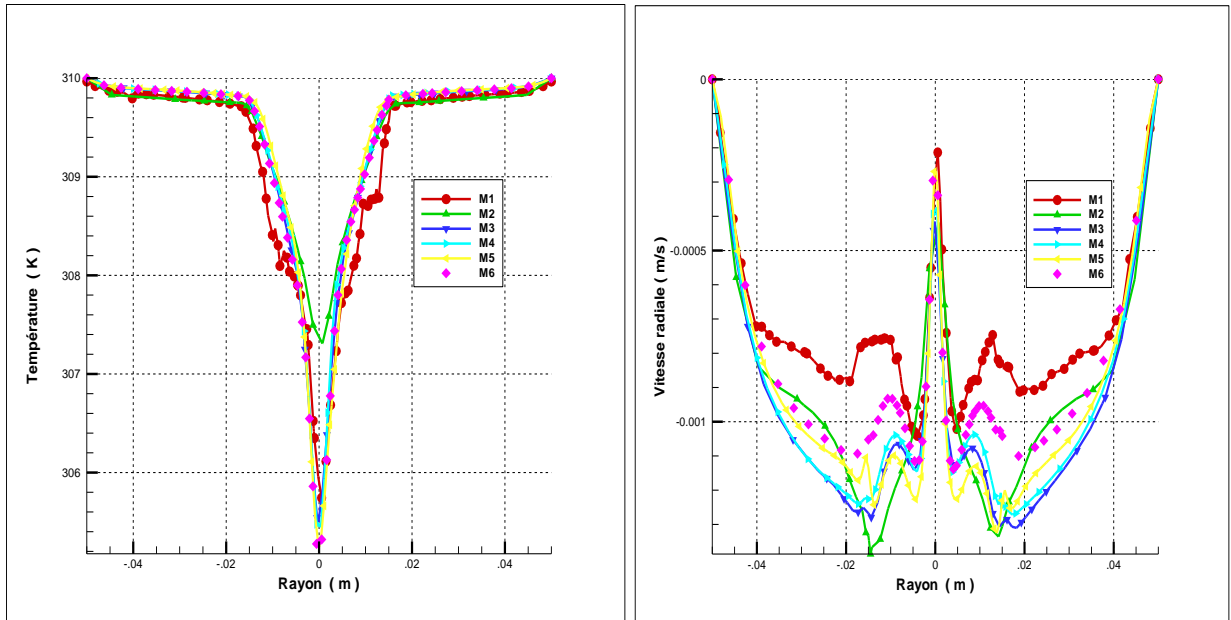


Figure IV.1 :Effet du maillage sur la variation axiale de (a) la température, (b) la vitesse tangentielle,(c) la vitesse axiale, (d) la vitesse radiale.



(a)

(b)

Figure IV.2: Effet du maillage sur la variation radiale de (a) la température,(b) la vitesse radiale

A partir de M3 la différence entre les courbes est faible et la solution devient indépendante du maillage. Nous pouvons retenir le maillage M3 (Figure IV.3) défini comme un bon compromis entre le temps de calcul et la précision des résultats.

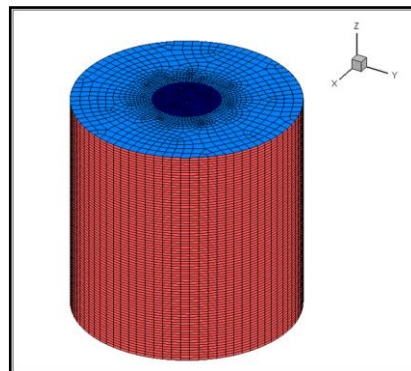


Figure IV.3 Schéma de Maillage utilisé

IV.2.1 Effet du maillage sur les contours de vitesse Axiale

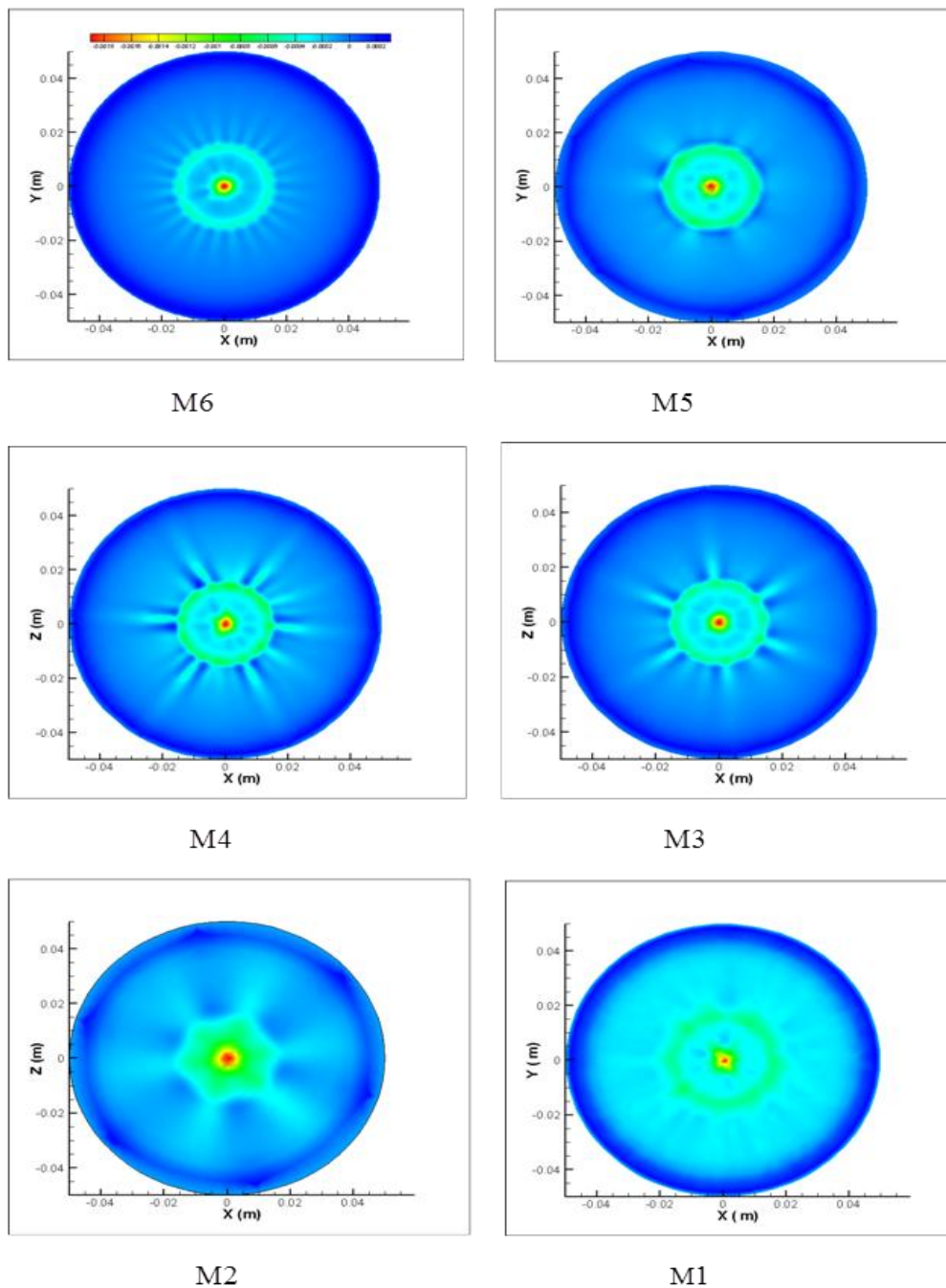


Figure IV.4: Effet du maillage sur les contours de vitesse axiale.

IV.2.2 Effet du maillage sur les contours de Température

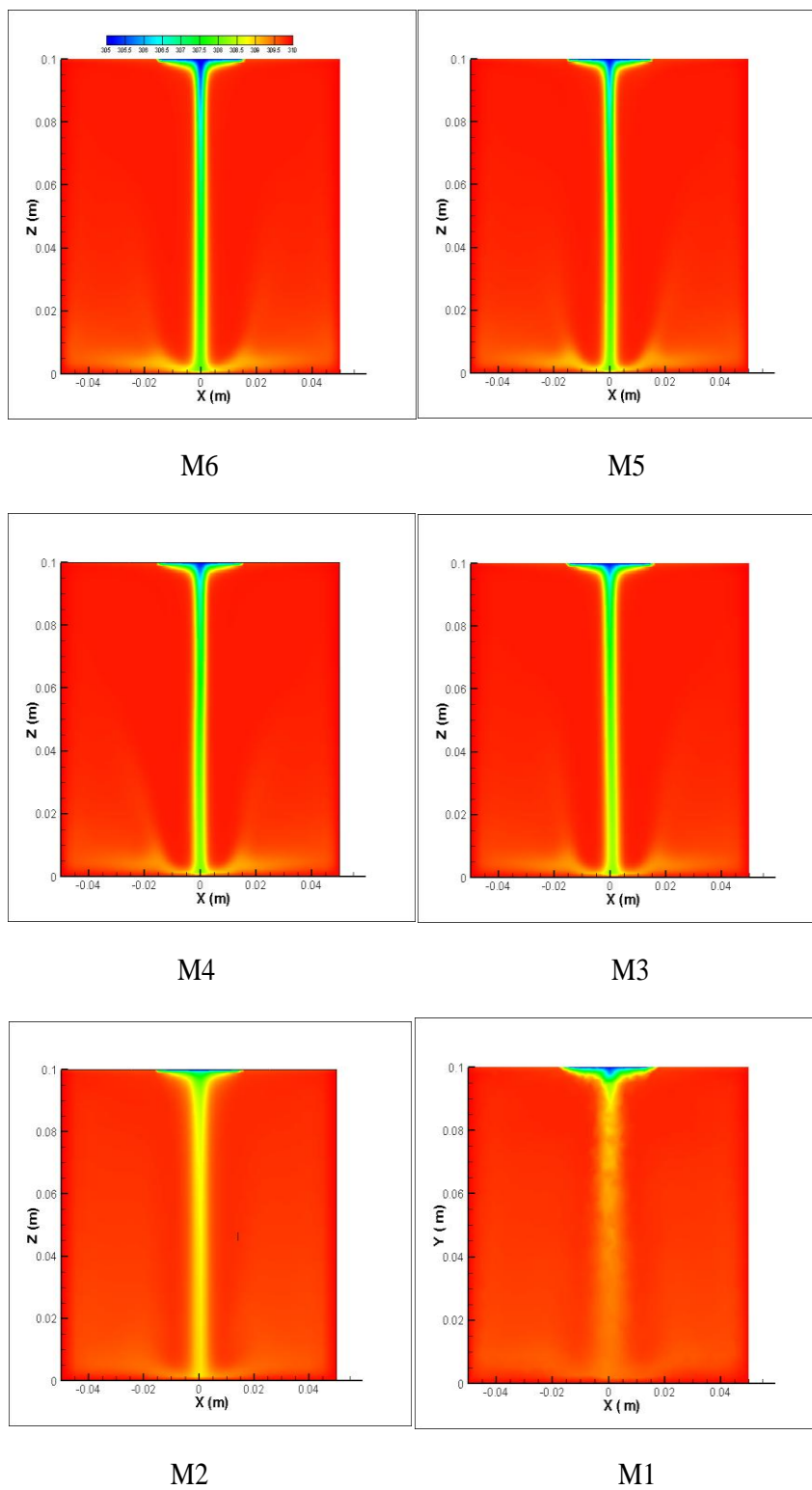


Figure IV.5: Effet du maillage sur les contours de température.

La figure IV.6 montre l'effet du maillage sur le nombre de Nusselt.

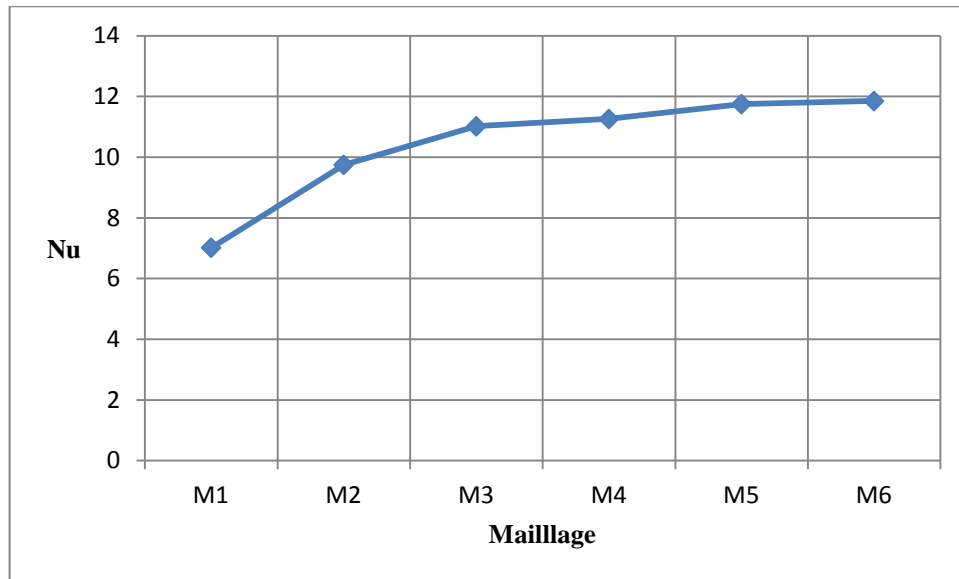


Figure IV.6: Effet du maillage sur le nombre de Nusselt

IV.2.3 Conclusion

En prenant un maillage fin au niveau de l'interface, nous n'avons pas amélioré de façon très sensible les résultats.

Les courbes montrent que la vitesse est largement surestimée dans le cas du maillage grossier. Cela est dû probablement à la présence d'une couche limite, qui n'est pas résolue par une loi de paroi spécifique. Dans ce cas, l'intégralité de la couche limite se situe dans la première maille, le calcul du champ de vitesse ne détecte pas les effets de viscosité au voisinage de la paroi.

Dans le cas d'un maillage fin, les premières mailles sont dans la couche limite. Dans cette zone, les termes visqueux sont prépondérants et freinent l'écoulement. Le calcul du champ de vitesse est donc plus précis, avec des vitesses plus faibles et plus en accord avec le phénomène physique que l'on cherche à modéliser.

On voit très nettement que le maillage grossier surestime la température.

Les structures convectives près de l'interface ne sont pas détectées par les maillages grossiers.

IV.3 Les nombres adimensionnels

Pour les simulations faites dans cette partie les valeurs des nombres adimensionnels utilisés sont:

$$Pr = 28$$

$$Ma = 88.65 \times 10^3 (\Delta T = 5 K) ; 177.3 \times 10^3 (\Delta T = 10 K)$$

$$Ra = 10^7 (\Delta T = 5 K) \text{ et } 2.1 \times 10^7 (\Delta T = 10 K)$$

$$Re_s = 0 \text{ à } 2900 (\Omega_s \text{ entre } 0 \text{ et } 246 \text{ tr/min})$$

IV.4 Résultats et analyse

IV.4.1 Validation qualitative de la procédure numérique

Afin de valider notre procédure de simulation numérique, les lignes de courant, à différentes valeurs des nombres de Rayleigh et de Reynolds du cristal, obtenues à partir de nos simulations numériques, sont comparées à celles obtenue par Rahal.S et al. [8]. On peut noter un bon accord qualitatif (voir Figure IV.7 et Figure IV.8). L'écoulement est visualisé dans le plan vertical médian du creuset.

Dans la configuration de Cz les plus importantes forces sont la force centrifuge due à la rotation du cristal; la force de flottabilité (poussée d'Archimède), due au gradient de température et la force thermocapillaire due au gradient de tension superficielle (convection de Marangoni). Les écoulements correspondants sont montrés sur les Figure IV.7. (a)(b) et (c)(d), respectivement. Le premier écoulement prend la forme de deux rouleaux tournants autour de leurs propres axes, le second est un écoulement axial axisymétrique. Dans le cas de la combinaison des différents écoulements induits par les différentes forces, le comportement de l'écoulement devient très complexe dans le creuset. (voir Figure. IV.8)

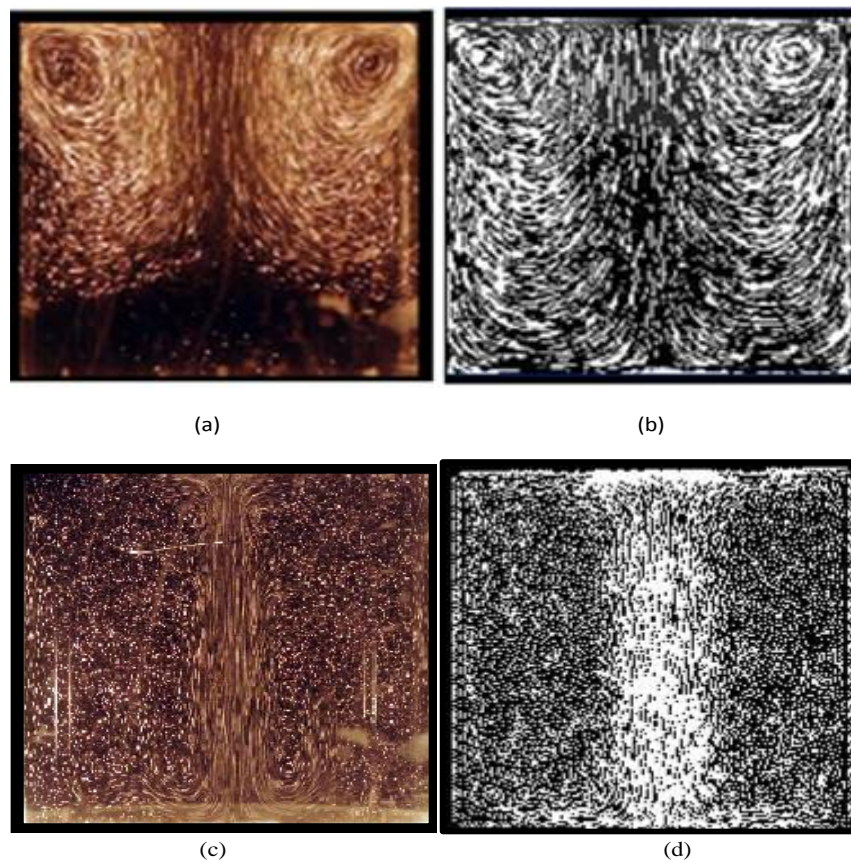


Figure IV.7: Lignes de courant observées dans le plan vertical médian du creuset, huile silicone 2 cSt . (a),(c): $Ra = 0$, $Re_s = 5.9 \times 10^2$. (b),(d): $Ra = 10^7$, $Re_s = 0$. (a),(c): Visualisations Expérimentales (Rahal.S et al.[8]). (b),(d): nos résultats numériques.

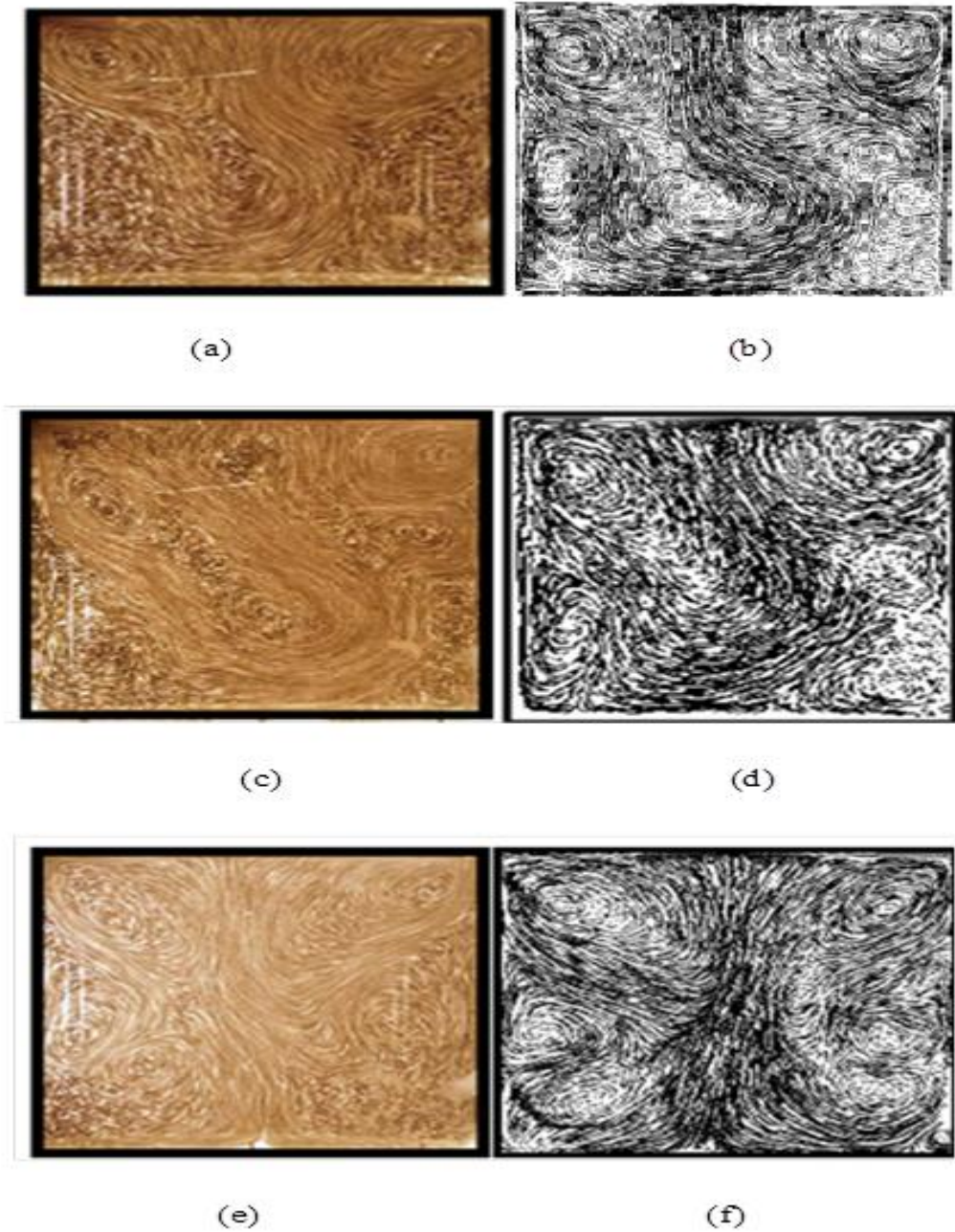


Figure IV.8: Lignes de courant, observées dans le plan vertical médian du creuset, huile silicone 2 cSt. (a), (b): $Ra = 10^7$, $Re_s = 1800$. (c),(d): $Ra = 10^7$, $Re_s = 2900$, (e),(f): $Ra = 2.1 \cdot 10^7$, $Re_s = 1800$. (a),(c),(e) : Visualisations Expérimentales (Rahal.S et al. [2008]). (b),(d),(f): nos résultats numériques.

Une deuxième validation des nos résultats avec les visualisations faites par **Teitel et al. [44]** (Figure IV.9.(a)) pour un nombre de Prandtl $Pr = 23.9$, a révélé la présence d'une instabilité dite «plume froide», où le fluide froid s'accumule près de la paroi froide supérieure (le cristal) et

descend ensuite vers le fond du creuset. Une instabilité similaire a été détectée par nos simulations numériques (Figure IV.9.(b)).

Le même type d'instabilité a été observé par **Munakata et al. [45]**, pour un grand nombre de Prandtl, $Pr = 1000$. Un calcul dépendant du temps de **Gelfgat et al. [63]** pour un modèle caractéristique révèle également un panache froid descendant de la partie supérieure vers la limite inférieure.

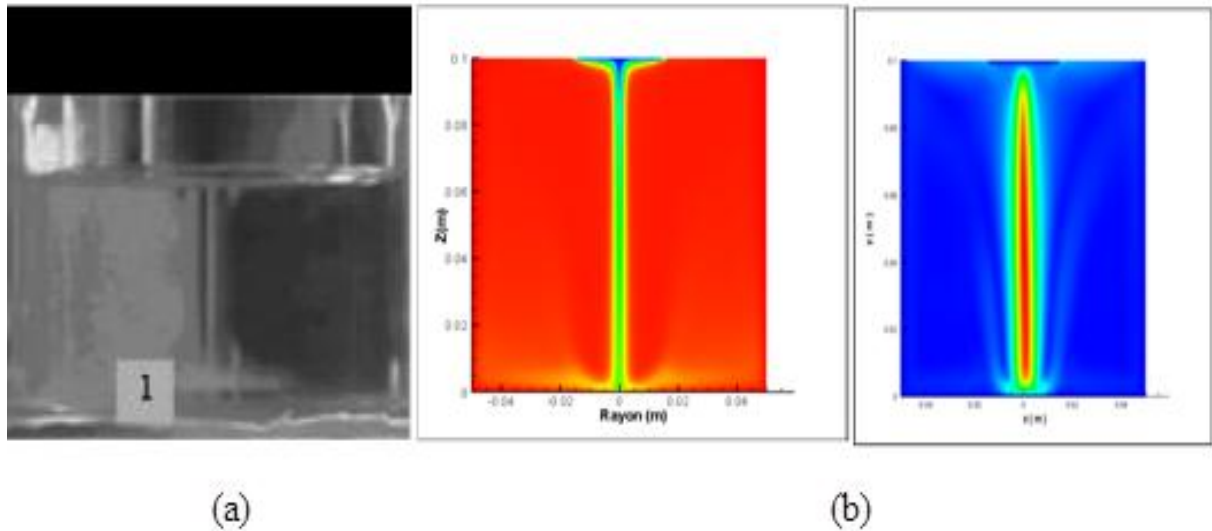


Figure IV.9 Visualisation de l'instabilité plume froide.

IV.4.2 Analyse des instabilités convectives

La figure IV.10 montre les profils des vitesses radiale et tangentielle le long de la ligne horizontale ($z = 0,09$ m (1 cm au dessous de l'interface solide-liquide) à l'instant $t = 300$ s pour une série de vitesses de rotation du cristal (allant de 0 à 246 tr/min). Pour les faibles vitesses de rotation < 10 tr/min, la vitesse radiale est négative et la vitesse tangentielle est très faible, ce qui signifie que l'écoulement est radial des parois latérales vers l'axe de symétrie du creuset. Ce résultat nous a permis de conclure que la convection libre soutenue par la convection de Marangoni domine la convection forcée. Pour une telle situation, les champs thermique et dynamique sont axisymétriques.

Pour des valeurs élevées de la vitesse de rotation du cristal (≥ 60 tr / min), il ya un changement dans la direction de l'écoulement et une augmentation significative de l'amplitude

des vitesses radiales et tangentielles. L'écoulement devient tridimensionnel, ce qui reflète l'importance de la convection forcée. Zhang et al. [92] ont constaté que l'écoulement asymétrique dans le système industriel CZ commence à des vitesses de rotation d'environ 20 à 30 tr / min.

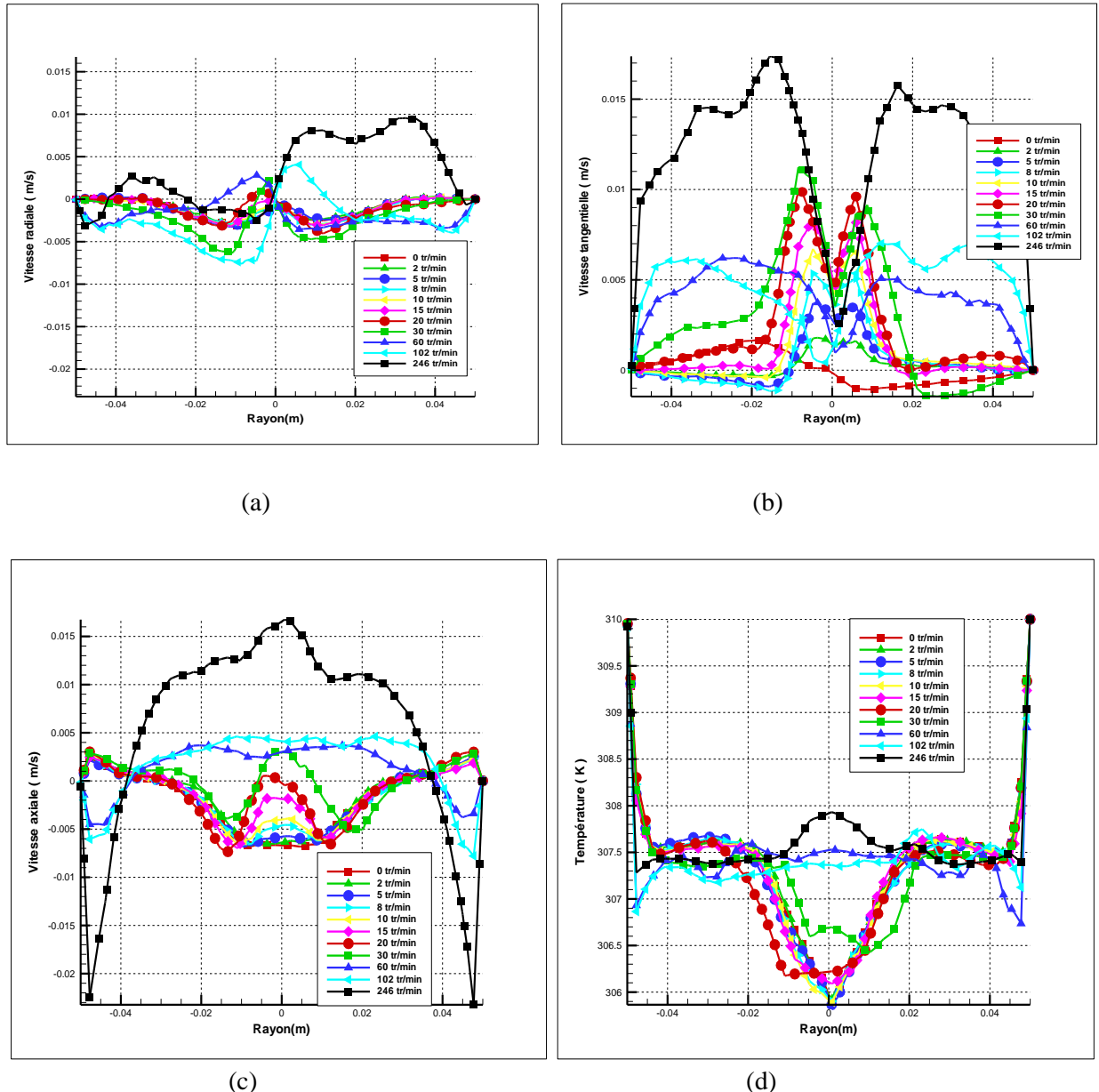


Figure IV.10: Vitesses radiales (a), Vitesses tangentielles (b), Vitesses axiales (c), températures; (d) le long du rayon à $z = 0,09$ m pour différentes vitesses de rotation de cristal. $Ra=10^7$ ($\Delta T = 5$ K).

IV.5 Observations qualitatives de l'écoulement

Afin de comprendre les caractéristiques de l'écoulement complexe entraîné par l'effet combiné de la flottabilité, la thermo capillarité et la rotation du cristal, une série de simulations numériques tridimensionnelles instationnaires ont été effectuées. Les résultats indiquent que l'écoulement est axisymétrique et stable pour les faibles différences de température et à de faibles vitesses de rotation du cristal. La structure de l'écoulement de base est composé d'un jet axiale. Avec l'augmentation de la vitesse de rotation et / ou de la différence de température, l'écoulement de base passe à un écoulement oscillatoire tridimensionnel.

IV.5.1 L'écoulement de base $Ra = 10^7$ et $Re = 0$ (Ecoulement stationnaire et bidimensionnel)

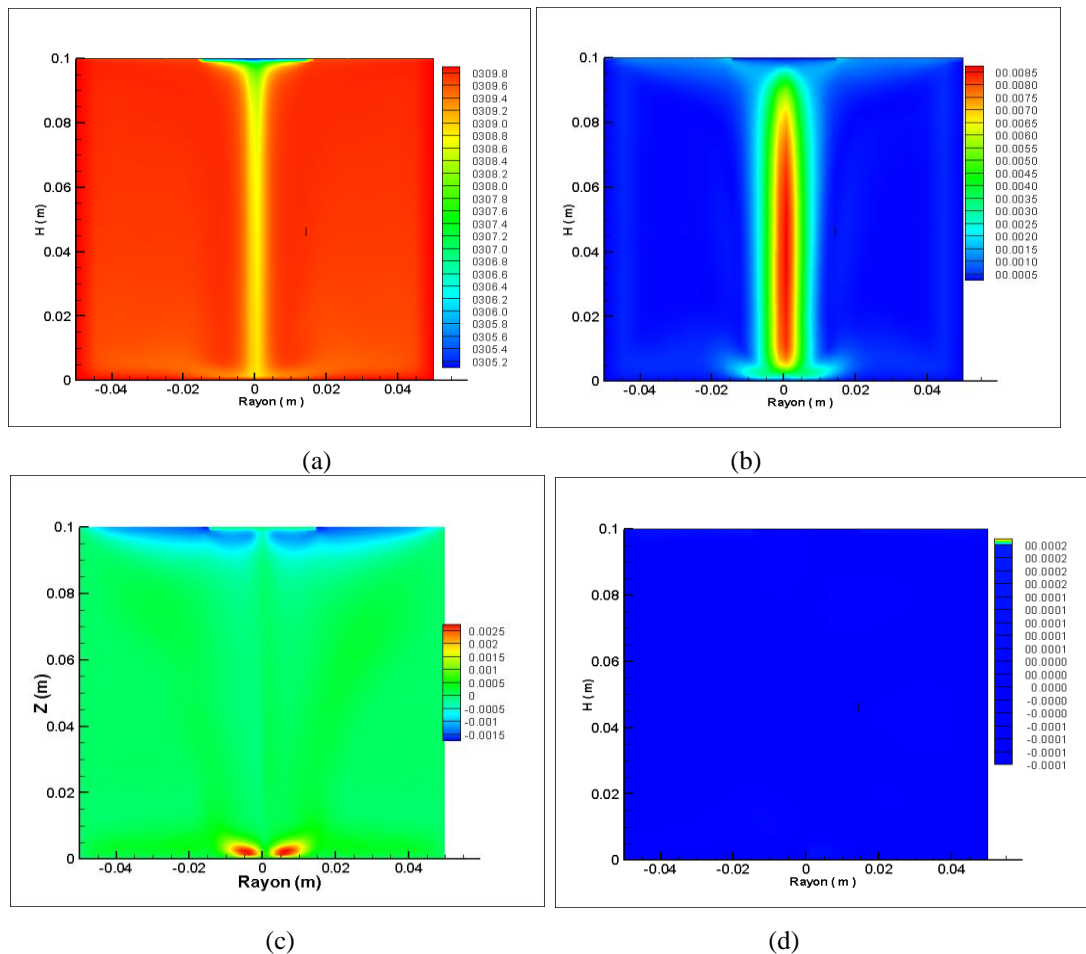


Figure IV.11 : Contours dans le plan vertical médian
 (a) température (b) magnitude de vitesse (c) vitesse radiale (d) vitesse tangentielle.

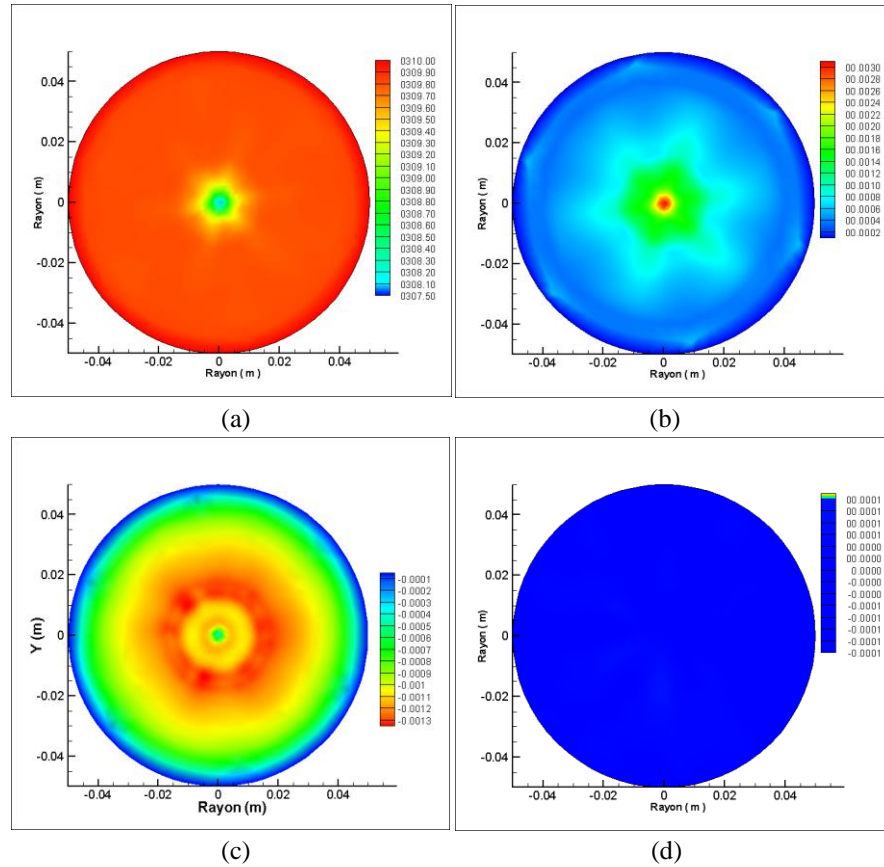


Figure IV.12 : Contours dans le plan horizontal $z=0.098\text{m}$.
 (a) température (b) magnitude de vitesse (c) vitesse radiale (d) vitesse tangentielle.

IV.6 Analyse spectrale

Pour localiser la position qui a de grandes fluctuations, trois positions ont été considérées dans le plan $z = 0,098\text{ m}$ (2 mm en dessous de l'interface solide-liquide) et une position dans le plan $z = 0,09\text{ m}$ (1 cm au-dessous de l'interface). La figure IV.13 présente les points correspondants P1, P2, P3 et P4 de coordonnées respectives (0 mm; 0 mm; 0,098 mm), (0 mm; 0 mm; 0,09 mm), (-0,015 mm; 0 mm; 0,098 mm), (-0,015 mm; 0 mm; 0,098 mm).

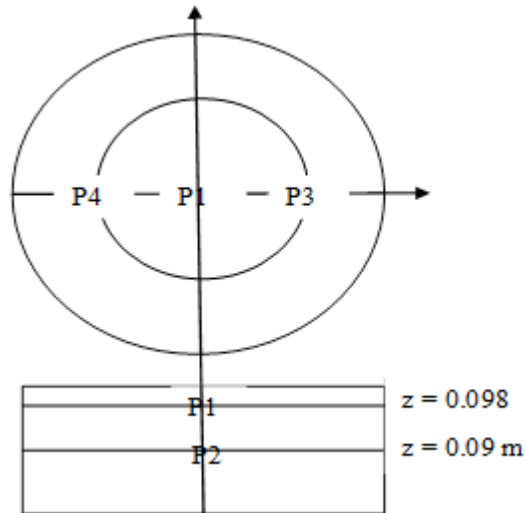


Figure IV.13 Positions azimuthales des points considérés .

Ces points, situés au-dessous de l'interface solide-liquide (Plan horizontal $z = 0.098$ m), ont été choisis, comme étant représentatifs des fluctuations ayant une influence sur la forme de l'interface et par conséquent sur les défauts qui apparaissent dans le futur cristal, puisqu'en ces points, les effets des trois écoulements coexistent (convection libre, convection forcée et convection de Marangoni). De plus, ils appartiennent à une zone de fortes variations de la vitesse comme en témoigne la Figure IV.11 et sont donc caractéristiques du phénomène.

Pour P1 et P2, les amplitudes des fluctuations sont égales ou supérieures à celles trouvées pour P3 et P4 qui sont également du même ordre. (Voir Figure IV.14). P1 est alors adopté pour notre analyse.

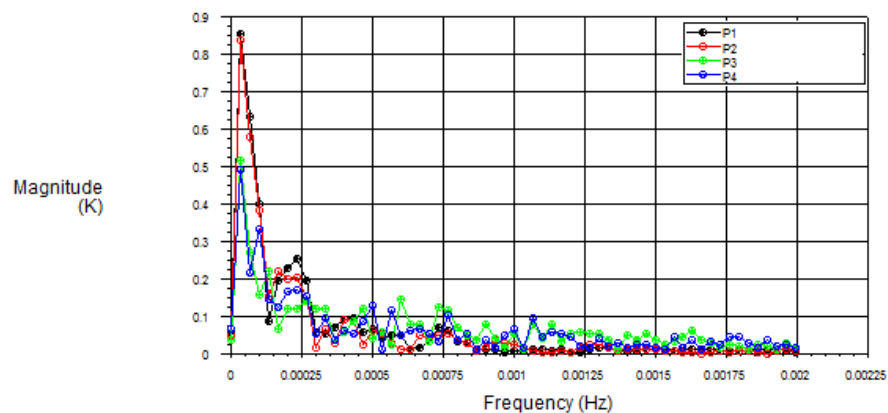


Figure IV.14 Spectres de magnitude des fluctuations de température à diverses positions sous l'interface cristal-liquide.

La figure IV.15 montre la variation temporelle de la température pour la position P1, pour une série de vitesses de rotation du cristal (allant de 0 à 246 tr/min).

On remarque que pour des vitesses de rotation faibles (inferieur à 10 tr/min), la valeur asymptotique de la température atteinte est la même pour toutes les vitesses. Pour des valeurs de $10 < \Omega_s < 30$ tr / min, une augmentation progressive de la valeur asymptotique est observée jusqu'à une valeur qui reste constante pour des vitesses ≥ 60 tr / min.

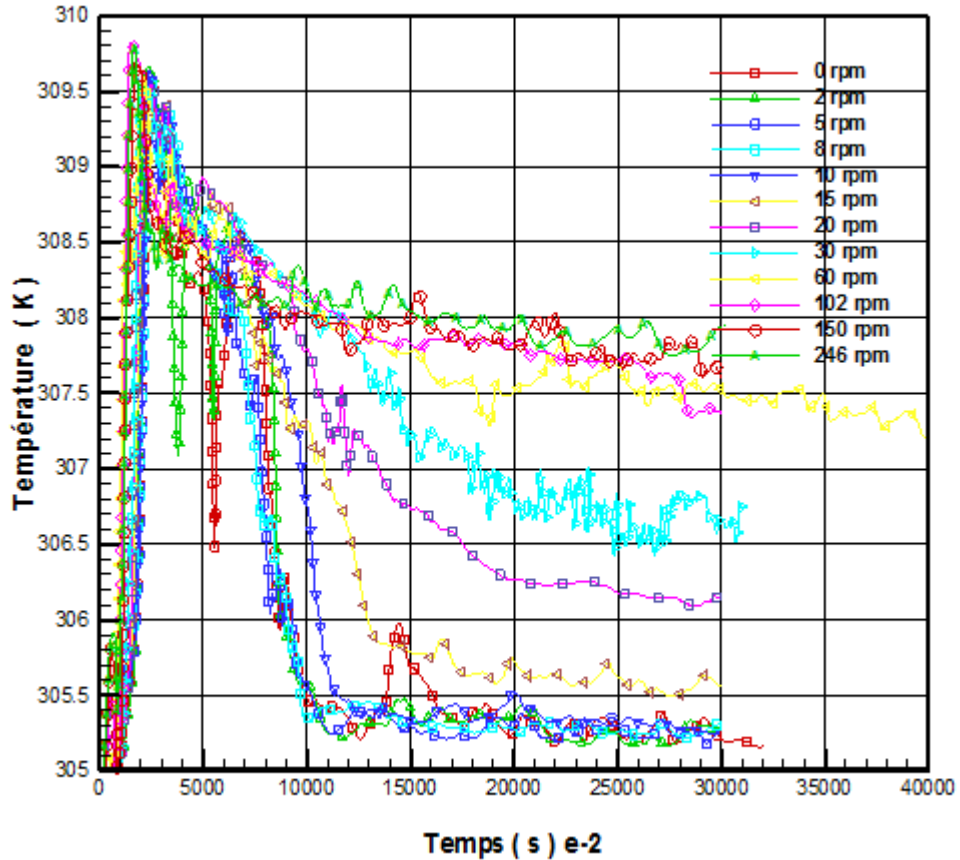


Figure IV.15: Variation de la température du point P1 en fonction du temps

Les transformées de Fourier rapides (FFT) correspondants aux courbes de la Figure IV.15, sont donnés sur la Figure IV.16. On peut remarquer que pour toutes les vitesses de rotation, les spectres sont continus et les grandeurs les plus élevées sont observées pour les faibles fréquences.

La figure IV.16, montre les spectres des fluctuations de températures du point P1 pour différentes vitesses de rotation du cristal. Les oscillations dépendent de la vitesse de cristal considérée et elles sont plus importantes pour les faibles vitesses.

Comme mentionné ci-dessus, les fluctuations thermiques sont préjudiciables à la qualité du cristal dans le système de Czochralski. Le but de ce travail est de comprendre leur comportement afin de trouver les meilleurs moyens de les contrôler. Nous avons trouvé que l'utilisation d'une vitesse de rotation du cristal supérieure à 10 tr/min permet de réduire considérablement l'amplitude des fluctuations de température. Le même résultat a été trouvé par **Hintz et al.[41]** et **Shuxian et al .[64]**.

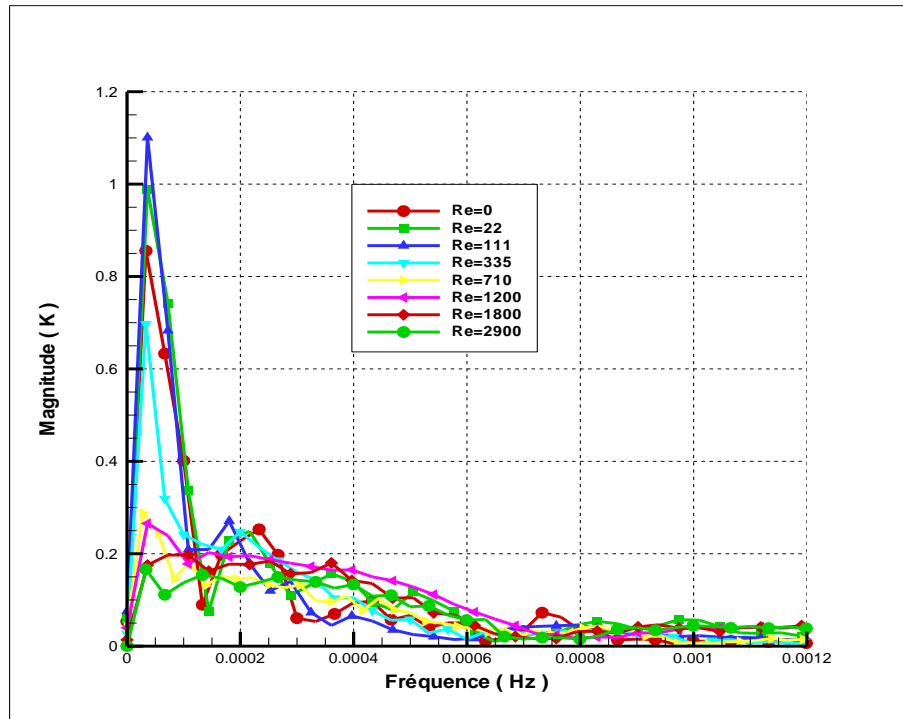


Figure IV.16: Transformée de Fourier des fluctuations de température pour le point P1 (2 mm au dessous de l'interface), pour différentes vitesses de rotation du cristal.

La figure IV.17 représente la variation de la magnitude des fluctuations de température en fonction de la vitesse de rotation du cristal. Une augmentation de l'amplitude des fluctuations est observée pour des vitesses de rotations entre 0 et 2 tr/min et entre 8 et 10 tr/min. La variation de

l'amplitude est très négligeable entre 2 et 8 tr/min. Au delà de 10 tr/min, une diminution remarquable des fluctuations est observée.

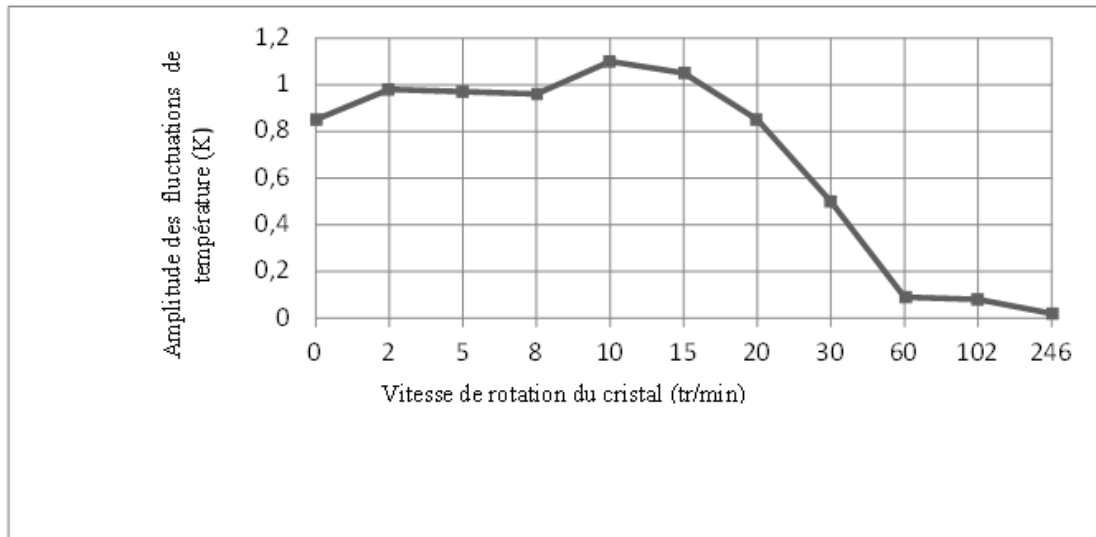


Figure IV.17 Magnitude des fluctuations de température en fonction de la vitesse de rotation du cristal.

La figure IV.18 représente la variation de la magnitude de vitesse en fonction de la vitesse de rotation du cristal. Pour des vitesses de rotations entre 0 et 10 tr/min, la magnitude de vitesse est très faible. Au delà de 10 tr/min une augmentation considérable est observée.

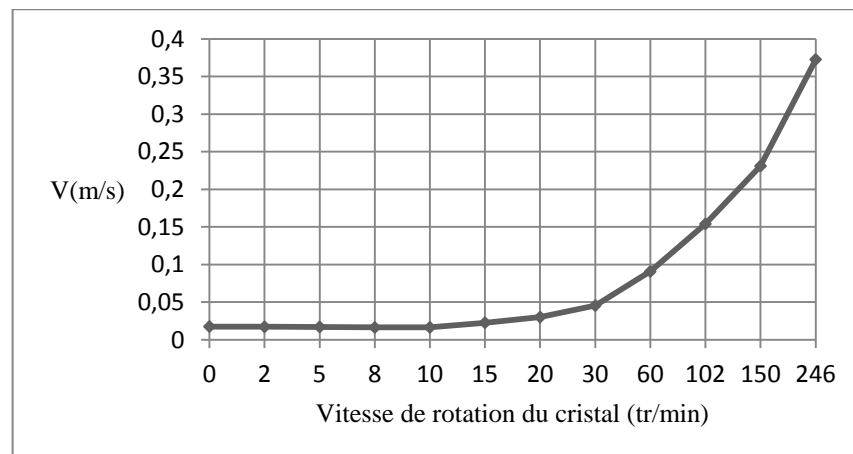


Figure IV.18 Magnitude de vitesse en fonction de la vitesse de rotation du cristal.

IV.7 Effet du nombre de Reynolds sur les champs thermique et dynamique

IV.7.1 Visualisation de l'écoulement.

L'objectif des visualisations décrites ci-dessous est de détecter les conditions critiques de la transition d'un écoulement stable et axisymétrique à un écoulement tridimensionnel (3D), pour

l'huile silicone (Cela nous permet de modéliser le comportement des oxydes qui se caractérisent par des nombres de Prandtl de même ordre $5 < Pr < 30$).

Les figures (IV.19), (IV.20), (IV.21), représentent les contours de vitesse radiale, les contours de la magnitude de vitesse et les contours de température respectivement pour $Ra=10^7$ ($\Delta T = 5$ K). On constate une symétrie par rapport à l'axe vertical pour $\Omega = 5$ tr/min et $\Omega = 10$ tr/min et une perte de symétrie pour $\Omega = 15$ tr/min et $\Omega = 60$ tr/min. On constate que l'écoulement dominant est le long de l'axe vertical.

La figure IV.20 montre les contours de la magnitude de vitesse pour une série de vitesses de rotation du cristal. Pour $\Omega_s = 5$ tr/min et $\Omega_s = 10$ tr/min, l'écoulement est axisymétrique. Pour $\Omega_s = 15$ tr/min, on remarque une perte de symétrie alors que pour $\Omega_s = 60$ tr/min une stabilité de l'écoulement où la vitesse est presque nulle dans la totalité de la cavité et un écoulement symétrique près de la surface libre.

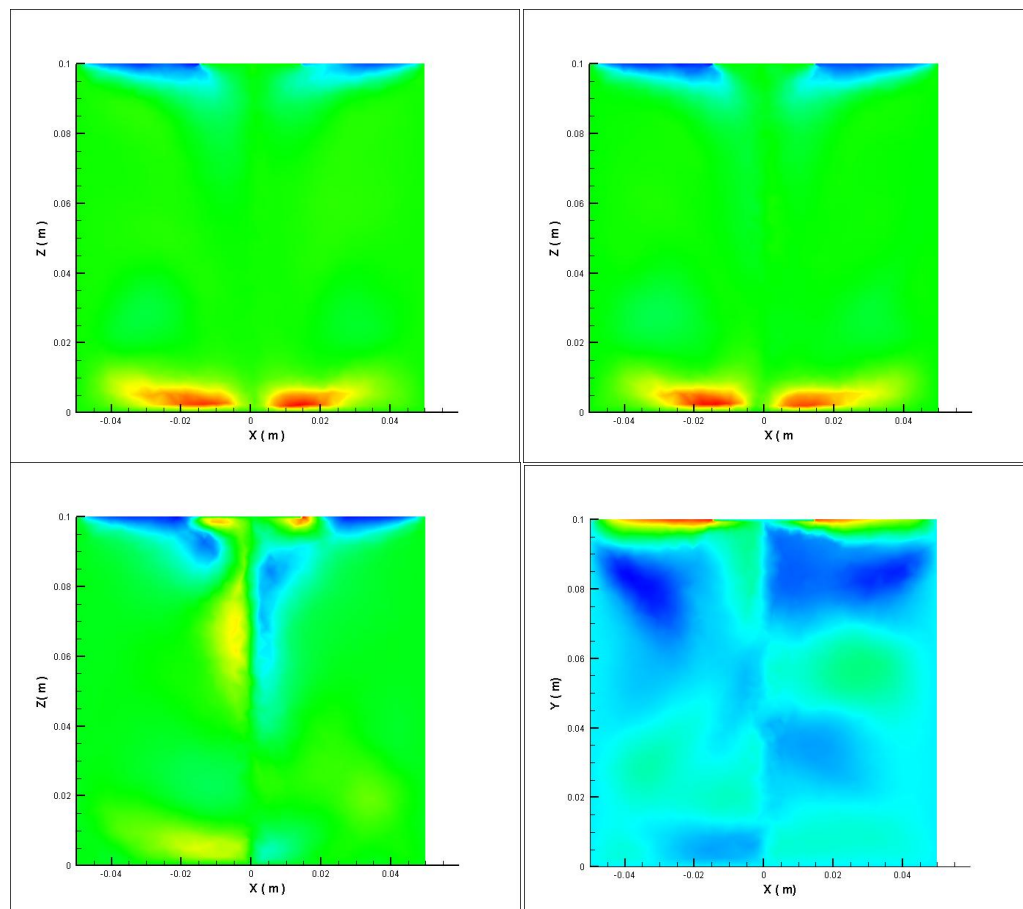


Figure IV.19: Contours de vitesse radiale $Ra=10^7$ ($\Delta T = 5$ K). (a) $\Omega_s = 5$ tr/min, (b) $\Omega_s = 10$ tr/min, (c) $\Omega_s = 15$ tr/min, (d) $\Omega_s = 60$ tr/min, à l'instant $t = 300$ s.

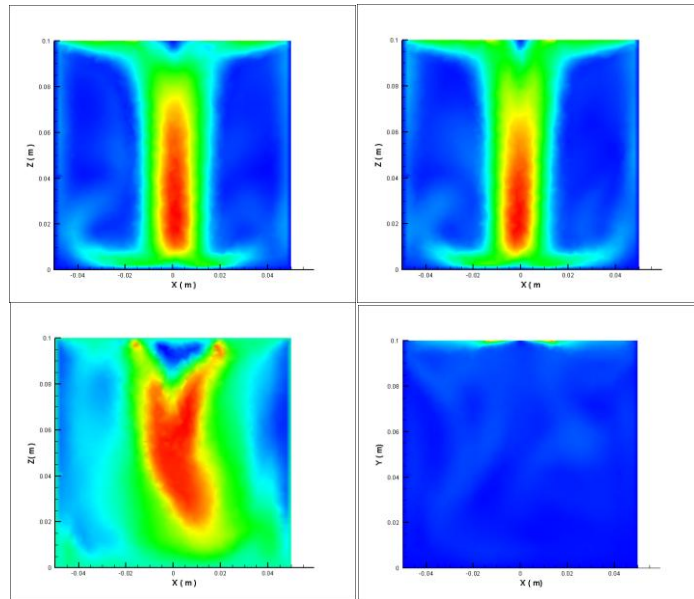


Figure IV.20: Contours de la magnitude de vitesse, $Ra=10^7$ ($\Delta T = 5$ K). (a) $\Omega_s = 5$ tr/min, (b) $\Omega_s = 10$ tr/min, (c) $\Omega_s = 15$ tr/min, (d) $\Omega_s = 60$ tr/min, à l'instant $t = 300s$

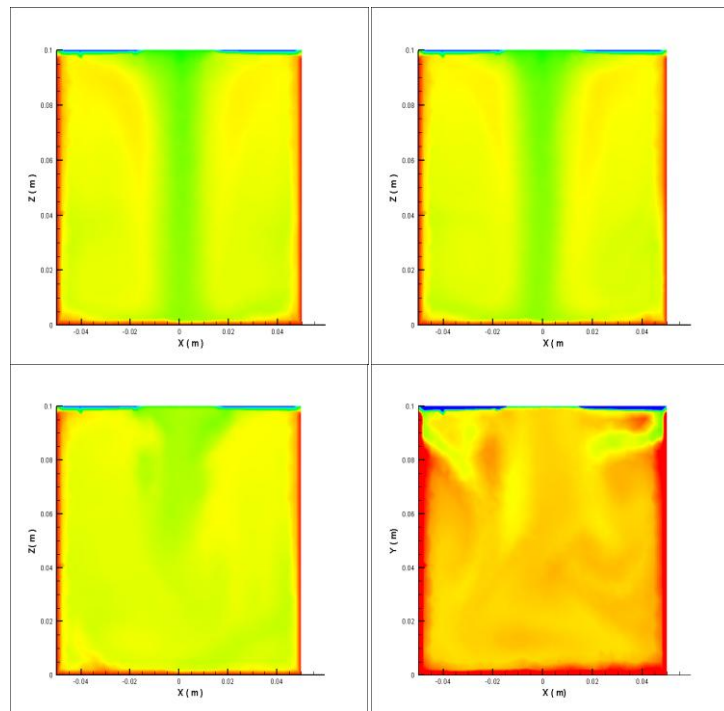


Figure IV.21: Contours de Température, $Ra=10^7$ ($\Delta T = 5$ K). (a) $\Omega_s = 5$ tr/min, (b) $\Omega_s = 10$ tr/min, (c) $\Omega_s = 15$ tr/min, (d) $\Omega_s = 60$ tr/min, à l'instant $t = 300s$

IV.8 Effet du nombre de Marangoni

L'analyse quantitative de l'effet du Marangoni sur la vitesse du fluide au niveau de la surface libre est illustrée sur la Figure IV.22, où la variation de la vitesse radiale est tracée suivant le rayon. On remarque une augmentation très significative de cette grandeur lorsque on s'approche de la surface libre ($Z = 0,098 \text{ m}$) et une diminution en s'éloignant. Elle s'annule au centre du creuset ($Z = 0,05 \text{ m}$).

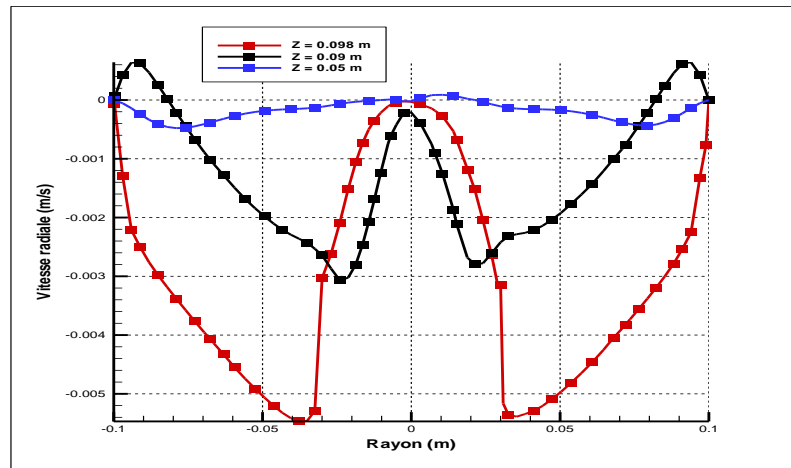


Figure IV.22 Variation radiale de la vitesses radiale, pour différentes valeurs de Z dans le cas $Ma = 88,65 \times 10^3$

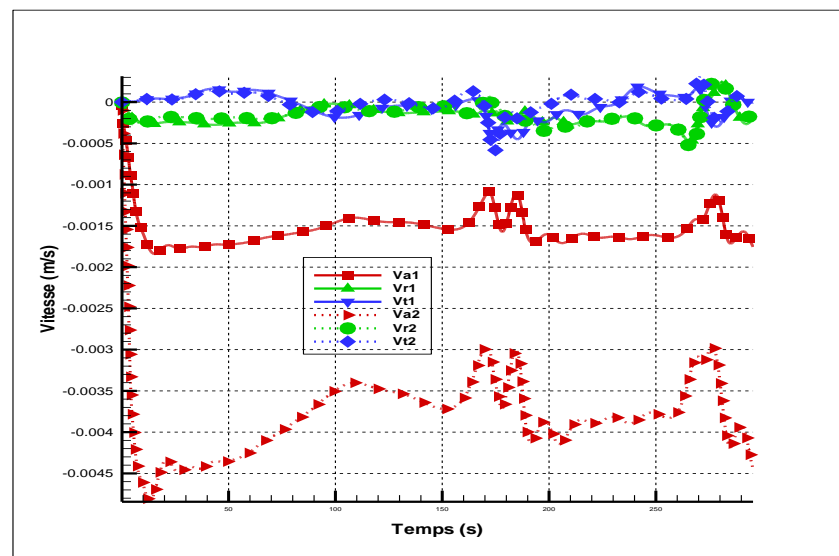


Figure IV.23 Variation temporelle des vitesses radiale, tangentielle et axiale dans le cas $Ma = 0$ pour les 2 positions P1 et P2

Sur la figure IV.23, on remarque que le mouvement axial domine les mouvements radial et azimutal où les valeurs des vitesses correspondantes sont négligeables en comparaison

avec la vitesse axiale. On note aussi une accélération du fluide vers le fond du creuset (vitesse au point P2 est supérieure à celle du point P1).

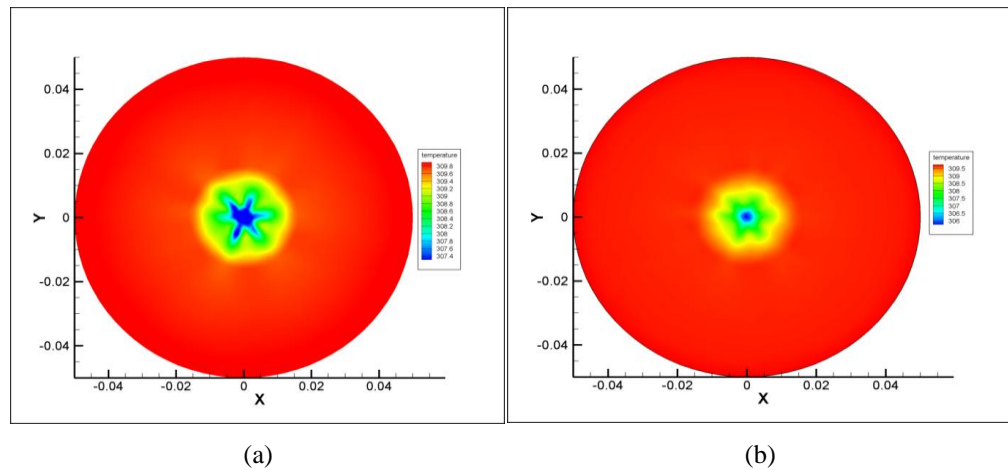


Figure IV.24 : Effet du nombre de Marangoni sur les contours de température au dessous de l'interface (a) $Ma = 0$, (b) $Ma = 88,65 \times 10^3$.

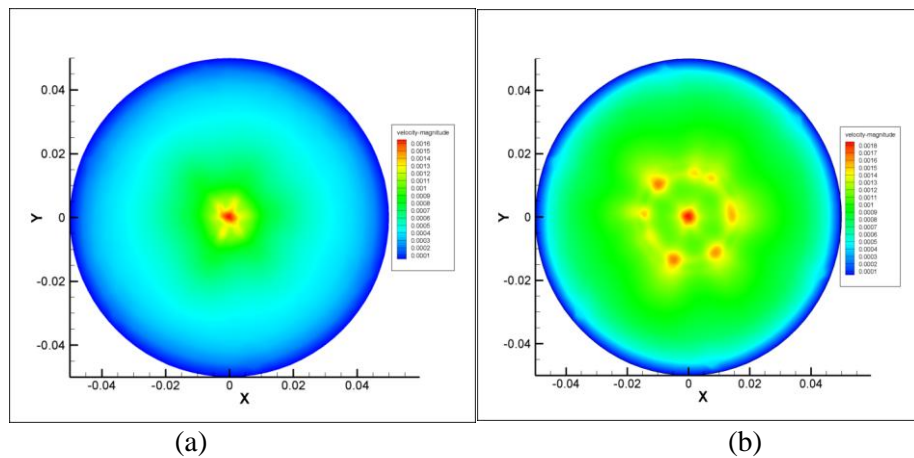


Figure IV.25: Effet du nombre de Marangoni sur les contours de la magnitude de vitesse au dessous de l'interface (a) $Ma = 0$, (b) $Ma = 88,65 \times 10^3$.

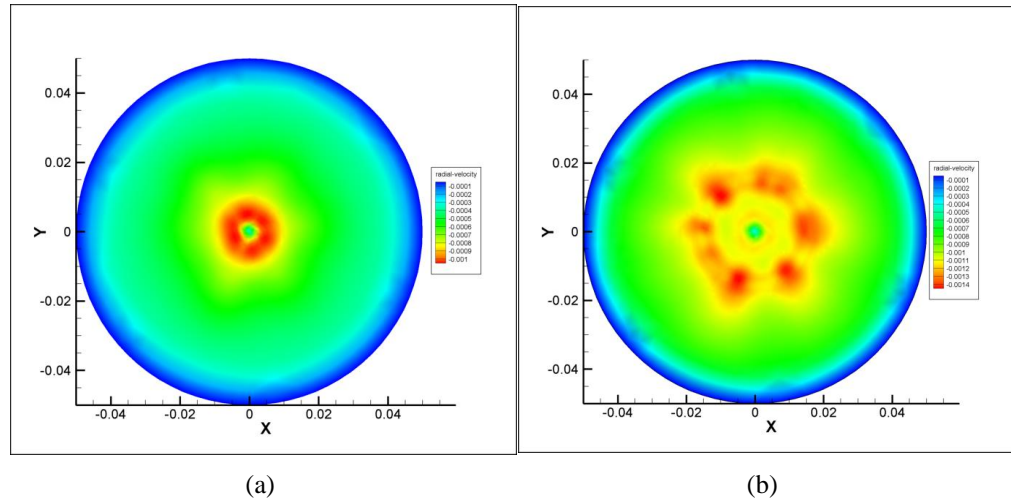


Figure IV.26: Effet du nombre de Marangoni sur les contours de la vitesse radiale au dessous de l'interface (a) $Ma = 0$, (b) $Ma = 88,65 \times 10^3$.

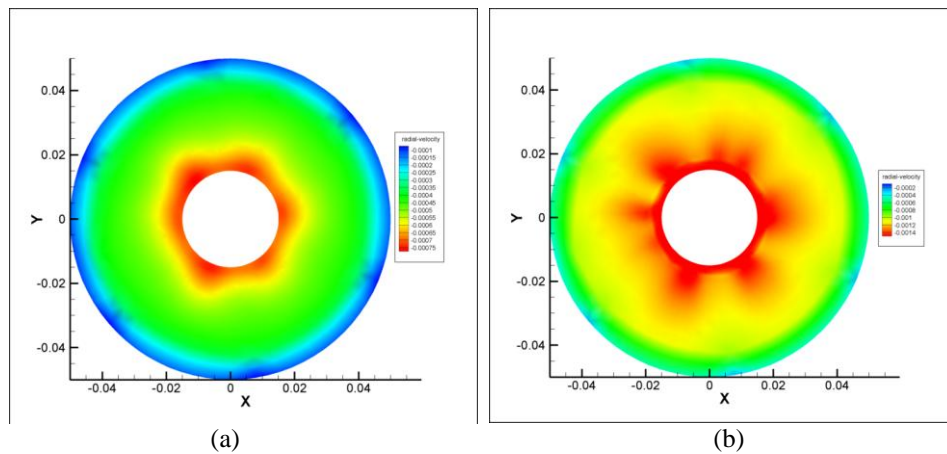


Figure IV.27: Effet du nombre de Marangoni sur les contours de la vitesse radiale à la surface libre (a) $Ma = 0$, (b) $Ma = 88,65 \times 10^3$.

A l'aide de la simulation numérique des écoulements dans le procédé de Czochralski, nous avons démontré que la structure de l'écoulement est influencée par les effets thermocapillaires qui agissent au niveau de la surface libre. Ces effets se manifestent par une variation importante de la vitesse radiale à proximité de la surface libre.

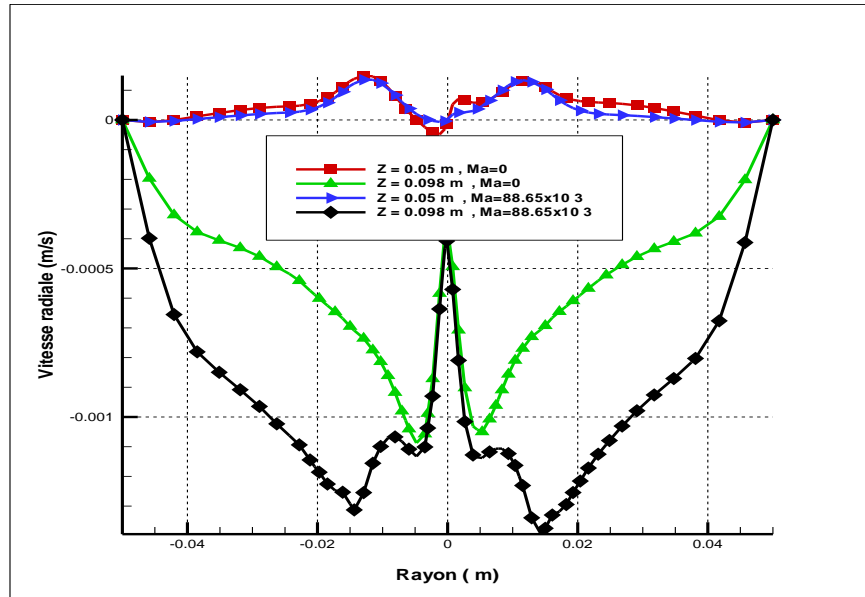


Figure IV.28 Variation radiale de la vitesses radiale, pour deux valeurs de Z dans le cas $Ma = 88,65 \times 10^3$ et $Ma = 0$

Sur la Figure IV.28, on remarque l'importance de l'effet thermo capillaire près de la surface libre (ligne horizontale $z = 0,098 \text{ m}$), ainsi que la variation remarquable de la vitesse radiale dans cette région. Aucun effet du nombre de Marangoni au centre du creuset (ligne $z = 0.05 \text{ m}$ où il y a égalité des vitesses radiales) n'est constaté.

La figure IV.29 représente la magnitude des fluctuations de température au point P1 dans le cas $Ma = 0$ et $Ma = 88,65 \times 10^3$. L'amplitude des fluctuations pour $Ma = 0$ est plus importante que celle correspondant à $Ma = 88,65 \times 10^3$, cela signifie que la tension superficielle à proximité de la surface libre joue un rôle stabilisateur.

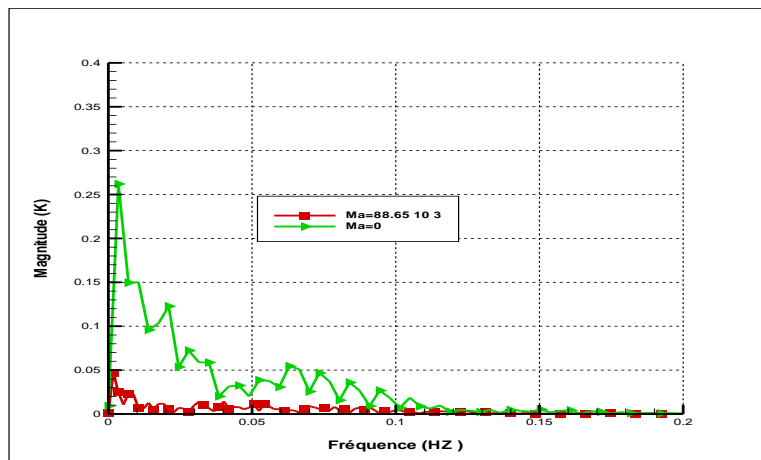


Figure IV.29 Spectres de magnitude des fluctuations de température au point P1.

IV.9 Effet du nombre de Biot

Le nombre de Biot mesure le rapport de la résistance thermique interne du film liquide à la résistance thermique entre la surface libre et l'air ambiant. Un nombre de Biot nul correspond à une surface libre adiabatique (aucun échange de chaleur à l'interface) et un grand nombre de Biot correspondra à un fort échange de chaleur au niveau de l'interface. Nous avons fixé les autres paramètres de l'écoulement à $Re = 335$ ($\Omega_s = 15$ tr/min), $Ra = 10^7$ et $Ma = 88,65 \times 10^3$. Nous observons sur la figure IV.30 que lorsque l'échange de chaleur sur la surface supérieure est très faible ($Bi = 0$), la température dans le creuset augmente d'une manière généralisée, ce qui réduit les gradients thermiques. Au fur et à mesure que la valeur du nombre de Biot augmente il ya apparition d'un mouvement axial et un jet froid le long de l'axe de symétrie. La condition thermique à la surface libre joue un rôle important dans la structure de l'écoulement et le champ de température dans le procédé de Czochralski.

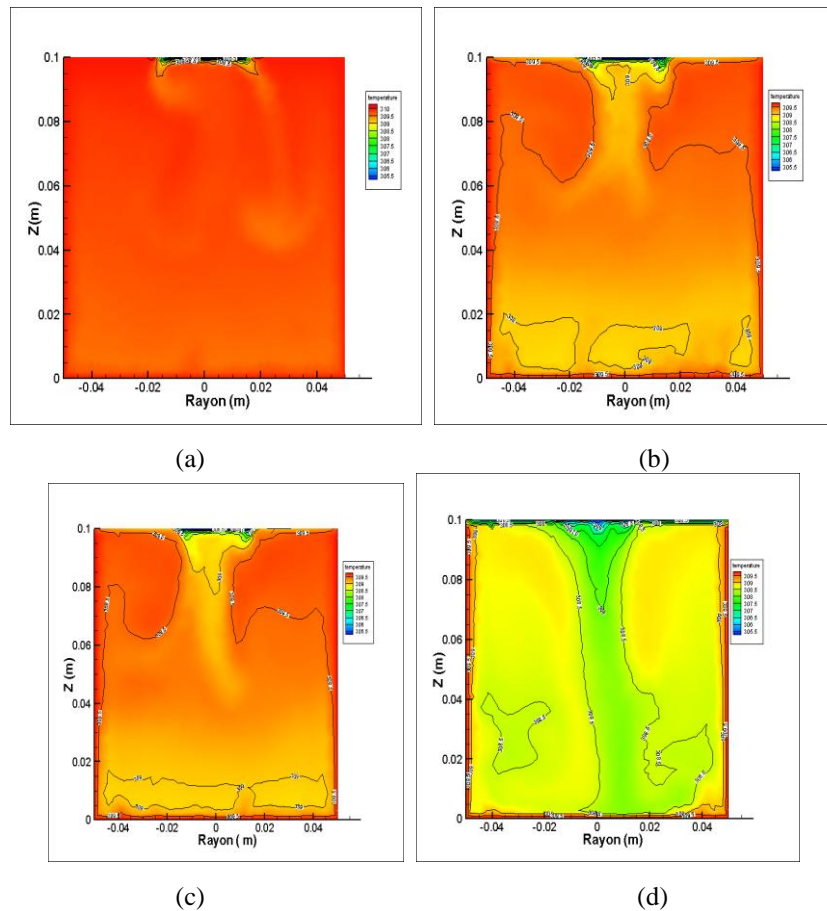


Figure IV.30 : Effet du nombre de Biot (a) $Bi = 0$ (b) $Bi = 3,33$ (c) $Bi = 6,66$ (d) $Bi = 66,66$

IV.10 Conclusion

La première partie de ce travail a été consacrée à l'étude de l'écoulement induit par la rotation du cristal avec la présence de la convection de Marangoni à la surface libre. Nous avons étudié l'effet de la rotation du cristal sur les fluctuations de température dans le système de Czochralski simulé.

A partir des visualisations on a pu détecter la marge des vitesses de rotation du cristal responsable de la transition d'un écoulement stable et axisymétrique à un écoulement tridimensionnel (3D).

On a démontré aussi le rôle stabilisateur de la tension superficielle représenté par le nombre de Ma dans la zone critique à proximité de la surface libre.

A partir des expériences réelles, il a été montré qu'une grande vitesse de rotation du cristal réduit les fluctuations de température, pour une plage restreinte de valeur (0; 60; 102; 150 ou 246 tr/min), contrairement à cette étude numérique qui nous a permis de généraliser le résultat pour une gamme très importante de vitesses de rotation, en particulier pour celles inférieures à 30 tr/min généralement utilisées dans le procédé réel de Czochralski.

Chapitre V

Résultats et discussions cas: Gallium

Partie 2: Cas d'un fluide à faible nombre de Prandtl (Gallium)

V.1 Introduction:

Notre intérêt pour l'étude de ce problème est son implication dans la croissance des cristaux destinés à la fabrication des semi-conducteurs. En plus de cet aspect pratique, l'étude des écoulements convectifs dans les métaux liquides présente un intérêt du point de vue recherche fondamentale. En effet, ce type de fluides opaques à bas nombre de Prandtl et leurs comportements lorsqu'ils sont soumis à des gradients de température sont assez différents de ceux observés dans les fluides à haut nombre de Pr.

Les résultats expérimentaux du transfert de chaleur dans les métaux liquides sont très limités à cause des difficultés à mener des mesures à cause de leur opacité et leur agressivité chimique et donc les simulations numériques peuvent s'avérer très utiles.

L'écoulement dépend de la géométrie (rapport de forme H/D), du fluide (nombre de Prandtl), de l'écart de température (nombre de Rayleigh et nombre de Marangoni), ainsi que des conditions aux limites thermiques et dynamiques. Il en résulte une très grande diversité des écoulements obtenus engendrée par le nombre important de combinaisons possibles. Cette étude, comme la plupart des travaux numériques sur la convection, est basée sur l'approximation de Boussinesq (Différence de température ΔT inférieure à 10 % de la température de référence), dont la validité, notamment dans le cas des systèmes fermés, reste un sujet de controverses **Gray** et **Giorgini [93]**, **Paolucci [94]**. Il faut noter que dans des travaux consacrés à cette question comme ceux de **Paolucci [94]** de nouvelles recommandations sur les conditions de sa validité sont proposées. Pour notre cas d'étude, le fluide est du Gallium ($Pr = 0,025$) et l'écart de température doit être inférieur à 32 K (limite de validité de l'approximation de Boussinesq selon **Gray** et **Giorgini [93]**).

Maintenant que notre procédure de simulation numérique a été validée, nous allons essayer d'optimiser la configuration étudiée au chapitre IV, pour un deuxième fluide. Comme mentionné dans l'introduction, l'huile silicone sera remplacée par du Gallium.

V.2 L'écoulement de base ($Ra = 10^6$ ($\Delta T = 2$ K) et $Re_s = 0$)

L'écoulement de base est obtenu pour un nombre de Rayleigh égal à $Ra = 10^6$ ($\Delta T = 2$ K) et $Re_s = 0$, l'écoulement observé est stationnaire (Figure V.1) et bidimensionnel (la vitesse azimutale est nulle), (Figures V.2 et V.3).

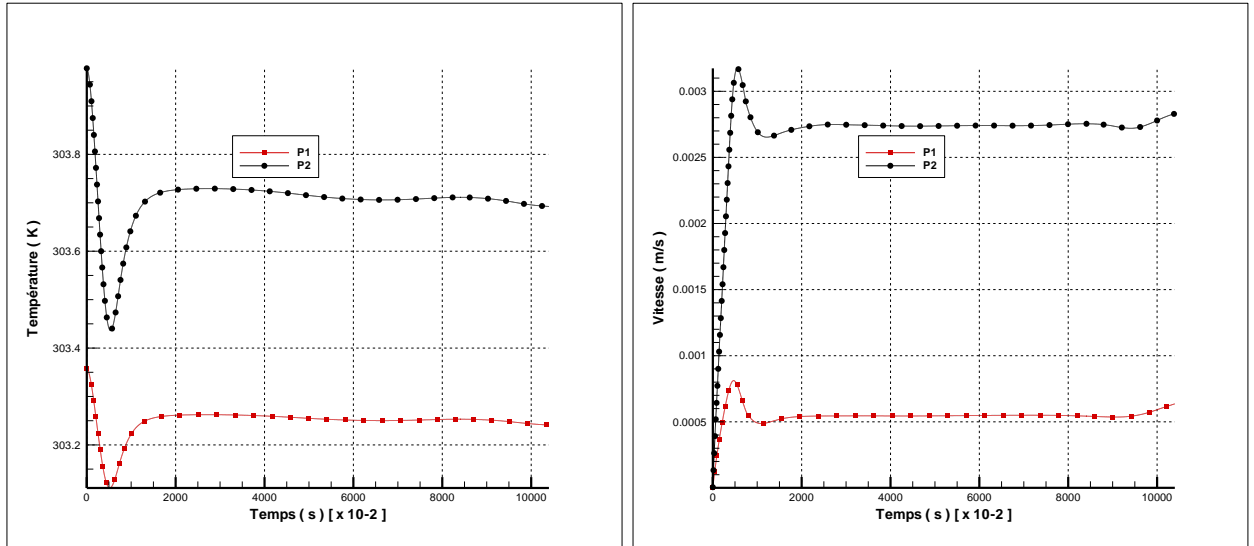


Figure V.1 Evolution temporelle de (a) la température (b) la magnitude de vitesse.

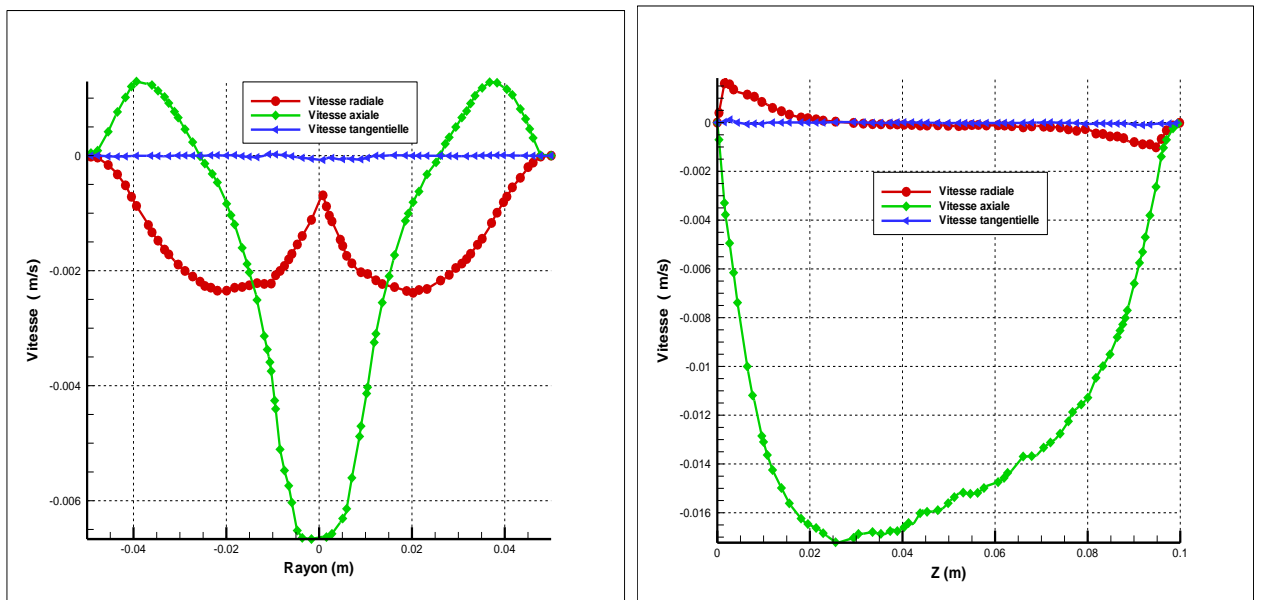


Figure V.2 Profils radial et axial des vitesses radiale, axiale et tangentielle

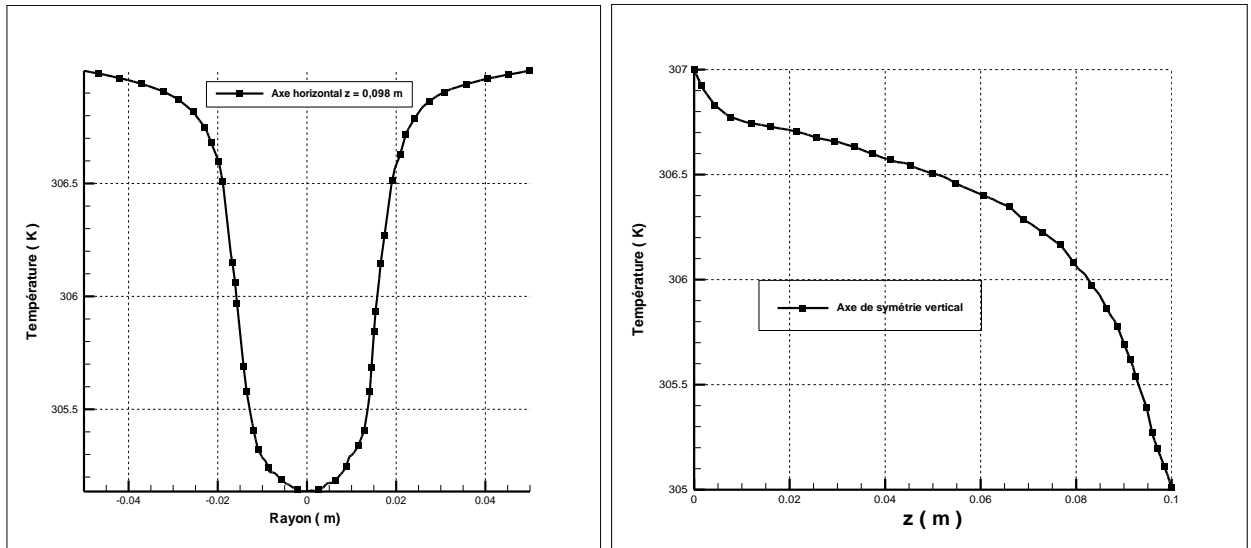


Figure V.3 Profils radial et axial de la température.

V.3 Effets du nombre de Rayleigh

Les Figures (V.4) et (V.5) illustrent les contours de température pour différents nombres de Rayleigh dans les plans horizontaux ($Z = 0,098$ m, $Z = 0,05$ m et $Z = 0,01$ m respectivement) et dans le plan vertical médian.

Partant d'un écoulement stationnaire et bidimensionnel pour un nombre de Rayleigh égal à $Ra = 10^6$ ($\Delta T = 2$ K), et passant à une valeur de Rayleigh égale à $Ra = 2,5 \times 10^6$ ($\Delta T = 5$ K) ensuite à $Ra = 10^7$ ($\Delta T = 32$ K). La visualisation de l'écoulement dans trois plans horizontaux (à proximité de l'interface "melt"-solide, au milieu du creuset et près du fond du creuset) montre la nature axisymétrique de l'écoulement pour $\Delta T = 2$ K. Pour $\Delta T = 5$ K, une perte de symétrie (par rapport au plan vertical médian) est observée au milieu du creuset, alors que près de l'interface et au fond du creuset l'écoulement demeure symétrique (avec une légère déformation des isothermes). Pour obtenir des variations notables des champs thermiques et des régimes d'écoulement, on a procédé à l'augmentation de la différence de température jusqu'à $\Delta T = 32$ K correspondant à un nombre de Rayleigh de l'ordre de 10^7 . La température est homogène dans l'ensemble du creuset alors que près de l'interface, on note l'apparition d'une couche limite et une perte de symétrie. Pour Rayleigh $Ra = 10^6$ et $Ra = 2,5 \times 10^6$, l'écoulement axial au centre de la cavité est dominant.

V. 3.1 Visualisation de l'écoulement pour différents nombres de Rayleigh dans différents plan horizontaux

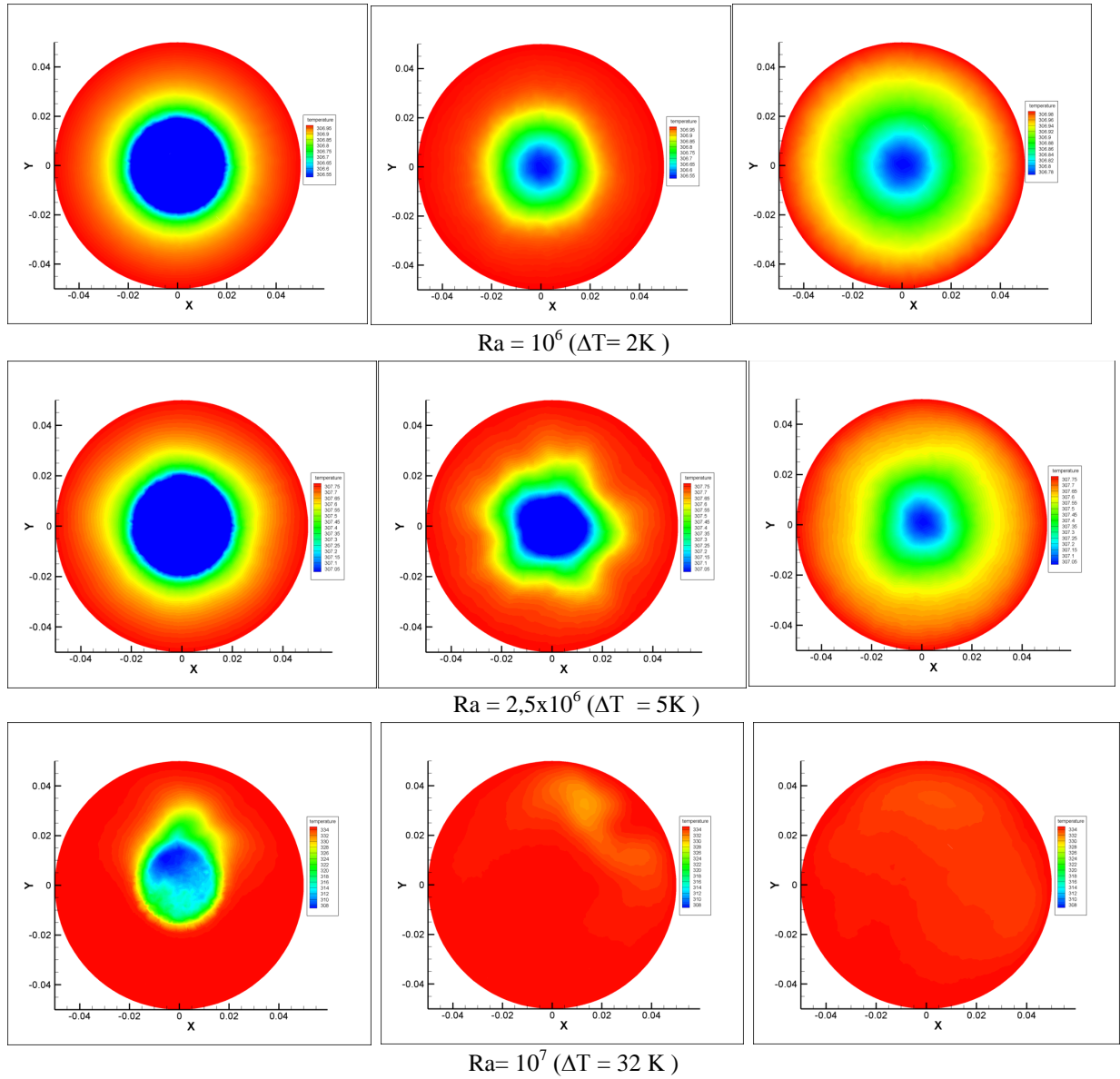


Figure V.4 Contours de température pour différents nombres de Rayleigh (dans les plans horizontaux $Z = 0,098$ m, $Z = 0,05$ m et $Z = 0,01$ m respectivement).

V. 3.2 Visualisation de l'écoulement pour différents nombres de Rayleigh dans le plan vertical médian

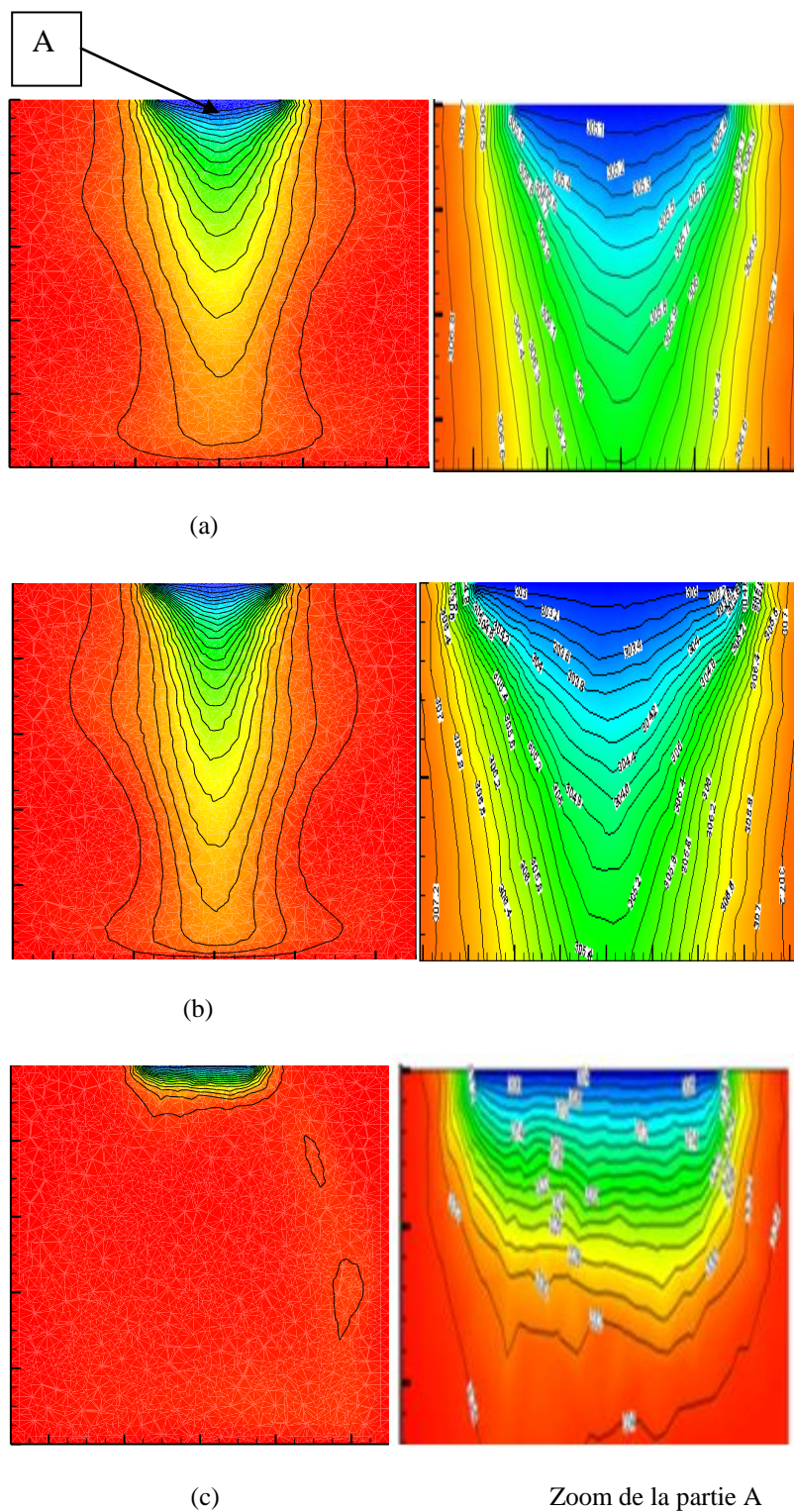


Figure V.5 Contours de température (a) $Ra = 10^6$ ($\Delta T = 2K$), (b) $Ra = 2,5 \times 10^6$ ($\Delta T = 5K$) et (c) $Ra = 10^7$ ($\Delta T = 2K$)

La perte de symétrie a été confirmée par la visualisation des contours de vitesses voir Figure V.6

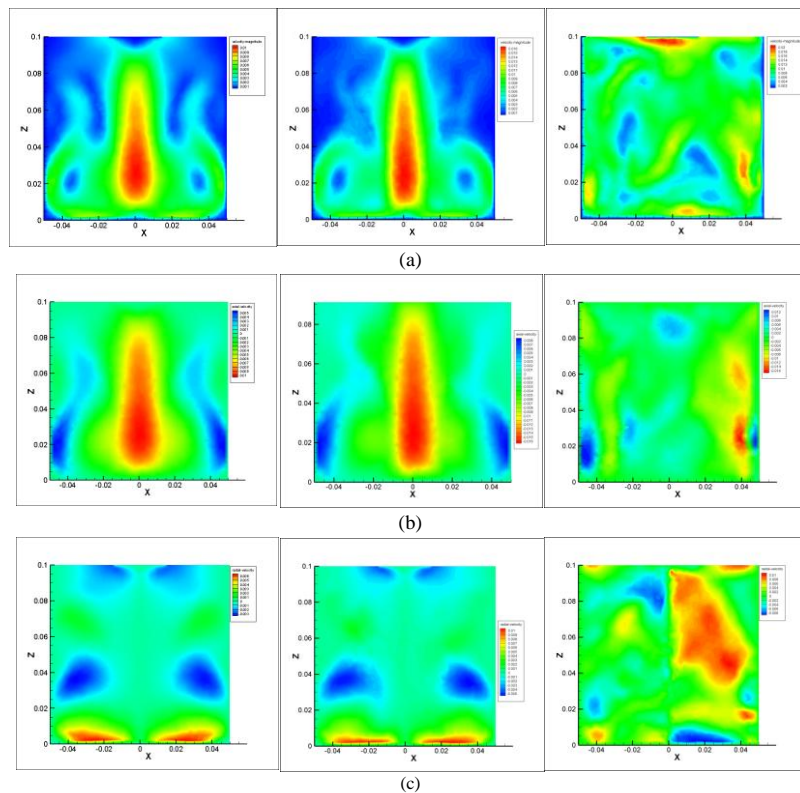


Figure V.6 Contours de (a) magnitude de vitesse, (b) vitesse axiale, (c) vitesse radiale pour $Ra = 10^6$ ($\Delta T = 2K$), $Ra = 2,5 \times 10^6$ ($\Delta T = 5K$) et $Ra = 10^7$ ($\Delta T = 32K$) respectivement.

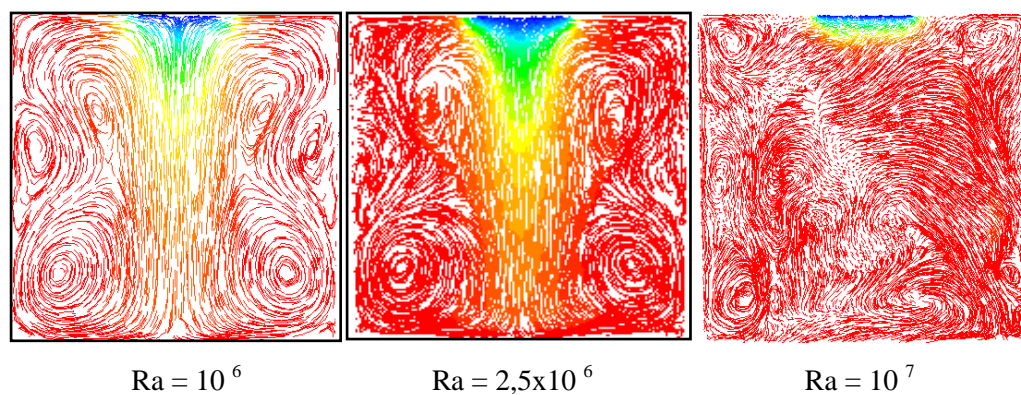


Figure V.7: Lignes de courant observées dans le plan vertical médian du creuset $Re_s = 0$.

V.3.4 Effet du nombre de Rayleigh sur les profils de température

Afin de localiser l'origine de la perturbation qui provoque la perte de symétrie, on a essayé d'interpréter les variations des profils de température et celles des trois composantes de la vitesse (axiale, radiale et tangentielle), le long de deux axes horizontaux à proximité de l'interface et au milieu du creuset, que nous jugeons représentatifs de la partie du creuset où l'écoulement a une grande influence sur la forme de l'interface.

La Figure V.8 illustre la variation radiale de la température le long des axes horizontaux $Z = 0,05$ m et $Z = 0,098$ m. Au milieu du creuset, la température pour les trois nombres de Rayleigh est uniforme. On peut conclure que la variation du nombre de Rayleigh a peu d'influence sur les profils de température dans cette zone (la convection de Marangoni est absente dans cette région). A proximité de l'interface solide-liquide, on note une légère perturbation du profil de température pour $Ra = 2,5 \times 10^6$ et une grande variation pour $Ra = 10^7$. Ce résultat confirme la déstabilisation de l'écoulement dans cette zone avec l'augmentation du nombre de Rayleigh et Marangoni.

La Figure V.9 illustre la variation radiale de la vitesse axiale le long des axes horizontaux $Z = 0,05$ m et $Z = 0,098$ m. Au milieu du creuset, la vitesse axiale est maximale pour $R = 0$ m, l'écoulement est principalement axial vers le fond du creuset pour $Ra = 10^6$ et $Ra = 2,5 \times 10^6$, alors que pour $Ra = 10^7$ l'écoulement change de direction vers le haut du creuset et on note aussi la naissance d'un mouvement près de la paroi latérale. On peut conclure que la variation du nombre de Rayleigh a une grande influence sur le profil de la vitesse axiale dans cette zone). A proximité de l'interface solide-liquide, on note une grande perturbation du profil de la vitesse axiale pour $Ra = 10^7$. Ce résultat confirme la déstabilisation de l'écoulement axial avec l'augmentation du nombre de Rayleigh.

La Figure V.10 illustre la variation radiale de la vitesse radiale le long des axes horizontaux $Z = 0,05$ m et $Z = 0,098$ m. Au milieu du creuset, l'effet du nombre de Rayleigh sur le profil de la vitesse radiale est observé pour $Ra = 10^7$. A proximité de l'interface solide-liquide, on note un changement du sens de l'écoulement vers la paroi latérale et une grande perturbation du profil.

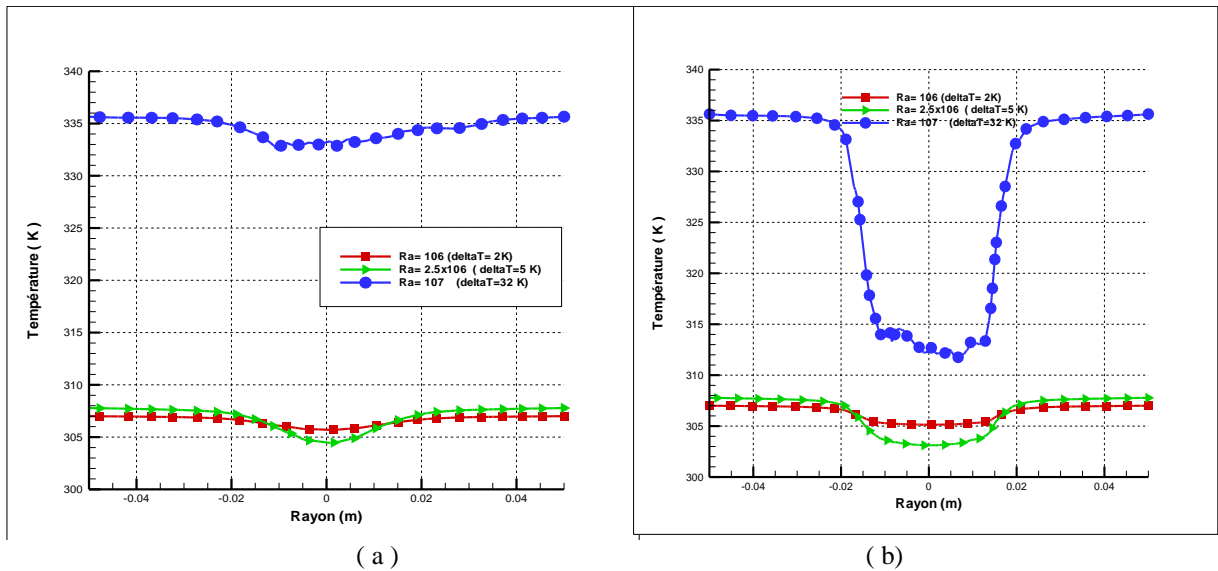


Figure V.8 Variation radiale de la température (a) $Z = 0,05$ m, (b) $Z = 0,098$ m.

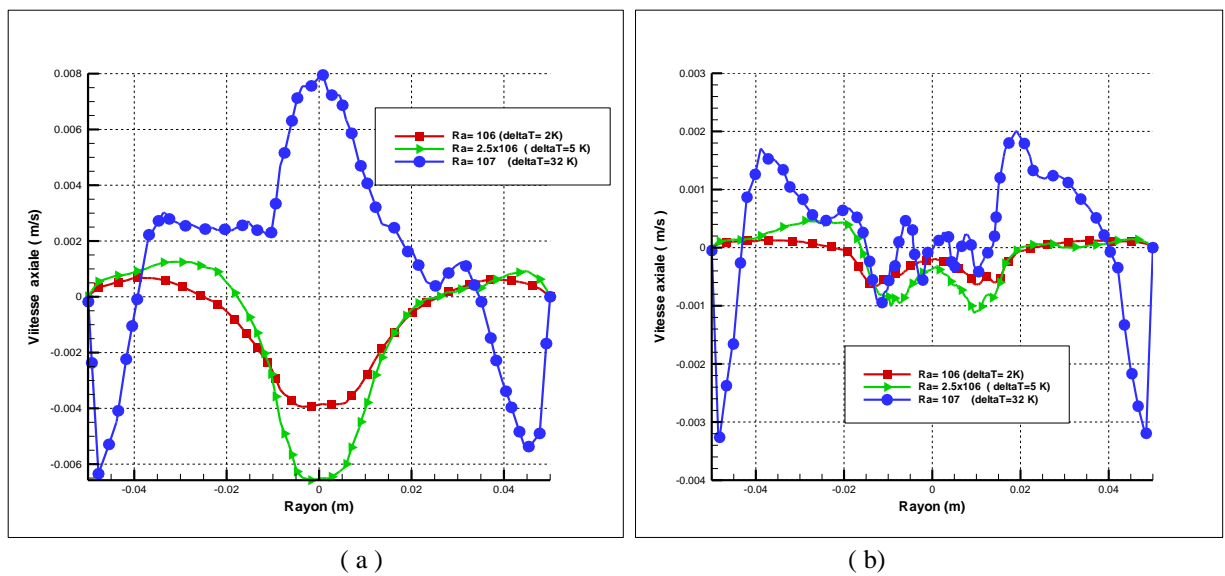


Figure V.9 Variation radiale de la vitesse axiale (a) $Z = 0,05$ m, (b) $Z = 0,098$ m.

La Figure V.11 illustre la variation radiale de la vitesse azimutale le long des axes horizontaux $Z = 0,05$ m et $Z = 0,098$ m. Pour $Ra = 10^6$ et $Ra = 2,5 \times 10^6$, l'écoulement est bidimensionnel (la vitesse azimutale est nulle). L'effet du nombre de Rayleigh sur le profil de la vitesse azimutale est observé pour $Ra = 10^7$. Au milieu du creuset l'écoulement est légèrement tridimensionnel la valeur maximale de la vitesse est de 0.006 m/s alors que près de l'interface. On

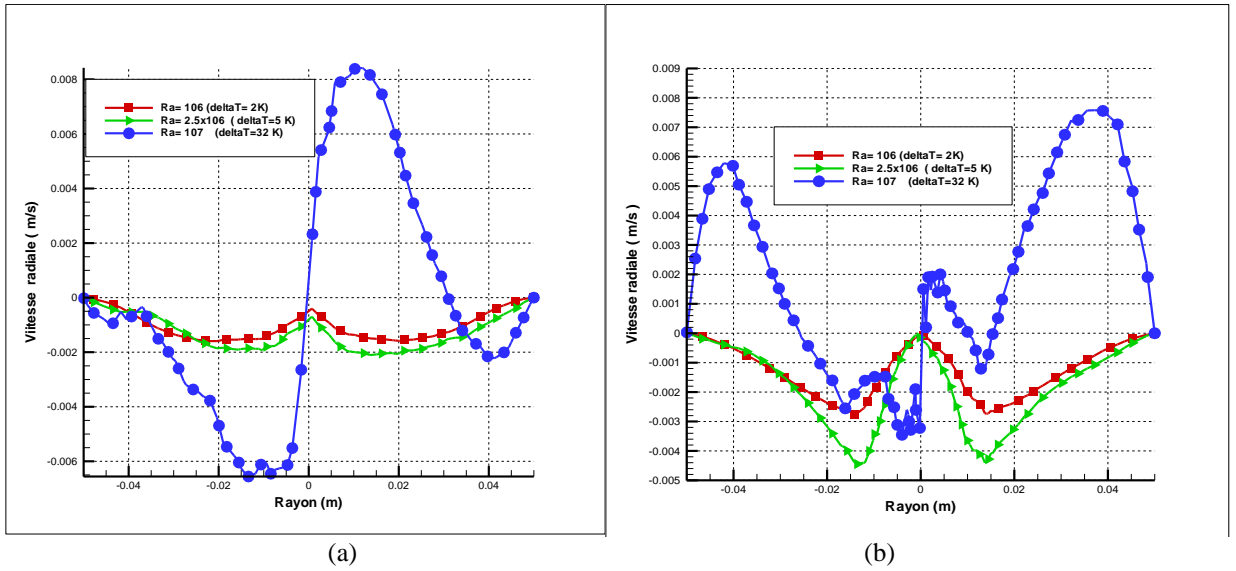


Figure V.10 Variation radiale de la vitesse radiale (a) $Z = 0,05$ m, (b) $Z = 0,098$ m.

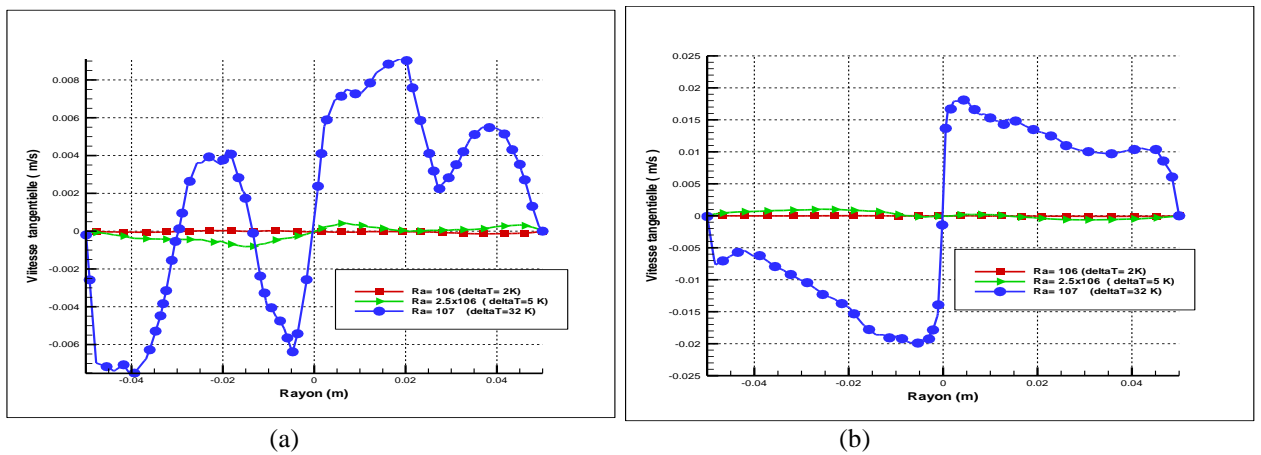


Figure V.11 Variation radiale de la vitesse azimutale (a) $Z = 0,05$ m, (b) $Z = 0,098$ m.

note la naissance d'un mouvement azimutale important rendant l'écoulement tridimensionnel, la vitesse maximale dans ce cas est de 0.02 m/s.

V.4 Effet de la vitesse de rotation du cristal sur le champ de l'écoulement pour $Ra = 10^7$

Afin de voir l'effet de la vitesse de rotation du cristal sur le champ de l'écoulement pour un grand nombre de Rayleigh, on a procédé à des visualisations du champ de température instantané à $t = 200$ s dans le plan horizontal $z = 0,098$ m (2 mm au dessous de l'interface "melt"-Cristal), pour différentes valeurs de Ω_s , (Figure V.12) et dans le plan vertical médian (Figure

V.13). Tout d'abord, on observe l'allure des isothermes, pour $\Omega_s = 0$ tr/min les isothermes sont serrées dans une zone étroite près de l'interface d'épaisseur égale à 0.005 m. Pour $\Omega_s = 5$ tr/min un étalement des isothermes vers le coté gauche du creuset est observé. Pour $\Omega_s = 10$ tr/min et $\Omega_s = 15$ tr/min l'étalement des isothermes est vers le coté droit du creuset. Pour et $\Omega_s = 30$ tr/min un rétrécissement des isothermes est observé. Pour $\Omega_s = 60$ tr/min l'allure des isothermes est semblable à celle trouvé pour $\Omega_s = 0$ tr/min. Il est également intéressant de remarquer que l'écoulement dans une grande partie du creuset n'est pas influencé par la vitesse de rotation du creuset où la température est homogène.

V.4.1 Visualisation du champ de température instantané à $t = 200$ s dans le plan $z = 0,098$ m (2 mm au dessous de l'interface "melt"-Cristal), pour différentes valeurs de Ω_s

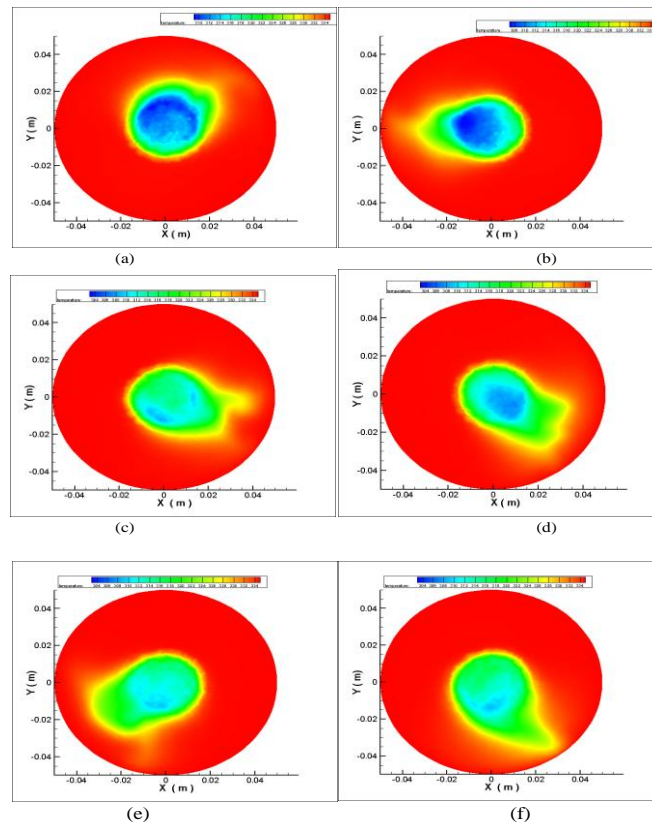


Figure V.12 $Ra=10^7$ ($\Delta T = 32,78$ K), (a) $\Omega_s = 0$ tr/min, (b) $\Omega_s = 5$ tr/min, (c) $\Omega_s = 10$ tr/min, (d) $\Omega_s = 15$ tr/min, (e) $\Omega_s = 30$ tr/min, (f) $\Omega_s = 60$ tr/min, à l'instant $t = 200$ s.

V.4.2 Visualisation du champ de température dans le plan vertical médian

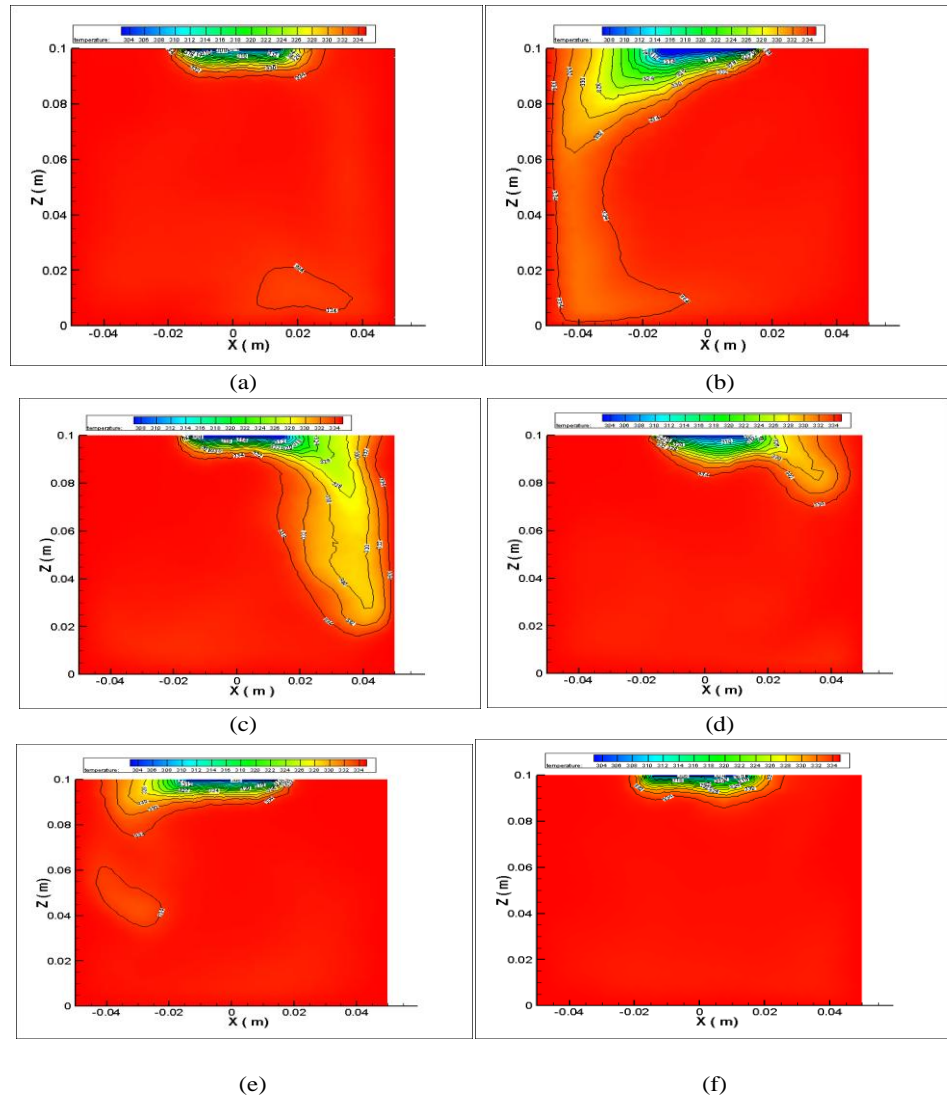
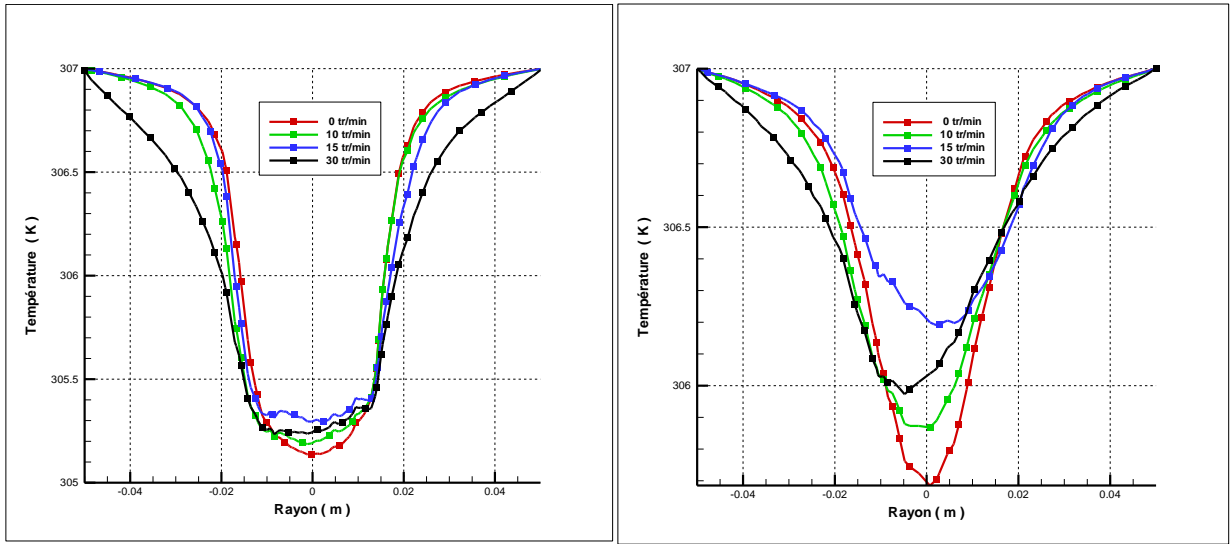


Figure V.13 $Ra = 10^7$ (a) $\Omega_s = 0$ tr/min, (b) $\Omega_s = 5$ tr/min, (c) $\Omega_s = 10$ tr/min, (d) $\Omega_s = 15$ tr/min, (e) $\Omega_s = 30$ tr/min, (f) $\Omega_s = 60$ tr/min, à l'instant $t = 200s$

Pour quantifier les instabilités observées avec la variation de la vitesse de rotation du cristal les profils des températures et des trois composantes de la vitesse à proximité de l'interface et au milieu du creuset pour différentes vitesses de rotation du cristal à $Ra=10^6$ ($\Delta T = 2$ K) ont été tracés (Figures (V.14), (V.15), (V.16), (V.17)).

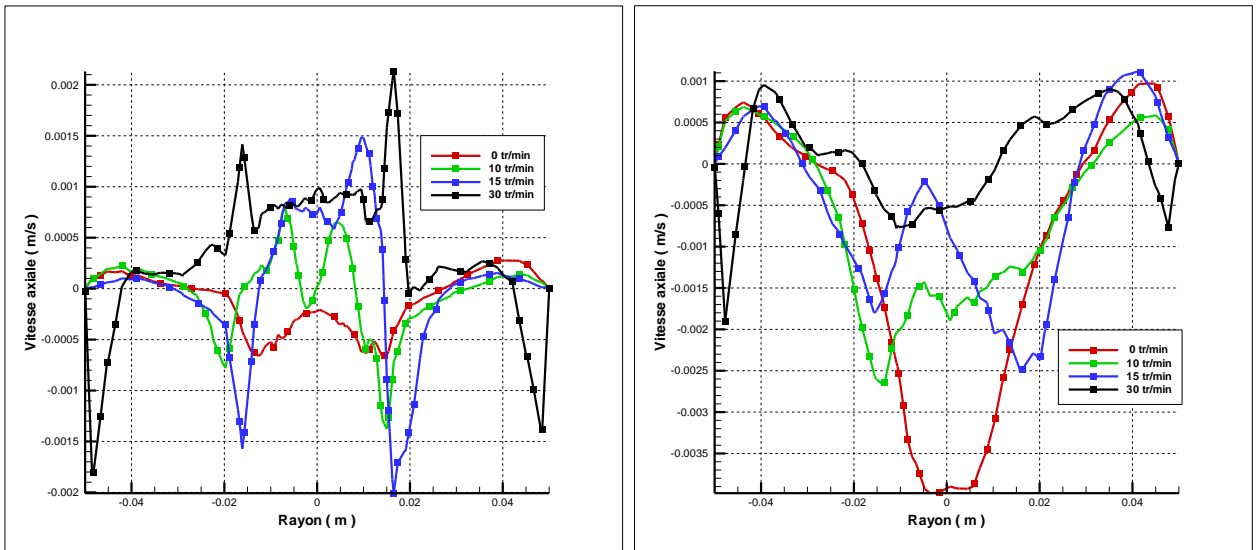
Les profils tracés confirment nettement la déstabilisation de l'écoulement par la vitesse de rotation du cristal surtout dans la région proche de l'interface "melt"-cristal.

V.4.3 Effet de la vitesse de rotation du cristal sur le profil radial de température



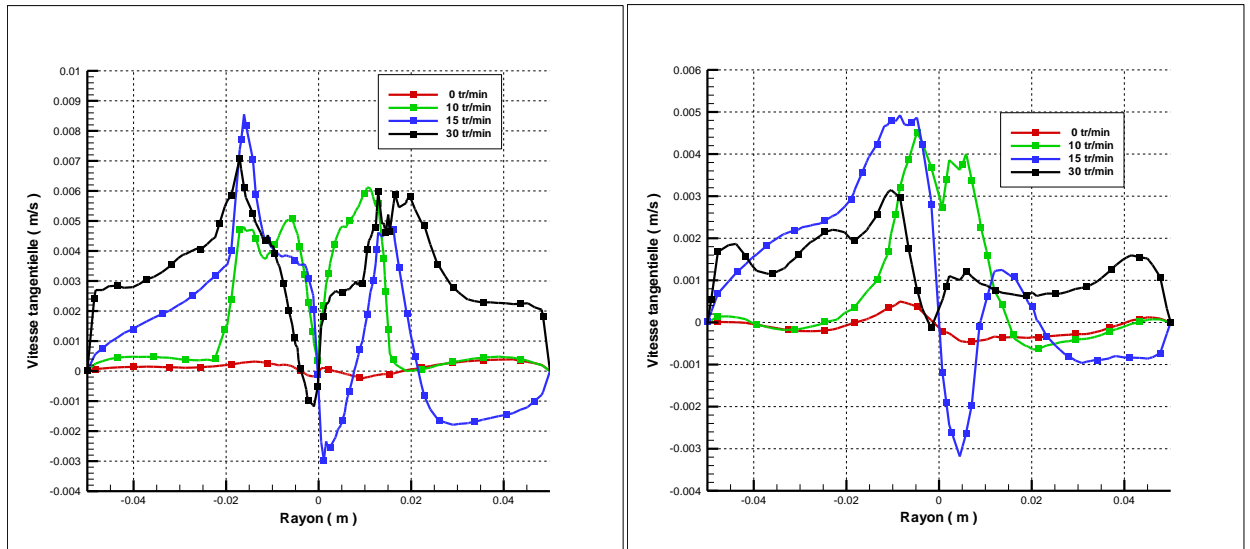
(a) (b)
 Figure IV.14: Variations radiales des températures : (a) à proximité de l'interface (b) au milieu du creuset pour différentes vitesses de rotation du cristal. $Ra=10^6$ ($\Delta T = 2$ K).

V.4.4 Effet de la vitesse de rotation du cristal sur le profil radial de la vitesse axiale



(a) (b)
 Figure IV.15: Variations radiales des vitesses axiales: (a) à proximité de l'interface (b) au milieu du creuset pour différentes vitesses de rotation du cristal. $Ra=10^6$ ($\Delta T = 2$ K).

V.4.5 Effet de la vitesse de rotation du cristal sur le profil radial de la vitesse tangentielle

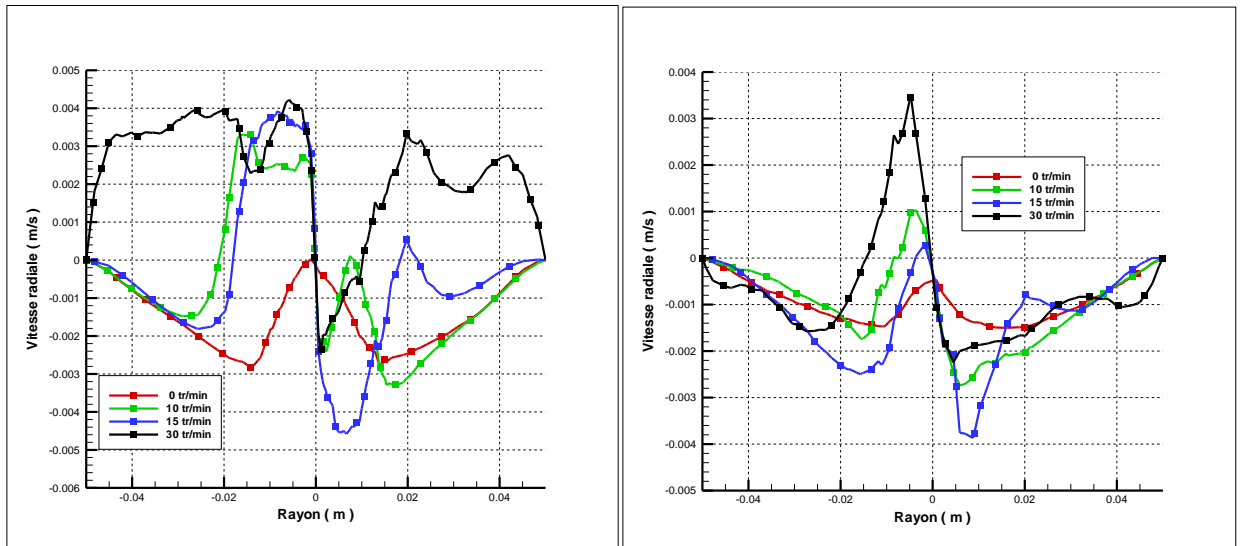


(a)

(b)

Figure V.16: Variations radiales des vitesses tangentielles: (a) à proximité de l'interface (b) au milieu du creuset pour différentes vitesses de rotation de cristal. $Ra=10^6$ ($\Delta T = 2$ K).

V.4.6 Effet de la vitesse de rotation du cristal sur le profil radial de la vitesse radiale



(a)

(b)

Figure V.17: Variations radiales des vitesses radiales: (a) à proximité de l'interface (b) au milieu du creuset pour différentes vitesses de rotation du cristal. $Ra=10^6$ ($\Delta T = 2$ K).

V.5 Analyse des instabilités

L'analyse spectrale d'un signal de température ou/et de la vitesse dans la section proche de l'interface solide-liquide est un bon moyen pour caractériser l'état de l'écoulement. C'est ce que nous nous proposons de faire dans cette partie. Nous avons choisi le même point P1 considéré dans le chapitre IV pour un nombre de Rayleigh $Ra = 10^6$. La Figure IV.18 montre la variation temporelle de la température pour la position P1, pour une série de vitesses de rotation du cristal (allant de 0 à 30 tr/min).

On remarque que pour les vitesses de rotation faibles (inférieur à 5 tr/min), l'écoulement est stationnaire. Pour des valeurs de $5 < \Omega_s \leq 10$ tr/min, on remarque l'apparition de fluctuations périodiques de faibles amplitudes et une augmentation progressive de la valeur asymptotique est observée. Pour une vitesse de rotation de l'ordre de 15 tr/min, on note l'apparition de grandes fluctuations de température (l'écoulement est instationnaire). L'aspect instationnaire de l'écoulement est toujours observé mais avec une diminution de l'amplitude des fluctuations pour $\Omega_s = 20$ tr/min et $\Omega_s = 30$ tr/min.

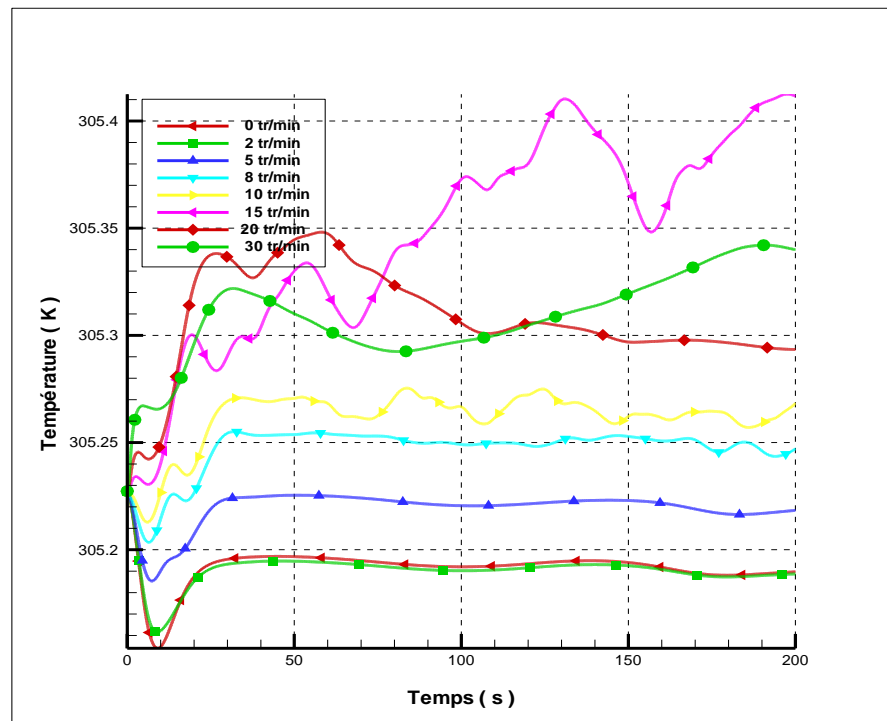


Figure V.18: Variation de la température du point P1 en fonction du temps ($Ra = 10^6$)

Dans le but de comprendre le comportement complexe des fluctuations de température et afin de trouver les meilleurs moyens de les contrôler, les transformées de Fourier rapides (FFT)

correspondants aux courbes de la Figure IV.18, sont exposées dans la Figure IV.19. On peut remarquer que pour toutes les vitesses de rotation, les spectres sont continus et les grandeurs les plus élevées sont observées pour les faibles fréquences.

La figure IV.19 montre les spectres des fluctuations de températures du point P1 pour différentes vitesses de rotation du cristal. Les oscillations dépendent de la vitesse de cristal considérée et elles sont plus importantes pour les faibles vitesses.

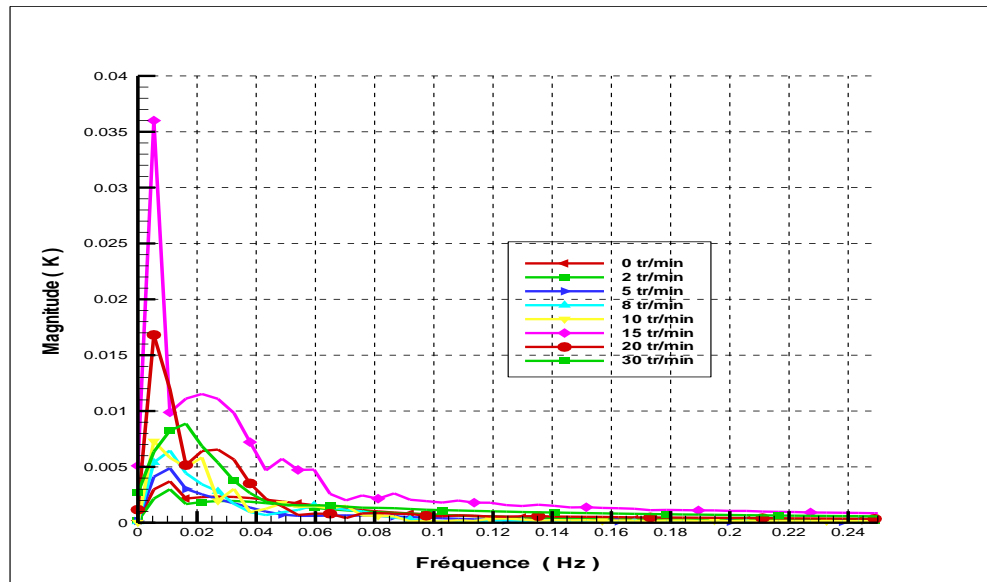


Figure V.19 Transformée de Fourier des fluctuations de température pour le point P1 (2 mm au dessous de l'interface) pour différentes vitesses de rotation du cristal.

La figure IV.20 représente la variation de la magnitude des fluctuations de température en fonction de la vitesse de rotation du cristal. Une diminution de l'amplitude des fluctuations est observée pour des vitesses de rotations entre 0 et 2 tr/min et une légère augmentation entre 2 et 10 tr/min. Pour une vitesse de rotation égale à 15 tr/min un pic est noté avec une amplitude des fluctuations de l'ordre de 0,035 K. Au delà de 15 tr/min, une diminution remarquable des fluctuations est observée.

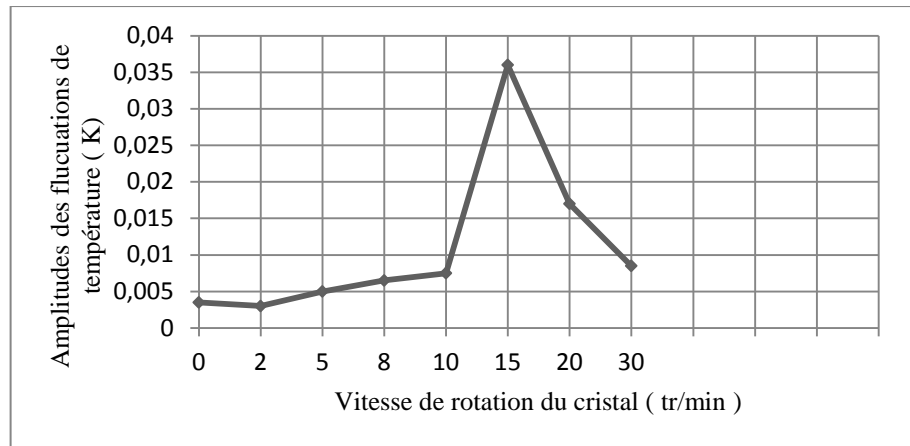


Figure V.20 Magnitude des fluctuations de température en fonction de la vitesse de rotation du cristal.

V.6 Conclusion

Cette étude numérique nous a permis de faire varier deux paramètres à savoir la vitesse de rotation du cristal, le gradient de température entre le creuset et le cristal (dans la marge de validité de l'approximation de Boussinesq). Une difficulté majeure a été rencontrée dans cette étude qui consiste dans les conditions aux limites thermiques à la surface libre et les propriétés thermo physiques en particulier le coefficient de tension superficielle qui ne sont pas définis avec une bonne précision, afin qu'ils puissent être correctement reproduits dans le modèle de calcul.

Il se dégage des résultats que la vitesse de rotation du cristal joue un rôle majeur dans la structure de l'écoulement et a un effet important sur les fluctuations de température.

Une visualisation de l'écoulement et une analyse spectrale des fluctuations de température montrent l'apparition et la disparition des fluctuations thermiques.

Conclusion générale

Conclusion Générale

Ce travail de recherche a porté essentiellement sur des simulations numériques de la convection mixte tridimensionnelle laminaire dans le procédé de croissance cristalline de Czochralski, en utilisant comme outil de calcul le code CFD Fluent basé sur l'algorithme simple.

Au cours du tirage par la méthode de Czochralski, l'écoulement dans la masse fondue est induit par la combinaison complexe de plusieurs effets (la convection libre, la convection de Marangoni et la convection forcée), d'où l'apparition des fluctuations de températures qui sont la cause principale de la formation des dislocations qui altèrent les qualités optiques du cristal formé. L'objectif principal de cette étude et d'une part, comprendre les divers phénomènes thermiques et hydrodynamiques liés au processus, afin d'optimiser l'écoulement et réduire les fluctuations de température indésirables. Deux fluides ont été considérés:

1. Huile silicone qui est un fluide relativement à grand nombre de Prandtl ($Pr = 28$), simulant les oxydes ($10 < Pr < 30$).
2. Gallium qui est un fluide à faible nombre de Prandtl $Pr = 0.025$, simulant les semi-conducteurs généralement, il est de l'ordre de 10^{-2} (Ge, Si, GaAs...).

Après une étude détaillée de l'influence du maillage, de nombreuses comparaisons avec des travaux publiés ont permis de valider qualitativement nos résultats.

Les résultats de nos simulations numériques ont permis aussi de situer les vitesses de rotations critiques pour les deux cas étudiés et de montrer l'importance de la condition thermique à la surface libre représentée par le nombre de Biot ainsi que le rôle de la convection de Marangoni.

Il a été montré par les expériences de Rahal et al. qu'une grande vitesse de rotation du cristal réduit les fluctuations de température. Pour une marge restreinte de valeur (0, 60, 102, 150 ou 246 tr / min), les visualisations de l'écoulement sont limités au plan vertical médian, contrairement à cette expérience numérique qui a permis de généraliser les résultats pour un intervalle plus large de vitesses de rotation en particulier pour les vitesses inférieures à 30 tr /min, généralement utilisées dans le procédé Czochralski et qui a permis aussi la visualisation de l'écoulement dans différents plans de la configuration .

PERSPECTIVES

Notre étude a porté sur un modèle tridimensionnel, type Czochralski, simplifié, il serait peut être judicieux d'utiliser un autre modèle en tenant compte de la forme de l'interface solide- liquide (phénomène de solidification), ainsi que la rotation du creuset, ce qui permettrait certainement d'approcher avec plus de précision le comportement réel du problème complexe des échanges thermiques dans ce procédé.

Références bibliographiques

- [1] <https://portail.cder.dz> (2015).
- [2] A. Bensalah (2004). Caractérisation spectroscopique et potentialité laser proche infrarouge de l'ion Yb³⁺ dans les monocristaux massifs de fluorures YLiF₄, LuLiF₄, BaY₂F₈ et KY₃F₁₀ tirés par la méthode Czochralski. Thèse de doctorat de l'Université Claude Bernard- lyon1.
- [3] L. SYLLA.(2008). Etude expérimentale et thermodynamique du procédé de démouillage appliqué aux semi-conducteurs. Thèse de doctorat de L'INPG.
- [4] M. H. Tavakoli (2006) Numerical analysis of seeding process during Czochralski growth of oxide single crystals, Thèse de doctorat de l'Université Cottbus.
- [5] F. Lévy (1994), Physique et technologie des semi-conducteurs (Traité des matériaux), Edition Broché.
- [6] A.S. Jordan, R.Caruso and A.R. Von Neida, (1984) , The theory and practice of dislocation reduction in GaAs and Inp, J. Crystal Growth, vol.70, pp.555-573.
- [7] Benjamin Gallien (2016). Contraintes thermomécaniques et dislocations dans les lingots de silicium pour applications photovoltaïques. Thèse de doctorat de l' Université de Grenoble.
- [8] Rahal, P. Cerisier, H.Azuma, (2008): Application of the proper orthogonal decomposition to turbulent convective flows in a simulated Czochralski system. Int J Heat Mass Tran. 51 4216-4227.
- [9]<https://www.gemmo.eu/fr/procedes-de-fabrication-des-pierres-gemmes-synthetiques-et-artificielles.php>
- [10] A. Verneuil (1904), Annales de Chimie et de Physique série III.
- [11] R.F. Belt, R.C. Puttbach et D.A. Lepore (1972). Crystal growth and perfection of large Czochalski Nd:YAG single crystals. J. Crystal. Growth 13/14 268.
- [12] J.C. Brice (1986). Crystal Growth Process, Chapter 4, Ed. John Wiley and Sons.
- [13] F.M. Herrmann, G. Müller, Growth of 20 mm diameter GaAs crystals by the floating-zone technique with controlled As-vapour pressure under microgravity. J. Crystal Growth 156 (1995) p. 350-360
- [14] Jean-Marie Fourmigue, François Balembois, Kheirréddine Lebbou (2008). Procédé de fabrication de fibres monocristallines. Revue des Techniques de l'Ingénieur.
- [15] A. Karek, K. Lebbou, M. Diaf, A. Brenier, G. Boulon. (2007). Yb³⁺ - doped NaBi(WO₄)₂ fiber single crystals grown by the micro-pulling down technique and emission spectroscopic characterization. Materials Research Bulletin 42 532–543.
- [16] H. Azoui (2013). Etude des propriétés de la zone liquide lors de la croissance cristalline par la technique micro pulling down. Thèse de magistère de l'Université de Batna.
- [17] C. D. Brandle. (1979). "Czochralski growth of large oxide crystals" Crystal Growth: a tutorial approach, North Holland Publishing Company.

Références bibliographiques

- [18] P.H. Haumesser (2000). Elaboration par croissance Czochralski, caractérisation spectroscopique et propriétés laser de monocristaux dopés par l'Ytterbium. Thèse de doctorat de l'Université Pierre et Marie Curie.
- [19] M. Spiesser, Jan Czochralski (1999). La méthode du tirage des cristaux, Bulletin GFCC.
- [20] H. J. Scheel, T. Fukuda (2003). Crystal Growth Technology, John Wiley & Sons, Ltd. ISBN: 0-471-49059-8.
- [21] https://fr.wikipedia.org/wiki/Procédé_de_Czochralski.
- [22] Marie Chavoutier (2010). Cristallogenèse, Caractérisation spectroscopique et Potentialité Laser de borates et d'oxyborates de terre rare dopés ytterbium. Thèse de doctorat de l' Université BORDEAUX 1.
- [23] <http://www.cyberstar.fr/CZpullers.html>
- [24] Lucian Gheorghe (2007). Les oxoborates non linéaires $Gd_{1-x}R_xCa_4O(BO_3)_3$, R = (Lu, Sc, Nd): croissance cristalline et propriétés optiques. Thèse de doctorat de l'Université Pierre et Marie Curie.
- [25] M. REN Jinlei (2017). Élaboration et caractérisation de monocristaux de borate pour la conversion de fréquence laser dans le domaine UV Thèse de doctorat de l' Université Pierre et Marie Curie.
- [26] Simon Ilas (2014). Élaboration et caractérisation de matériaux non linéaires pour la conception de dispositifs laser émettant dans l'ultraviolet. Thèse de doctorat de l'Université-Pierre et Marie Curie .
- [27] A. Benmeddour (2010). Etude et simulations numériques des contraintes thermomécaniques dans le silicium photovoltaïque. Thèse de doctorat de l' Université de Constantine.
- [28] Benjamin Gallien (2016). Contraintes thermomécaniques et dislocations dans les lingots de silicium pour applications photovoltaïques. Thèse de doctorat de l' Université de Grenoble.
- [29] A.BENDERRADJI (2012). Instabilités thermoconvectives dans un canal horizontal soumis à un phénomène de convection mixte. Thèse de doctorat de l' Université de Batna.
- [30] A. Abdelali (2012). Etude expérimentale des instabilités thermoconvectives de Rayleigh-Bénard dans les fluides viscoplastiques. Thèse de doctorat de l' Université Grenoble.
- [31] https://fr.wikipedia.org/wiki/Instabilité_de_Rayleigh-Bénard.
- [32] F. Gauthier (2008). Convection turbulente dans une cellule de Rayleigh-Bénard cryogénique: de nouveaux éléments en faveur du Régime Ultime de Kraichnan. Thèse de doctorat de l' Université Joseph Fourier Grenoble I.
- [33] Li, Y.R.; Peng, L. ; Shi,W.Y.; Imaishi, N. (2006): Convective Instability in Annular Pools. FDMP: Fluid Dynamics & Materials Processing, vol.2, no.3, pp.153-165.
- [34] D.T.J.Hurle (1983), convective transport in melt growth systems. J. Crystal Growth, vol.65, pp.124-132
- [35] Kuroda, E., Kozuka, H., Takana, Y., (1982): Influence of growth conditions on melt interface temperature oscillations in silicon Czochralski growth. J. Crystal. Growth 68, 613.

- [36] Kanda, T.; Hourai, M.; Miki, S.; Shigematsu, T.; Tomokage, H.; Miyano, T.; Morita, H.; Shintani, A. (1996): Influence of Melt-temperature Fluctuations on Striation Formation in Large-Scale Czochralski Si Growth Systems. *J. Crystal Growth* vol.166, pp. 663 -668.
- [37] Jones, A.D.W., (1989). Flow in a model Czochralski oxide melt. *J. Crystal. Growth* 94, 421–432. S.
- [38] Elwell, D.; Andersen, E; (1989) Temperature oscillations in silicon melts, *J. Crystal Growth* vol.98, pp. 667 -678.
- [39] Kobayashi, S. Miyahara, T. Fujiwara, T. Kubo and H. Fujiwara, (1991). Turbulence heat transfer through the melt in silicon Czochralski growth, *J. Crystal Growth*, vol.109, pp. 149-154.
- [40] Visman D, Gräbner O and Müller G,(2001). Three dimensional numerical simulation of thermal convection in an industrial Czochralski melt: comparison to experimental results, *J. Crystal. Growth*, Vol.233, pp.687-698.
- [41] P. Hintz, D. Schwabe, H. Wilke, (2001) Convection in a Czochralski crucible – Part 1: non-rotating crystal. *J. Crystal. Growth*, 222, 343-355.
- [42] D. Schwabe (2007): Convective instabilities in complex systems with partly free surface; Second International Symposium on Instability and Bifurcations in Fluid Dynamics. *Journal of Physics: Conference Series* 64 012001.
- [43] R. Nowak, E. Fornalik, J. Groniak (2008): Experimental analysis of velocity and temperature fields in a system similar to the Czochralski method of single crystal growth. *Archives of thermodynamics*. Vol. 29, No. 3, 1-20
- [44] Teitel Maxim; Schwabe Dietrich; Gelfgat Alexander Yu (2008). Experimental and computational study of flow instabilities in a model of Czochralski growth, *Journal of crystal growth*, vol. 310, n°7-9, pp. 1343-1348.
- [45] Munakata T., Someya S., Tanasawa I. (2004) : Effect of high frequency magnetic field on CZ silicon melt convection, *Int. J. Heat and Mass Transfer*, 47, No. 21, 4523-4533.
- [46] Haslavsky V., Miroshnichenko E., Kit E., and Gelfgat A. Yu. (2011). On experimental and numerical prediction of instabilities in Czochralski melt flow configuration. *J. Cryst. Growth*, 318, 156-161.
- [47] Haslavsky V, Miroshnichenko E., Kit E., and Gelfgat A. Yu .(2013): Experimental Modeling of Czochralski Melt Flow with a Slow Crystal Dummy Rotation .*A Phys Pol A*.124.193.
- [48] Mihelcic, M., Wingerath, K., Pirron, Chr., (1984). Three-dimensional simulations of the Czochralski bulk flow. *J. Cryst. Growth* 69, 473–488.
- [49] Bottaro, A., Zebib, A., (1989). Three-dimensional thermal convection in Czochralski melt. *J. Cryst. Growth* 97, 50–58.
- [50] H. kopetsch, (1989), Numerical simulation of the czochralski Bulk flow of silicon on a domain confined by a moving crystal-melt interface and curved melt-gas meniscus, physico chemical hydrodynamics, Vol. 11, pp. 357-375.
- [51] H. kopetsch,(1990), Numerical simulation of interface inversion in czochralski growth of oxide crystals, Vol. 102, pp. 505-528.

- [52] K. Iliev, M. Berkowski, V. Nikolov, P. Peshev, W. Piekarczyk.(1991) Conditions of existence and character of the temperature fluctuations during Czochralski growth of oxide single crystals, *J. Cryst. Growth*. Vol 108, pp. 219-224.
- [53] T.A. Kinney, D.E. Bornside and R.A. Brown,(1993), Application of turbulence modeling to the integrated Hydrodynamic thermal-capillary model of Czochralski crystal growth of silicon, *J. Cryst. Growth*, Vol. 132, pp. 551- 574.
- [54] T.A. Kinney, D.E. Bornside and R.A. Brown,(1993), Application of turbulence modeling to the integrated Hydrodynamic thermal-capillary model of Czochralski crystal growth of silicon, *J. Cryst. Growth*, Vol. 132, pp. 551- 574.
- [55] Wagner, C., Friedrich, R., Narayanan, R., (1994). Comments on the numerical investigation of Rayleigh and Marangoni convection in a vertical circular cylinder. *Phys. Fluids* 6 (4), 1425–1433.
- [56] Xiao, Q., Derby, J.J., (1995). Three-Dimensional melt flows in Czochralsky oxide growth: high-resolution, massively parallel, finite element computations. *J. Cryst. Growth* 152, 169–181.
- [57] Touihri, R., BenHadid, H. and Henry, D., (1999), On the onset of convective instabilities in cylindrical cavities heated from below. I. pure thermal case, *Phys. Fluids*, vol. 11, pp. 2078.
- [58] Visman D, Gräbner O and Müller G (2001), Three dimensional numerical simulation of thermalconvection in an industrial Czochralski melt: comparison to experimental results, *J. Cryst.Growth*, Vol.233, pp.687-698.
- [59] Enger, S., Grabner, O., Muller, G., Breuer, M., Durst, F., (2001). Comparison of measurements and numerical simulations of convection on Czochralski crystal growth of silicon. *J. Cryst. Growth* 230, 135–142.
- [60] Zhong, Z.; Jingqiu, C.; Hiroshi, M. (2003): Three-dimensional oscillatory convection of LiCaAlF₆ melts in Czochralski crystal growth, *J. Cryst. Growth*, vol. 252(4), pp. 538- 549.
- [61] Kumar V., Basu B., S. Enger, G. Brenner and F. Durst (2003), Role of Marangoni convection in Si-Czochralski melts—PartII: 3D predictions with crystal rotation. *Journal of Crystal Growth*, 255, 27.
- [62] Wagner, C., Friedrich, R., (2004):Direct numerical simulation of momentum and heat transport in idealized Czochralski crystal growth configurations. *International Journal of Heat and Fluid Flow* 25 431–443.
- [63] Gelfgat A. Yu. (2007): Three-Dimensional Stability Calculations for Hydrodynamic Model of Czochralski Growth. *J. Cryst. Growth*, 303, 226-230.
- [64] Shuxian CHEN; Y and Mingwei LI. (2007): Flow Instability of Molten GaAs in the Czochralski Configuration. *J. Mater. Sci. Technol.*, Vol.23 No.3
- [65] V.I. Polezhaev, N.V. Nikitin (2009), Interaction of the basic mechanisms of buoyancy – driven convection: fundamentals, technical and material sciences applications. *Proceedings of ITP Interdisciplinary Transport Phenomena VI: Fluid, Thermal, Biological, Materials and Space Sciences*, Volterra, Italy.
- [66] S. Hoyas, A. Gil, P. Fajardo, M.J. Pérez-Quiles (2013): Co-dimension three bifurcations in a Bénard–Marangoni problem, *Phys. Rev. E* 88 (015001).

- [67] S. Hoyas, P. Fajardo, A. Gil, M.J. Perez-Quiles (2014): Analysis of bifurcations in a Bénard–Marangoni problem: Gravitational effects ; *International Journal of Heat and Mass Transfer* 73 33–41.
- [68]. C.M. Wu, Y.R. Li, R.J. Liao: Instability of three-dimensional flow due to rotation and surface-tension driven effects in a shallow pool with partly free surface; *International Journal of Heat and Mass Transfer* 79 (2014) 968–98.
- [69] Hans J. Scheel (1985): Optimum convection conditions for Czochralski growth of semiconductors.
- [70] Lee Y.S., Chun Ch.H. (1999): Experiments on the oscillatory convection of low Prandtl number liquid in Czochralski crystal growth under an axial magnetic field, *J. Crystal Growth*, 198-99, 147-153.
- [71] H. Ben Hadid, D. Henry and R. Touihri (1997), Unsteady three-dimensional buoyancy-driven convection in a circular cylindrical cavity and its damping by magnetic field, *Journal of Crystal Growth*, vol. 180, pp. 433-441.
- [72]. Davoust, L Cowley, M.D et Merau, R., Buoyancy driven with magnetic field Part2: Experimental investigation, *Journal of fluid Mechanics* Vol 400, PP59-90 (1999).
- [73]. R. BESSAIH, M. KADJA, PH. MARTY, (1999). Effect of Wall Electrical Conductivity and Magnetic Field Orientation on Liquid Metal Flow in a Geometry Similar to the Horizontal Bridgman Configuration for CrystalGrowth", *International Journal of Heat and Mass Transfer*, Vol. 42, pp. 4345-4362.
- [74] Ph. Marty, L. M. Witkowski, P. Trombetta and T. Tomasino (1999): On The Stability of Rotating MHD Flows, *Transfer Phenomena in Magneto hydrodynamic and Electroconducting Flows*, pp. 327-343.
- [75] A. Juel, T. Mullin, H. Ben Hadid and D. Henry,(1999):Magneto hydrodynamic convection in molten gallium”, *Journal of Fluid Mechanics*, vol. 378, pp. 97-118, 1999.
- [76] A. Juel, T. Mullin, H. Ben Hadid and D. Henry (2001): Three-dimensional free convection in molten gallium , *Journal of Fluid Mechanics*, vol. 436, pp. 267-281.
- [77] R. Bessaih , M. Kadja, K. Eckert and Ph. Marty(2003): Numerical and analytical study of rotating flow in an enclosed cylinder under an axial magnetic field, *Acta Mechanica*, vol. 164, pp. 175-188.
- [78] Fontaine (1990): Modélisations axisymétrique et tridimensionnelle des aspects hydrodynamiques de la technique de Czochralski (avec ou sans encapsulant) pour la croissance des matériaux à partir d'un bain fondu. Thèse de doctorat
- [79] R.B. Brid, W.E. Stewart and E.N. Light foot, (1982):*Transport phenomena*, John Willey, New York.
- [80] F. Ladeinde and K.E.Torrance, (1991): Convection in rotating, Horizontal cylinder with radial and normal gravity forces, *J. Fluid Mech*, vol. 228, pp.361-385.
- [81] V. Parasad, H. Zhang, A. Anselmo, (1997): *Transport phenomena in Czochralski Cristal Growth Processes*, *Advance in Heat Transfer*, Vol.30, pp.313-435, Academia press.
- [82] A. Anselmo, V. Parasad, J. Koziol and K. P. Gupta, (1993): Oscillatory Convection in low Aspect Ratio Czochralski Melt, *J. Crystal growth*, Vol.134, pp. 116-140.
- [83] H. Saedi, M. Asadian, Sh. Enayati, N. Mirzaei, I. Mashayekhi Asi, J. Sabbaghzadeh (2011): The effect of crucible bottom deformation on the quality of Nd: GGG crystals grown by Czochralski method *Cryst. Res. Technol.* 46, 1229.

Références bibliographiques

- [84] Okada K. and Ozoe H. (1992): Experimental heat transfer rates of natural convection of molten gallium suppressed under an external magnetic field in either the X, Y, or Z direction, *J. of Heat Transfers*, Feb., 114, pp. 107-114.
- [85] Hua Sun.(2010): Modélisation et simulation numérique de la convection naturelle dans des mélanges binaires de gaz parfaits contenus dans des cavités: application à la condensation ou à l'évaporation surfaciques. Thèse de doctorat de l'Université Paris-Est.
- [86] Fluent User's Guide, Release 6.1. Fluent Inc., 2003.
- [87] Gambit 2.2.30 User's Guide, 2006.
- [88] S.Benkherbache (2016). Simulation numérique directe de la convection dans des tubes coaxiaux. Thèse de doctorat de l' Université de Batna.
- [89] S.V. Patankar et D.B. Spalding, (1972): A calculation procedure for heat, mass and momentum transfer in three-dimensional parabolic flows, *Int. J. Heat Mass Transfer* 15, 1787.
- [90] Chow. W. L et Rhie. C. M (1983): Numerical study of the turbulent past an airfoil with trailing edge separation. *AIAA journal* 21 1525-1532
- [91] Patankar (1980): Numerical heat transfer and fluid flow, McGraw-Hill, New-York.
- [92] H. Zhang, L. L. Zheng, V. Prasad and, D. J. Larson (1998): Diameter-Controlled Czochralski Growth of Silicon Crystals, *J. Heat Transfer* 120, 874-882.
- [93] D.D. Gray, A.Giorgini, The validity of the Boussinesq approximation for liquids and gases, *Int J Heat and Mass Transfer* 19 (1976) 545–551.
- [94] S. Paolucci, On the filtering of sound from the Navier-Stokes equations, Technical report, Sandia National Laboratory, (1982).SAND82-8257.

ملخص

طريقة السحب Czochralski هي واحدة من أهم التقنيات لإنتاج بلورات أحادية كبيرة لتصنيع أشباه الموصلات. في هذا العمل، أجرينا محاكاة رقمية ثلاثية الأبعاد غير مستقرة لنموذج Czochralski المبسط. الهدف الرئيسي هو إظهار تأثير الظروف الحرارية والحركية على بنية التدفق وتحديد ملامح السرعة وحقول درجة الحرارة لنظم التدفق المختلفة (دراسة وسطية بناء على اعداد التحكم رايلي، مارانغوني، رينولدز والحالة الحرارية على السطح الحر، ممثلة في عدد Biot). عملية المحاكاة هي بوتقة اسطوانية عامل الشكل (H / D) يساوي 1. وتعتبر السوائل المدروسة نيوتونية، غير منضغطة والخصائص الحرارية الفيزيائية ثابتة. تم اعتماد تقريب بوسينسك في هذه الدراسة. في الجزء الأول من هذا العمل تخضع البوتقة لتدرجات درجة الحرارة (شعاعية ومحورية)، التدفق الناتج هو ثابت ومتناظر محوريا. في الجزء الثاني، يؤخذ في الاعتبار تأثير سرعة الدوران على هيكل التدفق ودرجة الحرارة. في الختام، قد ثبتت تقنية استقرار التدفق الحلمي الحراري من خلال تطبيق سرعة دوران الكريستال المكيفة.

الكلمات المفتاحية: طريقة Czochralski، نمو البلورات، عدم الاستقرار، الحمل الحراري، المحاكاة العددية

RÉSUMÉ

La méthode de tirage de (CZ) est l'une des techniques les plus importantes pour produire des monocristaux de grande taille, destinées à la fabrication des semi-conducteurs. Dans ce travail, nous avons mené une simulation numérique tridimensionnelle instationnaire du modèle simplifié de Czochralski avec le code CFD Fluent. L'objectif principal est de montrer l'influence des conditions thermiques et dynamiques sur la structure de l'écoulement et de déterminer les profils des vitesses et les champs de température pour différents régimes d'écoulement (étude paramétrique en fonction des paramètres de contrôle Rayleigh, Marangoni, Reynolds et la condition thermique à la surface libre, représentée par le nombre de Biot). Le procédé simulé est un creuset cylindrique ayant un rapport de forme (H/D) égal à 1. Les fluides étudiés sont considérés newtoniens et incompressibles à propriétés thermo physiques constantes. L'approximation de Boussinesq est adoptée dans cette étude. Dans une première partie de ce travail le creuset est soumis à des gradients de température (radial et axial), l'écoulement résultant est stationnaire et axisymétrique. Dans la deuxième partie, l'effet de la vitesse de rotation sur la structure de l'écoulement et le champ de température est considéré. En conclusion, la technique de stabilisation d'écoulement de convection des fluides à faible nombre de Prandtl (semi-conducteurs) par l'application d'une vitesse de rotation du cristal adéquate, s'est avérée concluente.

Mots clés : Méthode de Czochralski, Croissance cristalline, Instabilités, Convection, Simulation numérique

ABSTRACT

The Czochralski pulling method is one of the most important techniques to produce large single crystals, for manufacturing of semiconductors. In this work, we conducted an unsteady three-dimensional numerical simulation of the simplified model of Czochralski using the Fluent code. The main objective is to show the ability of the code to model this type of flow and determine the velocity profiles and the temperature field for various flow regimes (parametric study based on control parameters). The simulated geometry is a cylindrical crucible with an aspect ratio (H / D) of 1. The studied fluids are considered to be newtonian and incompressible with constant physical properties, except for the density in the term of gravity and the surface tension in the term of the thermo capillary force. The Boussinesq approximation is adopted in this study. In the first part of this work the crucible is submitted to temperature gradients (radial and axial), the resulting flow is stationary and axisymmetric. In the second part, the effect of the rotational speed on the flow structure and the temperature field is considered. In conclusion, the technique of stabilizing the convection flow by the application of an adapted crystal rotational speed has been proven.

Key words: Czochralski method, Crystal growth, Instabilities, Convection, Numerical simulation.