



## Etude Numérique des contraintes thermomécaniques et Naissances des dislocations au cours de la solidification des CdZnTe

Hanene JAMAI<sup>1</sup>, Habib SAMMOUDA<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Hanene Jamai, Laboratoire de Recherche Appliquée en Electricité, Electronique et Energétique à l'Ecole Centrale Polytechnique Privée de Tunis

<sup>2</sup>Habib Sammouda, LabEM, l'Ecole Supérieure des Sciences et de la Technologie de Hammam Sousse

[hanene\\_jamai@yahoo.fr](mailto:hanene_jamai@yahoo.fr)  
[habib.sammouda.@yahoo.fr](mailto:habib.sammouda.@yahoo.fr)

**Résumé :** L'idée principale de ce travail est d'étudier les contraintes thermomécaniques de CdZnTe. Une attention particulière sera attribuée à l'étude des dislocations, dans une cavité cylindrique axisymétrique de Bridgman verticale subdivisée en deux domaines, le domaine supérieure comporte la phase liquide sous une température  $T_h=1400$  K alors que le domaine inférieure comporte le domaine solide de température froide  $T_c=1200$  K. L'interface qui maintient les deux domaines est soumise à une température  $T_m=1364$  K

**Mots clés :** contraintes thermomécaniques, contraintes de Von Mises, excès de contraintes, naissance et localisation des dislocations, solidification du CdZnTe, cavité de Bridgman Vertical

### 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, etc [1-2] et [3]. Ce pendant ; La méthode la plus employée parmi ces différentes méthodes est celle de Bridgman présentant l'avantage de contrôler indépendamment les faibles gradients de température et la vitesse de tirage. En outre, La qualité du cristal est déterminée par de nombreux facteurs tels que, le contact cristal-creuset qu'est une source 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.

Le tellure de cadmium est un matériau qui occupe à l'heure actuelle une place importante parmi les matériaux semi-conducteurs II-VI composés d'éléments des colonnes II et VI du tableau de classification périodique. Dans cette famille, le CdZnTe est considéré comme le matériau composite le plus recommandé dans le domaine, à cause de ses propriétés appropriées pour la détection des rayons X, rayons  $\gamma$ , et infrarouge, et pour son utilisation en imagerie médicale, ainsi que pour son utilisation comme un substrat parfait pour l'épithaxie des couches CdHgTe. Malgré les efforts effectués pour l'amélioration de la qualité cristalline de CdTe, celui-ci présente toujours une densité de défauts, d'origine physique ou chimique, assez considérables. Ceci a incité les chercheurs à se tourner vers l'alliage CdZnTe qui offre une qualité cristalline meilleure.

Pendant le processus de la croissance cristalline, la température du cristal n'est pas uniforme, ce qui provoque des contractions non uniformes formant une source des contraintes thermoélastiques. En effet, pendant le procédé de tirage, le lingot est soumis à des gradients de températures axiaux et radiaux qui conduisent à des hétérogénéités des volumes élémentaires dans le cristal. Cependant, cette hétérogénéité est à la base des formations des contraintes thermiques dans le procédé de la croissance cristalline. Mais, il faut noter qu'un glissement cristallographique a lieu lorsque les contraintes thermiques engendrées pendant la croissance dépassent une certaine valeur critique nommée Contrainte  $\sigma$  CRSS (Critical Resolved Shear Stress).

L'objectif de ce travail est d'étudier les contraintes thermomécaniques de CdZnTe. Une attention particulière sera attribuée à l'étude des dislocations, dans une cavité de Bridgman verticale.

### 2. Modèles Physique et Mathématique

## 2.1 Description de système expérimental

La géométrie complète est cylindrique, bidimensionnelle et axisymétrique (creuset et cristal), elle s'obtient par révolution autour de l'axe de symétrie donnée par la Figure.1. La géométrie initialement étudiée est une ampoule contenant un matériau sous les deux phases solide et liquide de rayon interne  $r_1=0.0379$  m et de rayon externe qui présente le rayon de l'ampoule  $r_2=0.039$  m de hauteur  $h=0.2$  m. (Fig.1). Cette configuration géométrique est dessinée sur un plan de coupe radial et axial  $(\vec{e}_r, \vec{e}_z)$  passant par l'axe de symétrie de la géométrie qui correspond aux deux domaines liquide et solide. Ce plan de coupe est représenté dans la Figure 2.

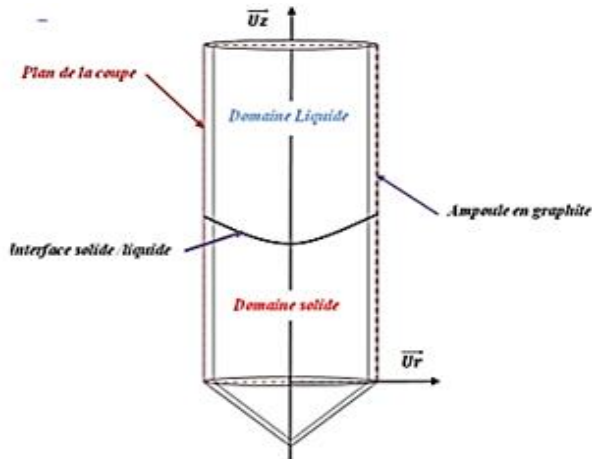


Fig. 1 Géométrie totale de Bridgman Vertical

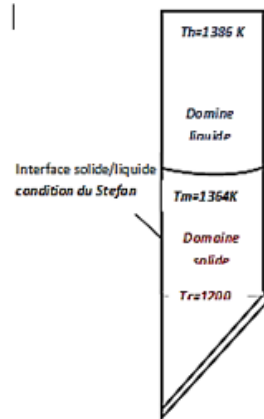


Fig. 2 Géométrie utilisée suivant le plan de coupe  $(\vec{e}_r, \vec{e}_z)$

## 2.2. Description mathématique

La formulation mathématique de notre problème physique est constituée par les équations suivantes : L'équation de conservation de l'énergie donnée par :

$$\nabla (K_p \nabla T_p) - \rho C_p \frac{\partial T_p}{\partial t} = 0 \quad (1)$$

L'indice 'p' correspond à la phase liquide, solide, et l'ampoule de croissance, respectivement.

L'équation de Stefan sur l'interface de solidification (liquide/solide) donnée par :

$$k_S \frac{\partial T_S}{\partial n} - k_L \frac{\partial T_L}{\partial n} = \rho_s L V_{int} \quad (2)$$

Alors que le tenseur de taux de déformation  $\epsilon_{ij}$ , dans la théorie linéaire d'élasticité, est lié au vecteur de déplacement  $u_i$  par la relation suivante

$$\epsilon_{ij} \equiv \frac{1}{2} (u_{i,j} + u_{j,i}) \quad (3)$$

Dans le cristal, on assume que la déformation est une combinaison linéaire des déformations élastique et thermique, alors

$$\epsilon_{ij} = \epsilon_{ij}^0 + \epsilon'_{ij} \quad (4)$$

Avec  $\epsilon_{ij}^0$  est la déformation élémentaire due à l'incrément de la température à  $T=0$

$$\epsilon_{ij}^0 = \beta T \delta_{ij} \quad (5)$$

Le tenseur de déformation  $\epsilon'_{ij}$  s'exprime comme, suit

$$\varepsilon'_{ij} = \frac{1}{2G} \left\{ \sigma_{ij} - \frac{\nu}{1+\nu} \text{tr}(\sigma_{ij}) \delta_{ij} \right\} \quad (6)$$

Avec  $G$  est le module de cisaillement,  $\nu$  est le coefficient de poisson et  $\text{tr}(\sigma_{ij}) = \sigma_{kk}$  est la trace du tenseur de contrainte  $\sigma_{kk}$ .

Les équations (5.3) à (5.5) se réduisent à :

$$\frac{\sigma_{ij}}{2G} = \varepsilon_{ij} + \frac{\nu}{1+\nu} \text{tr}(\varepsilon_{ij}) + \frac{1+\nu}{1-2\nu} \beta T \delta_{ij} \quad (7)$$

L'équation d'équilibre s'écrit :

$$\sigma_{ij,j} + F_i - \rho \ddot{u}_i = 0 \quad (8)$$

Où  $F_i$  est la force de volume,  $\rho$  est la densité volumique et  $\ddot{u}_i$  est l'accélération suivant la direction des  $x_i$ . Substituant les expressions de déplacement dans l'équation ci-dessus et admettant des conditions quasi-statiques, alors les équations pour le vecteur déplacement Nowacki [4] sont obtenues

$$G u_{i,kk} + (\lambda + G) u_{k,ki} + F_i - \gamma T_i = 0 \quad (9)$$

Avec  $\lambda$  est la constante de Lamé,  $E$  est le module d'Young

$$\lambda = \frac{\nu E}{(1+\nu)(1-2\nu)} \quad (10)$$

$$G = \frac{E(3\lambda + 2G)}{(\lambda + G)} \quad (11)$$

$$\nu = \frac{\lambda}{2(\lambda + G)} \quad (12)$$

$$2G = \frac{E}{(1+\nu)} \quad (13)$$

$$\gamma = (3\lambda + 2G)\beta \quad (14)$$

Compte tenu de la symétrie de la géométrie et du chargement ainsi que de l'effet négligeable de la pesanteur, l'équation (9) se réduit à :

$$\frac{\partial^2 u}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial u}{\partial r} - \frac{u}{r^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial z^2} + \frac{1}{1-2\nu} \frac{\partial e}{\partial r} = \frac{2(1+\nu)}{1-2\nu} \beta \frac{\partial T}{\partial r} \quad (15)$$

$$\frac{\partial^2 w}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial w}{\partial r} + \frac{\partial^2 w}{\partial z^2} + \frac{1}{1-2\nu} \frac{\partial e}{\partial z} = \frac{2(1+\nu)}{1-2\nu} \beta \frac{\partial T}{\partial z} \quad (16)$$

$$e = \frac{\partial u}{\partial r} + \frac{u}{r} + \frac{\partial w}{\partial z} \quad (17)$$

Les contraintes thermiques sont calculées d'après la loi de Hook (Lambropoulos [5] Timoshenko et al [6], et Schvezov [7]) pour un matériau isotrope de manière suivante :

$$\sigma_r = \frac{E}{1+\nu} \left[ \frac{\partial u}{\partial r} + \frac{\nu}{1-2\nu} e - \frac{1+\nu}{1-2\nu} \alpha (T - T_m) \right] \quad (18)$$

$$\sigma_{\theta\theta} = \frac{E}{1+\nu} \left[ \frac{u}{r} + \frac{\nu}{1-2\nu} e - \frac{1+\nu}{1-2\nu} \alpha (T - T_m) \right] \quad (19)$$

$$\sigma_{zz} = \frac{E}{1+\nu} \left[ \frac{\partial w}{\partial z} + \frac{\nu}{1-2\nu} e^{-\frac{1+\nu}{1-2\nu} \alpha(T-T_m)} \right] \quad (20)$$

$$\tau_{rz} = \frac{E}{2(1+\nu)} \left[ \frac{\partial w}{\partial r} + \frac{\partial u}{\partial z} \right] \quad (21)$$

La contrainte équivalente de Von Mises s'écrit dans les coordonnées cylindriques :

$$\sigma_{VM} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[ (\sigma_{rr} - \sigma_{\theta\theta})^2 + (\sigma_{\theta\theta} - \sigma_{zz})^2 + (\sigma_{zz} - \sigma_{rr})^2 \right]^{\frac{1}{2}} \quad (22)$$

### 2.2.1 Détermination des conditions aux limites

Nous définissons les conditions aux limites sur chaque frontière du domaine de calcul :

Les conditions aux limites thermiques :

$$T_{Amp}(r, z = 0.2m, t) = 0$$

$$\frac{\partial T_{Amp}}{\partial r}(r, z = -0.02, t) = \frac{\partial T_{Amp}}{\partial z}(r = 0.037, z, t) = 0$$

$$\frac{\partial T_s}{\partial z}(r = 0.037m, z, t) = \frac{\partial T_{Amp}}{\partial z}(r = 0.037, z, t); (-0.02 \leq z \leq 0.11m)$$

$$\frac{\partial T_l}{\partial z}(r = 0.037m, z, t) = \frac{\partial T_{Amp}}{\partial z}(r = 0.037, z, t); (0.11m \leq z \leq 0.2)$$

$$T_l(r, z = 0.2m, t) = T_h$$

$$T_l(r, z = 0.11m, t) = T_m$$

$$T_s(r, z = 0m, t) = T_c$$

$$T_s(r, z = 0.11m, t) = T_m$$

$$T_s(r, z = 0.11m, t) = T_l(r, z = 0.11m, t) = T_m$$

Les conditions aux limites correspondant à la contrainte thermique

(r = 0, z, t) : u et w : condition d'axisymétrie

(r = 0.037, z, t) : u et w sont libres

(r = 0.039, z, t) : u et w sont fixes

Les propriétés thermo-physiques du matériau CdZnTe, et de la nature du matériau de la nature de l'ampoule sont indiqués dans le tableau ci-dessous Tab1 :

Tableau 1: Propriétés thermo-physiques de l'ampoule

propriétés	température	polynomial
Conductivity, Kq W/ (K.m)	298 K < T < 1600 K	$1.25 + 1.05 \cdot 10^{-3} T - 3.95 \cdot 10^{-7} T^2 + 7.33 \cdot 10^{-11} T^3$
Specific heat Cp, J/(Kg.K)	298 K < T < 1600 K	$760 + 0.634 T - 2.39 \cdot 10^{-4} T^2 + 4.44 \cdot 10^{-8} T^3$
Density Kg/m3	-	2200
Expansion coefficient	T < 1250 K	$4.028 \cdot 10^{-7} + 5.466 \cdot 10^{-10} T - 4.623 \cdot 10^{-13} T^2$
	T > 1250 K	$3.637 \cdot 10^{-7}$
Young's modulus, G, Pa	-	$7.17 \cdot 10^{10}$
Poisson's ratio, v	-	0.16

### 3. Modélisation Numérique

Dans notre modélisation numérique, nous avons utilisé Comsol Multiphysics qui est à la base de la méthode des éléments finis (MEF). De nombreux paramètres influent sur la résolution numérique puisqu'ils affectent non seulement la convergence du problème étudié, mais également la qualité des résultats finals obtenus. Ces facteurs comprennent le nombre de mailles utilisées dans notre étude. Le pas de temps maximal choisi qui est fixé à  $\Delta T_{\max} = 1s$ , la tolérance relative  $\delta_r = 10^{-3}$ , la tolérance absolue  $\delta_a = 10^{-5}$ , et le problème physique converge lorsque l'erreur est inférieure à  $10^{-6}$ .

Dans notre modélisation, on a utilisé un maillage de type lagrangien avec un remaillage automatique en fonction de la déformation. Les formes des mailles sont triangulaires *Figure 3*, dont les nœuds se déplacent en fonction de la déformation de la matière. En effet, lorsque la déformation de la maille dépasse 100%, un remaillage automatique s'est réalisé, et qui a pour but d'améliorer la précision des calculs et d'éviter le chevauchement de certaines mailles.

Un raffinement de maillage a été créé près de l'interface de solidification et près des parois verticales droites de l'ampoule et les deux phases solide et liquide où ils sont exposés simultanément aux phénomènes thermiques et déformations importantes.

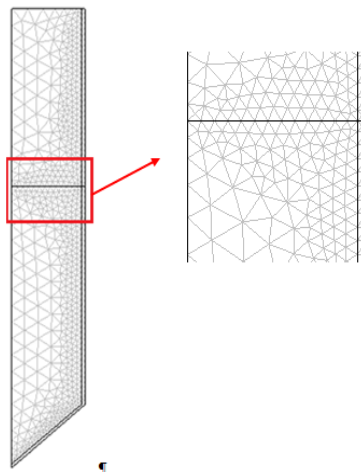


Figure. 3 Maillage raffiné près de l'interface de solidification (solide/liquide)

### 4. Résultats et Interprétations

#### 4.1. Champs de température et de contrainte de Von Mises

La température représente la source principale pour la naissance des contraintes thermiques au cours de la croissance cristalline. La distribution de la température à l'intérieur du cristal peut être utilisée comme indicateur de la présence des concentrations de contrainte et de leurs endroits. De ce fait, en premier lieu, on focalise notre modélisation sur l'étude de ces contraintes thermiques déterminées par les contraintes de Von Mises, où ses dernières peuvent être déterminées à partir de la composante principale de contrainte, qui mesure la force d'entraînement pour un mouvement de dislocation [8].

Dans la Figure.4, la région correspond à la contrainte la plus élevée est localisée au fond du cristal. Cette valeur décroît en augmentant la température du bas pour  $T_c=1200K$  vers le haut, en se rapprochant de l'interface du changement de phase solide/liquide où  $T_m=1364K$ .

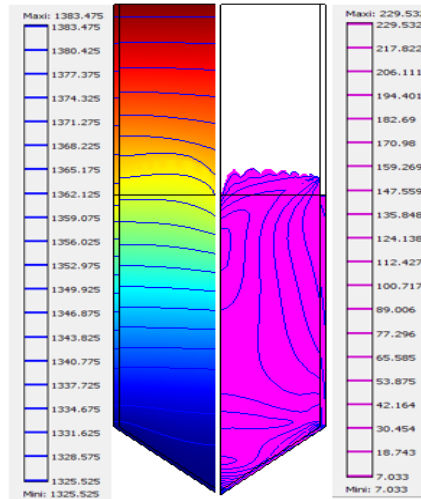


Figure. 4 .Allures des isovaleurs de la température (à gauche), de la contrainte de Von Mises (à droite) pour  $T_c=1330\text{ K}$ ,  $T_h =1385\text{ K}$ ,  $T_m =1364\text{ K}$  et  $t=10000\text{ s}$ .

#### 4.2 Effet de la variation de la température froide et le temps de croissance sur les contraintes de Von Mises

Dans cette section, on va étudier l'influence de la variation de la température froide  $T_c$  sur les contraintes thermiques déterminées par les contraintes de Von Mises, spécialement dans les premiers heures de la croissance du CdZnTe pour  $t=5000\text{ s}$ . Les résultats de la Figure. 5. (a, b, c, d) montrent qu'en augmentant  $T_c$  du 1210 K à 1350 K, quantitativement les isovaleurs ont les mêmes allures où les valeurs des contraintes de Von Mises atteignent leurs maximums au fond du domaine solide. Ces résultats ont été approuvés par Liu et al [47] qui ont montré, dans leurs études que les champs de contraintes thermiques dans les cristaux du CdZnTe avaient des allures similaires et que la contrainte thermique maximale est au fond du cristal, ainsi que la contrainte thermique diminue du bas vers le haut.

On a remarqué aussi que la contrainte de Von Mises suit la déformation de l'interface qui est affectée par la variation de  $T_c$  qui prétend simultanément de l'avancement et la forme de l'interface. Cependant, qualitativement les champs des contraintes de Von Mises de la Figure5.(e,f) sont similaires à ceux de la Figure.5. (a, b, c et d), mais quantitativement il y'a une différence près de l'interface où les contraintes de Von Mises suivent la forme et la déformation de l'interface qui est concave dans la Figure. 5. (a, b, c et d) et convexe dans la Figure. 5.(e, f).

La Figure.6, montre que les contraintes thermiques diminuent dans la direction radiale, en augmentant les valeurs de la température froide  $T_c$  à titre d'exemple, de 300MPa pour  $T_c=1210\text{ K}$  à 76 MPa pour  $T_c=1320\text{ K}$ . Autre la décroissance qui est de grande importance, on remarque aussi que pour les profils de  $T_c$ , qui appartiennent à [1210K-1320 K], présentent deux maximums. Le premier est près de la paroi verticale du domaine solide et le deuxième sur la paroi interne du l'ampoule où se déroule la croissance du CdZnTe. C'est qui prouve la localisation des contraintes thermiques entre le domaine solide et l'ampoule de croissance.

On a remarqué de même, à partir de la Figure. 7, que les contraintes de Von Mises ont subi une chute l'intérieure du cristal, dans la direction axiale par exemple de 490 MPa pour  $T_c=1210\text{ K}$  à 140 MPa à  $T_c=1320\text{K}$ . Mais, elles deviennent importantes près de l'interface de solidification. Ces observations ont été aussi confirmées par Liu et al [9] qui ont remarqué que les contraintes thermiques ont démunie à l'intérieur du domaine solide, dans la direction axiale.

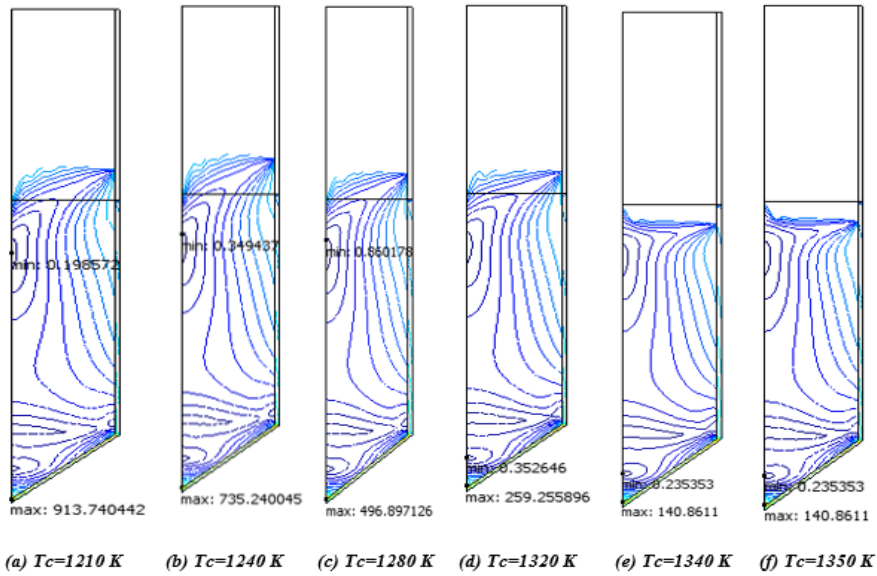


Figure. 5. Isovaleurs de la contrainte de Von Mises pour différentes valeurs de  $T_c$ ,  $T_h=1386\text{ K}$ ,  $T_m=1364\text{ K}$ , et pour  $t=5000\text{ s}$

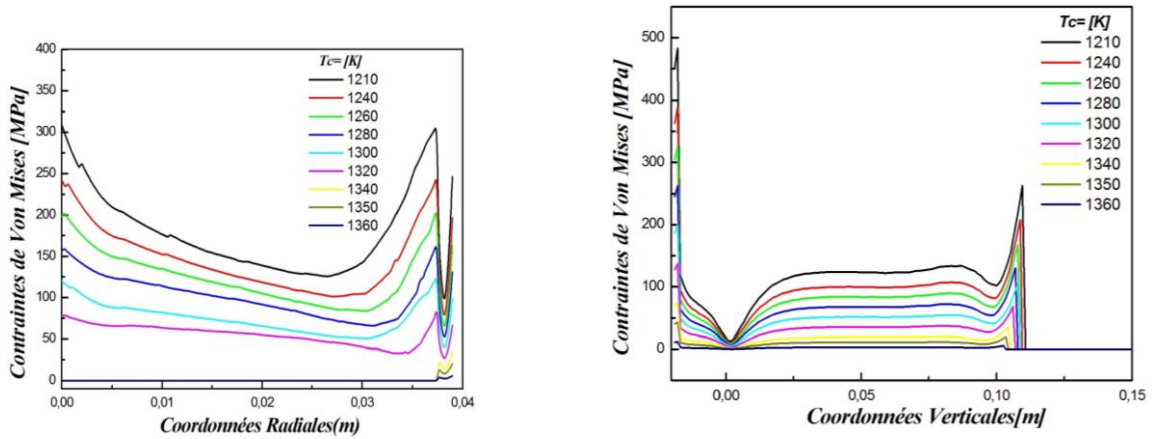


Figure 6 Profils de la contrainte de Von Mises, pour différentes valeurs de  $T_c$ ,  $T_h=1386\text{ K}$ ,  $T_m=1364\text{ K}$ ,  $z=0.11\text{ m}$  et pour  $t=5000\text{ s}$

Figure. 7. Profils de la contrainte de Von Mises, pour différentes valeurs de  $T_c$ ,  $T_h=1386\text{ K}$ ,  $T_m=1364\text{ K}$ ,  $r=0.016\text{ m}$  et pour  $t=5000\text{ s}$

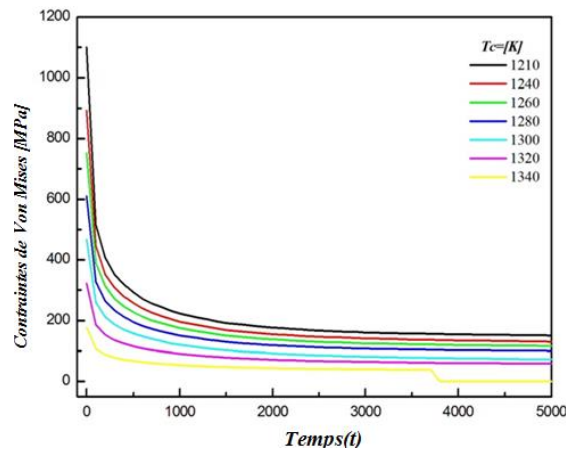


Figure. 8 Profils de la contrainte de Von Mises pour différentes valeurs de  $T_c$ ,  $T_h=1386\text{ K}$ ,  $T_m=1364\text{ K}$ ,  $r=0.016\text{ m}$ ,  $z=0.11\text{ m}$  et pour  $t=5000\text{ s}$

Qualitativement, le champ de contraintes thermique qui est donné par la Figure 9, pour  $t=5000$ s et  $t=10000$ s, est similaire, mais quantitativement, les valeurs sont différentes. Ces valeurs subissent une chute remarquable.

Nous avons remarqué aussi, d'après la Figure. 10 que les contraintes de Von Mises décroissent rapidement et subissent une chute à l'interface pour  $z=0.11$  m,  $r=0.016$  m,  $T_h=1386$  K,  $T_c=1320$  K et  $T_m=1364$  K. En effet, on a constaté que les valeurs de Von Mises diminuent de 350 MPa pour  $t=5000$  s, 280 MPa pour  $t=25000$  s, 270 MPa pour  $t=36000$  s, et à environs 250 MPa pour  $t=100000$  s. De ce fait, nous constatons que les contraintes thermiques décroissent à l'interface de solidification du CdZnTe lorsque nous augmentons de plus en plus le temps de la croissance pour aboutir à des cristaux de bonne qualité puisque les contraintes thermiques sont des sources de contamination pour la formation des stries et des dislocations

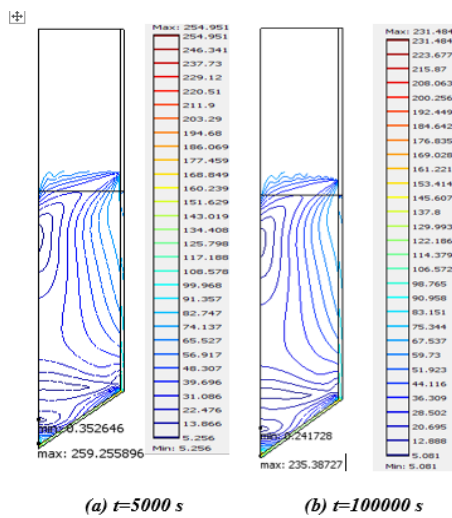


Figure. 9. Profils de la contrainte de Von Mises pour  $t=5000$  s (a),  $t=100000$  s (b),  $T_c=1320$  K,  $T_h=1386$  K,  $T_m=1364$  K,

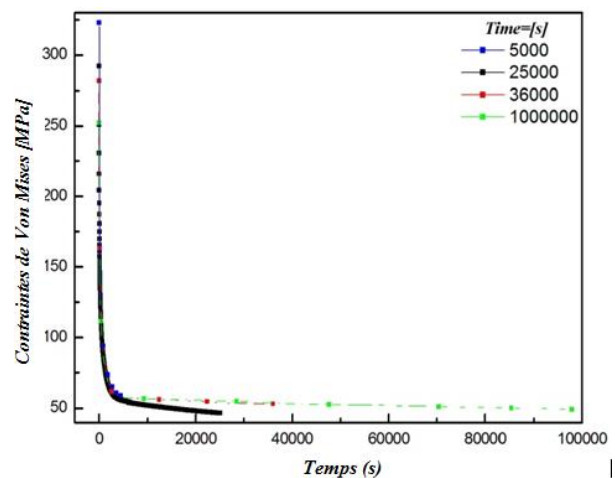


Figure. 10 Profils de la contrainte de Von Mises pour différentes valeurs de temps, pour  $T_c=1320$  K,  $T_h=1386$  K,  $T_m=1364$  K,  $z=0.011$ m et  $r=0.016$ m

#### 4.2 Visualisation des champs et profils des contraintes thermiques

Afin d'étudier les deux paramètres qui influent sur les contraintes thermiques tels que la température froide et le temps de croissance du CdZnTe, on fixera la température  $T_c$  à 1320K, et ceux-ci dont le but non seulement de minimiser les contraintes thermiques mais aussi de garder une interface concave, et le temps  $t=100000$  s puisqu'il nous permet d'obtenir des contraintes thermiques assez faibles qui sont localisées soient à l'interface de solidification soient dans tous le domaine solide. On s'intéresse dans ce qui suit à étudier les différents composants des contraintes thermiques telles que la contrainte radiale  $\sigma_{rr}$ , angulaire  $\sigma_{\theta\theta}$ , la contrainte axiale  $\sigma_{zz}$ , de cisaillement  $\tau_{rz}$ , et la contrainte de Von Mises  $\sigma_{VM}$  respectivement.

Cependant, on va visualiser globalement la localisation et la répartition des contraintes thermiques dans tout le domaine solide. On a remarqué d'après la Figure. 11 (a, b, c, d, e) que le domaine solide subit généralement une compression au fond du cristal ainsi que le maximum des contraintes thermiques suivent cette compression et par conséquent, elles sont localisés de même au fond du cristal avec des valeurs différentes Figure. 11(a, b, c, e) sauf celle de la Figure. 11 (d) où la contrainte de cisaillement est localisée sur le bord du domaine solide et du creuset.



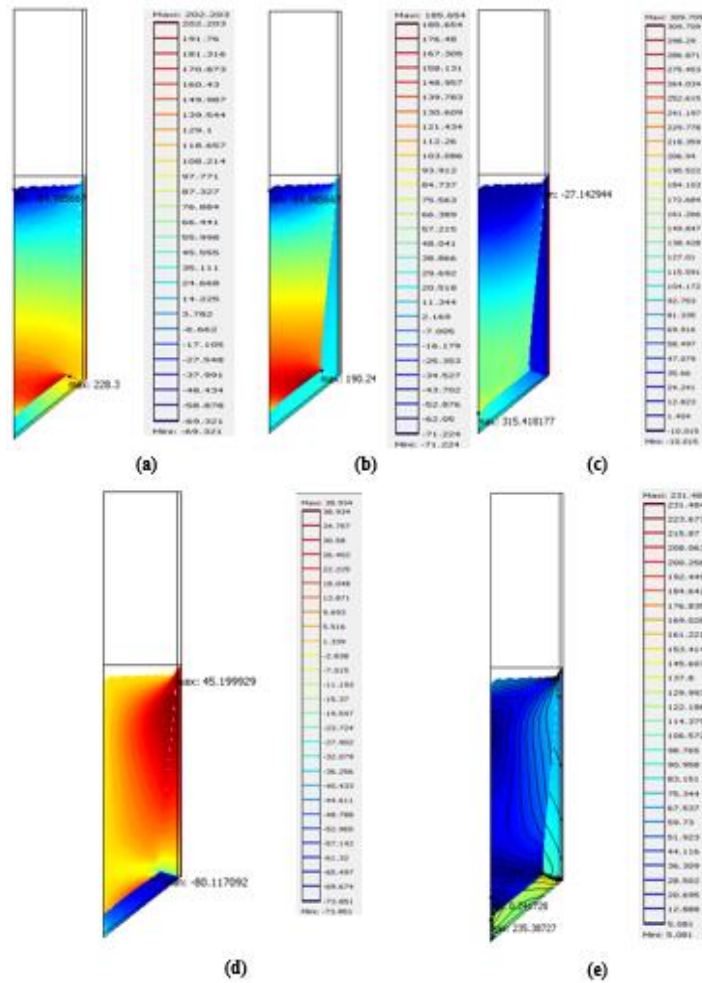


Figure. 11 Champs des contraintes thermiques,  $\sigma_{rr}$  MPa (a),  $\sigma_{\theta\theta}$  MPa (b),  $\sigma_{zz}$  MPa (c),  $\tau_{rz}$  MPa (d),  $\sigma_{VM}$  MPa (e), pour  $t=100000$  s,  $T_c=1320$  K,  $T_h=1386$  K,  $T_m=1364$  K

#### 4.2 Localisation des dislocations

D'après la littérature, les dislocations sont la conséquence directe des contraintes thermiques : si la contrainte de Von Mises est supérieure à la contrainte critique de cisaillement résolu (CRSS) [11]. La génération des dislocations est présumée se produire dans les régions où l'excès de la contrainte persiste [12].

L'expression de la Contrainte Critique Résolue de Cisaillement (CRSS) est écrite sous la forme (5.20), déduite du réf [10] :

$$\sigma_{CRSS} = 0.0232 \exp\left(\frac{4000}{T_s (K)}\right) \text{ MPa} \quad (23)$$

L'excès de la contrainte est obtenu par l'expression suivante :

$$\sigma_{ex} = \begin{cases} \sigma_{VonMises} - \sigma_{CRSS} & \sigma_{VonMises} > \sigma_{CRSS} \\ 0 & \sigma_{VonMises} \leq \sigma_{CRSS} \end{cases} \quad (24)$$

L'objet principal de cette dernière partie est de localiser les dislocations, en étudiant  $\sigma_{ex}$  en différents points du domaine solide. Cependant, nous présentons les champs de  $\sigma_{ex}$  pour trois positions radiales à ( $r = 0.016$ m,  $r = 0.0375$ m, et  $r = 0.039$ m) pour  $z = 0,11$ m, comme il est indiqué à la Figure 13.

Nous commençons par la validation de nos résultats numériques, où nous présenterons dans la Figure.12 la contrainte critique de cisaillement résolu (CRSS)  $\sigma_{CRSS}$  du matériau du CdZnTe en fonction de la

température. On remarque que la courbe du  $\sigma_{CRSS}$  diminue avec l'augmentation de la température. Par conséquent, nos résultats numériques sont en bon accord avec l'expression du  $\sigma_{CRSS}$  qui correspond à l'équation proposé par Parfenuik et al [10], dans leur travail expérimental, lors de la croissance du CdZnTe. En effet, la valeur du CRSS, à la température de fusion, est égale à  $0,43 \text{ MPa}$  présentant la même valeur trouvée par Parfenuik et al [10]. Cette valeur est plus faible que la valeur correspondante au GaAs de  $0,9 \text{ MPa}$ .

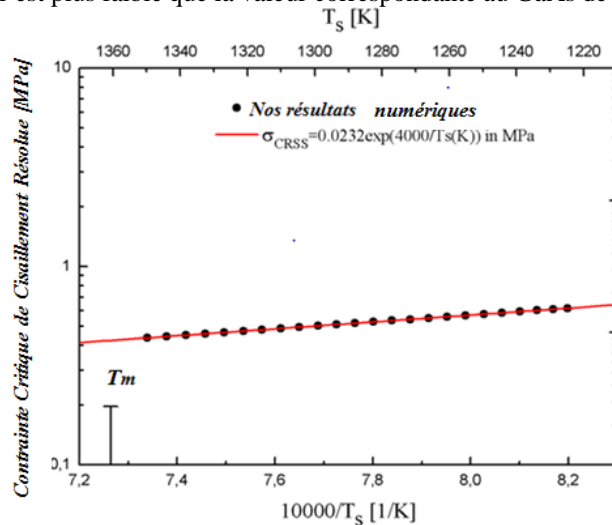


Figure. 12. Profil de la contrainte critique de cisaillement résolue  $\sigma_{CRSS}$  du CdZnTe en fonction de la température. Comparé avec l'expression de  $\sigma_{CRSS}$  donnée par Parfenuik et al [10], pour  $r=0.016\text{m}$  et  $z$  varie de  $-0.02 \text{ m}$  à  $0.11\text{m}$

A partir de la Figure 13 (a), nous notons que pour  $r = 0.016 \text{ m}$ , le maximum de Von Mises est localisé à l'interface du domaine solide/liquide et l'excès de la contrainte  $\sigma_{ex}$  (Figure 13 (b)) est situé de même à l'interface avec une valeur maximale égale à  $35 \text{ MPa}$ . On peut alors déduire que les dislocations sont situées à l'interface. Alors que pour  $r = 0.037\text{m}$ , le maximum de la Contrainte de Von Mises est localisé au fond du cristal, et à l'interface mais  $\sigma_{ex}$  est circonscrit à l'interface. S'approchant de la paroi interne du domaine solide où  $r=0.039 \text{ m}$ , révélée par Figure 13 (f), la contrainte de Von Mises diminue alors que la contrainte de  $\sigma_{ex}$  croît en atteignant  $60 \text{ MPa}$ , ce qui prouve l'effet de la paroi de l'ampoule qui présente un facteur d'anomalie pour le processus de croissance cristalline, et ceux-ci est dû à la conductivité thermique de l'ampoule

La Figure 14 montre la variation des profils de en fonction des coordonnées axiales pour différentes positions de  $r$ . On constate qu'en se rapprochant de domaine solide et de la paroi de l'ampoule qui l'englobe, l'excès de ces contraintes croît prouvant les mêmes résultats de la Figure 13 (b, d, f). En effet, on constate que aboutisse à leurs maximums près de l'interface de solidification et de la face interne du domaine solide, où il y a continuité de la température entre l'ampoule et le domaine solide, prouvant l'effet néfaste de l'ampoule qui parvient par sa conductivité thermique élevée.

La Figure 15 illustre la variation de champs de Von Mises et les champs de  $\sigma_{ex}$  en fonction des coordonnées radiales pour différentes positions de  $z$  spécialement pour  $z = (-0,02) \text{ m}$ ,  $z = 0,04 \text{ m}$ ,  $0,08 \text{ m}$  et  $z = 0,11\text{m}$ . On constate pour  $z = -0.002 \text{ m}$ , que la contrainte de Von Mises est localisée au fond du cristal, mais à cette valeur on remarque l'absence de l'excès thermiques (Figure. 15 (b)). En revanche, pour  $z = 0,04$ , on constate l'apparition de l'excès de la contrainte  $\sigma_{ex}$  qui est de valeur égale à  $23\text{MPa}$  (Figure. 15 (d)). Mais la contrainte de Von Mises diminue en s'éloignant du fond de cristal ((Figure. 15(c)). D'autre part, pour à  $z = 0,08 \text{ m}$  et  $z = 0,11 \text{ m}$  respectivement, la contrainte de Von Mises continue à diminuer en se rapprochant de l'interface de solidification, alors que les valeurs de  $\sigma_{ex}$  sont importantes Figure. 15 (e, g). En effet, les valeurs de  $\sigma_{ex}$  deviennent importante sur l'interface de solidification (Figure. 515(h)), et sur la paroi verticale du domaine solide (Figure. 15 (f)).

Ces interprétations sont vérifiées par les profils de  $\sigma_{ex}$  données par la Figure. 16, où on constate que  $\sigma_{ex}$  croît en fonction des coordonnées radiales, en s'éloignant du fond du cristal et ceux-ci pour les deux positions  $z=0.04\text{m}$  et  $z=0.08\text{m}$  qui ont les mêmes allures mais de valeurs différentes. Alors que pour  $z=0.11\text{m}$

(l'interface de solidification), on remarque que  $\sigma_{ex}$  atteint son maximum près de la paroi du domaine solide, prouvant l'effet de la paroi sur la solidification du CdZnTe. Puis le profil présente une chute à l'intérieur du creuset mais les valeurs sont toujours importantes de l'ordre 20 MPa, et ceux-ci est dû à la conductivité thermique du graphite de l'ampoule.

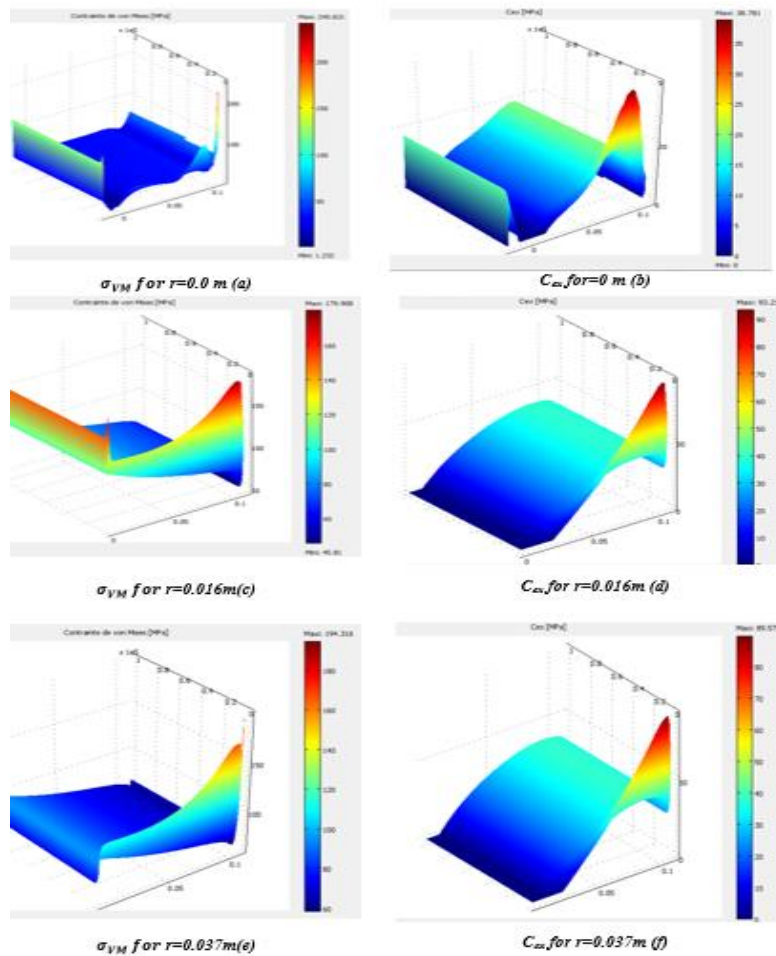


Figure 13. Champs de Von Mises (a, c, e) MPa,  $\sigma_{ex}$  (b, d, f) MPa, en fonction de  $z$  pour différentes valeurs de  $r$ ,  $T_c=1320\text{K}$ ,  $T_h=1385\text{K}$ ,  $T_m=1365\text{K}$  et  $t=100000\text{s}$

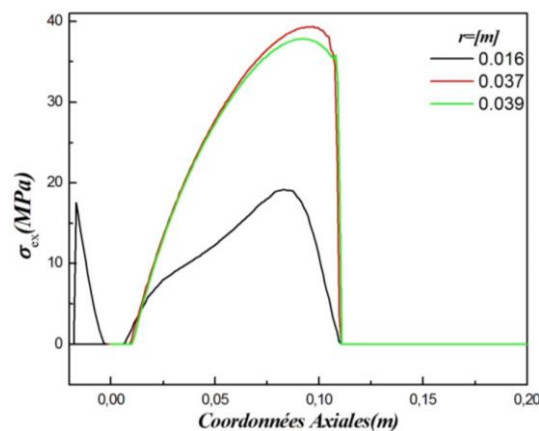


Figure 14. Profils de  $\sigma_{ex}$  MPa en fonction des coordonnées axiales, pour différentes positions de  $r$ , pour  $T_c=1320\text{K}$ ,  $T_h=1385\text{K}$ ,  $T_m=1365\text{K}$ , et  $t=100000\text{s}$

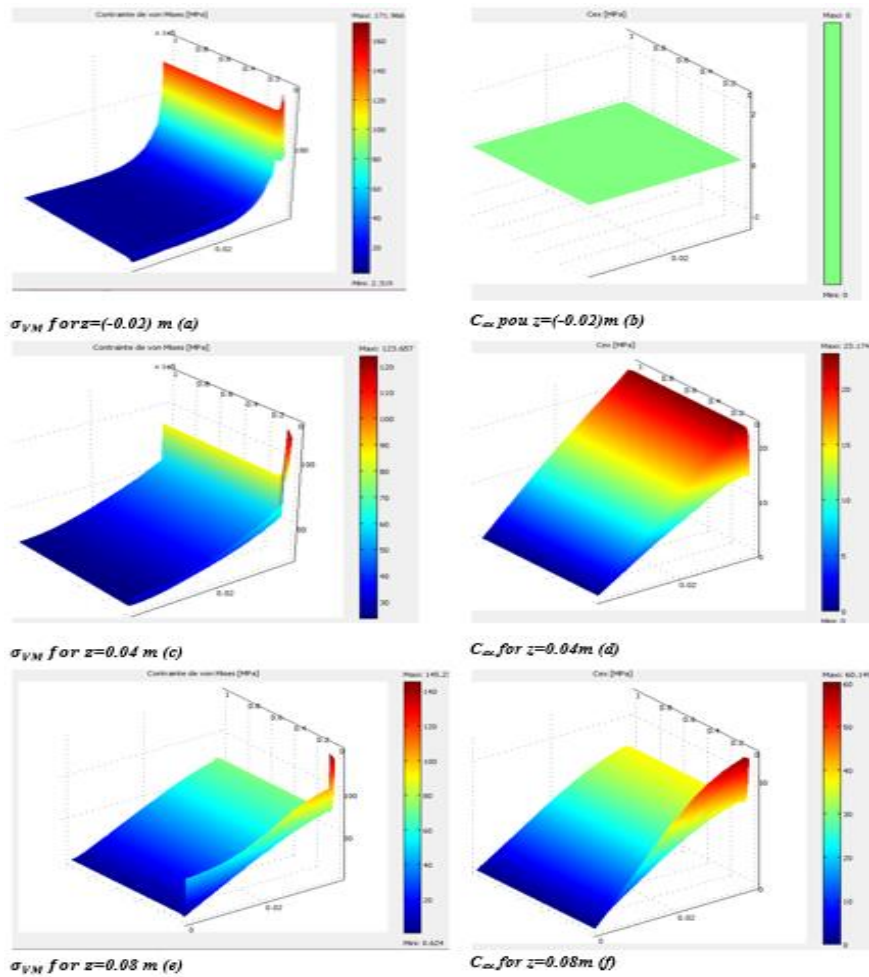


Figure 15. Champs de Von Mises (a, c, e) MPa,  $\sigma_{ex}$  (b, d, f) MPa, en fonction de z pour différentes valeurs de r,  $T_c=1320K$ ,  $T_h=1385K$ ,  $T_m=1365K$  et  $t=100000s$

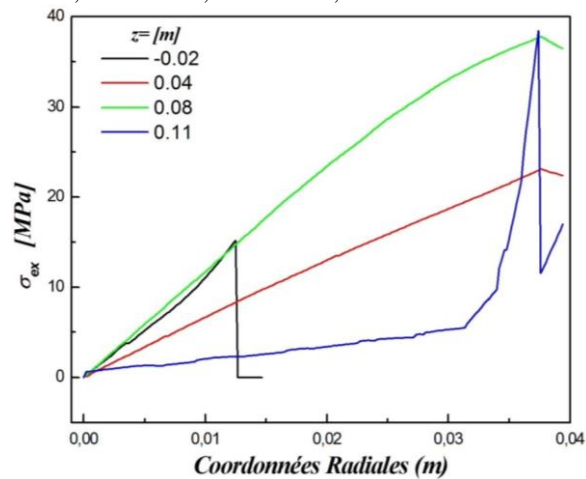


Figure 16. Profils de  $\sigma_{ex}$  MPa en fonction des coordonnées Radiales pour différentes positions de z, pour  $T_c=1320K$ ,  $T_h=1385 K$ ,  $T_m=1365 K$ , et  $t=100000s$

## Conclusion

L'étude se base sur l'étude des contraintes thermiques qui se produisent à cause, non seulement des gradients thermiques élevés, mais aussi à la présence de l'ampoule où se déroule la solidification du CdZnTe. En

effet, le creuset représente une source d'anomalie et de contamination pour de la croissance cristalline. Cependant, le but de notre étude est de minimiser ces contraintes pour aboutir un cristal qui répond aux exigences demandées par l'industrie de semi-conducteur particulièrement et l'industrie de la croissance cristalline généralement.

On a essayé à partir de cette revue quelques paramètres jouant un rôle important sur la diminution des contraintes thermiques tels que la variation de la température froide.  $T_c$ , et l'augmentation de temps de croissance. On a constaté que les contraintes thermiques données par les contraintes de Von Mises démunies en augmentant la  $T_c$ , qu'on l'a fixé égal à 1320k, et ceci dont le but de garder l'interface concave. Ensuite, on a fait varier le temps de croissance qu'on la choisi égale à  $t=100000$  s.

Dans le même but on a présenté une étude détaillée sur les composants de la contrainte de Von Mises pour savoir c'est qui se passe macroscopiquement au domaine solide qui a subi des compressions et des contractions.

Finalement, on a étudié l'excès des contraintes qui jouent un rôle important dans la localisation des zones où préexistent les dislocations qui naissent près de l'interface de solidification et près de la paroi vertical du domaine solide et l'ampoule qui l'englobe

### Références

- [1] J.C.Brice.The growth of crystals from liquids.North Hollands ,New York ,1976.
- [2] S.Bouabdellah, R.Bessaih, A.Soudani et S.Boughoul, Stabilité magnétohydrodynamique lors d'un changement de phase d'un fluide à faible nombre de Prandtl, Congrès Français de Thermique, SFT, Île de Ré, 16-19 mai 2006.
- [3] S.Wakitani, Numerical study of three-dimensional oscillatory natural convection at low Prandtl number in rectangular enclosures, Journal of Heat Transfer, Vol.123, pp. 77-83, 2001.
- [4] W. Nowacki, Thermoelasticity, Addison-Wesley publishing company, Int, New York (1964).
- [5] J. C Iambropoulos, Stresses near the solid-liquid interface during the growth of a czochralski crystal. Journal of Crystal Growth 80, (1987) p. 245
- [6] S. P.Timoshenko et N. Goodier, Theory of elasticity, third edition, Mc Graw Hill (1982)
- [7] C Schvezov, I.V. Samarasekera et F. Weinberg, Mathematical modeling of liquid encapsulated Czochralski growth. II-Stress model, J. Cryst. Growth 84 (1987) p. 219
- [8] A. Shimizu, J. I. Nishizawa, Y. Oyama and K. Suto, J Cryst Growth (2002) pp 237-239.
- [9] J. liu et G. Zhang, Numerical simulation of the thermal stress field during vertical Bridgman CdZnTe single crystal growth, Journal of the Korean Physical Society, Vol. 53(5) (2008) p. 2989
- [10]C. Parfeniuk, F. Weinberg, I.V .Samarasekera, C .Schvezov, et L . Li, Measured critical resolved shear stress and calculated temperature and stress field during growth of CdZnTe, J.Cryst. Growth 119 (1992) 261

[11] H.S. Fang, S. Wang, L. Zhou, N. G. Zhou, et M.H. Lin, Influence of furnace design on thermal stress during directional solidification of multicrystalline silicon, *J. Cryst. Growth* (2012) p. 5

[12] W. Rosch, et F. Carlson, Computed stress fields in GaAs during vertical Bridgman growth, *J. Cryst. Growth* 109, (1991) p. 75

**25-27 Octobre 2017**  
**Monastir - Tunisie**