

REPUBLIQUE ALGERIENNE DEMOCRATIQUE ET POPULAIRE
Ministère de l'enseignement supérieur et de la recherche
Université Mouloud Mammeri de Tizi-Ouzou
faculté génie de la construction
Département de génie mécanique



Mémoire de fin d'études

En vue de l'obtention du diplôme de Master

Spécialité Génie Mécanique

Option : Energétique

présenté

par

M^{elle} GHEDDACHE ZINEB

Thème

***EFFETS DU COEFFICIENT
D'ECHANGE CONVECTIF SUR
LA CROISSANCE
CRISTALLINE DU SAPHIR PAR
LA METHODE
HEM***

Dirigé par : **Dr. FAIZA MOKHTARI-MERAH**

Promotion : 2013/2014

Remerciements

Je voudrai remercier en premier ma promotrice madame F. Mokhtari pour l'intérêt qu'elle a manifesté à mon travail, pour sa patience et aussi sa disponibilité

Je voudrai aussi exprimer ma profonde gratitude à Mr Ziani et Mr Guezaoui pour leurs précieux conseils

Ma reconnaissance va également à tous mes enseignants qui m'ont aidé à réaliser ce travail, pour leur générosité avec laquelle il m'ont fait bénéficier de leur expérience

Je remercie Mr Mecheri et Gaouir massininssa, mes amies lynda et safia pour leur aide

Je remercie aussi toutes les personnes ayant participé à l'aboutissement de ce travail

Zineb

A

Ma mère

&

La mémoire de mon père

Liste des figures

Figure I.1: Quelques cristaux naturels.....	5
Figure I.2. Schéma du dispositif de Verneuil.....	8
Figure I.3 : Schéma de principe de la méthode de la Zone Flottante (FZ).....	9
Figure I.4: Schéma de principe de la méthode Czochralski.....	10
Figure I.5: schéma de la croissance cristalline par la méthode de kyropoulos.....	11
Figure I.6: Schéma de principe de la méthode Bridgman verticale (VB).....	12
Figure I.7: Schéma de principe de la méthode Bridgman horizontale (HB).....	12.
.....	13
Figure I.8: Schéma du four de croissance HEM.....	16
Figure I.9: Schéma du principe de la méthode HEM.....	17
Figure I.10: Lingots de saphir produits par la technique HEM. (a) : dans le creuset, (b) : après extraction du creuset, (c): lingot à interface solide-liquide plane, (d): lingot à interface solide-liquide sous forme de dôme.....	20
Figure II.1 : Schéma du domaine de calcul	23
Figure III.1 : Interface de gambit.....	34
Figure III.2 : Fenêtre d'outils d'opération.....	34
Figure III.3 : Construction de la géométrie	35
Figure III.4 : Génération de maillage.....	35
Figure III.5: Incorporation des conditions aux limites.....	36
Figure III.6: Boutons d'outils.....	36
Figure III.7: Fenêtre de contrôle global.....	36
Figure III.8 : fenêtre de démarrage.....	37
Figure III.9: Interface du code Fluent.....	38
Figure III.10: Volume de contrôle.....	41
Figure III.11: Etapes utilisées dans la méthode des volumes finis.....	42
Figure IV.1 : Maillage du domaine de calcul.....	44

Figure IV.2: Distribution de la température (droite) et le front de solidification à (gauche) à $t=20s$ pour différentes valeur de h_e46

Figure IV.3: Distribution de la température (à droite) et le front de solidification à (gauche) à $t=50s$ pour différentes valeurs du facteur d’aspect radial46

Figure IV.4 : Distribution de la température(droite) et le front de solidification à (gauche) à $t=100s$ pour différentes valeurs de h_e47

Figure IV.5 : Distribution de la température à (droite) et le front de solidification à (gauche) à $t=180s$ pour différentes valeurs de h_e47

Figure IV.6: Evolution du front de solidification en fonction du h_e avec toutes les valeurs..49

Figure IV.7 : L’avancement du front de solidification en fonction du temps pour différentes valeurs de coefficient d’échange convectif.....50

Figure IV.8 : Evolution du nombre de Nusselt maximal pour différentes valeurs de h_e ...52

Figure IV.9: Evolution du de Nusselt minimal pour les différentes valeurs de h_e52

Figure IV.10 : Distribution de vitesses axiales (à gauche) et radiales (à droite) à $t=20s$ pour différentes valeurs de h_e 53

Figure IV.11: Distribution de vitesses axiales (à gauche) et radiales (à droite) à $t=50s$ pour différentes valeurs de h_e53

Figure IV.12 : Distribution de vitesses axiales (à gauche) et radiales (à droite) à $t=100s$ pour différentes valeurs de h_e54

Figure IV.13 : Distribution de vitesses axiales (à gauche) et radiales (à droite) à $t=180s$ pour différentes valeurs de h_e54

Figure IV.14 : Distribution de pression et lignes du courant à $t=20s$ pour différentes valeur de h_e55

Figure IV.15 : Distribution de pression et lignes du courant à $t=50s$ pour différentes valeurs de h_e56

Figure IV.16 : Distribution de pression et lignes du courant à $t=100s$ pour différentes valeurs de h_e56

Figure IV.17 : Distribution de pression et lignes du courant à $t=180s$ pour différentes valeurs de h_e57

Figure IV.18 : Evolution de la pression maximal pour différente valeur de h_e 58

Figure IV.19 : Evolution de la pression minimal pour différente valeurs de h_e58

Figure IV.20 : Courbe de la fonction de courant maximale en fonction de h_e59

Liste des tableaux

Tableau I.1: Classification des techniques de cristallisation	15
Tableau II.1 : Propriété géométrique du système de croissance.....	31
Tableau II.2: Propriétés thermophysiques du saphir.....	31
Tableau II.3 : Valeurs des nombres adimensionnels.....	32

Nomenclature des notations et symboles utilisés

A_{mush}	Constante caractéristique de l'interface de croissance
A_R	Facteur d'aspect radial
Cp_l	Capacité calorifique du liquide du saphir
f_l	Fraction liquide
g	Accélération de la pesanteur
Gr	Nombre de Grashof
H	Hauteur du creuset
k	Conductivité thermique du saphir liquide
L	Chaleur latente de fusion
P'	Pression
P	Pression caractéristique
Pr	Nombre de Prandtl
Q	Terme source
r	Coordonnée radiale
R_c	Rayon de l'échangeur
R	Rayon du creuset
Ra	Nombre de Rayleigh
Ste	Nombre de Stephan
t'	Temps
t	Temps caractéristique
T	Température
T_c	Température du creuset
T_f	Température de fusion
V	Vecteur vitesse
ΔT_{ex}	Température d'excès du chauffage
V_c	Vitesse caractéristique
z	Coordonnée axiale
α	Diffusivité thermique
β	Coefficient de dilatation thermique
μ	Viscosité dynamique
ρ	Densité du saphir
ρ_0	indique la densité de référence
τ	La différence entre la température dans le bain et la température de fusion T_f
ν	Viscosité cinématique
Ψ	Fonction courant
Ψ_{max}	Intensité maximale de la fonction courant
Θ	Température adimensionnelle
Nu	Nombre de Nusselt

Tables des matières

INTRODUCTION GENERALE	1
Chapitre I. Revue bibliographique	3
Introduction	3
I.1. Phénomène de la cristallisation	3
I.1.1. Cristallisation par refroidissement.....	4
I.1.2. Description du problème (Germination et croissance)	5
I.2. Principales méthodes de la croissance cristalline	6
I.2.1. croissance cristalline à partir d'une solution	6
I.2.2. croissance cristalline par l'état solide	6
I.2.3. Croissance cristalline à partir de la phase vapeur	6
I.2.4. Croissance cristalline à partir de la phase liquide	7
I.2.4.1. Croissance sans creuset	7
a. Méthode de Verneuil	7
b. Méthode de la zone fondue flottante	8
I.2.4.2. Méthode de tirage	9
a. Méthode de tirage de Czochralski	9
b. Méthode de Kyropoulos	11
c. La méthode de tirage sur piédestal	12
I.2.4.3. Croissance dans un creuset	12
a. Méthode de Bridgman	12
b. Méthode de l'échangeur de chaleur HEM	13
I.3. Avantages, inconvénients et critères de choix de la technique de croissance cristalline... 14	
I.4. Technique de la croissance cristalline HEM	16
I.4.1. Principe de la méthode HEM	16
I.4.2. Etapes de la méthode HEM	17
I.4.3. Matériaux tirés par cette méthode	18
I.5. Résumés de quelques travaux effectués pour l'étude de la méthode HEM	18
1.5.1. Avantages de la méthode HEM	20
1.5.2. Inconvénients de la méthode HEM	21

Conclusion	22
Chapitre II: Formulation de la problématique	23
Introduction	23
II.1. Description du problème	23
II.2. Hypothèses simplificatrices	24
II.2.1. Approximation de Boussinesq	24
II.3. Equations dimensionnelles	25
II.4. Conditions aux limites	26
II.5. Mise sous forme adimensionnelle	27
II.5.1. adimensionnement des équations.....	27
II.5.2. Conditions aux limites adimensionnelles	28
II.5.3. Nombres adimensionnels	29
II.5.4. Propriétés dimensionnelles et adimensionnelles du système et du fluide étudiés	31
Conclusion	32
Chapitre III : Description du code de calcul	33
Introduction	33
III.1. Présentation des logiciels Gambit et fluent	33
III.1.1. Gambit	33
a. Fenêtre d'outils d'opération	34
b. Construction de la géométrie	34
c. Génération de maillage.....	35
d. Incorporation des conditions aux limites	35
e. Boutons d'outils	36
f. Fenêtre de contrôle global	36
III.1.2 Code Fluent	37
III.1.2.1. Interface du code Fluent	37
III.1.2.2. Condition aux limites utilisées par le code FLUENT	39
III.1.2.3. Modèle Numérique utilisée par le code FLUENT	39
III.1.2.4. Méthode des volumes finis	40
III.1.2.5. La méthode enthalpique	42
Conclusion	43
Chapitre IV : Résultats et discussion.....	44
Introduction	44

IV.1. Maillage du domaine sous Gambit.....	44
IV.2. Effet du coefficient d'échange convectif de l'échangeur de chaleur sur le front de solidification.....	45
IV.3. Effet du coefficient convectif de l'échangeur sur la température.....	50
IV.4. Effet du coefficient convectif de l'échangeur sur les composantes de la vitesse	52
IV.5. Effet du coefficient convectif de l'échangeur sur la pression	55
IV.6. Effet du coefficient d'échange convectif de l'échangeur sur la fonction courant	58
Conclusion	60
Conclusion générale.....	61
Références bibliographique.....	63
Annexes	

INTRODUCTION GENERALE

Le vingtième siècle a connu la naissance et le développement de plusieurs nouvelles disciplines en physique : la relativité, la physique quantique, ... et la croissance cristalline. Le processus de cette dernière est simple et s'inspire sur la nature, il consiste à mettre un germe de matériau dans une solution ; un solide à la même structure que le germe sera alors obtenu. Bien que cette manière de faire soit simple, les premiers cristaux obtenus étaient, jusqu'aux années cinquante, petits et imparfaits parce qu'ils contenaient des impuretés indésirables et surtout des défauts dans le réseau cristallin.

Les études sur la croissance des cristaux ont pris une place significative dans la science des matériaux contemporaine avec la découverte du transistor en 1948 et l'émergence d'une technologie révolutionnaire d'électronique à l'état solide (qui dépend directement de la technologie des monocristaux). Dès lors, les techniques de croissance cristallines ont été développées afin de subvenir aux besoins de la recherche fondamentale et de la recherche appliquée.

En Asie et aux USA, la croissance cristalline s'est largement développée à partir des applications militaires, mais également civiles et spatiales. Dans le domaine d'éclairage par exemple, la croissance de silicium, d'oxyde de zinc, de nitrure de gallium et de saphir prennent de plus en plus place avec le lancement de certains programmes sur ces matériaux.

En France en 2011, ils ont lancé un programme pour la production de silicium par la méthode de Kyropoulos, mais jusqu'à maintenant ils n'ont pas publié les résultats de ce projet.

En Algérie, le domaine de la croissance cristalline est peu connu, mais récemment, et à cause du développement technologique (surtout le domaine des énergies renouvelables) et la nécessité de fabriquer quelques matériaux à savoir le silicium, le zinc, le saphir, ... etc, les centres de recherche comme le CDTA (Centre de Développement Technologique Avancé) et l'UROF (Unité de Recherche pour l'Optique et Phonétique) ont lancé des programmes pour étudier et pour développer le domaine de la croissance cristalline.

La présente étude concerne la simulation numérique du transfert thermique et de l'écoulement qui se produisent dans un creuset de HEM pour la croissance du silicium et du saphir.

Le premier chapitre consiste en une revue bibliographique sur la croissance cristalline et les différentes techniques de croissance et une synthèse bibliographique des travaux sur la méthode Heat Exchanger Method dite HEM, sur laquelle se base l'ensemble du mémoire, est présentée à travers son principe, son historique est un recensement des matériaux qu'elle a produits jusqu'à présent. L'intérêt de cette technique est démontré par une présentation de ses avantages (nous citerons aussi quelques inconvénients).

Dans le deuxième chapitre on va présenter la géométrie qu'on va utiliser dans la simulation et dans le troisième chapitre on va présenter le code de calcul de la simulation en dernier chapitre on va voir les résultats obtenus et leur interprétations.

Nous terminons ce mémoire par une conclusion générale, en donnant les perspectives de ce travail.

Chapitre I : Revue bibliographique

Introduction :

La croissance cristalline des monocristaux est plus difficile à faire que des matériaux poly cristallins, et l'effort supplémentaire n'est justifié que si les monocristaux ont des propriétés exceptionnelles. Leurs principaux mérites sont l'anisotropie, l'uniformité de la composition et l'absence de joints de grains inévitablement présents dans des matériaux polycristallins.

Dans ce chapitre on va commencer par expliqué l'aspect physique-chimique de la cristallisation pour mieux comprendre ce phénomène qui est la base de la croissance cristalline, puis on va citer quelque méthodes de croissance.

la méthode de l'échangeur thermique, dite Heat Exchanger Method ou HEM, sur laquelle se base l'ensemble du mémoire, est présentée à travers son principe, son historique est un recensement des matériaux qu'elle a produit jusqu'à présent. L'intérêt de cette technique est démontré par une présentation de ses avantages (nous citerons aussi quelques inconvénients).

I.1. Phénomène de la cristallisation

La cristallisation, au sens large, est le changement d'état qui donne lieu dans un solide, un liquide ou une vapeur, à la formation d'une phase solide cristallisée, c'est à dire à une organisation géométrique régulière. Dans la pratique industrielle, elle est considérée comme la formation de cristaux d'un ou plusieurs solutés, à partir de leur solution dans un liquide, le solvant. Les cristaux sont ensuite Retirés de la solution restante, appelée eau-mère ou liqueur-mère, par des opérations de séparation solide-liquide, telles que la filtration et la centrifugation. Dans ce cas la Cristallisation peut être envisagée approximativement comme l'inverse de la dissolution [1,2]

Pour qu'une cristallisation ait lieu, il est nécessaire de créer un état de sursaturation, autrement dit le principe récurant pour provoquer une cristallisation est de modifier l'état du système pour engendrer un déséquilibre thermodynamique provoquant l'apparition d'une sursaturation. De ce fait le système va chercher à retourner à un nouvel état d'équilibre thermodynamique pour cela il faut provoquer une cristallisation du liquide pour diminuer la concentration en soluté du produit et donc ramener la sursaturation absolue a une valeur nulle, c'est la naissance des cristaux ainsi que leur croissance qui consomment la sursaturation.[1,2].

I.1.1. Cristallisation par refroidissement

À l'exception du mercure, lorsqu'on refroidit un métal ou un alliage en fusion à température ambiante entraîne une solidification. Le passage de la phase liquide à la phase solide s'appelle un changement de phase. Lorsqu'un métal pur en fusion est refroidi, sous pression constante (pression atmosphérique par exemple), le changement de phase s'effectue toujours à une température fixe, les deux phases liquide et solide coexistent.

La cristallisation étant un phénomène exothermique, au passage par le point de fusion, la chaleur perdue par le refroidissement de l'alliage est temporairement compensée.

Chaque minéral possède son point de fusion qui correspond aussi à son point de cristallisation à une pression donnée. Plusieurs minéraux de la croûte terrestre cristallisent à partir d'un magma, c'est-à-dire, de la roche fondue. Cette cristallisation obéit à certaines règles. Dans un magma dont la température est supérieure à 1200° C, comme au niveau du manteau supérieur par exemple, les minéraux sont tous sous leur phase liquide. Si ce magma est introduit dans la croûte terrestre, il subit un abaissement de pression et se refroidit progressivement. Avec un abaissement de la température du magma, les minéraux dont la température de cristallisation devient progressivement plus basse cristallisent.

A mesure que les minéraux cristallisent dans la chambre magmatique c.à.d. dans la poche où s'est introduit le magma, les cristaux sédimentent, s'accumulent à la base de la chambre. Il se fait donc une ségrégation, et les roches issues de la cristallisation du magma (roches ignées) auront des assemblages de minéraux différents selon qu'on est à la base, au milieu ou au sommet de la chambre magmatique. [1,2]



Figure I.1: Quelques cristaux naturels [1]

I.1.2. Description du problème (Germination et croissance) :

Dans son sens le plus large, le terme de germination (*en anglais nucléation*) désigne le processus de génération au sein d'une phase mère métastable de germe d'une phase nouvelle est plus stable, susceptible de se développée spontanément en fragments plus importants de cette phase nouvelle et plus stable.

Le mécanisme de processus de germination correspond à la transformation d'un très petit volume de réactant en produit, la réaction se poursuivant par croissance du germe. Dans le cas des réactions entre un gaz et un solide, les germes apparaissent à la surface des particules de solide initial, souvent préférentiellement en des sites particuliers relatifs aux défauts de Surface (marches, arêtes, dislocations, joints de grains, etc. ...). [3]

La croissance correspond au dépôt d'un germe secondaire sur substrats cohérent puis à la complétion de la couche du cristal sur toute la largeur du cristal formé par germination.

Comme nous l'avons vu plus haut la cristallisation est la juxtaposition de deux phénomènes soit la formation de nouveaux germes et la croissance de ce dernier, du fait que d'autre part la sursaturation est la principale variable dans ce processus

La croissance : dans un milieu sursaturé un cristal va grandir en adsorbant une partie de la sursaturation pour permettre un équilibre thermodynamique entre la phase liquide et solide, l'adsorption du produit par le cristal est appelé croissance, étant donné que les

dimensions ainsi que la masse du cristal vont croître.

Dans le cadre de la cristallisation, nous parlons d'adsorption et non pas d'absorption car comme le montre la définition suivante, nous sommes effectivement dans le cadre de l'adsorption. [2]

I.2. Principales méthodes de la croissance cristalline

I.2.1. croissance cristalline à partir d'une solution

Des cristaux peuvent croître à partir d'une solution à condition que celle-ci soit sursaturée, c'est-à-dire qu'elle contient plus de soluté qu'elle ne peut en contenir lorsqu'elle est en équilibre avec le solide. Trois techniques principales pour obtenir cette sursaturation requise :

- ✓ le refroidissement lent de la solution (dite la méthode de croissance en flux)
- ✓ l'évaporation lente du solvant.
- ✓ l'établissement d'un gradient de température entre une zone chaude contenant un excès de solide non-dissous, et une zone plus froide dans laquelle croît le cristal.

L'avantage essentiel d'un tel processus de croissance est le contrôle qu'il permet sur température de croissance, donc sur la sursaturation. Ainsi rend-il possible la croissance de cristaux qui présentent une fusion non-congruente ou des variétés allotropiques de basse température.

I.2.2. croissance cristalline par l'état solide

L'obtention de cristaux à partir de l'état solide ou recristallisation, consiste en la transformation, à l'état solide, d'un échantillon polycristalin à grain fins en un échantillon constitué d'un seul, ou au plus de quelques grands cristaux à des températures proches de la température de fusion. Pour cela, un des grains doit être consommé et un nouveau grain doit être formé par nucléation adéquate et grossir au détriment des autres.

L'accomplissement de ce type de transformation est généralement le résultat d'un traitement thermique ou /et d'une déformation plastique, suivi d'un recuit. La recristallisation est utilisée surtout pour les métaux, mais elle a aussi été appliquée pour NaCl, Al₂O₃ ou encore les carbures de Ti, Hf, Zn, Nb, V et Ta

I.2.3. Croissance cristalline à partir de la phase vapeur

On peut distinguer deux types de processus en phase vapeur. Le premier met en jeu le transport direct de la matière par évaporation ou sublimation depuis une zone chaude vers une zone froide de croissance : c'est le transport physique ou PVT (Physical Vapor Transport). Cette méthode est couramment utilisée pour la croissance de composés (Zn, Cd) sous vide

ou sous débit gazeux. Dans le deuxième type le matériau, transporté sous forme de composé chimique (souvent un halogénure), se compose dans une zone de croissance pour redonner le solide de départ, on parle de transport chimique ou CVT (Chemical Vapor Transport).

Dans les deux cas, la croissance peut être soit auto nucléée, soit avoir lieu par épitaxie, sur le germe du même matériau que celui a croître ou un autre matériau de paramètres cristallins proches.[4]

I.2.4. Croissance cristalline à partir de la phase liquide

Si une substance a un point de fusion précis comme dans le cas des substances élémentaires pures et des composés présentant une fusion congruente , la cristallisation peut être réalisée en procédant à la fusion du solide poly-cristallin ,puis à un abaissement graduel de la température du liquide en dessous de la température de fusion .ce type de processus conduit généralement à une masse poly-cristalline cependant, en prenant des précaution particulières, la croissance d'un monocristal peut être favorisée. Les méthodes mettant en jeu ce type de processus peuvent être classées en trois groupes selon que la fusion et la solidification ont lieu ou non dans un creuset.la technique HEM faisant partie de cette famille.

I.2.4.1.Croissance sans creuset

Il existe deux méthodes qui font appel à aucun moment du processus de fusion-solidification à un creuset.

a. Méthode de Verneuil

La méthode de Verneuil est une technique utilisée depuis plus d'un demi-siècle (1902) pour le besoin de bijouterie et horlogerie. Elle est usée pour des matériaux ayant des hauts points de fusion. C'est un procédé de fusion à flamme. Elle est restée pratiquement inchangée jusqu'à ce jour.

Le procédé consiste en un réservoir de poudre du matériau à cristalliser avec un mécanisme de d'alimentation de ce dernier, deux sources H_2 et O_2 un moufle réfractaire et un dispositif de déplacement du cristal

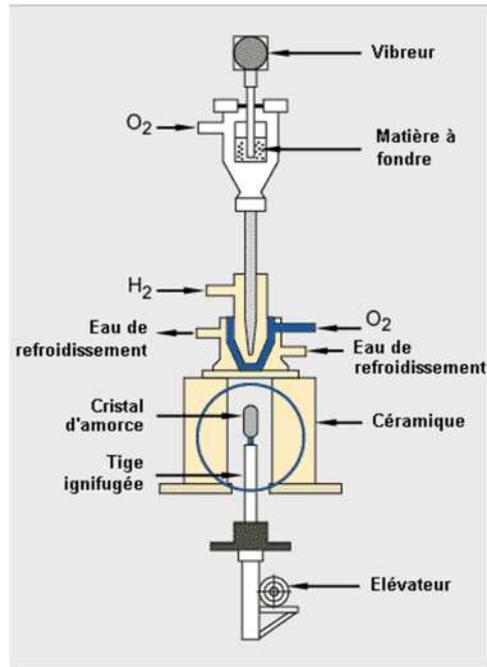


Figure I.2. Schéma du dispositif de Verneuil

Dans un premier temps la poudre de matériau cristallisé fond à l'aide d'une flamme d'un chalumeau oxyhydrique (H₂ et O₂). Après la fusion la poudre fondue tombe sur un germe cristallin qui grandit continuellement comme une stalagmite et fait ainsi naître un cristal.

Cette technique est utilisée dans l'industrie des solides et des lasers solides et lasers à rubis et pour la production du saphir.

b. Méthode de la zone fondue flottante

Dans la méthode de la zone flottante (1953), un barreau polycristallin est chauffé localement, créant ainsi une zone fondue maintenue entre les deux parties solides par les forces de tension superficielles. [4]

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 polycristal et les germes sont déplacés vers le bas tout en assurant la fusion locale du matériau (Figure I.3). Le diamètre du cristal en train de croître peut être modifié en diminuant ou en augmentant la vitesse et les dimensions de la zone fondue.

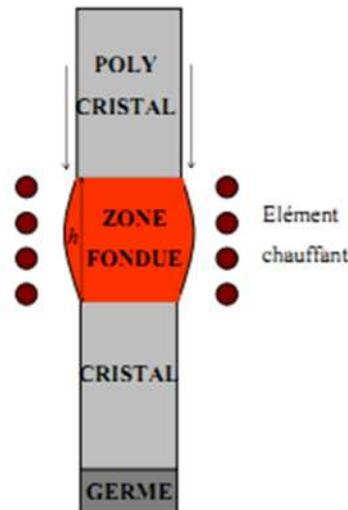


Figure I.3 : Schéma de principe de la méthode de la Zone Flottante (FZ) [5]

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. 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 a été obtenu. Un autre inconvénient est l'existence de la convection Marangoni, résultant du gradient de tension interraciale sur les surfaces libres, et son influence sur les profils de concentration. [5]

I.2.4.2.Méthode de tirage

Le tirage des cristaux à partir de leurs bains fondus est une méthode de croissance courante, en particulier grâce à la rapidité avec laquelle on peut obtenir de gros cristaux, de bonne qualité on cite les méthodes les plus connu.

a. Méthode de tirage de Czochralski

Un germe monocristallin est plongé dans le bain fondu du matériau, la solidification s'opère en déplaçant le germe vers le haut. Le cristal ainsi que le creuset sont animés d'un mouvement de rotation. Lorsque l'on tire le germe vers le haut, la portion qui cristallise

adopte la forme d'un cylindre.

Ce procédé est largement utilisé dans l'industrie pour élaborer des monocristaux de silicium de diamètre allant jusqu'à 14mm (voir 16mm en laboratoire), de germanium mais aussi des monocristaux III-V (colonne du tableau périodique) et notamment le GaAs et l'InP. Pour les semi-conducteurs III-V, l'élément de la colonne V est souvent volatil et nécessite l'emploi d'un encapsulant et d'une Contre-pression afin de limiter son évaporation.

Les avantages du procédé CZ proviennent de l'absence de contact cristal- creuset et de la possibilité d'élaborer des cristaux de diamètre important avec des vitesses de tirage relativement élevées (au moins de l'ordre du centimètre par heure).

Par contre, la stabilisation de la position de l'interface de solidification et du diamètre nécessitent un gradient de température axial élevé (de l'ordre de $50^{\circ}\text{C}/\text{cm}$), ce qui augmente les contraintes thermomécaniques dans le cristal. On verra par la suite que ces contraintes induisent des défauts dans les cristaux. Pour cette raison, cette méthode n'est pas adaptée à la croissance de semi-conducteurs II-VI qui sont très sensibles à ces contraintes.[5]

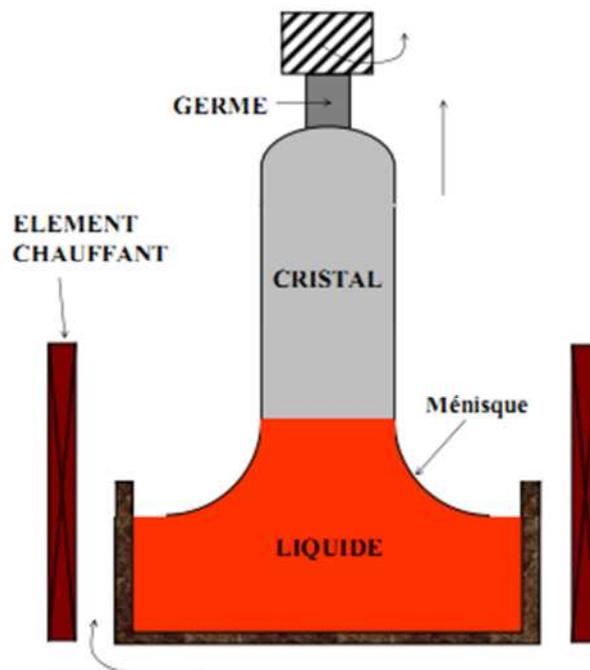


Figure I.4: Schéma de principe de la méthode Czochralski [5]

b. Méthode de Kyropoulos

Une autre méthode de la croissance cristalline à partir du bain fondu est la méthode de Kyropoulos, cette méthode s'apparente à la méthode de Czochralski sur le principe (croissance du cristal à partir de sa phase liquide sur un germe orienté placé dans un gradient thermique). toutefois, la cristallisation est réalisée sans translation, ni rotation du germe mis en contact avec le bain liquide, mais par un simple abaissement de la température.

La croissance se réalise dans le liquide et l'interface solide-liquide est moins sensible à l'évaporation des éléments légers. du fait qu'il n'y ait pas de rotation du germe, il n'y a pas de convection forcée et par conséquent l'apport de la matière se fait par convection naturelle. L'apport de la matière est donc plus lent que pour la méthode de Czochralski. L'amorce de la croissance est réalisée par la méthode de Czochralski avec utilisation de la rotation et de la translation du germe. Une fois la partie d'affinage terminée, la rotation et la translation du germe est arrêtée. Ainsi, les seuls paramètres de croissance mis en jeu sont la rampe de la pente de refroidissement et les gradients thermiques. Le schéma de cette méthode est représentée la dessous sur la figure suivante :

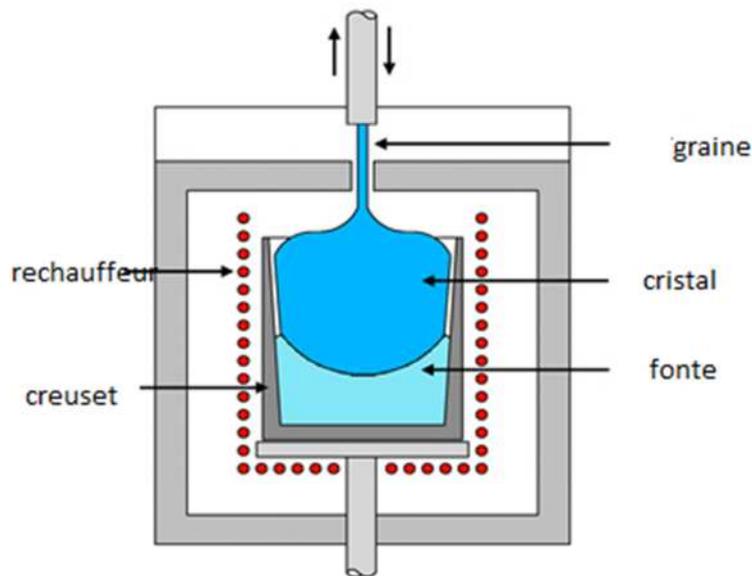


Figure I.5: schéma de la croissance cristalline par la méthode de kyropoulos

c. La méthode de tirage sur piédestal

La méthode de tirage sur piédestal est une autre variante qui dérive de la méthode de la zone flottante. Un bain fondu est formé sur le haut du barreau polycristallin et le germe est plongé dans ce bain ; la croissance a alors lieu comme lors de la technique Czochralski. Les vitesses de translation du germe et du barreau par rapport au chauffage (par faisceau d'électrons, laser,...) sont ajoutées pour avoir un rapport correct entre les sections du cristal et du barreau. [4]

I.2.4.3.Croissance dans un creuset

La plupart des méthodes actuelles de fusion-solidification dans un creuset se base sur la technique de Bridgman (1925),

a. Méthode de Bridgman

Cette technique repose sur le déplacement d'un creuset dans un four à gradient de température et de Stobert (1925) dont la méthode inversement, consiste a un déplacement du gradient de température le long d'un creuset fixe.

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) de la méthode Bridgman horizontale (HB).

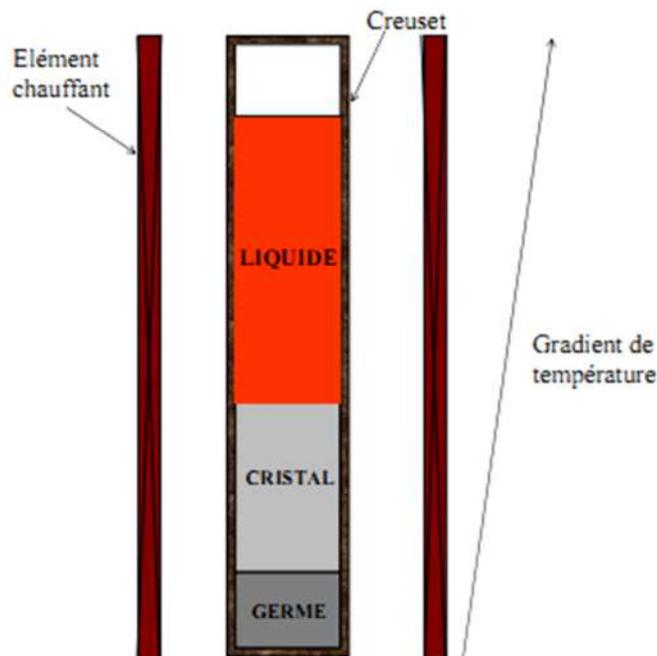


Figure I.6: Schéma de principe de la méthode Bridgman verticale (VB)

Il existe plusieurs variantes de la méthode Bridgman: quand le creuset est fixe, un simple refroidissement du four permet la solidification. On parle de méthode Vertical Gradient Freeze (VGF) ou Horizontal Gradient Freeze (HGF).

On distingue parmi les méthodes VB et VGF le procédé « Stockbarger » ou « trois zones » (une zone chaude et une zone froide séparées par une zone à gradient de température constant), le procédé « multi-zones » (le gradient est ajustable, et le profil de température n'est pas forcément linéaire) et le procédé « résistor unique » (le gradient est fixé).

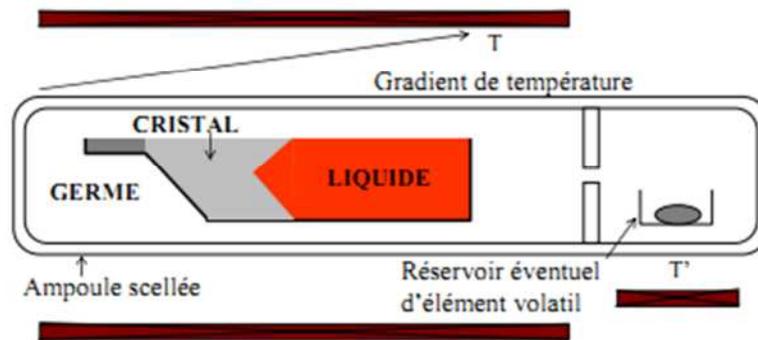


Figure I.7: Schéma de principe de la méthode Bridgman horizontale (HB)

Le contrôle de la composition du bain peut s'effectuer également en disposant dans l'enceinte un réservoir d'élément volatil dont la température est contrôlée.

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°C/cm. Le creuset permet de contrôler facilement les dimensions et la forme du cristal. L'inconvénient majeur du procédé Bridgman 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. Malgré tout, grâce aux faibles gradients de température mis en œuvre, c'est la méthode utilisée pour la production des cristaux de la famille II-VI. [5]

b. Méthode de l'échangeur de chaleur HEM

Cette méthode est une méthode de croissance avec creuset et c'est l'objet de ce mémoire elle sera détaillé plus bas.

I.3. Avantages, inconvénients et critères de choix de la technique de croissance cristalline

Une des difficultés rencontrées lors de la préparation d'une expérience de croissance cristalline réside dans le choix de la technique la plus appropriée. Or ce choix s'effectue d'autant plus facilement si l'on connaît mieux les propriétés physiques, chimiques et thermodynamiques du matériau. La manière dont ces dernières déterminent la technique adaptée, ainsi que les limites auxquelles il faut s'attendre, est abordée sous forme de questions logiques successives. [4]

La classification des techniques de croissance, est représentée dans le tableau [1] indiquant les avantages et les inconvénients de chacune d'elles.

A partir de la connaissance des techniques existantes, il s'agit alors de sélectionner la plus appropriée à la croissance d'un matériau donné, en se basant sur ses propriétés physiques et chimiques. Les méthodes à privilégier, les méthodes possibles à exclure pour cela, nous avons considéré trois propriétés, essentielles dans le choix de la technique :

- La nature de fusion (congruente ou non congruente) .
- la pression de la vapeur à la température de fusion (faible ou élevé).
- l'existence, à l'état solide, d'une transition structurale (oui ou non).

Technique de la croissance	Avantages	Inconvénients
Croissance à partir de l'état vapeur	-Appareillage simple -Possibilités de couches mince	-petite taille -qualité difficilement contrôlable -nécessité d'un support
croissance cristalline a partir de l'état fondu	-Vitesse de croissance -Possibilité de produire de gros cristaux -Eventuellement orienté suivant divers axes	-Solide a fusion congruente seulement -qualité dépendent de nombreux paramètre -nécessité d'un recuit dans certain cas -température élevé ($T \geq T_f$ a la température de fusion) - risque de contamination en présence du creuset
croissance cristalline a partir d'une solution :	-Bonne qualité -Cristaux faible contrainte -Appareillage souvent simple -Température $< T_f$	Possibilité de contamination par le milieu Vitesse lente nécessité d'un contrôle rigoureux des gradients de température
Croissance en phase solide	-application possible aux alliages -appareillage très simple -contrôle de la forme	Intérêt essentiellement limité jusqu'à a présent à l'état métallique

Tableau I.1: Classification des techniques de cristallisation [4]

I.4. Technique de la croissance cristalline HEM

I.4.1.Principe de la méthode HEM

La méthode HEM est un procédé de croissance en creuset vertical d'un mono ou polycristal à partir de la phase liquide, la chaleur latente de solidification étant extraite à la partie inférieure du lingot grâce à un échangeur de chaleur.

Cette méthode a pour but de fabriquer des cristaux à grande section carrées destinés pour le marché photovoltaïque et est basée sur la solidification directionnelle pour la croissance des lingots poly cristallins de Silicium.

Le germe est placé au fond du creuset, est en contact thermique avec un échangeur de chaleur. Par un contrôle convenable de la température du four et de l'échangeur, la charge pollicristalline et les bords du germe sont portés au dessus du point de fusion. S'il s'agit d'une croissance sans germe initial, alors la fusion de la charge est totale. La croissance du cristal à partir de l'état liquide est assurée par l'échangeur de chaleur, lui-même refroidi par un fluide bon conducteur thermique (généralement l'hélium gazeux).

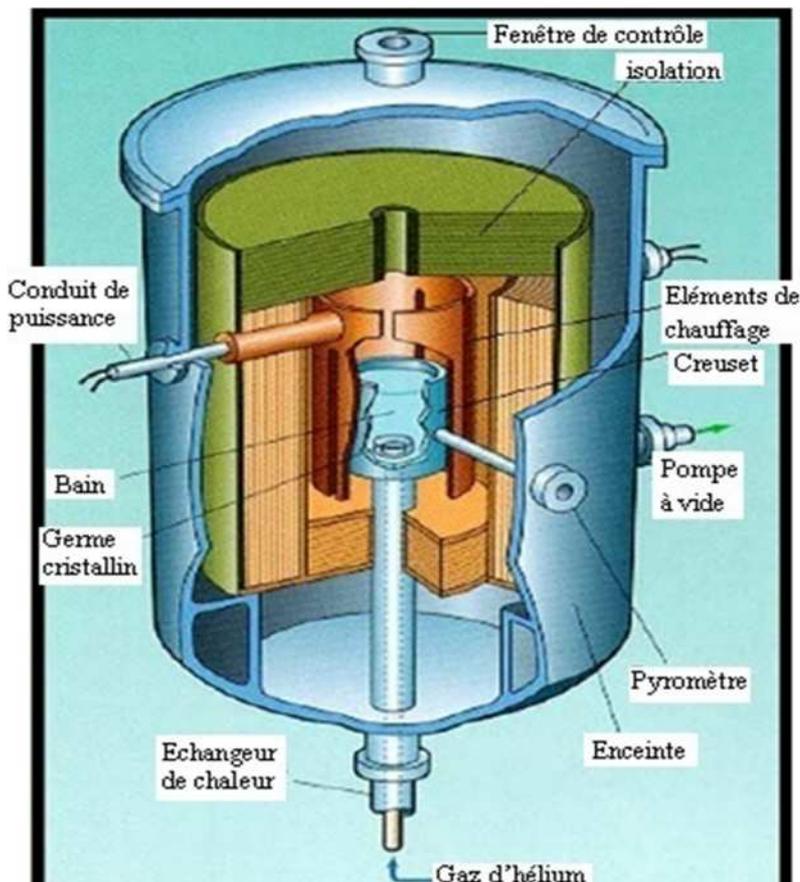


Figure I.8: Schéma du four de croissance HEM

Le four HEM est conçu de telle façon à ne pas développer de fort gradient de température et assure une bonne symétrie thermique, en comparaison avec les méthodes précédentes, le germe est placé à la base du creuset qui est rempli avec la charge du silicium sur l'échangeur de chaleur.

La forme de l'interface bain-cristal est convexe, donc les impuretés se rassemblent sur les cotés du cristal et non pas au centre. Le contrôle précis de l'interface dans la technique HEM donne des vitesses de croissance élevées sous faible gradient de température, ce qui réduit les tensions de solidification, et par conséquent minimise la formation des défauts.

I.4.2. Etapes de la méthode HEM

1. **matériau de départ et germe avant la fusion** : La chaleur fournie par le réchauffeur en graphite est transférée vers le creuset pour fondre la charge de silicium,
2. **fusion de la charge et des bords du germe** : Au cours du chauffage, la masse du silicium se fond avec les bords du germe mais le germe est maintenu à l'état solide en le refroidissant par le gaz d'hélium à travers l'échangeur de chaleur.
3. **développement du germe au détriment du liquide** : la chaleur est extraite par l'échangeur, les gradients de température dans le cristal et le bain sont contrôlés indépendamment par l'échangeur de chaleur, et la température du four respectivement.

Au cours de la croissance, le matériau froid est en bas et le bain chaud est en haut, minimisant ainsi les effets néfastes de la convection. La stabilité du champ de température aide à minimiser le sur-refroidissement, et assure une croissance uniforme donnant un cristal parfait et homogène chimiquement.

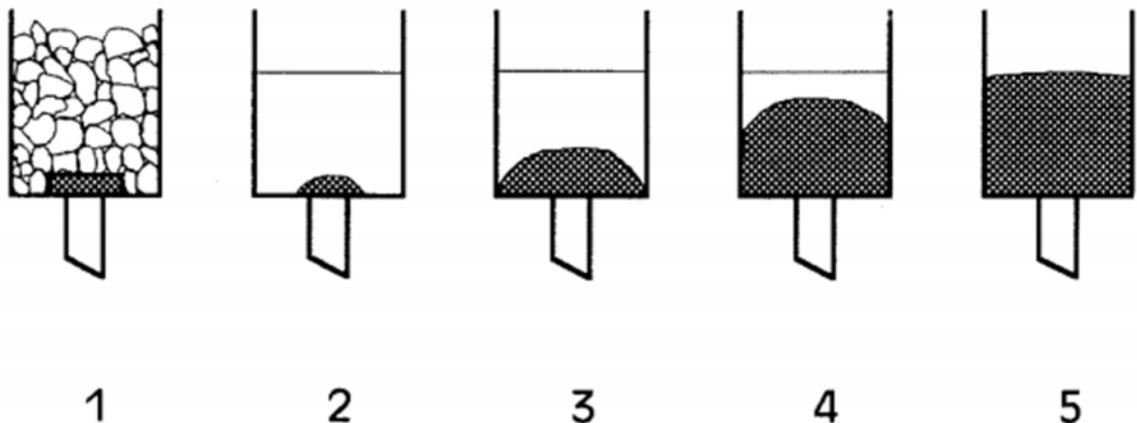


Figure I.9: Schéma du principe de la méthode HEM

I.4.3. Matériaux tirés par cette méthode

En 1970, Schmid et Viechniki de Crystal System (mass,USA) annonce la mise au point d'une nouvelle technique de croissance cristalline qui se classe dans la famille des technique à solidification dirigé [6]

Par la suite, diverses modification et améliorations apportée à la technique HEM ont conduit a la prise de brevet en 1975[7]

Les premiers travaux ont porté sur le saphir pur et dopé et ont abouti à la production de monocristaux de 70 mm de diamètre et de 10 mm d'épaisseur, en vue d'applications telles que les lasers ou les électro-optiques. D'autres matrices monocristallines ont alors été envisagées à des fins commerciales, telles que $Y_3Al_5O_{12}$ dopé au néodyme (YAG : Nd) MgF_2 dopé au cobalt pour les matériaux lasers ou encore le silicium polycristallin pour des cellules photovoltaïques à usage solaire.[8,9]

I.5. Résumés de quelques travaux effectués pour l'étude de la méthode HEM

C.P.Khattak, F.Schmid [12,13] et J.Dong, P.Deng, [14] ont fait croître des cristaux de saphir de bonne qualité par la méthode HEM. Malgré sa haute température de fusion (2040°C) et sa faible conductivité thermique par rapport aux métaux, les plus grands cristaux de saphir dans le monde ont été produits par cette méthode [15].

De grands lingots de $NaMgF_3$ ont été produits par A.Oçafrain et al. [16] en utilisant la méthode HEM. V.Peters et al. [17] ont fait croître des cristaux de Sc_2O_3 , selon la même référence les premiers cristaux produits par HEM sont des cristaux de scandia.

En utilisant la méthode des éléments finis, J.H.Wang, D.H.K im et J.S.Huh [18] ont modélisé numériquement la croissance HEM de BGO (Bismuth germanium Oxyde) pour étudier l'effet de différents paramètres du processus sur la forme de l'interface, le profil de température, et les lignes de courant. Ils ont observé que la déflexion de l'interface de croissance devient maximale quand elle coïncide avec le coin du creuset. Cette déflexion maximale croit avec l'augmentation de la température de chauffage et elle est aussi influencée par la température de l'échangeur.

En utilisant le code de calcul FIDAP, C.W.Lu, J.C.Chen et L.J.Hu [19] ont étudié numériquement l'effet de la température du four dans le système de croissance HEM de saphir sur la convexité de l'interface cristal-bain et l'augmentation de la taille du cristal, ils ont montré qu'une haute température de chauffage engendre une grande convexité, et

que durant la baisse de cette température et quand elle atteint la température de fusion le volume du cristal augmente rapidement. On constate alors qu'une baisse progressive de la température de chauffage est nécessaire pour garder un taux de croissance constant.

J.C.Chen et C.W.Lu [20] ont étudié numériquement l'influence de la forme du creuset sur le champ thermique, dynamique et la forme de l'interface bain-cristal au cours de la croissance cristalline HEM de saphir. Ils ont montré qu'un creuset cylindrique à base incurvé aide à minimiser la convexité de l'interface de croissance et à supprimer les zones de fluide mort dans le bain et donc éviter le back-melting qui mène à des défauts dans la structure cristalline.

J.M.Kim et Y.K.Kim [21] ont produit et analysé des lingots de Silicium polycristallin d'une section carrée de 69cm et de 240kg de poids. Ils ont montré leur consistance et uniformité, et que leur utilisation dans la fabrication des cellules solaires montre une bonne performance, similaire aux lingots de silicium monocristallin produits par la technique de Czochralski.

A.Ahmanache, N.Zeraibi et E.Arquis [22] ont fait la première étude adimensionnelle (paramétrique) de la croissance cristalline HEM, en utilisant le code de calcul Fluent. Ils ont montré l'effet de certains nombres adimensionnels qui caractérisent le processus sur les profils de vitesse, de température et forme de l'interface.

En utilisant la technique HEM avec un contrôle simultané des températures de chauffage et de refroidissement, H.Rahab et al [23] ont fait croître des cristaux de NaBiW_2O_8 (NBW) et de $\text{Na}_5\text{B}_2\text{P}_3\text{O}_{13}$ (NBP) de quelques centimètres de diamètre.

H.B. Xiong, Y. Ma et L.L. Zheng [24] ont simulé le transfert de chaleur et l'écoulement du bain pour la croissance cristalline dans un procédé HEM modifié, qui combine les avantages du procédé HEM traditionnel et du procédé de Bridgman. Ils ont montré que le four HEM modifié est approprié pour la croissance de grands monocristaux qui nécessite un bon contrôle de la température de chauffage, et que le gradient de température dans le cristal est faible par rapport à HEM traditionnel, ce qui minimise les défauts et fissures dans le lingot.

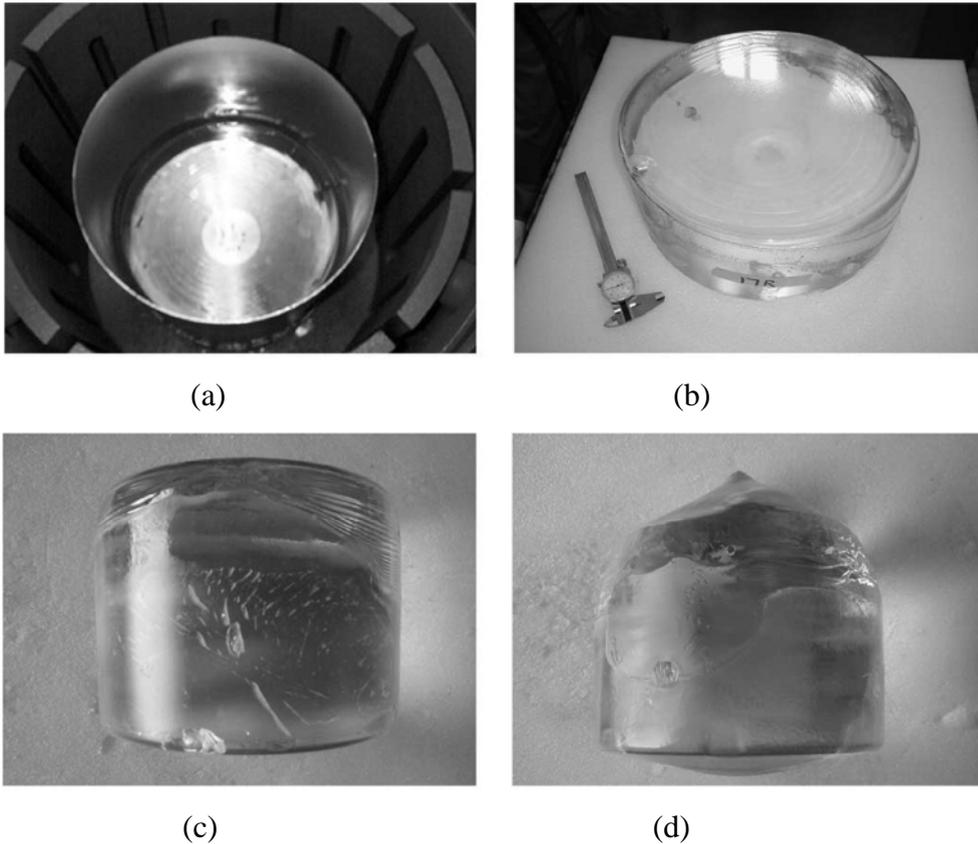


Figure I.10: Lingots de saphir produits par la technique HEM. (a) : dans le creuset, (b) : après extraction du creuset, (c): lingot à interface solide-liquide plane, (d): lingot à interface solide-liquide sous forme de dôme

1.5.1. Avantages de la méthode HEM

Certains matériaux présentent une meilleure qualité cristalline lorsqu'ils sont produits par HEM (Al_2O_3 ; $\text{Bi}_4\text{Ge}_3\text{O}_{12}$) ; l'origine se trouve, avant tout, dans la forme et dans la position (par rapport au liquide) particulières de l'interface durant la croissance. De plus, HEM étant surtout dédié à la production industrielle, le facteur économique ne doit pas être négligé dans la comparaison des techniques.

- **Absence de mouvement :**

La caractéristique principale du HEM est l'absence de mouvement durant le processus que ce soit du germe, du bain ou du four, ce qui évite de perturber l'interface de croissance, contrairement à la technique Czochralsky (ou le germe subit un mouvement de rotation-translation ce qui entraîne un fort courant dans le bain) et à la technique Bridgman-Stober (ou, soit le four, soit le creuset, subit une translation en continu).

- **Position de l'interface :**

En comparaison avec Czochralski , où l'interface est à la surface du bain , et donc les gradients de température locaux importants, dans HEM, l'interface solide-liquide est immergée ; en conséquence, toute perturbation mécanique ou thermique dans le four est atténuée par la masse fondue avant d'atteindre l'interface.

De plus, le gradient thermique vertical au voisinage de l'interface est orienté vers le haut, contrairement à Czochralski , ce qui minimise la convection.

De ces deux phénomènes résultent des gradients de température stabilisants, avec des variations minimales à l'interface ; on peut donc s'attendre à une perfection cristalline plus grande et à une meilleure homogénéité chimique.

- **Contraintes thermiques :**

Par Czochralski, le cristal se situe dans une zone à fort gradient de température , hors du four , ce qui le soumet à un choc thermique pouvant engendrer des fissurations, ou nécessite l'apport d'un four de recuit.

Dans HEM, le cristal reste dans le four durant son refroidissement ; ainsi la formation de défauts issus des contraintes de solidification est réduite.

De plus, le cristal produit par HEM peut subir un recuit in-situ puisqu'il ne quitte pas la zone chaude. Il suffit d'abaisser la température du four juste en dessous de la température de fusion, puis réchauffer l'échangeur thermique. Ainsi, par un refroidissement uniforme et contrôlé du cristal, on atténue les contraintes internes et on empêche la fissuration.

Cette caractéristique permet la production de lingots de grandes dimensions, et élimine une étape de recuit séparé, intérêts non négligeables d'un point de vue économique.

- **Forme du lingot :**

Enfin, la forme du lingot étant déterminée par celle du creuset, la production de lingots de section carrée ou rectangulaire et dimensions variées est possible, dans un même four, contrairement au Czochralski , donnant un autre avantage économique à HEM dans la production de certains matériaux à applications spécifiques, en particulier le silicium pour les cellules solaires ou les barreaux de laser.

1.5.2. Inconvénients de la méthode HEM

- ✓ La fusion et la solidification ont lieu dans un creuset, ce qui peut entraîner une pollution et des contraintes mécaniques ; phénomènes que l'on évite par l'absence de contact du cristal avec le creuset dans Czochralski. L'existence de creuset avec lequel le liquide ne réagit pas pour être un frein à l'utilisation du HEM.

- ✓ La difficulté à suivre l'interface liquide-solide durant une croissance, en particulier lors de la fusion partielle du germe, rend la méthode parfois non reproductible et nécessite plusieurs essais de croissance pour chaque matériau, afin de cerner les paramètres thermiques adéquats.
- ✓ L'absence de mouvement important à l'interface solide-liquide, tout en étant un avantage, peut être un inconvénient puisqu'elle conduit à une mauvaise homogénéisation du bain et éventuellement du dopant, contrairement au Czochralski. Cependant, cet inconvénient est en partie compensé par les très faibles vitesses de croissance (mm /h).

Conclusion

Le travail effectué dans le cadre de ce chapitre nous a permis de consulter et d'étudier différents documents sur la croissance on a défini la croissance cristalline comme le processus de formation de cristaux dans la nature et ses préparations dans les laboratoires et les usines. De même, on a présenté les principales techniques de croissance cristalline, et on s'est basé sur la méthode HEM utilisée pour la croissance de silicium et du saphir.

Chapitre III : Description du code de calcul

Introduction

La simulation numérique en mécanique des fluides, est reconnue aujourd'hui comme l'un des outils incontournables de conception et est largement utilisée dans l'industrie. Le choix de l'utilisation de telle méthode numérique va dépendre essentiellement du type et de la complexité du problème à résoudre : la nature du fluide, le comportement thermodynamique, la modélisation du milieu et le problème stationnaire ou in-stationnaire.

Pour notre travail, nous aurons recours au code CFD Fluent, commercialisé par Fluent Incorporated. Il permet de résoudre les équations régissant les mouvements laminaires d'un fluide, en dimension 2.

Les problèmes à résoudre sont en régime permanent et instationnaire.

III.1. Présentation des logiciels Gambit et fluent

III.1.1. Gambit

C'est un préprocesseur intégré pour l'analyse en CFD (computational fluid dynamics), il permet de générer un maillage structuré ou non structuré en coordonnées cartésiennes, polaires, cylindriques ou axisymétriques, Il peut réaliser des maillages complexes en deux ou trois dimensions avec des mailles de type rectangle ou triangle.

Il peut être utilisé pour construire une géométrie et lui générer un maillage .Eventuellement, une géométrie d'un autre logiciel de CAO (Conception Assistée par Ordinateur) peut être importée dans ce préprocesseur. Les options de génération de maillage de Gambit offrent une flexibilité de choix.

On peut décomposer la géométrie en plusieurs parties pour générer un maillage structuré. Sinon, Gambit génère automatiquement un maillage non structuré adapté au type de géométrie construite. Avec les outils de vérification du maillage, les défauts sont facilement détectés.

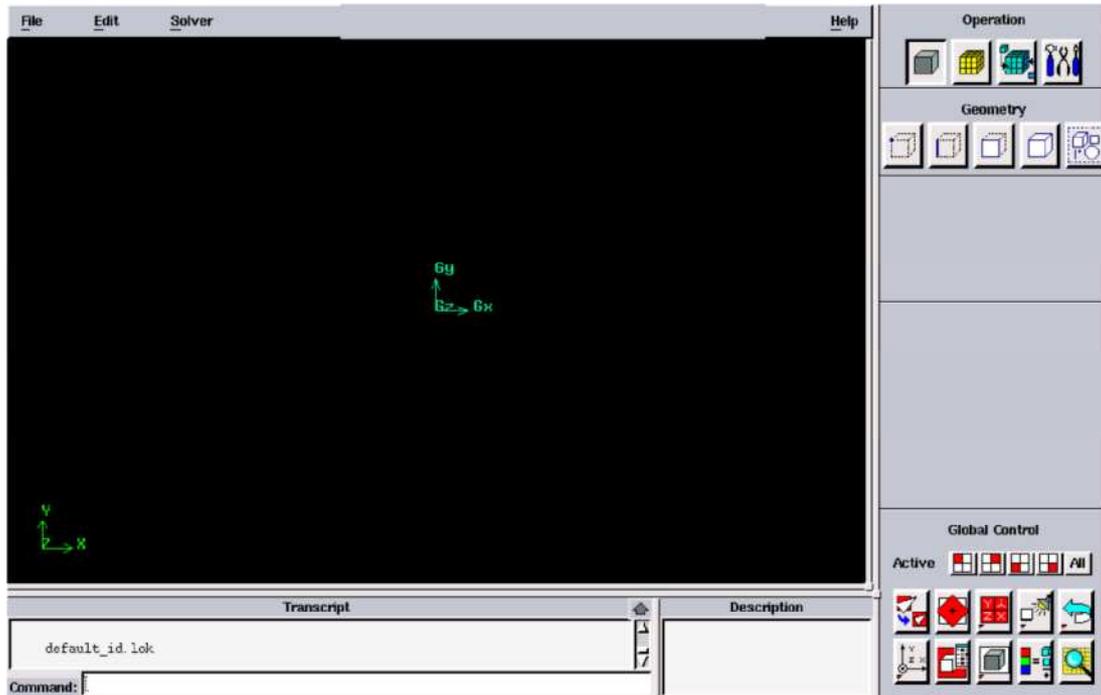


Figure III.1 : Interface de gambit

Cette Interface est décomposée en plusieurs parties :

a. Fenêtre d'outils d'opération :

Chaque bouton de cette fenêtre correspond à une fonction bien définie (figure III.2)



Figure III.2 : Fenêtre d'outils d'opération

b. Construction de la géométrie

Elle est créée à partir de points, de cotés, de surfaces, de volumes ou d'un groupe de tous ces éléments. On peut effectuer des opérations d'union, d'intersection, de séparation d'effacement de décomposition (figure III.3).

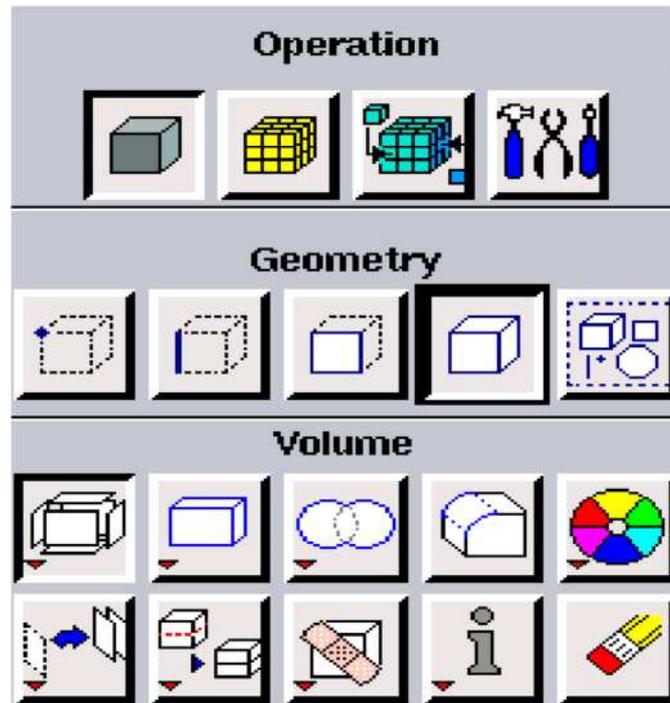


Figure III.3 : Construction de la géométrie

c. Génération de maillage

Cette fonction permet la génération de tous types de maillage, la manipulation du maillage généré et même la création d'une couche limite s'il y a lieu (figure III.4).

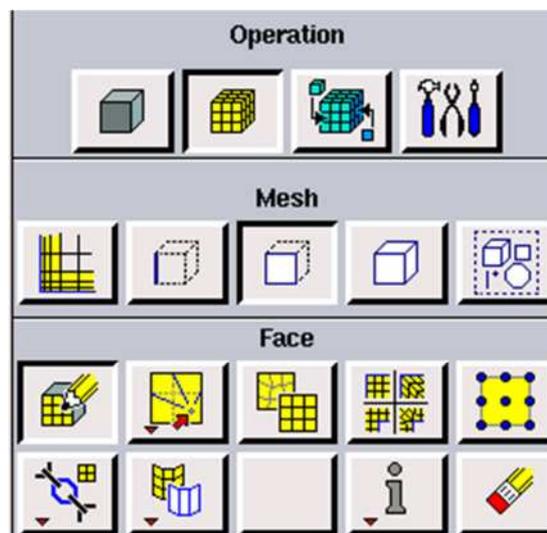


Figure III.4 : Génération de maillage

d. Incorporation des conditions aux limites

Plusieurs types de conditions aux limites sont disponibles selon le problème traité. A noter que l'espace maillé est pris par défaut comme étant fluide (figure III.5).



Figure III.5: Incorporation des conditions aux limites

e. Boutons d'outils

Ils permettent de spécifier le système de coordonnées par exemple ou d'autres opérations spécifiques (figure III.6).



Figure III.6: Boutons d'outils

f. Fenêtre de contrôle global

Elle concerne l'orientation, l'affichage, la lumière et la vérification du maillage (figure III.7)

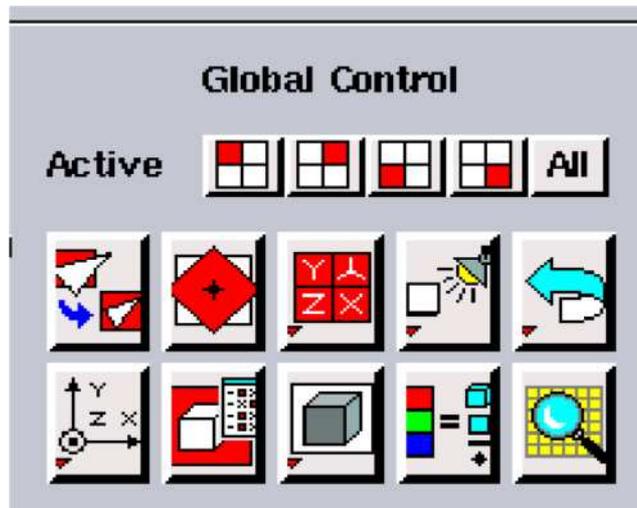


Figure III.7: Fenêtre de contrôle global

III.1.2 Code Fluent

Fluent est un programme informatique conçu pour la simulation des écoulements de fluide et du transfert de chaleur dans des géométries complexes.

Il présente une grande flexibilité des résultats et une adaptation avec n'importe quel type de maillage. Il permet le raffinement du maillage en fonction des conditions aux limites, des dimensions et même des résultats déjà obtenue. Cela est très utile dans la région à gradients importants (couches limites, couches à cisaillement libre).

Fluent écrit en langage C, il emploie toute la flexibilité et la puissance qu'offre ce langage. Il utilise l'architecture serveur client nécessaire au calcul parallèle sur plusieurs machines.

Fluent dispose d'un outil de graphisme pour l'affichage des résultats et leur exploitation. On peut aussi exporter les résultats vers un autre logiciel de graphisme, et l'option UDF permet de résoudre des équations additionnelles ou des termes sources additionnelles définies par l'utilisateur.

III.1.2.1. Interface du code Fluent

On peut démarrer 4 versions de Fluent 2D, 3D, 2DDP, 3DDP ayants la même interface (figure III.8).



Figure III.8 : fenêtre de démarrage

- **2D** (2 Dimensions)
- **2DDP** (2 Dimensions Double Précision)
- **3D** (3 Dimensions)
- **3DDP** (3 Dimensions Double Précision)

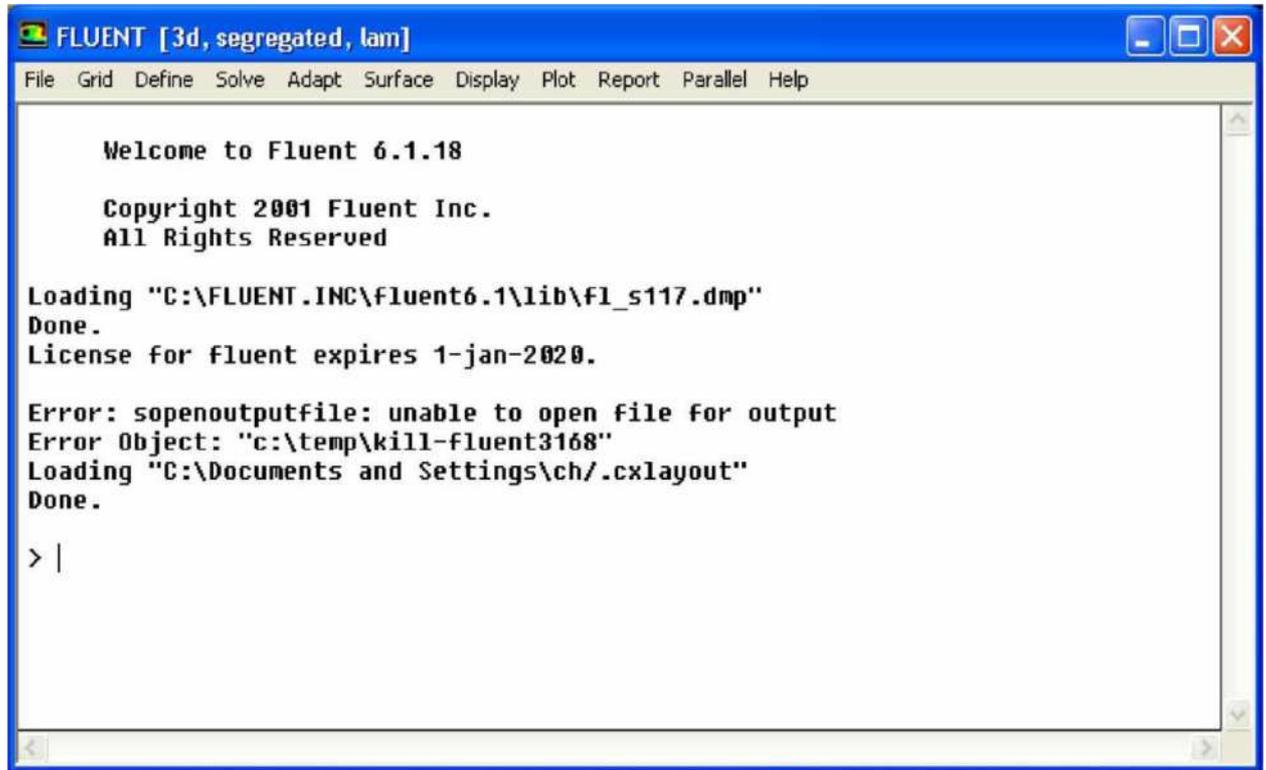


Figure III.9: Interface du code Fluent

Les fonctions (figure III.9) disponibles pour la procédure numérique sont :

File: pour les opérations concernant les fichiers: lecture, sauvegarde, importation...etc.

Grid : pour la vérification et la manipulation du maillage et de la géométrie.

Define : pour définir les phénomènes physiques, les matériaux et les conditions aux limites.

Solve : pour choisir les équations à résoudre, les schémas de discrétisations, les facteurs de sous relaxation, les critères de convergence et pour initialiser et procéder au calcul.

Adapt : pour l'adaptation du maillage selon plusieurs paramètres.

Surface: pour créer des points, des lignes et des plans nécessaires à l'affichage des résultats.

Display et plot: pour l'exploitation des résultats.

Report : pour afficher des rapports contenant les détails du problème traité.

Parallel : pour le calcul parallèle.

Help : pour l'exploitation du contenu du code.

III.1.2.2. Condition aux limites utilisées par le code FLUENT

Pour le code Fluent les types disponibles des conditions aux limites sont classés comme suit :

- a) **Conditions d'entrée et de sortie de l'écoulement** : pression d'entrée (**pressure inlet**), vitesse de l'entrée (**velocity inlet**), débit massique à l'entrée (**mass flow inlet**), admission (**intake**), pression de sortie (**pressure outlet**) ; sortie (**outflow**), champ de pression lointain (**pressure far-field**), échappement (exhaust)
- b) **paroi et conditions de symétrie** : paroi(**wall**), axe de symétrie (**axis**), conditions périodique, plan de symétrie (**symétrie**).
- c) **Cellules des zones internes** : fluide ou solide (de différent type).
- d) **Condition des faces internes** : ventilation, radiation, paroi intérieur.

Mais si on parle d'une façon plus générale nous aurons quatre types de conditions aux limites ou chacun d'eux nécessite une étude approfondie :

- à l'entrée du domaine : la valeur de la variable est connue.
- à la sortie du domaine : soit on connaît la valeur de la variable donnée ou on suppose que le régime est établi.
- à la paroi : soit on connaît la valeur de la variable posée (la vitesse ou la température par exemple), soit on connaît d'autres grandeurs physiques (gradient de vitesse, flux thermique).
- sur l'axe de symétrie : où le gradient de la variable posé suivant la direction perpendiculaire à l'axe de symétrie est nul.

III.1.2.3. Modèle Numérique utilisée par le code FLUENT

Le code Fluent utilise la méthode des volumes finis pour discrétiser les équations de transport. Dans cette méthode, on intègre des équations de conservation que l'on applique sur chaque volume de contrôle élémentaire. A partir des variables connues aux centres des volumes, on évalue les flux aux surfaces des volumes par interpolation. La grille est a priori quelconque, permettant ainsi de traiter des

écoulements à géométrie complexe. Cette méthode donne de très bon résultat, car elle garantie la conservation de bilan thermique sur tout le domaine étudié.

III.1.2.4. Méthode des volumes finis

Cette méthode a été décrite pour la première fois en 1971 par Patankar et Spalding et a fait l'objet de publication en 1980 par Patankar. La méthode des volumes finis est utilisée pour résoudre numériquement des équations aux dérivées partielles, comme la méthode des différences finies et la méthode des éléments finis. Mais, contrairement à la méthode de différences finies qui utilise des approximations de dérivées, la méthode de volumes finis s'appuie, comme la méthode d'éléments finis, sur des approximations d'intégrales. Toutefois, la méthode des éléments finis emploie une formulation variationnelle de l'équation à résoudre (on parle aussi de forme faible), tandis que la méthode de volumes finis est fondée directement sur la forme dite forte de l'équation. [11]

Le domaine de calcul est divisé en sous-domaines distincts appelés volumes de contrôle (cellules). Chaque volume de contrôle comporte un nœud placé en son centre géométrique. L'équation différentielle est discrétisée sur le groupe de nœuds considéré, en exprimant un principe de conservation de la variable dépendante en question sur le volume de contrôle. L'équation différentielle est alors intégrée localement en chaque cellule, le résultat de l'intégrale donne la valeur de la variable en question au centre de la cellule.

Chaque volume de contrôle est caractérisé par son nœud central "P" et ses quatre faces cardinales désignées respectivement par "e", "w", "n", et "s". Les points "E", "W", "N" et "S" sont les nœuds du maillage qui entourent le point "P", voir figure (III.10). Cette méthode permet de transformer un système d'équations différentielles en un système d'équations algébriques obtenues par intégration sur le volume de contrôle considéré.

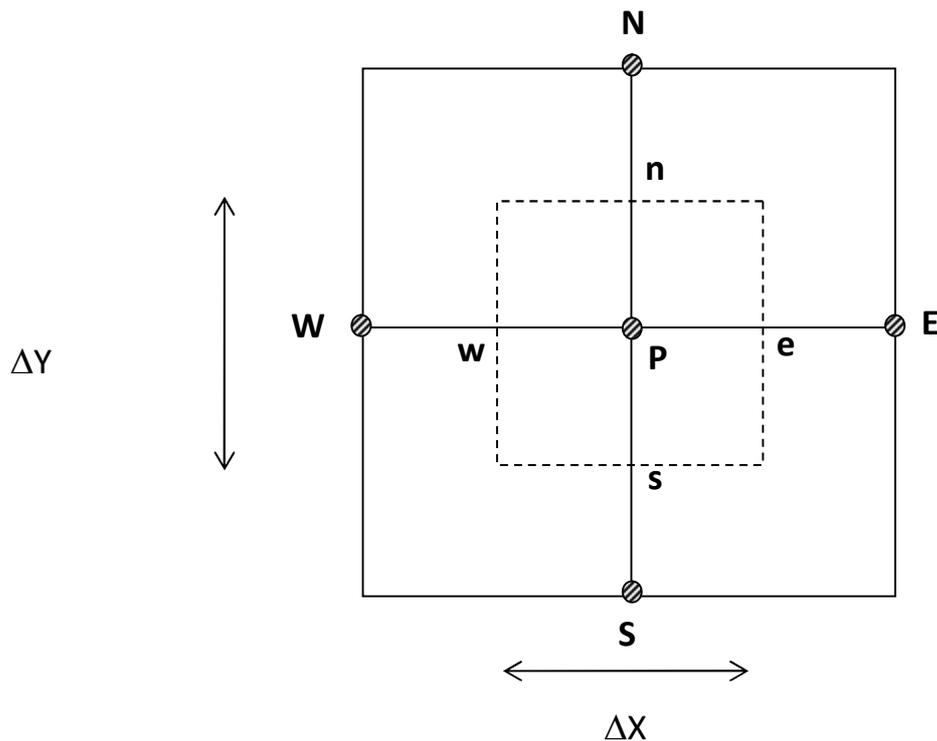


Figure III.10: Volume de contrôle

On résout l'équation aux dérivées partielles de manière approchée sur un maillage. Ce maillage est constitué de **volumes finis**. Les volumes finis sont des petits volumes en 3D, des surfaces en 2D, des segments en 1D dont la réunion forme le domaine d'étude. Les volumes finis peuvent être construits autour de points d'un maillage initial, mais pas nécessairement.

Les méthodes de volumes finis ont été mises au point initialement pour des lois de conservation, mais des développements récents permettent à présent de les utiliser pour des équations elliptiques et paraboliques.

Un autre avantage de la méthode des volumes finis est qu'elle est facilement utilisable avec des maillages non-structurés. En effet, la formulation d'une méthode de volumes finis ne tient aucun compte de la complexité du maillage, pour ce qui est de la discrétisation des lois de conservation. En revanche les caractéristiques géométriques du maillage peuvent jouer un rôle déterminant pour ce qui est des flux diffusifs.

La méthode des volumes finis s'articule autour de trois étapes principales : la génération du maillage, la discrétisation des équations de transport basées sur le principe d'intégration des équations sur un volume de control, enfin la résolution du

système d'équations par différentes méthodes de résolution numériques directes et itératives.

Fluent utilise cette technique basée sur les étapes représentées dans la figure III.11

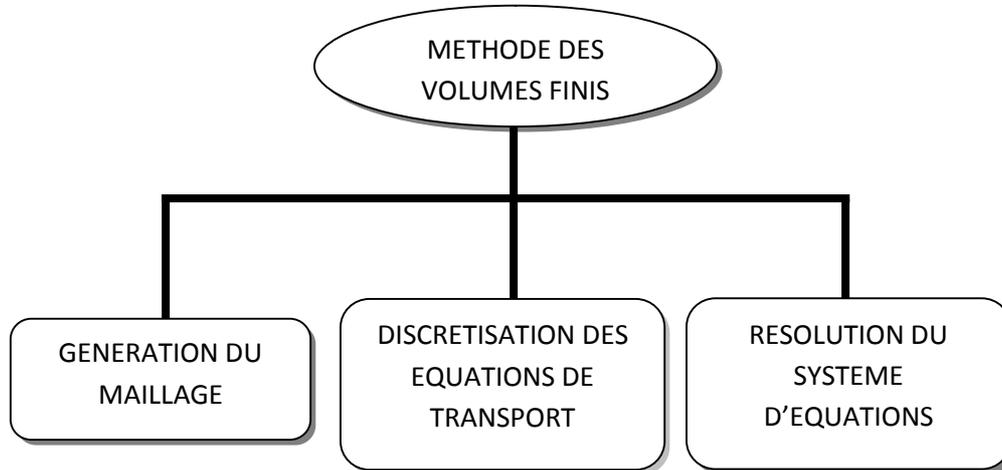


Figure III.11: Etapes utilisées dans la méthode des volumes finis

III.1.2.5. La méthode enthalpique

Pour résoudre le problème du changement de phase dans la croissance cristalline, Fluent utilise la méthode enthalpique ou enthalpy-porosity méthode [27,28,29]. V.R.Voller a développé cette méthode pour résoudre numériquement les problèmes de changement de phase (solidification ou fusion) couplés à des phénomènes de convection et/ou diffusion. Au lieu de travailler avec une grille décalée, une grille fixe est utilisée avec une approche enthalpique qui ne nécessite pas une condition à l'interface de croissance.

L'interface liquide-solide est considérée comme étant une zone poreuse dont la porosité est égale à la fraction liquide. Ainsi la porosité des cellules liquides est égale à 1, et celle des cellules solides est égale à 0.

Cette méthode tient compte de la chaleur latente de solidification en attribuant dans l'équation de l'énergie, à chaque cellule, une valeur de cette chaleur correspondante à la température de la cellule.

Au cours du changement de phase, la chaleur latente correspondante à la cellule est ajustée pour tenir compte de son évolution. Cet ajustement est pris en compte dans un terme source S_T ajouté à l'équation de l'énergie :

$$\frac{\partial T}{\partial t} + \vec{V} \cdot \nabla T = \alpha \Delta T + S_T$$

L'avantage de cette technique est qu'on n'a pas besoin d'une condition explicite à l'interface de croissance pour garantir la conservation de l'énergie.

Un autre terme source est ajouté aux équations de Navier Stokes pour annuler la vitesse dans les cellules solidifiées :

$$\frac{\partial \vec{V}}{\partial t} + \vec{V} \cdot \nabla \vec{V} = \nu \Delta \vec{V} + S_V \cdot \vec{V}$$

Dans le cas de la croissance d'un matériau pur, A.D.Brent et al. ont proposé les formules suivantes pour les termes sources : [11]

$$S_T = \frac{L}{C_p} \frac{df_l}{dt}$$

$$S_V = -A_{mush}(1 - f_l)$$

Où :

- f_l est la fraction liquide : pourcentage du volume de la cellule qui est en état liquide
- L est la chaleur latente de solidification.
- A_{mush} est une constante caractéristique de l'interface de croissance, elle doit être suffisamment élevée pour annuler les vitesses dans les cellules à l'état solide.

Dans les cellules liquides $S_V = 0$, on retrouve donc les équations de Navier Stokes ordinaires. Au niveau des cellules solides $S_T = 0$, la vitesse s'annule, donc il ne reste que l'équation de transfert de chaleur dans le solide (sans terme source).

Conclusion

Dans ce chapitre on a donné une description du code de calcul Fluent, et de la méthode des volumes finis et aussi on a parlé de la méthode enthalpique suivit pour résoudre les problèmes de changement de phase et de croissance cristalline.

Dans ce qui suit, on utilisera le code de calcul Fluent dans la résolution de notre problème. On commence par une étude bidimensionnelle du creuset.

Chapitre IV : Résultats et discussion

Introduction

Dans ce chapitre nous nous intéressons à la représentation des résultats obtenus dans la simulation numérique d'un procédé de croissance cristalline d'un monocristal de saphir avec la méthode HEM.

Afin d'obtenir un cristal de bonne qualité, notre travail consiste à faire varier le coefficient d'échange convectif de l'échangeur ensuite analyser son effet sur la cristallisation du saphir.

IV.1. Maillage du domaine sous Gambit

La création de la géométrie ainsi que le maillage s'est fait à l'aide du logiciel Gambit 2.4.6. Ce maillage propose des solutions étendues pour les géométries les plus compliquées. Cependant, dans notre cas, deux choix principaux du maillage se sont posés à nous : les maillages triangulaires et quadrilatère.

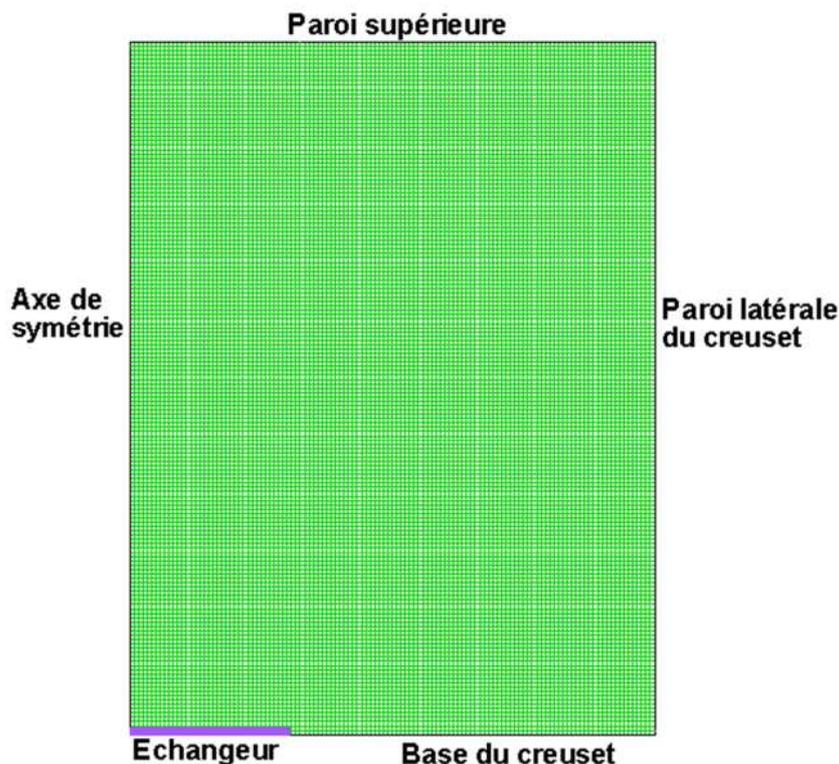


Figure IV.1 : Maillage du domaine de calcul

A deux dimensions, le maillage peut être composé de cellules quadrilatères, ou des cellules triangulaires. A trois dimensions, il peut être constitué de cellules hexaédriques ou de cellules tétraédriques.

L'utilisation d'un maillage triangulaire induirait un surplus d'utilisation du nombre de cellules par rapport aux cellules quadrilatères, d'où la nécessité d'avoir de plus de ressources et de temps de calcul.

Dans notre travail, on a utilisé un maillage quadratique structuré composé de 160×120 19481 nœuds pour le creuset cylindrique, la sensibilité du maillage a été étudié dans la référence [26] puisque on a travaillé avec la même géométrie.

La capacité de l'évacuation de la chaleur dans l'échangeur de chaleur du système HEM est déterminé par l'importance de h_e et de T_e . Ces deux paramètres sont contrôlés par la vitesse d'écoulement du fluide du fonctionnement à l'intérieur de l'échangeur de chaleur.

on fait varier le coefficient d'échange convectif h_e de l'échangeur pour voir son effet sur différentes grandeurs caractéristiques de la croissance cristalline du saphir, à savoir, l'interface de croissance cristalline, la température, la pression, la fonction courant et les composantes radiale et axiale de la vitesse. Les valeurs des h_e étudiées sont de $h_e=20$; 100 ; 1000 et 2000 W/m^2

IV.2. Effet du coefficient d'échange convectif de l'échangeur de chaleur sur le front de solidification

Les figures IV.2, IV.3, IV.4 et IV.5 donnent la distribution de la température et la forme du front de solidification à $t=20$, 50, 100 et 180s respectivement pour les différentes valeurs coefficient d'échange convectif.

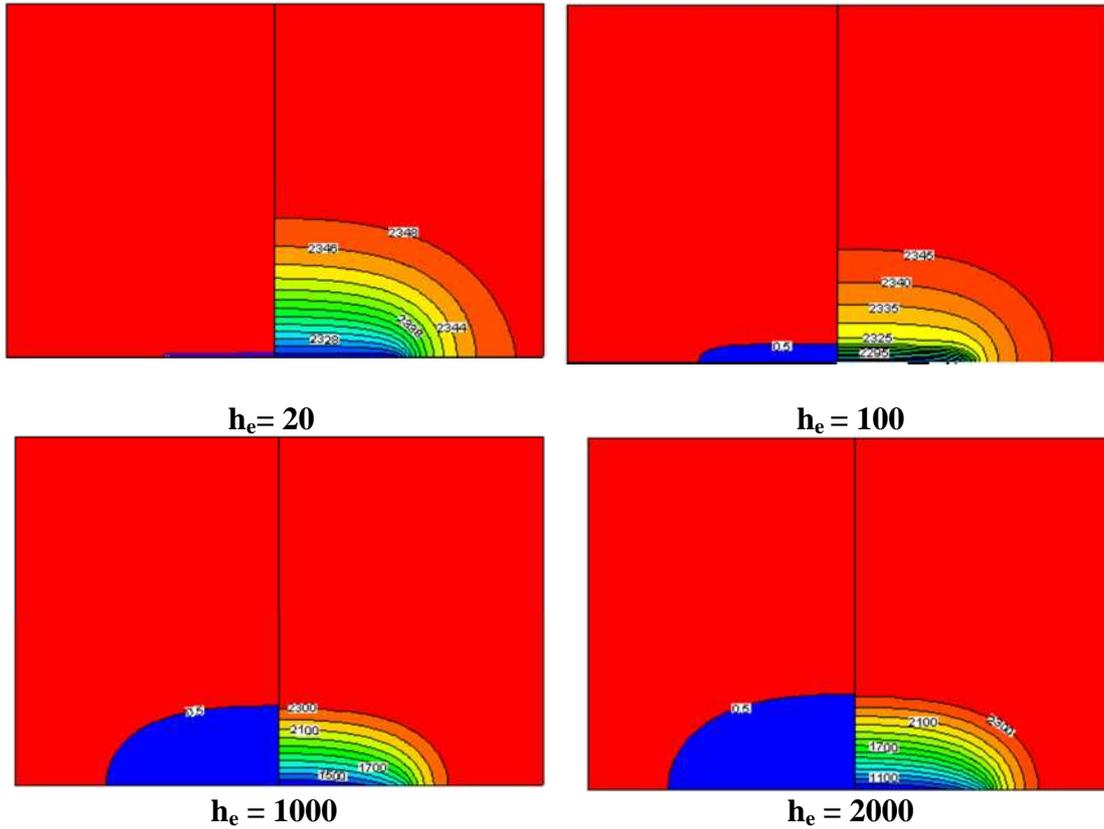


Figure IV.2: Distribution de la température (droite) et le front de solidification à (gauche) à $t=20s$ pour différentes valeur de h_e

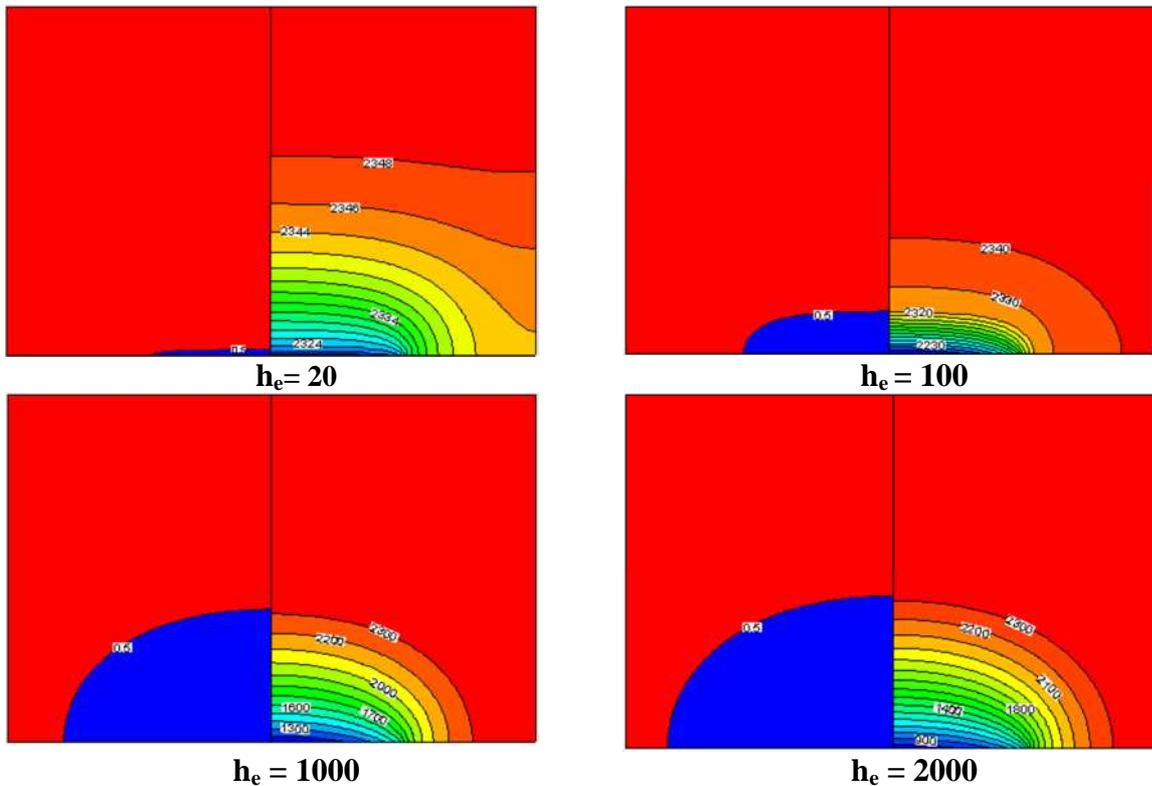


Figure IV.3: Distribution de la température (à droite) et le front de solidification à (gauche) à $t=50s$ pour différentes valeurs du facteur d'aspect radial

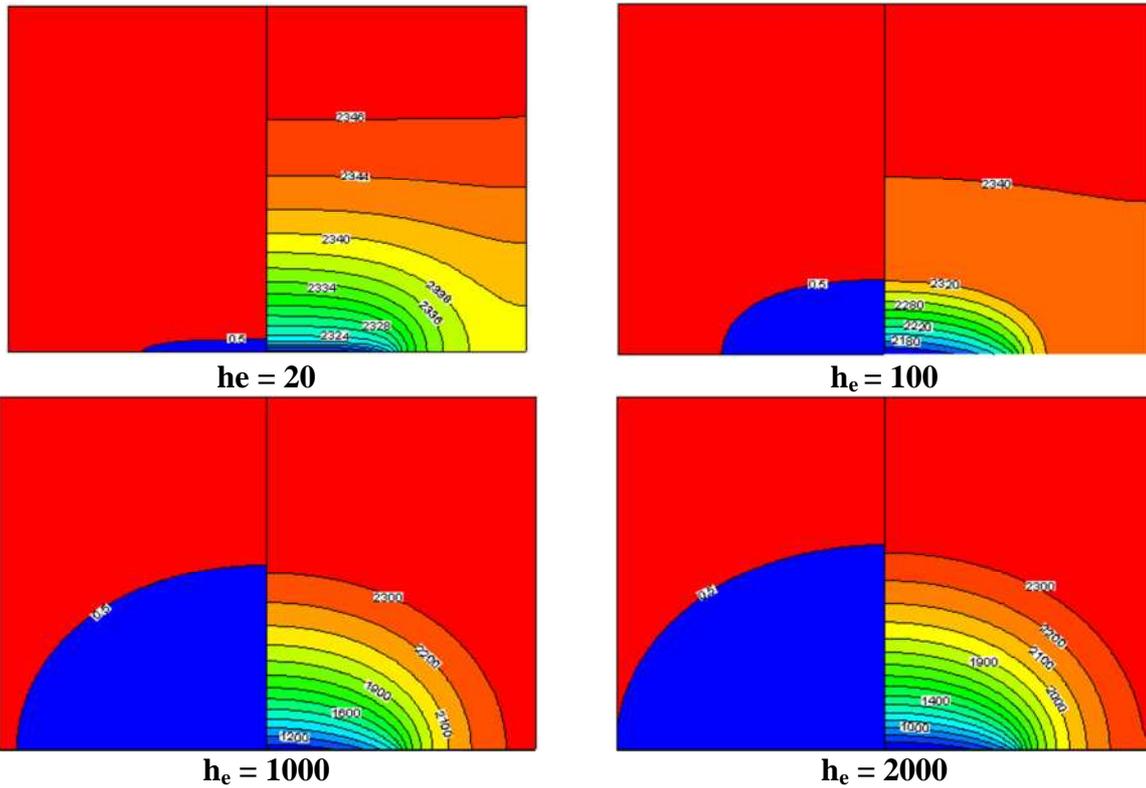


Figure IV.4 : Distribution de la température(droite) et le front de solidification à (gauche) à $t=100s$ pour différentes valeurs de h_e

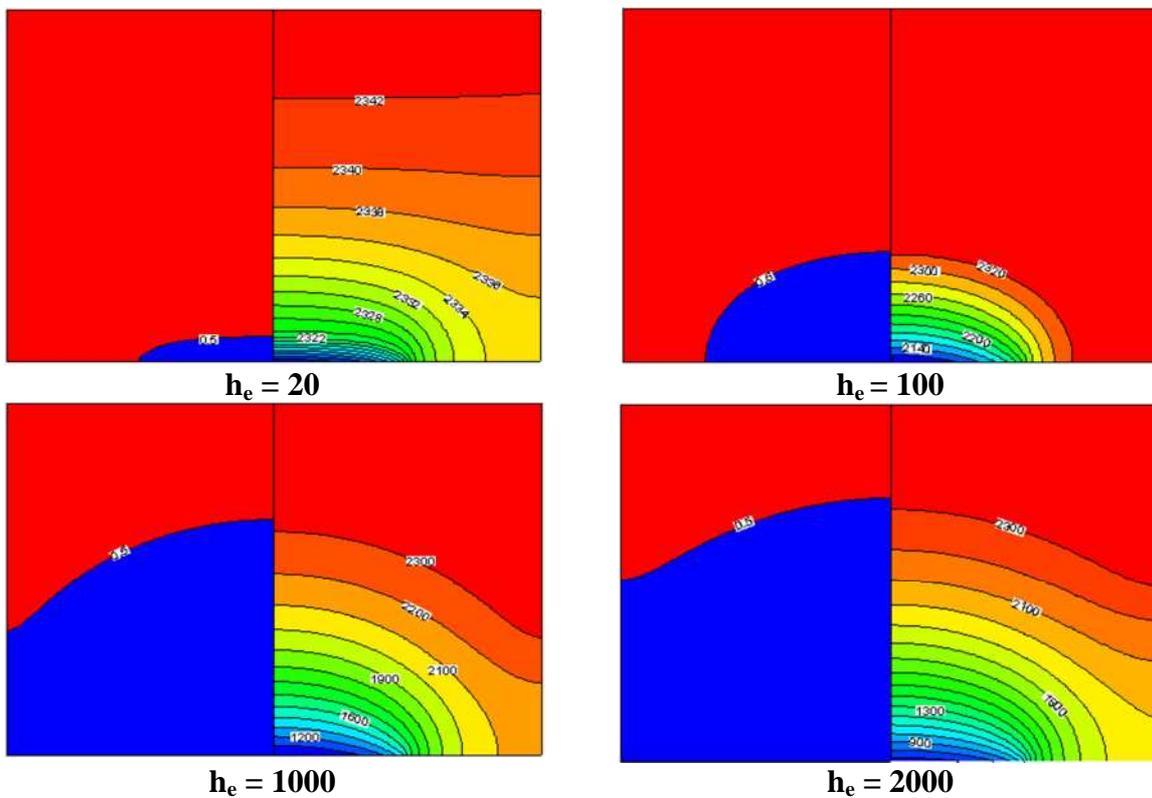


Figure IV.5 : Distribution de la température à (droite) et le front de solidification à (gauche) à $t=180s$ pour différentes valeurs de h_e

Le front de solidification sépare deux régions de natures différentes : solide et liquide. Sur l'interface de croissance, la fraction liquide est de 0.5. Dans le solide (en couleur bleue) la valeur de la fraction liquide est de 0 Dans le liquide (en couleur rouge) elle est égale à 1.

On peut voir que la forme du front de solidification est plane pour les faibles coefficient d'échange de l'échangeur ($h_e=20$) et son évolution au cour du temps est très lente même en avançant dans le temps la forme reste plutôt plane avec une augmentation légère du niveau du front, cela revient la valeur du coefficient d'échange des paroi du four ($h_c=10\text{W/m}^2\text{K}$) qui est très proche de celle du l'échangeur et la surface d'échange des parois qui est plus importante que la surface d'échange de l'échangeur donc ce qui permet l'introduction de grande quantités de chaleur (des valeurs supérieur ou légèrement inférieur a la chaleur évacué) dans le four ce qui complique le refroidissement et la solidification du matériau.

Pour des valeurs plus grande de h_c (1000 et 2000 $\text{W/m}^2\text{K}$) qui sont des valeur loin de celle de $h_c(10 \text{W/m}^2\text{K})$ le front de solidification avance plus rapidement et la forme de l'interface est sphérique. Après une centaine de seconde le front touche la paroi latérale du creuset et commence à prendre une allure plane a mesure que la solidification avance.

La solidification rapide du matériau est du au fait que le débit de chaleur évacué par l'échangeur de chaleur est largement plus important que le flux de chaleur introduit par les parois du four.

La solidification totale du liquide sera obtenue au bout de quelque seconde avec un front de croissance quasiment linéaire, ce qui est favorable pour la qualité du lingot du saphir produit, car ce lingot va être découpé par la suite en plaquettes pour des utilisations industrielles.

D'après les résultats de la référence [24] les coins du creuset sont les points chauds et le cristal ne peut pas croitre vers eux jusqu'à ce que la quantité de chaleur dégagée atteigne une certaine valeur, ce qui implique que front de solidification atteint la paroi latéral avant de toucher le coin du creuset, dans notre cas d'après la forme sphérique du creuset on peut voir que le front atteint le coin avant la paroi latéral.

On remarque aussi après une observation générale des résultats que le coefficient d'échange convectif n'a pas d'influence sur la forme du front mais seulement sur le temps de solidification, ce dernier est un facteur important puisque la qualité de cristal obtenu dépend aussi du temps de solidification.

Pour avoir plus de précision sur la vitesse de la croissance cristalline dans les différents cas étudiés, on a tracé les courbes de l'évolution instationnaire du front de solidification en fonction de h_e (Figure IV.6).

La hauteur du front en fonction du temps pour les quatre valeurs de h_e étudiées, est donnée dans la figure IV.7.

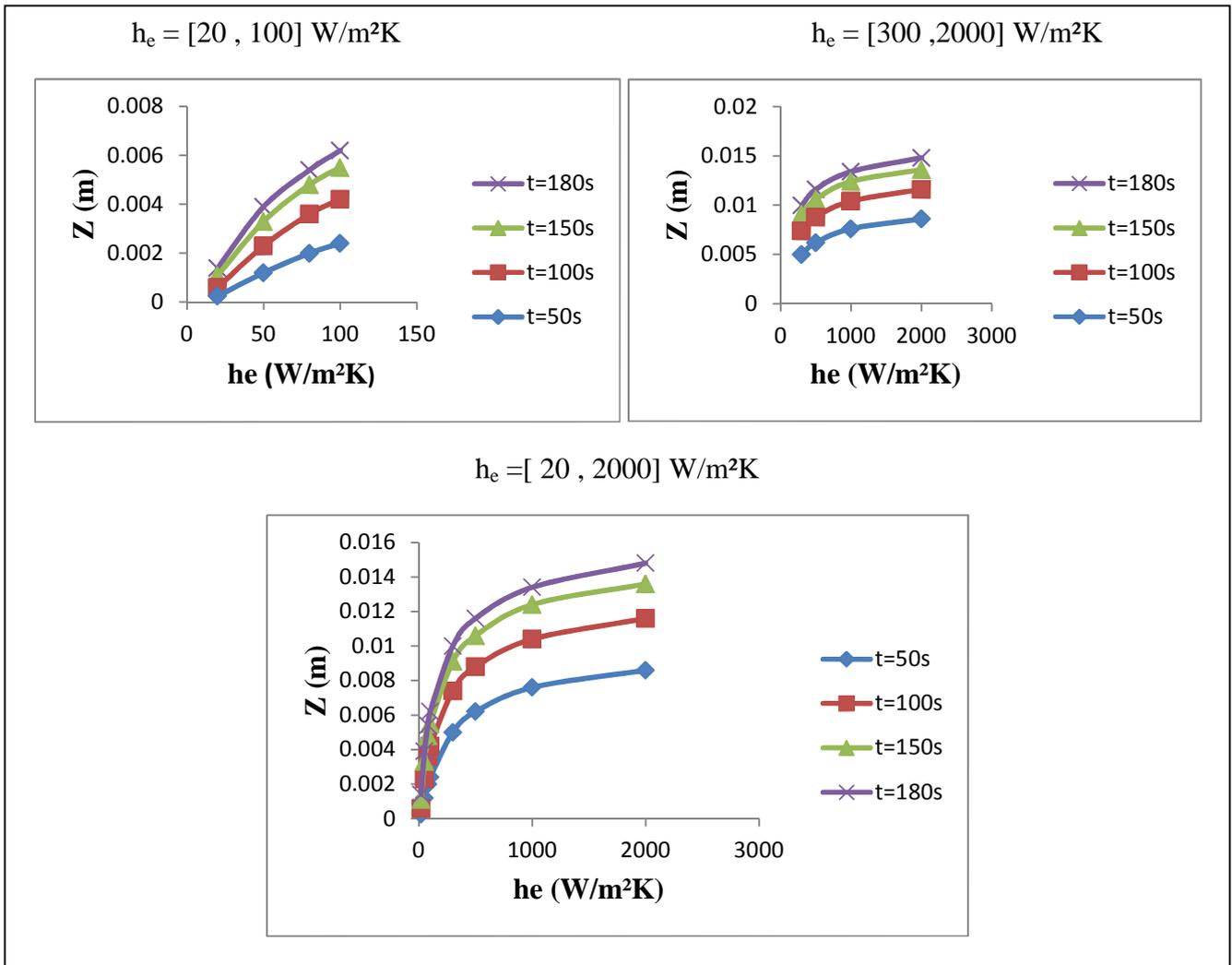


Figure IV.6: Evolution du front de solidification en fonction du h_e avec toutes les valeurs

Remarque :

Vu la différence qu'il ya entre les deux premières valeurs de h_e et les deux dernière, pour mieux voir l'évolution sur le premier intervalle on a préféré établir un graphe pour chaque intervalle ensuite présenter un troisième graphe qui les unit.

Dans la figure IV.6 la courbe des Z en fonction de h_e que pour les 4 temps les courbes d'évolution ont la même allure pour $h_e=[20\text{et } 2000]$.

l'évolution est une fonction croissante de h_e mais on remarque aussi que l'évolutions pour les petite valeur de h_e est plus importante par rapport a celle des grandes valeurs la

hauteur atteinte entre $h_e=[20 \text{ et } 100]$ qui est un intervalle plus court que celui entre $h_e=[500 \text{ et } 2000]$ mais la hauteur atteinte est proche de celle du premier intervalle car au début de l'évolution et aux faibles valeurs du coefficient d'échange la croissance se base sur l'axe des Z mais en avançant dans le temps et lorsque le front atteint une certaine hauteur la solidification commence à avancer sur les deux axes ce qui rend l'évolution du front sur l'axe des z plus lente.

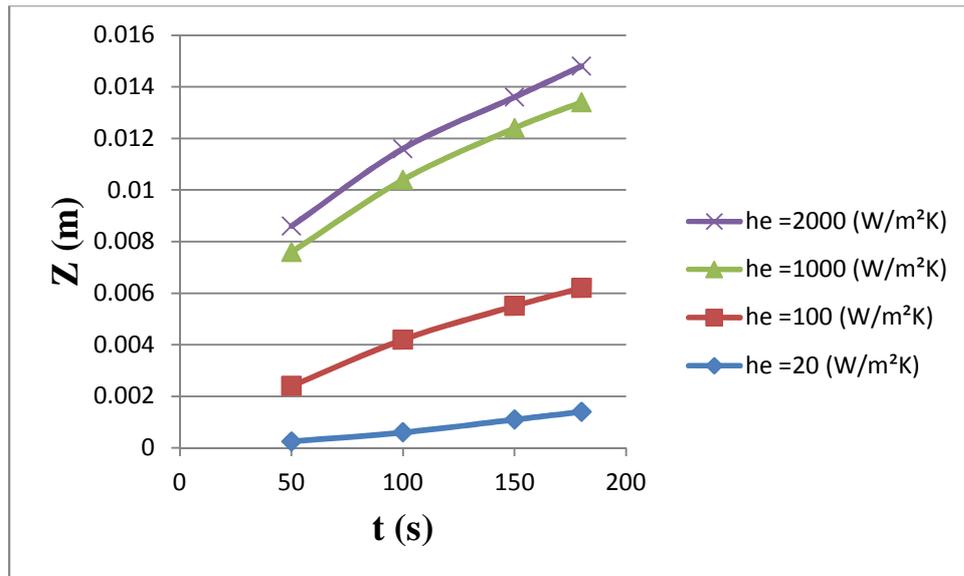


Figure IV.7 : L'avancement du front de solidification en fonction du temps pour différentes valeurs de coefficient d'échange convectif

Dans ce graphique on voit que l'évolution du front sur l'axe de symétrie pour les faibles valeurs coefficients d'échange est une fonction croissante et linéaire mais $h_e=1000$ et 2000 cependant pour les grandes valeurs du coefficient d'échange cette évolution perd sa linéarité mais reste toujours croissantes.

Comme nous l'avons expliqué aux faibles valeurs de h_e l'évolution est linéaire puisque la croissance est sur l'axe des Z seulement mais sur les grandes valeurs la croissance évolue sur les deux axes donc la fonction n'est pas linéaire.

IV.3. Effet du coefficient convectif de l'échangeur sur la température

La température la plus basse est située au niveau de l'échangeur, elle est croissante en fonction de la hauteur du creuset. On observe que la forme des isothermes est conforme avec la forme du front de solidification pour tous les cas étudiés. On note que l'isotherme correspondante à la température de fusion (dans notre cas c'est le saphir $T_f=2323.15\text{K}$)

coïncide toujours avec l'interface de croissance cristalline correspondante à la valeur de la fraction liquide 0.5.

Au début de la croissance cristalline, les lignes isothermes sont très proches les unes des autres au voisinage de l'échangeur, elles deviennent distantes en s'éloignant. On note ici le développement d'une couche limite thermique induite par l'échange de chaleur par refroidissement. Au dessus du front de solidification la température est constante, cela est dû à l'absence d'échange thermique.

À mesure que le cristal de saphir croît, la couche limite disparaît et les isothermes s'éloignent les unes des autres surtout pour les échangeurs de plus grand coefficient d'échange convectif pour lesquels les lignes isothermes deviennent presque parallèles à la base du creuset. Lorsque h_e augmente le refroidissement sera plus rapide ainsi que l'avancement de l'interface de solidification, cela est dû à l'extraction d'une grande quantité de chaleur.

On remarque aussi que la distribution des isotherme et leur forme est beaucoup plus claire dans les deux cas où les h_e sont plus faible, vu que l'interface de croissance du cristal n'a pas atteint de grand niveau donc on peut voir plus d'isotherme dans ces deux derniers cas et on peut suivre mieux leur évolutions.

Avec les plus grandes valeurs du coefficient d'échange h_e (1000 et 2000) on ne peut pas voir les isotherme qui sont supérieures au niveau de l'interface solide-liquide puisque la prochaine isotherme doit se situer hors du creuset Figures IV.2, IV.3 et IV.4 et IV.5.

Pour avoir plus de précision sur l'évolution de la température on trace les courbes du nombre de Nusselt maximale en fonction de h_e Figure (IV.8) et Nusselt minimale (Figure IV.9)

La courbe des $N_{U_{max}}$ dans la figure IV.8 est une fonction linéaire parce que l'influence de la conduction sur ce travail est régie par une loi qui est une fonction linéaire.

La figure IV.9 montre que $N_{U_{min}}$ en fonction de h_e est une fonction linéaire et les 4 courbes du temps sont des droites confondues et décroissantes.

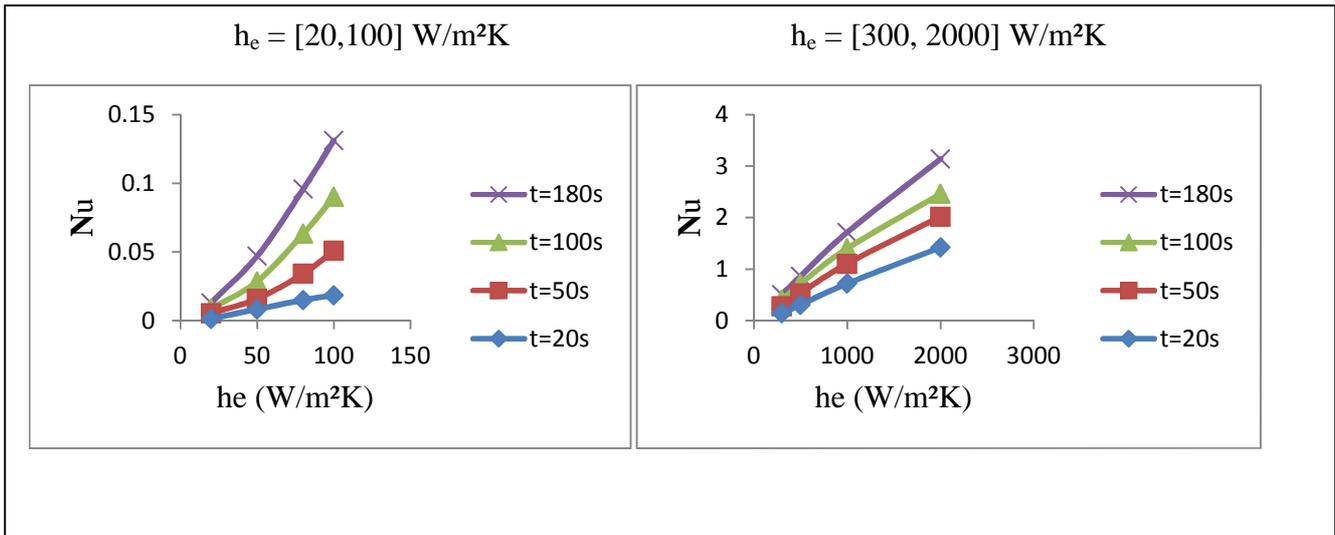


Figure IV.8 : Evolution du nombre de Nusselt maximal pour différentes valeurs de h_e

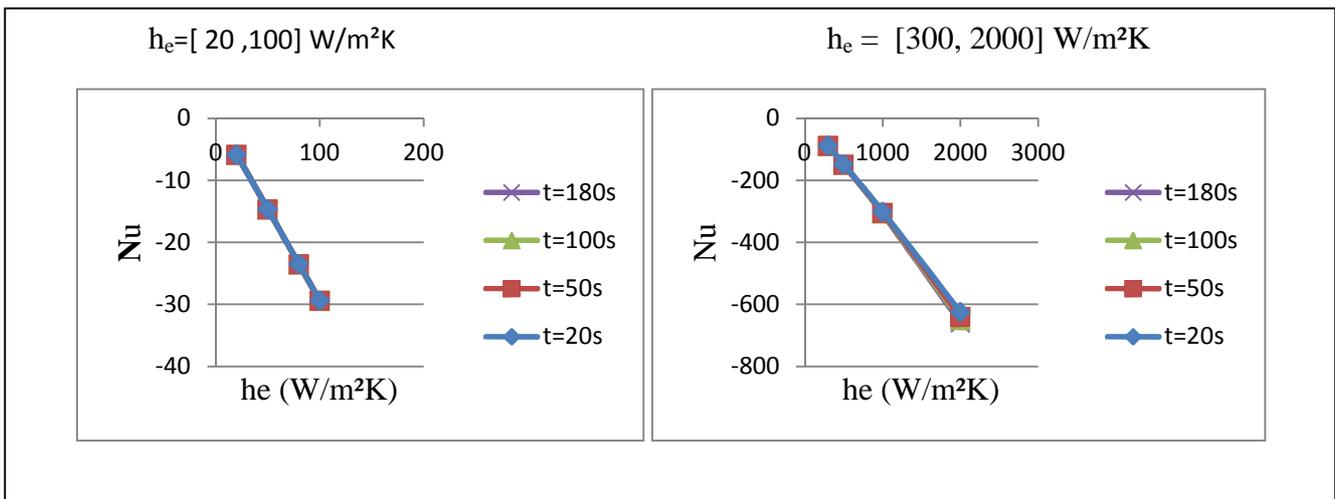


Figure IV.9: Evolution du de Nusselt minimal pour les différentes valeurs de h_e

IV.4. Effet du coefficient convectif de l'échangeur sur les composantes de la vitesse

Les figures IV.10, IV.11, IV.12 et IV.13 donnent la distribution de la vitesse axiale et la vitesse radiale à différent valeur de $t=20 ; 50 ; 100 ; 180\text{s}$ respectivement pour les différentes valeurs du coefficient d'échange convectif.

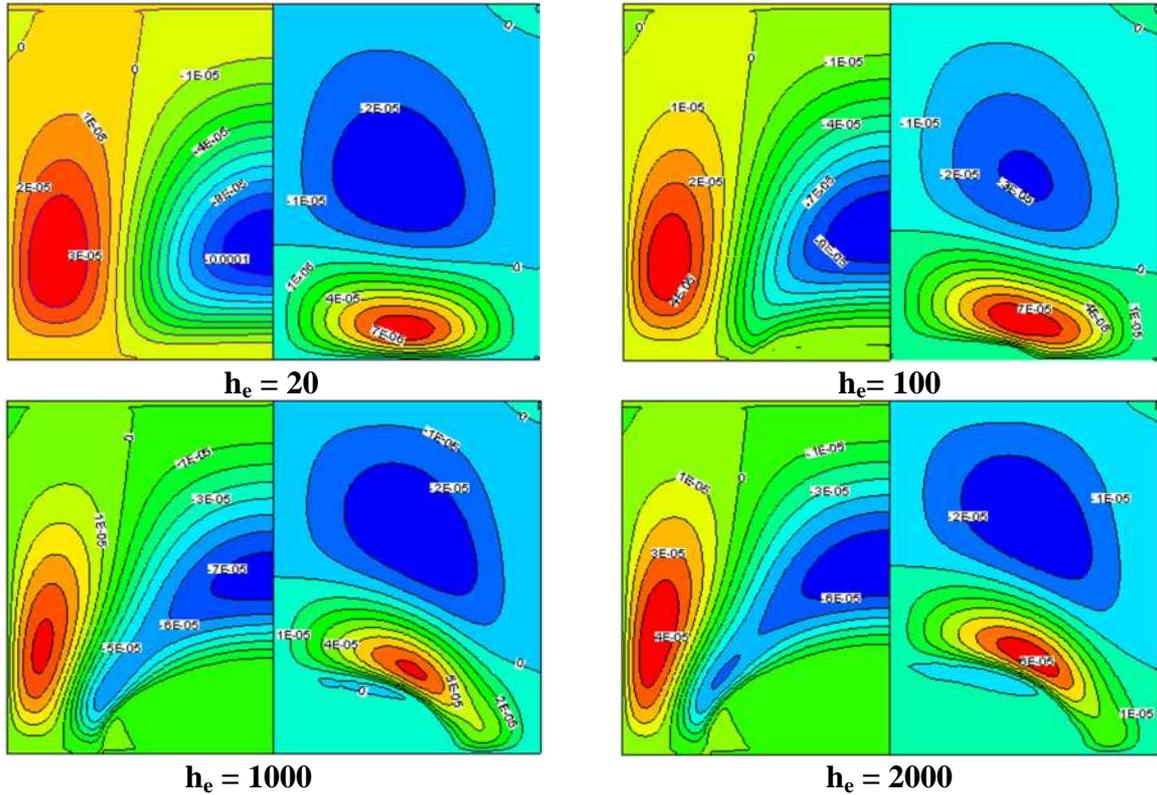


Figure IV.10 : Distribution de vitesses axiales (à gauche) et radiales (à droite) à $t=20s$ pour différentes valeurs de h_e

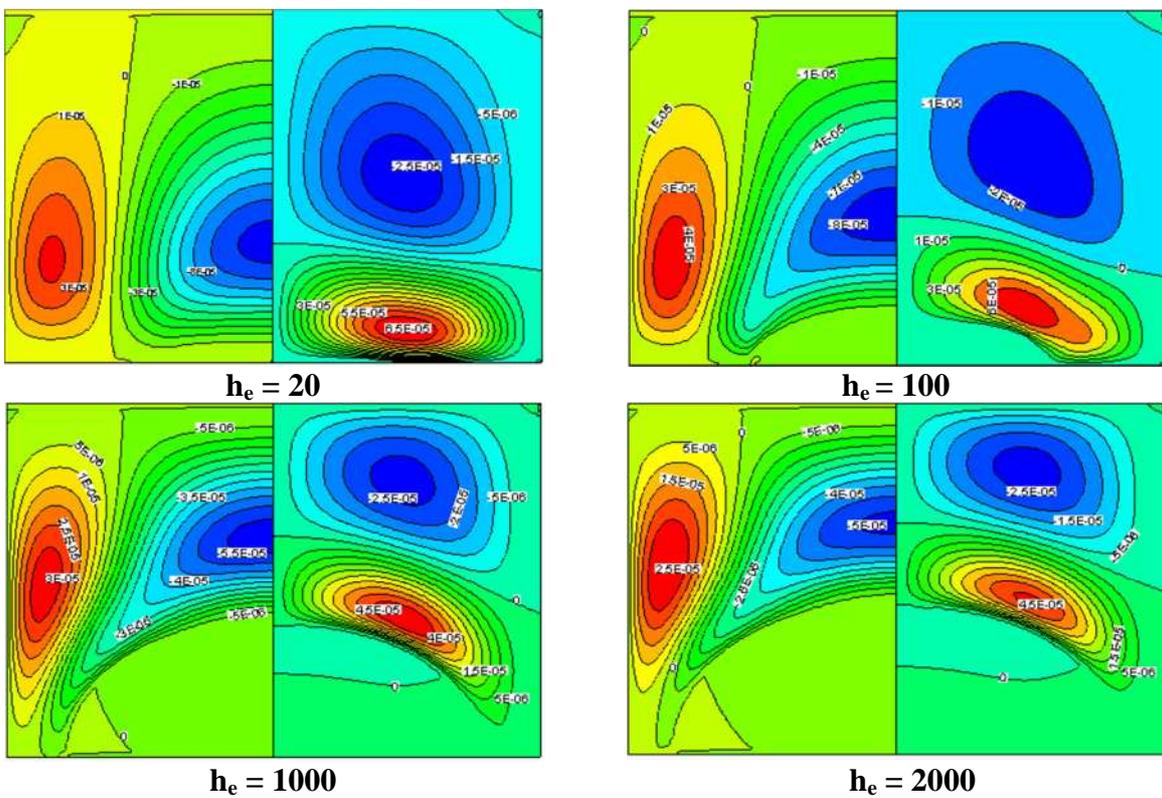


Figure IV.11: Distribution de vitesses axiales (à gauche) et radiales (à droite) à $t=50s$ pour différentes valeurs de h_e

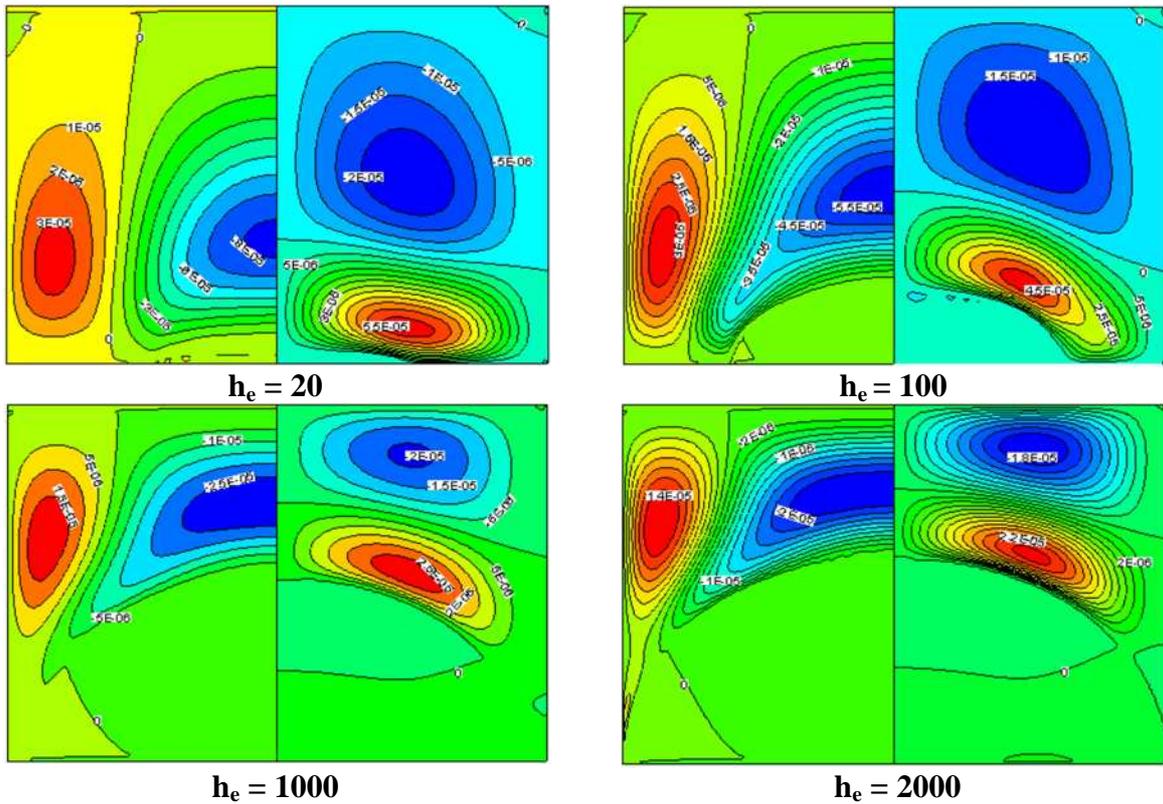


Figure IV.12 : Distribution de vitesses axiales (à gauche) et radiales (à droite) à $t=100s$ pour différentes valeurs de h_e

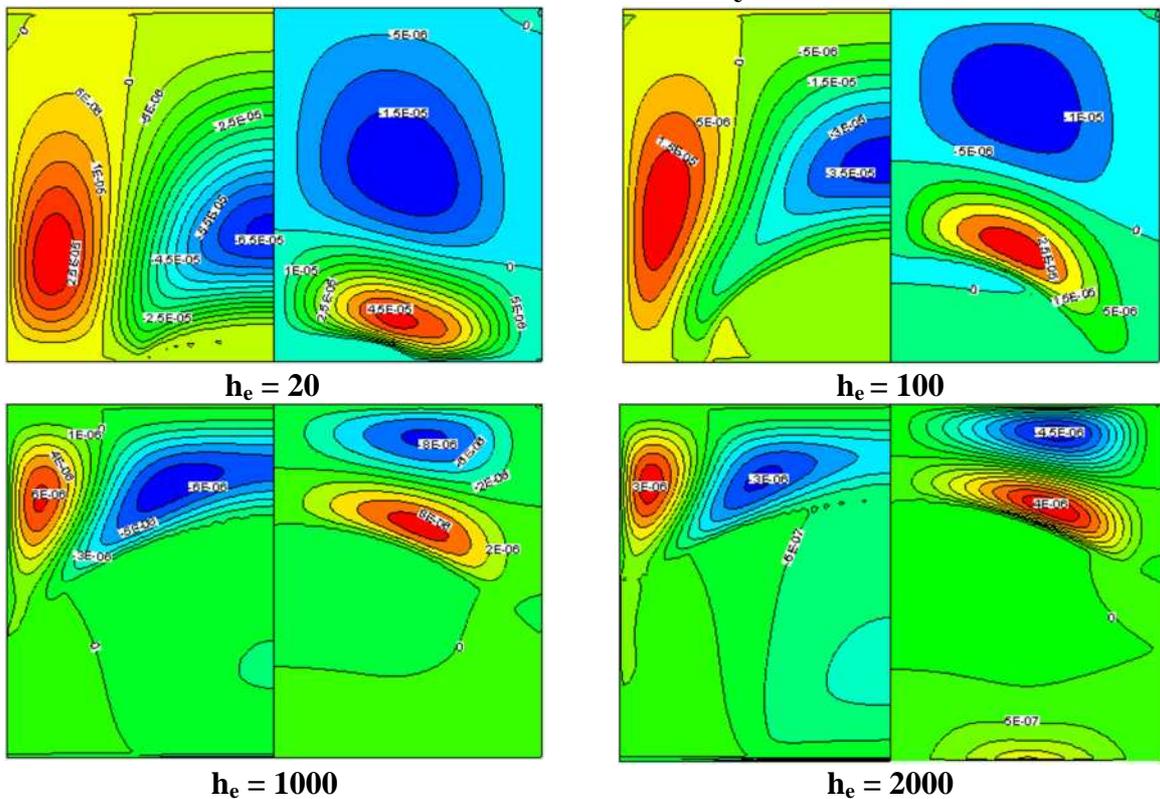


Figure IV.13 : Distribution de vitesses axiales (à gauche) et radiales (à droite) à $t=180s$ pour différentes valeurs de h_e

Dans les contours de la vitesse radiale, on note la présence de deux vortex, le premier à intensité positive se situant près de l'interface de croissance et le deuxième à intensité négative dans la partie supérieure du creuset. Le vortex positif se déforme suivant la forme de l'interface de croissance. Au cours du temps les dimensions de ces vortex diminuent avec l'évolution du front de solidification.

Pour la vitesse axiale, un vortex d'intensité positive est situé près de la paroi du creuset et un demi-vortex à intensité négative dont le centre est situé sur l'axe de symétrie. Les valeurs des vitesses radiale et axiale sont nulles dans la partie solide.

Au cours du temps, la vitesse axiale subit plus de changement par rapport à la vitesse radiale, cela est dû à l'avancement du front de solidification que se fait axialement.

IV.5.Effet du coefficient convectif de l'échangeur sur la pression

Les figures IV.14, IV.15, IV.16 et IV.17 donnent la distribution de la pression et la fonction de courant à différentes valeurs de $t=20;50;100;180$ respectivement pour les différentes valeurs du coefficient d'échange convectif.

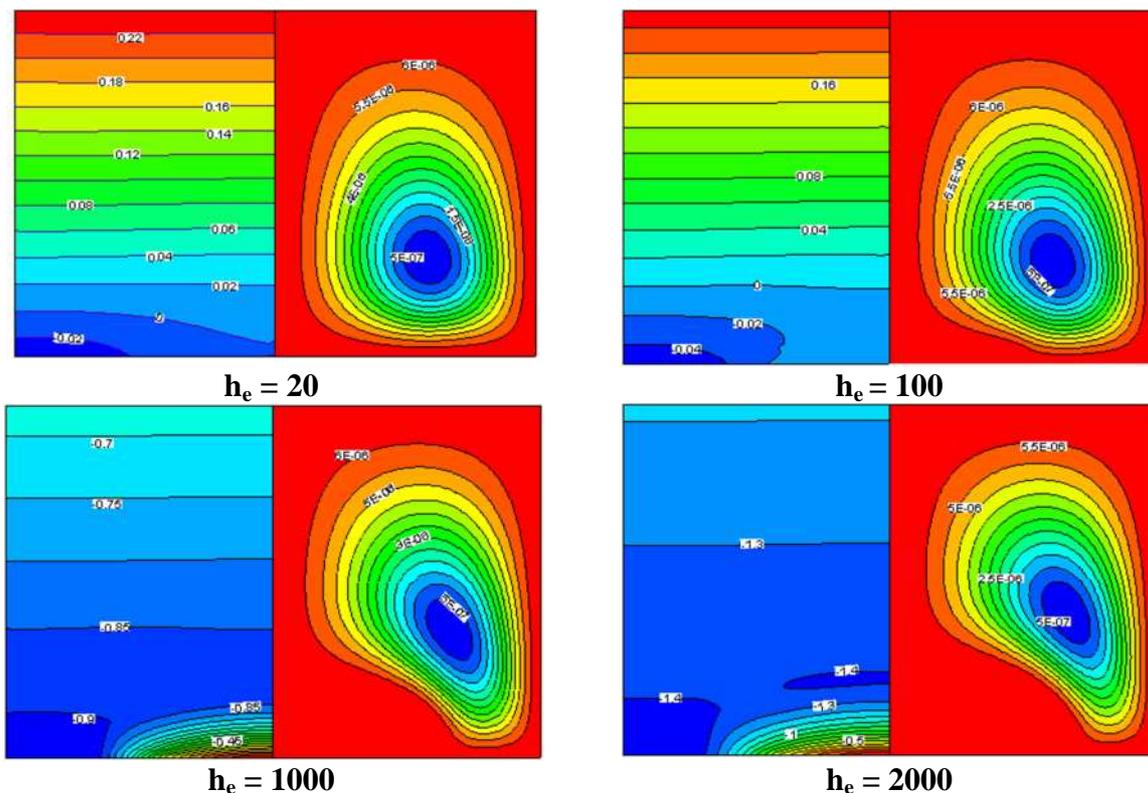


Figure IV.14 : Distribution de pression et lignes du courant à $t=20s$ pour différentes valeurs de h_e

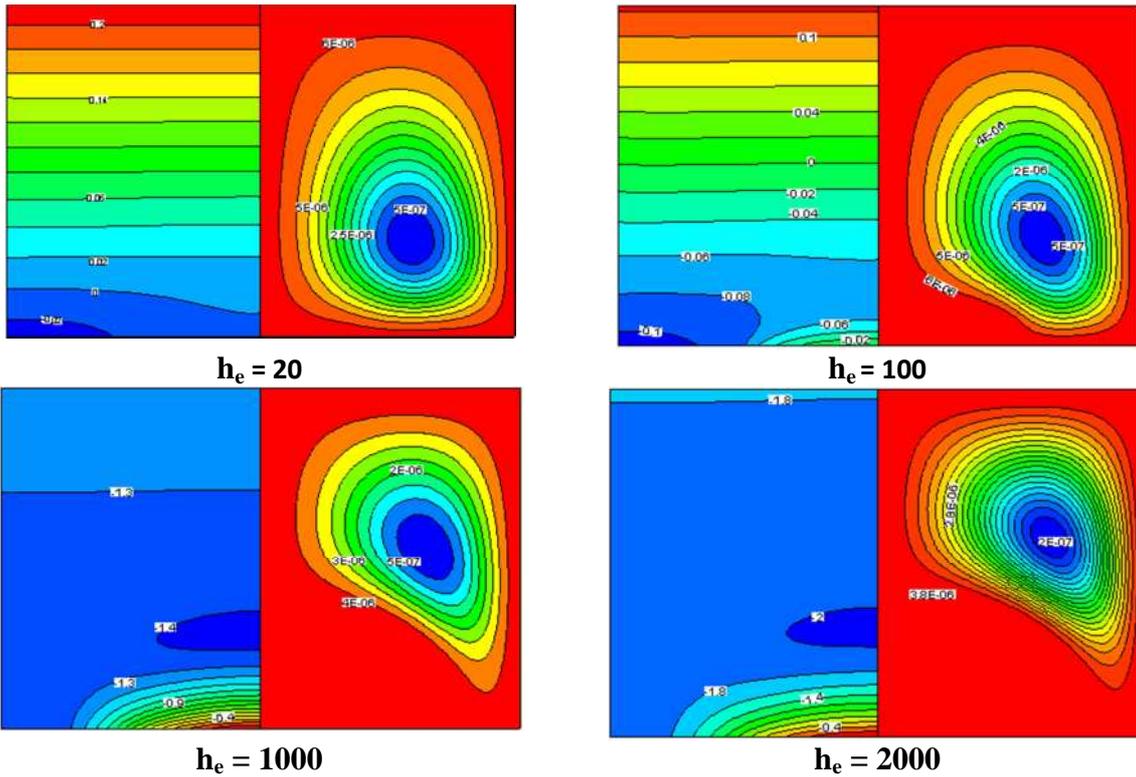


Figure IV.15 : Distribution de pression et lignes du courant à $t=50s$ pour différentes valeurs de h_e

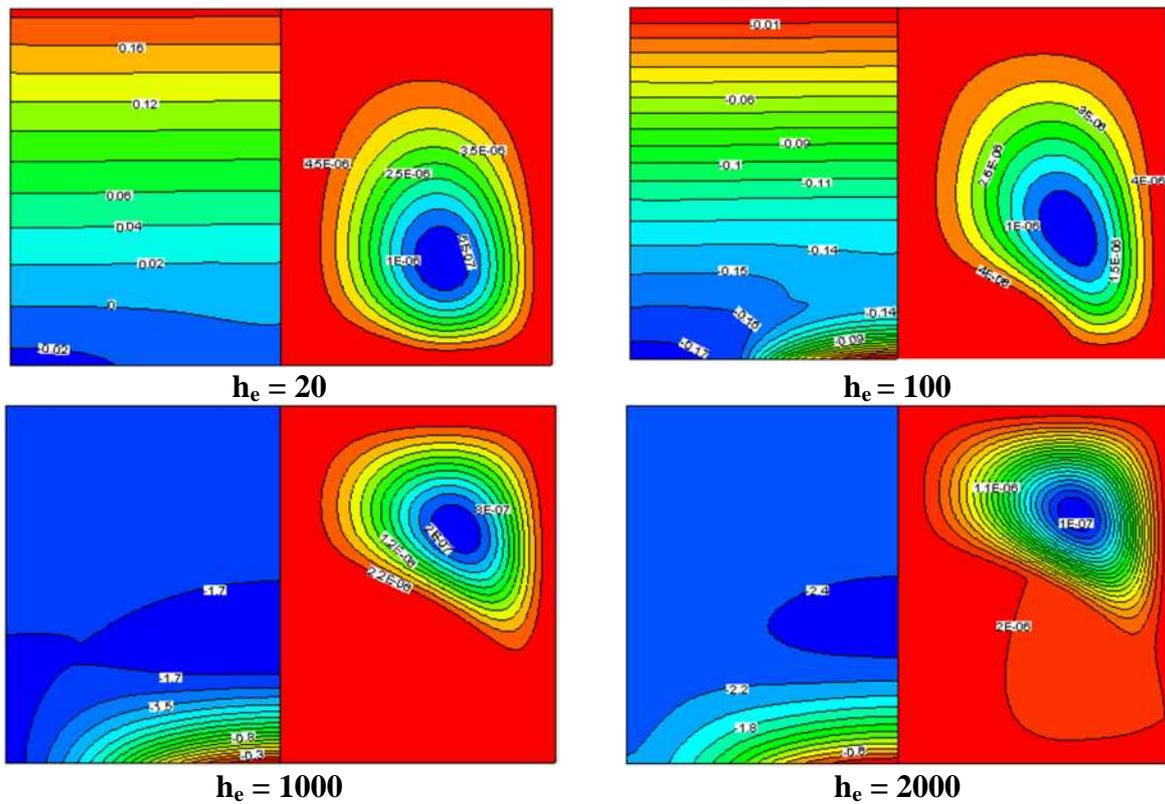


Figure IV.16 : Distribution de pression et lignes du courant à $t=100s$ pour différentes valeurs de h_e

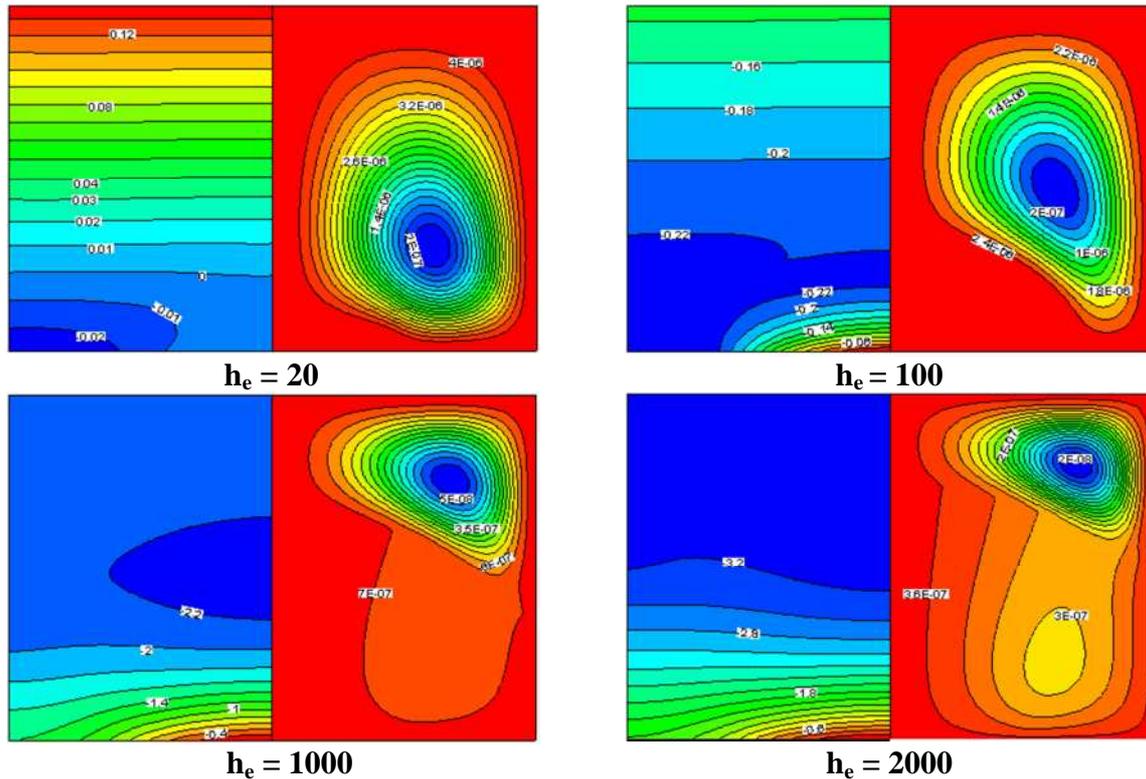


Figure IV.17 :Distribution de pression et lignes du courant à $t=180s$ pour différentes valeurs de h_e

Au début du processus de la croissance cristalline pour les faible h_e on constate les lignes isobare sont parallèles et ont pour base le coin du four.

Pour les grandes valeurs de h_e on note une forte de concentration des lignes isobares près des échangeurs et une distribution quasi-uniforme des pressions loin des échangeurs.

On note que pour tout les cas étudiés, la pression est élevée près de l'échangeur et elle diminue en son voisinage. Ensuite, elle diminue progressivement en allant vers la paroi supérieure du creuset.

On remarque aussi que les lignes isobares sont très concentrées près de l'échangeur et elles sont distantes et uniformément réparties en s'éloignant de la base. Autrement dit, le gradient de pression est très fort près de l'échangeur, il s'affaiblie loin de celui-ci. Cette variation de la pression et des gradients de pression sont provoqués essentiellement par le transfert de chaleur et le changement de phase liquide-solide au voisinage de l'échangeur et aussi a la chaleur entrante par les parois du creuset.

Pour plus de clarté on a tracé les courbes de P_{max} et P_{min} on fonction de h_e

P_{\max} pour les petit h_e pour $t=20s$ les courbes sont droite ainsi que pour $t=50$ et $100s$ donc P_{\max} en fonction de h_e est une fonction linéaire décroissante. Mais pour $t=180s$ la courbe s'annule pour la grande valeur de h_e a $t=20s$ la courbe est décroissante puis s'annule.

Pour les P_{\min} les courbes sont descendante et les valeur de P_{\min} sont négatives donc la pression minimale est inversement proportionnel a h_e .

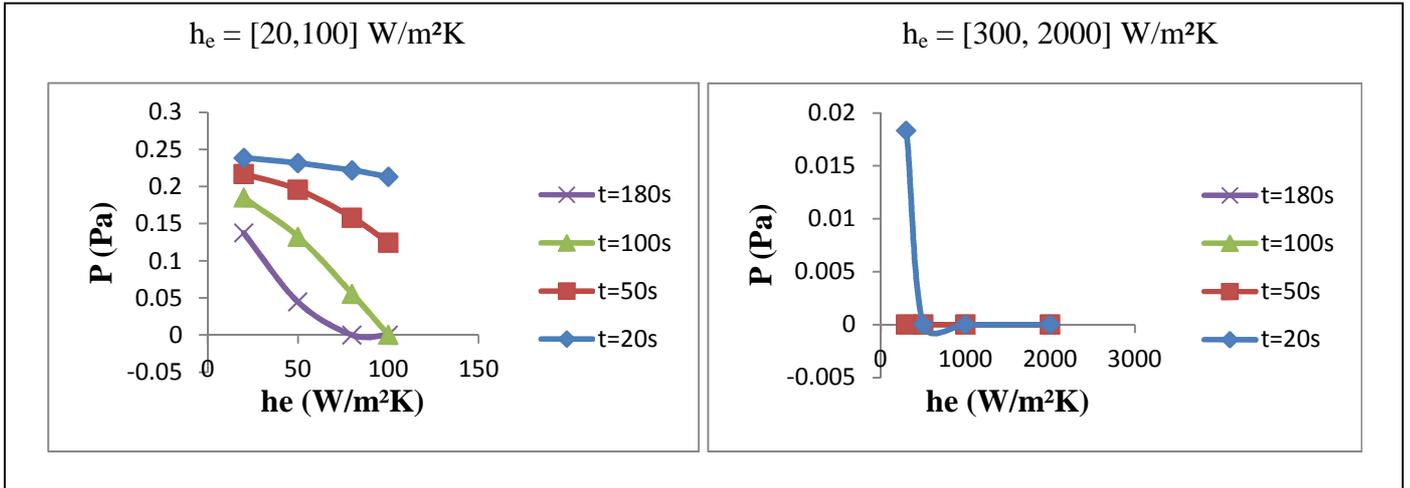


Figure IV.18 : Evolution de la pression maximal pour différente valeur de h_e

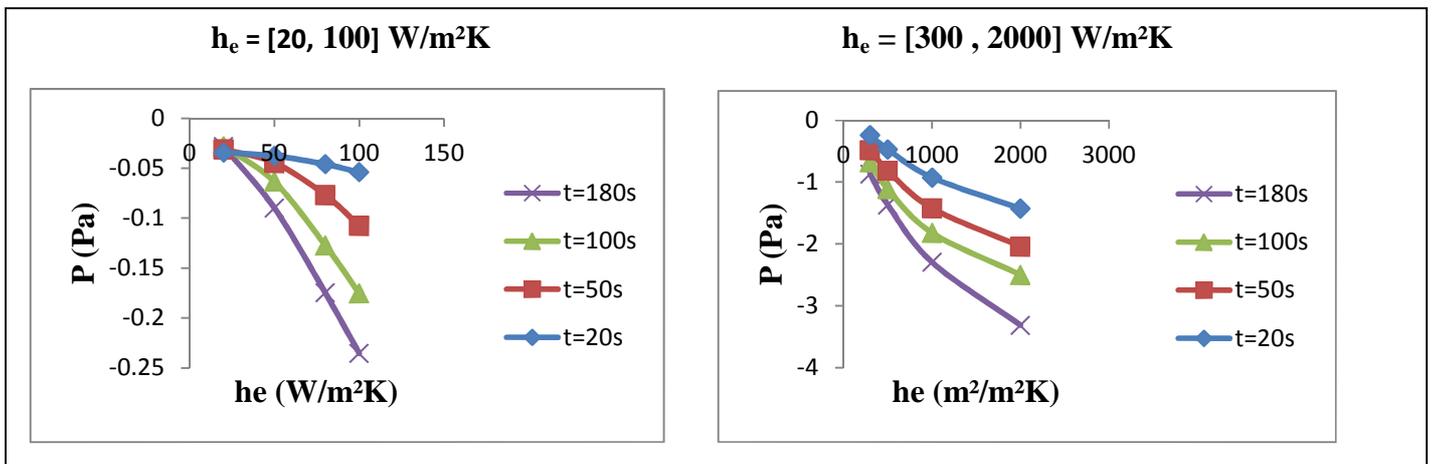


Figure IV.19 : Evolution de la pression minimal pour différente valeurs de h_e

IV.6. Effet du coefficient d'échange convectif de l'échangeur sur la fonction courant

Les figures IV.14, IV.15, IV.16 et IV.17 donnent la distribution de la pression et des lignes du courant à pour différentes valeur de coefficient d'échange convectif de l'échangeur de chaleur.

On note que la fonction courant est nulle sous l'interface de solidification ce qui correspond à la partie solide. Cependant, les lignes de courant forment des tourbillons dans la

partie liquide. Ces tourbillons se déforment en épousant la forme de l'interface. Au cours du temps, ils se déplacent vers la partie supérieure du creuset et leurs tailles s'affaiblie car le saphir devient progressivement cristallin. On note ici que les valeurs de la fonction courant sont trop faibles car dans ce procédé de croissance il n'existe pas des parties mobiles, et pas de convection naturelle comme le processus de Czochralski décrit dans le premier chapitre. On remarque aussi que l'intensité du vortex diminue avec l'augmentation de h_c donc avec l'augmentation de la vitesse de solidification.

Pour avoir plus de précision sur l'effet du coefficient d'échange h_e sur la fonction de courant on trace les courbes de fonction de courant maximale et minimale en fonction de h_e pour les petites valeurs et pour les grandes valeurs de h_e et une courbe générale pour toute les valeurs.

Les figure(IV.20) montre que pour les faibles valeurs de h_e Ψ_{max} en fonction de h_e est presque constante légèrement croissante pour les temps 20et 50s, mais en avançant dans le temps et aussi avec la grande valeur de h_e donc après l'avancement du front l'allure des courbe des Ψ_{max} commence a changé a partir de $t=100s$,aussi pour $h_e=1000$ et $2000W/m^2 K$ les courbe sont décroissante mais vu les valeur des Ψ_{max} sont très proche la décroissance n'est pas bien claire et les courbes sont presque droite donc la fonction a presque une valeur constante.

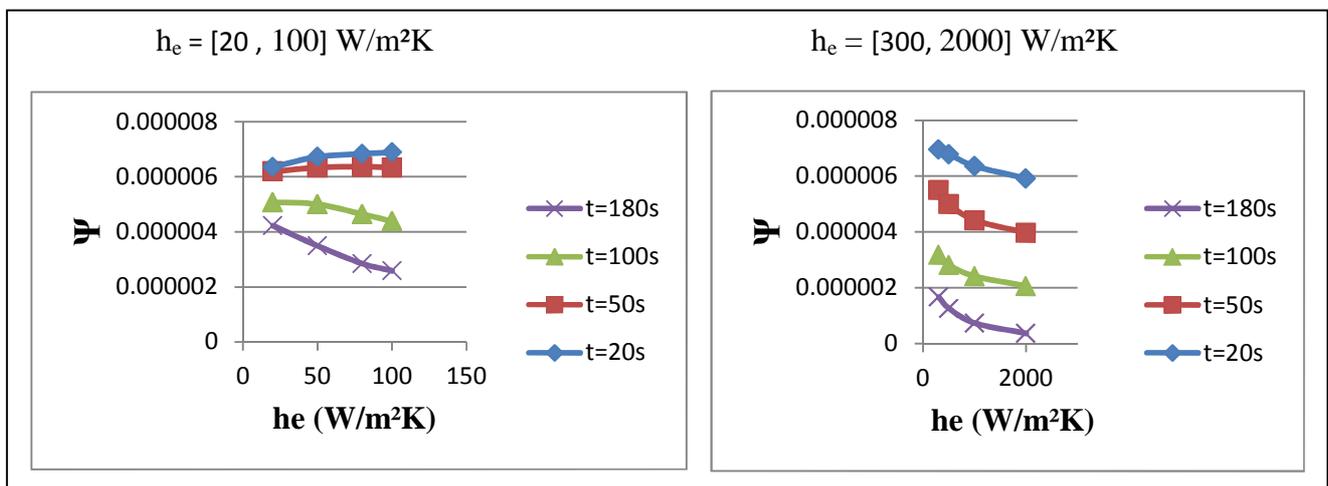


Figure IV.20 : Courbe de la fonction de courant maximale en fonction de h_e

Conclusion

Nous avons essayé d'étudier l'évolution du front de solidification du saphir par la méthode HEM, n'avons pas pu utiliser la même géométrie et ça revient à ce que les calculs de changement de phase prennent beaucoup de temps de calcul et demande des machines puissantes. (Une station de calcul HP xw-8600 de processeur de 3.16 GHz) dans notre cas nous avons utilisé un processeur simple pour réaliser les calculs.

Alors quand le coefficient d'échange convectif de l'échangeur est grand la qualité de saphir obtenu sera meilleure. Cependant, on sait pas si des échangeurs avec un grand coefficient d'échange sont utilisés dans l'industrie des cristaux donc on propose d'étudier l'influence des autres paramètres de la croissance, à savoir, la température de l'échangeur, la géométrie du creuset, le débit du liquide de refroidissement (Hélium) etc.

Conclusion générale

L'avantage principal de la méthode HEM étudié dans ce mémoire vient du fait que le matériau froid est en bas et le bain chaud est en haut, minimisant ainsi les effets néfastes de la convection. Le champ de température est plus stable par rapport aux autres techniques de croissance ce qui peut minimiser le sur-refroidissement, et assurer une croissance uniforme donnant un cristal parfait et homogène chimiquement.

En utilisant le code de calcul Fluent, on a pu faire l'investigation de l'effet du coefficient d'échange convectif de l'échangeur sur la croissance cristalline qui n'a pas été étudié auparavant. De même, il nous a semblé intéressant d'examiner l'évolution de la température et aussi celle de la pression au cours du processus de la croissance cristalline.

Le coefficient d'échange convectif de l'échangeur n'a pas d'influence sur la forme de l'interface de croissance mais il influence plutôt sur la température de solidification et aussi sur le temps de croissance.

Lorsque le coefficient d'échange convectif de l'échangeur augmente le refroidissement est plus rapide ainsi que l'avancement de l'interface de solidification, cela est dû à l'extraction d'une grande quantité de chaleur.

Lorsque les parois d'un creuset HEM ne sont pas adiabatique il faut prendre en considération le coefficient d'échange convectif de ces dernières et de leur surface pour le choix de la capacité d'échangeur, puisque pour que la croissance exige un taux de chaleur évacué par l'échangeur plus grand que celui rentré par les parois.

La forme des isothermes suit toujours la forme du front de solidification et l'isotherme correspondante à la température de fusion coïncide avec l'interface de croissance cristalline. Des forts gradients de température ont été trouvés au voisinage de l'échangeur au début de la croissance cristalline donnant naissance à une couche limite thermique induite par l'échange de chaleur par refroidissement. Cette dernière disparaît en avançant dans le temps.

La pression s'avère une caractéristique dynamique très importante ; son évolution est fortement liée aux paramètres de croissance comme les nombres de Grashof et de Marangoni et également à la forme de creuset. Elle est donc plus sensible que la température tant sur le plan qualitatif que quantitatif.

Le champ de pression nous a fourni plusieurs indications. On note ici que ce paramètre n'a pas été étudié auparavant par les spécialistes du domaine de la croissance cristalline à notre connaissance. Près de l'échangeur, le gradient de pression est très fort au début de la

croissance, il s'affaiblit loin de celui-ci. Cette variation de la pression et des gradients de pression sont provoqués essentiellement par le transfert de chaleur et le changement de phase liquide-solide au voisinage de l'échangeur. Quand la proportion du volume du saphir cristallisé devient grande la pression décroît axialement.

Tous ces résultats, ainsi que beaucoup d'autres obtenus ou en cours de traitement illustrent la richesse des phénomènes rencontrés à travers cette étude (les différentes formes de front de la solidification ; la répartition des pressions et des températures...), malgré la difficulté du problème appréhendé. Ceux-ci font appel à une série de futurs travaux complémentaires afin de pouvoir répondre aux nombreuses questions soulevées à travers cette étude.

A la lumière de ces premiers résultats, il est souhaitable, voire nécessaire, de compléter ces essais préliminaires, par un deuxième volet consacré à la variation des autres paramètres de la croissance cristalline tels que la température de l'échangeur ; le débit du liquide de refroidissement et la géométrie de creuset

Références bibliographiques

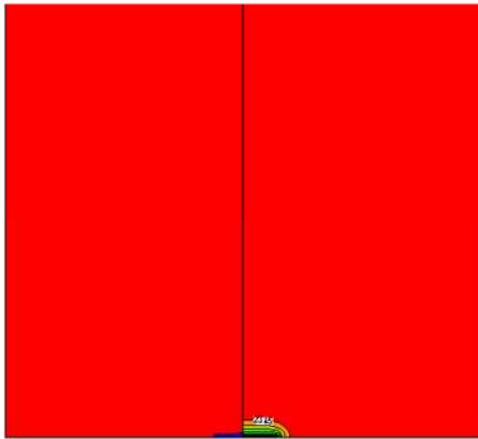
- [1] C. Morand, contribution à l'étude de la cristallisation du sel de Glauber ; école polytechnique fédérale. Zurich , 1959.
- [2] B.Muccheddu , Observateur pour un procédé de cristallisation en batch, université de Lyon, 2011.
- [3] F. BALBAUD, C. DESAGRANGES, C. DUHAMEL,L. MARTINELLI,R. MOLINS ,S. PERRIN,F. ROUILLARD , corrosion et protection des matériaux a haute température,179-193 , 2011.
- [4] A.oçafon, mise en œuvre et utilisation de la méthode de l'échangeurs de chaleur pour obtention des monocristaux à application spécifique et céramique supraconductrice orientées , université de bordeaux 1 ,1995.
- [5] S. Lamine, étude experimental et thermodynamique du procédé de moulliage appliqué aux semiconducteurs,institut national polytechnique de Grenoble 2008
- [6] M.Chavoutier. cristalogense,caracterisation spectroscopique et potentialité laser de borates et d'oxyborates de terre rare dopée ytterbium,unniversité de Bordeaux 1, 2010
- [7]J.C. Brice , The growth of crystals from liquids , North Hollande/ American Elsevier (1973).
- [8]F.Schmid, D.Vietchnicki : « growth of sapphire disk from the melt by a gradient furnace technique; J.Amer.Cer.Soc ., Discussions and notes, 53-528,1970.
- [9]F.Schmid, C.P.Khattak, Laser focus/ Electro-optics, Large crystal saphir optics, 19-147, 1983.
- [10]D.Vietchnicki, F.Schmid: "Growth of large monocrystal AL_2O_3 by a gradient furnace technique, J.Crys.Growth, 11-345,1971
- [11] F. MOKHTARI- MERAH, Effet du facteur d'aspect géométrique sur la croissance cristalline dans le procédé de Czochralski modifié, USTHB, Alger,2010
- [12] C.P.Khattak , F.Schmid, Silicon processing for Photovoltaics II p. 153 (1987).
- [14] C.P.Khattak , F.Schmid, J. Cryst. Growth Vol. 255 p. 572 (2001)
- [15] J.Dong , P.Deng, J. Cryst. Growth Vol. 261 p. 514 (2004)
- [16] A.Oçafraïn, J.P.Chaminade, O.Viraphong, R.Cavagnat,M.Couzi et M.pouchard, J. Cryst. Growth Vol. 166 p. 414 ,1996.
- [17] V.Peters, A.Boltz, K.Petermann, G.Huber, J. Cryst. Growth Vol. 237 p. 879 (1996)
- [18] J.H.Wang, D.H.Kim, J.S.Huh, J. Cryst. Growth Vol. 174 p. 13 ,1997.

- [19] C.W.Lu, J.C.Chen, L.J.Hu, Mod. Sim. Mat. Sci. and Eng. Vol. 10 p. 147 ,2002.
- [20] J.C.Chen, C.W.Lu, J. Cryst. Growth Vol. 266 p. 239 ,2004
- [21] J.M.Kim, Y.K.Kim, Solar Energy Materials & Solar Cells, Vol. 81 p. 217,2004.
- [22] A.Ahmanache, N.Zeraibi, E.Arquis, 5th International Workshop on Modeling in Crystal Growth (IWMCG-5), Bamberg .Germany,2006.
- [23] H. Rahab, D. Ouadjaout, A. Manseri, O.Viraphong and J.P. Chaminade, Journal of Crystal Growth ,2007.
- [24] H.B. Xiong, Y. Ma and L.L. Zheng, J. of Crys.Growth (2007)
- [25] Chung-wei Lu,jyh chen chen , J. of Crys.Growth,vol225,274-281,2001.
- [26]K.Ouzia,L.Arab said,effet du facteur géométrique sur la croissance cristalline UMMTO, Tizi ouzou,2013.
- [27] V.R.Voller, C.Prakash, International J. Heat Mass Trans. Vol.30 p.1709 ,1987.
- [28] V.R.Voller, C.R.Swaminathan, Numerical Heat Transfer, Part B, Vol.19 p.175 1991.
- [29] A.D.Brent, V.R.Voller, K.J.Reid, Num. Heat Trans., Vol.13 p.297 ,1988.

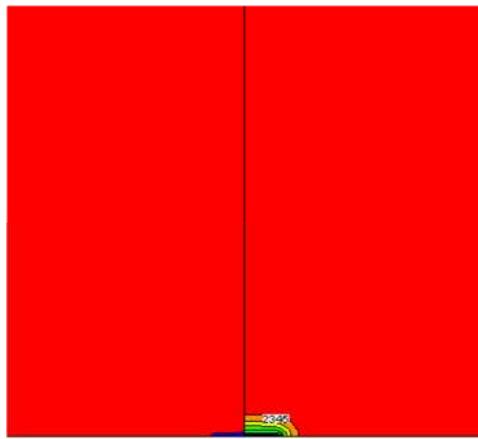
Annexe

I/ Etudes de la croissance cristalline HEM dans des conditions plus réalistes

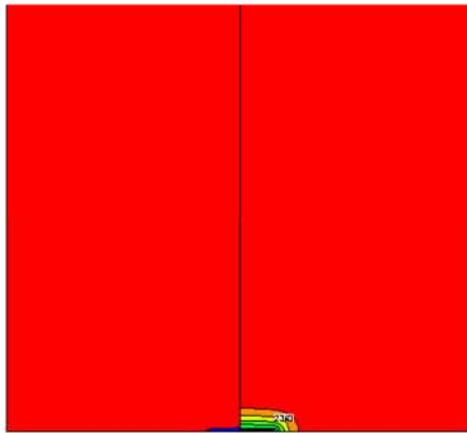
Au début du travail on a essayé d'étudier la croissance cristalline par la méthode de l'échangeur de chaleur dans des conditions plus réalistes en se basant sur l'article de C. Wei Lu et al (référence[25])] mais comme on peu voir les calculs de changement de phase prennent beaucoup de temps de calcul et demande des machines puissantes (une station de calcul HP xw-8600 de 8 processeurs de 3.16 GHz)



t=10s



t=20s



t=30s

II/Evolution de l'interface et la distribution de la température en fonction de temps

Ici on va représenté les résultats préliminaire qu'on a pu obtenir avec un creuset de hauteur de 0.13m et de rayon 0.065m et de rayon d'échangeur de 0.01m a trois temps différent a 10s et 20s et 30s pour un coefficient d'échange convectif de $h_e=100\text{W/m}^2\text{K}$

On peut voire que le taux de croissance au cours du temps est très faible et tres difficile a constaté sur le profil des températures pour les trois temps, vu que l'évolution est très lente