

Etude numérique de la Solidification de Cd ZnTe par la technique de Bridgman Verticale

Hanene Jamai*^a, H.SAMMOUDA^b

Email des auteurs ((hanene_jamai@yahoo.fr; habib.sammouda@fsm.rnu.tn))

Résumé : L'étude porte sur solidification du matériau poly-cristallin Cd ZnTe par la méthode de Bridgman verticale. En effet, nous envisageons numériquement les différents paramètres qui influent sur l'interface de solidification qui présente un facteur important pendant le processus de croissance cristalline. L'approche numérique est basée sur l'utilisation du code **COMSOL** qui se base sur la méthode des Eléments finis avec une formulation de type ALE (Arbitrary-Eulerian-Lagrangian). L'objectif principale de notre simulation est d'étudier des différents paramètres affectant le processus de solidification du CdZnTe en particulier l'aspect dynamique qui se focalise sur l'étude du déplacement de l'interface liquide-solide et l'aspect thermique traitant le transfert thermique au cours de tous le processus de la solidification

Mots clés : Solidification du CdZnTe : Configuration du Bridgman Verticale. , COMASOL, approche ALE..

Nomenclature

Cp	capacité calorifique à pression constante (J /kg K)
ΔH	enthalpi (J/ kg)
K	conductivité thermique (W/m K)
n	normal entrante à la phase liquide
T	temperature (K)
Tf	temperature froide (K)
Th	temperature froide (K)
Tm	temperature de fusion(K)
t	temps (s)
V	vitesse (m / s)
ρ	densité (Kg / m ³)

Subscripts

int	int erface
l	liquid
s	solid

1. Introduction

La croissance des cristaux, à partir d'un bain fondu, est un processus important pour l'industrie des semi-conducteurs. Les cristaux sont produits à partir d'un bain fondu en utilisant des techniques de croissance cristalline diverses telles que la configuration de Bridgman horizontal et verticale, zone flottante, Czochralski, ... [1-2] et [3]. En effet, La méthode de Bridgman verticale est l'une des méthodes de croissance la plus importante pour la croissance cristalline.

Lors de la croissance cristalline par la technique de Bridgman, des gradients de température suffisamment élevés peuvent se produire dans le bain fondu, engendrant ainsi des mouvements convectifs importants au sein du fluide. Ces mouvements de convection constituent un mode de transfert d'énergie important qui accélèrent le processus d'obtention des cristaux. En outre, La qualité du cristal est déterminée par de nombreux facteurs tels que, le contact cristal-creuset qu'est une source de contamination d'effets, thermiques (courbure de l'interface solide-liquide), interfaciaux (germination de grains ou macles parasites) et mécaniques (contraintes de dilatation différentielle) conduisant à des dislocations et des joints de grains. C'est ainsi qu'au cours du tirage, des nombreux phénomènes se manifestent. Ce pendant, au cours de tirage, la température du cristal n'est pas uniforme. Elle est égale à la température de fusion à l'interface de solidification, elle est minimum au sommet du cristal, et varie dans un rapport important.

Le besoin croissant pour la production d'un monocristal de haute qualité CdZnTe dans les 10 dernières années a été motivé par le développement de détecteurs infrarouges de hautes performances basé sur HgCdTe [4]. En effet, CdZnTe est matériau important pour deux raisons principales. Tout d'abord, il est transparent dans la

gamme de longueurs d'onde infrarouge, ce qui lui permet d'éclairer les réseaux de détecteurs connectés aux dispositifs de silicium lue au moyen de la technologie de bille d'indium [5]. D'autre part, l'addition de 3 à 5% de zinc dans les résultats de CdTe conduit à une diminution de la densité des dislocations des cristaux en raison de la liaison de renforcement Cd-Te [6]. De ce fait, la croissance de cristaux de haute qualité exige une connaissance détaillée des relations entre les paramètres de croissance contrôlables et les propriétés du matériau [7].

La modélisation numérique peut servir comme un outil efficace pour cette compréhension. Dans une «expérience», il est assez facile de faire varier les conditions aux limites particulières, telles que les températures des fours, les propriétés thermodynamiques et optiques de l'ampoule, les gradients de température dans le four, les vitesses de l'air entourant l'ampoule, et toutes les caractéristiques géométriques de l'expérience, sans la nécessité d'utiliser des matériaux de haute pureté coûteux impliqués dans l'essai expérimental et des techniques d'erreur utilisées dans le passé pour le même but. De ce fait la modélisation numérique restera un outil efficace pour résoudre certains problèmes rencontrés pendant la croissance d'un cristal.

Notre étude se focalise sur la modélisation de la solidification du CdZnTe en utilisant COMSOL, dont les étapes se résument dans la Fig.1

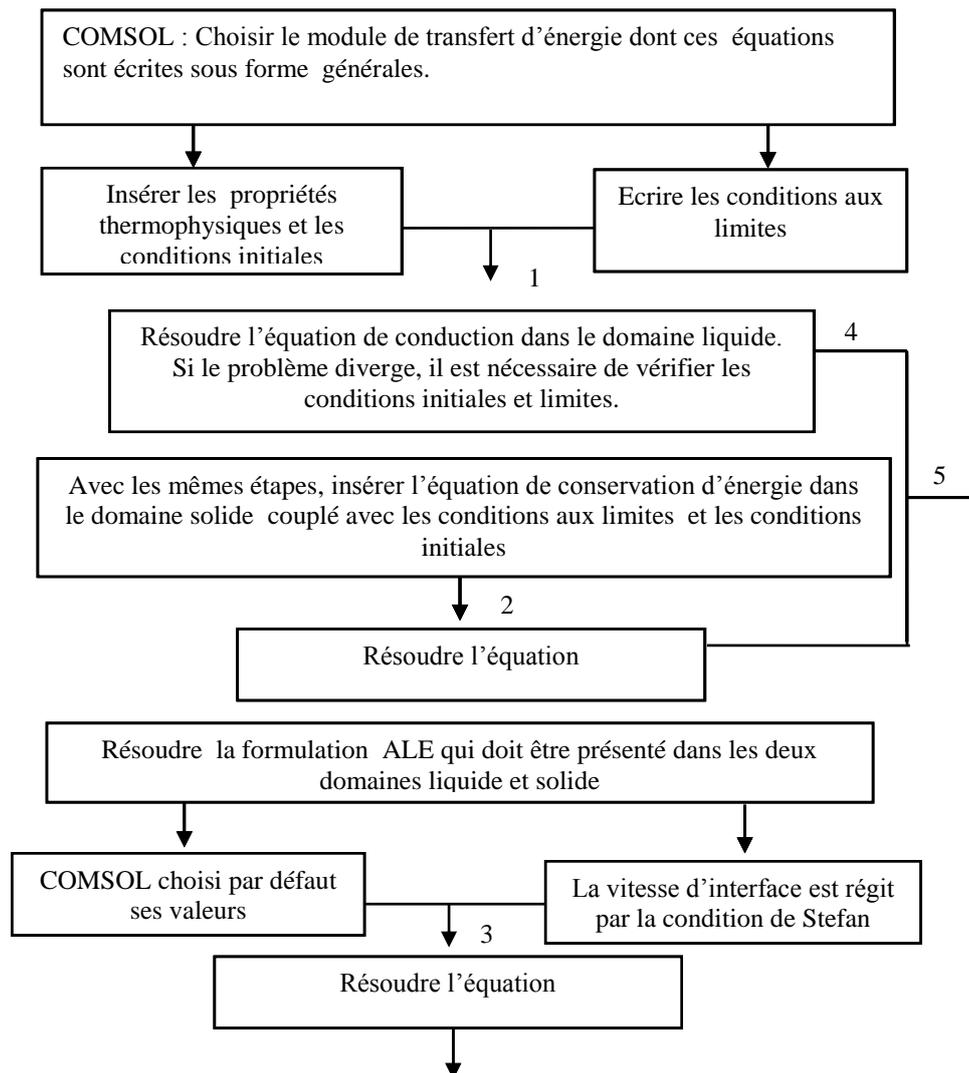


Fig.1 : Charte présentant les différentes étapes pour la solidification du CdZnTe dans COMSOL

2. Modélisation Mathématique

2.1. Description de la configuration étudiée

La configuration de Bridgman étudiée est une cavité bidimensionnelle cylindrique axisymétrique allongée verticalement de longueur $L=0.2\text{m}$ et de largeur 0.037m , subdivisée en deux domaines comportant une phase liquide et une phase solide séparée par une interface initialement plane. En outre la partie supérieure du domaine liquide est soumise à une température haute T_h alors que la partie inférieure du domaine solide est soumise à une

température froide T_f alors que l'interface commune de deux domaines est à température T_m qui est la température de changement de phase Fig.2. Mais les parois verticales sont adiabatiques.

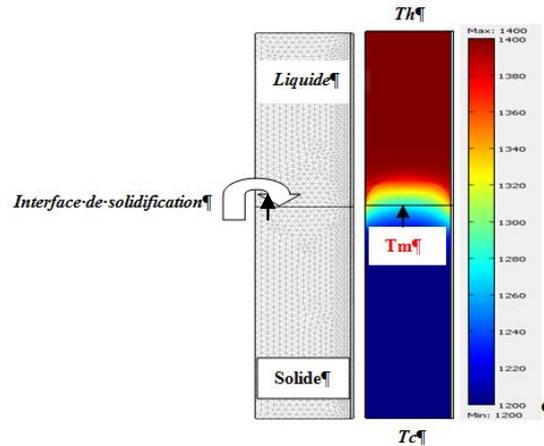


Fig. 2 : configuration géométrique

2.2. Description mathématique

On s'intéresse uniquement au phénomène conductif qui est régi par les deux équations de conservation d'énergie dans les deux domaines solide et liquide respectivement. On se place dans les conditions où la vitesse de tirage de l'ampoule est nulle ainsi sans tenir compte de l'effet du creuset sur la phase solide. Les équations de chaleurs dans le domaine liquide et solide sont :

$$\nabla(K_l \nabla T_l) - \rho C_{p_l} \frac{\partial T_l}{\partial t} = 0 \quad (1)$$

$$\nabla(K_s \nabla T_s) - \rho C_{p_s} \frac{\partial T_s}{\partial t} = 0 \quad (2)$$

Dans la configuration verticale de Bridgman, la forme de l'interface liquide solide est un facteur de contrôle important parce qu'une interface plane a pour effet bénéficielle de supprimer la ségrégation radiale de soluté et de l'incidence de polycristalline. Pour une interface plane, le gradient de température radiale doit être nul à l'interface. Ainsi que l'équation qui régit l'interface s'écrit comme suit :

$$K_s \frac{\partial T_s}{\partial z} - K_l \frac{\partial T_l}{\partial z} = \rho \Delta H V_{\text{int}} \quad (3)$$

Pour la conductivité thermique, la capacité calorifique à pression constante dans les deux domaines solide et liquide respectivement évoluent en fonction de la température comme mentionnés dans le tableau ci-dessous.

Property	Temperature	Polynomial
Conductivity, k_c , W/(K·m)	500 K < T < 1200 K	$5.337 - 2.263 \times 10^{-3}T$
	1200 K < T < 1364 K	$-38.31 + 6.78 \times 10^{-2}T - 2.811 \times 10^{-5}T^2$
	$T > 1364$ K	$9.987 - 5.676 \times 10^{-3}T$
Specific heat, C_e , J/(kg·K)	298 K < T < 1600 K	$177.8 + 1.663 \times 10^{-1}T - 6.607 \times 10^{-5}T^2 + 1.703 \times 10^{-8}T^3$
Density, ρ_c , kg/m ³	-	5680
Heat of fusion, ΔH_c , J/kg	1364 K	209000
Expansion coefficient	$T > 525$ K	6.3629×10^{-6}
Young's modulus, G_c , Pa	-	3.98×10^{11}
Poisson's ratio	-	0.459
Melting point, T_m , K	-	1364

Tableau 1 de propriétés thermo-physiques de CdZnTe [8, 9]

3. Résultats et discussion

Les résultats de nos simulations de calcul pour la solidification du CdZnTe sont donnés par la variation de la température (Fig.3, Fig. 4, Fig. 5), de vitesses de l'interface (Fig. 6) et de la position de l'interface (Fig.7) ainsi que l'effet du rapport de la conductivité sur son évolution (Fig. 8).

Ce pendant on remarque, pour la variation de la température en fonction des coordonnées axiale présente des sauts caractéristiques attendues de gradients de température Fig. 4, ainsi on remarque que la position de l'isotherme de la température à l'interface présentant un pic au tour du T_m puis elle démunie au cours du temps Fig. 5. En outre, la Fig. 5 illustre bien la mise en place du régime stationnaire.

Pour l'interface de solidification du CdZnTe, on remarque qu'elle croît en fonction du temps, et pour le rapport de la conductivité thermique de l'état liquide à solide au point de fusion $K = K_l / K_s$ s'est révélé d'une importance cruciale, car il pourrait changer à la fois l'amplitude et le signe de la courbure. Avec les valeurs étudiées, on a constaté que la condition $K < 1.1$ garantit la réalisation d'une interface convexe, alors que pour $K > 1.1$ l'interface devient concave. Il est donc possible de conclure que la mesure précise de la conductivité thermique près du point de fusion est de grande importance pour la croissance cristalline.

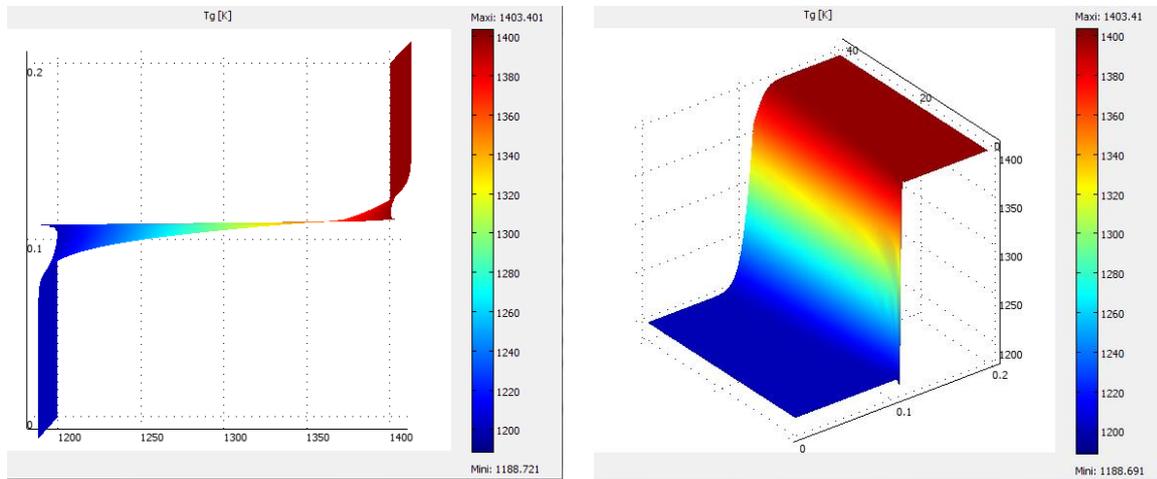


Fig. 3 : Evolution de la température au cours de la solidification de CdZnTe pour $T_h= 1400K$, $T_f=1200K$ et $T_m=1364K$

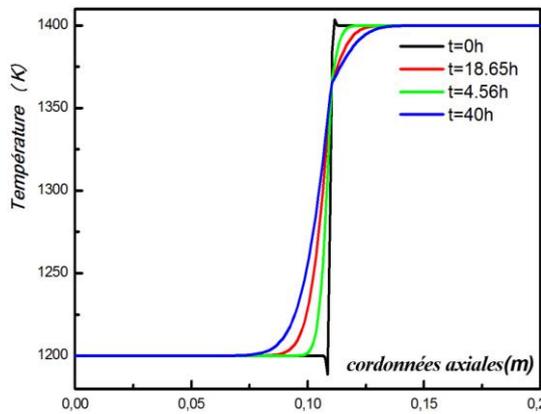


Fig. 4 : Evolution de la température de CdZnTe en fonction des coordonnées axiales, pour $T_h= 1400K$, $T_f=1200K$ et $T_m=1364K$

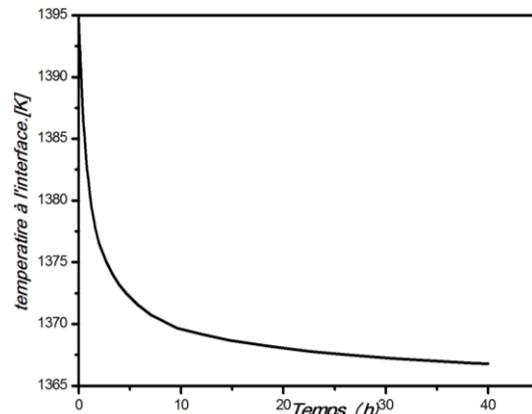
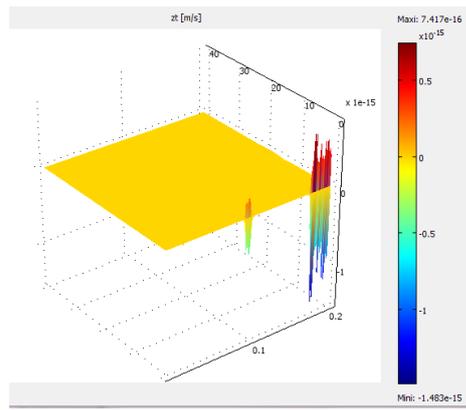
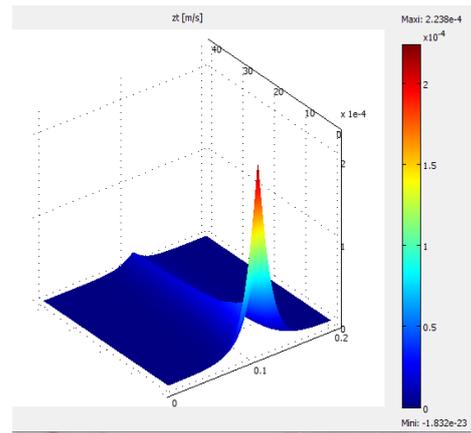


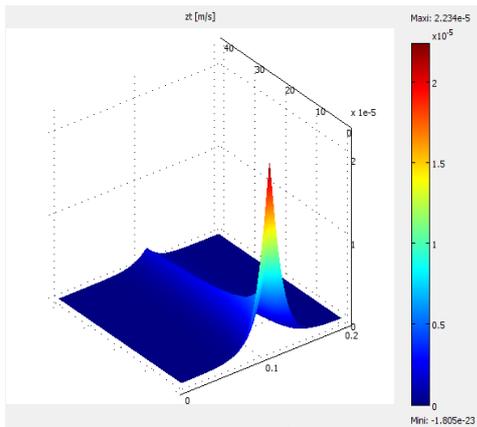
Fig. 5 : Evolution de la température à l'interface de CdZnTe en fonction du temps pour $T_h= 1400K$, $T_f=1200K$ et $T_m=1364K$



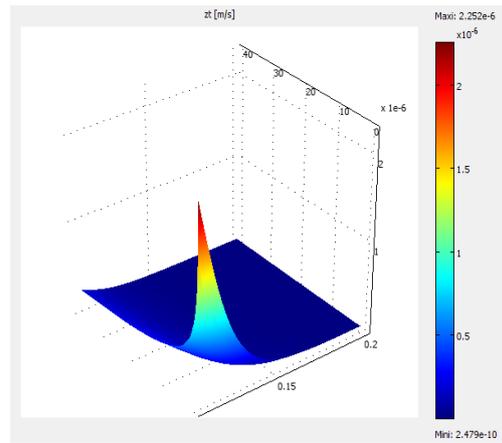
(a) $V_{int}=0$



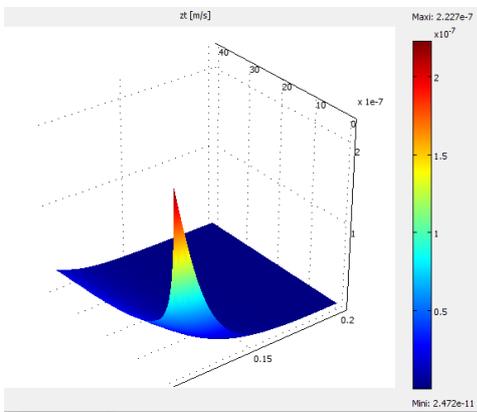
(b) $V_{int}=10^{-5}$



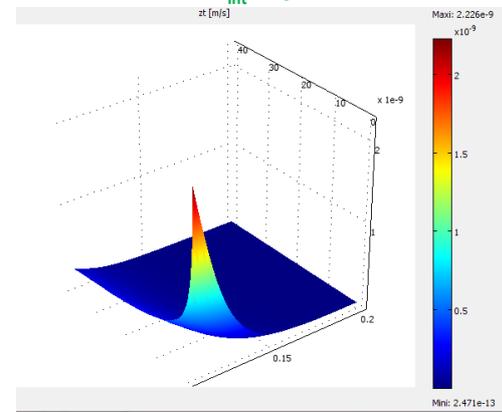
$V_{int}=10^{-6}$



$V_{int}=10^{-7}$



$V_{int}=10^{-8}$



$V_{int}=10^{-10}$

Fig. 6 : Evolution de la vitesse d'interface pour différentes valeurs prises, en fonction de coordonnée axiale et du temps

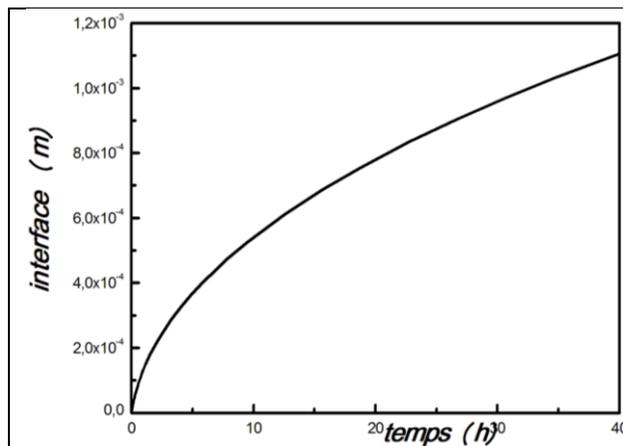


Fig. 7 : Evolution de l'interface de CdZnTe en fonction du temps pour $T_h=1400K$, $T_f=1200K$ et $T_m=1364K$

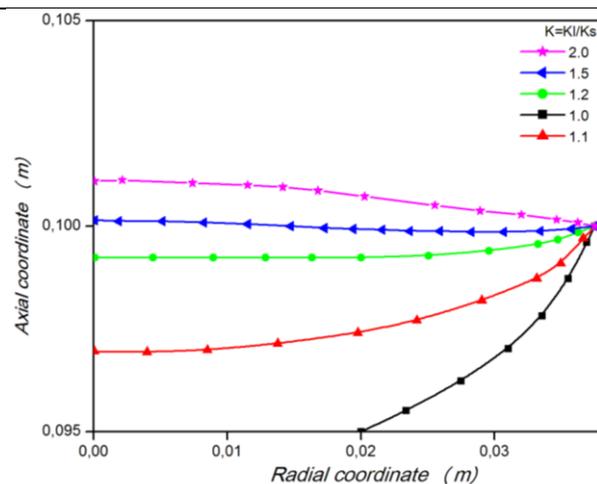


Fig. 8 : variation de coordonnées axiales en fonction des coordonnées radiales pour différentes valeurs du K pour $T_h=1400K$, $T_f=1200K$ et $T_m=1364K$

4. conclusion

Notre simulation se focalise sur l'étude des différents paramètres affectant le processus de solidification du CdZnTe. Ainsi, l'étude numérique porte sur l'utilisation du code COMSOL qui est à la base de la méthode des éléments finis avec la formulation ALE.

De ce fait on a essayé, dans cette étude, de visualiser l'isotherme de la température au cours de la solidification du CdZnTe. Parmi les paramètres importants, l'exactitude de la conductivité thermique par rapport à la relation de température expose l'influence la plus critique, en particulier sa partie proche de la température de fusion, car cela peut affecter la forme de l'interface de manière significative. Un autre facteur qui influe sur la l'interface de solidification est la variation de V_{int} .

Références

- [1] Hottel, HC, Woertz, BB. Performance of flat plate solar heat collectors. Transactions of ASME 1942;64:91–104.
- [2] Bliss, RW. The derivations of several 'plate-efficiency factors' useful in the design of flat plate solar heat collectors. Solar Energy 1959;3:55–64.
- [3] Liu, BYH, Jordan, R. The long-term average performance of flat plate solar-energy collector. Solar Energy 1963;7(2):53–74.
- [4] Whillier, A, Saluja, G. Effect of materials and construction details on the thermal performance of solar water heaters. Solar Energy 1965;9(1):21–26.
- [5] Gupta, GL, Garge, HP. System design in solar water heaters with natural circulation. Solar Energy 1968;12:163–182.
- [6] Yeh, HM., Ho, CD, Yeh, CW. Effect of aspect ratio on the collector efficiency of sheet-and-tube solar water heaters with the consideration of hydraulic dissipated energy. Renewable Energy 2003;28:1575–1586.
- [7] San Martin, RL, Fjeld, GJ. Experimental performance of three solar collectors. Solar Energy 1975; 17(6):345–349.

[

.