

REPUBLIQUE ALGERIENNE DEMOCRATIQUE ET POPULAIRE

MINISTERE DE L'ENSEIGNEMENT SUPERIEUR ET DE LA
RECHERCHE SCIENTIFIQUE

UNIVERSITE MENTOURI – CONSTANTINE
FACULTE DES SCIENCES DE L'INGENIEUR



DEPARTEMENT DE GENIE MECANIQUE

N° attribué par la bibliothèque

□□□□□□□□□□

T H E S E

Pour obtenir le grade de
Docteur en Sciences
Spécialité «Génie Mécanique»

Présentée et soutenue publiquement par

Benmeddour Amor

**Etude et simulations numériques des contraintes
thermomécaniques dans le silicium photovoltaïque**

Soutenue le : 20/05/2010

Devant le Jury composé de :

Président	: Prof. BOUCHOUCHA Ali	Université Mentouri-Constantine
Rapporteur	: Prof. MEZIANI Salim	Université Mentouri-Constantine
Examineur	: Prof. OUTTAS Toufik	Université Hadj Lakhdar-Batna
Examineur	: Prof. BEGHIDJA Abdelhadi	Université Mentouri-Constantine
Examineur	: Dr BOUHLAGHEM Abdelaziz (MC)	Université Badji Mokhtar-Annaba
Invité	: Dr MEKHILEF Slimane (MC)	Université Badji Mokhtar-Annaba

Remerciements

Je tiens à remercier très chaleureusement Monsieur ***Meziani Salim***, professeur à l'Université Mentouri Constantine, *pour avoir* dirigé cette thèse. Je lui suis très reconnaissant pour la confiance qu'il m'a apportée et pour la disponibilité dont il a fait preuve tout au long de ces cinq années. En toute complémentarité, ils m'a guidée et m'a permis de m'enrichir de ses connaissances et de ses expériences.

Je tiens à témoigner ma reconnaissance à Monsieur ***Bouchoucha Ali***, Professeur au Département de Génie Mécanique de l'Université Mentouri de Constantine, pour m'avoir fait l'honneur de présider le jury et participer à l'examen de cette thèse.

Mes remerciements vont également à l'ensemble des membres du Jury ; Monsieur ***Bouchlaghem abdelaziz, Outtas toufik*** et Monsieur ***Beghidja abdelhadi*** pour l'intérêt qu'ils ont accordé à cette étude.

Je voudrais exprimer ma profonde reconnaissance à Monsieur ***Fouathia Athmane***, maîtres de Conférences à l'Université Mentouri Constantine, qui m'a encouragé et donné beaucoup d'intérêt et de rigueur. Je le remercie pour les nombreuses discussions que nous avons menées sur le thème. Sa gentillesse, sa confiance et sa disponibilité m'ont aussi été d'un grand soutien lors des moments les plus difficiles. Ce travail ne serait pas ce qu'il est sans son aide précieuse.

Merci à ***Gaci et Bellagh*** de m'avoir toujours soutenu et encouragé pendant ses années. Et Je remercie également le chef de département de génie mécanique ***Benisaad Ismail*** ainsi que Monsieur le Président du comité scientifique ***Bouchoucha Ali*** pour leur conseil. Et enfin tous ceux que je connais de près ou de loin ainsi que l'équipe enseignantes du laboratoire de mécanique.

Je remercie du fond du coeur Mes Parents pour leur soutien, leurs encouragements et pour m'avoir permis de réaliser ces études dans de bonnes conditions.

Table des matières

Nomenclature	iv
Introduction	01
Chapitre I	
Généralités sur la Technologie Photovoltaïque	04
I.1 Le photovoltaïque dans le monde	05
I.1.1 Les énergies renouvelables	05
I.1.1 Le solaire photovoltaïque.....	05
I.2 Les technologies photovoltaïques.....	06
I.2.1. Le silicium cristallin	06
I.2.2. Le silicium amorphe.....	07
I.2.3. Les cellules organiques.....	08
I.3. Méthode de production du silicium	09
I.3.1. Réduction de la silice	09
I.3.2. Purification du silicium	09
I.3.3 Principales méthodes d'élaboration du silicium	10
I.3.5. Préparation des plaquettes	13
I.4. Structures cristallines	14
I.5. Défauts cristallins dans le Silicium	16
I.5.1. Défauts linéaire : Dislocations	16
I.5.2. Défauts bi-dimensionnels	17
Chapitre II	
Phénomène Intervenant lors du procédé de Czochralski (CZ).....	20
II.1 Présentation de la méthode Czochralski	21
II.1.1.Le tirage Czochralski du silicium	22
II.1.2 Ecoulements dans le liquide.....	23
II. 2. Phénomènes d'écoulement de fluide et transfert de chaleur	25
II.2.1 Équation de continuité	25
II.2.2 Equations de Navier Stokes	25
II.2.3 Transfert de chaleur	26
II.3. Phénomènes mécanique intervenant lors du tirage Czochralski	27
II.3.1.Rappel sur l'évaluation des contraintes normales	28
et tangentielles	
II.3.2 Formation et évolution des dislocations sous	29
l'action de contraintes	
II.3.3 Localisation des dislocations dans un cristal	31

Chapitre III	
Modélisation du système de croissance CZ	32
III.1 Etat de l'art de la Modélisation et de la simulation du processus	
Czochralski	33
III.1.1 Modélisation de l'écoulement du fluide et transfert de chaleur...	33
III.1.2 Modélisation sur la qualité.....	37
III.1.3 Modélisation des contraintes thermiques et dislocations.....	38
III. 2 Le modèle de transfert de chaleur avec solidification	42
III.2.1 Modèle physique	42
III.2.2 Modèle mathématique	43
III.3 Le modèle mathématique de la thermoélasticité	45
III.4 Le modèle mathématique thermo-élasto-plastique	47
d'Alexander et Hassan	
III.5 Méthode de résolution numérique des Champs des températures.....	50
et des contraintes	
III.6 Résolution du problème à l'aide du logiciel Femlab	51
III. 6.1 Présentation du logiciel Femlab	51
III. 6.2 Méthode de résolution d'un problème sous Femlab	52
Chapitre VI	
Résultats et discussion	57
VI.1 Résultats du modèle thermo-élastique	58
VI.1.1 Champ de température et de contrainte de Von Mises	58
VI.1.2 Champ des composantes de contrainte	62
VI.2 Effet des différents paramètres sur la répartition des contraintes	69
VI. 2.1 Effet de la longueur du silicium	69
VI. 2.2 Effet de la vitesse de tirage	73
VI. 2.3 Effet de vitesse de rotation du cristal et du creuset	78
VI.3 Calcul paramétrique et optimisation du procédé Czochralski	84
VI.4 Résultats du modèle thermo-élasto-plastique	86
VI.4.1 Champ de température et de contrainte de Von Mises	86
VI.4.2 Champ des composantes de contrainte	89
VI.4.3 Analyse et comparaison entre les deux modèles	95
de comportement	
Conclusion et perspectives	98
Bibliographie	100
Résumé	112
Abstract	113
ملخص	114

Nomenclature

u, v, w	Velocitiés: axiale, radial et azimutale	[m/s]
r, z	Coordonnées polaires	[m]
q	Flux thermique	W/m ²
p	Pression	[Pa]
α	La diffusivité thermique	[m ² /s]
g	Accélération due à la gravité	[m/s ²]
T_c	Température des bords du Creuset	[k]
T_m	Température de solidification	[k]
T_a	Température Ambiante	[k]
r_c	Rayon du Creuset	[m]
r_s	Rayon du Cristal	[m]
h_c	Hauteur du Creuset	[m]
h_s	Hauteur du Cristal	[m]
β	Coefficient de dilatation thermique	[1/k]
K_s	Conductivité thermique du solide	[W/m.K]
k_m	Conductivité thermique du liquide	[W/m.K]
ω_s	Vitesse angulaire de rotation du cristal	[rad/s]
ω_c	Vitesse angulaire de rotation du creuset	[rad/s]
v_p	Vitesse de tirage	[m/s]
ΔH_f	Chaleur latente de fusion	[J/kg]
C_{p_m}	Chaleur spécifique du fluide à pression constante	[J/K.kg]
C_{p_s}	Chaleur spécifique du cristal à pression constante	[J/K.kg]
ρ_s	Masse volumique du solide	[kg/m ³]
ρ_m	Masse volumique du liquide	[kg/m ³]
σ	Constante de Stefan-Boltzman	[W/m ² .k ⁴]
ε_s	Emissivité du cristal	[]
ε_m	Emissivité du liquide	[]
h_s	Coefficient de transfert de chaleur du cristal	[W/m ² .K]
h_m	Coefficient de transfert de chaleur du liquide	[W/m ² .K]
E	Module d'Young	[Pa]

Nomenclature

μ	Viscosité dynamique	[]
ν	Coefficient de Poisson	[]
ε_{ij}	Le tenseur de déformation	%
δ_{ij}	Le delta de Kronecker	[]
G	Le module de cisaillement	[Pa]
F_i	La force de volume	[N]
λ	Constante de lamé	[Pa]
ε^{pl}	La déformation plastique	[%]
ε^{el}	La déformation élastique	[%]
ε^{th}	La déformation thermique	[%]
N	La densité de dislocation	[cm ⁻²]
N_0	Densité de dislocation initiale	[cm ⁻²]
V	La vitesse moyenne des dislocations	[$\mu\text{m/s}^{-1}$]
Q	Energie de peierls	[EV]
σ_{eff}	La contrainte effective de la dislocation	[Pa]
σ_{CRSS}	La contrainte critique de cisaillement	[Pa]
σ_{VM}	Contrainte de Von Mises	[Pa]
σ_{rz}	Contrainte de cisaillement	[Pa]
σ_{rr}	Contrainte radiale	[Pa]
σ_{zz}	Contrainte axiale	[Pa]
$\sigma_{\theta\theta}$	Contrainte angulaire	[Pa]

Introduction

Introduction

La montée en puissance de l'énergie photovoltaïque devient aujourd'hui une réalité industrielle et économique qui doit relever les défis technologiques. Indépendamment des points communs avec les autres énergies renouvelables, l'énergie solaire photovoltaïque présente plusieurs autres avantages. Tout d'abord, elle est relativement bien répartie à la surface du globe et facilement disponible, ce qui la rend particulièrement appropriée aux régions isolées. Ensuite, le caractère modulaire des panneaux photovoltaïques permet un montage simple et adaptable à des besoins énergétiques divers. De plus, les panneaux photovoltaïques exigent peu d'entretien, sont fiables et ont relativement une longue durée de vie (25 ans), ce qui rend leurs coûts de fonctionnement très faibles. Enfin, la technologie photovoltaïque, dominée par le silicium, présente des qualités sur le plan écologique car le produit fini est non polluant, silencieux et n'entraîne pas de perturbations du milieu, si ce n'est par l'occupation de l'espace pour les installations de grandes dimensions. Cependant, avec une intégration correcte dans les bâtiments, l'intrusion visuelle du photovoltaïque peut être minimale.

La méthode de tirage du silicium Czochralski (CZ) est l'une des techniques la plus importante pour produire des monocristaux de silicium de grande taille et de qualité optique suffisante, utilisés dans les dispositifs à semi-conducteur pour application dans le domaine photovoltaïque. Divers types de défauts (ponctuels et étendus) sont présents dans ces cristaux. Dans le cas du silicium, on sait que la présence de dislocations diminue fortement la durée de vie des cellules solaire [1]. De plus, de récentes études montrent que les propriétés optoélectroniques des cristaux de silicium sont influencées par l'existence de dislocations. Leur présence dans les cristaux est essentiellement due aux contraintes thermiques existant pendant la croissance Jordan *et al.* [2], [3]. Donc l'amélioration du rendement du silicium monocristallin nécessite une amélioration de ses propriétés optoélectroniques pour ses applications dans l'industrie photovoltaïque.

Au cours du tirage, dans le procédé de tirage Czochralski, de nombreux phénomènes se manifestent, dont le phénomène thermique couplé avec le phénomène hydrodynamique, sans négliger le phénomène de changement de phase lors de la solidification. De ces étapes, résultent des contraintes résiduelles au sein du silicium solide, qui subit de très forts gradients de température. Ces derniers tendent à augmenter quand le diamètre du cristal est plus grand que 300 millimètres, et la distribution non homogène de fortes contraintes thermiques est créée [4]. Par conséquent, des régions distinctes, avec de multiplication intensive des dislocations, se manifestent dans le cristal.

Introduction

La relation entre la contrainte thermique et la densité de dislocations dans les cristaux de silicium a été vérifiée par Jordan *et al.* [5], [6]. Ils ont trouvé que pendant le procédé de tirage du cristal CZ, le noyau est en compression et la périphérie du lingot de silicium est en tension [7]. Tanahash *et al.* [8] a trouvé par la méthode de simulation que la contrainte thermique dans le cristal augmente avec l'augmentation de la vitesse de tirage. Après Takano *et al.* [9] a remarqué que la contrainte thermique dans un cristal est sensiblement affectée par la forme de l'interface dans le cas des cristaux de grand diamètre.

Puisque les contraintes thermiques et les dislocations en matériaux électroniques et optiques réduisent la performance et la fiabilité des dispositifs, la réduction de la densité de dislocation et des contraintes thermiques des cristaux de grande taille devient un important objectif. Vu la complexité du problème, la méthode expérimentale reste toujours coûteuse et demande beaucoup de temps pour aboutir à des résultats acceptables. D'autre part, la méthode analytique ou même semi analytique ne peut pas résoudre des phénomènes aussi complexes. Seule l'approche numérique nous permet d'obtenir des résultats avec une marge d'erreur contrôlable dans un temps satisfaisant.

Ce travail, réalisé dans le cadre d'une thèse de doctorat en mécanique, est une contribution à l'étude et simulations numériques des contraintes thermomécaniques dans le silicium photovoltaïque. Notre travail consiste à proposer un modèle de simulation numérique qui permet de suivre l'histoire thermique et mécanique du silicium au cours de croissance élaboré par le procédé de tirage czochralski, mettre en évidence le rôle des différents facteurs, opérationnel, géométrique et thermique intervenant dans le tirage sur la génération des contraintes. Ainsi des conditions de tirage optimales, permettant de réduire les dislocations devraient pouvoir être établies.

Ce manuscrit se présente de la façon suivante : Le chapitre I décrit dans un premier temps l'état de l'art du silicium photovoltaïque et les différentes technologies envisagées pour l'obtention du silicium photovoltaïques. Dans un second temps, le chapitre I dresse la méthode d'obtention du silicium de grade solaire et discute des défauts cristallins qui en découlent, afin de mettre en évidence l'intérêt de notre travail.

Dans le deuxième chapitre, nous avons présenté une étude sur les phénomènes physiques et mécanique intervenant lors du processus de tirage des monocristaux par la méthode de czochralski qui a pour objectifs d'une part de mettre en évidence les différents paramètres influent sur la qualité du cristal et d'autre part de rappeler les démarches généralement utilisées pour la modélisation et la simulation des conséquences thermiques et mécaniques du procédé de tirage Czochralski.

Le troisième chapitre présente l'état de l'art des travaux réalisés concernant la modélisation numérique du procédé czochralski. La deuxième partie de ce chapitre est consacré à une présentation détaillée des modèles proposés pour l'étude du problème thermomécanique du silicium et résolu par le code COMSOL Multiphysics [10] et plus

Introduction

particulièrement l'adaptation du logiciel au procédé czochralski en utilisant la stratégie globale stationnaire. Ce chapitre rappelle les différentes équations du problème thermo-élastique et thermo-élastoplastique. Nous présenterons les différentes conditions aux limites et initiales utilisées pour la fermeture du problème dans le cas du procédé czochralski.

Le dernier chapitre présente une étude numérique du champ de températures et des contraintes thermomécaniques dans la billette de silicium. Elle est réalisée en deux étapes successives.

La première est consacrée à la simulation du champ de température pendant la croissance du cristal de silicium de large diamètre (300 mm) dans un système de croissance Czochralski en adoptant un modèle bidimensionnel de l'écoulement du fluide et de transfert de chaleur avec solidification. La répartition des contraintes thermo-élastiques est calculée à partir du champ de température dans le lingot de silicium dans l'approximation d'un matériau purement élastique en adoptant le modèle déformation plane.

La deuxième étape concerne une étude détaillée de l'influence de différents paramètres, tel que la longueur du lingot de silicium, la vitesse de tirage, la rotation du cristal et celle du creuset sur la forme de l'interface solide / liquide et la répartition des contraintes thermiques dans les cristaux de silicium.

Dans la dernière étape nous présentons une analyse des contraintes thermoélasto-plastique et l'étude de l'effet de la relaxation de ces contraintes due à la multiplication des dislocations en utilisant le modèle d'Alexander et Haasen [11].

Chapitre I

Généralités sur la Technologie Photovoltaïque

Sommaire	04
I.1 Le photovoltaïque dans le monde	05
I.1.1 Les énergies renouvelables	05
I.1.2 Le solaire photovoltaïque	05
I.2 Les technologies photovoltaïques	06
I.2.1 Le silicium cristallin	06
I.2.1.1 Le silicium monocristallin	06
I.2.1.2 Le silicium polycristallin	07
I.2.2 Le silicium amorphe	07
I.2.3 Les cellules organiques	08
I.3 Méthode de production du silicium	09
I.3.1 Réduction de la silice	09
I.3.2 Purification du silicium	09
I.3.3 Principales méthodes d'élaboration du silicium	10
I.3.3.1 Procédure de Czochralski	10
I.3.3.2 La Zone Flottante (FZ)	11
I.3.3.3 Procédés de solidification unidirectionnelle	13
I.3.4 Préparation des plaquettes	13
I.3.4.1. Orientation et découpage	13
I.3.4.2. Découpage et polissage	14
I.4 Structures cristallines	14
I.5 Défauts cristallins dans le Silicium	16
1.5.1 Défauts linéaire : Dislocations	16
1.5.2 Défauts bi-dimensionnels	17

Ce chapitre introduit le cadre dans lequel s'inscrit ce travail : le domaine photovoltaïque. Nous décrivons l'état de l'art du silicium photovoltaïque, ensuite nous présentons un aperçu des technologies photovoltaïques et enfin on discute des défauts cristallins qui en découlent.

I.1 Le photovoltaïque dans le monde

I.1.1 Les énergies renouvelables

L'utilisation massive des énergies fossiles et fissiles, même si elle a rempli tout le champ de l'activité des hommes d'aujourd'hui, reste un phénomène secondaire à l'échelle de l'histoire humaine ; elle apparaît à travers deux pics, l'un au cours du XIX^e siècle avec le charbon et la découverte des machines à vapeur, l'autre au XX^e siècle avec le pétrole, le gaz et le nucléaire. Le monde a besoin d'inventer une nouvelle stratégie énergétique, qui pour respecter l'environnement global, devra d'abord reposer sur la modération et l'efficacité énergétique et inévitablement utiliser les sources renouvelables.

L'irradiation solaire annuelle sur l'ensemble de la planète au niveau de la mer représente plus de 5000 fois l'énergie que nous consommons. Sur le long terme - environ 50 ans - le potentiel extractible des différentes sources d'énergie renouvelable pourrait en pratique couvrir la consommation mondiale actuelle.

Mais il est clair que la consommation d'énergie que connaît le monde actuellement, tend à s'accroître grâce à la poursuite de la croissance des pays industrialisés et à l'expansion démographique et économique des pays en voie de développement. Si aucun pays ne modifie sa politique énergétique (ou en l'absence d'une politique énergétique mondiale), les besoins énergétiques de la planète pourraient tripler d'ici à 2050.

L'enjeu énergétique de ces prochaines années est donc triple; faire face d'une part à la disparition des ressources énergétiques actuelles, et d'autre part, à une demande toujours croissante, tout en préservant notre environnement. Cependant, seule une implication politique forte permettra de voir le développement de ces énergies renouvelables à grande échelle avant l'assèchement des énergies de stock.

I.1.2 Le solaire photovoltaïque

La montée en puissance de l'énergie photovoltaïque devient aujourd'hui une réalité industrielle et économique qui doit relever les défis technologiques. Indépendamment des points communs avec les autres énergies renouvelables, l'énergie solaire photovoltaïque présente plusieurs autres avantages. Tout d'abord, elle est relativement bien répartie à la surface du globe et facilement disponible, ce qui la rend

particulièrement appropriée aux régions isolées. Ensuite, le caractère modulaire des panneaux photovoltaïques permet un montage simple et adaptable à des besoins énergétiques divers. De plus, les panneaux photovoltaïques exigent peu d'entretien, sont fiables et ont relativement une longue durée de vie (25 ans), ce qui rend leurs coûts de fonctionnement très faibles. Enfin, la technologie photovoltaïque, dominée par le silicium, présente des qualités sur le plan écologique car le produit fini est non polluant, silencieux et n'entraîne pas de perturbations du milieu, si ce n'est par l'occupation de l'espace pour les installations de grandes dimensions. Cependant, avec une intégration correcte dans les bâtiments, l'intrusion visuelle du photovoltaïque peut être minimale.

Jusqu'en 1997, la technologie modulaire photovoltaïque se limitait aux applications professionnelles (bornes téléphoniques, télédétection, alarme, relais Télécom, ...etc.), ce qui assurait un développement de la technologie. Mais, avec des taux de croissance de 15% par an [12], il faut encore attendre jusqu'à 2020 pour que la production mondiale annuelle atteigne un seuil satisfaisant. Autrement dit, la conversion photovoltaïque de l'énergie solaire reste un procédé nouveau, ou au mieux l'énergie pour les sites isolés.

I.2 Les technologies photovoltaïques

Le silicium utilisé pour les cellules photovoltaïques doit être d'une grande pureté, quelque soit sa forme. Comme beaucoup d'autres éléments, le silicium peut exister à température ambiante sous différentes structures, dont les deux extrêmes sont respectivement l'état amorphe et l'état cristallin (monocristallin ou multicristallin). Nous allons à présent décrire les différents matériaux utilisés dans l'industrie photovoltaïque et plus particulièrement le silicium.

I.2.1 Le silicium cristallin

Le silicium cristallin est de loin le matériau le plus utilisé dans l'industrie photovoltaïque. On en dénombre 3 types différents:

I.2.1.1 Le silicium monocristallin

Le silicium monocristallin est un matériau de très haute pureté, qui est obtenu par des procédés industriels tels que le tirage en creuset (méthode de Czochralski) ou la purification par fusion de zone (FZ). Le produit fini se présente sous la forme de lingots monocristallins qu'il faut ensuite découper en plaquettes de 300 j.tm. Cette étape entraîne d'ailleurs une perte importante de matériau (jusqu'à 50%). Ce type de matériau, qui présente d'excellentes qualités électroniques, permet la fabrication de cellules conventionnelles à haut rendement (18%). La part de marché du silicium monocristallin est donc de moins en moins importante (33,6%) [12], puisque les

modules produits ont certes un rendement plus élevé mais sont bien plus chers que ceux en silicium multicristallin. A noter également la commercialisation depuis peu de cellules à très haut rendement utilisant du silicium mono mais avec des technologies différentes : les HIT (Heterojunction with Intrinsic Thin layer) de Sanyo [13] et les RCC (Rear contacted cells) de Sunpower [14] dont les rendements sont de l'ordre de 21%.

I.2.1.2 Le silicium polycristallin

Le silicium multicristallin est quant à lui fabriqué principalement à partir de sources de matériau moins raffinées ou des rebuts de l'industrie micro-électronique, mais convient à l'industrie photovoltaïque. La majeure partie de ce matériau est produite par des procédés de solidification unidirectionnelle, tels que le Polix (Photowatt) ou le Baysix (Bayer). Il se présente également sous forme de lingots de grandes dimensions qu'il faut découper en tranches de 200 à 400 mm, grâce cette fois-ci à une scie à fil. Le lingot obtenu est composé de plusieurs gros cristaux, séparés par des joints de grain. Ce matériau, moins homogène que le silicium monocristallin, a des rendements des cellules obtenues légèrement inférieurs (15% [13]). Cependant c'est le matériau qui conduit au coût le plus faible au Wc, en comparaison avec d'autres procédés. Il occupe aujourd'hui 55,9 % de part de marché et tend à progresser

D'autres méthodes de production se développent, tel que le silicium en ruban, cette solution séduisante consiste à produire directement des plaques minces (< 200 um) de silicium multicristallin en utilisant un ruban de carbone qui passe dans un bain de silicium fondu [15]. Par adhérence, un film de silicium se dépose. Il suffit ensuite de brûler le carbone et on se retrouve avec de fines plaques de silicium prêtes à être découpées et processées en cellules photovoltaïques, permettant ainsi d'éviter l'étape de découpe très préjudiciable. Cependant cette technique n'a pas réussi à s'imposer, en raison notamment de la moins bonne qualité du silicium obtenu (purification moins poussée, cristallisation moins bonne, ainsi que l'uniformité et l'état de surface) et des vitesses de tirage trop faible (quelques cm/min). Cependant les meilleures cellules produites présentent des rendements de conversion moyen d'environ 14 %. Le ruban ne représente aujourd'hui que 3,4% de la production mondiale mais la mise au point récente du procédé RGS [16] avec des vitesses de tirage très importantes (6 à 10 m par minute) pourrait relancer l'intérêt du ruban.

I.2.1.3 Le silicium amorphe

Une autre forme de silicium est également utilisée pour la fabrication de cellules photovoltaïques, c'est le silicium amorphe qui a une structure atomique désordonnée, non cristallisée, vitreuse, mais il possède un coefficient d'absorption de la lumière environ 1000 fois supérieur au silicium cristallin. Une fine couche de 0,3 mm est donc suffisante pour absorber l'essentiel du spectre visible. Dans cette technologie, le

silicium est produit directement sur une plaque de verre à partir du gaz silane SiH_4 . En fait, les plaques de verre sont placées dans une enceinte chauffée où l'on fait le vide, puis du silane est injecté et décomposé par une décharge radiofréquence; le silicium libéré se dépose alors sur les plaques. La présence d'hydrogène est également nécessaire pour la qualité du matériau (il limite le nombre de défauts en saturant les liaisons pendantes de silicium présentes à cause de la structure désordonnée). L'adjonction des dopants est réalisée par ajout de gaz PH_3 ou B_2H_6 au silane. Avec ce type de matériau peu coûteux par rapport aux autres formes de silicium, on a de faibles rendements: 5 à 6 % et des problèmes de stabilité apparaissent rapidement quand on l'expose au soleil et aux intempéries (quelques centaines d'heures) [17]. Cependant, le principal problème des cellules en silicium amorphe est leur dégradation au cours du temps, dégradation consécutive à la libération de l'hydrogène.

Aujourd'hui les piles solaires en silicium amorphe sont principalement employées pour des biens de consommation (montres, calculatrices...) mais peu utilisées dans le cadre des installations solaires (seulement 4% du marché photovoltaïque).

I.2.3 Les cellules organiques

Une autre filière est en train de faire son apparition mais ne s'est pas encore imposée: les cellules organiques. La recherche et développement de cellules solaires à base de matériaux organiques ou de polymères est motivée par les avantages que présentent ces matériaux : faible coût, matière première illimitée, facilité de mise en œuvre, technologie à basse température, grandes surfaces, dispositifs souples... Cette solution permettrait de plus de traiter selon une même technologie le substrat (support mécanique), le matériau actif où a lieu la conversion photovoltaïque et l'encapsulation. Il existe aujourd'hui des cellules photovoltaïques organiques dont le rendement de conversion dépasse la barre des 10 %. Elles reposent sur la technologie dite de Gratzel [18] qui consiste en une jonction entre un polymère organique et un électrolyte liquide. La génération photovoltaïque se situe dans le polymère et l'électrolyte permet d'assurer le transfert de charge et la différence de potentiel (force électromotrice) par sa jonction avec le polymère. La présence de l'électrolyte liquide constitue l'inconvénient majeur de cette technologie avec une faible stabilité en temps (évaporation) et une plage de température de fonctionnement limitée.

Les meilleures performances actuelles sont un rendement de conversion de 3,6% [19]. L'essor de la filière est donc conditionné par une amélioration des rendements mais également par la maîtrise et la compréhension des mécanismes de vieillissement des cellules dont la dégradation au cours du temps est très importante (durée de vie de seulement quelques milliers d'heures). Pour l'instant seul des applications jetables sont envisagées.

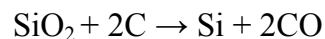
I.3 Méthode de production du silicium

Le silicium a bien d'autres usages que la fabrication de cellules solaires. On l'utilise en métallurgie (industrie de l'aluminium, tôles de transformateurs...) et pour la fabrication de matériaux (silicones). Seule une petite partie (10%) du silicium produit est utilisée pour l'industrie des semi-conducteurs (composants électroniques). Les cellules solaires ne constituent qu'une petite partie de ces composants. Pour cette raison, on se contente lors de la production du silicium d'une pureté "métallurgique" et on purifie ensuite le silicium destiné aux semi-conducteurs.

Le matériau de base, la silice (SiO_2) est très répandu à la surface de la terre (quartz, sable blanc...), nécessite d'une part d'être réduit et d'autre part, d'être purifié afin d'obtenir un matériau de qualité électronique.

I.3.1 Réduction de la silice

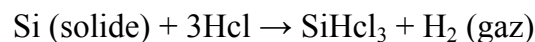
On réalise une électrolyse dans un four à arc pour atteindre une température assez élevée pour faire fondre la silice. La silice est mélangée à du carbone. Réaction principale :



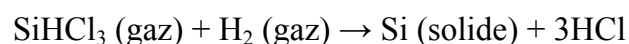
Le silicium obtenu a une pureté de 98%, il faut encore le purifier pour obtenir un matériau de qualité électronique.

I.3.2 Purification du silicium

On effectue une purification chimique. Une des méthodes, consiste à faire une distillation à partir de SiHCl_3 (trichlorosilane) liquide à température ambiante:



Le rendement de la réaction est égale à 90%. On a effectuée une première purification car des précipités chlorés ne se mélangent pas au trichlorosilane. Puis SiHCl_3 (qui a une température d'ébullition faible: 31.8°C) est purifié par distillation fractionnée, il est plus volatil que les chlorures des principales impuretés. Ce trichlorosilane purifié est ensuite réduit pour redonner du silicium:



Après la distillation, la teneur en impuretés actives est inférieure à 1ppm, le silicium est alors de qualité électronique. Le silicium pur obtenu (donc intrinsèque) doit maintenant subir un double traitement à la fois d'enrichissement en matériau dopant

afin d'en faire du silicium extrinsèque de type p ou n comportant une proportion d'une impureté connue et d'obtenir de plus un monocristal convenablement orienté.

I.3.3 Principales méthodes d'élaboration du silicium

En effet, le silicium précédemment obtenu était polycristallin, il y a nécessité de le transformer en monocristallin pour améliorer sa conductivité. Cette opération est réalisée dans un four à partir du bain fondu selon deux méthodes :

- Procédure de Czochralski;
- La méthode de la Zone Flottante (FZ).

I.3.3.1 Procédure de Czochralski

Pour produire du silicium monocristallin, on utilise la même technique que dans l'industrie des composants électroniques. La méthode Czochralski est l'une des seules permettant d'obtenir de gros monocristaux de qualité optique suffisante. Le matériau à élaborer est d'abord porté à la fusion dans un creuset (figure I.1). Un germe monocristallin est approché du centre de la surface du bain, avec laquelle il est mis en contact. Le liquide remonte par capillarité le long du germe, créant une interface triple liquide-solide-gaz. Le germe est ensuite lentement tiré vers le haut, à des vitesses de l'ordre du millimètre par heure, pour former un monocristal. L'ensemble de la croissance est effectuée en maintenant le cristal en rotation, de manière à homogénéiser le bain et à contrôler la forme de l'interface solide/liquide [20], [21].

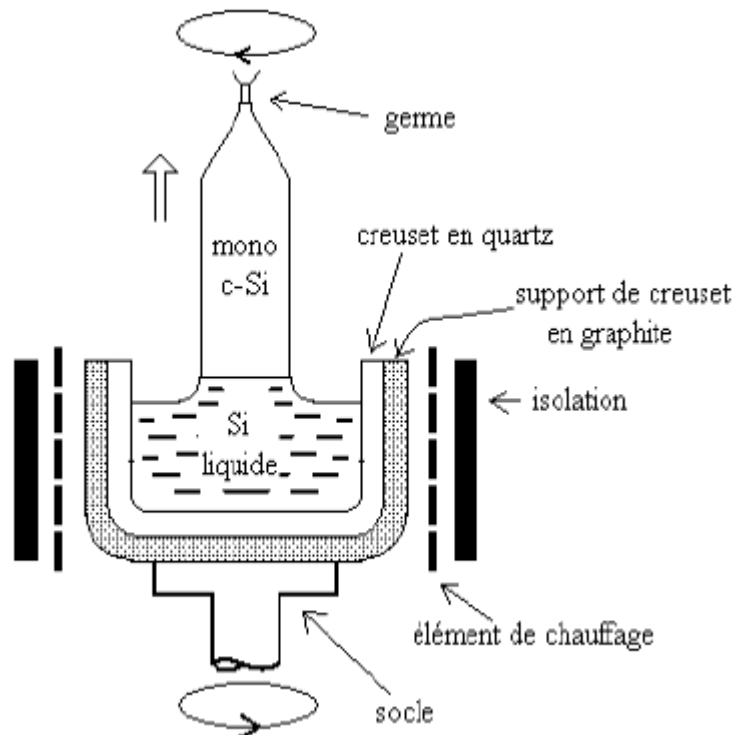


Figure I.1: Méthode de Czochralski [22]

La figure I.2 présente 2 cristaux obtenus par la méthode Czochralski, le premier a un diamètre de 150mm et le second a un diamètre de 200mm.



Figure I.2: Lingots de silicium monocristallin [23]

Cependant, les simples cristaux de silicium développés par la méthode de Czochralski contiennent des impuretés puisque le creuset qui contient la fonte, se dissout. Pour certains dispositifs électroniques, en particulier ceux exigés pour des applications de puissance élevée, le silicium développé par la méthode de Czochralski n'est pas assez pur. Pour ces applications, le silicium de zone flottante (FZ-Si) peut être employé à la place.

I.3.3.2 La méthode de la Zone Flottante (FZ)

La méthode de la Zone Flottante permet de fabriquer des monocristaux de très haute pureté en comparaison avec les autres méthodes. Elle s'est donc imposée dans le domaine des semi-conducteurs (Si, Ge, ...). La méthode de cristallisation par zone flottante permet d'une part de purifier un barreau de silicium polycristallin et d'autre part de le transformer en un monocristal d'orientation cristalline et de diamètre contrôlés. La solidification est initiée au moyen d'un germe monocristallin qui sélectionne l'orientation du monocristal massif. Les différentes étapes de l'opération sont illustrées schématiquement sur la figure I.3.

L'extrémité inférieure du barreau polycristallin est fondue, en général par induction, après un préchauffage par passage d'un courant à effet joule, dans le barreau. Le germe monocristallin est orienté et plongé depuis le bas dans la goutte de silicium fondu. La zone fondue est progressivement déplacée vers le haut du cristal. Elle est maintenue par tensions superficielles. Un contrôle judicieux des températures, des vitesses déplacement et de rotation conduit à la recristallisation de tout le barreau. La pureté du lingot monocristallin est déterminée par la pureté du matériau de départ,

par celle de l'atmosphère ambiante (vide poussé, gaz inerte) et par les parois du récipient. Les impuretés résiduelles principales (O, C) sont présentes à raison de 10^{21} atpmes.m⁻³ environ. Des lingots de 15-20 cm de diamètre et de plusieurs dizaines de kilos sont aisément fabriqués. Au stade initial de la croissance, on procède de façon qu'un rétrécissement se forme immédiatement au-dessous du germe (diamètre d'environ 3 mm sur une longueur de l'ordre de 10 mm). L'étranglement ainsi formé correspond à un accroissement sensible de la surface par apport au volume du cristal. Cette opération favorise l'élimination des dislocations qui sont provoquées par le choc thermique lors du contact germe froid avec la goutte fondue. En effet, les dislocations tendent à croître vers les surfaces libres de l'échantillon où les contraintes mécaniques sont plus faibles. Le déplacement uniforme et contrôlé de la zone fondue, garantie ensuite la croissance d'un monocristal de diamètre régulier et sans dislocations.

Du point de vue des réglages, cette méthode est un mécanisme extrêmement complexe: la vitesse d'avancée, la vitesse de fusion, le volume de fusion, les forces centrifuges et la puissance du générateur sont des paramètres dépendants les uns des autres et qui doivent être accordés avec une extrême précision pendant toute la durée du processus [20].

Les cristaux fabriqués par la méthode de la Zone Flottante et libellés FZ (*floating zone*) sont relativement purs grâce à l'absence de contact entre la phase fondue et un creuset. Il conviennent particulièrement bien à la fabrication de dispositifs à semi-conducteur de puissance détecteur infrarouges. Par contre, leurs résistances mécaniques ainsi qu'aux contraintes thermiques est relativement faible.

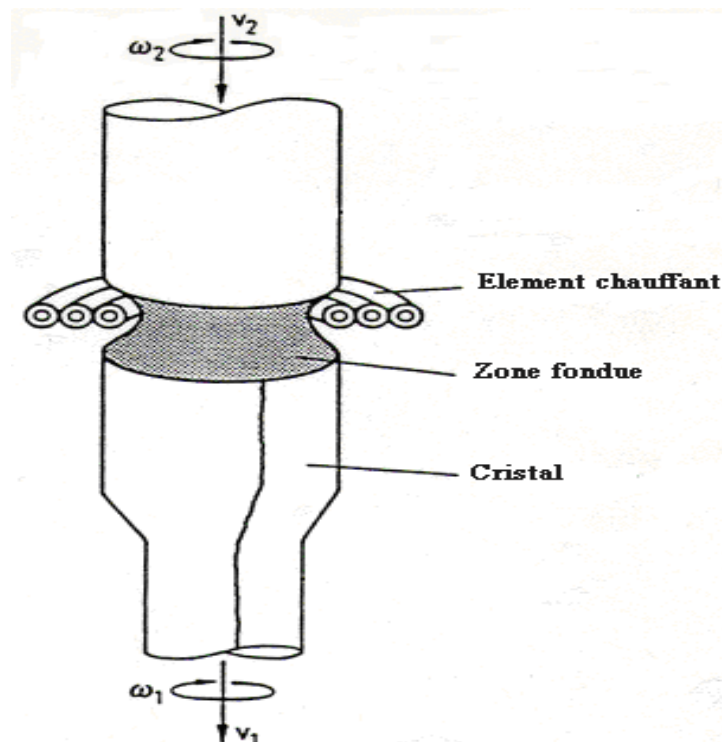


Figure I.3 : Schéma de principe de la méthode de la Zone Flottante (FZ) [24].

I.3.3.3 Procédés de solidification unidirectionnelle

Si on se contente de silicium polycristallin, il est possible de procéder par une méthode qui consiste à utiliser un four semblable à celui donné sur la figure I.4, mais avec un creuset de forme parallélépipédique (souvent à base carrée). On refroidit le creuset par le bas, par exemple en le faisant descendre progressivement hors de l'élément chauffant, comme indiqué à la figure.

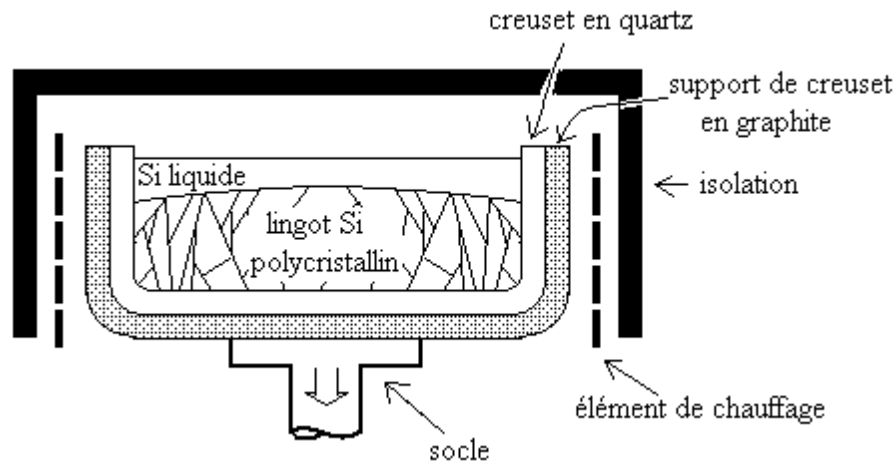


Figure I.4 : Fabrication de lingots de Si polycristallin [22]

Une méthode moins coûteuse consiste à couler le silicium liquide dans des conteneurs en graphite réutilisables. Le refroidissement se fait par toute la surface interne du conteneur. La régularité de la colonne des grains est moins bonne que dans le cas précédent.

I.3.4 Préparation des plaquettes

I.3.4.1 Orientation et découpage

Une fois les deux bouts du lingot sont enlevés du four de croissance, le bout supérieur sert à constituer le germe monocristallin pour la croissance suivante. Le bout inférieur contient une concentration d'impureté plus importante que dans le corps du lingot. Le lingot est ensuite rectifié au bon diamètre sur un tour pour donner un lingot parfaitement rond. L'orientation cristalline du lingot est déterminée grâce à un appareil aux rayons X. Connaître cette orientation est nécessaire pour les étapes ultérieures de fabrication. En particulier, la séparation des circuits d'une plaquette les uns des autres, doit se faire d'un plan atomique. Un monocristal se coupe ou se clive le long d'un de ses plans réticulaires. L'orientation utilise les indices de Miller, un monocristal cubique contient trois plans atomiques: (100), (110) et (111).

I.3.4.2 Découpage et polissage

Pour scier des plaquettes à partir d'un lingot, on utilise une scie diamantée à diamètre intérieur, elle a la particularité de provoquer le minimum de casse. Le lingot à scier est collé par son méplat primaire sur une barre afin de maintenir les plaquettes lors du sciage. On utilise aussi d'autres types de scies à fil diamanté. Quelques plaquettes sont enlevées du lot pour subir des testes et des mesures, à savoir, le diamètre, la planéité et l'épaisseur; on vérifie aussi l'homogénéité de la résistance. Après le sciage, les plaquettes sont nettoyées à l'eau désionisée. On leur meule les arêtes vives pour les adoucir. Elles subissent ensuite un rodage mécanique à la poudre d'alumine. On les charge dans une machine à action orbitale où elles tournent entre deux surfaces lubrifiées avec de la poudre d'alumine. Après ce rodage, les irrégularités à la surface sont inférieures à 3 microns.

I.4 Structures cristallines

La matière condensée peut prendre deux états solides différents, suivant les conditions dans lesquelles elle s'est formée : un état dit amorphe, dans lequel la disposition des atomes est aléatoire, ou un état cristallisé, caractérisé par un arrangement périodique des atomes. Les solides amorphes sont généralement appelés des verres et considérés comme des liquides de haute viscosité. Les solides cristallisés peuvent former des monocristaux, si la périodicité est ininterrompue dans tout le volume, ou des poly-cristaux, s'il existe une périodicité locale et que le solide est composé d'un ensemble de grains cristallins de taille à peu près uniforme. Dans la microphotographie de la figure I.5, prise par TEM (Transmission Electron Microscopy), une vue de coupe du réseau cristallin du silicium permet d'observer sa périodicité. Le résultat est un ensemble ordonné, ou localement ordonné, des noyaux d'atomes et d'électrons liés entre eux par des forces principalement coulombiennes. Ces forces sont plus ou moins importantes suivant l'électronégativité des éléments intervenant dans les liaisons, ce qui confère aussi des propriétés mécaniques et électriques au solide cristallisé résultant. On distingue quatre familles de solides cristallins : les cristaux ioniques, les cristaux covalents, les métaux et les cristaux moléculaires [25]. L'observation de la surface d'un solide à l'aide d'un microscope à effet tunnel (M.E.T.) met en évidence la structure régulière et périodique des solides cristallisés.

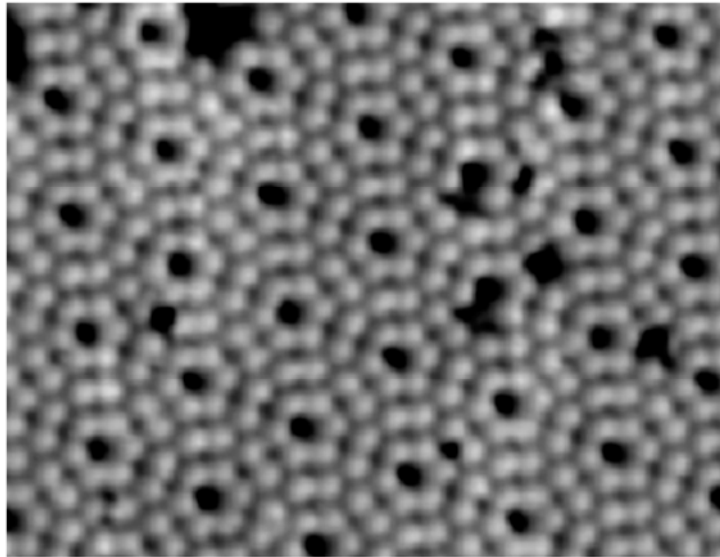


Figure I.5 : Microphotographie du réseau cristallin du silicium (plan (1,1,1)) prise par M.E.T [25].

La structure diamant

Dans la structure diamant, chaque atome est entouré de 4 plus proches voisins, ce qui permet de former des liaisons covalentes. Elle peut être décrite comme étant formée de 2 structures C.F.C. déplacées l'une par rapport à l'autre le long de la diagonale principale. La position de l'origine de la seconde structure C.F.C. par rapport à l'origine de la première est $(1/4, 1/4, 1/4)$. Le diamant cristallise dans cette structure, mais aussi le Silicium et le Germanium.

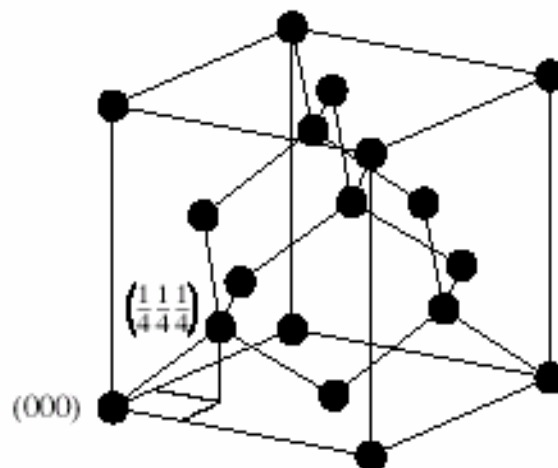


Figure I.5 : La structure diamant

Cette structure est typique des éléments de la colonne IV du tableau périodique, mais aussi des composés III – V dans lesquels les sites $(0, 0, 0)$ et $(1/4, 1/4, 1/4)$ sont occupés par différents types d'atomes. On parle dans ce cas de structure Zinc blende [26].

I.5 Défauts cristallins dans le Silicium

Dans un lingot monocristallin plusieurs défauts peuvent être présents, la localisation de ces défauts sur l'emplacement du circuit intégré peut entraîner son rejet et baisser ainsi le rendement de fabrication. Il existe plusieurs types de défauts, qui altèrent la qualité des cristaux :

- ponctuels : atome interstitiel, lacunes et impuretés,
- linéaires : dislocations,
- bi-dimensionnels : macles et joints de grains,
- volumiques localisés : bulles et précipités,
- volumiques diffus : contraintes résiduelles et hétérogénéité chimique.

I.5.1 Défauts linéaire : dislocations

Les défauts les plus importants et qui nous intéressent dans cette étude sont les dislocations. Il existe deux types de dislocations : la dislocation vis et coin (voir figure I.6), toutes deux créent une distorsion de la maille cristalline. Une dislocation est un déplacement de plans réticulaires par translation d'une région du cristal définie par le vecteur de Burgers. La contrainte critique σ_{CRSS} , introduite par Weertman [27], est la contrainte à partir de laquelle le mouvement des dislocations devient significatif et la déformation devient irréversible. Lorsqu'une contrainte de cisaillement devient supérieure à σ_{CRSS} dans un plan de glissement, la déformation plastique intervient par multiplication des dislocations. Les dislocations sont donc dues aux contraintes thermomécaniques qui sont elles liées à la courbure des isothermes.

Il a été montré par Jordan *et al.* [6] que le champ de contraintes thermoélastiques calculé et celui des densités de dislocations expérimentales étaient superposables. Les dislocations ont tendance à se multiplier sous l'effet des contraintes thermomécaniques dans les matériaux à faibles σ_{CRSS} . La contrainte critique de cisaillement σ_{CRSS} est faible pour les semi-conducteurs III-V : respectivement 0,3 et 0,5 MPa pour le GaAs et le GaSb alors qu'elle est de 5 MPa pour le silicium. L'origine des dislocations est donc en partie thermique et on sait que le creuset, par sa conductivité thermique différente, perturbe le champ de température dans le cristal.

De plus, les coefficients de dilatation du matériau et du creuset sont différents dans la majorité des cas, générant ainsi des contraintes de dilatation différentielle au cours du refroidissement du cristal, susceptibles de favoriser la multiplication des dislocations. Cet effet est exacerbé en cas d'adhésion du cristal sur le creuset.

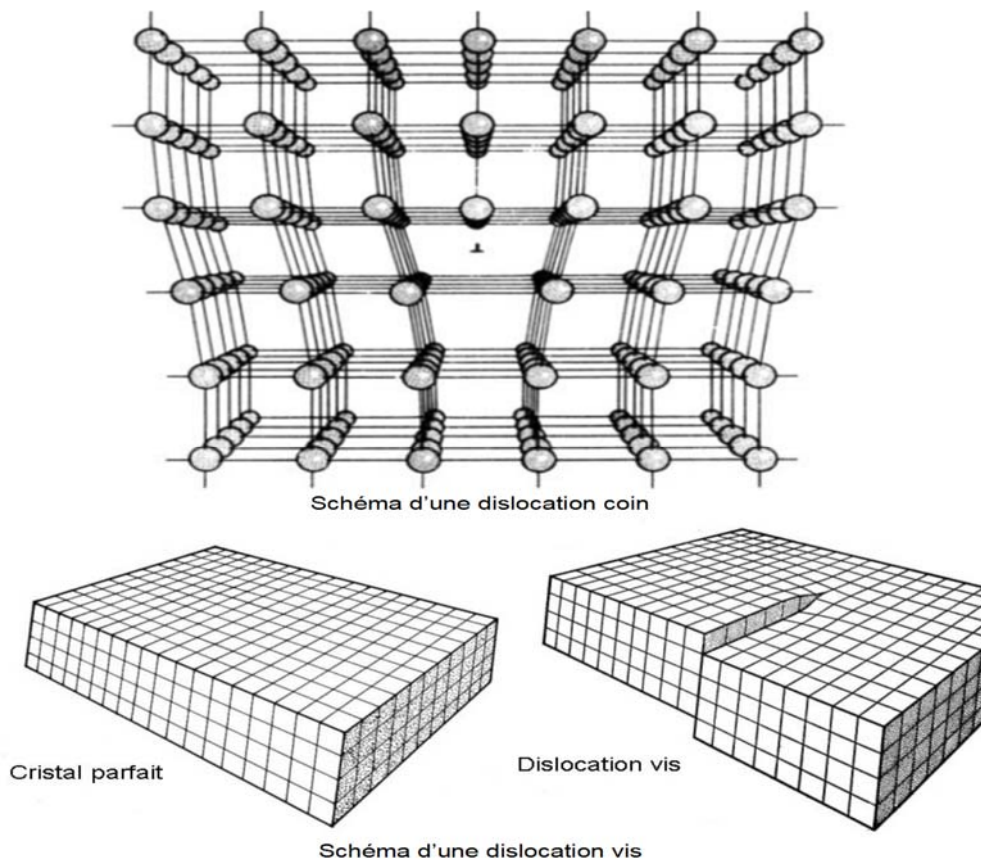


Figure I.6 : Schéma de la dislocation [28]

Ces différentes causes de génération de dislocations sont toutes liées à l'emploi d'un creuset. Afin de diminuer les dislocations, il faut diminuer les contraintes thermiques subies par le cristal pendant le refroidissement. Il est alors nécessaire de diminuer les contraintes de dilatation différentielle et les gradients de température radiaux près de l'interface liquide-solide.

I.5.2 Défauts bi-dimensionnels

Les défauts de surface à deux dimensions peuvent être divisés en joints de grains et en macles.

La quasi-totalité des solides cristallins est constituée d'un agglomérat de cristaux, ou grains accolés avec des orientations différentes. La taille des grains varie de quelques microns à quelques millimètres suivant les conditions d'élaboration. Si ces cristaux sont de nature identique, leur surface d'accolement est appelée joint de grains. Si les cristaux sont de nature différente, leur surface d'accolement est appelée joint de phases. La figure I.7 représente un joint de grains entre des cristaux. Dans les joints, les atomes occupent des positions intermédiaires entre les nœuds des réseaux adjacents, sans que les liaisons atomiques soient rompues.

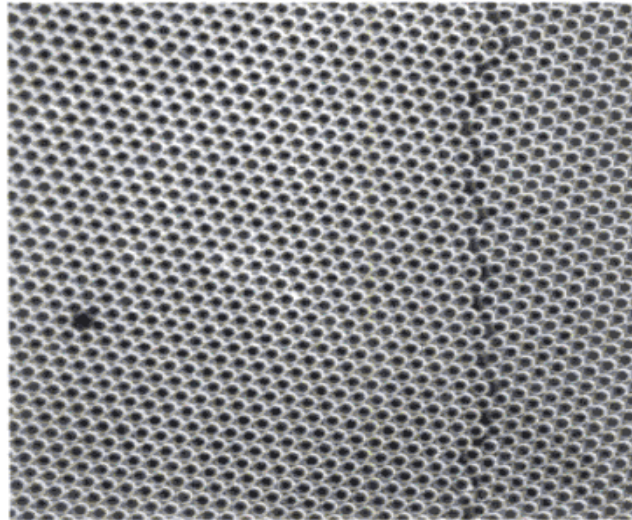


Figure I.7 : Représentation bidimensionnelle d'un joint de grains dans un réseau de bulles. Les bulles ont un diamètre 0.5 mm et forment un réseau cristallin plan. On note une lacune à gauche de la photo [25].

La formation de grains secondaires, et donc de joints de grains, résulte de germinations parasites. D'après Brice [29], une interface liquide-solide concave (vue du liquide), favorise une croissance polycristalline à partir de la périphérie du lingot, où la nucléation tendra à former un grain se propageant vers l'intérieur. À l'inverse, si l'interface est convexe, le grain est dirigé vers la surface du cristal en train de croître et disparaît.

On distingue la nucléation homogène (à hautes valeurs de surfusion de nucléation) de la nucléation hétérogène où elle débute sur un substrat (faibles valeurs de surfusion de nucléation).

La formation de joints de grains peut également avoir pour origine la multiplication et la coalescence des dislocations produites par les contraintes thermo élastiques.

Les macles sont des défauts dans l'ordre d'empilement des couches denses d'atomes. Au cours de la solidification d'un métal liquide ou de cristallisation d'un solide dans un réseau C.F.C, l'ordre d'empilement des plans compacts qui est théoriquement ABCABC, peut s'inverser, ce qui produit une faute d'empilement. La figure I.8 représente deux plans de maclage (A_1 et A_2) délimitant une zone maclée (région 2) dans une structure C.F.C.

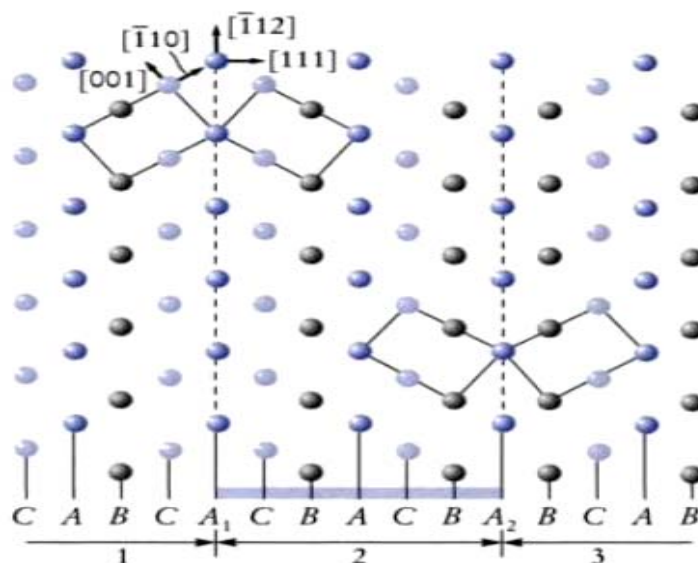


Figure I.8 : Représentation schématique de la maclure dans le réseau CFC le plan de la figure Est Le plan (110), les plans A1 et A2 sont les plans de maclages [28].

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

Tableau I.1 : Origine des différents défauts de réseaux cristallins [30].

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

Chapitre II

Phénomènes Intervenant lors du procédé de Czochralski (CZ)

Sommaire	20
II.1 Présentation de la méthode Czochralski	21
II.1.1 Le tirage Czochralski du silicium	22
II.1.2 Ecoulements dans le liquide	23
II. 2 Phénomènes d'écoulement de fluide et transfert de chaleur	25
II.2.1 Équation de continuité	25
II.2.2 Equations de Navier Stokes	25
II.2.3 Transfert de chaleur	26
II.2.3.1 Transfert de chaleur par conduction	26
II.2.3.2 Transfert de chaleur par convection	26
II.2.3.3 Transfert de chaleur par rayonnement	27
II.3 Phénomènes mécaniques intervenant lors du tirage Czochralski	27
II.3.1 Rappel sur l'évaluation des contraintes normales et tangentielles ...	28
II.3.2 Formation et évolution des dislocations sous l'action de contraintes	29
II.3.2.1 Formation des dislocations	29
II.3.2.2 Evolution des dislocations	30
II.3.3 Localisation des dislocations dans un cristal	31

II.1 Présentation de la méthode Czochralski

La méthode Czochralski (Figure I.1) est un procédé de fabrication de monocristaux par cristallisation à la surface d'un bain fondu. Elle est employée avec de nombreux matériaux tels que le quartz, la silice, le germanium, et l'arséniure de galium (AsGa) utilisé en optoélectronique et en électronique. La première expérience de tirage d'un monocristal à partir d'un bain fondu, a été réalisée en 1916 par Jan Czochralski. Il s'agissait du tirage d'un fil d'étain monocristallin [31], [32]. La découverte du transistor dans les laboratoires Bell aux USA en 1950 va permettre de lancer le tirage d'un premier cristal industriel de grandes dimensions par la méthode Czochralski: le germanium [33]. Puis ce sera le silicium, ainsi que les semi-conducteurs III-V (AsGa, InP) et II-VI (CdTe). La technique la plus couramment utilisée aujourd'hui pour la production de nombreux monocristaux est donc le tirage Czochralski. Il convient de noter que la technologie de tirage par la méthode de czochralski est continuellement développée [34-40].

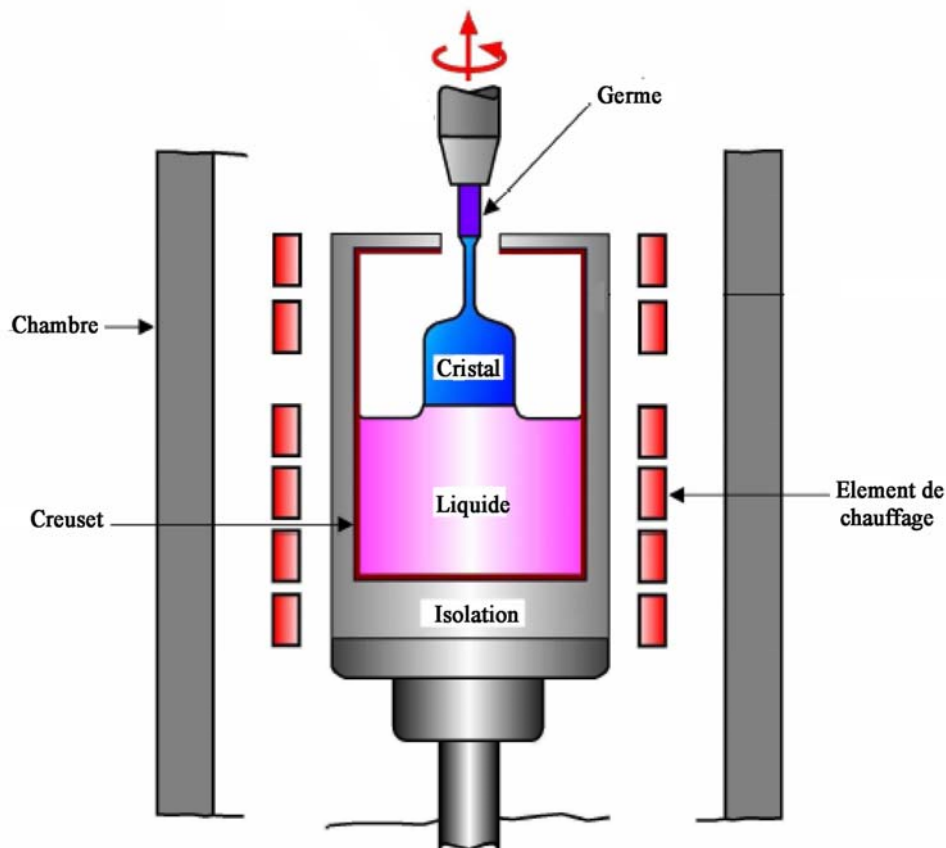


Figure II.1 : Schéma de principe de la méthode Czochralski [41]

Cette méthode présente de nombreux avantages :

- Le contrôle visuel permet d'agir en temps réel sur les conditions de croissance (température, vitesse de tirage),

- L'absence de contact entre le cristal et le creuset pendant la nucléation permet une meilleure qualité cristalline par rapport à d'autres méthodes telle que la technique Bridgman,
- La vitesse de tirage peut être très rapide (jusqu'à 1 cm/h) et la dimension des monocristaux synthétisés très importante (jusqu'à plusieurs mètres de longueur pour le tirage de barreau de silicium en milieu industriel).

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.

II.1.1 Le tirage Czochralski du silicium

Le principe de cette méthode est relativement simple (Figure II.2) et permet d'obtenir des monocristaux de silicium de bonne qualité avec des vitesses de croissance supérieures à celles obtenues par la méthode de Bridgman. Le silicium liquide est déposé dans un creuset cylindrique de verre de silice. Le creuset est porté à une température supérieure à la température de fusion du silicium, dans le vide ou sous atmosphère inerte. Un four résistif ou inductif à radiofréquence peut être utilisé avec des éléments de graphite très pur servant à la fois de support et de corps de chauffe. Une tige métallique en molybdène se terminant en pointe et animée d'un mouvement de rotation, vient en contact avec la surface du liquide et permet la nucléation spontanée du monocristal. En ajustant correctement la température, il est possible de stabiliser l'équilibre liquide-solide au voisinage de la surface du bain. Après solidification d'un premier germe, la tige est progressivement remontée par un mouvement de translation et le cristal est tiré à vitesse constante. La formation d'un étranglement par diminution du diamètre favorise l'élimination des dislocations qui tendent à croître vers la surface. Par la suite, le diamètre du cristal est contrôlé en jouant sur la puissance thermique délivrée au creuset.

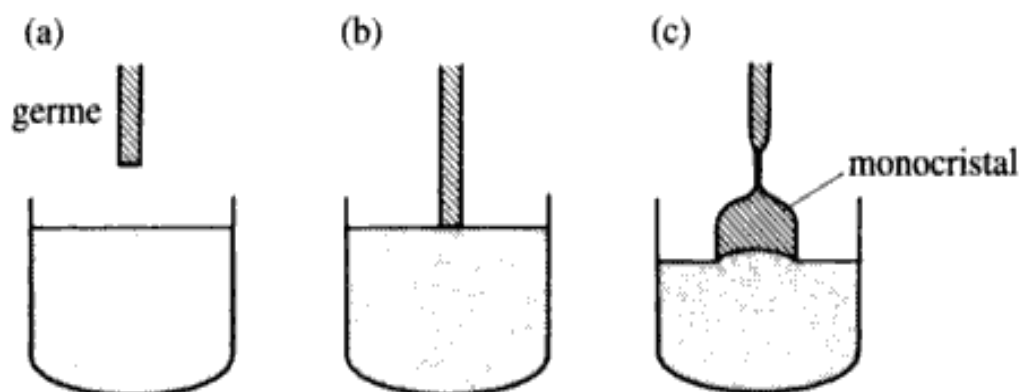


Figure II.2 : Technique de Czochralski pour la fabrication de Si monocristallin [1]

Cette puissance est diminuée progressivement en début de tirage pour que le diamètre du cristal croisse, puis ajustée de manière à obtenir un diamètre constant.

L'homogénéité de l'ensemble est assurée par une rotation du creuset et du cristal autour de l'axe vertical. La croissance d'un monocristal n'est possible que grâce à un contrôle soigné de tous les paramètres : vitesse de tirage (1-20 cm/h) et de rotation du cristal et/ou du creuset, température, atmosphère ambiante, etc. Des monocristaux de diamètre de l'ordre de 15-30 cm et de 1-2 m de long sont fabriqués ainsi. On estime qu'un étranglement de 2 mm peut supporter un cristal pesant 150 kg, librement suspendu. Il n'y a pas d'autre limite à la taille d'un cristal que les dimensions de l'équipement de tirage à disposition.

Le phénomène le plus important dans le processus de czochralski (CZ) est l'écoulement du bain de silicium. Plusieurs mécanismes sont responsables de l'écoulement:

(a) En raison de la viscosité du liquide, le cristal et le creuset tournants, exercent des forces de cisaillement sur le liquide, de sorte que le liquide soit conduit avec mouvement dans la direction azimutale (écoulement azimutal). En outre, les forces centrifuges induites par le cristal et les rotations de creuset conduisent le liquide au voisinage de l'interface cristal/liquide et au fond du creuset. Ces écoulements méridionaux s'appellent la convection forcée. Le cristal tournant, améliore l'uniformité de la structure dans le bain du liquide et la rotation du creuset garantit les symétries thermiques qui peuvent résulter des irrégularités dans le chauffage;

(b) Le chauffage du creuset cause des différences de température à travers le liquide. En raison de la dilatation thermique du fluide, le liquide chaud est plus léger que le liquide froid. Une telle différence des densités, mène à la flottabilité dans certaine partie du liquide. En conséquence, la convection est induite (librement ou convection normale);

(c) Les variations de la tension superficielle le long du ménisque du liquide, conduisent un autre écoulement appelé la convection de Marangoni. Puisque le coefficient de tension superficielle de la plupart des matériaux en cristal, sous leur forme fondue, varie avec la température. Un gradient de température différent de zéro le long de la surface libre, cause un traçage extérieur non-constant, ayant pour résultat le cisaillement sur la surface libre. Ce dernier cas n'est pas pris en considération dans le cas de notre étude.

II.1.2 Ecoulements dans le liquide

La configuration d'écoulement (Figure II.3) causé par la combinaison de ces mécanismes, contrôle le transfert de masse et de chaleur dans le liquide. Ainsi la qualité, la taille et la vitesse de croissance du cristal sont directement liées aux caractéristiques des configurations d'écoulement. C'est pourquoi la plupart des études sur le cristal élaboré par le procédé de Czochralski, ont été concentrées sur les configurations d'écoulement dans le liquide.

Un autre facteur qui influence sur la qualité du cristal est la forme de l'interface liquide/solide. La forme de l'interface peut fortement affecter la qualité du cristal développé avec le procédé de czochralski. Une interface fortement concave ou convexe, induit les contraintes thermiques dans le cristal pendant le refroidissement qui mènent aux fissures et aux dislocations. Ainsi il est très important de trouver les conditions opératoires pour une forme d'interface plate (ou presque) pour les cristaux de silicium.

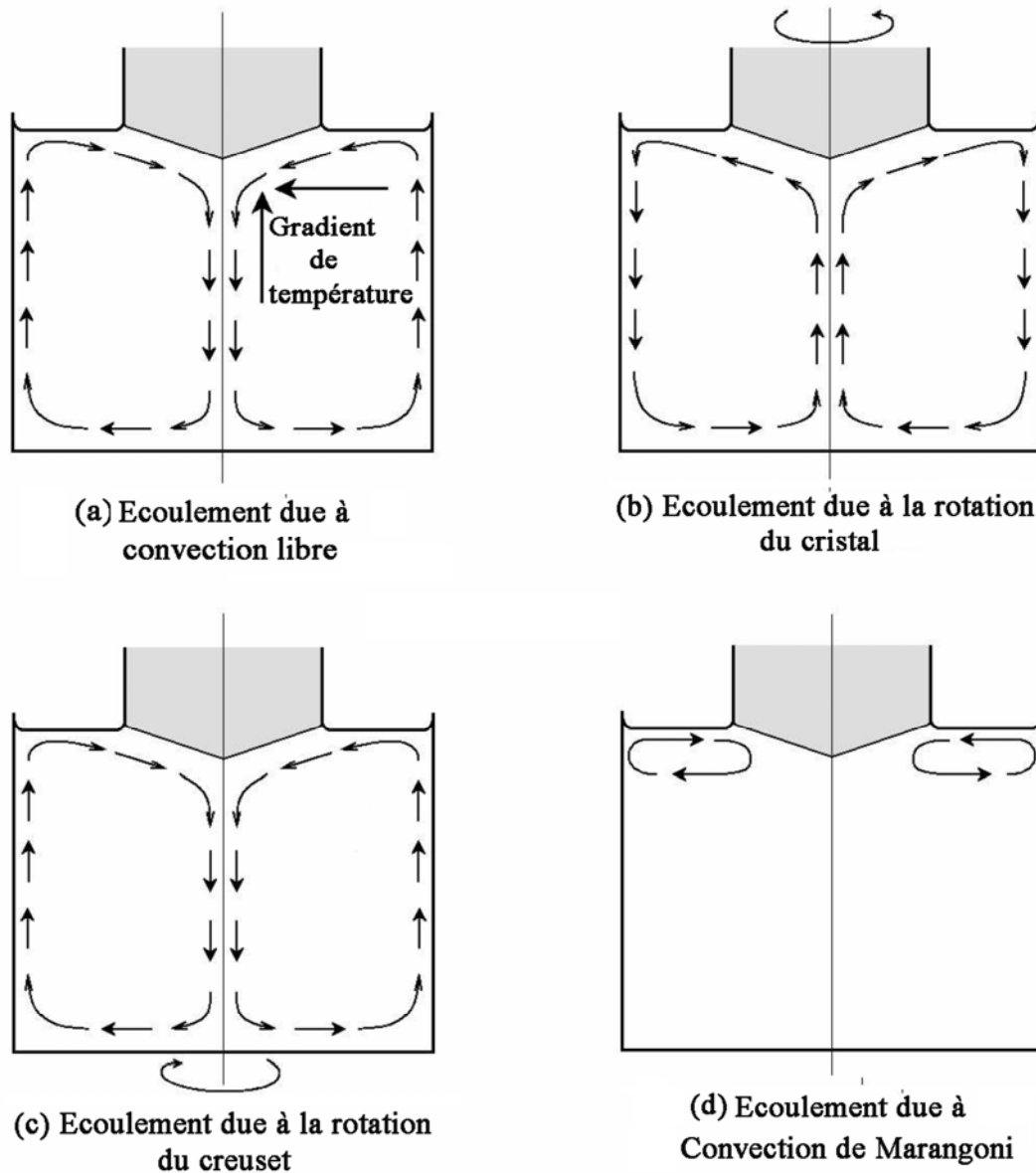


Figure II.3 : Les différents modes d'écoulement de fluide dans Czochralski [41].

II.2 Phénomènes d'écoulement de fluide et transfert de chaleur

II.2.1 Équation de continuité

Dans la dynamique des fluides, une équation de continuité est une équation de conservation de masse. Sa forme différentielle est :

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v}) \quad (1)$$

Où: ρ est la densité, t est le temps et \mathbf{v} est la vitesse du fluide. Pour un fluide incompressible, $\rho = \text{constante}$.

L'équation de la continuité se simplifie à:

$$\nabla \cdot \mathbf{v} = 0 \quad (\rho = \text{constante}) \quad (2)$$

II.2.2 Equations de Navier Stokes

Les équations du mouvement pour un élément de fluide sont données par les équations Navier Stokes [42, 43].

$$\rho \left(\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla \mathbf{v} \right) = \rho \cdot \mathbf{f} - \nabla p + \nabla (\mu \nabla \mathbf{v}) \quad (3)$$

Où: μ est la viscosité du fluide, le dernier terme représente l'effet des forces visqueuses.

Le frottement interne, dû à la nature visqueuse du fluide se manifeste seulement quand une région de fluide se déplace relativement à une autre.

Des couches mobiles plus rapides entraînent en mouvements les plus lents de sorte que la force soit transférée à partir du plus rapide aux couches plus lentes. De tels fluides s'appellent les fluides Newtonien.

Le vecteur \mathbf{f} représente la force de volume exercée sur l'élément du fluide. La pesanteur est un exemple d'une force de volume. L'effet de pesanteur est de grande importance dans la convection normale qui est conduite par la différence de densité de flottabilité et empêchée par l'inertie visqueuse du fluide. La viscosité absorbe l'énergie cinétique tandis que la force de flottabilité libère l'énergie interne.

$$\mathbf{f} = -g\rho\beta_T(T - T_0) \quad (4)$$

Où: T_0 se rapporte à une température de référence, g est la constante de la gravité.

L'équation ci-dessus, s'appelle l'approximation de Boussinesq. L'approximation de Boussinesq signifie qu'on assume que la densité du fluide est constante, excepté dans le terme de buoyancé dans l'équation de Navier-Stoks (variation au moins de 1% dans tout le fluide). Dans la dynamique des fluides, l'approximation de Boussinesq est employée dans le domaine de l'écoulement conduit par flottabilité.

II.2.3 Transfert de chaleur

Le transfert de chaleur est celui dû à une différence de température. Le transfert de chaleur peut se produire par trois mécanismes différents : conduction, convection et rayonnement [44, 42]. La conduction se rapporte au transfert de chaleur qui se produit à travers un solide stationnaire ou au fluide en lequel un gradient de température existe. En revanche, la convection se rapporte à la propagation de la chaleur dans un fluide, donc gaz ou liquide, dont les molécules sont en mouvement et en lequel un gradient de température existe. Le rayonnement, particulièrement rayonnement thermique, se rapporte au transfert de chaleur entre deux surfaces à différentes températures séparées par un milieu transparent aux ondes électromagnétiques émises par les surfaces.

II.2.3.1 Transfert de chaleur par conduction

Quand il existe un gradient de température dans un corps, l'énergie calorifique découlera de la région de haute température vers la région à basse température. Ce phénomène est connu en tant que transfert de chaleur de conduction, et il est décrit par la loi de Fourier (baptisée du nom du physicien français Joseph Fourier),

$$q = -k\nabla T \quad (5)$$

Cette équation détermine le vecteur de flux thermique q pour un profil de température donné T et la conductivité thermique k . Un flux thermique est défini comme la quantité de chaleur transférée par unité de superficie par l'unité du temps. La diffusivité thermique α est lié à la conductivité thermique k , à la chaleur spécifique C , et à la densité ρ par,

$$\alpha = \frac{k}{\rho C} \quad (6)$$

II.2.3.2 Transfert de chaleur par convection

Pour un fluide et dans le cas stationnaire, à pression constante ou pour des fluides avec une densité indépendante de la température, l'équation de transfert de chaleur est donnée par :

$$\alpha \nabla^2 T - \nu \cdot \nabla T = 0 \quad (7)$$

La convection est habituellement la forme dominante de transfert de chaleur en liquides et en gaz. C'est le terme employé pour caractériser les effets combinés de la conduction et l'écoulement du fluide. Dans la convection, le transfert de chaleur se produit par le mouvement des parties chaudes ou froides du fluide ainsi que le transfert de chaleur par conduction. Les particules de fluide en contact avec un corps chaud deviennent plus légères et montent en cédant leur place à d'autres particules qui ne sont pas encore chaudes ou qui se sont refroidies. Ces dernières à leur tour s'échauffent, montent et ainsi de suite. Ce cycle a comme conséquence une circulation continue et la chaleur est transférée à des secteurs plus frais. Deux types de convection sont généralement distingués, la convection libre, dans laquelle les forces de buoyancé commande le mouvement du liquide, et la convection forcée, où un ventilateur, un agitateur, ou des autres moyens sont employés pour déplacer le fluide.

II.2.3.3 Transfert de chaleur par rayonnement

Le rayonnement est un transfert de chaleur par l'émission des ondes électromagnétiques qui portent l'énergie à partir du corps d'émission. La relation gouvernant les corps chauds s'appelle la loi de Stefan Boltzmann [45] :

$$q = \sigma \varepsilon (T^4 - T_a^4) \quad (8)$$

Où: ε est l'émissivité, $\sigma = 5.6703 \cdot 10^{-8}$ Watt/m²k² est la constante de Stefan Boltzmann et T_a la température d'environnement.

Le rayonnement est la seule forme de transfert de chaleur qui peut se produire en l'absence d'autre forme dans le milieu et car elle est le seul type de transfert de chaleur dans un vide. Le rayonnement thermique est un résultat direct des mouvements de atomes et molécules dans un matériau. Puisque ces atomes et molécules se composent des particules chargées (des protons et des électrons), leurs mouvements ont comme conséquence l'émission du rayonnement électromagnétique, qui porte l'énergie à partir de la surface. Au même temps, la surface est constamment bombardée par rayonnement des environnements, résultant du transfert de l'énergie à la surface. Puisque la quantité de rayonnement émis augmente avec l'augmentation de la température, par conséquent le résultat est un transfert d'énergie net à partir des températures plus élevées à des températures basse.

II.3 Phénomènes mécanique intervenant lors du tirage Czochralski

En cours de tirage, la température du cristal n'est pas uniforme. Egale à la température de fusion à l'interface de solidification, elle est minimum au sommet du cristal, et varie dans un rapport important.

Ce fort gradient thermique, provoque des contractions non uniformes, c'est la source de contraintes thermo élastiques. Il en résulte la création de défauts du réseau cristallin qui doit accommoder ces contraintes : les dislocations. Un gradient thermique trop important peut même provoquer la rupture du cristal.

Au refroidissement, les différences de dilatations disparaissent mais les dislocations subsistent. Ceci explique la présence de contraintes résiduelles dans le cristal à température basse et uniforme après tirage.

Ces contraintes résiduelles posent des problèmes de qualité. Les cristaux tirés sous fort gradient thermique peuvent être très fragiles à la découpe. En outre, et c'est un inconvénient majeur, la formation des dislocations altère les qualités optiques du matériau [46].

Un des objectifs de la modélisation présentée dans ce travail est donc de visualiser ces contraintes thermo élastiques et de mettre en évidence leur corrélation avec la thermique du four.

II.3.1 Rappel sur l'évaluation des contraintes normales et tangentielles

Soit (dV) un élément de volume du domaine Ω et (dS) l'une des surfaces centrée en x .

Dans une base orthonormée $\{\vec{e}_1, \vec{e}_2, \vec{e}_3\}$ les efforts intérieurs à Ω portés sur (dS) s'écrivent (Figure II.4):

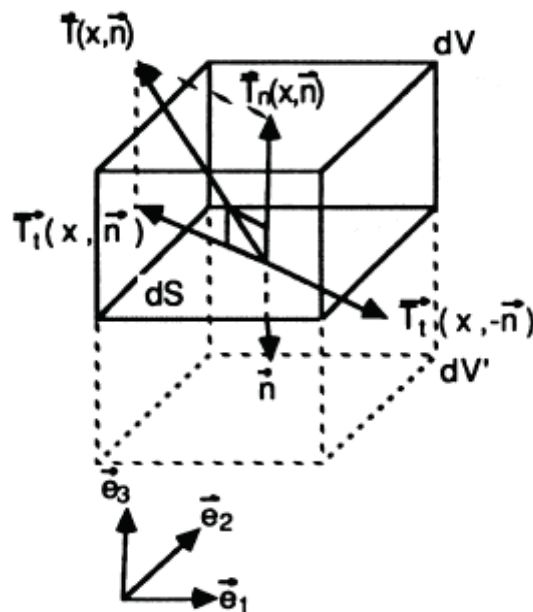


Figure II.4 : Efforts intérieurs un élément de volume

$$\vec{T}(x, \vec{n}) \cdot dS = \sum_{i,j=1}^3 \vec{e}_i \sigma_{ij} n_j dS \quad (9)$$

Où: \vec{n} est la normale unitaire à (dV) de composantes n_1, n_2, n_3 [47].

La contrainte $\vec{T}_n(x, \vec{n})$ est appelée contrainte de compression ou de traction suivant son sens et $\vec{T}_t(x, \vec{n})$ est appelée contrainte de cisaillement.

En effet, la contrainte tangentielle en x porté sur (dV'), symétrique de (dV) par rapport à (dS) est $\vec{T}_t(x, -\vec{n}) = -\vec{T}_t(x, \vec{n})$.

$\vec{T}_t(x, \vec{n})$ et $\vec{T}_t(x, -\vec{n})$ tendent donc à faire glisser (dV) sur (dV') dans des directions opposées.

II.3.2 Formation et évolution des dislocations sous l'action de contraintes

II.3.2.1 Formation des dislocations

Le cristal est un empilement régulier d'atomes. Mais, sous l'action de fortes contraintes, on observe le glissement d'atomes de part et d'autre de plans, dit plans de glissement (Figure II.5). La régularité de la structure cristalline est perturbée : c'est la formation des dislocations [48] et [49].

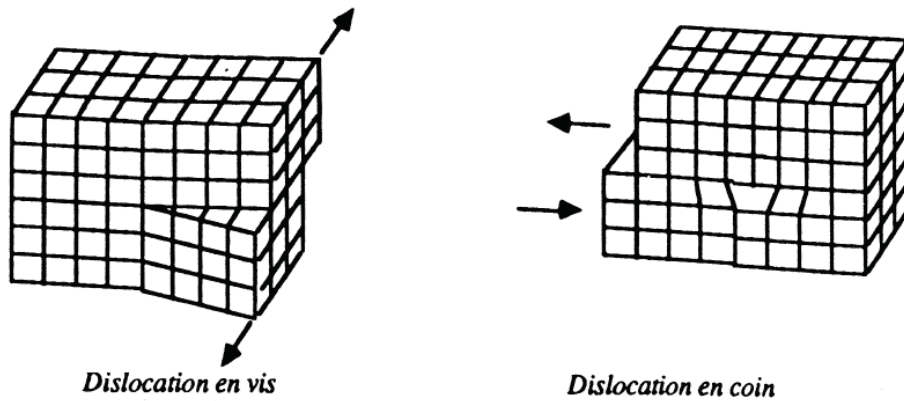


Figure II.5: Dislocation en (vis et coin)

Ce sont donc les efforts de cisaillement plutôt que ceux de traction ou de compression qui produisent les dislocations.

Il est donc utile de calculer le module de cisaillement maximum en chaque point, afin de localiser le risque de formation de dislocation.

D'autre part, dans tout cristal, les glissements ne sont possibles que suivant des plans et des directions déterminées par la structure cristalline. En particulier, les plans

de glissement d'un cristal de silicium sont parallèles à l'une des faces du tétraèdre donné sur la figure II.6.

Les directions de glissement permises sont définies par les arêtes de la face correspondante.

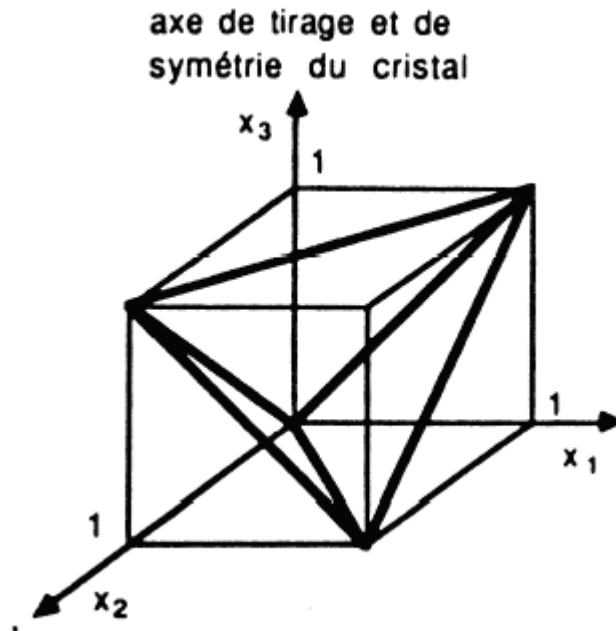


Figure II.6 : Faces du tétraèdre

II.3.2.2 Evolution des dislocations

Les propriétés mécaniques du cristal varient en fonction de la température, il faut en tenir compte pour appréhender le processus de formation des dislocations au cours du tirage. Nous distinguons donc deux situations :

A haute température : c'est aux températures proches de la température de fusion que les forces de cohésion entre les atomes du cristal sont les plus faibles. Sous l'action du cisaillement et des dilatations thermiques les dislocations se créent, puis évoluent et se multiplient suivant deux schémas :

- Une dislocation en engendre d'autres dans le même plan de glissement. C'est le glissement des dislocations;
- Une dislocation en engendre d'autres dans d'autres plans de glissement. C'est la montée des dislocations. Ce phénomène est dû à la combinaison de la dislocation avec un défaut ponctuel, tel qu'une impureté ou l'absence d'un atome dans la structure cristalline. Les dislocations parviennent alors à isoler de petites régions du cristal appelées cellules.

A basse température : le seuil de contraintes pour la création des dislocations est beaucoup plus élevé qu'aux hautes températures. Les dislocations sont générées

principalement par glissement de celles préexistantes. Par contre la montée des dislocations ne se produit plus.

II.3.3 Localisation des dislocations dans un cristal

Il existe différents procédés pour révéler les dislocations. En particulier une simple attaque chimique (KOH) permet de rendre visible les dislocations à la surface d'un échantillon.

La figure II.7 montre une coupe horizontale d'un cristal ou « wafer », ayant subi ce traitement. Ce sont sur de tels wafer que sont implantés les composants électroniques et qu'est étudiée la répartition des dislocations [50].

On observe :

- 1) les bandes de glissements : elles sont réparties de manière ordonnée à la périphérie du disque. Elles sont regroupées suivant huit lobes (on remarquera les symétries dues à la structure cristalline). A l'intérieur d'un quelconques de ces lobes elles ont toutes la même direction.

Cette direction correspond à l'intersection d'un plan de glissement avec la coupe, comme l'illustre la figure II.7.

- 2) les cellules : elles sont réparties au centre et à la périphérie du wafer. On observe une zone intermédiaire peu disloquée.

Signalons d'autre part que la répartition des dislocations est identique quelque soit la hauteur de la coupe dans le cristal, tout du moins dans sa partie cylindrique.

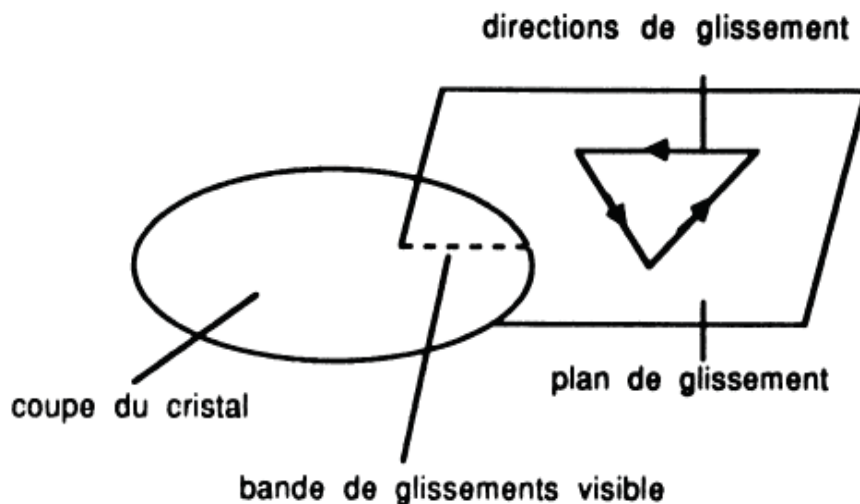


Figure II.7 : Plan de glissement

Chapitre III

Modélisation du système de croissance CZ

Sommaire	32
III.1 Etat de l'art de la Modélisation et de la simulation du processus Czochralski	33
III.1.1 Modélisation de l'écoulement du fluide et transfert de chaleur	33
III.1.2 Modélisation sur la qualité	37
III.1.3 Modélisation des contraintes thermiques et dislocations	38
III.2 Le modèle de transfert de chaleur avec solidification	42
III.2.1 Modèle physique	42
III.2.2 Modèle mathématique	43
III.3 Le modèle mathématique de la thermoélasticité	45
III.4 Le modèle mathématique thermo-élasto-plastique d'Alexander et Haasen	47
III.5 Méthode de résolution numérique des Champs des températures et des contraintes	50
III.6 Résolution du problème à l'aide du logiciel Femlab	51
III. 6.1 Présentation du logiciel Femlab	51
III. 6.2 Méthode de résolution d'un problème sous Femlab	52
III. 6.2.1 La géométrie	52
III. 6.2.2 Définition des propriétés physiques intervenant dans les équations aux dérivées partielles	53
III. 6.2.3 Définition des conditions aux limites	54
III. 6.2.4 Le maillage	54
III. 6.2.5 Résolution numérique	56
III. 6.2.6 Visualisation numérique	56

III.1 Etat de l'art de la Modélisation et de la simulation du processus Czochralski

L'ensemble des travaux théorique de modélisation et de simulation du processus de tirage Czochralski (CZ) ont commencé depuis quelques années, dès 1950. Cependant, ces études n'ont pas eu un important impact industriellement comparé avec les essais expérimentaux. Ceci est resté inchangé jusqu'à 1980. À ce moment-là, les fabricants de puces exigeaient des plaquettes de silicium avec des diamètres suffisamment grands. L'échec était dû à la non linéarité des phénomènes physiques régissant l'état de fonctionnement du tirage par la méthode CZ, tel que le transfert de chaleur par rayonnement, la conduction et la convection, le transfert de masse par rayonnement, le transfert de masse, l'écoulement du fluide, la cinétique de la solidification et la dynamique des surfaces libres.

L'observation expérimentale tout récemment faite par rayon X par Hurlé [51], a indiqué le comportement complexe d'écoulement. Cependant. Beaucoup de variables ne peuvent pas être mesurées ni impliquées dans de vraies expériences de croissance. Par conséquent, des modèles mathématiques qui incorporent des phénomènes physiques importants, sont exigés pour des prévisions précises. Les modèles mathématiques sont limités par la complexité des équations décrivant la physique du processus de Czochralski. Des simplifications sont nécessaires pour obtenir des expressions de forme close et les équations gouvernantes peuvent négliger des interactions importantes. Les modèles précis exigent des moyens informatiques énormes. Récemment, avec les avancements rapides en informatique, il est devenu possible d'effectuer des simulations numériques qui peuvent incorporer les phénomènes physiques compliqués de réels processus. De plus en plus de modèles complets sont donc développés. Par conséquent, notre travail se concentre principalement sur l'effort de simulation de la croissance des cristaux de silicium par la méthode Czochralski.

III.1.1 Modélisation de l'écoulement du fluide et transfert de chaleur

Des simulations numériques du procédé de cristallogène du cristal de Czochralski ont été effectuées par beaucoup de chercheurs. Les simulations diffèrent les unes des autres, il y a celles qui emploient les approximations d'écoulement et qui simulent des écoulements bidimensionnels de cavité, elles emploient un modèle global qui inclut le cristal, le liquide, l'inducteur de chauffage, et d'autres composants du four. Les méthodes de différence finie et d'élément fini ont été employées pour les modèles d'écoulement axisymétriques ou tridimensionnels, bidimensionnels de liquide. D'excellentes discussions sur la modélisation et la simulation sont présentées dans les articles de Chan [52], de Brown [53], de Muller [54], et plus récemment de Hurlé [36] et de Parasad et al [55].

Des études par éléments finis ont été faites par Brown et ces Co-auteurs [56, 57, 58]. Ils ont développé une approche, intégrant le modèle capillaire thermo

hydrodynamique (IHTCM) qui tient compte du calcul de l'interface et des formes du ménisque. Le modèle d'IHTCM est basé sur une analyse conjuguée, y compris 1) le transfert de chaleur par la conduction dans le cristal, 2) le rayonnement gris entre tous les composants dans l'appareillage de procédé CZ et 3) la convection axisymétrique, stationnaire, convection laminaire dans le liquide. Récemment, les modèles par élément fini ont également incorporé un modèle du $k-\varepsilon$ pour expliquer la turbulence dans le liquide [58].

Des travaux utilisant les méthodes de différences finies et de volumes finis, ont tiré bénéfice de l'avancement dans la simulation numérique. Kopetsch [59, 60] était le premier à employer les formes déformables de l'interface solide/liquide et la forme liquide/gaz ambiant dans la simulation du processus CZ. Il a employé une transformation algébrique pour le domaine du cristal et une transformation numérique pour le domaine du liquide.

Kopetsch [60] a calculé différents cas combinés de la flottabilité, de la convection forcé, et des écoulements thermo capillaires, et a comparé les résultats aux solutions obtenues. La déflexion de l'interface cristal/liquide a été démontrée.

Xiao et Derby [61] ont développé un modèle massivement parallèle d'éléments finis pour des calculs numériques. Utilisant ce modèle, ils ont simulé l'écoulement du liquide d'un cristal de YAG dans la configuration CZ. Les interfaces cependant, ont été traitées comme des coordonnées orthogonales planaires et régulières et ont été employées dans leur travail.

C'est remarquablement intéressant que récemment, Koai et Coauteurs [62] ont développé une méthode hybride qui emploie un modèle global de conduction et rayonnement, basée sur le code FEM, ABAQUS. Le modèle de rayonnement thermique, et une solution tridimensionnelle des équations de Navier Stokes basé sur une méthode de volume finie pour le champ d'écoulement du fluide a été utilisé.

Le travail de Zhang [63] est basé sur une méthode de maillage adaptative multi zone, combinée avec des coordonnées curvilignes de volume fini. Cette technique a été employée pour simuler la haute pression du procédé du cristallogène du cristal par Zhang et Parasad [64, 65]. L'influence de la convection de gaz dans le procédé à haute pression du cristallogène du cristal a été bien démontrée par leurs calculs.

Anselmo et al [66], ont étudié le comportement oscillant de l'écoulement du fluide et le transfert de chaleur dans un creuset avec le nombre de Grashof variant de 10^7 à 10^8 . Ils ont constaté que valeur d'oscillation est une fonction du rapport de la hauteur de quantité liquide dans le creuset sur le rayon de celui-ci et de la forme du fond du creuset. Plusieurs travaux ont décrit ce phénomène, par exemple, Brown [53], Muller [54], Dupret et autres [67] et Parasad et al [55].

Wilcox et Fulmer [68] étaient probablement les premiers à suggérer que l'écoulement dans le procédé CZ est turbulent, en entreprenant une expérience avec un nombre de Grashoff faible ($Gr = 10^6$) pour le fluorure de calcium ($Pr. = 1$). Depuis lors, plusieurs investigations faisant référence à la turbulence de l'écoulement du fluide, ont été entreprises par Cockayne et Gates [69], Cockayne et al [70], Kim et al [71], Carruthers et Witt [72], Kim et al [73], Koller [74] et Kakimoto et al [75]. Ces études ont impliqué des expériences physiques entreprises dans des creusets. Par conséquent, l'écoulement du fluide dans de réels processus de croissance de Czochralski, serait plus turbulent que celui observé dans les études mentionnées ci-dessus.

Ristorcelli et Lumley [76] ont identifié plusieurs instabilités du liquide, liées à la flottabilité, à la tension superficielle et aux forces de rotation qui pourraient mener à la turbulence dans une grande quantité de liquide dans le processus Czochralski. Ce sont les instabilités dues à la rotation du disque, les instabilités centrifuges, les instabilités induites par la flottabilité au-dessus d'une surface horizontale, les instabilités induites de tension superficielle, les instabilités dues à la rotation du creuset, les effets de rotation et de flottabilité pour des gradients de température verticale et horizontale.

Kobayashi et al [77] ont effectué des mesures de la température dans le procédé Czochralski de production du silicium (Si) et ont présenté les résultats en termes de solutions analytiques basées sur les modèles standards k- ϵ . Cependant, leur approche, qui est obtenue à partir de l'analyse des écoulements de la couche limite, peut ne pas être appropriée pour les écoulements dans les enceintes. Kinney et Brown [58] ont incorporé le modèle de k- ϵ de faible nombre de Reynolds à leur modèle global, pour étudier l'effet de la laminarisation de l'écoulement près de l'enceinte et ils ont rapporté un certain résultat d'une manière encourageante.

Des simulations numériques tridimensionnelles de la convection normale dans la configuration cylindrique ont été conduites par Neumann [78] et Wanschura *et al* [79]. Ils ont constaté que la configuration d'écoulement convecteur, au delà des points critiques, est liée à la perturbation appliquée à l'état statique initial. Touihri *et al* [80] ont effectué la simulation à trois dimensions de l'écoulement convecteur régulier dans un cylindre de chauffage vertical. Dans leurs simulations on a observé la configuration d'écoulement axisymétrique et non axisymétrique.

Dans des configurations cylindriques, Vrentas et al [81] ont étudié l'écoulement convecteur de stabilités conduit seulement par des effets flottables ou de thermo capillaire. Des nombres critiques de Rayleigh et les nombres de Marangoni sont rapportés pour différents allongements, utilisant un fluide avec le nombre de Prandtl infini.

Wagner et al [82] ont conduit des simulations numériques à trois dimensions de la convection normale dans un cylindre vertical, ouvert avec de divers états de frontière

imposés sur la surface supérieure. Elles ont prouvé que la perturbation axisymétrique peut mener à l'écoulement à trois dimensions non axisymétrique.

Dauby et al [83] ont présenté une analyse de stabilité linéaire de la convection couplée de Bénard-Marangoni dans un cylindre vertical. Ils ont trouvé que les surfaces latérales de conduite sont plus stables que des frontières isolantes.

Il y a beaucoup d'applications de technologie dans lesquelles l'interaction entre le rayonnement avec la convection est significative et change le mécanisme de transfert de chaleur, nous pouvons citer Siegel et Howell [84], et Modest [85]. Dans des systèmes de traitement de matériaux, le fait que le liquide est absorbant, émettant et dispersant dans la gamme de fréquence de rayonnement thermique, le rend important pour comprendre l'interaction entre le transfert de chaleur de convection et le rayonnement thermique [Shu *et al*, 86]. Les changements du champ thermique provoqués par le rayonnement, peuvent changer le champ d'écoulement convectif et en outre, changer la structure cristalline des matériaux produits par la méthode czochralski.

Plusieurs chercheurs ont travaillé sur le problème du rayonnement et de la convection combinés, dans un système Czochralski simplifié (Larson [87], Chang *et al*. [88], Desreyaud et Lauriat [89], Webb et Viskanta [90]). Une revue sur ce problème est donnée par Yang [91].

Tan et Howell [92] ont présenté une étude numérique sur le rayonnement thermique combiné et la convection dans un procédé Czochralski, en supposant que le creuset avait une section carrée. Des simulations ont été effectuées à de divers nombres de Rayleigh. Ils ont constaté que la présence du rayonnement interne change la température et les champs d'écoulement de manière significative.

Shu *et al* [86] ont proposé un modèle numérique pour des phénomènes de transport et de solidification dans des liquides d'oxyde avec et sans la présence d'un champ magnétique appliqué. Le modèle est basé sur la solution par éléments finis des équations de Navier Stokes on introduisant la force de Lorentz. L'équation de transfert radiatif a été résolue par la méthode discontinue des éléments finis. Dans leurs résultats ils ont suggéré que le rayonnement interne ait l'effet significatif sur le comportement de solidification.

Shyy et al. [93] et Prescott et Incropera [94] ont étudié le procédé de solidification des alliages utilisant un modèle amélioré de $k-\varepsilon$ pour la porosité de l'écoulement du fluide. Leurs deux études ont prouvé qu'en présence de la turbulence, la vitesse de transfert de chaleur global est très différente de celle d'un écoulement laminaire. Un modèle de turbulence devrait être utilisé dans la simulation, pour obtenir des résultats précis.

Un autre mécanisme d'entraînement d'écoulement important dans le processus CZ est les rotations du cristal et du creuset. Dans le meilleur des cas, les vitesses les plus élevées de rotation peuvent considérablement améliorer l'homogénéité azimutale. Cependant, il y a des limitations pratiques et théoriques sur la vitesse de rotation. La dépression dans hauteur du creuset due à la rotation est donnée par [95]. Deuxièmement, les vitesses de rotation élevées du cristal amplifieront l'effet de l'excentricité, la création de l'écoulement ondulé rend le système fortement asymétrique et peu convenable pour la croissance de bons cristaux. Pour des écoulements fortement non symétriques dans un cylindre en rotation on peut se référer à Yang et al [96].

Ladeinde et al [97] ont trouvé que l'écoulements asymétriques commencent dans le système industriel CZ quand la vitesse de rotation est 20-30 tr/min. Parasad [55] a constaté expérimentalement, que des rotations du creuset d'environ 5-6 tr/min réduisent au minimum la quantité de l'oxygène incorporée au creuset, et qu'une vitesse de rotation d'environ 10 tr/min est optimale pour une meilleure structure cristalline

III.1.2 Modélisation sur la qualité

Parallèlement au travail expérimental sur le transport de l'oxygène dans la croissance du silicium CZ, Moody [98] était probablement le premier à employer le calcul numériquement du transport de l'oxygène dans la croissance du silicium CZ. Des méthodes numériques ont été également employées pour étudier l'effet du champ magnétique sur le transport de l'oxygène [99, 77]. Les deux études ont assumé un état d'écoulement laminaire stationnaire dans le creuset, correspondant à un creuset de petit diamètre. Les effets du champ magnétique sur les écoulements et le transport de l'oxygène dans le silicium liquide durant le procédé CZ, ont été numériquement simulés par Hirata et Hoshikawa [100], utilisant un modèle tridimensionnel.

Kim et Longlois [101] ont simulé l'écoulement laminaire du transport de l'oxygène pendant la croissance du cristal de silicium de 150 millimètres de diamètre dans le système CZ (le nombre de Grashof est de l'ordre de 2×10^9), avec et sans un champ magnétique. Ils ont prévu le comportement oscillant d'écoulement dans le liquide. La concentration en oxygène prévue, semble être bien conforme aux mesures expérimentales.

Togawa et Al [102] ont également résolu les équations laminaires de Navier Stokes pour le cristallogène du cristal de silicium de 150 millimètres de diamètre. Ils ont modelé la concentration en oxygène moyenne dans le cristal, en faisant la moyenne des données oscillantes sur une certaine période de temps. Les calculs numériques sont conformes qualitativement bien à leurs données expérimentales.

Après s'être rendu compte de l'importance du nombre élevé de Grashof dans les cristaux de grands diamètres dans un système de cristallogène de silicium, plusieurs

chercheurs ont essayé de présenter les modèles turbulents pour traiter l'écoulement complexe du liquide associé avec le transport de l'oxygène.

Kinney et Brown [58] étaient probablement les premiers investigateurs qui ont employé le modèle de turbulence pour calculer le transport de l'oxygène dans la croissance du silicium de grand diamètre. Ils ont également comparé la prédiction laminaire de la distribution de l'oxygène à la prédiction de turbulence. L'écoulement de l'oxygène calculé avec une convection laminaire montre la structure multi cellulaire de l'écoulement, qui est également la configuration d'écoulement typique qui a été rapportée pour des modèles d'écoulement laminaire dans leur simulation laminaire de turbulence.

Le même modèle standard de k- ϵ a été également utilisé par Yi et al [103] pour simuler la croissance des cristaux du silicium czochralski de 150 millimètres et de 250 millimètres de diamètre. Un processus dynamique, dans lequel la longueur en cristal change avec le temps, a été simulé en utilisant la méthode des volumes finis avec l'algorithme SIMPLE [104], et d'après les solutions stationnaires obtenues, une bonne concordance entre la prévision et la concentration en oxygène a été rapportée pour un cristal de 150 millimètres de diamètre. Des simulations numériques ont été effectuées pour le cristal de 250 millimètres de diamètre utilisant des diverses valeurs des vitesses de rotation du cristal et de creuset. Ils ont trouvé qu'avec l'augmentation de la vitesse de rotation du creuset, la concentration en oxygène dans le cristal augmente de manière significative. Un processus d'optimisation a été également présenté pour choisir les meilleurs paramètres de processus.

Récemment, Zhang et Al [105, 106] ont présenté le modèle RNG de k- ϵ pour simuler l'écoulement de fonte dans des cristaux de 300 millimètres de diamètre dans des creusets de 600 millimètres et de 750 millimètres de diamètre. Dans un creuset de grande taille, si la température entre le creuset et le cristal est maintenue à 85 K, la présence des rotations, pour diviser la cellule à courant simple en cellules multiples, s'est avérée plus petites et plus faibles. En conséquence, on a observé une distribution stratifiée de l'oxygène, qui montre un effet mélange de diffusion. Il s'est avéré que le niveau de concentration diminue avec l'augmentation de la vitesse de rotation du cristal et augmente avec l'augmentation de la vitesse de rotation du creuset.

III.1.3 Modélisation des contraintes thermiques et dislocations

Jordan et al [2], [3], [5], [6] sont les premiers à expliquer théoriquement, la formation des contraintes et des dislocations dans le cristal, en proposant que la formation de la dislocation soit causée par la présence des contraintes thermo élastiques dans le cristal. Quand la contrainte thermique dépasse la contrainte critique de cisaillement (σ_{CRSS}). Les dislocations commencent à se former et se multiplient par glissement dans les directions de glissement. Ils ont supposé que lors du tirage, le

cristal est une longue tige cylindrique. Ils ont calculé la distribution de la température de conduction et les composants de la contrainte thermique. La distribution de densité a montré un bon accord qualitatif avec celle observée sur des sections prises de la partie cylindrique des vrais cristaux. Après le travail de Jordan et al, on a observé ces dernières années que des études ont été entreprises par beaucoup d'autres chercheurs, pour le calcul de la distribution des contraintes thermiques dans le cristal.

Dans certaines études, le cristal a été isolé et l'interface a été simplifiée en tant que formes planes [17, 107, 108, 109, 110]. Et l'effet des champs d'écoulement et de température du liquide n'a pas été pris en considération. D'autres améliorations ont été apportées par Motakef et koai [111, 112, 113], Dupret [114, 115] et Bornside [116] etc., en employant des modèles globaux de rayonnement et de conduction qui ont inclus le liquide et le cristal.

Cependant, ces modèles ont négligé la convection dans le liquide, bien que le calcul de la forme d'interface ait été inclus. La sensibilité de la distribution des contraintes thermiques et de l'échange thermique par rayonnement a été bien démontrée dans ces simulations. Récemment, Kinney et al [57, 58] ont étudié la sensibilité de la dynamique d'interface et de la distribution des contraintes via la convection du liquide. Imaishi et al [117] ont simulé la convection et les contraintes thermiques durant la croissance des cristaux simples d'oxyde et du silicium. Tous ces modèles supposent que la croissance du cristal est thermo élastique et ils ont utilisé la méthode des éléments finis pour le calcul des contraintes dans le cristal.

Plus récemment, GAO et al. [118] ont utilisé le logiciel de modélisation thermique de la croissance cristalline CrysVUn, pour l'analyse numérique de la position d'interface de croissance, le transfert de chaleur, l'écoulement d'argon et la convection du liquide. Ils ont prévues la forme d'interface et la distribution des contraintes thermiques pendant la croissance des cristaux de silicium Czochralski (CZ) de 300 millimètres de diamètre avec différentes vitesses de tirage. La comparaison des résultats de mesures et de simulations a donné une bonne concordance.

Bornside et al. [116] ont pu réduire au minimum les contraintes thermo élastiques produites dans le cristal de silicium dans le procédé de Czochralski, grâce à une étude quasi stationnaire, utilisant un modèle décrivant le transfert de chaleur à hautes températures et la solidification. Ils ont obtenu les conditions optimales en utilisant différentes configurations géométriques du bouclier thermique.

Miyazaki et al. [119.120] ont développé un programme élément fini tridimensionnel, pour l'analyse des contraintes thermiques des monocristaux, en considérant l'anisotropie élastique et la dépendance des propriétés du matériau de la température. D'une part, Nakayama et Masaki [121] ont développé un programme informatique pour une analyse transitoire de la conduction de chaleur qui peut simuler

le processus de croissance de CZ d'un monocristal de silicium en prévoyant les éléments finis automatiquement et en considérant le rayonnement thermique entre le monocristal et tout son environnement, c'est-à-dire, liquide, inducteur et bouclier de rayonnement.

Il est difficile d'absorber l'énorme chaleur latente provoquée par la solidification du silicium liquide, quand le diamètre du cristal est plus grand que 300 millimètres. En conséquence, les gradients de température tendent à augmenter et la distribution non homogène des contraintes est créée, Miyazaki et al [4].

L'analyse numérique des contraintes élastiques et de la distribution thermiques d'effort du cristal de silicium de 300 millimètres, sous la considération de différents boucliers thermiques, a été faite par GAO et al [122]. Ils ont démontré que la présence et la forme du bouclier thermique, de la pression de gaz et de la vitesse peuvent fortement affecter la distribution des contraintes de von Mises dans le cristal de silicium. En revanche, l'augmentation de la pression du gaz ne peut pas avoir comme conséquence un effet significatif.

Schvezov et al. [123] ont fait une analyse par simulation numérique, du transfert de chaleur et des contraintes thermiques dans les monocristaux d'InP de 6 cm de diamètre élaboré par le procédé Czochralski. La distribution des contraintes thermiques dans le cristal est calculée en employant le champ obtenu de la température. Ils ont étudié les effets de plusieurs paramètres du processus sur l'écoulement, le transfert de chaleur, la forme croissante de interface et sur la contrainte thermique.

Des techniques numériques et analytiques sont employées, afin de calculer les contraintes thermiques près de l'interface de solide/liquide pendant la croissance d'un cristal par la méthode de Czochralski (Lambropoulos [108]). En supposant le cristal élastique isotrope, Lambropoulos a montré l'effet de la déformation non élastique à hautes températures, en expliquant explicitement la relaxation des contraintes près du centre de l'interface de solide/liquide.

Il est devenu évident que la contrainte thermique pendant la croissance de CZ joue un rôle important dans la génération des dislocations. La relation qualitative entre la densité de dislocation et la contrainte thermique dans un monocristal a été étudiée jusqu'ici en comparant des contraintes de cisaillements obtenus à partir d'une analyse élastique de contrainte thermique à la contrainte de cisaillement critique (Miyazaki-[124]).

Récemment, Muiznieks et al [125] ont développé un modèle bidimensionnel basé sur le code de calcul FEM, ANSYS, pour calculer le champ de la température dans le cristal croissant considérant l'échange de chaleur de rayonnement avec les réflecteurs et l'environnement et les contraintes thermiques induites et ont déterminé la

zone disloquée. Par une étude paramétrique pour différents cas de conditions aux limites thermiques et différentes géométries du cristal, les contraintes thermiques sont calculées. Les auteurs ont fait quelques recommandations sur la façon de réduire les contraintes et éviter la génération de dislocations.

On a trouvé que pendant le procédé de tirage du cristal CZ, que le noyau est en compression et la périphérie du lingot de silicium est en tension (Tsukada [7]). Tanahash [8] a trouvé, par la méthode de simulation, que la contrainte thermique dans le cristal augmente avec l'augmentation de la vitesse de tirage. Après, Takano [9] a remarqué que la contrainte thermique dans un cristal est sensiblement affectée par la forme d'interface dans le cas des cristaux de grand diamètre.

Avec SZABO [126], une solution analytique a été dérivée, pour la description des champs de contrainte apparaissant dans les conditions non homogènes de distribution de la température durant la croissance des monocristaux de Czochralski. Le cristal tiré a été modélisé par une tige élastique d'un rayon constant et de longueur semi infinie, alors que ses propriétés élastiques et thermiques étaient prises indépendamment de la température.

L'évidence expérimentale suggère que le cristal subit une déformation plastique pendant qu'il se développe. Une description alternative de formation de dislocations se fonde donc sur la modélisation microscopique de la dislocation et de la multiplication, et présente la notion de la détente provoquée par les contraintes plastiques dans le cristal. Volkl et Muller [127, 128, 129] ont proposé un calcul en déformation plastique, basé sur le modèle d'Alexandre et Hassen (AH). Les données expérimentales et les calculs numériques menés par Volkl et Muller [127] ont prouvé que la dynamique de dislocation prévue par le modèle AH est appropriée pour la croissance de Czochralski.

Maroudas et Brown [130] ont prévu la dynamique du silicium utilisant le modèle AH. En même temps, Motakef [131] a prétendu que le σ_{CRSS} basé sur les calculs thermo élastiques, aussi bien que des approches quantitatives réduit la densité par cette formulation, sont compatible au modèle d'Alexandre et Hassen. Évidemment, il est nécessaire de faire plus de travail expérimental pour pouvoir valider les prévisions. Noter qu'une méthode précise, qui corrèle le niveau de la contrainte thermique avec la formation des défauts dans le cristal n'est pas encore disponible. En outre, l'approche Jordan et le modèle AH n'expliquent pas le mécanisme de génération des dislocations. Le modèle AH exige des simulations complexes et de vastes ressources informatiques, tandis que le modèle plus tôt de σ_{CRSS} emploie seulement des formulations élastiques linéaires.

L'apport essentiel dans le travail que nous présentons dans cette thèse, porte sur l'étude de l'effet de différents paramètres dans un système de croissance Czochralski, sur la forme de l'interface solide/liquide et la simulation de la répartition de la

température et contraintes thermiques dans les cristaux de silicium de large diamètre (300 mm). Pour cela un modèle bidimensionnel de l'écoulement du fluide et de transfert de chaleur avec solidification a été développé. Les équations de Navier-Stokes et d'énergie dans le liquide et l'équation de conduction de chaleur dans le cristal sont résolues par la méthode des volumes finis. La contrainte thermo élastique est calculée à partir du champ de température par l'adoption du modèle déformation plane dans une géométrie axisymétrique pour un cristal cylindrique. Le calcul est fait à l'aide du logiciel Femlab.

III. 2 Le modèle de transfert de chaleur avec solidification

III.2.1 Modèle physique

Le procédé de tirage du silicium par la méthode de czochralski (CZ) est schématisé dans la figure III.1 (a). Le domaine numérique considéré dans la présente étude est montré dans la figure III.1 (b). Le processus est stationnaire et axisymétrique. L'écoulement du fluide est laminaire et incompressible. On suppose que des propriétés thermo physiques du liquide sont constantes. Le fond du creuset est thermiquement isolé. La solidification est considérée à l'interface solide/liquide et la forme du front de cristallisation coïncide avec la température de solidification T_m . On assume que le liquide et le cristal échangent seulement le rayonnement avec l'environnement ambiant (le gaz) à une température constante T_a . Les paramètres de la géométrie et du système de croissance (CZ) sont énumérés dans tableau III.1.

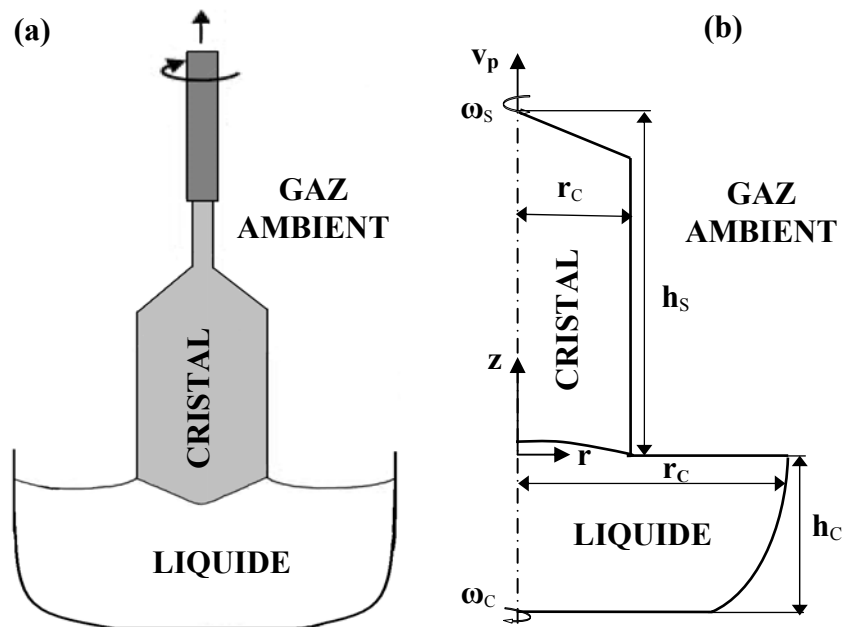


Figure III. 1: (a) Schématisation du processus de Czochralski, (b) domaine numérique

III.2.2 Modèle mathématique

Les équations gouvernant le domaine du liquide sont discrétisées par les équations de Navier Stokes, couplées avec les équations d'énergie avec solidification. Les équations partielles différentielles gouvernant l'état stationnaire, incompressible, et axisymétrique de l'écoulement du fluide sont données dans des coordonnées cylindriques comme suit :

- **L'équation de continuité :**

$$\frac{\partial}{\partial z}(\rho u) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r}(\rho r v) = 0 \quad (1)$$

- **Les équations de la quantité de mouvement :**

Suivant -U:

$$\frac{\partial}{\partial z}(\rho u u) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r}(\rho r v u) = \frac{\partial}{\partial z} \left(\mu \frac{\partial u}{\partial z} \right) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \mu \frac{\partial u}{\partial r} \right) - \rho g \beta \nabla T - \frac{\partial p}{\partial z} \quad (2)$$

Suivant-V:

$$\frac{\partial}{\partial z}(\rho u v) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r}(\rho r v v) = \frac{\partial}{\partial z} \left(\mu \frac{\partial v}{\partial z} \right) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \mu \frac{\partial v}{\partial r} \right) - \frac{\partial p}{\partial r} - \frac{\mu v}{r^2} + \frac{\rho v w^2}{r} \quad (3)$$

Suivant-W:

$$\frac{\partial}{\partial z}(\rho u w) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r}(\rho r v w) = \frac{\partial}{\partial z} \left(\mu \frac{\partial w}{\partial z} \right) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \mu \frac{\partial w}{\partial r} \right) - \frac{\mu w}{r^2} + \frac{\rho v w^2}{r} \quad (4)$$

- **Equation d'énergie**

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial z}(\rho u h) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r}(\rho r v h) &= \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{k}{C_p} \frac{\partial h}{\partial z} \right) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{k}{C_p} \frac{\partial h}{\partial r} \right) - \frac{\partial}{\partial z}(\rho u \Delta H_f) \\ &- \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r}(\rho r v \Delta H_f) \end{aligned} \quad (5)$$

Où: u , v et W sont, les composants axiaux, radiaux et azimutaux de la vitesse d'écoulement du fluide respectivement, g l'accélération due à la gravité, β est le coefficient de dilatation thermique, h représente l'enthalpie, et les deux dernières termes représentent la source convectrice de solidification.

Tableau III. 1: Paramètres de la géométrie et du système de croissance (CZ) utilisés dans la simulation

Rayon du Creuset, r_c	200 mm
Rayon du Cristal, r_s	150 mm
Hauteur du Creuset, h_c	200 mm
Hauteur du Cristal, h_s	150, 300, 450, 600 mm
Vitesse angulaire de rotation du cristal, ω_s	1, 5, 10, 15 tr/min
Vitesse angulaire de rotation du creuset, ω_c	1, 5, 10, 15 tr/min
Vitesse de Tirage, v_p	20 mm/h
Température des bords du Creuset, T_c	1850 K
Temperature Ambiante, T_a	700 K

- **Conditions aux limites**

Pour les conditions aux limites thermiques, une température constante sur les bords du creuset et un transfert de chaleur convective radiatif entre le gaz et le liquide d'une part et entre les bords du cristal et le gaz d'autre part ont été utilisées. Les conditions aux limites correspondant aux différentes surfaces données dans la Figure III.1, pour le problème du champ de température et d'écoulement sont :

Sur la périphérie et l'extrémité du cristal:

$$u = v_p, v = 0, w = r.\omega_s, -k_s \frac{\partial T}{\partial r} = h(T - T_c) + \varepsilon_s \sigma (T^4 - T_a^4) \quad (6)$$

A l'interface gaz/liquide :

$$u = 0, \frac{\partial v}{\partial z} = 0, \frac{\partial w}{\partial z} = 0, -k_m \frac{\partial T}{\partial r} = h(T - T_c) + \varepsilon_m \sigma (T^4 - T_a^4) \quad (7)$$

Aux bords et au bas du creuset :

$$u = 0, v = 0, w = r.\omega_c, T = T_c \quad (8)$$

Sur l'axe de symétrie:

$$\frac{\partial u}{\partial r} = 0, v = 0, w = 0, \frac{\partial T}{\partial r} = 0 \quad (9)$$

Où: k est la conductivité thermique, h est le coefficient d'échange thermique, ε est l'émissivité du matériau, σ est la constante de Stefan-Boltzman, T_a est la température ambiante du gaz ; ω_s et ω_c sont les vitesses angulaires de rotation du cristal et du creuset respectivement.

III.3 Modèle mathématique de la thermoélasticité

Dans le procédé de tirage par la méthode czochralski, le lingot de silicium est soumis à des gradients de température axiaux et radiaux, qui se manifestent par une hétérogénéité des volumes élémentaires dans le silicium. Cette hétérogénéité peut être à l'origine des contraintes thermiques, Boly [132].

La formulation d'élasticité, bien que facilement disponible en manuels [133], est présentée ici en totalité. On assume que les matériaux sont isotropes et homogènes en ce qui concerne leurs propriétés mécaniques et thermiques, et la température T utilisée ici représente l'incrément de la température de l'état initial de contraintes quand $T = 0$. Dans la théorie linéaire d'élasticité, le tenseur de déformation ε_{ij} est lié au vecteur de déplacement u_i par les relations suivantes:

$$\varepsilon_{ij} \equiv \frac{1}{2}(u_{i,j} + u_{j,i}) \quad (10)$$

On assume que la déformation totale dans le cristal est une combinaison linéaire des déformations élastiques et thermiques, écrite comme suit :

$$\varepsilon_{ij} = \varepsilon_{ij}^0 + \varepsilon'_{ij} \quad (11)$$

Où: ε_{ij}^0 représente la déformation élémentaire du parallélépipède due à l'incrément de la température à $T = 0$.

$$\varepsilon_{ij}^0 = \beta.T.\delta_{ij} \quad (12)$$

Où: β est le coefficient de dilatation thermique et le symbole δ_{ij} est le delta de Kronecker.

La relation ci-dessus représente la propriété d'un corps isotrope dans lequel une variation de température n'a comme conséquence aucun changement des angles de cisaillements.

Le tenseur de déformation ε'_{ij} est exprimé comme suit :

$$\varepsilon'_{ij} = \frac{1}{2G} \left\{ \sigma_{ij} - \frac{\nu}{1+\nu} tr(\sigma_{ij}) \delta_{ij} \right\} \quad (13)$$

Où: G est le module de cisaillement, ν est le coefficient de Poisson et $tr(\sigma_{ij}) = \sigma_{kk}$ est la trace du tenseur de contraintes, σ_{kk} . Les équations (11)- (13) se réduisent à :

$$\frac{\sigma_{ij}}{2G} = \varepsilon_{ij} + \frac{\nu}{1-\nu} \text{tr}(\varepsilon_{ij}) \delta_{ij} - \frac{1+\nu}{1-2\nu} \beta T \delta_{ij} \quad (14)$$

L'équation d'équilibre s'écrit :

$$\sigma_{ij,j} + F_i - \rho \ddot{u}_i = 0 \quad (15)$$

Où: le F_i est la force de volume, ρ est la densité et \ddot{u}_i est l'accélération dans la direction x_i .

Substituant les expressions de déplacement dans l'équation ci-dessus et admettant des conditions quasi statiques, les équations pour le vecteur de déplacement sont obtenues comme [134]:

$$G u_{i,kk} + (\lambda + G) u_{k,ki} + F_i - \gamma T_i = 0 \quad (16)$$

Où: λ est la constante de lamé, E est le module de Young.

$$\text{Avec: } \lambda = \frac{\nu E}{(1+\nu)(1-2\nu)} \quad (17)$$

$$G = \frac{G(3\lambda + 2G)}{(\lambda + G)} \quad (18)$$

$$\nu = \frac{\lambda}{2(\lambda + G)} \quad (19)$$

$$2G = \frac{E}{(1+\nu)} \quad (20)$$

$$\gamma = (3\lambda + 2G)\beta \quad (21)$$

Compte tenu de la symétrie de la géométrie et du chargement ainsi que de l'effet négligeable de la pesanteur, les équations (14) se réduisent à [57] :

$$\frac{\partial^2 u}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial u}{\partial r} - \frac{u}{r^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial z^2} + \frac{1}{1-2\nu} \frac{\partial e}{\partial r} = \frac{2(1+\nu)}{1-2\nu} \beta \frac{\partial T}{\partial r} \quad (22)$$

$$\frac{\partial^2 \omega}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial \omega}{\partial r} + \frac{\partial^2 \omega}{\partial z^2} + \frac{1}{1-2\nu} \frac{\partial e}{\partial z} = \frac{2(1+\nu)}{1-2\nu} \beta \frac{\partial T}{\partial z} \quad (23)$$

Où:
$$e = \frac{\partial u}{\partial r} + \frac{u}{r} + \frac{\partial \omega}{\partial z} \quad (24)$$

Les contraintes thermiques sont calculées d'après la loi de Hooke pour un matériau isotrope de la manière suivante :

$$\sigma_{rr} = \frac{E}{1+\nu} \left[\frac{\partial u}{\partial r} + \frac{\nu}{1-2\nu} e - \frac{1+\nu}{1-2\nu} \alpha T \right] \quad (25)$$

$$\sigma_{\theta\theta} = \frac{E}{1+\nu} \left[\frac{u}{r} + \frac{\nu}{1-2\nu} e - \frac{1+\nu}{1-2\nu} \alpha T \right] \quad (26)$$

$$\sigma_{zz} = \frac{E}{1+\nu} \left[\frac{\partial \omega}{\partial z} + \frac{\nu}{1-2\nu} e - \frac{1+\nu}{1-2\nu} \alpha T \right] \quad (27)$$

$$\tau_{rz} = \frac{E}{2(1+\nu)} \left[\frac{\partial \omega}{\partial r} + \frac{\partial u}{\partial z} \right] \quad (28)$$

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

$$\sigma_{VM} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[(\sigma_{rr} - \sigma_{\theta\theta})^2 + (\sigma_{\theta\theta} - \sigma_{zz})^2 + (\sigma_{zz} - \sigma_{rr})^2 \right]^{1/2} \quad (29)$$

III.4 Modèle mathématique thermo-elasto-plastique d'Alexander et Haasen

Le modèle d'Alexander et Haasen [11] se propose de décrire le comportement plastique. Pour cela, on utilise un certain nombre d'équations décrivant l'évolution des quantités macroscopiques de déformation (densité de dislocation, vitesse moyenne des dislocations, contrainte effective). Ce modèle se réfère à un comportement collectif global des dislocations. La relation d'Orowan exprimant la vitesse de déformation plastique et résultant du flux de dislocation est:

$$\frac{\partial \varepsilon^{pl}}{\partial t} = b.V.N \quad (30)$$

Où: N est le nombre de dislocations par unité de surface, b est le vecteur de Burger et V exprime la vitesse moyenne des dislocations :

$$V = B \cdot \exp\left(-\frac{Q}{kT}\right) (\sigma_{eff})^m \quad (31)$$

Où: m , B et k sont des constantes empiriques qui dépendent du matériau semi-conducteur, Q est l'énergie de Peierls soit 2.2 Ev, et σ_{eff} représente la contrainte effective de la dislocation et donnée par la relation:

$$\sigma_{eff} = \sigma_M - A\sqrt{N} \quad (32)$$

Avec: σ_M est la contrainte équivalente de Von Mises.

Les dislocations se multiplient pendant qu'elles se déplacent et ayant pour résultat l'évolution de la densité de dislocation. Il est raisonnable de supposer que la vitesse de multiplication est proportionnelle à la densité de dislocation et à la vitesse de leur mouvement. Ainsi l'évolution de la densité de dislocation est donnée par :

$$\frac{dN}{dt} = bVN\sigma_{eff} \quad (33)$$

Alexander et Hassen supposent que la multiplication des dislocations soit proportionnelle à la contrainte effective. Les deux équations (30) et (33), décrivant la vitesse de déformation plastique et la vitesse de densité de dislocation deviennent :

$$\frac{d\varepsilon^{pl}}{dt} = N \cdot \phi \cdot b \cdot B_v \cdot \exp\left(-\frac{Q}{kT}\right) (\sigma_{eff})^m \quad (34)$$

$$\frac{dN}{dt} = N \cdot k_M \cdot B_v \cdot \exp\left(-\frac{Q}{RT}\right) (\sigma_{eff})^{m+1} \quad (35)$$

La déformation totale résulte de plusieurs mécanismes qui sont supposés indépendants et additifs. Parmi eux, la déformation plastique.

La déformation totale s'écrit :

$$\frac{d}{dt}[\varepsilon] = \frac{d}{dt}[\varepsilon^{el}] + \frac{d}{dt}[\varepsilon^{th}] + \frac{d}{dt}[\varepsilon^{pl}] \quad (36)$$

La déformation élastique [ε^{el}] suit la loi de BOLY [132] et s'écrit :

$$\varepsilon_{ij}^{el} = \frac{1}{2G} \left(\sigma_{ij} - \frac{\nu}{1+\nu} \pi \cdot \delta_{ij} \right) \quad (37)$$

Avec : $\pi = \sigma_{kk}$ représente trois fois la pression hydrostatique.

La loi de comportement de la déformation résultant de la dilatation thermique selon Dour [135] est la suivante :

$$\varepsilon_{ij}^{th} = \alpha \cdot \Delta T \cdot \delta_{ij} \quad (38)$$

La déformation plastique contribue seulement au cisaillement. Pour le calcul incrémental, l'équation (19) peut s'écrire :

$$\delta \varepsilon_{ij} = \frac{\delta \sigma_{ij}}{2G} - \frac{\nu}{1+\nu} \cdot \frac{\delta \pi}{2G} \delta_{ij} + \alpha \cdot \delta T \cdot \delta_{ij} \quad (39)$$

$$\delta \varepsilon_{rr} = \frac{\delta \sigma_{rr}}{2G} - \frac{\nu}{1+\nu} \cdot \frac{\delta \pi}{2G} + \alpha \cdot \delta T \quad (39-a)$$

$$\delta \varepsilon_{\theta\theta} = \frac{\delta \sigma_{\theta\theta}}{2G} - \frac{\nu}{1+\nu} \cdot \frac{\delta \pi}{2G} + \alpha \cdot \delta T \quad (39-b)$$

$$\delta \varepsilon_{zz} = \frac{\delta \sigma_{zz}}{2G} - \frac{\nu}{1+\nu} \cdot \frac{\delta \pi}{2G} + \alpha \cdot \delta T \quad (39-c)$$

$$\delta \varepsilon_{rz} = \frac{\delta \sigma_{rz}}{2G} - \frac{\nu}{1+\nu} \cdot \frac{\delta \pi}{2G} + \alpha \cdot \delta T \quad (39-d)$$

Et par addition des équations (39-a et 39-b et 39-c), il vient la dilatation en volume δe :

$$\delta e = \frac{1}{2G} \left[\delta \sigma_{rr} + \delta \sigma_{\theta\theta} + \delta \sigma_{zz} - \frac{3\nu}{1+\nu} \cdot \delta \pi \right] + 3\alpha \cdot \delta T \quad (40)$$

δe doit suivre la loi thermo élastique isotrope et il est indépendant de ε_{pl} .

$\delta \pi$ est tiré de (23) et porté dans les autres équations, se qui donne la loi de comportement exprimé en contraintes :

$$\frac{\delta \varepsilon_{rr}}{G} = 2\delta \varepsilon_{rr} + \frac{2\nu}{1-2\nu} \cdot \delta e - 2\alpha \cdot \frac{1+\nu}{1-2\nu} \cdot \delta T \quad (41-a)$$

$$\frac{\delta \varepsilon_{\theta\theta}}{G} = 2\delta \varepsilon_{\theta\theta} + \frac{2\nu}{1-2\nu} \cdot \delta e - 2\alpha \cdot \frac{1+\nu}{1-2\nu} \cdot \delta T \quad (41-b)$$

$$\frac{\delta \varepsilon_{zz}}{G} = 2\delta \varepsilon_{zz} + \frac{2\nu}{1-2\nu} \cdot \delta e - 2\alpha \cdot \frac{1+\nu}{1-2\nu} \cdot \delta T \quad (41-c)$$

$$\frac{\delta \varepsilon_{rz}}{G} = 2\delta \varepsilon_{rz} - 2\delta \varepsilon^{pl} \quad (41-d)$$

Les expressions thermo élasto-plastiques (41.a) au (41.d) sont portées dans l'équation d'équilibre (15) et exprimant l'équilibre mécanique.

L'équation d'équilibre relative à r s'écrit :

$$\begin{aligned} 2 \frac{\partial}{\partial r} (\delta \varepsilon_{rr}) + \frac{\partial}{\partial z} (\delta \varepsilon_{rz}) + \frac{2}{r} (\varepsilon_{rr} - \varepsilon_{\theta\theta}) + \frac{2\nu}{1-\nu} \cdot \frac{\partial}{\partial r} (\delta e) - 2 \frac{1+\nu}{1-2\nu} \alpha \frac{\partial}{\partial r} (\delta T) \\ - 2 \frac{\partial}{\partial z} (\delta \varepsilon^{pl}) = 0 \end{aligned} \quad (42)$$

De même, pour l'équation d'équilibre relative à z, qui devient :

$$\begin{aligned} 2 \frac{\partial}{\partial r} (\delta \varepsilon_{rz}) + \frac{\partial}{\partial z} (\delta \varepsilon_{zz}) + \frac{2}{r} (\varepsilon_{rz}) + \frac{2\nu}{1-\nu} \cdot \frac{\partial}{\partial z} (\delta e) - 2 \frac{1+\nu}{1-2\nu} \alpha \frac{\partial}{\partial z} (\delta T) \\ - 2 \frac{\partial}{\partial r} (\delta \varepsilon^{pl}) - \frac{2}{r} (\delta \varepsilon^{pl}) = 0 \end{aligned} \quad (43)$$

III.5 Méthode de résolution numérique des champs des températures et des contraintes

Les équations bidimensionnelles de (1) à (5) avec leurs conditions aux limites pour le champ de fluide et de température dans la configuration CZ ont été résolues numériquement, en utilisant la méthode des volumes finis [136]. Afin de coupler le champ de vitesse et de pression dans les équations de quantité de mouvement, l'algorithme (Simple) proposé par Patankar [104] a été adopté. Afin de résoudre le problème du mouvement de l'interface solide/liquide pendant la solidification, une méthode enthalpique de maillage fixe, proposée par VÖller et Bennon [137], [138] a été utilisée dans ce travail. On a assumé une zone de maillage mince, dans laquelle la

chaleur de la solidification latente a été libérée. La chaleur latente associée avec les phénomènes de changement de phase dans le procédé de Czochralski, est incorporée dans l'équation d'équilibre thermique global. Les équations de Navier-Stokes et d'énergie dans le liquide ainsi que l'équation de conduction de chaleur dans le cristal, sont résolues par la méthode de volume fini. En se basant sur le champ de la température calculé, l'isotherme de solidification a été prévue et correspond à la position de l'interface cristal/liquide.

Par cette définition, l'interface cristal/liquide coïncide avec l'isotherme de solidification, par conséquent, la distribution finale de la forme d'interface et de température est obtenue. Les données sur les champs de température et du maillage, sont utilisées pour calculer la contrainte thermique. Le calcul de champs de contraintes se fait uniquement dans la partie solide de la géométrie, donc le calcul commence à partir de l'interface de solidification.

III. 6 Résolution du problème à l'aide du logiciel Femlab

III. 6.1 Présentation du logiciel Femlab

Nous avons utilisé la version 3.2 du logiciel Comsol-Femlab pour cette étude. Il permet de modéliser et simuler des phénomènes physiques descriptibles sous la forme d'équations aux dérivées partielles. Femlab propose des solveurs performants qui peuvent résoudre numériquement des problèmes de très grande taille. Grâce à des modèles prédéfinis, on peut simuler simplement la plupart des phénomènes physiques, et les coupler entre eux. Pour des applications pointues, il est également possible de travailler directement sur les équations et les modifier selon les besoins grâce à l'interface graphique. Femlab utilise une discrétisation par la méthode des éléments finis, avec un maillage automatique de la géométrie en triangles ou tétraèdres. Son langage de programmation est basé sur Matlab (The Mathworks, Inc.) [139].

Les principales caractéristiques intéressantes de Femlab, même si toutes n'ont pas été exploitées lors de cette étude, sont :

- Les solveurs directs ou itératifs dont on peut modifier la plupart des paramètres;
- Des modèles stationnaires linéaires et non-linéaires, ou dépendant du temps;
- Les propriétés physiques peuvent être spécifiées en tant que constantes numériques ou comme fonctions de différents paramètres, tels que le temps, l'espace ou d'autres propriétés;
- La formulation générale des équations aux dérivées partielles pour les systèmes physiques les plus courants.

III. 6.2 Méthode de résolution d'un problème sous Femlab

La résolution d'un problème à l'aide de Femlab suit une succession de calcul, qui se décompose suivant les quatre étapes de la résolution par la méthode des éléments finis :

1. Création de la géométrie;
2. Définition des propriétés physiques intervenant dans les équations aux dérivées partielles;
3. Définition des conditions aux limites;
4. Choix du Maillage;
5. Résolution numérique;
6. Visualisation des résultats.

Ces étapes de calcul s'effectuent indépendamment, ce qui permet une grande souplesse d'utilisation et une diminution du temps de calcul.

III. 6.2.1 La géométrie

S'agissant d'une géométrie 2D axi-symétrique, celle-ci est dessinée sur un plan de coupe passant par l'axe de symétrie de la géométrie qui correspond aux deux domaines liquides dans le creuset et solides dans le cristal. Ce plan de coupe est représenté dans la figure III.2 (mode de visualisation du logiciel Femlab 32.a).

La géométrie complète (creuset et cristal) s'obtient par révolution autour de l'axe de symétrie (figure III.3). La première géométrie initialement étudiée est un cristal de 150 mm de rayon et de 400 mm de hauteur correspondant aux cas étudiés expérimentalement et numériquement par d'autres chercheurs. La longueur du creuset est de 200 mm, le rayon et de 200 mm ce qui correspond à la dimension du domaine du silicium liquide compris entre les bords du creuset et l'isotherme de solidification.

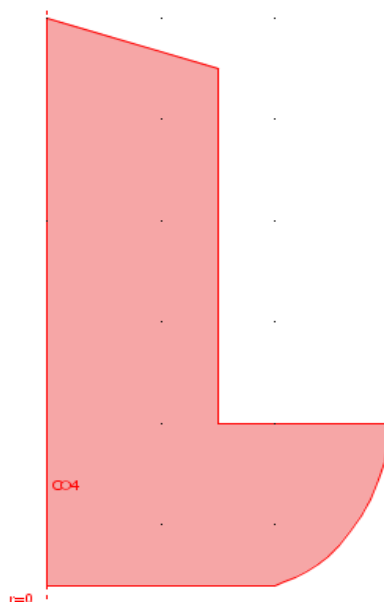


Figure III.2 : Géométrie utilisée pour la simulation

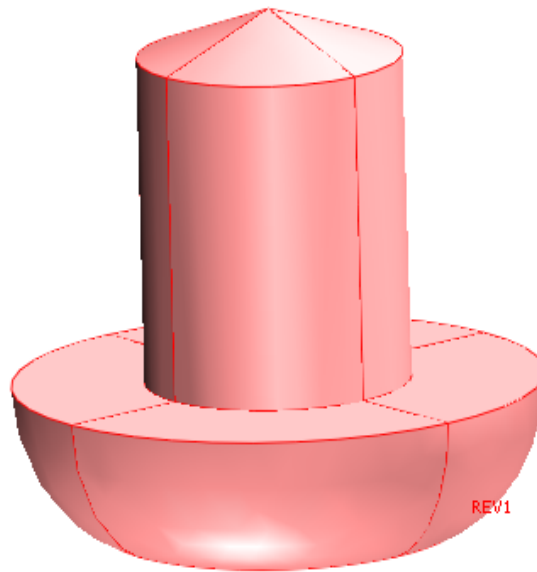


Figure III.3 : Géométrie utilisée pour la simulation (vue en 3D)

III.6.2.2 Définition des propriétés physiques intervenant dans les équations aux dérivées partielles

Pour chaque sous domaine considéré, il faut fixer les valeurs des constantes ou variables qui interviennent dans les équations (par exemple la masse volumique, la viscosité...). Ces variables peuvent être une fonction de l'espace, du temps ou d'autres variables calculées. Femlab n'utilise pas d'unités spécifiques, si bien que pour éviter les erreurs, il vaut mieux travailler dans le système international d'unités. Certains noms de variables sont choisis par défaut. De même, certains modes d'applications nécessitent l'intervention de variables extérieures, qu'il faut renseigner dans les champs adéquats, avec les bonnes variables. Par exemple, l'équation de diffusion convection utilise le champ de vitesse u déterminé par la résolution des équations de Navier-Stokes.

Les propriétés physiques et les conditions de croissance du système CZ, sont données dans le tableau III.2.

Table III. 2: Propriétés physiques et thermiques du silicium

Propriétés	valeur	Unité
Température de solidification, T_m	1686	k
Chaleur latent de fusion, ΔH_f	1110	kJ/kg
Conductivité thermique		
Solide, k_s	$(0.98)-(9.42 \times 10^{-4}) \cdot T$	W/K.m
Liquide, k_m	66.5	
Chaleur spécifique		
Solide, Cp_s	1000	
Liquide, Cp_m	915	
Densité		
Solide, ρ_s	2530	
Liquide, ρ_m	2570	
Emissivité		
Solide, ε_s	$(0.9)-(26 \times 10^{-5}) \cdot T$	
Liquide, ε_m	0.30	
Coefficient d'échange de chaleur, h	7	W/m ² .K
Coefficient de dilatation thermique, β	3.2×10^{-6}	1/k
Coefficient de Poisson, ν		
Module de Young, E	1.31×10^{11}	Pa

III. 6.2.3 Définition des conditions aux limites

On définit les conditions aux limites sur chaque frontière du domaine dessiné. Les conditions aux limites sont prises en charge par Femlab et diffèrent selon le modèle choisi. Pour les équations de Navier-Stokes avec un fluide incompressible, on peut définir la vitesse ou la pression, en entrée ou en sortie, et le non- glissement aux parois. Pour l'équation de diffusion-convection, on peut fixer la concentration ou le flux en entrée et les parois sont isolants.

III. 6.2.4 Le maillage

Femlab propose neuf types de maillages de différentes finesses, de l'extrêmement fin à l'extrêmement grossier. Seulement, il est possible de modifier les paramètres pour l'améliorer. Le maillage peut être affiné, selon la complexité de la géométrie du problème, sur un sous domaine, une frontière ou autour d'un point particulier.

Le maillage utilisé pour discrétiser la géométrie étudiée est de type lagrangien avec remaillage automatique en fonction de la déformation. Les mailles sont de forme triangulaire (voir figure III.4) et les nœuds se déplacent en fonction de la déformation de la matière. Lorsque la déformation de la maille dépasse 100%, un remaillage

automatique de la pièce est réalisé. Ceci a pour but d'améliorer la précision des calculs et d'éviter le chevauchement de certaines mailles, qui peut se produire lorsque la matière s'enroule sur elle-même comme lors de la formation du bourrelet par exemple.

Une boîte de maillage a été créée dans la zone de la géométrie proche de l'interface (sur les trois premiers millimètres à partir de la ligne liquide/solide) afin d'affiner les mailles dans la partie qui subit la majorité des déformations et des phénomènes thermiques importantes.

De plus, le maillage a été affiné sur l'ensemble du contour de la géométrie de façon à pouvoir faire face aux gradients thermiques et notamment ceux qui se produisent au contact cristal/gaz et liquide/gaz (voir figure III.4).

Ainsi, dans la partie éloignée du lingot, qui représente l'extrémité du lingot, les mailles ont une taille moyenne de 1,3 mm le long de l'axe de symétrie de la géométrie. Elles sont de 0,5 à 0,7 mm à l'interface cristal/gaz et liquide/gaz et liquide/creuset. Dans la boîte de maillage, la taille moyenne des mailles est très fine, elle est de 0,15 mm à l'interface, et des mailles grossières de l'ordre de 1.6 mm à l'extrémité libre de la géométrie.

Ces dimensions ont été choisies à partir de tests réalisés avec des tailles de mailles différentes et correspondent au meilleur compromis entre un coût de calcul relativement faible et une bonne précision des résultats.

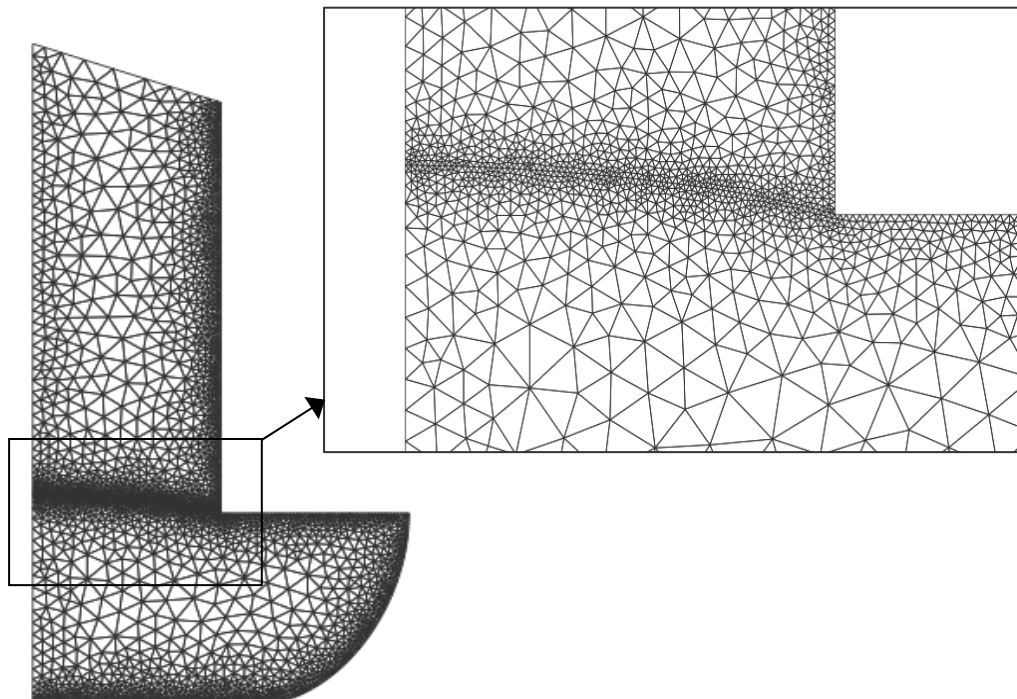


Figure III.4 : Millage affiné aux contours extérieurs de la géométrie et des mailles très fines à l'interface de solidification (solide/liquide)

III. 6.2.5 Résolution numérique

La résolution est d'autant plus longue que le nombre de noeuds du problème est élevé. Sa vitesse dépend également du type de solveurs choisis. Il est possible de fixer une initialisation qui peut être une valeur, ou une solution précédemment enregistrée. On peut choisir la ou les variables que l'on souhaite résoudre, dans le cas d'un problème multi physique que l'on peut découpler. Le jeu de données à créer pour la résolution numérique complète comprend le modèle de comportement, les propriétés physiques, émissivités et conductivité du matériau, et les conditions aux limites imposées sur le maillage. Ces données sont saisies conventionnellement par l'interface de maillage et stockées sur un fichier texte. Ce fichier pourra être ultérieurement modifié par l'éditeur de texte. Il suffit à l'utilisateur d'ordonner au logiciel la résolution en désignant le fichier donné, précédemment créé et le fichier contenant le maillage.

III. 6.2.6 Visualisation des résultats

Après la fin de la procédure de calcul, on obtient en sortie deux fichiers. L'un contenant les températures aux nœuds du maillage qui serviront au calcul des contraintes et l'autre est un fichier post-traitement pour la visualisation des isothermes.

Chapitre IV

Résultats et discussion

Sommaire	57
IV.1 Modèle thermo-élastique	58
IV.1.1 Champ de température et de contrainte de Von Mises	58
IV.1.2 Champ des composantes de contrainte	62
IV.2 Effet des différents paramètres sur la répartition des contraintes	69
IV.2.1 Effet de la longueur du silicium	69
IV.2.2 Effet de vitesse de tirage	73
IV.2.3 Effet de vitesse de rotation du cristal et du creuset	78
IV.2.3.1 Effet de vitesse de rotation du cristal	78
IV.2.3.2 Effet de vitesse de rotation du creuset	79
IV.3 Calcul paramétrique et optimisation du procédé Czochralski	84
IV.4 Modèle thermo-élasto-plastique	86
IV.4.1 Champ de température et de contrainte de Von Mises	86
IV.4.2 Champ des composantes de contrainte	89
IV.4.3 Analyse et comparaison entre les deux modèles de comportement	95

IV.1 Modèle thermo-élastique

Dans un premier cas de notre étude, la distribution du champ de température et la répartition des contraintes thermiques dans des cristaux de silicium de large diamètre (300 mm) dans un système de croissance Czochralski a été étudiée numériquement en utilisant le modèle bidimensionnel de l'écoulement du fluide et de transfert de chaleur avec solidification. La contrainte thermo-élastique est calculée à partir du champ de température dans le lingot de silicium dans l'approximation d'un matériau purement élastique en adoptant le modèle déformation plane, en géométrie axisymétrique d'une billette cylindrique. Le calcul des champs de contraintes se fait uniquement dans la partie solide du lingot, donc le calcul commence à partir de l'interface qui sépare le silicium liquide en bas et le silicium solide en haut.

IV.1.1 Champ de température et de contrainte de Von Mises

La figure IV.1 représente l'évolution des champs de température dans le liquide et le cristal, et la distribution de la contrainte thermo-élastique correspondante dans un cristal de 400 millimètres de hauteur, la vitesse de tirage est constante ($v_p = 35$ mm/h). Dans cette figure, le côté gauche montre les isothermes dans le liquide et le cristal séparées par des pas de 15 K. Le côté droit montre les courbes d'iso-contraintes séparées par des pas de 2 Mpa.

La figure IV. 2 montre le profil de température le long de la bielle (suivant l'axe Z) pour différents rayons r.

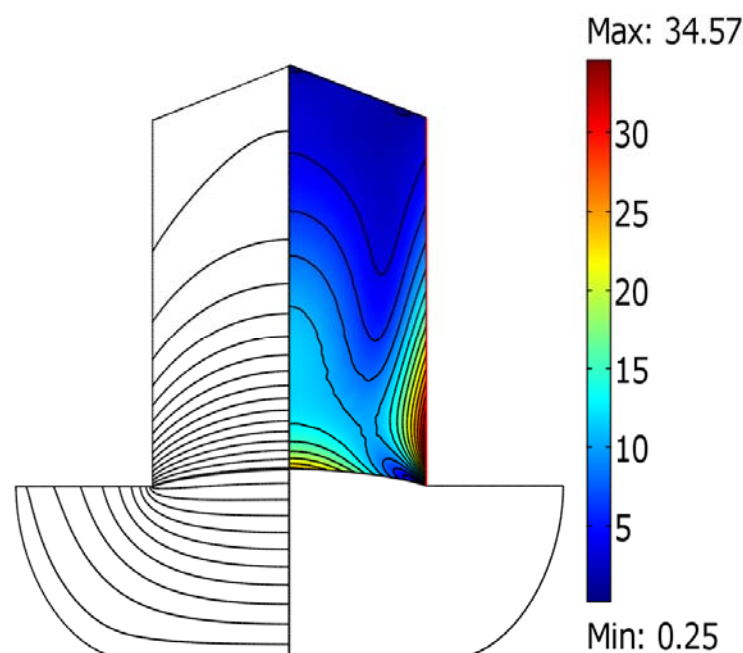


Figure IV.1: Champs de température et de contrainte dans le cristal de silicium

Dans la figure IV.1, nous pouvons observer deux points chauds (les zones de concentrations de contours de contraintes) correspondant à deux valeurs maximales pour la contrainte, une au centre de l'interface et l'autre sur la périphérie du cristal. On constate aussi que la forme de l'interface liquide/solide a un grand effet sur la contrainte thermique, pendant la croissance et la valeur de cette contrainte diminue progressivement du fond du cristal jusqu'à l'extrémité libre, où elle atteint une valeur presque nulle.

La distribution de la température à l'intérieur du cristal fournit un indice pour la possibilité de concentrations de contrainte et de leurs endroits. Dans la figure IV.1, la région correspondant à la contrainte la plus élevée est celle près du bord du cristal (34.6 Mpa) où un grand changement de profil de température se produit (voir figure IV.2). La grande variation de la température dans cette région peut être expliquée par l'exposition soudaine à la radiation. Le résultat actuel, prouve cependant clairement, que c'est le gradient de température longitudinal élevé qui induit directement des points chauds dans le cristal.

Il est maintenant clair que la forme de l'interface liquide/solide a un effet néfaste sur la valeur maximale de la contrainte thermique dans le silicium durant le processus de croissance du silicium [140]. Un effet semblable est obtenu dans notre étude. On peut aussi observer, que la forme de l'interface liquide/solide représentée sur la figure IV.3 prend une forme convexe dans le cristal, ce dernier n'est en réalité qu'une isotherme correspondant à la température de solidification. La déflexion maximale est de l'ordre de 15 mm. Cette variation de la forme de l'interface affecte la valeur de la contrainte thermique le long de l'interface, comme il est indiqué sur la figure IV.3, la valeur maximale de la contrainte localisée dans le centre de l'interface est très grande, elle est de l'ordre de 25.2 MPa.

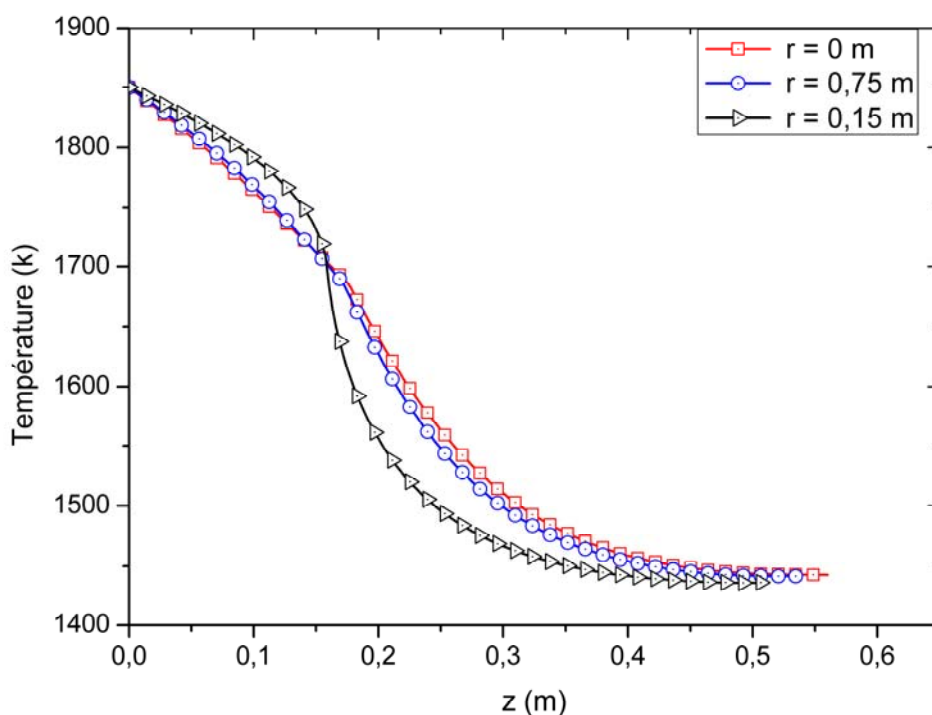


Figure IV.2: Profil longitudinal de température pour plusieurs rayons.

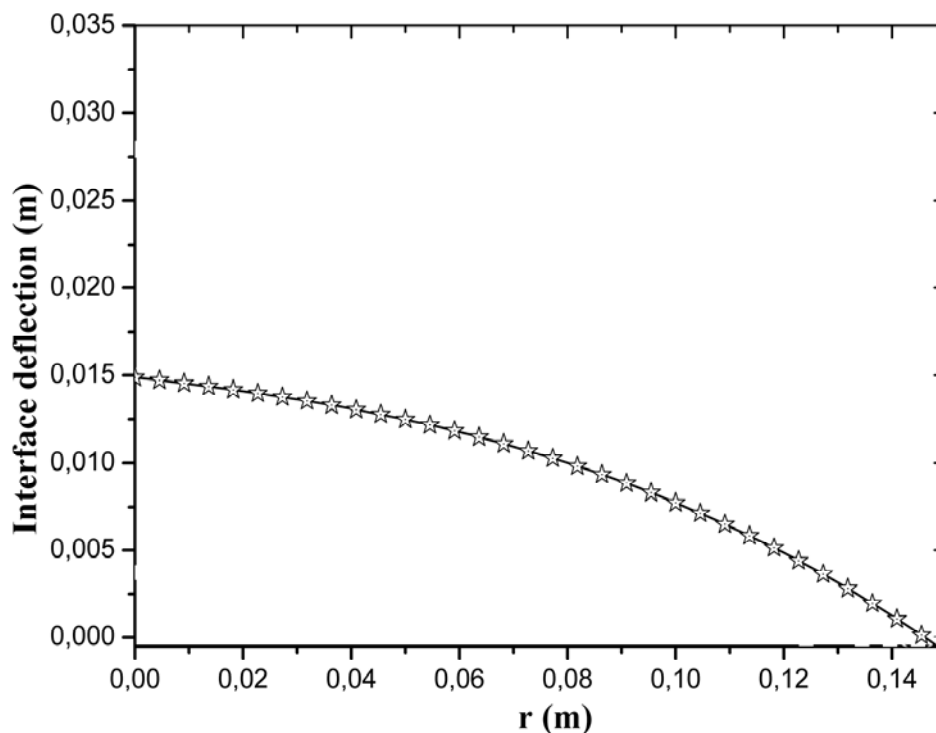


Figure IV.3: Profil de la forme d'interface solide/liquide

La figure IV.4 (a) illustre la variation de la contrainte équivalente de Von Mises suivant le rayon du lingot. Sa valeur est une mesure de l'état globale des contraintes dans le lingot, en remarque l'allure particulière que prennent ces courbes. Ils ont une forme W ce qui confirme les remarques trouvées par Volkl et al [128]. L'ordre de grandeur de la contrainte au front de solidification, représenté par la courbe correspondant à l'interface, varie de 2 à 25 MPa. L'ordre de grandeur de la contrainte le long de la périphérie et qui passe par le deuxième point chaud représenté par la courbe $z = 0.04$ m, varie de 15 à 36.4 MPa. En comparaison avec les autres courbes et de point de vue quantitatif, ces figures confirment que la zone qui est juste en dehors du front liquide/solide et juste au bord du bas de la bielle est soumise à des contraintes importantes par rapport au reste de la bielle, mais ne dépassant néanmoins pas, la résistance à la rupture du silicium (135 MPa). Les mêmes remarques peuvent être faites pour la figure IV.4 (b). Sur cette dernière, la contrainte décroît très rapidement entre le front de solidification et l'endroit où $z = 0.04$ m, puis elle prend une allure progressivement décroissante qui tend vers 0 à l'extrémité libre du lingot.

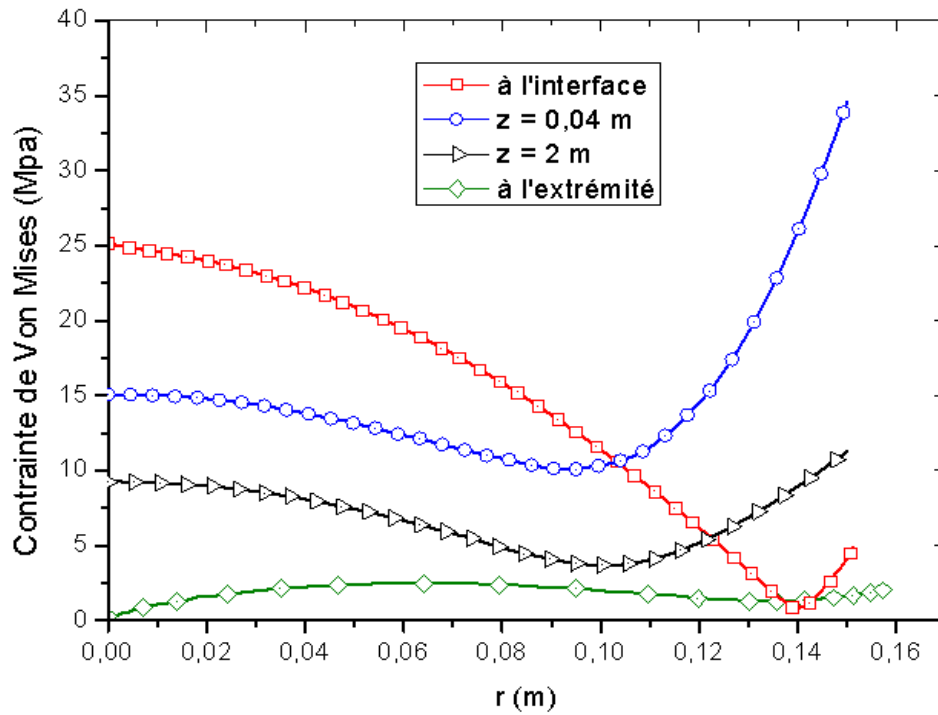


Figure IV.4 (a): Variation suivant r de la contrainte de Von Mises pour 4 positions de z

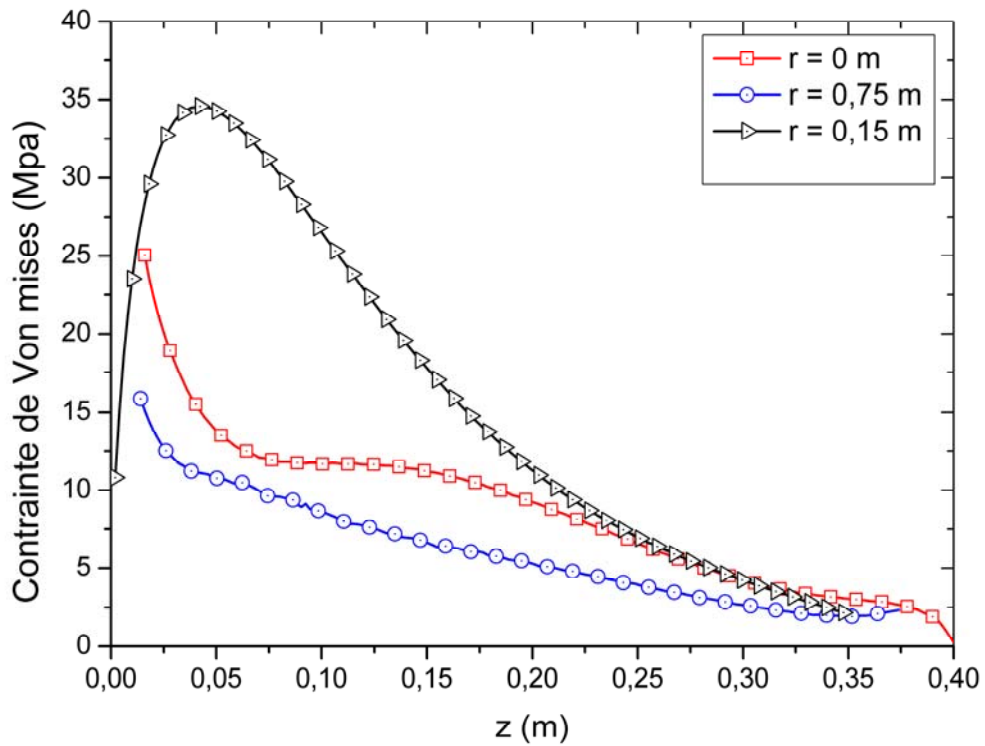


Figure IV.4 (b): Variation suivant z de la contrainte de Von Mises pour 3 positions de r

IV.1.2 Champ des composantes de contrainte

La figure IV.5 représente l'évolution des champs de température dans liquide et le cristal et la distribution des composantes de contraintes correspondantes dans le cristal, respectivement la contrainte radiale (σ_{rr}), de cisaillement (σ_{rz}), axial (σ_{zz}) et la contrainte angulaire ($\sigma_{\theta\theta}$). Dans cette figure, le côté gauche montre les isothermes dans le liquide et le cristal séparées par des pas de 15 K. Le côté droit montre les courbes d'iso-contrainte pour le cristal séparées par des pas de 2 Mpa.

Sur la figure IV.5 (a), on remarque une grande concentration des contours de la contrainte de cisaillement σ_{rz} au voisinage du front de solidification. Ceci traduit l'effet des gradients thermiques intenses, entre le front et la surface du lingot, soumis au flux exercé par le creuset. Un peu plus loin, il y a deux zones où on remarque un resserrement des contours de la contrainte de cisaillement, qui est due au fort gradient de température mais de signe opposés. Ceci signifie que le bas du lingot est en compression et le haut est en tension. L'extrémité du lingot représente la partie la plus froide, où le gradient devient pratiquement nul et en conséquence la contrainte a diminué.

En observant la figure IV.6 (a), qui représente le profil de la contrainte σ_{rz} longitudinalement et transversalement, on peut relever que la contrainte au front de solidification et au voisinage de celui-ci est très grande en comparaison avec celles mesurées aux autres niveaux. Cette dernière est une contrainte de compression, elle atteint en valeur absolue 4.8 MPa, tandis que la contrainte maximale de traction est de l'ordre de 2.3 MPa. Mais du point de vue quantitatif, ces valeurs sont faibles. Ces résultats quantitatifs renforcent les remarques qualitatives de la première figure qui représentent les contours.

Sur la figure IV.5 (b) qui illustre la répartition de la contrainte σ_{zz} le long du lingot, on remarque qu'il y a deux zones, on a un resserrement des contours de la contrainte σ_{zz} , qui sont de signes opposés, le cœur bien au centre du lingot est en tension et la périphérie est en compression.

Les figures IV.7 (a et b) illustrent la variation de la contrainte axiale σ_{zz} à différentes cotes transversales et longitudinales du lingot de silicium. Sur la première figure par exemple, on remarque que toutes les courbes passent presque par un même point d'intersection, très proche de la position ($r = 0.11m$) où la contrainte est quasiment nulle, ensuite elles changent de signe. Les contraintes sont très proches à différents niveaux et un peu faible du point de vue quantitatif, à l'exception de celles qui présentent les contraintes au front de solidification et à l'extrémité du lingot qui sont quasiment nulles. La deuxième figure illustre le fait, que les contraintes maximales sont de compression sur la périphérie (9.7 MPa) tandis que la contrainte de traction va se localiser à l'intérieur, sur l'axe de symétrie (7 MPa).

Sur la figure IV.8, qui illustre la répartition de la contrainte $\sigma_{\theta\theta}$ le long du lingot, on constate qu'il y a deux zones où on remarque un resserrement des contours de la contrainte $\sigma_{\theta\theta}$ et de signes opposés, le cœur du lingot juste en bas du lingot est en compression et la périphérie est en tension.

La variation de la contrainte ($\sigma_{\theta\theta}$) est illustré sur la figure IV.8, où on remarque que la contrainte est très importante est de l'ordre de -25 MPa au front de solidification et de 32 Mpa sur le coté périphérique. Ce comportement est dû à la différence de température entre le cœur et le bord du lingot. On peut dire que le cœur est en compression et le bord est en tension dans le sens de l'angle θ selon la convention de signe. Donc, le silicium solide se dilate en comprimant celui du coeur, qui est encore mou. Tout ça se passe à une température de l'ordre de 1000°C. Dans le reste du lingot, la contrainte angulaire est relativement faible. A son niveau le plus élevé, elle est cinq fois plus petite en valeur absolue que celle au niveau de l'interface liquide-solide, qui est de l'ordre de 5 MPa.

La figure IV.5 (d) illustre la répartition de la contrainte σ_{rr} le long du lingot. On remarque qu'il y a une seule zone de concentration des contours de contrainte σ_{rr} de signe négatif qui témoigne que le cœur du lingot, juste au dessus du front de solidification est en compression par apport au reste de la bielle de silicium.

Les figures IV.9 (a) et (b) représentent la variation de la contrainte radiale (σ_{rr}). On remarque que la contrainte est presque nulle à partir de $z = 1.6$ m, en haut de la bielle. On constate aussi que la contrainte est toujours négative à différents niveaux dans le lingot, ce qui n'est plus clair au front de solidification. L'ordre de grandeur de cette dernière à $r=0$ et en valeur absolue est égal de 25 MPa et pratiquement nulle à $r = 0.15$ m.

Le fait que la contrainte est toujours négative vient de l'état du silicium solide qui est en compression selon la direction r , c'est-à-dire les bords du lingot se refroidissent rapidement en dégageant de la chaleur par convection et rayonnement avec l'air froid ambiant. Le bord de la bielle solidifiée va jouer le rôle d'un mur empêchant le cœur, qui n'a pas encore atteint la même température, de se dilater dans le sens positif selon r . Ce dernier va subir une compression et il en résulte de tout ça des contraintes résiduelles dans le matériau du lingot.

En faisant une comparaison qualitative et quantitative de ces résultats, avec ceux obtenus par Szabo [126] dans le cas d'un matériau parfaitement élastique, on peut montrer que les résultats obtenus sont très proches du point de vue ordre de grandeur et que les contraintes se comportent de la même façon du point de vue qualitatif.

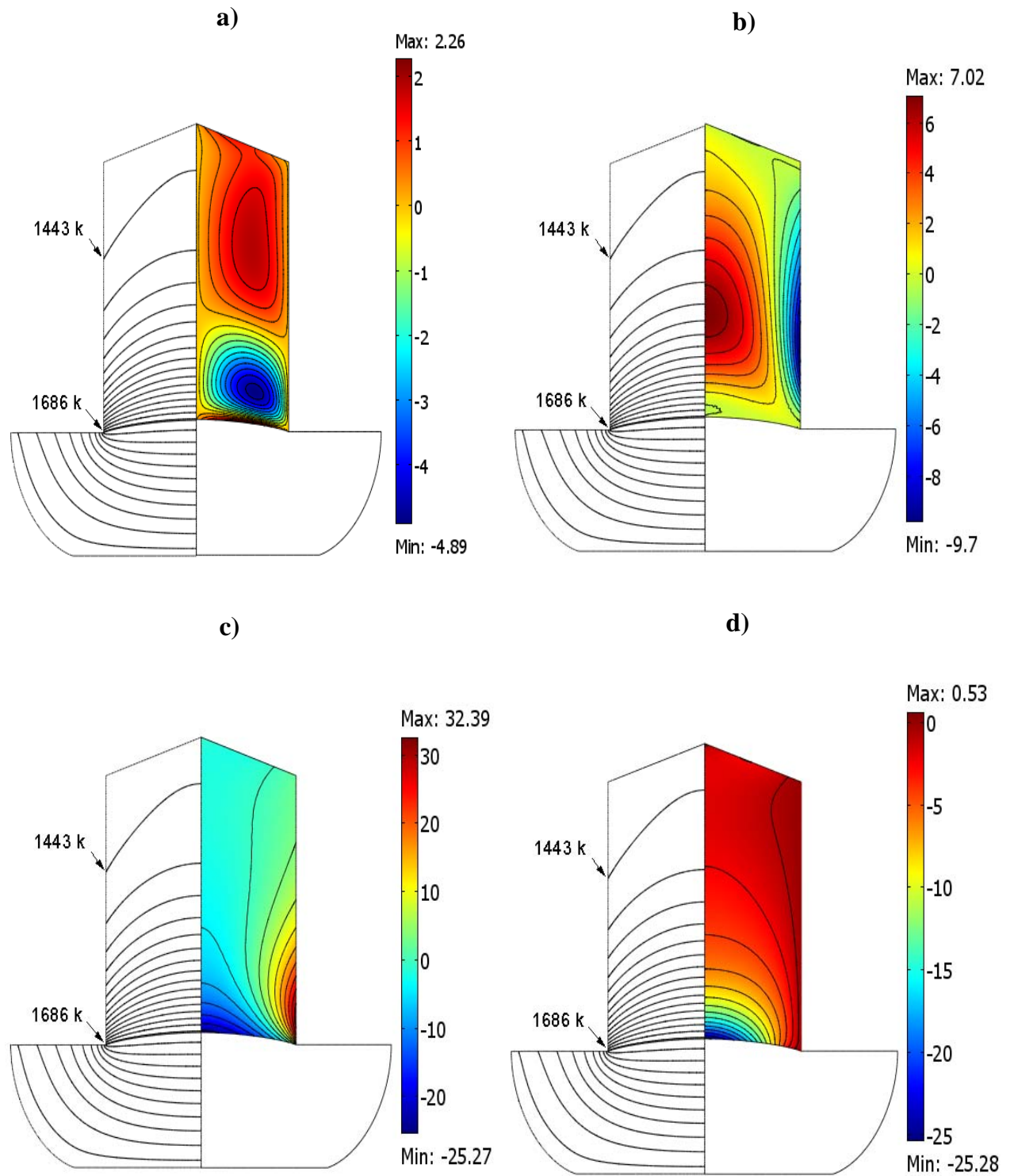


Figure VI.5: Champs de température et les champs des quatre composantes de contrainte dans le cristal de silicium : a) contrainte de cisaillement (σ_{rz}), b) contrainte axiale (σ_{zz}), c) contrainte angulaire ($\sigma_{\theta\theta}$), d) contrainte radiale (σ_{rr})

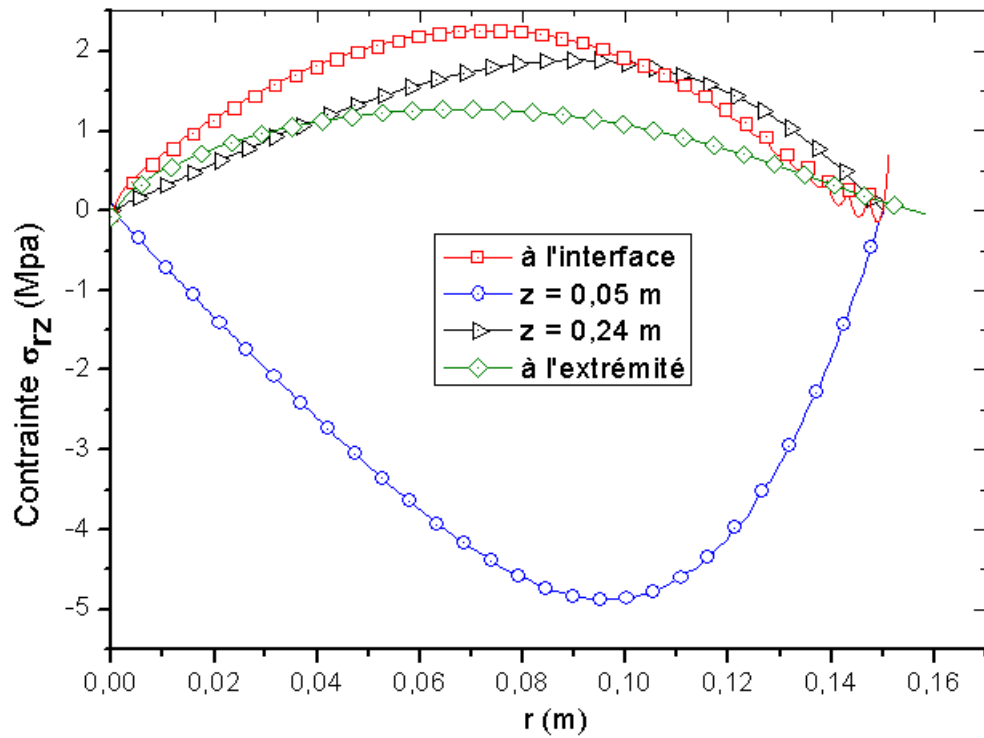


Figure IV.6 (a): Variation suivant r de la contrainte de cisaillement σ_{rz} pour quatre positions de z

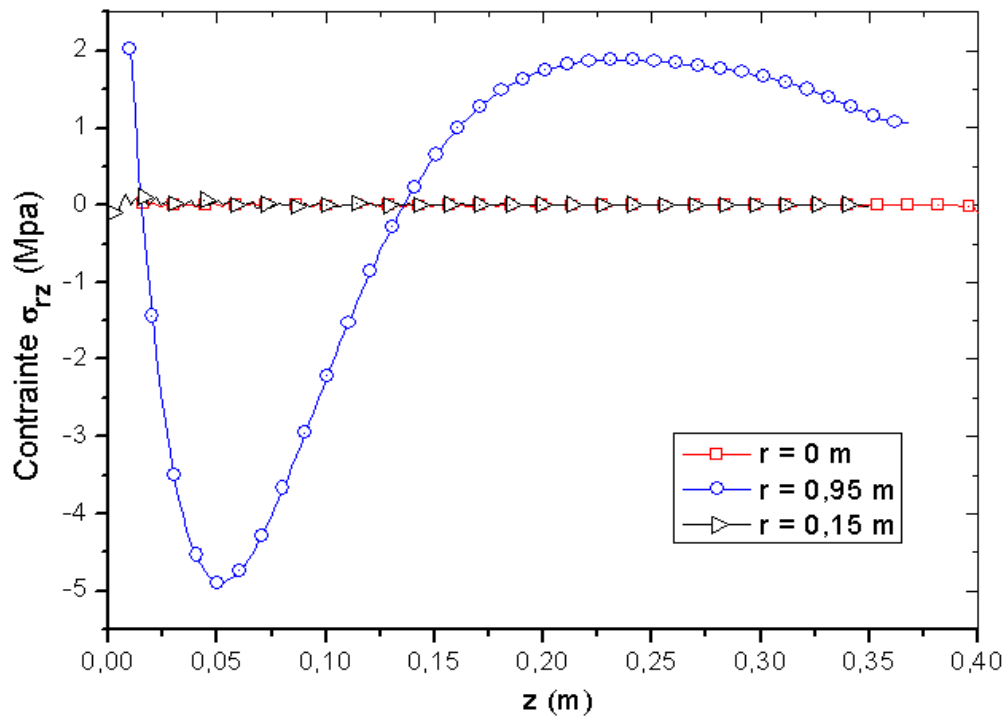


Figure IV.6 (b): Variation suivant z de la contrainte de cisaillement σ_{rz} pour trois positions de r

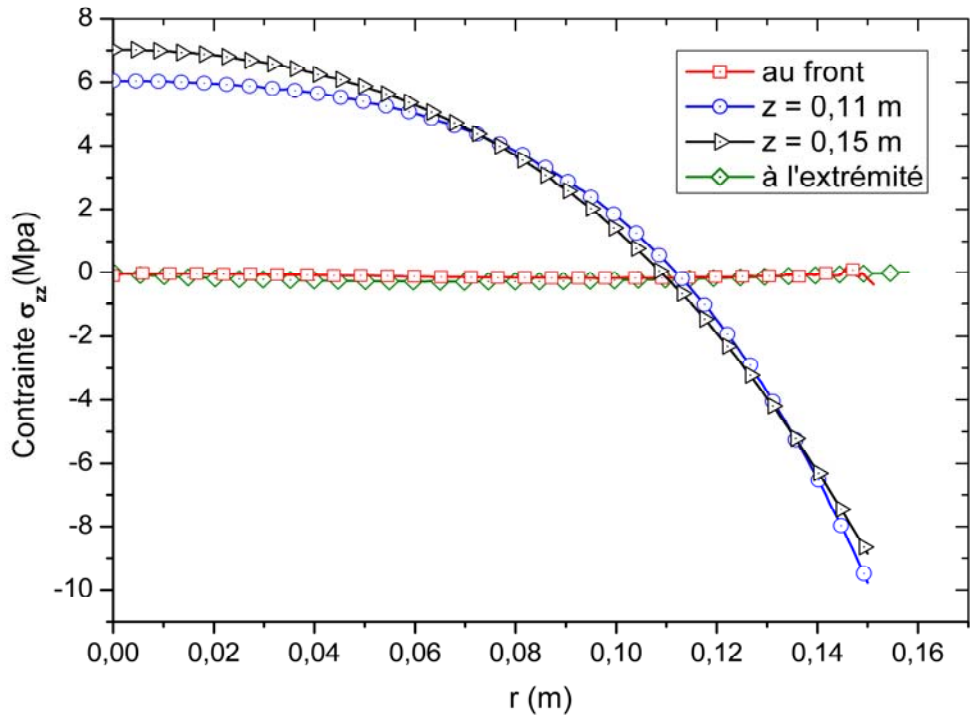


Figure IV.7 (a): Distribution de la contrainte σ_{zz} au sein du lingot de silicium

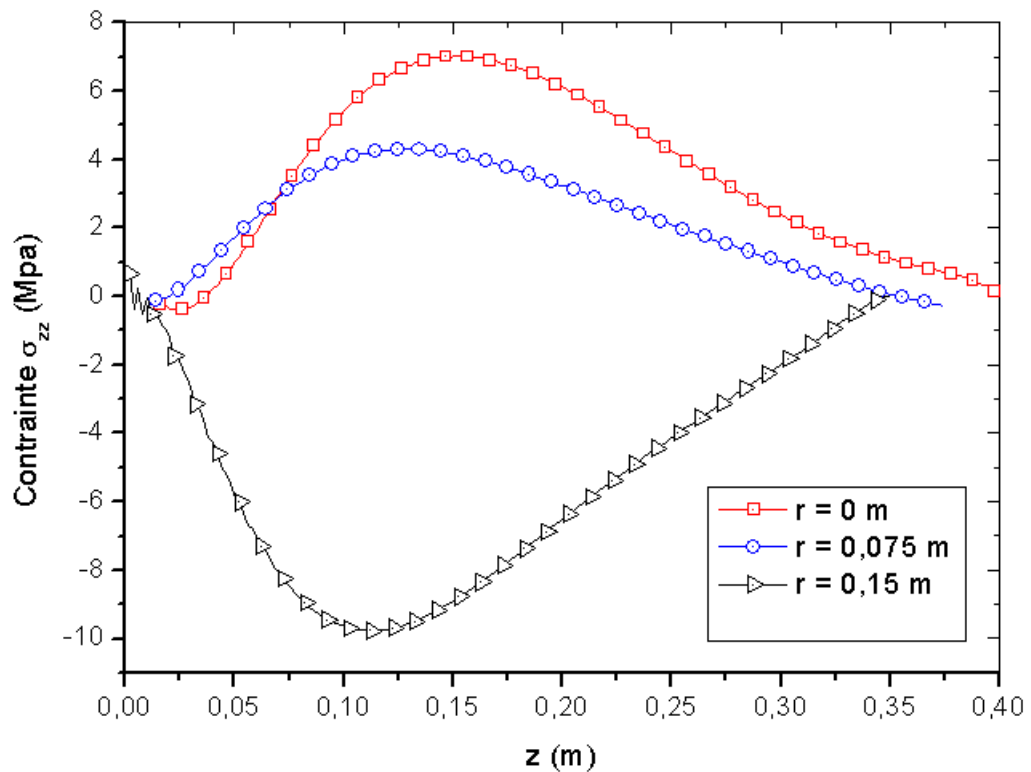


Figure IV.7 (b): Distribution de la contrainte σ_{zz} au sein du lingot de silicium

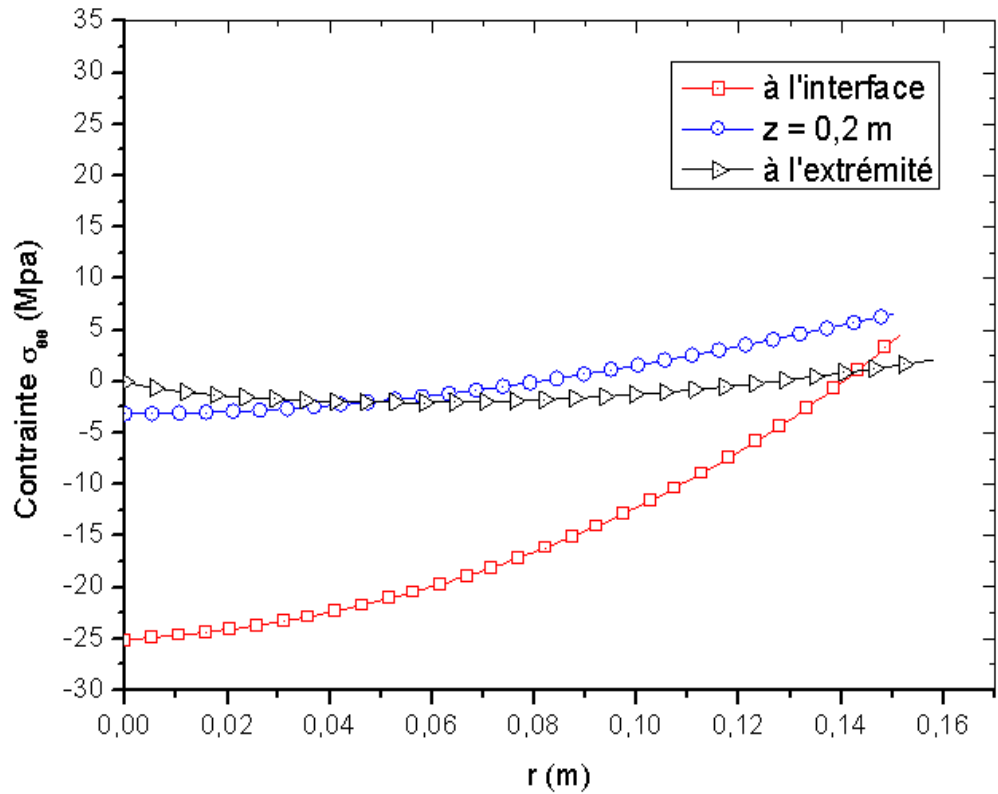


Figure IV.8 (a): Variation de la contrainte ($\sigma_{\theta\theta}$) au sein du lingot de silicium

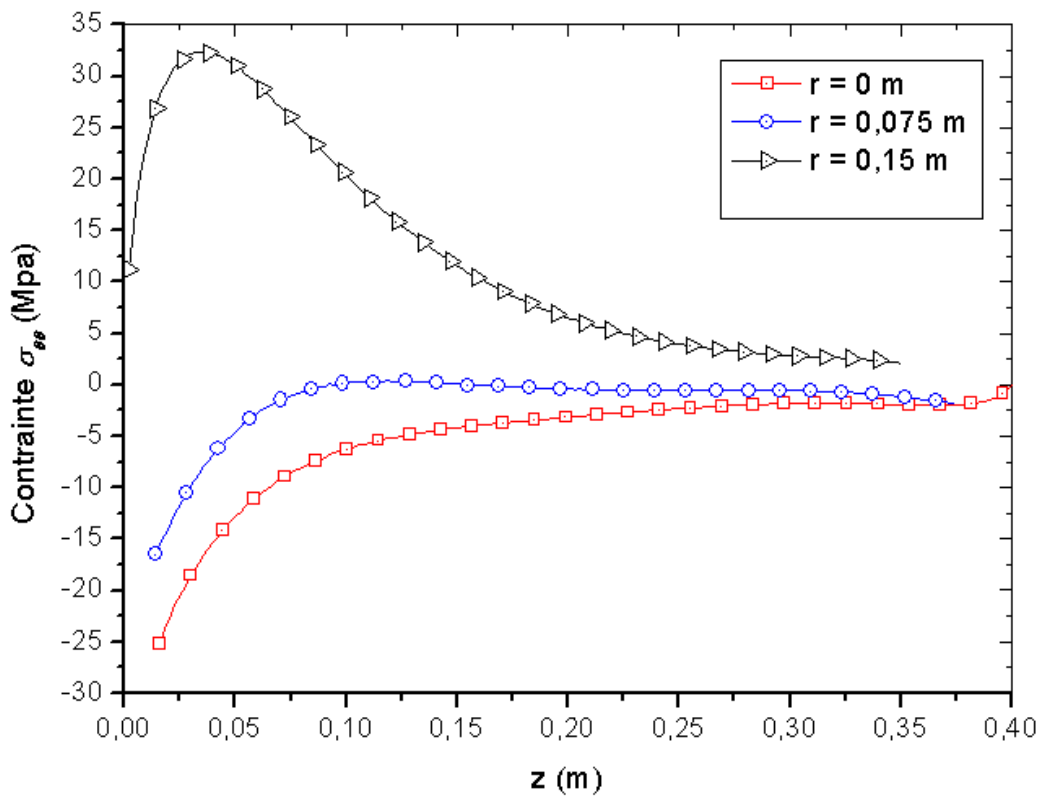


Figure IV.8 (b): Variation de la contrainte ($\sigma_{\theta\theta}$) au sein du lingot de silicium

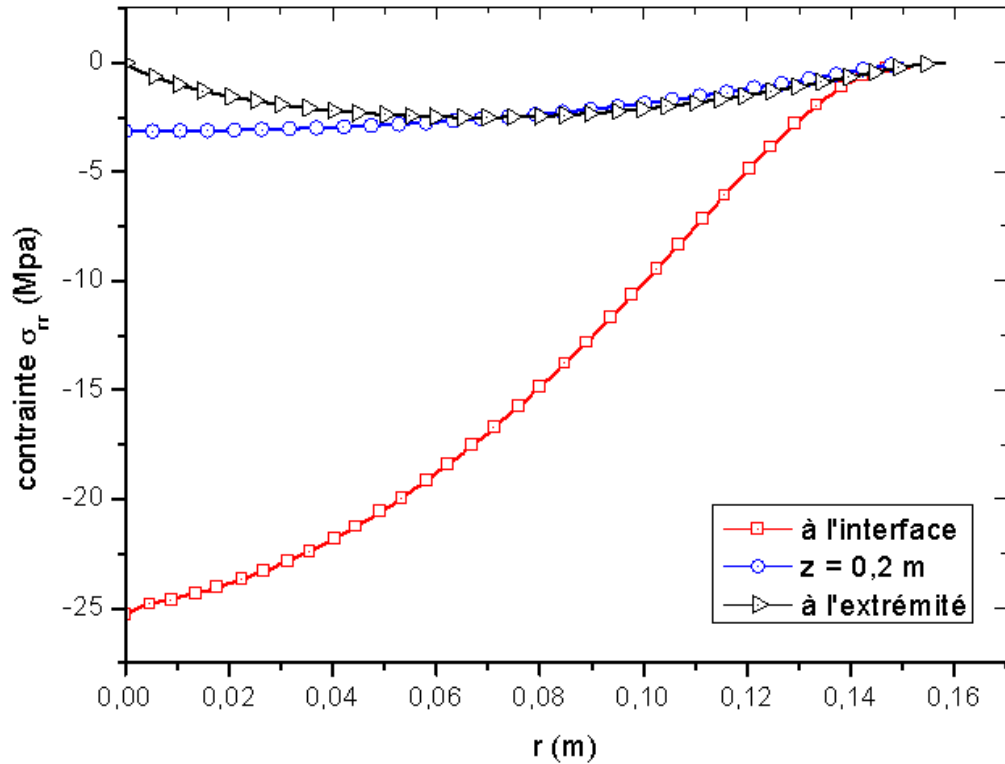


Figure IV. 9 (a): Variation de la contrainte (σ_{rr}) selon r pour différents hauteur

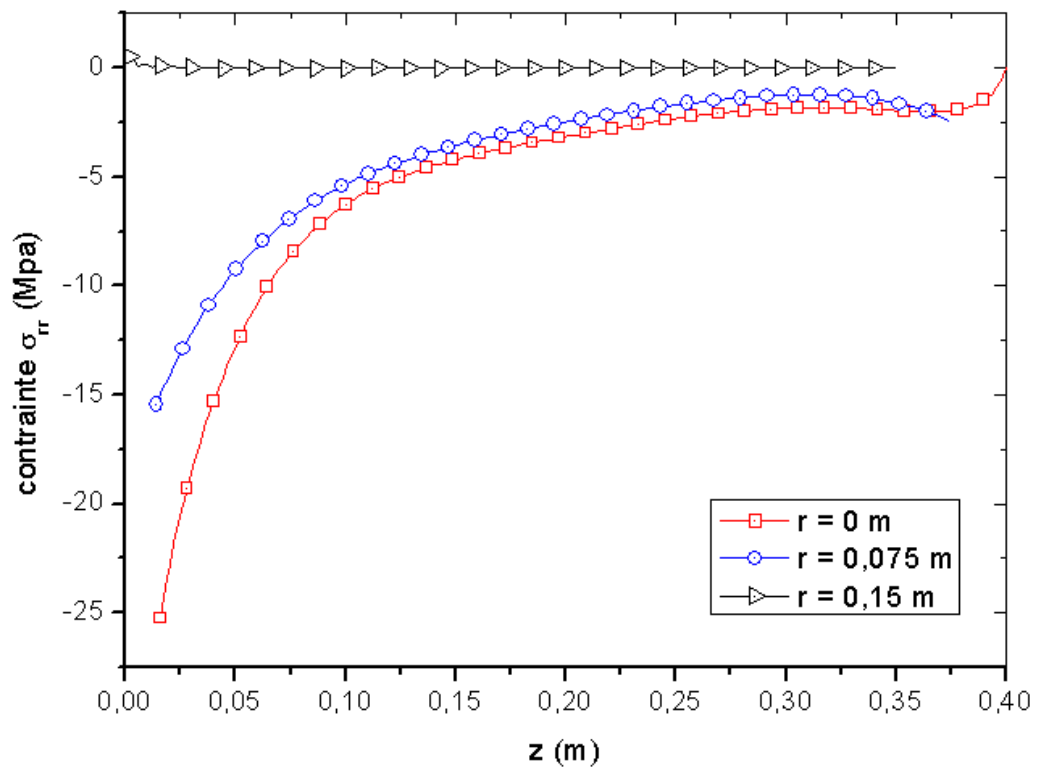


Figure IV.9 (b): Variation de la contrainte (σ_{rr}) selon z pour différents rayons

IV.2 Effet des différents paramètres sur la répartition des contraintes

Dans cette section, une série de simulations sous différentes conditions opératoires a été conduite pour calculer le champ de température dans le cristal, le champ de contrainte dû à la dilatation thermique et l'influence de la hauteur du lingot du silicium. L'impact de la vitesse de tirage, la vitesse de rotation du cristal et celle du creuset sur la forme de l'interface solide/liquide et la contrainte thermique sont discutés en détail dans les sous-sections suivantes.

IV.2.1 Effet de la longueur du silicium

La distribution du champ de température et la répartition des contraintes thermiques dans des cristaux de silicium de large diamètre (300 mm) dans un système de croissance Czochralski a été étudiée numériquement pendant les différentes stages du processus de croissance, pour révéler l'effet de la longueur du cristal sur la croissance de la forme d'interface et la contrainte thermique.

La Figure IV.10 représente les résultats de simulation des champs de la température dans liquide et le cristal, et la distribution thermo-élastique correspondante dans le cristal pour différents stages de croissance. Quand la vitesse $v_p = 10$ mm/h, et les tailles du cristal présent sont successivement (a) 150 millimètres, (b) 300 millimètres, (c) 450 millimètres et (d) 600 millimètres. Dans ces figures, le côté gauche représente les isothermes dans le liquide et le cristal séparées par des pas de 30 K. Le côté droit montre les courbes d'iso-contraintes séparées par des pas de 3 Mpa.

Pour tous les résultats représentés dans la figure IV.10, nous pouvons observer un phénomène remarquable, deux points chauds correspondant à deux maxima de contraintes pour différentes longueurs, un au centre de l'interface solide/liquide et l'autre sur la périphérie du cristal. La contrainte thermique maximale sur la périphérie du cristal est plus grande que celle au centre de l'interface et la forme de l'interface solide/liquide est sensiblement affectée pendant la croissance.

La figure IV.11 représente l'évolution de la forme de l'interface de solide/liquide pour différentes hauteurs du lingot de silicium. La croissance de l'interface change d'une forme convexe en concave avec l'augmentation de la longueur. Quand la longueur est basse (150 millimètres), l'interface est très convexe. Quand la longueur devient plus grande, l'interface devient concave dans cristal. La déflexion maximum de l'interface de croissance diminue de 22.5 à -10 millimètres, à mesure que la longueur varie de 150 jusqu'à 600 millimètres puisque la vitesse de tirage est supposée constante. Ce changement de la forme d'interface affecte la variation de la contrainte élastique de Von Mises le long de l'interface (Figure VI.12). Nous pouvons observer que les profils de la contrainte thermique vont d'une forme (W) à une forme (U) et la contrainte thermique maximum située au centre de l'interface est la plus

haute (25.2 MPa) dans le premier cas où l'interface est convexe. Quand la forme de l'interface change, la contrainte au centre devient beaucoup plus petite (14.6 MPa), mais au bord de l'interface elle devient plus grande.

Il est maintenant évident que la forme de l'interface solide/liquide ait un effet néfaste sur le maximum de la contrainte thermique pendant la croissance du cristal. La valeur de la contrainte de Von Mises devient plus grande dans le cas où l'interface devient plus convexe dans le cristal.

Les profils des contraintes de Von Mises le long la périphérie du cristal pour différentes tailles du cristal sont montrés dans figure IV.13, il est clairement observé que l'augmentation de la longueur induit un niveau de contraintes décroissant, mais qualitativement cette variation n'est pas significative, les valeurs des pics de la contrainte sur la périphérie augmente de la valeur 36.4 à 31.3 MPa, quand la longueur du cristal change de 150 à 600 millimètres. C'est principalement dû à la croissance de la longueur du cristal. La diminution de la contrainte peut être expliquée par les mécanismes de transfert de chaleur à l'intérieur du cristal. Le gradient de température dépend de la superficie. Le cristal échange plus de chaleur avec l'air ambiant froid, ayant pour résultat la courbure d'isotherme. Les gradients de température qui existent dans le cristal sont faibles et donc la contrainte thermique diminue quand la longueur du cristal est grande. En outre, le cristal échange moins de chaleur par rayonnement avec l'environnement extérieur et le gradient de température dans le cristal augmente et par conséquent, la contrainte sur la périphérie augmente quand la longueur est basse. Deuxièmement, l'endroit où la contrainte maximale apparaît, ne change pas pendant la croissance du cristal. Cette prévision de la variation de contrainte pendant la croissance du cristal, est en complète accord avec l'observation de Volk et al [128].

La valeur maximale de la contrainte de Von Mises obtenue dans le présent calcul est légèrement plus grande que celles trouvées par Muzinek et al [125], ainsi c'est très dangereux et les dislocations peuvent se produire à l'interface pendant la croissance.

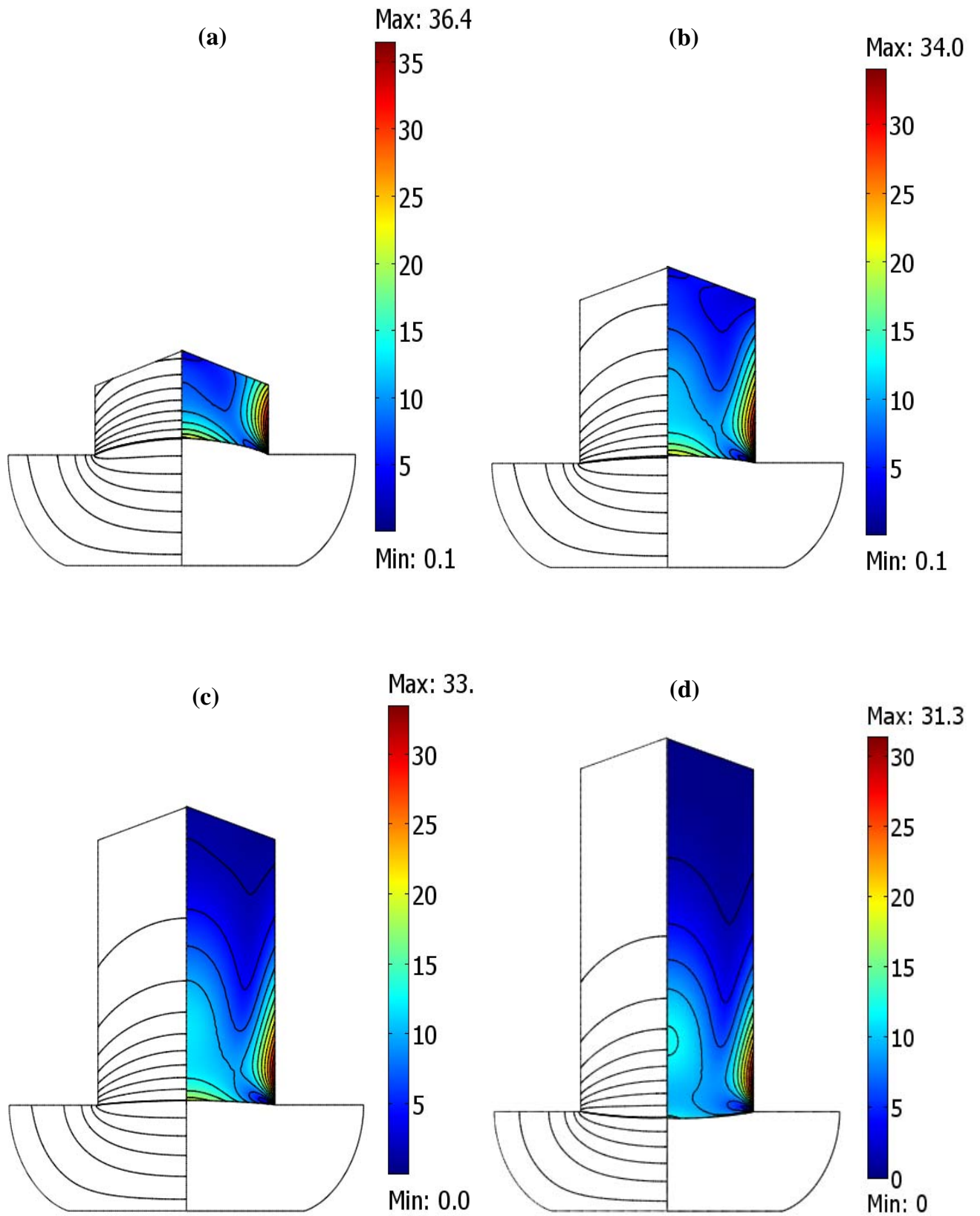


Figure IV.10: Champs de température et de contraintes pour plusieurs longueurs du silicium

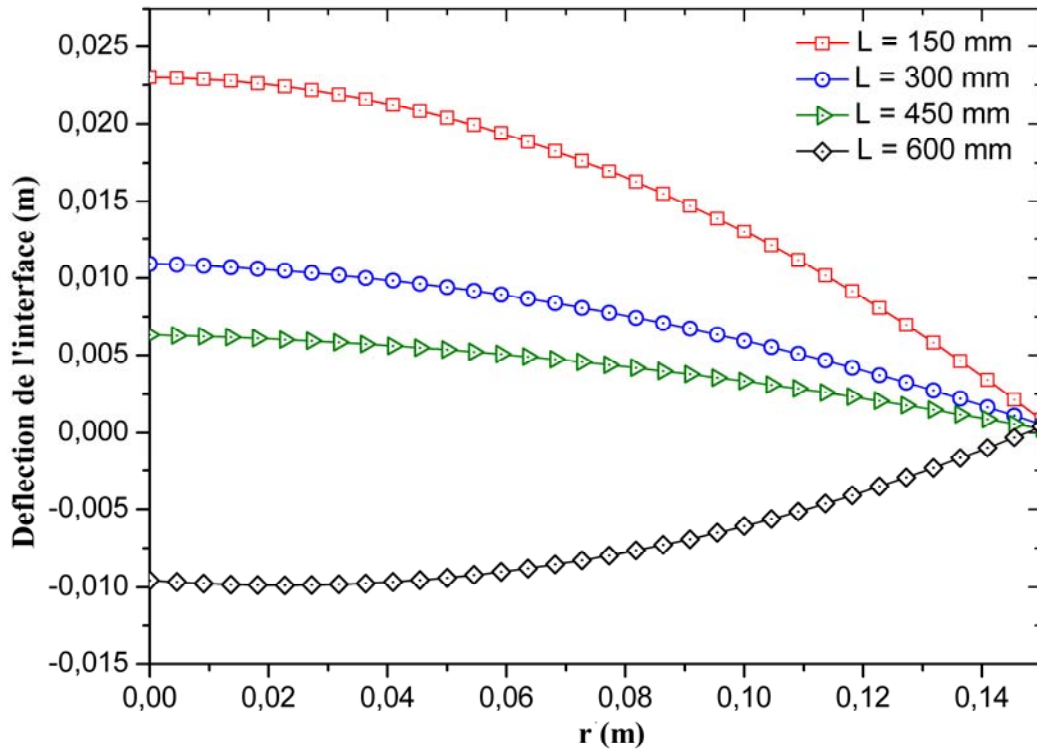


Figure IV.11 Evolution de la forme de l'interface solide/liquide pour différentes hauteurs du lingot de silicium

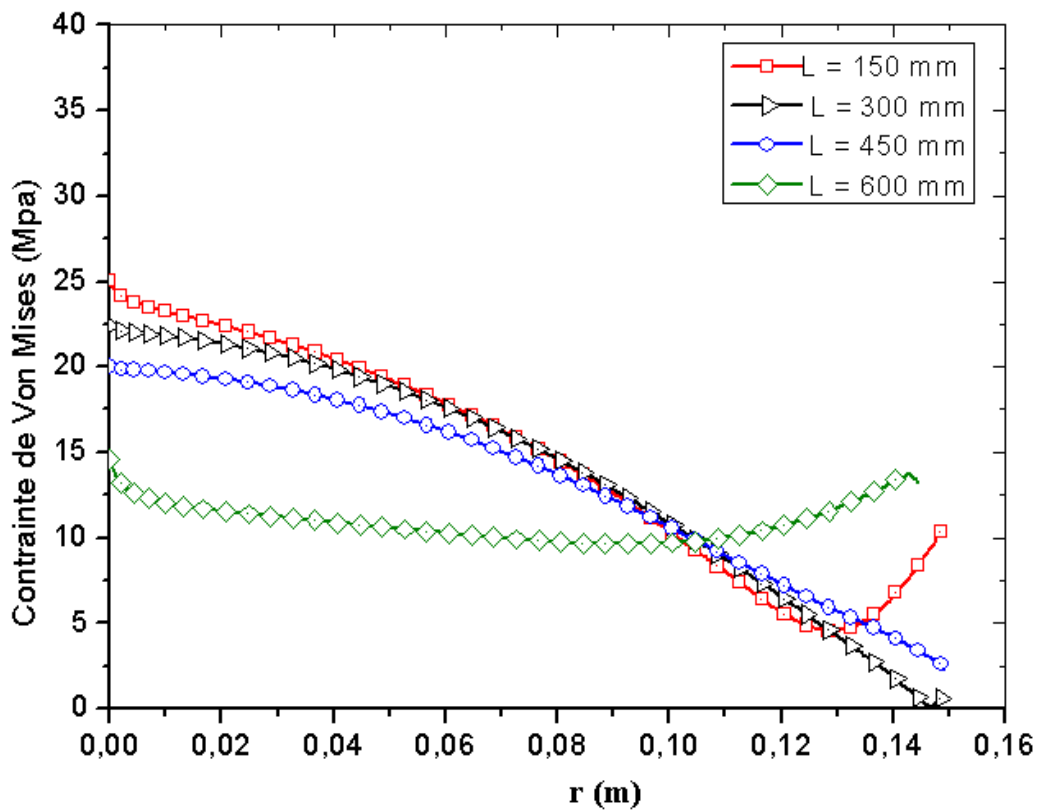


Figure IV.12 : Evolution de la contrainte de Von Mises le long de l'interface pour différentes hauteurs du lingot de silicium

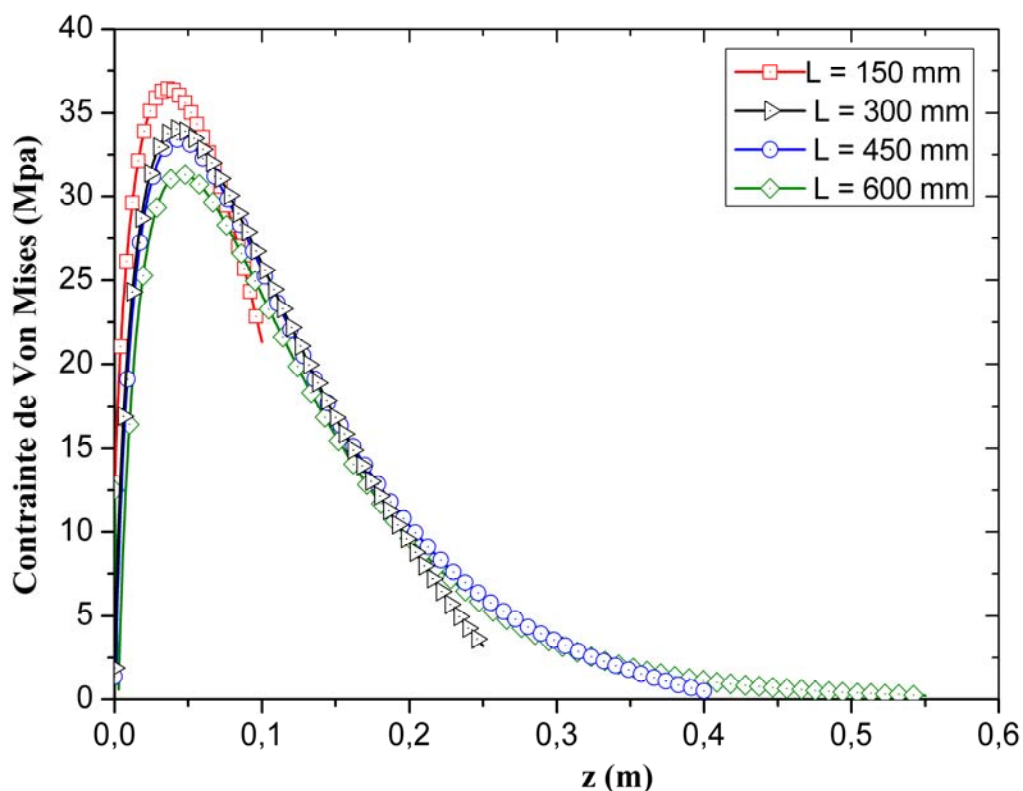


Figure IV.13 : Evolution de la contrainte de Von Mises le long de la périphérie pour différentes hauteurs du lingot de silicium

IV.2.2 Effet de la vitesse de tirage

La figure IV.14 représente l'évolution des champs de température dans le liquide et le cristal, et la distribution de la contrainte thermo élastique correspondante dans le cristal pour les différentes vitesses de tirage imposées et égales respectivement à 5 mm/h, 20 mm/h, 35 mm/h et 50 mm/h. Les vitesses de rotation du cristal et du creuset sont maintenues constantes et égales à 1 tr/min. Dans ces figures, le côté gauche illustre les isothermes dans le liquide et le cristal séparées par des pas de 15 K. Le côté droit illustre les iso-contraintes dans un cristal de 400 millimètres de hauteur séparées par des pas de 2 MPa. Nous pouvons observer deux points chauds correspondant à deux maximums de contraintes pour différentes vitesses de tirage, situés au centre de l'interface et au bord du cristal.

Nous pouvons observer, que la croissance de la forme d'interface change d'une forme concave à une forme convexe avec l'augmentation de la vitesse de tirage (Figure IV.15). Quand la vitesse de tirage est faible (5 mm/h), l'interface est concave. Quand la vitesse de tirage devient plus grande, l'interface devient très convexe dans le cristal. La déflexion maximale de l'interface augmentera de -7.2 à 27.3 millimètres.

Les figures IV.16 et IV.17 représentent les profils de la contrainte de Von Mises le long de l'interface et les profils axiaux de la contrainte de Von Mises le long la

périphérie du cristal. On peut observer clairement qu'une vitesse de tirage plus élevée induit un niveau de contrainte croissant. Au centre de l'interface, la contrainte de Von Mises augmente plutôt remarquablement (de la valeur maximale 13.8 MPa jusqu'à la valeur maximale de 31.6 MPa) mais et au bord du cristal, la variation de la contrainte maximale n'est pas significative (de 31.9 à 36.2 MPa), en augmentant la vitesse de tirage de 5 mm/h à 50 mm/h. Ceci est dû principalement à l'augmentation de la déflexion de l'interface, le cristal devenant plus convexe. C'est aussi dû à la chaleur de fusion, qui est proportionnelle à la vitesse de tirage. La contrainte thermique dans le cristal de silicium sur l'interface, dépend de la forme de l'interface et du gradient de température et cette superficie, et donc la contrainte thermique augmente avec la forme curvilinéaire de l'interface. En même temps, avec l'augmentation de la déflexion de l'interface, la chaleur latente pendant la transformation de phase, n'est pas libérée à temps et par conséquent les gradients de température et la contrainte thermique augmenteront avec l'augmentation de la vitesse de tirage du cristal.

La valeur de la contrainte de Von Mises devient plus grande dans le cas où l'interface deviennent plus convexe dans le cristal, qualitativement, cet important résultat est dans l'accord complet avec GAO [118] et Zou [140], qui ont également trouvé des points chauds identiques.

La figure IV.18 représente la relation entre la vitesse de tirage et le changement du maximum de la contrainte thermique dans le cristal, au centre de l'interface et sur la périphérie du cristal. Dans cette figure, on constate clairement que pour des vitesses de tirage variant de la valeur de 5 à 50 mm/h, le maximum de la contrainte thermique dans le cristal dépend linéairement de la vitesse de tirage.

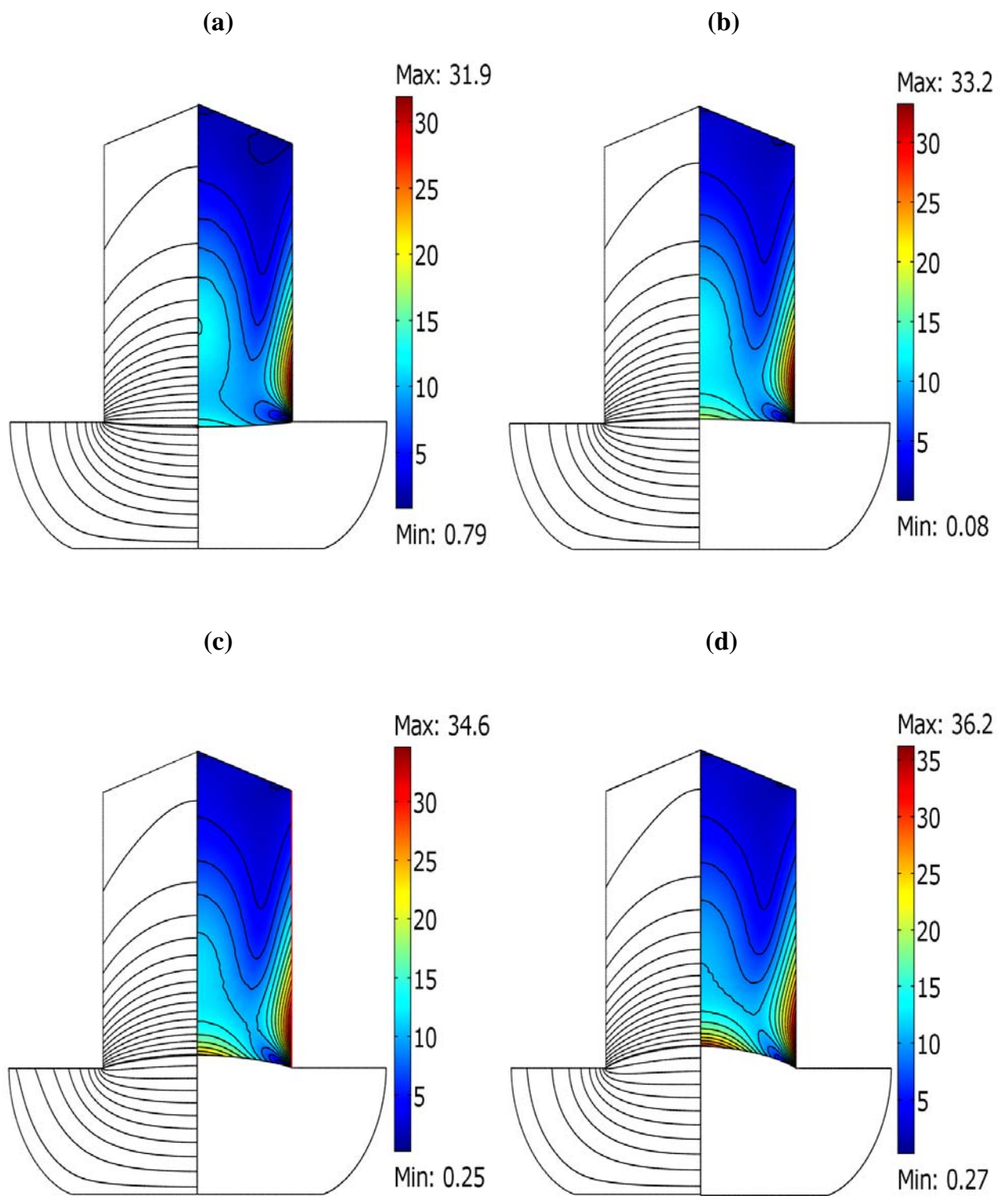


Figure IV.14 : Champs de température et de contrainte thermique dans le cristal pour différentes vitesses de tirage : a) 5 mm/h, b) 20 mm/h, c) 35 mm/h et d) 50 mm/h.

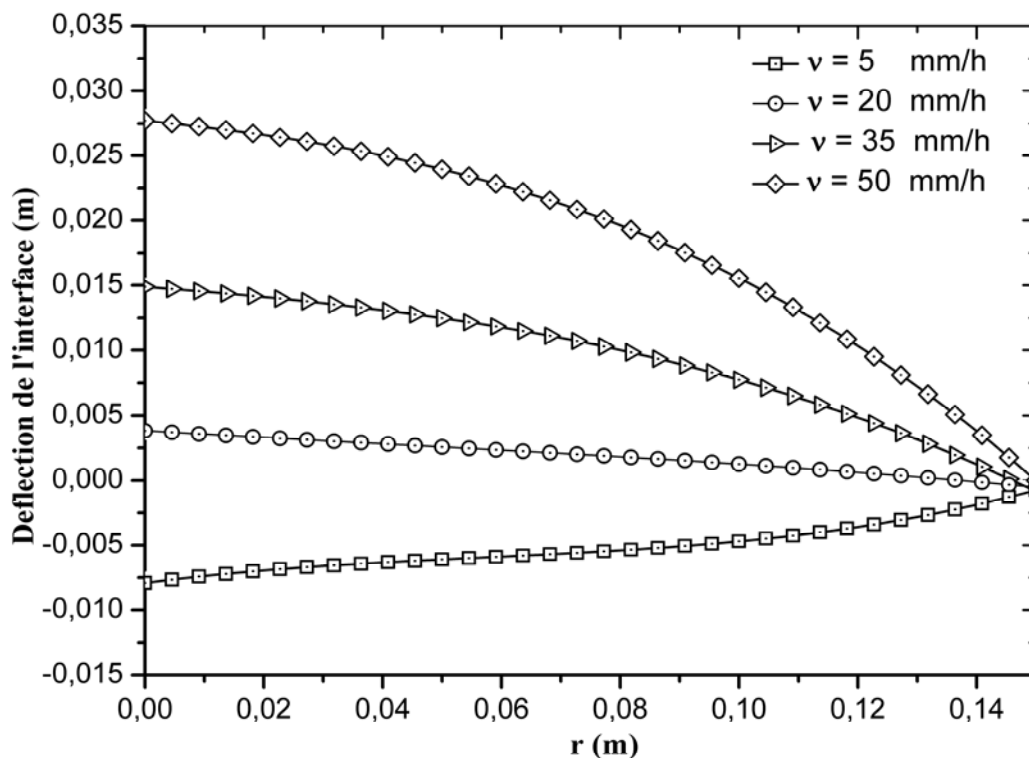


Figure IV.15 : Déflexion de l'interface pour différentes vitesses de tirage

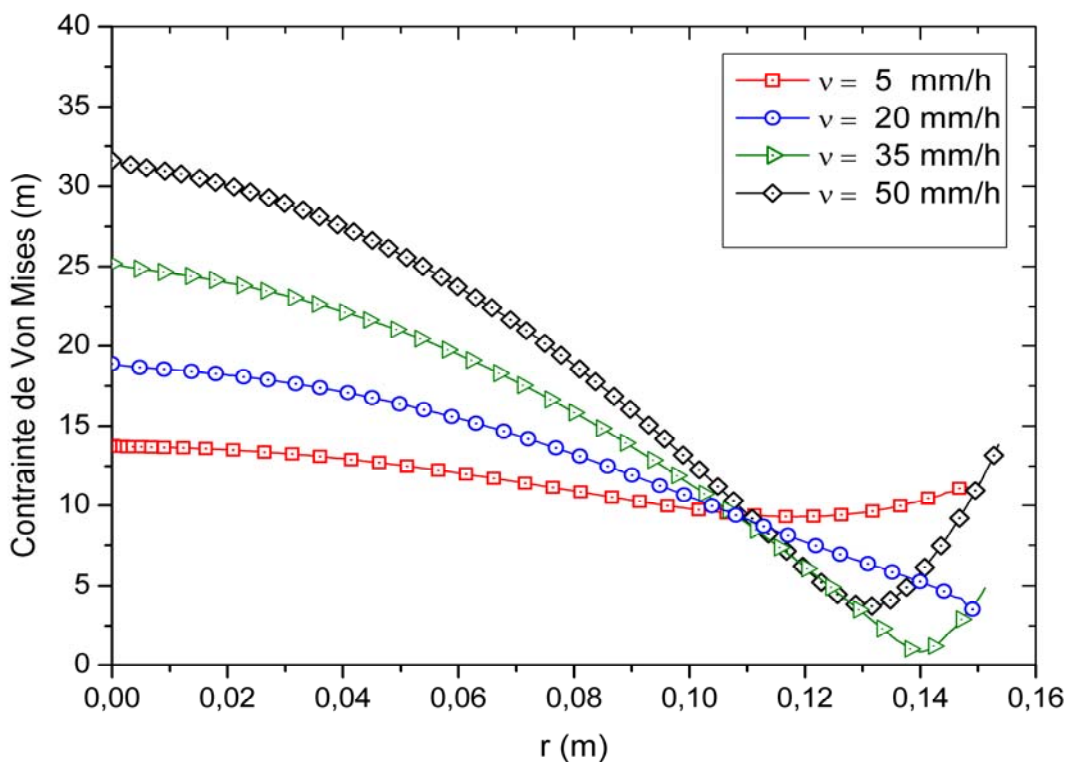


Figure IV.16 : Contrainte de Von Mises le long de l'interface pour différentes vitesses de tirage

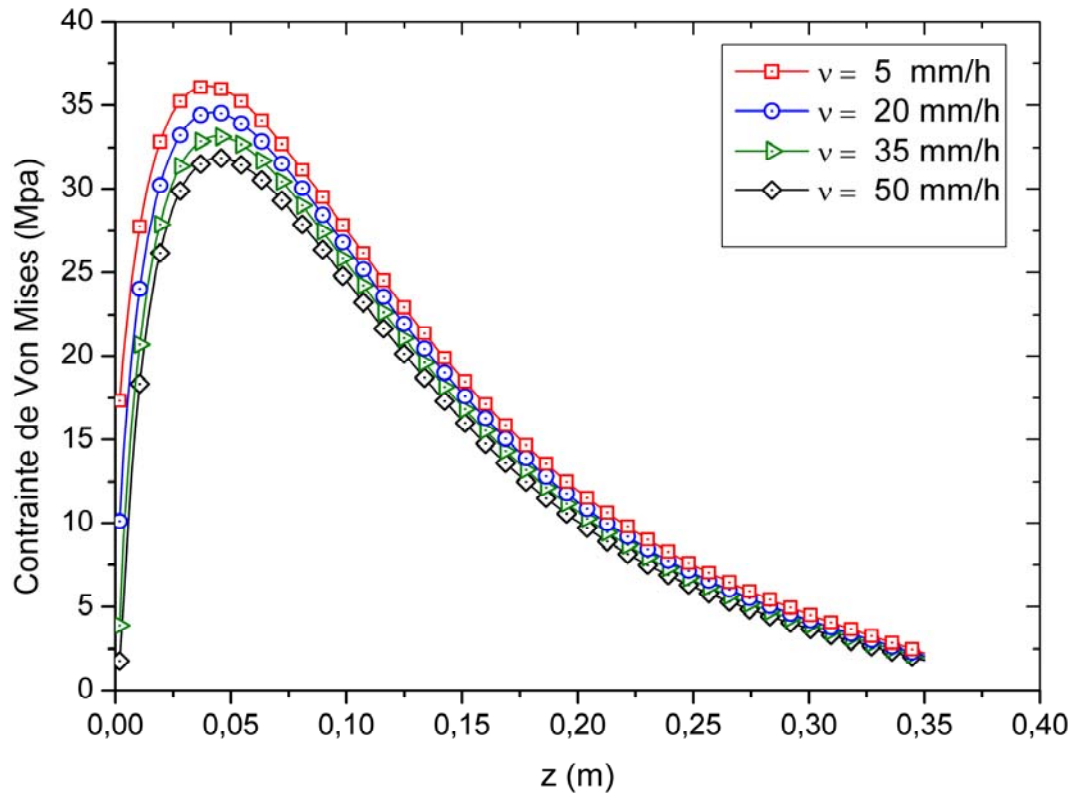


Figure IV.17 : Contrainte de Von Mises le long de la périphérie pour différentes vitesses de tirage

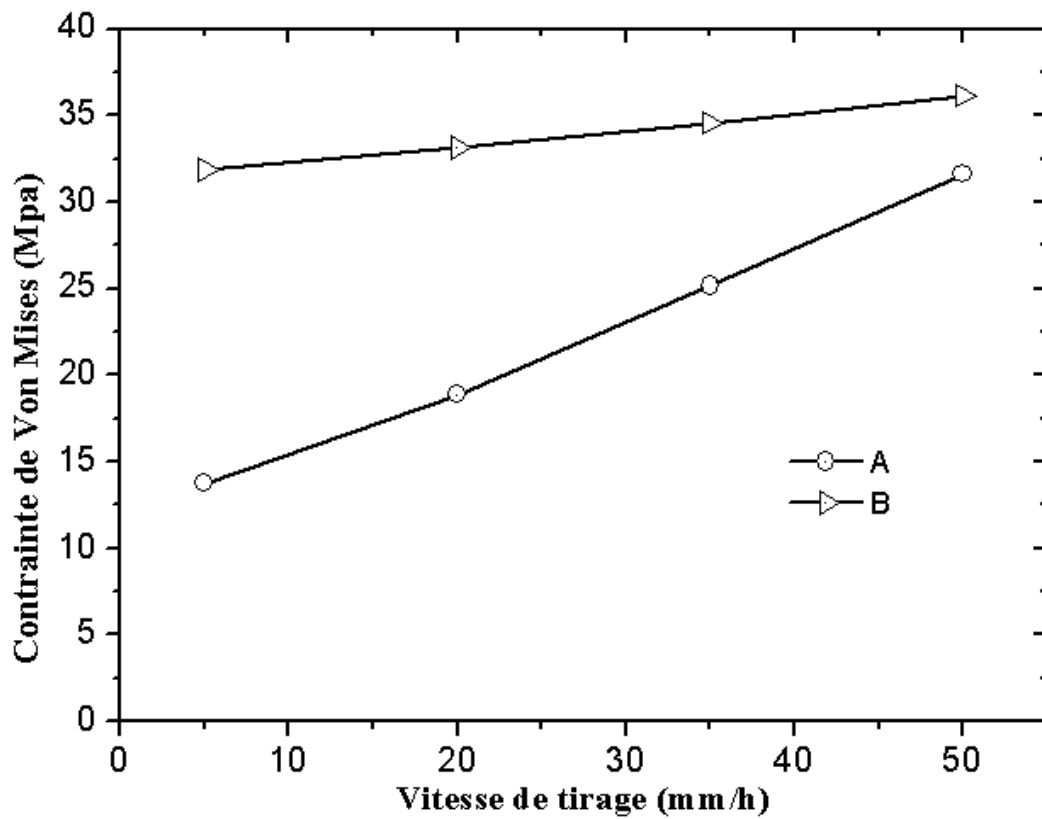


Figure IV.18 : Relations entre vitesse de tirage et contrainte (A : au centre de l'interface, B : sur la périphérie)

IV.2.3 Effet des rotations du cristal et du creuset sur l'état de contrainte

Afin d'améliorer la symétrie thermique autour du cristal et également homogénéiser la distribution du dopant, durant le processus de Czochralski, le cristal et/ou le creuset sont généralement tournés dans des directions opposées. Ainsi il est très important de savoir l'effet des rotations du cristal et du creuset sur l'état de contrainte et des champs de température dans le silicium. Les vitesses de rotation du cristal, imposées dans cette étude varient de 1 à 15 tr/min, en supposant que le creuset tourne dans le sens opposé ($\omega_c = -5$ tr/min). Les vitesses de rotation du creuset varient de 1 à 15 tr/min, en supposant que le cristal tourne dans la direction opposée ($\omega_s = -5$ tr/min). La vitesse de tirage est maintenue constante et égale à 20 tr/min.

IV.2.3.1 Effet de vitesse de rotation du cristal

La Figure IV.19 montre les isothermes dans le liquide et le cristal, et les courbes d'iso contraintes dans le cristal pour les différentes vitesses de rotation imposées du cristal. Dans ces figures, les isothermes dans le liquide et le cristal sont séparées par des pas de 15 K (illustrées sur le côté gauche des figures a, b, c et d). Les iso contraintes sont séparées par des pas de 2 MPa. (Illustrées sur le côté droit dans le cristal en a, b, c et d).

La forme de l'interface cristal/liquide n'est pas sensiblement affectée par la variation de la vitesse de rotation du cristal. La déflexion maximale de l'interface augmente de -8.2 à 5.4 mm), en variant la vitesse de rotation du cristal ω_s de 1 à 15 tr/min. La forme de l'interface change d'une forme concave à une forme convexe avec l'augmentation de la vitesse de rotation du cristal (voir les figures IV.19 et IV.20). Quand la vitesse de rotation est faible ($\omega_s = 1$ tr/h) l'interface est concave. Dans le cas où la vitesse de rotation atteint la valeur critique de 10 tr/min, la forme de l'interface liquide/cristal est presque plate. Quand la vitesse de rotation devient plus grande ($\omega_s = 15$ tr/min.) l'interface devient convexe dans le cristal.

D'après les figures IV.21 et IV.22, qui représentent les profils de la contrainte de Von Mises le long de l'interface et les profils axiaux de la contrainte de Von Mises le long la périphérie du cristal, on remarque que la contrainte maximale de Von Mises, au centre de l'interface, augmente avec l'augmentation de la vitesse. Particulièrement, la contrainte maximale de Von Mises augmente de la valeur maximale 13,6 MPa jusqu'à la valeur maximale de 18,3 MPa) ce qui représente presque une différence de 35 %. Au bord du cristal, la variation de la contrainte maximale n'est pas significative (de la valeur maximale 31,7 MPa jusqu'à la valeur maximale de 33,3 MPa), ce qui est environ 5 % à mesure que la vitesse augmente de 1 tr/min à 15 tr/min.

D'après les résultats donnés dans la figure IV.23, nous notons que la valeur maximum de la contrainte thermique est linéairement proportionnelle à la vitesse de

rotation et la valeur maximale de la contrainte de Von Mises devient plus grande dans le cas où l'interface devient plus concave dans le liquide. Ce comportement est conforme au résultat numérique de derby et Schwabe [141, 142]. Les résultats présentés ici démontrent le rôle important joué par la rotation du cristal sur la forme de l'interface pendant le processus de croissance CZ.

IV.2.3.2 Effet de vitesse de rotation du creuset

La figure IV.24 représente l'évolution de la forme de l'interface cristal/liquide pour différentes vitesses de rotation du creuset. La croissance de la forme d'interface reste toujours concave avec l'augmentation de la vitesse de rotation du creuset. Quand la vitesse est très faible ($\omega_c = 1$ tr/min), l'interface est peu concave (-3,6 mm). Quand la vitesse atteint une valeur plus grande ($\omega_c = 15$ tr/min), la concavité de l'interface augmente pour atteindre -7,16 mm. Par conséquent, ce changement de la forme d'interface affecte la variation de la contrainte élastique de Von Mises le long de l'interface. Mais qualitativement, cette variation n'est pas significative, les valeurs maximales de la contrainte, au centre de l'interface, diminuent (de la valeur maximale 15,3 à 14,4 MPa) de presque de 6 %. Au bord du cristal, la contrainte thermo élastique diminue faiblement (de la valeur maximale 32,2 à 31,8 MPa) d'environ 1 % quand la vitesse de rotation du creuset augmente (de 1 tr/min à 15 tr/min).

Dans la figure IV.25, nous pouvons observer la relation entre la contrainte thermique et la vitesse de rotation du creuset. La valeur maximale est linéairement dépendante de l'augmentation de la vitesse de rotation du creuset.

Qualitativement, la prédiction obtenue de l'effet de vitesse de rotation du creuset, sur la forme d'interface et sur la valeur de la contrainte thermique est conforme au résultat numérique de Xiao et al [61] et Muzinek et al [125]. La valeur maximale de la contrainte thermo élastique de Von Mises obtenue dans ces calculs, est légèrement plus grande que celles indiquée par Muzinek et al. Les résultats présentés dans ce travail, démontrent le rôle important joué par la rotation du cristal et celle du creuset sur la forme de l'interface solide/liquide et l'état de contraintes pendant le processus de croissance CZ.

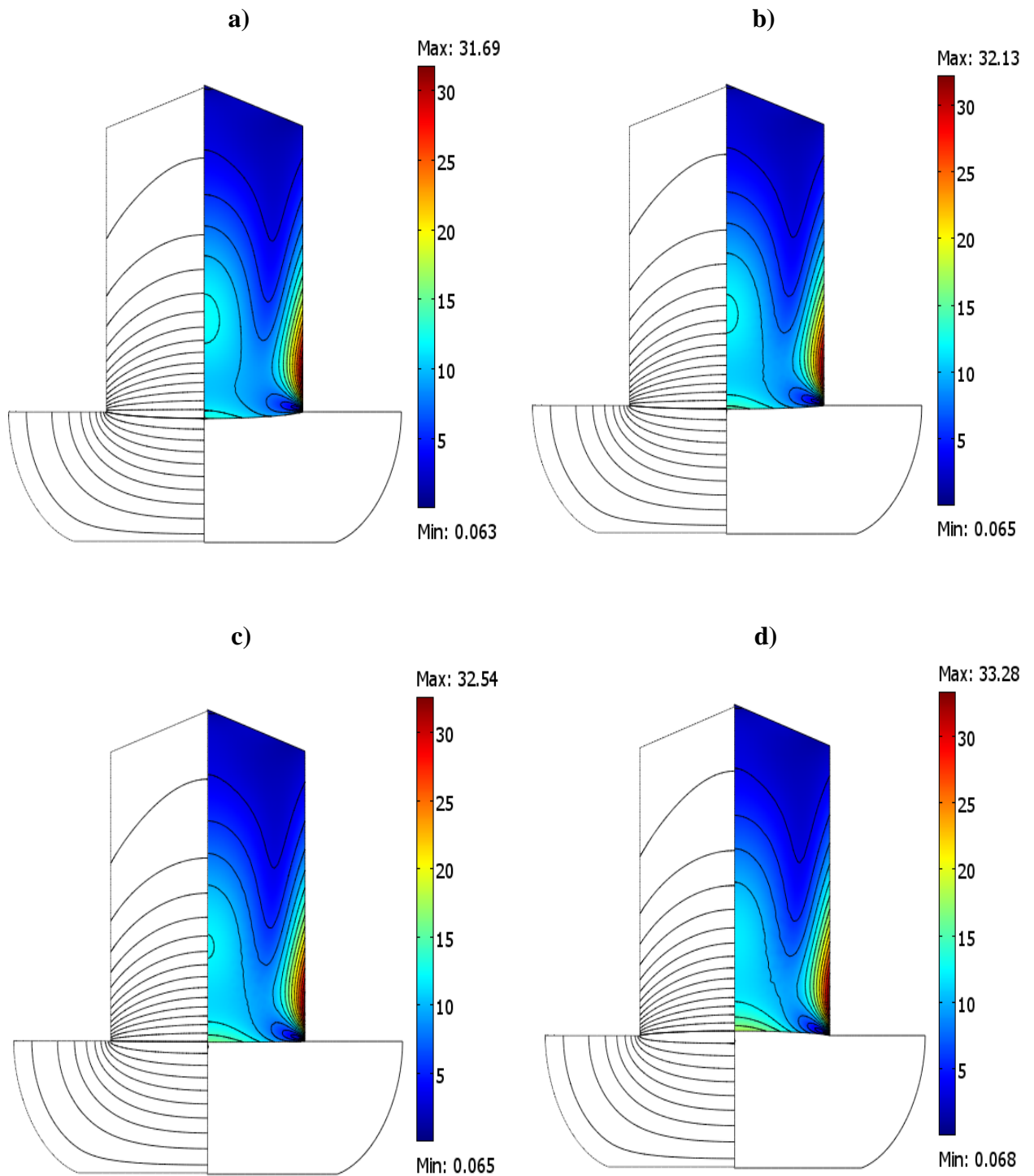


Figure IV.19 : Champs de température et de contrainte thermique dans le cristal pour différentes Vitesses de rotation du cristal (ω_S): a) 1 tr/min, b) 5 tr/min, c) 10 tr/min et d) 15 tr/min.

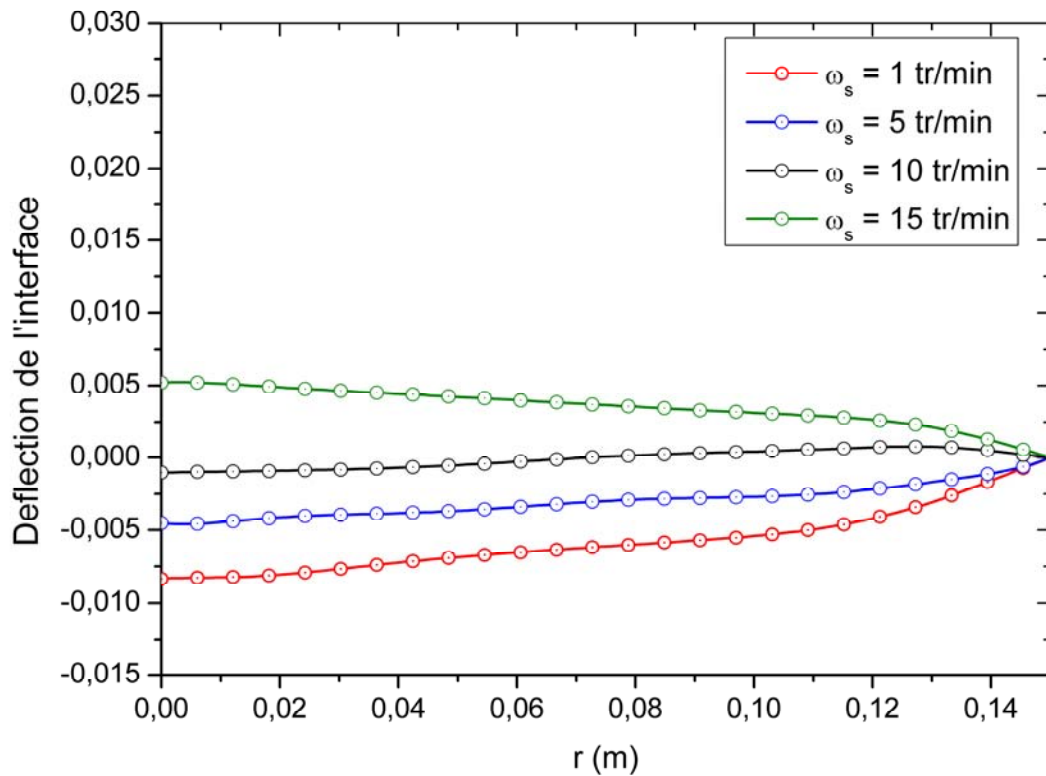


Figure IV.20 : Déflexion de l'interface pour différentes vitesses de rotation du cristal

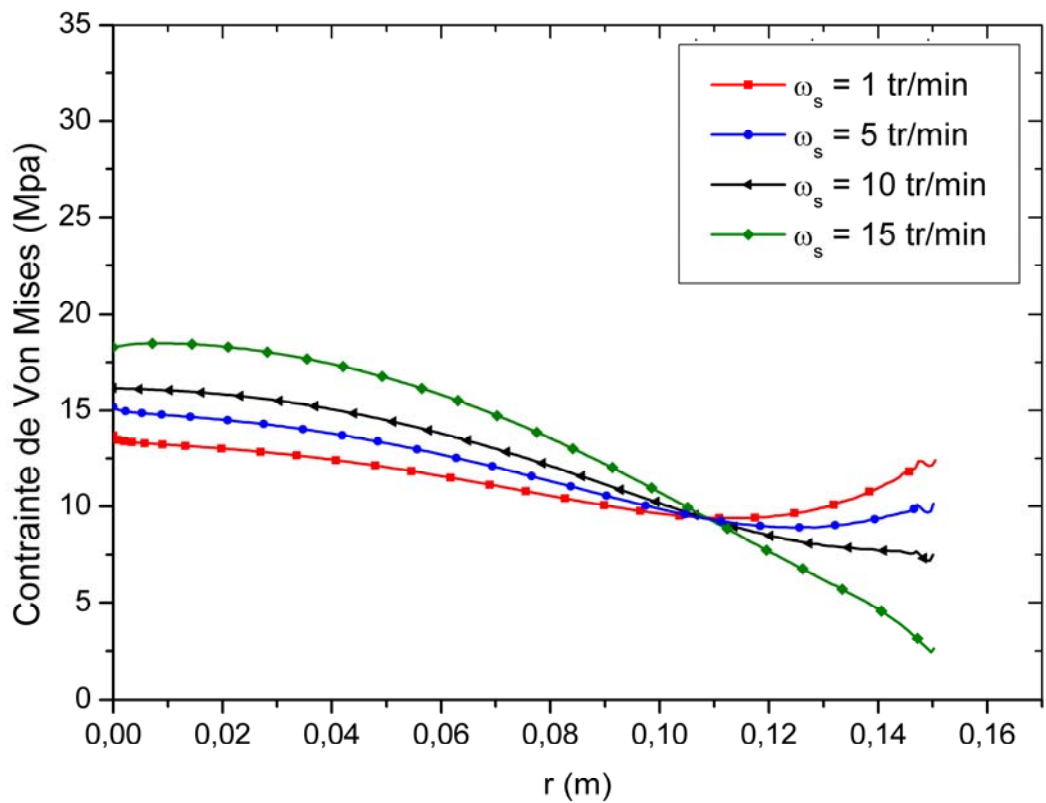


Figure IV.21 : Contrainte de Von Mises le long de l'interface pour différentes vitesses de rotation du cristal

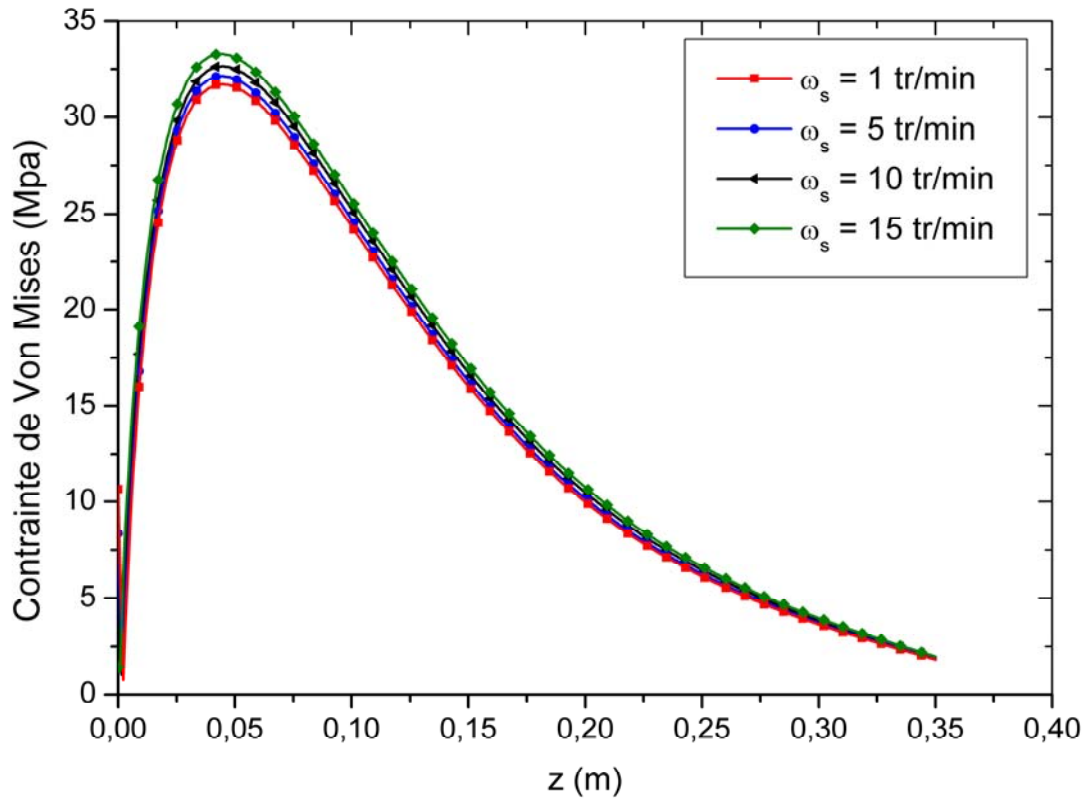


Figure IV.22 : Contraite de Von Mises le long de la périphérie pour différentes vitesses de rotation du cristal

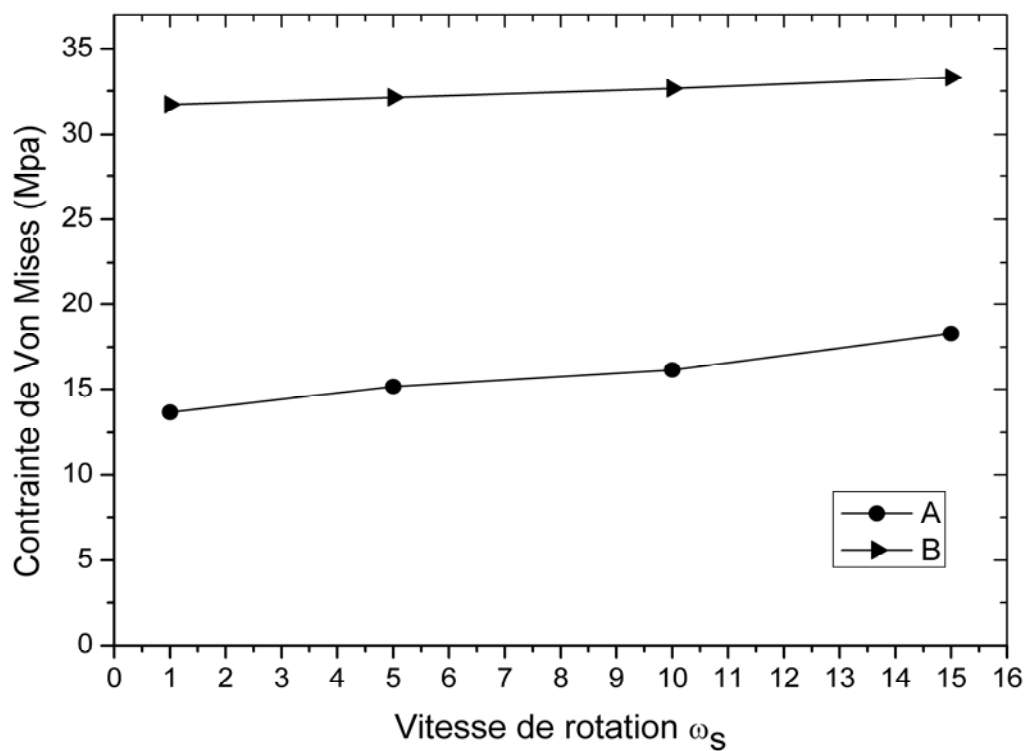


Figure IV.23 : relation entre vitesse de rotation du cristal (ω_s) et contraite (A : au centre de l'interface, B : sur la périphérie)

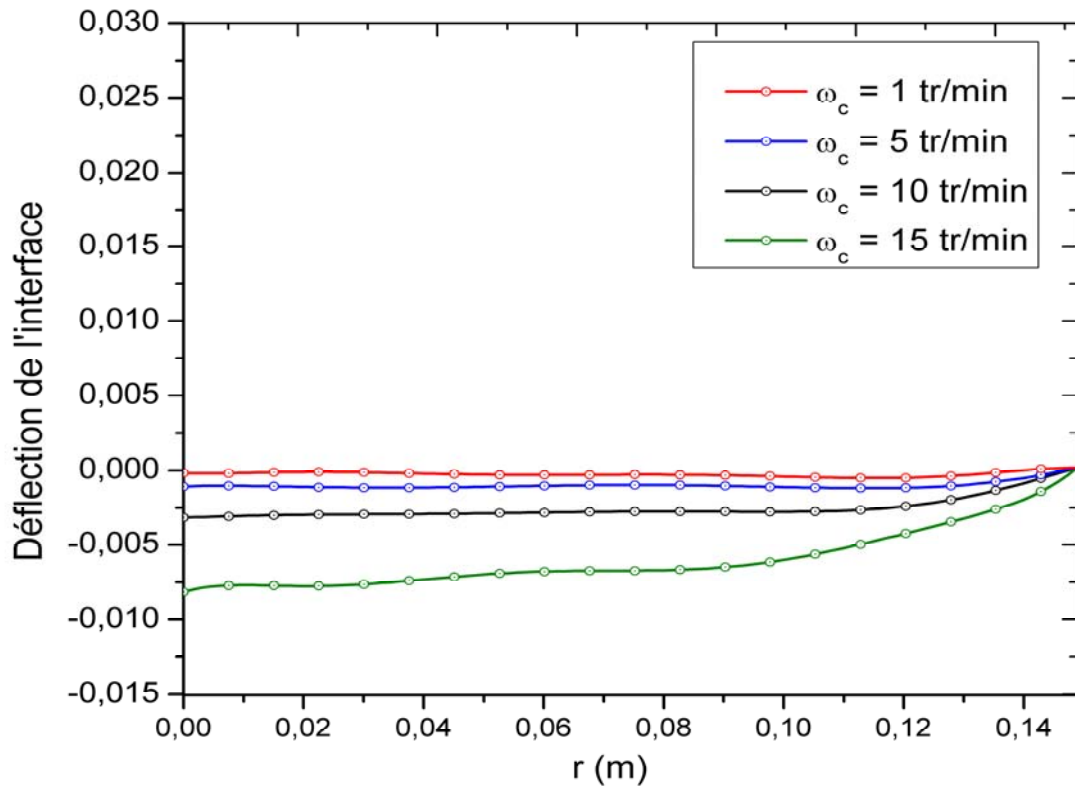


Figure IV.24 : Déflexion de l'interface pour différentes vitesses de rotation du creuset

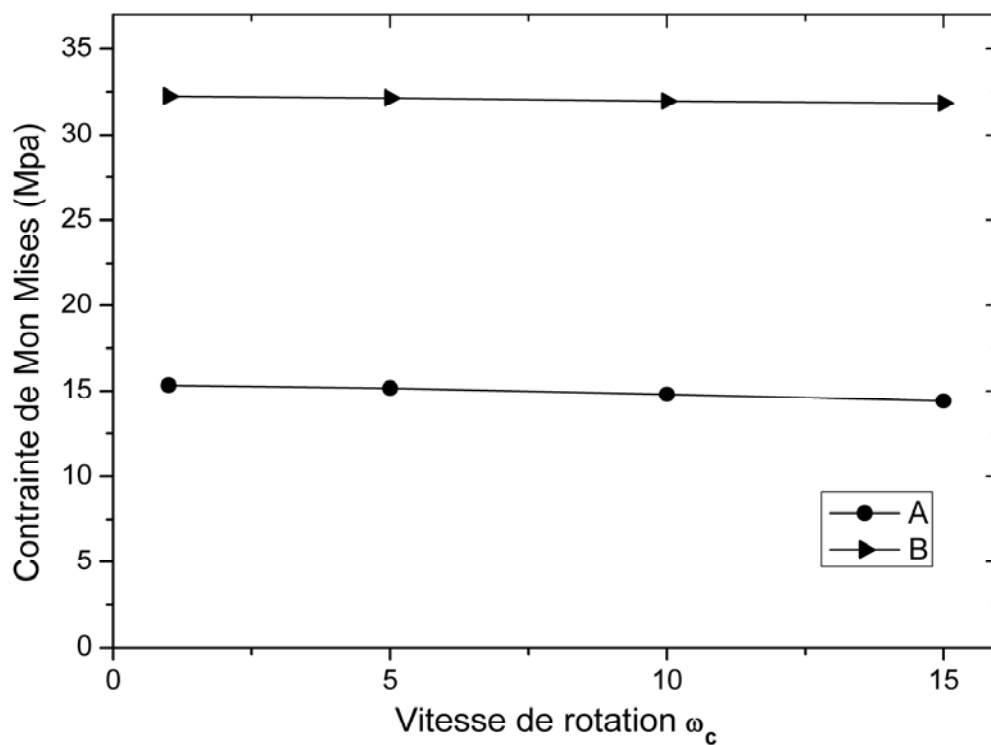


Figure IV.25 : Relation entre vitesse de rotation du creuset (ω_c) et contrainte (A : au centre de l'interface, B : sur la périphérie)

IV.2 Calcul paramétrique et optimisation du procédé czochralski

La recherche des paramètres optimaux du procédé czochralski pour les cristaux de silicium a été réalisée en faisant varier les paramètres suivants: longueur du lingot de silicium (L), vitesse de tirage (v_p), vitesse de rotation du cristal (ω_s) et vitesse de rotation du creuset (ω_c).

Le tableau IV.1 donne les intervalles des valeurs des paramètres étudiés qui ont été fixés par rapport à d'autres études d'optimisation sur l'élaboration du silicium czochralski [143], [144].

Tableau IV.1 Intervalle de variation des paramètres du procédé czochralski

Paramètre	Intervalle d'étude
Longueur du lingot	100 – 650 mm
Vitesse de tirage	1 – 50 mm/h
Vitesse de rotation du cristal ω_s	1 – 30 tr/min
Vitesse de rotation du creuset ω_c	-1 – (-30) tr/min

La méthode des réseaux de neurones artificiels (RNA) permet d'optimiser les paramètres principaux impliqués dans le processus de croissance de monocristal efficacement. C'est un outil puissant pour l'approximation des fonctions non linéaires et largement appliqué dans divers domaines. Ils sont notamment appliqués pour résoudre des problèmes de classification, de prédiction, de catégorisation, d'optimisation, de reconnaissance des formes et de mémoire associative [145], [146], [147], [148].

Dans cette étude, d'abord le modèle d'écoulement du fluide et le modèle transfert de chaleur avec solidification (FFSHT) ont été développés pour simuler la croissance du monocristal de Si-CZ. Le modèle développé nous a permis d'établir la relation entre les paramètres du processus et la contrainte thermique. Un algorithme génétique a été alors adopté pour optimiser les paramètres affectant la forme et la position de l'interface et par conséquent la contrainte thermique.

Le logiciel COMSOL Multiphysics (Femlab 32.a) a été employé pour développer l'algorithme ci-dessus ; pour optimiser les paramètres affectant la forme de l'interface et la valeur maximale de la contrainte thermique dans le processus de croissance de CZ et qui permet d'obtenir un état de contraintes optimale, les résultats des valeurs optimales obtenues par la simulation sont énumérées dans le tableau IV.2.

Tableau VI.2. Résultats des valeurs des paramètres optimums

Longueur du lingot (mm)	Vitesse de tirage (mm/h)	Vitesse de rotation du cristal ω_s (rpm)	Vitesse de rotation du creuset ω_c (rpm)	Contrainte maximum optimale à l'interface (Mpa)
650	2.3	26.7	- 4.2	7,8 Mpa

Les variables optimisées ont été par la suite employées dans le modèle d'écoulement du fluide et le transfert de chaleur avec solidification, pour évaluer la performance du modèle d'optimisation et prédire la forme d'interface et l'état de contraintes minimales (figure IV.26). Les valeurs optimisées de 2.3 mm/h, de 26.7 tr/min et 4.2 tr/min ont été obtenues pour la vitesse de tirage du cristal et la vitesse de rotation du cristal et celle du creuset, respectivement pour un cristal de grande dimension.

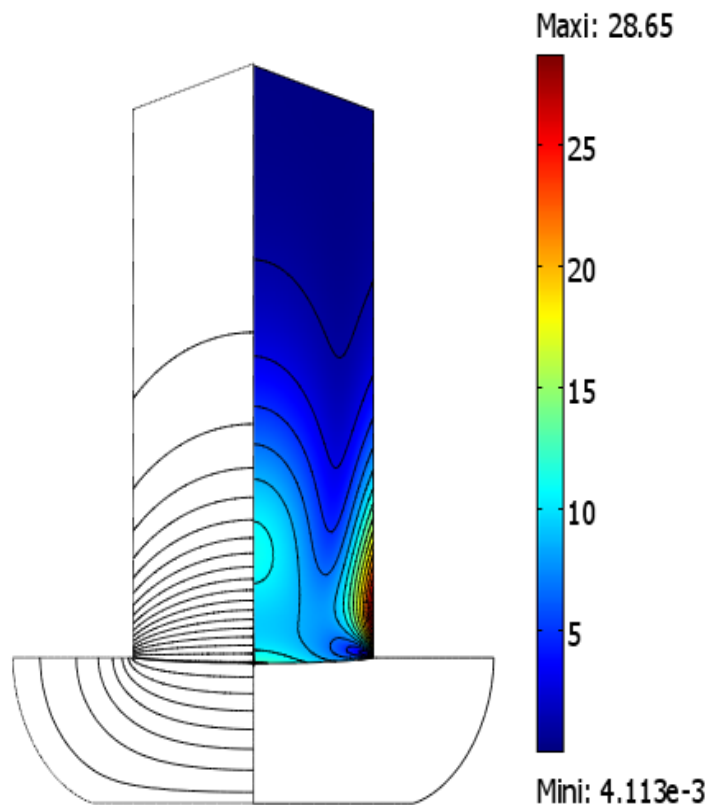


Figure IV.26 : Champs de température et de contrainte thermique dans le cristal pour les conditions optimales obtenues

IV.4 Modèle thermo-élasto-plastique

IV.4.1 Champ de température et de contrainte de Von Mises

La Figure IV.27 montre l'évolution des champs de température dans liquide et le cristal, et la distribution de la contrainte thermo-élasto-plastique correspondante dans le cristal. Les données du silicium utilisées sont celles de Dour et al [135] avec: le facteur géométrique $\Phi = 1$, le module du vecteur de Burgers $b = 0.384E-09$, la valeur initiale de la densité de dislocation $N_0 = 50E+06 \text{ cm}^{-2}$ et l'énergie de Peierls $Q = 2.2 \text{ Ev}$.

Dans cette figure, le côté gauche montre les isothermes dans le liquide et le cristal séparées par des pas de 15 K. Le côté droit montre les courbes d'iso-contraintes séparées par des pas de 2 Mpa.

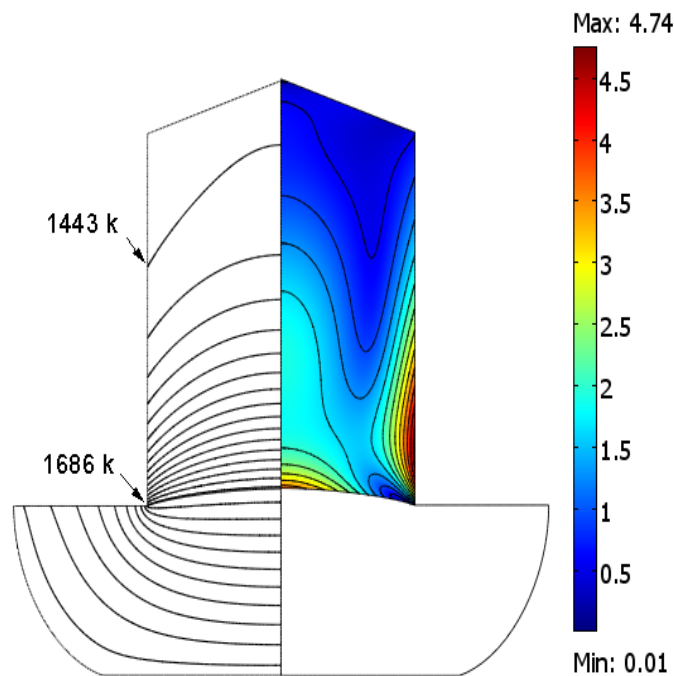


Figure IV.27 Champs de température et de contrainte thermo-élasto-plastique dans le cristal de silicium

Dans la figure IV.27, nous pouvons remarquer le même phénomène que dans le cas d'un matériau purement élastique. Il y a deux zones de concentrations de contours de contraintes correspondant à deux valeurs maximales pour la contrainte, une au centre de l'interface et l'autre sur la périphérie du cristal. On constate aussi que la valeur de cette contrainte diminue progressivement du fond du cristal jusqu'à l'extrémité libre, où elle atteint une valeur quasiment nulle.

Les figures IV.28 (a) et IV.28 (b), illustrent la variation de la contrainte de Von Mises (σ_{vm}) respectivement le long de la bielle (suivant l'axe Z) pour différents rayons et transversalement (suivant l'axe r) pour différentes hauteurs.

Dans la figure IV.28 (a) qui illustre la variation de la contrainte de Von Mises (σ_{vm}) selon r, la contrainte le long de la ligne du front de solidification, a une valeur qui varie entre 0.25 et 3.7 MPa. En comparant ces résultats avec ceux donnés dans la figure IV.4 (a), on remarque que la contrainte a gardé le même comportement, par contre du point de vue ordre de grandeur, sa valeur maximale a beaucoup diminué d'un facteur légèrement inférieur à 7, ceci est dû à l'effet de la relaxation plastique.

Sur la figure IV.28 (b) qui représente la variation de la contrainte de Von Mises en fonction de z, pour trois positions de r, sur le long du bord du lingot, la contrainte croît rapidement pour atteindre une valeur maximale égale à 4.7 MPa ensuite, cette contrainte prend une allure progressivement décroissante qui tend vers 0.5 MPa. En comparant avec la figure IV.4 (b), on remarque que les résultats du modèle thermo-élastique, décroissent très rapidement. Du point de vue qualitatif, on remarque que la valeur maximale de la contrainte a diminuée en grandeur d'un facteur légèrement supérieur à 7. Donc l'effet de la relaxation par les dislocations, qui se traduit par des glissements de plan cristallin, compense cette contrainte résiduelle.

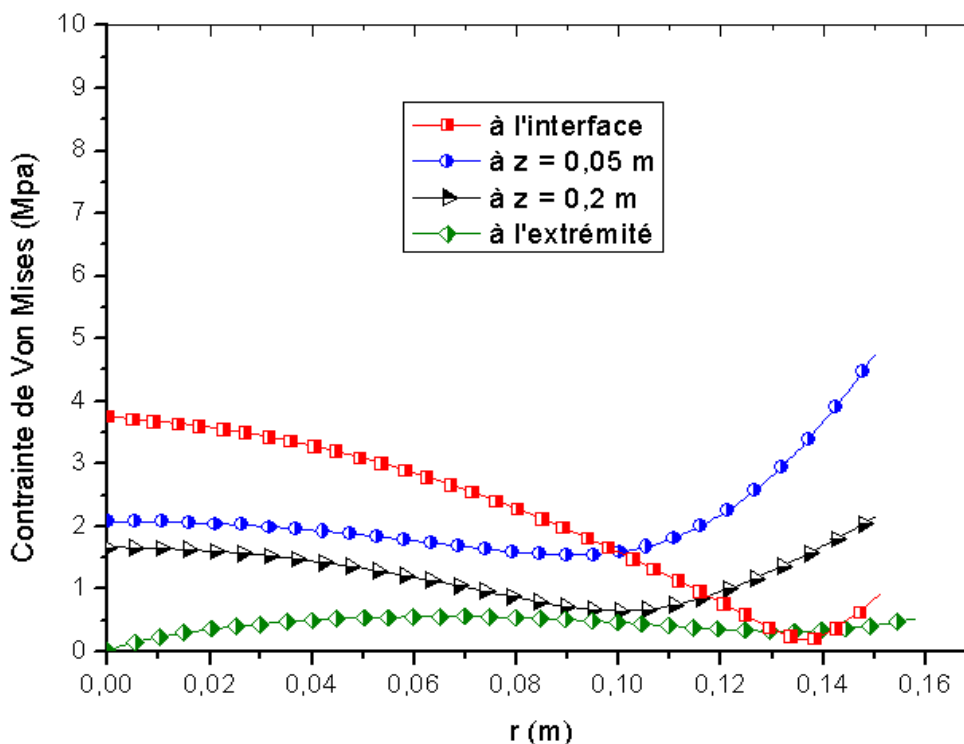


Figure IV.28 (a) : Variation suivant r de la contrainte de von mises pour 4 positions de z

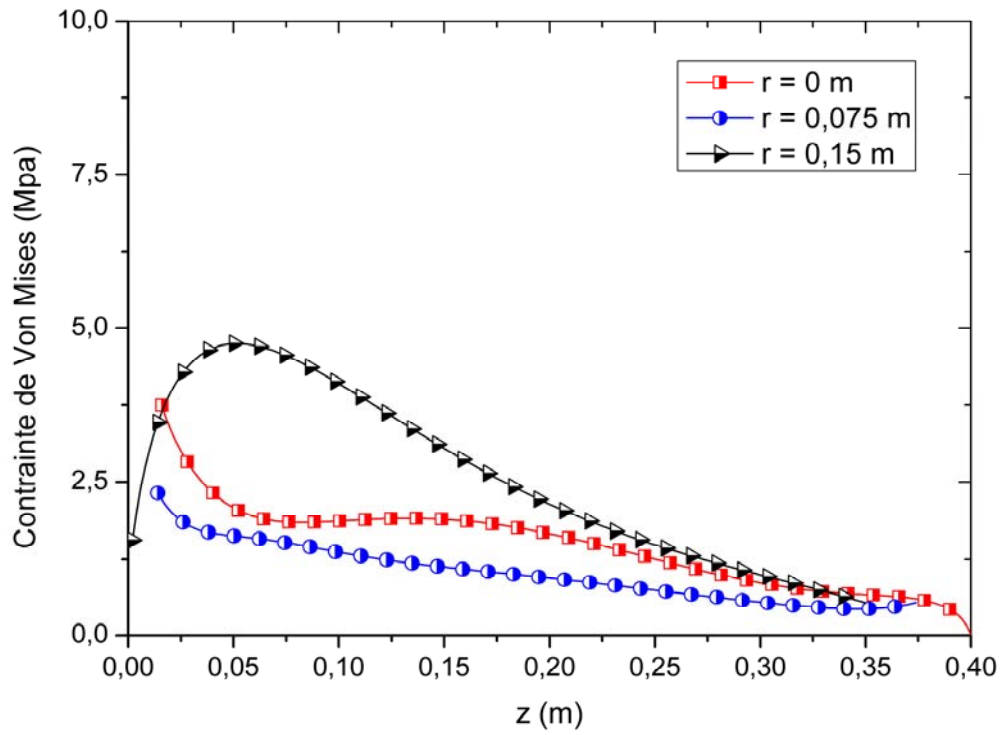


Figure IV.28 (b) : Variation suivant z de la contrainte de von mises pour 3 positions de r

IV.4.2 Champ des composantes de contrainte

La figure IV.29 montre la distribution des températures dans liquide et le cristal, et la distribution des composantes de contraintes correspondantes dans le cristal, respectivement la contrainte de cisaillement (σ_{rz}), la contrainte axial (σ_{zz}), la contrainte angulaire ($\sigma_{\theta\theta}$), la contrainte radial (σ_{rr}). Dans cette figure, le coté gauche montre les isothermes dans le liquide et le cristal séparées par des pas de 15 K. Les courbes d'iso-contrainte dans le cristal représentées à droite sont séparées par des pas de 2 MPa. Sur cette figure, on remarque le même phénomène déjà observé dans le cas purement élastique, la différence et surtout quantitative.

Pour les résultats obtenus dans la figure IV.30, qui illustre la variation de la contrainte de cisaillement σ_{rz} à différentes sections transversales et longitudinales du lingot de silicium, il est à constater que la valeur maximale calculée de la contrainte de compression σ_{rz} localisée dans la position (0.092 m, 0.05 m), est très large par rapport à la valeur maximale de la contrainte de tension σ_{rr} localisée dans la position (0.092 m, 0.24 m). Sa valeur maximale absolue est trois fois supérieure à cette dernière. En comparant avec le cas purement élastique, on constate que la contrainte de cisaillement a diminué sensiblement de la valeur maximum en valeur absolue de 4.9 MPa à 0.5 MPa dans le cas élasto-plastique. Donc le fait de relaxation par les dislocations est clairement visible sur la contrainte de cisaillement où on a injecté le terme plastique.

En ce qui concerne la contrainte axiale σ_{zz} , la figure IV.29 (b) qui illustre la répartition de la contrainte σ_{zz} le long du lingot, on remarque qu'il y a deux zones distinctes qui montrent que le cœur du lingot est en tension et la périphérie est en compression. Le maximum de la contrainte de tension est de l'ordre de 1.2 MPa en valeur absolue, localisé sur l'axe de symétrie à une hauteur de 0.16 m (Figure IV.30 (a)). Tandis que le maximum de la contrainte de compression, situé à une hauteur de 0.12 m sur le long de la périphérie est de 1.5 MPa en valeur absolue. Du point de vue grandeur, la valeur maximale calculée de la contrainte de compression σ_{zz} est presque équivalente à la valeur maximale de la contrainte de tension σ_{zz} . Les contraintes le long de l'interface et à l'extrémité sont quasiment nulles (Figure IV.31 (a)).

En comparant avec le cas d'un matériau de comportement élastique, il y a une légère différence de comportement du champ de contrainte entre les deux modèles avec un décalage des points chauds d'un millimètre dans le cas elasto-plastique. On constate aussi que la contrainte axiale σ_{zz} a diminuée d'un facteur légèrement supérieur à 6 du fait de la relaxation plastique (du point de vue grandeur et en valeur absolue, de la valeur maximum 9.7 MPa à 1.5 MPa).

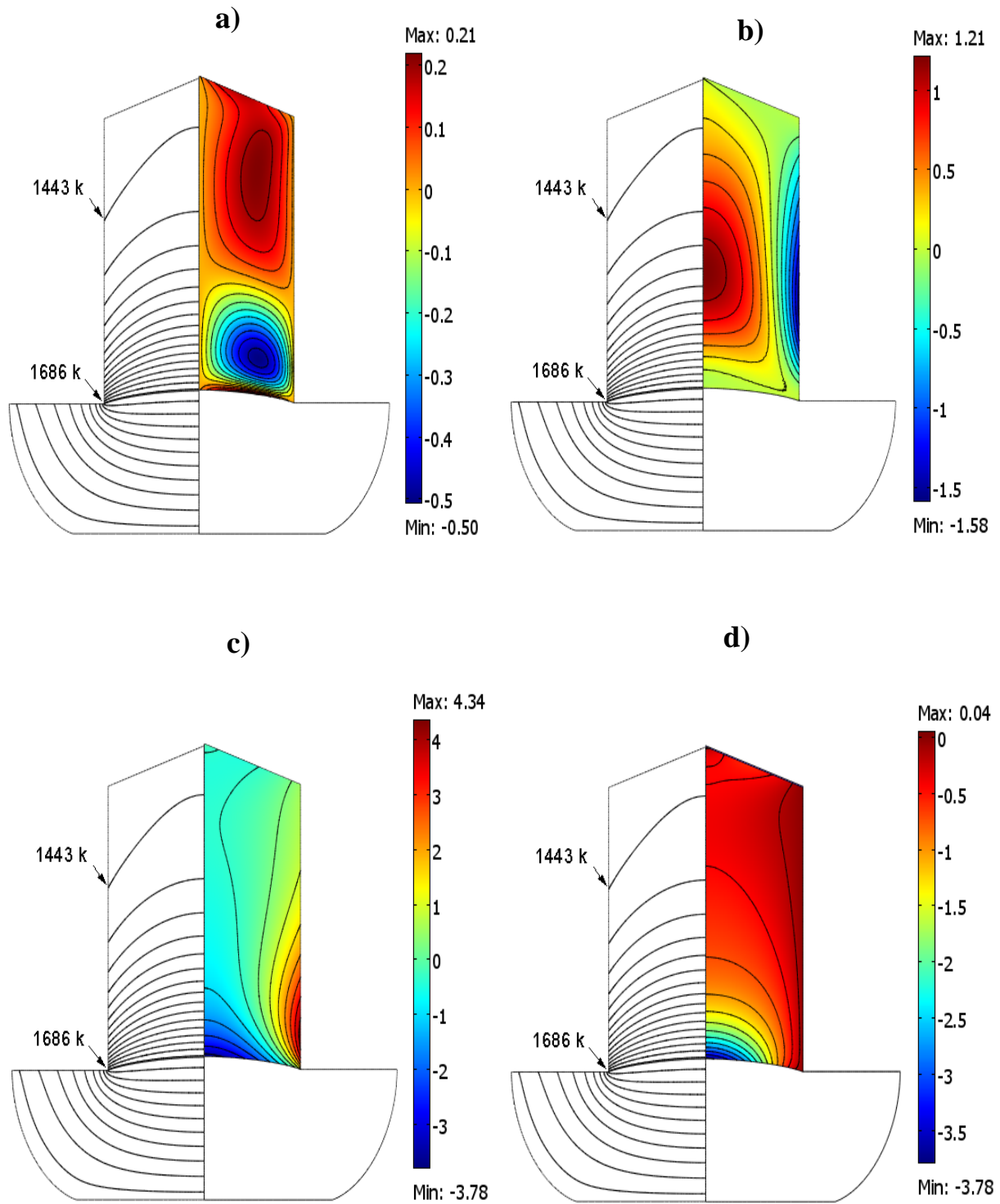


Figure IV.29 : Champs de température et les champs des quatre composantes de contrainte dans le cristal de silicium : a) contrainte de cisaillement (σ_{rz}), b) contrainte axiale (σ_{zz}) c) contrainte angulaire ($\sigma_{\theta\theta}$), d) contrainte radiale (σ_{rr})

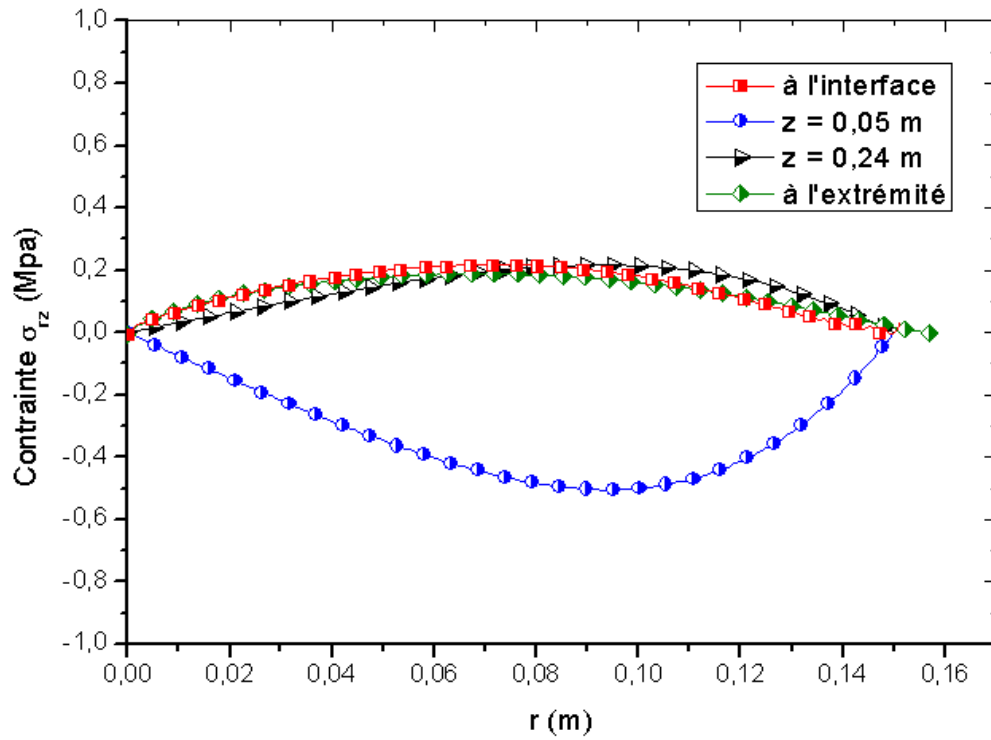


Figure IV.30 (a) : Variation suivant r de la contrainte cisaillement σ_{tz} pour 4 positions de z

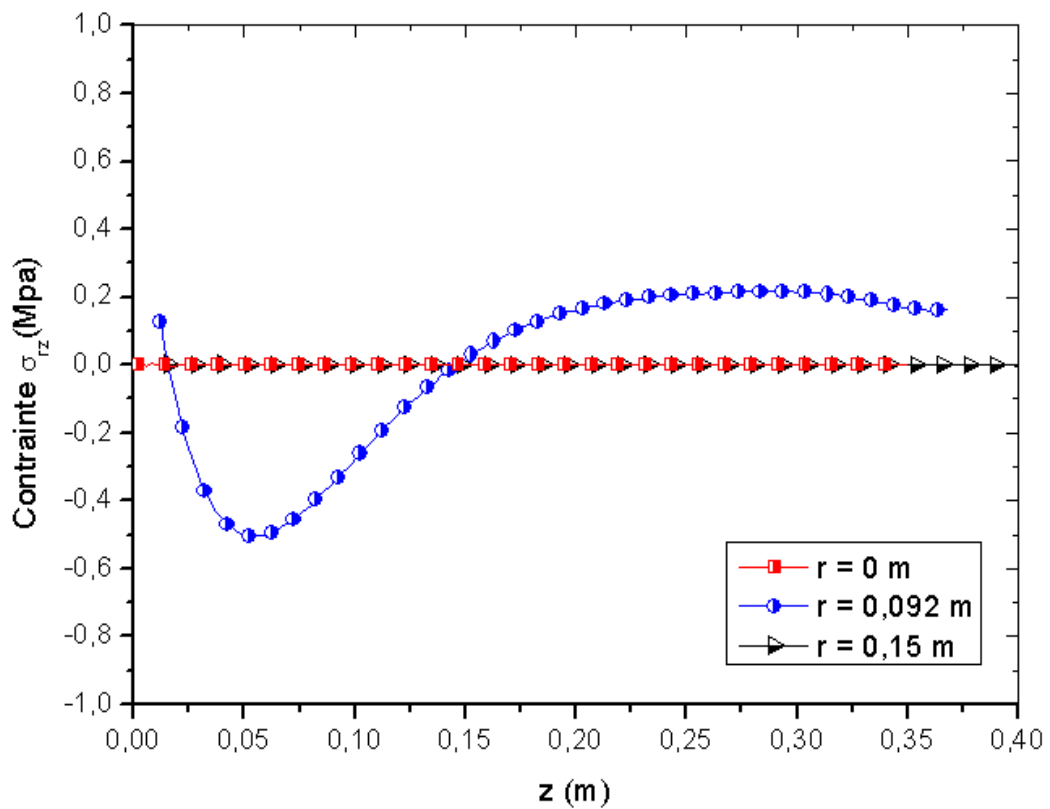


Figure IV.30 (b) : Variation suivant z de la contrainte cisaillement σ_{tz} pour 4 positions de r

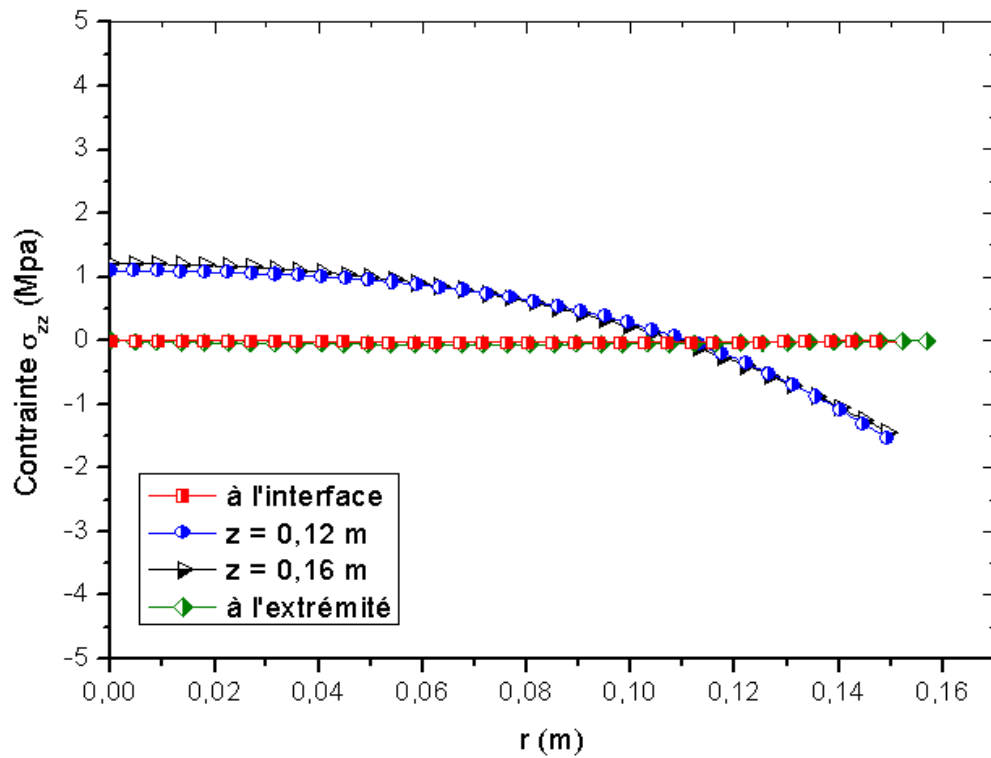


Figure IV.31 (a) : Variation suivant r de la contrainte axiale σ_{zz} pour 5 positions de z

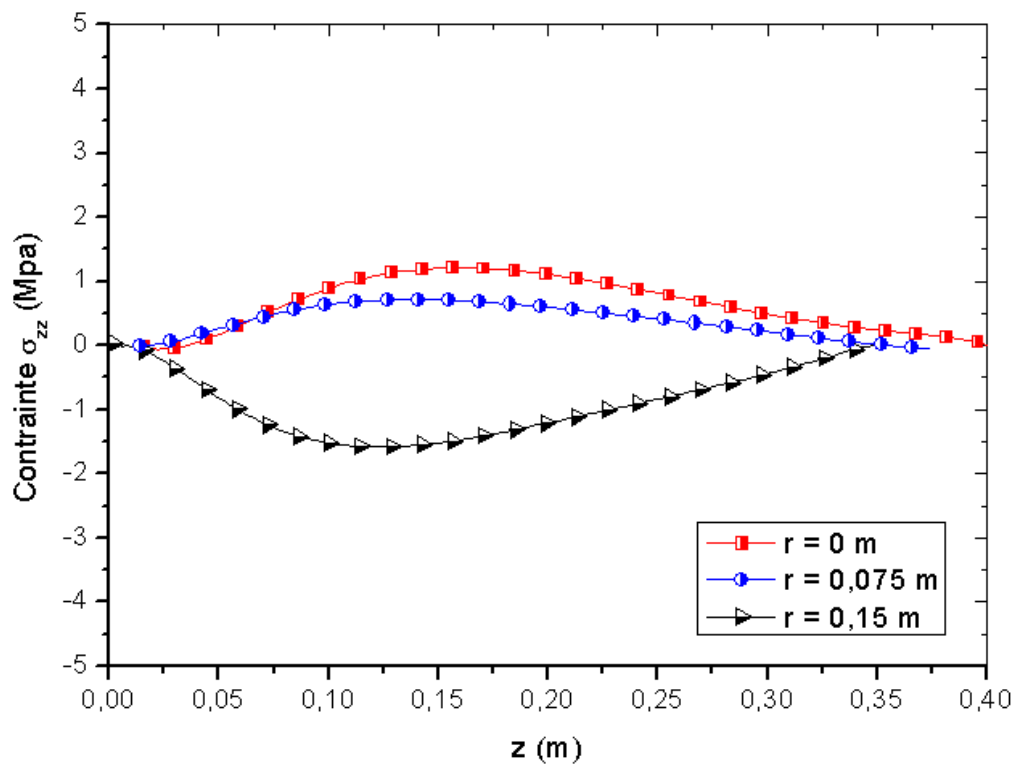


Figure IV.31 (b) : Variation suivant z de la contrainte axiale σ_{zz} pour 3 positions de r

Les évolutions de la figure IV.32 présentent le profil de la contrainte $\sigma_{\theta\theta}$ longitudinalement et transversalement successivement pour différents rayons et différentes hauteurs. On remarque que le cœur est en compression (avec un maxima dans le centre de l'ordre de -3.7 MPa) et le bord est en tension (avec un maxima localisé sur la périphérie à une hauteur de 0.04 m et de l'ordre de 4.3 MPa) dans le sens de l'angle θ selon la convention de signe. Dans le reste du lingot, la contrainte angulaire est relativement faible.

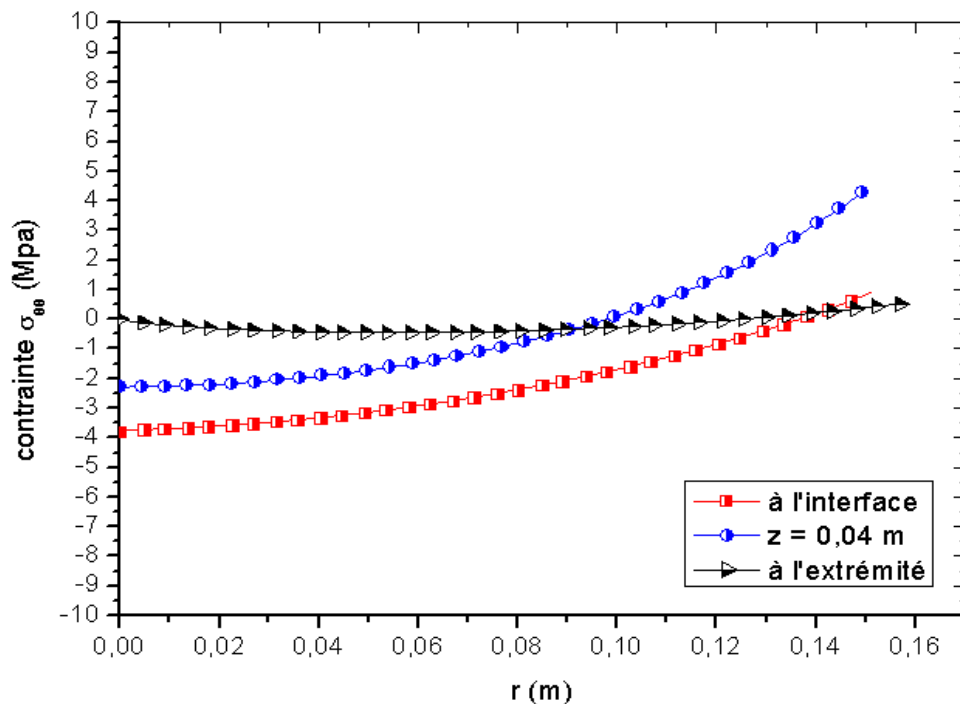


Figure IV.32 (a) : Variation suivant r de la contrainte axiale $\sigma_{\theta\theta}$ pour 3 positions de z

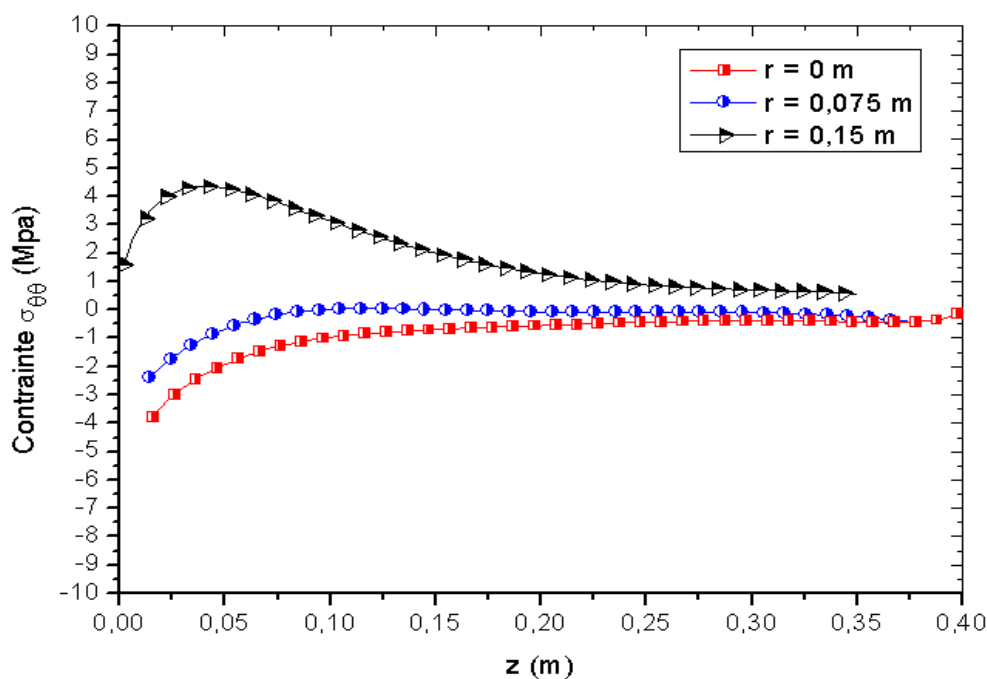


Figure IV.32 (b) : Variation suivant z de la contrainte axiale $\sigma_{\theta\theta}$ pour 3 positions de r

En comparant avec le cas du comportement élastique, on constate que du fait de la relaxation plastique, la valeur maximale de la contrainte angulaire $\sigma_{\theta\theta}$ a diminuée d'un facteur supérieur à 7, en valeur absolue, de la valeur maximale 32 MPa à 4.3 MPa.

Sur la figure IV.33, qui représente la variation de la contrainte (σ_{rr}) longitudinalement et transversalement, on constate que la contrainte est quasiment nulle le long de la périphérie ensuite elle devient négative aux autres niveaux dans le lingot. A son niveau le plus haut elle est de l'ordre de 3.8 MPa en valeur absolue, situé au centre de l'interface. Ceci témoigne que le silicium est compression selon la direction r. En comparant avec le cas purement élastique, on constate que la contrainte radiale a diminué d'un facteur supérieur à 6, en valeur absolue, de la valeur maximum 25.3 MPa à 3.8 MPa dans le cas élasto-plastique.

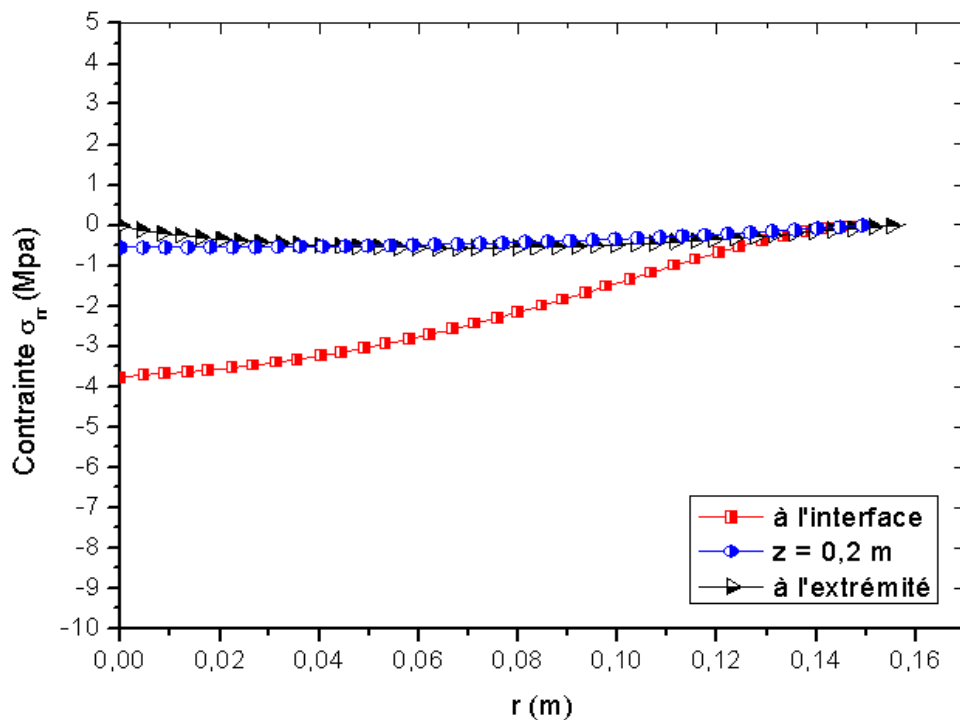


Figure IV.33 (a) : Variation suivant r de la contrainte axiale σ_{rr} pour 3 positions de z

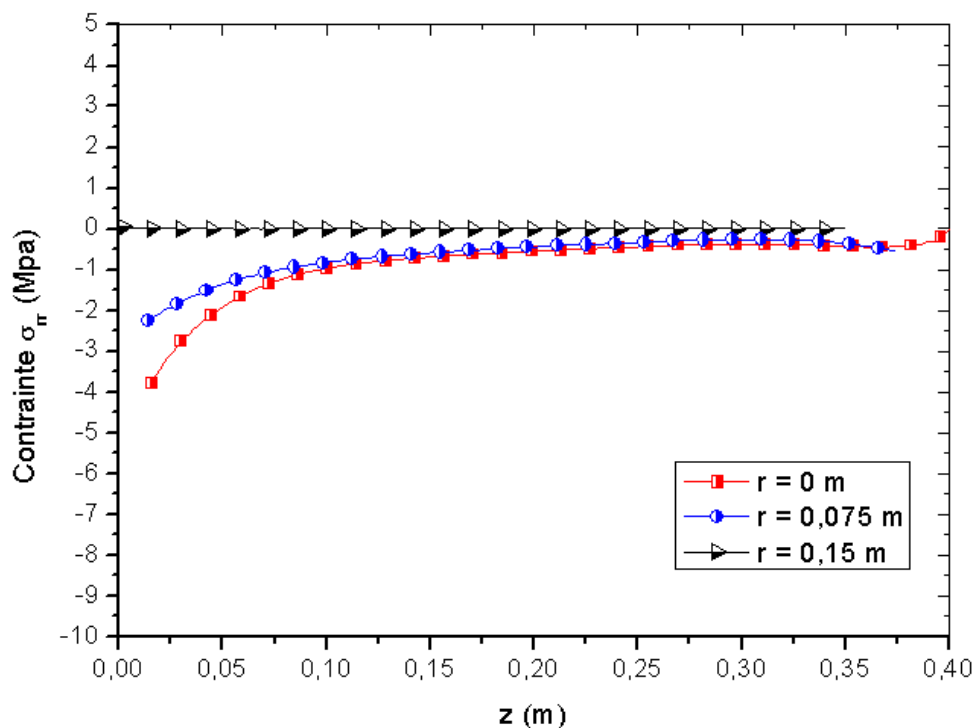


Figure IV.33 (b) : Variation suivant z de la contrainte axiale σ_{rr} pour 3 positions de r

IV.4.3 Analyse et comparaison entre les deux modèles de comportement

Pour mieux analyser la variation des valeurs des composantes de la contrainte pour les deux modèles de comportement nous présentons dans la figure IV.34 les valeurs maxima en valeur absolues de ces contraintes pour les deux modèles. Concernant le modèle élastique, nous pouvons remarquer qu'après retour à la température ambiante, les contraintes présentent les valeurs les plus importantes, se sont la contrainte angulaire ($\sigma_{\theta\theta}$) comme contrainte dominante et la contrainte radiale. Elles sont successivement de l'ordre de 32,4 et 25,3 MPa. Cela s'explique par le fait que le gradient de température radial est très important suivant l'axe r . Les contraintes résiduelles suivant les deux autres directions sont relativement faibles. Tandis que dans le cas d'un matériau élasto-plastique, les valeurs de ces deux contraintes deviennent proches, elles sont successivement de l'ordre de l'ordre de 3,8 et 4,3 MPa, témoignant d'une répartition plus homogène des composantes de contraintes. D'autre part, nous pouvons constater que le facteur de relaxation de la contrainte de cisaillement est le plus élevé en comparaison avec les contraintes principales ($\sigma_{\theta\theta}$), (σ_{rr}), (σ_{zz}). Pour la contrainte de cisaillement, il est légèrement inférieur à 10, et de l'ordre de 7,4, 6,7 et 6,2 successivement pour les contraintes ($\sigma_{\theta\theta}$), (σ_{rr}), (σ_{zz}). C'est l'effet de la contribution plastique.

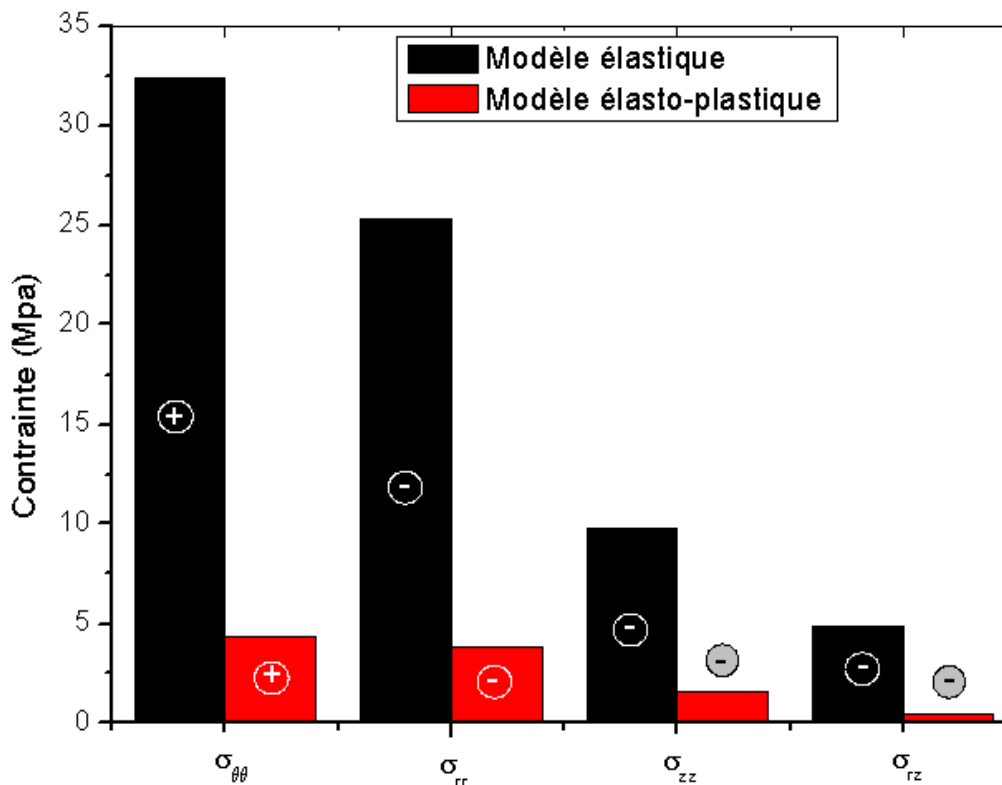


Figure IV.34 (b) : Variation des contraintes pour les deux modèles

D'autre part, nous pouvons constater aussi que les contraintes maximales sont transversales. Elles sont de traction et localisées principalement dans la zone périphérique du lingot de silicium. Qualitativement c'est le même résultat obtenu dans la littérature [77].

La figure IV.35, représente la variation de la contrainte de cisaillement suivant r , le long de la ligne la plus chaude, pour les deux modèles où l'effet de la relaxation est clairement visible sur la contrainte de cisaillement où on a injecté le terme plastique. Il est évident que le comportement de la contrainte est le même pour les deux cas, mais on remarque clairement que cette contrainte a diminuer sensiblement, sa valeur maximum en valeur absolue été de l'ordre de 4.8 MPa dans le cas d'un matériau élastique et est devenue égale à 0.5 MPa dans le cas du modèle élasto-plastique. C'est le résultat de la relaxation par multiplication de dislocations qui se traduit par des glissements de plans cristallins qui compensent cette contrainte résiduelle.

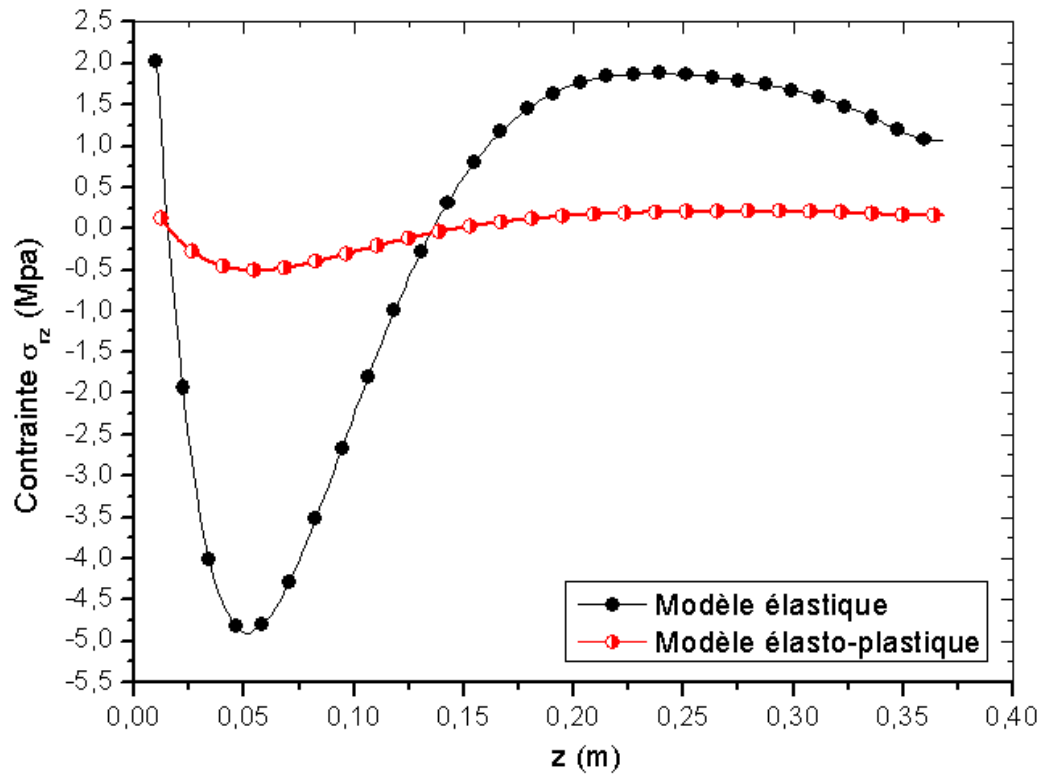


Figure IV.35 : Variation de la contrainte σ_{zz} suivant z pour les deux modèles de comportement

Conclusion et Perspectives

Conclusion et perspectives

Ce travail concerne la prédiction numérique du comportement thermomécanique du silicium monocristallin de large diamètre (300 mm), élaboré par le procédé de czochralski. En se basant sur une analyse par éléments finis, plusieurs modèles de simulation ont été développés sur le code de calcul numérique FEMLAB 32.a.

Grâce à un modèle numérique bidimensionnel de l'écoulement du fluide et de transfert de chaleur avec solidification développé sur FEMLAB, nous avons pu simuler le champ de température pendant la croissance du cristal. En adoptant le modèle déformation plane à partir des champs de température déjà calculé, on a pu déterminer la distribution des contraintes thermo élastiques dans le lingot de silicium. Ces résultats ont permis de suivre l'évolution du gradient thermique au cours de sa croissance. Celui-ci est très important au centre de l'interface solide/liquide et sur la périphérie du cristal. Ce gradient thermique va être responsable de l'apparition d'un gradient de déformation qui peut générer des zones de concentrations de contraintes (points chauds) dans ces endroits. Nous avons pu constater que la contrainte thermique au bord est plus grande qu'au centre de l'interface.

D'après l'analyse des composantes de contrainte, nous avons constaté que les contraintes maximales sont angulaires. Elles sont de traction et localisées principalement dans la zone périphérique du lingot de silicium. Du point de vu qualitatif, nous avons obtenu le même résultat que ceux rencontrés dans la littérature.

Les résultats qui concernent l'effet de différentes longueurs du lingot de silicium sur la forme de l'interface solide / liquide et la répartition des contraintes thermiques dans les cristaux de silicium, montrent que la forme de l'interface solide / liquide devient très concave et que la valeur maximale de la contrainte thermique dans le cristal, diminue remarquablement pendant la croissance du lingot de silicium. L'influence de la vitesse de tirage sur la forme d'interface et la valeur de la contrainte est relativement plus grande ainsi que l'augmentation de la contrainte thermique a une évolution linéaire, dépendante de la valeur de la vitesse de tirage. La croissance de l'interface devient très concave et la contrainte thermique augmente légèrement avec l'augmentation de la vitesse de rotation du cristal. En outre, l'influence de la rotation du creuset sur la forme d'interface et de la contrainte thermique est insignifiante. Aussi, la valeur maximale de la contrainte thermique dans le cristal dépend linéairement de l'augmentation de la vitesse de rotation du creuset ou celle du cristal.

Le modèle génétique des réseaux de neurones artificiels RNA a été employé pour optimiser les paramètres du processus czochralski pour obtenir un état de contrainte minimal. Les valeurs optimisées de 2.3 mm/h, de 26.7 tr/min et 4.2 tr/min ont été

obtenues respectivement, pour la vitesse de tirage du cristal, la vitesse de rotation du cristal et celle du creuset, pour un cristal de grande dimension.

Le modèle proposé, en considérant une loi de comportement élasto-plastique d'Alexander et Haasen, a permis de prédire l'évolution des contraintes au cours de la croissance des monocristaux de silicium. Du fait de la relaxation de ces contraintes, due à la multiplication des dislocations, on a constaté que la contrainte équivalente de Von Mises a sensiblement diminuée.

Dans le cas d'un matériau élasto-plastique, on a remarqué une répartition plus homogène des composantes de contraintes. D'autre part, nous avons constaté que le facteur de relaxation de la contrainte de cisaillement est le plus élevé en comparaison aux contraintes principales et il est légèrement supérieur à 10. Ceci est le résultat de la relaxation par multiplication de dislocations, qui se traduit par des glissements de plans cristallins, qui compensent cette contrainte résiduelle. La comparaison des résultats numérique en termes de contraintes résiduelles, avec des données bibliographiques a permis une validation qualitative de la réponse du modèle développé.

Ce travail, réalisé au Laboratoire de Mécanique de l'Université Mentouri Constantine, dans le cadre d'un travail de recherche sur le comportement thermomécanique du silicium, nous a permis d'optimiser les paramètres de tirage, pour diminuer les contraintes thermiques qui résultent lors du tirage et d'améliorer la qualité des lingots dans une production industrielle du silicium photovoltaïque.

A l'issue de ce travail, nous pouvons relever quelques observations et présenter quelques perspectives.

- Il serait intéressant de développer une procédure sur Femlab permettant d'introduire dans le modèle, un maillage adaptatif qui dépendra de la position de l'interface au cours de la solidification. Cette démarche permettra de diminuer la taille du problème notamment en terme de temps de calcul et d'espace mémoire nécessaire pour la résolution numérique du problème.
- Etendre l'étude développée, en considérant d'autres paramètres qui influent sur la réponse thermique et mécanique, tels que la température ambiante, la dimension du creuset, les propriétés du silicium, etc. Cette perspective peut être intéressante à explorer au niveau de la modélisation du processus de croissance Czochralski.
- Finalement, des calculs tridimensionnels pourraient également être réalisés avec les mêmes modèles afin de reproduire une situation plus proche des conditions de croissance réelle durant le procédé de tirage Czochralski.

Bibliographie

Bibliographie

- [1] F. Lévy, “Physique et technologie des semi-conducteurs (Traité des matériaux)”, Edition Broché, 1994.
- [2] A.S. Jordan, R.Caruso and A.R. Von Neida, 1984, the theory and practice of dislocation reduction in GaAs and Inp”, J. Crystal Growth, vol.70, pp.555-573.
- [3] A.S. Jordan, 1985, “some thermal and mechanical properties of InP Essential crystal growth modelling”, J. Crystal Growth, vol. 71, pp.559-565.
- [4] N. Miyazaki, “Development of a thermal stress analysis system for anisotropic single crystal growth”, J. Crystal. Growth 236 (2002), pp. 455– 465.
- [5] A.S. Jordan, R.Caruso and A.R. Von Neida, 1980, “A thermoelastic analysis of dislocation generation in pulled GaAs crystals” Bell system Tech. J, Vol.59, pp.593-637.
- [6] A.S. Jordan, A.R. Von Neida, R.Caruso and, 1981, “a comparative study of thermal stress induced dislocation in pulled GaAs, and Si crystals”, J. Appl. vol.52, pp.3331-3336.
- [7] T. Tsukada, M. Hozawa, N. Imanishi, “Effect of a radiation shield on thermal stress field during Czochralski crystal growth of silicon”, J. Chem. Eng. Jpn 23 (1990), 186.
- [8] K. Tanahash, M. kikuchi, Concentration of point defects changed by thermal stress in growing CZ silicon crystal: effect of the growth rate, J. Cryst. Growth, 210 (2000), pp. 45-48.
- [9] K. Takano, Y. Shiraishi, J. Matsubara, T. Iida, N. Takase, N. Machida, M. Kuramoto, H. Yamagishi, “Global simulation of the CZ silicon crystal growth up to 400 mm in diameter”. J. Cryst. Growth 229 (2001), pp. 26-30.
- [10] Software Comsol Multiphysics Femlab 32.a, www.comsol.com.
- [11] H. Alexander and P. Haasen, “Dislocations and plastic flow in the diamond structure”, Solid State Physics. Vol. 22, 1969, p. 27-158.
- [12] Report IEA (International Energy Agency). “Trends in photovoltaic application”. PVPS T1- 15, 2006, p6.

Bibliographie

- [13] M .Tanaka., S .Okamoto and S. Tsuge, “Development of HIT solar cells with more than 21 % conversion efficiency and commercialization of highest performance HIT module”, Proc. of the 3rd World Conference and Exhibition on Photovoltaics Solar Energy Conversion, Osaka, Japan, 2003, pp. 1-4.
- [14] W. P .Mulligan, D.H.Rose, M.J.Cudzinovic, et al “efficiency by Sun power”. Proc. of 19th European Photovoltaic Paris, France, 2004, pp. 387-390.
- [15] J.Kalejs, B.Bathey, J.Cao, “EFG Ribbon Photovoltaic Manufacturing”, Proc. of the NCPV, 2003, pp. 600-603.
- [16] A .Schônecker., L.J.Laas, A .Gutjahr., P.Wyers, “ Progress in high-speed crystalline silicon wafer man Photovoltaic” Specialists Conference, New Orleans, USA, 2002.
- [17] B.Von Roedern, “Status of Amorphous and Crystalline Thin-Film Silicon Solar Cell Activities”, Proc. Of the NCPV and Solar Program Review Meeting 2003, pp. 552-555.
- [18] B.O’Regan, M. Gratzel, “A low-cost, high-efficiency solar cell based on dye-sensitized colloidal TiO₂ films”, Nature, 1991, vol. 353, pp. 737-740.
- [19] P. Peumans and S. R Forrest, “Very-high-efficiency double-heterostructure copper phthalocyanine C₆₀ photovoltaic cells”, Applied Physics Letters, 2001, vol. 79 (1), pp. 126-128.
- [20] P.H. Haumesser, Thèse de doctorat de l’Université Pierre et Marie Curie, “Elaboration par croissance Czochralski, caractérisation spectroscopique et propriétés laser de monocristaux dopés par l’Ytterbium“, 2000.
- [21] G.C. Joyce, D.T.J. Hurle et Q.QA.E. Vaughan, “Novel Development of the Weighing Method for Automatic Czochralski Crystal Growth of Semiconductors”, Journal of Crystal Growth, vol. 1, p.132, (1993).
- [22] <http://www.lei.ucl.ac.be/~matagne/SOLAIRE/SEM13/S13P11.HTM>.
- [23] http://www.silfex.com/products_2_0.html
- [24] http://people.seas.harvard.edu/~jones/es154/lectures/lecture_2/materials/materials.html
- [25] H.Mathieu, « Physique des semi-conducteurs et des composants électroniques », Masson, Paris, 1996.

Bibliographie

- [26] S. M. SZE, "Physics of Semiconductor Devices", John Wiley & Sons, 1981.
- [27] Weertman, "Physical Metalurgy" R.W.Cahn North Holland Amsterdam, (1970), p 983.
- [28] Jean-Paul Bailon, « Des matériaux », Edition Relié, 2000.
- [29] J.C. Brice, "Facet formation during crystal pulling" J. Crystal Growth, vol.6 (1970) p. 205.
- [30] T. Duffar, "Cristallogenèse", cours INPG-ENSEEG.
- [31] A. Verneuil, "Annales de Chimie et de Physique" 8e série III (1904), 20.
- [32] J. Czochralski, Z. Physik, Chem. 92 (1918), 219.
- [33] G.R. Teal et J.B. Little, "Growth of germanium single crystals". Phys. Rev. 78 (1950) 647.
- [34] A.W.A. Hart, Czochralski Crystal Growth, Leiden Univ. Diss. 1978.
- [35] F.E. Rosenberger, Fundamentals of Crystal Growth, Springer 1979.
- [36] D.T.J. Hurle, Crystal Pulling from the Melt, Springer-Verlag 1993.
- [37] D.T.J. Hurle, Handbook of Crystal Growth vol. A-B, North-Holland 1993-1994.
- [38] R. Fornari, Theoretical and Technological Aspects of Crystal Growth, Trans. Tech. Publ. 1998.
- [39] H.J. Scheel and T. Fukuda, Crystal Growth Technology, John Wiley & Sons 2003.
- [40] P. Capper, Bulk Crystal Growth of Electronic, Optical and Optoelectronic Materials, John Wiley & Sons 2005.
- [41] M. H. Tavakoli, Numerical analysis of seeding process during Czochralski growth of oxide single crystals, these doctoral, University Cottbus, 2006.
- [42] E.L. Allgower and K. Georg, Introduction to Numerical Continuation Methods, SIAM 2003.

Bibliographie

- [43] M. Rappaz, M. Bellet and M. Deville, Numerical Modeling in Materials Science and Engineering, Springer-Verlag 2003.
- [44] A.F. Mills, Heat and Mass Transfer, IRWIN 1995.
- [45] R. Siegal, J.R.Howel, thermal radiation heat transfert, Mc Graw-Hill, New York (1972).
- [46] S. Miyasawa, 14th int. Conf. on defects in semi conductors, material science forum, v1. 10, p1. trans. Tech. pub, Ed. H.J. Van Barardelben, (1986).
- [47] J.P.Henry, F.Parsy, cours d'élasticité, Dunod (1982).
- [48] R.A.Laudise, the growth of single crystals. Solid state physical electronics series, prentice-Hall-Inc (1970).
- [49] J.P.Hirth, J.Lothe, Theory of dislocations, Wiley Interscience Publication.
- [50] T. Kituno et al, Generation rule of slip dislocation in LEC GaAs crystal, proc. Conf. on semi-insulating III-V materials, Hakone (1986).
- [51] D.T.J.Hurle 1983, convective transport in melt growth systems", J. Crystal Growth, vol.65, pp.124-132.
- [52] Y.T.Chan.H.J.Gibeling and H.L.Grubin, 1988, "Numerical Simulation of the Czochralski Growth," J.Appl. Phys., Vol. 64, pp. 1425-1439.
- [53] R.A. Brown, 1988, "Theory of transport process in Single Crystal Growth from the Melt", AICHE J., Vol. 43, pp. 881-911.
- [54] G. Muller, 1988, "Convection and in homogeneities in crystal growth from melt," Crystals, Vol. 12.12, Springer-Verlag, Berlin.
- [55] V. Parasad, H. Zhang, A. Anselmo, 1997, "transport phenomena in Czochralski Cristal Growth Processes", Advance in Heat Transfer, Vol.30, pp.313-435, Academia press.
- [56] J.J. Derby and R.A.Brown, 1986, "Thermal-Capillary Analysis of Czochralski and liquid encapsulated czochralski crystal growth I. Simulation", J. Crystal growth, Vol.74, pp. 605-624.
- [57] T.A. Kinney, D.E.Bornside and R.A. Brown, 1993, "Quantitative assessment of an integrated Hydrodynamic thermal-capillary model for large-diameter

- czochralski growth of silicon: comparison of predicted temperature field with experiment”, *J. Crystal growth*, VOL. 126, pp. 413-434.
- [58] T.A. Kinney, D.E. Bornside and R.A. Brown, 1993, “Application of turbulence modelling to the integrated Hydrodynamic thermal-capillary model of czochralski crystal growth of silicon”, *J. Crystal growth*, VOL. 132, pp. 551-574.
- [59] H. Kopetsch, 1989, “Numerical simulation of the czochralski Bulk flow of silicon on a domain confined by a moving crystal-melt interface and curved melt-gas meniscus”, *physico chemical hydrodynamics*, Vol. 11, pp. 357-375.
- [60] H. Kopetsch, 1990, “Numerical simulation of interface inversion in czochralski growth of oxide crystals”, Vol. 102, pp. 505-528.
- [61] Q. Xiao and J. J. Derby, “three-dimensional melt flows in czochralski oxide growth: high-resolution, massively parallel finite element computation”, *J. Cryst. Growth* 152, pp.169-181(1994).
- [62] K. Koai, A. Seidel, H.J. Leister, G. Muller and A. Kohler. 1994. Modelling of thermal fluid flow in the liquid encapsulated czochralski process and comparison with experiment, *J. Crystal growth*, Vol. 137, pp. 41-47.
- [63] H. Zhang, 1993. Doctoral dissertation, “A multizone adaptive grid generation technique for simulation of moving and free boundary problems, dep. Of Mech. Engineering, polytechnic University.
- [64] H. Zhang and V. Parasad, 1995, “A multizone adaptive process model for low and high pressure crystal growth”, *J. Crystal growth*, Vol. 155, pp. 47- 65
- [65] H. Zhang and V. Parasad, 1995, “A multizone adaptive simulation high pressure crystal growth”, ASME/JSME, thermal engineering joint conference Maui, Hawaii.
- [66] A. Anselmo, V. Parasad, J. Koziol and K. P. Gupta, 1993, “Oscillatory Convection in low Aspect Ratio Czochralski Melt”, *J. Crystal growth*, Vol. 134, pp. 116-140.
- [67] F. Dupret and N. Van den Bogaert. 1994, “modelling Bridgman czochralski growth”, in: *handbook of crystal growth*, 2b, (D.T.J. Hurle, ed.) North Holland, New York.
- [68] W.R. Wilcox and L.D. Fullmer. 1965, “Turbulent free convection in czochralski crystal growth”, *J. Appl. Phys*, vol. 36, pp. 2201-2206.

Bibliographie

- [69] B. Cockayne and M.P.gates, 1967, “growth striation in vertically pulled oxide and fluoride single crystals”, *J. Mat. Sci.* vol .2.pp. 118-123.
- [70] B.Cockayne, M. Cesswas, J.G. Plant and A.W. Vers, 1969, “ferroelectric Domains and Growth striate in barium sodium niobate single crystals”, *J. Mat. Sci.* vol. 4, pp. 565-569.
- [71] K.M. Kim, A.F. Witt and H.C. Gatos, 1972, “crystal growth from the melt under destabilizing thermal gradients”, *J. Electrochem. Soc.*, vol. 119, pp. 1218-1226.
- [72] J.RE. Carruthers and A.F. Witt, 1975, Transient segregation effects in czochralski crystal growth” in *crystal growth and characterization*. North Holland Publication.
- [73] K.M. Kim, A.F. Witt M. Lichtenstriger and H.C. gatos, 1978, “Quantitative analysis of the effects of destabilizing vertical thermal gradients on crystal growth and segregation: Ga-doped Ge”, *J. Electrochem. Soc.*, vol. 125, pp. 475-480.
- [74] H. Kolker, 1980, “the behaviour of nonrotational striations in silicon”, *J. Crystal Growth*, vol.50, pp.852-858.
- [75] K. Kakimoto, M. Eguchi, H. Watanabe and T. Hibiya, 1988, “Natural and forced convection of molten silicon during czochralski single crystal growth”, *J. Crystal growth*, vol. 94, pp. 412-420.
- [76] J.R. Ristorcelli, and J.L.Lumley, 1992,” instabilities, transition and turbulence in the czochralski crystal melt”, *J. Crystal growth*, vol. 115, pp. 447-260.
- [77] S. kobayashi, S. Miyahara, T. Fujiwara, T. Kubo and H. Fujiwara, 1991, “Turbulence heat transfer through the melt in silicon czochralski growth”, *J. Crystal Growth*, vol.109, pp. 149-154.
- [78] G. Neumann, , 1990, Three-dimensional numerical simulation of buoyancy-driven convection in vertical cylinders heated from below, *J. Fluid Mech.*, vol. 214, pp. 559.
- [79] Wanschura, M., Kuhlmann, H.C. and Rath, H.J., 1996, Three-dimensional instability of axisymmetric buoyant convection in cylinder heated from below, *J. Fluid Mech.*, vol. 326, pp. 339.

Bibliographie

- [80] Touihri, R., BenHadid, H. and Henry, D., 1999, On the onset of convective instabilities in cylindrical cavities heated from below. I. pure thermal case, *Phys. Fluids*, vol. 11, pp. 2078.
- [81] Vrentas, J.S., Narayanan, R. and Agrawal, S.S., 1981, Free surface convection in bounded cylindrical geometry, *Int. J. Heat Mass Transfer*, vol. 24(9), pp. 1513.
- [82] Wagner, C., Friedrich, R. and Narayanan, R., 1994, Comments on the numerical investigation of Rayleigh and Marangoni convection in a vertical circular cylinder, *Phys. Fluids*, vol. 6(4), pp.1425.
- [83] Dauby, P.C., Lebon, G. and Bouhy, E., 1997, Linear Bénard-Marangoni instability in rigid circular containers, *Phys. Review E*, vol. 56(1), pp. 520.
- [84] Siegel, R. and Howell, J.R., 1992, Thermal radiation heat transfer, 3rd Edition, Taylor & Francis.
- [85] Modest, M.F., 1993, Radiative heat transfer, McGraw-Hill, Inc., New York.
- [86] Shu, Y., Li, B.Q. and Lynn, K.G., 2004, Numerical modeling of internal radiation and solidification in semitransparent melts in magnetic field, *Num. Heat Transfer, Part A*, vol. 45, pp. 957.
- [87] Larson, D.W., 1981, Enclosed radiation and turbulent natural convection induced by a fire, *Numerical Method in Heat transfer* (Edited by Lewis, R.W., Morgan, K. and Zienkiewicz, O.C.), Wiley, New York.
- [88] Chang, L.C., Yang, K.T. and Lloyd, J.R., 1983, Radiation-natural convection interaction in two-dimensional complex enclosures, *ASME J. Heat Transfer*, vol. 105, pp. 89.
- [89] Desreyaud, G. and Lauriat, G., 1985, Natural convection of radiating fluid in a vertical layer, *ASME J. Heat Transfer*, vol. 107, pp. 710.
- [90] Webb, B.W. and Viskanta, R., 1987, Radiation-induced buoyancy-driven flow in rectangular enclosures: experiments and analysis, *ASME J. Heat Transfer*, vol. 109, pp. 427.
- [91] Yang, K.T., 1986, Numerical modeling of natural convection-radiation interactions in enclosures, *Heat Transfer 1986: Proc. Eighth Int. Heat Transfer Conf.*, vol. 1 pp. 131-140, Hemisphere, Washington, DC.

Bibliographie

- [92] Tan, Z. and Howell, J.R., 1991, Combined radiation and natural convection in a two dimensional participating square medium, *Int. J. Heat Mass Transfer*, vol. 34(3), pp. 785.
- [93] W. Shyy, Y. Pang, G.B. Hunter, D.Y. Wai and M.H. Chen, 1993, „effect of turbulent heat transfer on continuous ingot solidification”, *J. Crystal Growth*, vol.70, pp.555-573.
- [94] P.J. Prescott and F.P. Incorpera, 1995,” the effect of turbulence on solidification of binary metal alloy with electromagnetic stirring”, *J. Heat transfer*, vol. 117, pp. 717-724.
- [95] R.B. Brid, W.E. Stewart and E.N. Lightfoor, 1982, transport phenomena, john willey, New York.
- [96] H.Q. Yang, K.T. Yang and J.R. Lloyd, 1988, “rotational effects on natural convection in a horizontal cylinder”, *AICACHE J.*, vol. 34. pp. 1627-1633.
- [97] F. Ladeinde and K.E.Torrance, 1991, “convection in rotating, Horizontal cylinder with radial and normal gravity forces”, *J. Fluid Mech*, vol. 228, pp.361-385.
- [98] J.W. Moody, 1986,” oxygen in czochralski crystals and melts-A review”, *semiconductor silicon 1986*, pp. 100-155, the electrochemical society.
- [99] S. Kobayashi, 1990, “heat transfer through the melt in a silicon czochralski process”, *J. Crystal growth*, vol. 99, pp. 692-706.
- [100] H. Hirata and K. Hoshikawa, “Oxygen solubility and its temperature dependence in silicon melt in equilibrium with solid silica”. *J. Crystal growth*, 106, 657 (1990).
- [101] K.M. Kim and W.E. Langlois, “Semiconductor silicon”, *Proc. 6th Intern. Symp. On Silicon Materials Science and Technology*, Electrochemical Society, Pennington, 1990, pp. 81–93.
- [102]Togawa.S, Huang. X, Izunone. K, Terashima. K, kimura.s, 1995, “oxygen transport analysis in czochralski silicon melt by considering the oxygen evaporation from the melt surface”, *J. Crystal growth*, vol. 148, pp. 70-78.
- [103]K.W. Yi, K. Kakimoto, M. Eguchi and H. Noguchi, 1996,” Oxygen transport Mechanism in Si melt during single crystal growth in the czochralski system”, *J. Crystal growth*, vol. 165, pp.359-361.

Bibliographie

- [104] S.V. Patankar., Numerical Heat Transfer and Fluid Flow, Hemisphere, Wash-ington DC, (1980), Mc Grow Hill.
- [105] T. Zhang, F.Ladeinde, V. Prasad, 1999, "Turbulant convection in czochralski silicon melt ", J. of Heat transfer, vol. 121, pp.1027-1040.
- [106] T. Zhang, G.X. Wang, H. Zhang, F.Ladeinde, V. Prasad, 1999, "Turbulant transport of oxygen in the czochralski growth of large silicon crystals", J. Crystal growth, vol. 198/199, pp.141-146.
- [107] N. Kobayashi and T. Iwaki, 1985, a thermoelastic analysis of the thermal stress produced in a semi-infinite cylindrical single crystal during the czochralski growth, J. Crystal Growth, vol.73, pp.96-110.
- [108] J. C. Lambropoulos, 1987, "stresses near the solid-liquid interface during the growth of a czochralski crystal", Journal of Crystal Growth 80, pp. 245-256.
- [109] G.O. Meduoye, K.E.Evans and D.J. Bacon, 1989, "Modeling of the growth of the LEC technique II. Thermal stress distribution and influence of interface shape", J. Crystal Growth, vol.97, pp.709-719.
- [110] G.O. Meduoye, D.J. Bacon, K.E.Evans and, 1991, "computer modeling of temperature and stress distribution in LEC-Grown GaAs crystals", J. Crystal Growth, vol.108, pp.627-636.
- [111] K.W. Kelly, K. Koai and S. Motakef, 1991, "model-based control of thermal stress during LEC Growth of GaAs I. Validation of thermal model", J. Crystal Growth, vol.113, pp.254-264.
- [112] K. Koai, 1990, doctoral dissertation, "model-based thermal stress control of LEC GaAs bulk crystal growth", dept. of mech. Engineering. MIT.
- [113] S. Motakef and A.F. Witt, 1987, "thermoelastic analysis of GaAs in LEC growth configuration", J. Crystal Growth, vol.80, pp.37-50.
- [114] F.Dupret, P.Necodeme and Y.Ryckmans, 1989, "Numerical method for reducing stress level in GaAs crystals", J. Crystal Growth, vol.97, pp.162-172.
- [115] F.Dupret, P.Necodeme and Y.Ryckmans, P.Wouters and M.J.Crochet, 1990, "global modelling of heat mass transfer in crystal growth furnaces", Int. J. heat mass transfer, vol.33, pp.1849-1871.

Bibliographie

- [116] B.E.Bornside, T.A.Kinney and R.A.Brown, 1991, “minimization of thermoelastic stress in czochralski grown silicon: application of the integrated system model”, *J. Crystal Growth*, vol.108, pp.779-805.
- [117] N. Imaishi, T. Tsukada, M. Hozawa, Y. Okano and A. Hirata, 1992, “Numerical study of the czochralski growth of oxide single crystal”, *heat and mass transfer in material processing*, hemisphere publishing corporation, pp. 123-136.
- [118] GAO Yu, T. Hailing, W. Qigang, D. Xiaolin, and X. Qinghua, Comparison of measurements and simulation results in 300 mm CZ silicon crystal growth, *Rare Metals*. 26 (6), (2007), pp. 607-610.
- [119] N. Miyazaki, S. Hagihara and T. Munakata, *J. Crystal Growth*, vol.106 (1990), pp. 149.
- [120] N. Miyazaki, H. Uchida, S. Hagihara and T. Munakata, *J. Crystal Growth* vol. 113 (1991), pp. 227.
- [121] W. Nakayama and H. Masaki, in: *Heat Transfer -1986*, Vol. 4 (Hemisphere, 1986) pp. 1755.
- [122] GAO Y , XIAO Q , ZHOU Q , DAI X , and TU H, Effect of thermal shield and gas flow on thermal elastic stresses in 300 mm silicon crystal, *J. RARE METALS*, Vol. 25, 2006, pp .45.
- [123] C. SCHVEZOV, I.V. SAMARASEKERA and F. WEINBERG, “mathematical modelling of the liquid encapsulated czochralski growth”, *Journal of Crystal Growth*, vol. 84 (1987), pp. 219—230.
- [124] N. Miyazaki, H.Uchida, T. Munakata, K. Fujioka, Y. Sugino, “Thermal stress analysis of silicon bulk single crystal during Czochralski growth”, *J. Crystal. Growth* 125 (1992), pp. 102-111.
- [125] A. Muiznieks, G. Raming, A. Muhlbauer, J. Virbulis, B. Hanna, W.v. Ammon, Stress-induced dislocation generation in large FZ- and CZ-silicon single crystals}numerical model and qualitative considerations, *J. Crystal Growth* 230 (2001) 305–313.
- [126] G. SZABO Thermal strain during czochralski growth, *Journal of Crystal Growth* 73 (1985) pp. 131-141.
- [127] J. Volkl, G. Muller, “Analysis of thermally induced stress in the LEC growth of InP crystals”, *European materials research society symposia proceedings*, vol. 16, (1987), pp.141-150.

Bibliographie

- [128] J. Volkl, G. Muller, A new model for the calculation of dislocation formation in semiconductor melt growth by taking into account the dynamics of plastic deformation, *J. Crystal Growth* 97 (1989) 136-145.
- [129] J. Volkl, 1994, “stress in the cooling crystal”, *Handbook of crystal growth*, vol. 2, pp. 823-861.
- [130] D. Maroudas and R.A. Brown, 1991, “on the prediction of dislocation formation in semiconductor crystals grown from the melt: analysis of haasen model for plastic deformation dynamics”, *J. Crystal growth*, vol. 108, pp. 399-415.
- [131] S. Motakef, 1991, “fundamental consideration in Creep-based determination of dislocation density in semiconductors grown from the melt”, *J. Crystal growth*, vol. 114, pp.47-58.
- [132] B.A. boley, G.H.weiner “theory of thermal stress”, Krieger EDITOR (1968).
- [133] O. C. Zienkiewicz and R.L.Taylor, 1990, “the finite element method Mc Graw-Hill Book Company, London.
- [134] W. Nowacki, 1964, “thermoelasticity”, Addison-Wesley publishing company, Inc., New York.
- [135] G. Dour, F. Durand and Y. Bréchet, “Relaxation of thermal stresses by dislocation flow and multiplication in the continuous casting of silicon”, *Modelling Simul. Mater. Sci. Eng.* 5, p 275–288, (1997).
- [136] P. Sabhapathy, M.E. Salcudean, “Numerical analysis of heat transfer in LEC growth of GaAs”, *J. Crystal Growth* 97 (1989), pp. 125-135.
- [137] V. R. VÖller, C.Prakash, “Fixed-Grid Numerical Modeling Methodology for Convection-Diffusion Mushy Region Phase Change Problems”. *Int J. Heat Mass transfer*, 30 (1987), pp. 1709-1720.
- [138] W.D. Bennon, F.P. Incropera, “A Continuum Model for Momentum, Heat and Species Transport in Binary Solid-Liquid Phase Change Systems-I. Model Formulation”, *Int. J. Heat Mass Transfer* 30 (1987), pp. 2161-2170.
- [139] The Mathworks, Inc., www.matlab.com

Bibliographie

- [140] Y.F. Zou, G.-X. Wang, H. Zhang, V. Prasad, D.F. Bliss, “Macrosegregation, dynamics of interface and stresses in high pressure LEC grown crystal”, *J. Cryst. Growth* 180 (1997) pp. 524–533.
- [141] J. J. Derby and Q. Xiao, “Heat transfer and interface inversion during the Czochralski growth of yttrium aluminum garnet and gadolinium gallium garnet “, *J. Cryst. Growth* 139, 147 (1994).
- [142] D. Schwabe, R. R. Sumathi, and H. Wilke, “The interface inversion process during the Czochralski growth of high melting point oxides “, *J. Cryst. Growth* 265, 494 (2004).
- [143] Morteza Asadian, S.H. Seyedein, M.R. Aboutalebi, A. Maroosi, Optimization of the parameters affecting the shape and position of crystal–melt interface in YAG single crystal growth, *Journal of Crystal Growth*, 311 (2009), pp. 342–348.
- [144] Shuqing Liang, ‘Thermal stress reduction inside InSb crystal grown by czochralski method’, thesis, York university, Toronto Ontario, October 2005.
- [145] Ling Wang, “A hybrid genetic algorithm-neural network strategy for simulation optimization”, *Appl. Math.Comput.* Vol 170 (2005), pp.1329.
- [146] P.J. DREW, J.R.T. MONSON, “artificial neural networks”, *Surgery* vol.127 (2000), pp. 3-11.
- [147] L.B. Jack, A.K. Nandi, “Genetic algorithms for feature extraction in machine condition monitoring with vibration signals,” *IEE Proceedings of Vision & Image Signal Processing* 147 (2000), pp. 205–212.
- [148] Takahara J, Takayama K, Nagai T. “Multi-objective simultaneous optimization technique based on an artificial neural network in sustained release formulations”. *J Control Release.* Vol 49 (1997), pp. 11-20.

Résumé

La méthode de tirage du silicium Czochralski (CZ) est l'une des techniques la plus importante pour produire des monocristaux de silicium de grande taille, utilisés dans les dispositifs à semi-conducteur.

Au cours du tirage, dans le procédé de tirage Czochralski, de nombreux phénomènes se manifestent, dont le phénomène thermique couplé avec le phénomène hydrodynamique, sans négliger le phénomène de changement de phase lors de la solidification. Il résulte de ces étapes des contraintes résiduelles au sein du silicium solide qui subit de très forts gradients de température. Ces derniers tendent à augmenter quand le diamètre du cristal est plus grand que 300 millimètres, et la distribution non homogène de fortes contraintes thermiques est créée, et par conséquent des régions distinctes dans le cristal avec de multiplication intensive des dislocations se manifestent. Puisque la présence des contraintes thermiques et des dislocations dans le silicium, réduit la performance et la fiabilité des dispositifs, la réduction de la densité de dislocations et des contraintes thermiques dans les cristaux de silicium de grande taille devient un important objectif.

Ainsi, ce travail est une contribution à l'étude et simulations numériques des contraintes thermomécaniques dans le silicium photovoltaïque élaboré par le procédé de tirage czochralski. Grâce à un modèle numérique bidimensionnel de l'écoulement du fluide et de transfert de chaleur avec solidification développé sous FEMLAB, nous avons pu simulé le champ de température pendant la croissance du cristal. En adoptant le modèle déformation plane à partir des champs de température déjà calculé on a pu déterminer la distribution des contraintes thermo élastiques dans le lingot de silicium.

L'influence de différent paramètres, tel que la longueur du lingot du silicium, la vitesse de tirage, la rotation du cristal et celle du creuset sur la forme de l'interface solide / liquide et la répartition des contraintes thermiques dans le silicium sont investis en détail. Une optimisation des paramètres du processus czochralski pour obtenir un état de contrainte minimale a été établie.

En considérant une loi de comportement élasto-plastique basé sur le modèle d'Alexander et Haasen on a pu déterminer l'effet de la relaxation de ces contraintes due à la multiplication des dislocations. Une analyse de comparaison des composantes de contraintes pour les deux modèles de comportement a été faite. La comparaison des résultats numériques en terme de contraintes avec des données bibliographiques été satisfaisante.

MOTS-CLÉS : Czochralski, silicium, interface solide/liquide, vitesse de tirage, vitesse de rotation du cristal, vitesse de rotation du creuset, contrainte thermo élastique, contrainte thermo élasto-plastique.

Abstract

The Czochralski (CZ) crystal growth method is one of the most important techniques for producing large size single crystals of silicon utilized in semiconductor devices.

In this process, many phenomena coexist in the growth setup. Of which the thermal phenomenon coupled with the hydrodynamic phenomena, without neglecting the phase change phenomena during solidification.

However, it is hard to timely dissipate the enormous latent heat induced by the solidification of Si melt when the crystal diameter is larger than 300 mm. Consequently, temperature gradients tend to increase and an inhomogeneous stress distribution is created, and consequently contains a distinct region in the crystal with intensive multiplication of dislocations than smaller size crystals. Since thermal stresses and dislocations in electronic and optical materials reduce device performance and reliability, the reduction of dislocation densities and thermal stresses in large size crystals becomes an important issue.

This work is a contribution to the study and Numerical simulations of thermo mechanical stress of photovoltaic silicon Czochralski crystal growth, using a fluid flow and solidification model developed on FEMLAB, we could simulate the moving solid/melt interface problem and the temperature field in the large diameter of the silicon single crystal growth in a Czochralski process. The thermo-elastic stress is calculated from the temperature field by adopting the plane strain model.

The effects of pulling rate, crystal and crucible rotation to the crystal/melt interface shape and thermal stresses distribution in the silicon single crystal are investigated in detail. The optimization of the operating parameters such as pulling rate, crystal and crucible rotation speed to obtain a minimal thermal stress is obtained.

While considering elasto-plastic behaviour based on Alexander and Haasen model, have could to reveal the effect of the relaxation of these stresses due to the multiplication of dislocations. A comparison analysis of stress components for the two models of behaviour was made. A good agreement between our numerical simulations and those found in the literature is obtained.

KEYWORDS: Czochralski, Silicon, Crystal/melt interface shape, pulling rate, crystal rotation, crucible rotation, Thermo-elastic stress, thermo-elasto-plastic stress.

ملخص

إن تقنية Czochralski هي واحدة من أهم التقنيات لإنتاج بلورات السيليكون من الحجم الكبير، المستخدمة في الأجهزة التي تستخدم أشباه الموصلات.

خلال عملية السحب لقلب السيليكون باستعمال تقنية Czochralski ، تحدث العديد من الظواهر ، بما في ذلك الظاهرة الحرارية إلى جانب الظاهرة الهيدروديناميكية ، دون إغفال ظاهرة تغير حالة المادة خلال مرحلة التصلب. ونتيجة لهذه المراحل، يبقى داخل قالب السيليكون الصلب الذي يمر بدرجات حرارة قوية اجهادات حرارية. هذه الاخيرة تميل إلى الزيادة عندما يكون قطر قالب الكريستال أكبر من 300 ملم ، و يتكون توزيع غير متجانس للإجهاد الحراري العالي ، وبالتالي يتم إنشاء مناطق متميزة في البلورة ذات احتلالات مكثفة. بما ان وجود الاجهادات الحرارية و كذا الاختلالات داخل السيليكون تحد من حسن الأداء والموثوقية للأجهزة ، بالتالي يصبح الحد من كثافة الاختلالات والاجهادات الحرارية في بلورات السيليكون ذات الاحجام الكبيرة هدفا هاما.

وبالتالي ، فإن هذا العمل هو المساهمة في دراسة و محاكاة عددية للاجهادات الحرارية في السيليكون المستعمل في الحلايا الشمسية المصنع بواسطة تقنية السحب Czochralski. باستعمال نموذج عددي ثنائي الأبعاد لتدفق السوائل وانتقال الحرارة مع التصلب استخدم بواسطة FEMLAB ، استطعنا محاكاة مجال درجة الحرارة خلال نمو البلورات ومن خلال هذه الاخيرة و باستعمال قانون السلوك المطاطي تم تحديد توزيع الاجهادات الحرارية داخل قالب السيليكون.

تأثير معايير مختلفة ، مثل طول قالب السيليكون ، سرعة السحب و كذا السرعة الدورانية لقلب السيليكون و حوض الانصهار على شكل الواجهة صلب / سائل ، وتوزيع الاجهادات الحرارية داخل كريستال السيليكون قد درست بالتفصيل. و لقد تم ايجاد المعايير الأمثل لعملية السحب Czochralski للحصول على الحد الأدنى من الإجهاد.

باخذ بعين الاعتبار قانون السلوك المطاطي-بلاستيكي على أساس نموذج الكسندر وحاسن استطعنا تحديد تأثير التخفيف من هذه الاجهادات الحرارية الموجودة بسبب تكاثر الاختلالات. قدمنا تحليلا مقارنا للاجهادات بالنسبة للنموذجين. ومقارنة النتائج العددية ، من حيث الاجهادات الحرارية مع البيانات البيليوغرافية قد أعطى مطابقة جيدة.

الكلمات المفتاحية : Czochralski ، السيليكون ، الواجهة صلب / سائل ، سرعة السحب ، السرعة الدورانية لقلب السيليكون ، سرعة حوض الانصهار ، الاجهادات الحرارية .