

REPUBLIQUE ALGERIENNE DEMOCRATIQUE ET POPULAIRE

MINISTERE DE L'ENSEIGNEMENT SUPERIEUR

ET DE LA RECHERCHE SCIENTIFIQUE

UNIVERSITE MENTOURI CONSTANTINE

FACULTE DES SCIENCES

DEPARTEMENT DE PHYSIQUE

N° d'ordre :

Série :

MEMOIRE

PRESENTEE POUR OBTENIR LE DIPLOME DE MAGISTER

SPECIALITE : Métallurgie

Titre :

Simulation numérique des transferts thermiques lors de la
croissance Bridgman horizontale des cristaux

PAR

Kalkoul NADIRA

Soutenu le : .. /.. /2006

REMERCIEMENTS

Ce travail a été effectué au laboratoire de physique- chimie des semi-conducteurs à l'université de Constantine.

Je tiens tout d'abord à remercier, tout particulièrement, Monsieur A.Djemel professeur, à l'Université de Constantine qui ma proposé le sujet et dirigé mon travail. Je le remercie pour son aide précieuse et pour sa grande patience. Au long de ces années j'ai pu apprécier sa façon de travailler son calme et profiter de ses connaissances et de ses conseils. Je le remercie également pour les nombreuses discussions fructueuses que nous avons eues.

«Je lui exprime aujourd'hui toute ma gratitude et ma reconnaissance»

Je suis très sensible à l'honneur que me fait Monsieur K.Guergouri professeur à l'Université de Constantine , de présider mon jury. Je le remercie bien vivement et exprimer ma profonde reconnaissance pour m'avoir accueilli au sein du laboratoire de physique- chimie des semi conducteur et d'avoir suggéré et dirigé ce travail. Je tiens également à lui exprimer ma gratitude pour les précieux conseils et discussions dont il ne m'a pas privé tout au long de ce travail de thèse.

Je suis très reconnaissante à Monsieur A. Bourrait, maître de conférence à l'Université de Constantine, qui ma fait l'honneur d'accepter de juger ce travail .

J'adresse mes plus vifs remerciements à Monsieur M.S.Aida professeur à l'Université de Constantine, qui ma fait l'honneur d'avoir accepté de juger mon travail.

Je voudrais également remercier tous les membres du laboratoire de physique- chimie des semi-conducteurs pour l'aide qu'ils m'ont apportée.

Je tiens à remercier particulièrement Monsieur A.bouroucha pour sa précieuse aide et les discussions dont 'il ne m'a pas privé tout au long de ce travail de thèse. .

Il m'est très agréable d'exprimer mes chaleureux remerciements et mes profonde reconnaissances à mon mari S.Namous, qui m'a aidé matériellement et moralement pour aller au bout de ma tache.

J'exprime ma profonde gratitude à tous mes enseignants, dans tous les cycles.

Je tiens à remercier chaleureusement mon amie Saliha Hamdelou pour leur soutien moral et matériel

J'exprime aussi ma profonde gratitude à tous mes amies Z. Belmili, N .Bouteler, M.Hamzewi pour leur soutien moral.

J'adresse mes plus vifs remerciements à mes très chers parents, mes chères sœurs et mes chers frères pour l'aide qu'ils m'ont apportée

N. kalkoul

SOMMAIRE

INTRODUCTION GENERALE.....	1
CHAPITRE I: GENERALITES SUR CdTe ET TECHNIQUES D'ELABORATION	
I-1 Généralités et études antérieures sur CdTe	4
I-2-1 Structure cristalline.....	4
I-1 Diagramme de phase	7
I-2-1 Diagramme de phase «composition- température» de CdTe	7
I-2-2 Diagramme de phase «pression- température».....	7
I-3 Propriétés générales	7
I-3-1 Propriétés optiques et électriques	7
I-3-2 Propriétés plastiques.....	7
I-4 Les défauts de réseau cristallin:	8
I-4-1 Les vibrations thermiques de réseau	8
I-4-2 Les défauts ponctuels	8
I-4-2-1 Les lacunes	9
I-4-2-2 Les interstitiels	9
I-4-2-3 Les atomes d'impuretés	12
I-4-3 Les défauts linéaires.....	12
I-4-4 Les défauts plans.....	13
I-4-4-1 Les joints de grains.....	13
I-4-4-2 Les surfaces et les interfaces cristallines.....	14
I-5 Visualisation des défauts	18
I-6 Influences des paramètres de croissance sur la méthode de Bridgman.....	18
I-6-1 Influence de la vitesse de croissance sur l'état cristalline.....	19
I-7 Méthodes d'élaboration des monocristaux.....	20
I-7-1 Croissance en solution.....	20
I-7-2 Croissance en phase vapeur.....	21
I-7-3 Croissance en bain de fusion	22
I-7-3-1 Technique de Czchralski (Cz).....	22
I-7-3-1 Technique de la zone flottante.....	23
I-7-3-2 Technique de la zone fondue.....	23
I-7-3-3 Technique de Bridgman	24

I-8 Croissance des cristaux CdTe par la méthode de Bridgman horizontale23

CHAPITRE II : FORMULATION MATHEMATIQUE

II-1 Introduction.....30

II-2 Etude thermique.....30

II-2-1 L'équation différentielle de la conduction de chaleur à l'état quasi stationnaire....30

II-2-2 Modèle physique..... 31

II-2-3 Hypothèses simplificatrice..... .31

II-2-4 Equations de problème..... 32

II-2-5 Traitement de terme source..... .32

II-2-6 Détermination de l'interface 33

II-2-7 Effet de la conductivité thermique sur la forme de l'interface.....34

II-2-8 Formulation finale de l'équation de conduction.....37

II-2-9 Conditions aux limites.....37

II-3 Résumé de la formulation de problème thermoélastique38

II-3-1 Introduction..... .38

II-3-2 Contrainte thermique dans les cristaux aux cour de la croissance Bridgman..... . 38

II-3-5 Analyse théorique des contraintes thermoelastique39

II-3-5 Equation d'équilibre en terme de contraintes 40

II-3-5 La relation d'équilibre en terme de déplacement..... 41

II-4 Contraintes de V.M42

II-5 Les conditions aux limites.....42

II-5-1 Les conditions aux limites de traction..... 42

II-5-1 Les conditions aux limites de déplacement..... 43

CHAPITRE III:MODELISATION NUMERIQUE

III-1 Introduction.....46

III-2 Méthodes numérique.....46

III-2-1 Méthode des éléments finis.....46

III-2-2 Méthode des volumes finis..... 46

III-2-3 Méthode des différences finies..... 47

III-3 Principe de la méthode des différences finies..... 47

III-4 Discrétisation par la méthode des différences finies..... 47

III-4-1 Discrétisation du domaine..... 47

III-4-2 Discrétisation de l'équation de la conduction.....47

III-4-3 Discrétisation du terme source 51

III-4-4 Equations finales de discrétisation.....	53
III-4-5 Discrétisation des condition aux limites.....	53
III-4-5-1 Formule relative à un point de l'axe de symétrie.....	53
III-4-5-2 Surface de creuset.....	53
III-4-6 Algorithme de calcul de la location de l'interface et du champ de la température..	53
III- 5 Discrétisation des équations thermoélastiques par la méthode des différences finies	
III-5-1 La discrétisation des équations thermoélastiques aux nœuds réguliers.....	55
III-5-2 La discrétisation des équations thermoélastiques aux nœuds irréguliers	59
III-5-2-1 Approximation des dérivées partielles aux nœuds irréguliers	60
III-5-2-2 Approximation des dérivées mixtes aux nœuds irréguliers avoisinant une frontière	60
III-6 Equations finals de discrétisation des équations thermoélastiques	61
CHAPITRE IV : RESULTAS ET DISCUSSION	
IV-1 Introduction.....	65
IV-2 Résultats et discussions.....	65
IV-2-1 Effet du gradient thermique sur la forme de l'interface.....	66
IV-2-2 Effet de la température de la zone chaude T_{haute} sur la forme de l'interface... ..	67
IV-2-3 Effet de la taille de l'ampoule sur la forme de l'interface.....	75
IV-2-3-1 Effet de la longueur de l'ampoule sur la forme de l'interface.....	75
IV-2-3-2 Effet du rayon de l'ampoule sur la forme de l'interface.....	75
IV-2-4 Effet de la vitesse de tirage sur la forme de l'interface.....	75
Annexe A.....	82
Annexe B.....	89
CONCLUSION GENERALE.....	93
REFERENCES BIBLIOGRAPHIQUES.....	95

CHAPITRE I :
GENERALITES SUR CdTe ET
TECHNIQUES D'ELABORATION

I – 1 GENERALITES ET ETUDES ANTERIEURES SUR CdTe:

I-1 -1 Structure cristalline:

Les semi-conducteurs CdTe est un composé II-VI cristallisent dans deux structures différentes: structure cubique de type sphérique et structure hexagonale de type Wurtzite [8]. Dans ces composés on peut assiste, sous certaines condition, a des transitions d'une à l'autre ou bien les deus structures coexistent (Fig-I-1-a, b) [9].

I –1-1-a La structure Wurtzite:

La maille élémentaire est composée de deux molécules du composé II-VI. Les atomes de type II occupent les positions $(0, 0, 0)$; $(1/3, 1/3, 1/2)$ et les atomes de type VI occupent les sites $(0, 0, u)$ et $(1/3, 2/3, 1/2+u)$, avec $u=3/8$. Le groupe d'espace est $p6_3mc$. un atome de type II est entouré de quatre atomes de type VI disposées aux sommets d'un tétraèdre. Cette structure celle de CdTe dans sa structure hexagonale.

I-1-1-b La structure sphérite:

La maille élémentaire comporte quatre molécules du composé II-VI. Le groupe d'espace est

$F43m$. Les atomes de type II : $(0, 0, 0)$; $(0, 1/2, 1/2)$; $(1/2, 0, 1/2)$; $(1/2, 1/2, 0)$.

Et les atomes de type VI : $(1/4, 1/4, 1/4)$; $(1/4, 3/4, 1/4)$; $(3/4, 1/4, 1/4)$; $(1/4, 3/4, 3/4)$.

Chaque atome est entouré de quatre atomes de l'autre type, placés aux sommets d'un tétraèdre. Cette structure est appelée de type blende de zinc référence à la cristallisation de CdTe sous cette forme cubique. CdTe possède des plus fortes conicités des composés II-VI, elle est estimée à environ 72 % [8].

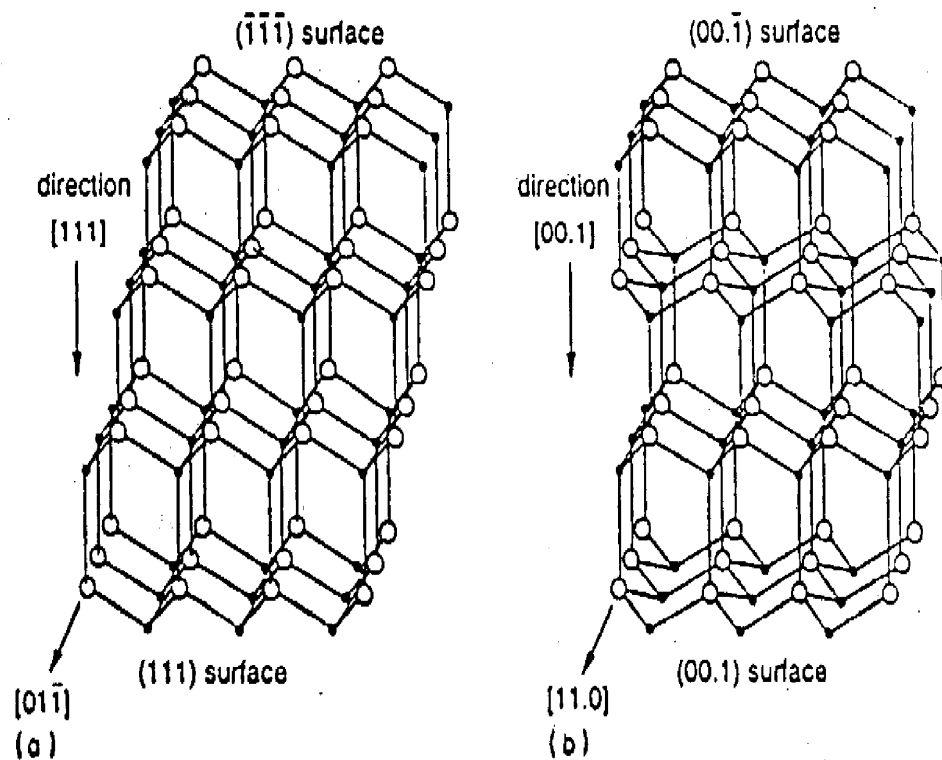


Fig. I-1-a, b: les structures sphérite (a) et wurtzite (b) CdTe observées dans les directions normales à $[0x]$ et $[110]$.

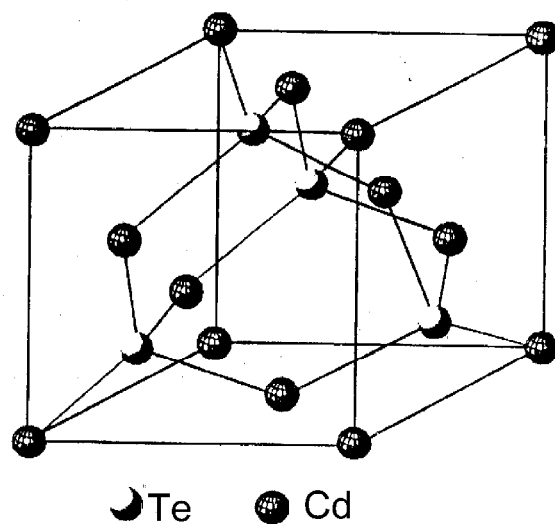


Fig. I-2: Maille élémentaire de la structure de CdTe (Blende de Zinc)

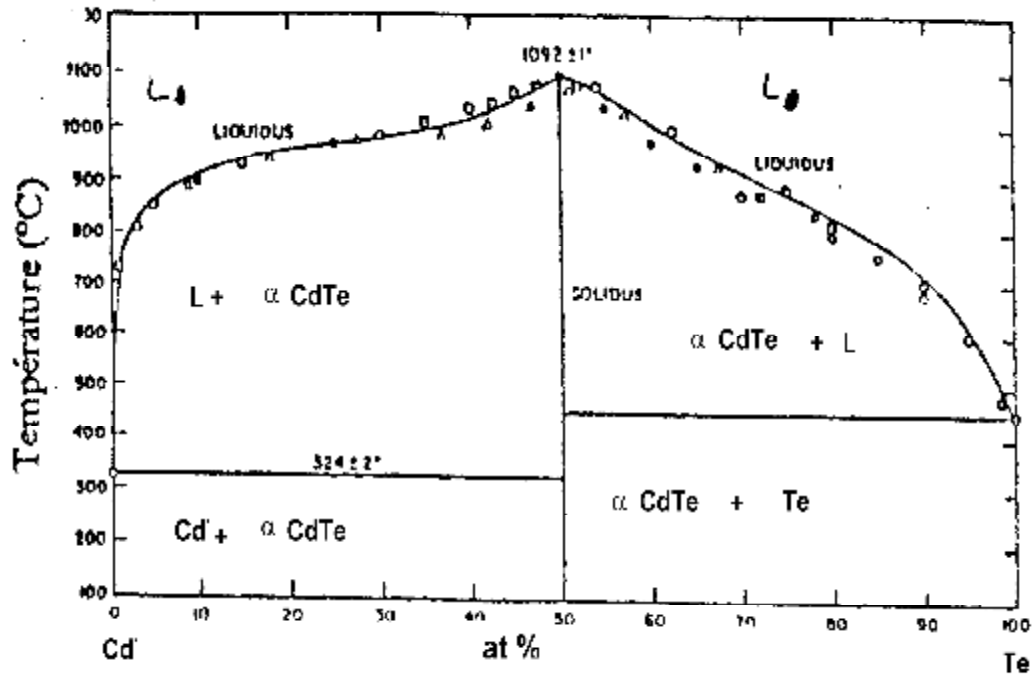


Fig. I-3-a diagramme de phase de CdTe

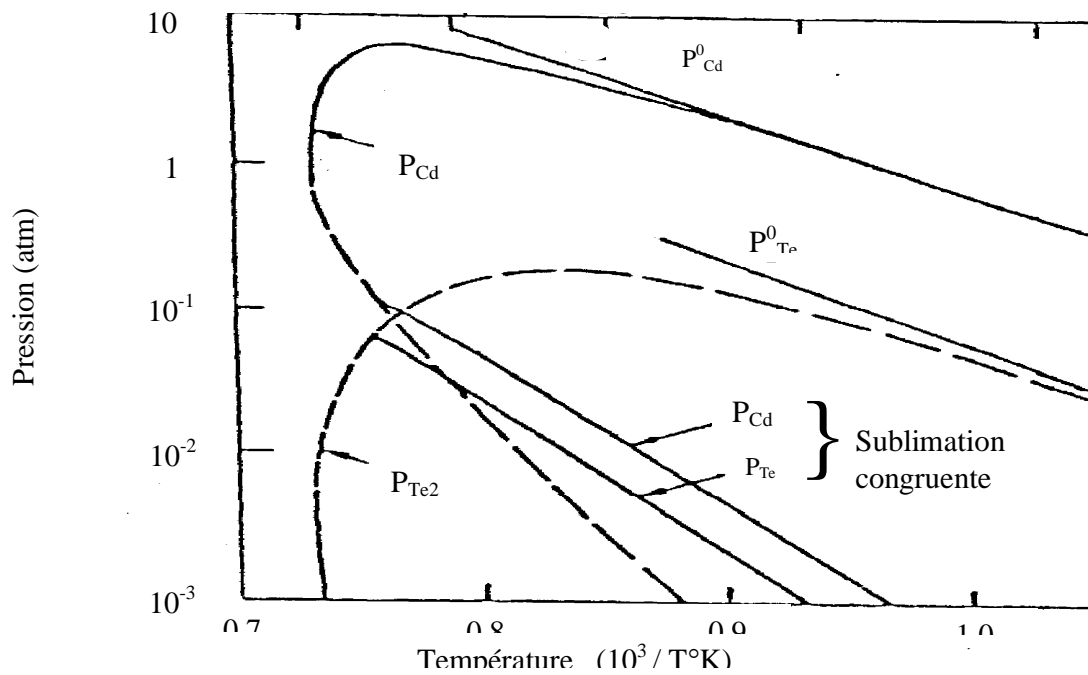


Fig. 1-4: Diagramme de phase (Pression-température) de CdTe.

I - 2 Diagramme de phase :

1 - 2 -1 Diagramme de phase composition - température de CdTe:

Le diagramme de phase de CdTe est assez simple et (Fig I-3), il a un point de fusion à $1092 \pm 1 \text{ C}^\circ$ pour une concentration approximative de tellure de 50 at %.

Deux paliers eutectique à $324^\circ \pm 2\text{C}^\circ$ pour la région riche en Cd et à $449 \pm 2^\circ\text{c}$ pour la région riche en Te [10].

Le composé stœchiométrique représenté par une ligne se trouve en réalité répartie sur un domaine étroit tel qu'on aura un point de fusion à 897C° pour une concentration de 49,99985 % pour le tellure et 1092 C° pour une concentration de 50,00085 % pour le tellure [11].

I-2-2 Le diagramme de phase pression-température:

Le diagramme pression-température de CdTe (Fig. I-4) permet de savoir avec précision les conditions d'élaboration des cristaux [10].

I -3 Propriétés générales :

Comme on le sait bien, le CdTe est un semi- conducteur qui a des propriétés très avantageuses par rapport au d'autre semi-conducteur chalcogenides de cadmium. Et il a des propriétés spécifiques.

I –3-1 Propriétés optiques et électriques

CdTe est un semi-conducteur à gap direct, sa structure de bande est montrée sur la (Fig. I-5) [10], elle lui permet des transitions verticales radiatives entre la bande de valence et la bande de conduction (Fig. I-5-a). Il présente une large bande interdite, d'environ 1.51 eV à température ambiante, ce qui lui donne un seuil d'absorption optique dans le domaine infrarouge.

L'incorporation de Zinc donne au gap une variation linéaire en fonction de la concentration (Fig. I-5-b) [12].

CdTe peut présenter les deux types de conductivité n ou p; leur obtention, facile à contrôler, justifie les multiples applications de ce matériau dans le domaine de l'optoélectronique, notamment en détection infrarouge et en tant que substrat pour l'épitaxie des couches de CdHgTe. Le changement de type est aussi possible, notamment sous atmosphère de Cd [12].

I-3 -2 Propriétés plastiques:

CdTe est un matériau plastique à température ambiante et même à températures plus basses [12]. Les scissions résolues sont d'environ 25 MPa et 40 MPa avec pré-déformation à 300°K et sans pré-déformation à 220°K respectivement, elle chute à quelque MPa pour T=873K (déformation sous air)

Le tableau (I-1) résume les différentes données nécessaires à la connaissance des propriétés physiques de CdTe.

I-4 Les défauts de réseau cristallin:

Il n'existe jamais, en réalité, des cristaux parfaits; Donc, les cristaux réels comportent toujours des imperfections. En remarquant d'autre part que le nombre de propriétés des cristaux (par exemple; la résistance mécanique, la conductivité électrique, les effets photoélectriques, etc.) dépendent dans une large mesure de la nature et de la concentration des imperfections, l'étude de celles-ci s'impose tout naturellement.

Les principaux défauts que l'on trouve dans les semi-conducteurs CdTe élémentaires et les composés stœchiométriques sont: les vibrations thermiques du réseau, les défauts ponctuels, les défauts linéaires ou dislocations et les défauts de surface.

I-4-1 Les vibrations thermiques de réseau:

Les particules (atomes ou ions) occupant les nœuds d'un réseau cristallin, à $T \neq 0$, oscillant autour de leur position d'équilibre; Et de même que l'énergie des ondes électromagnétiques, l'énergie des vibrations thermiques des atomes (ou des ions) est quantifiée. Le quantum d'énergie est appelé le phonon ($E=h\nu$). Les phonons étant des quasi-particules, se distinguent des vraies particules (électron, proton, etc.) par le fait qu'elles ne peuvent apparaître et subsister que dans un milieu matériel (où ils se comportent comme des porteurs élémentaires de mouvement) et n'existent pas dans le vide.

Ces phonons, qui se propagent dans le cristal sont diffusés par les défauts de structure, ainsi que par les autres phonons. Ces vibrations thermiques des atomes perturbant la périodicité rigoureuse du réseau cristallin, c'est à dire, le potentiel périodique, et constituent donc un des principaux mécanismes de diffusion des porteurs de charge dans les cristaux semi-conducteurs (diffusion par le réseau) [13].

I-4-2 Les défauts ponctuels :

I-4-2-1 Les lacunes (ou défauts de Schottky):

Sont des nœuds de réseau où manquent des atomes. Les lacunes se forment surtout à la surface des cristaux, grâce aux déplacements successifs des atomes, diffusent à l'intérieur du cristal. Dans les cristaux ioniques, on distingue généralement les lacunes cationiques qui portent le signe $\ll + \gg$ et les lacunes anioniques qui portent le signe $\ll - \gg$.

A toute température la concentration des lacunes en état d'équilibre est donnée par l'expression suivante: $N_v \sim \exp\left(-\frac{Q}{KT}\right)$. [13]

Où Q est l'énergie de formation d'une lacune (1eV) qui est été comparable à celle de la sublimation d'un atome. C'est pourquoi la valeur de N_v est, approximativement, égale à la concentration de la vapeur saturée (à la même température). [14]

Dans le cas où la concentration des lacunes serait notablement plus grande que la concentration à l'équilibre (le cristal est alors sursaturé de lacunes) l'excès de lacunes peut coaguler et donner naissance à des microcavernes et à des pores dans le cristal.

La création de lacunes dans les cristaux covalents, comme Ge et Si fait apparaître des liaisons avalantes non saturées, qui cherchent à accaparer des électrons provenant soit de la bande de valence du cristal, soit des atomes d'impuretés. De ce fait les lacunes dans ces cristaux se comportent comme des accepteurs [14].

Dans les semi-conducteurs ioniques, les composés II-VI (à titre d'exemple), la création d'une lacune cationique fait apparaître auprès des ions négatifs avoisinants un excès de charge positive, d'où la tendance à capter les électrons de la bande de valence et d'autres niveaux occupés, ces lacunes se comportent donc comme des accepteurs.

La création d'une lacune anionique fait apparaître auprès des ions avoisinants un excès de charge négative, ce qui fera passer les électrons dans la bande de conduction ou sur des niveaux vides; les lacunes anioniques sont donc des centres donneurs. On doit noter que certaines lacunes peuvent être ionisées plusieurs fois [12].

1-4-2-2 Les interstitiels:

Il s'agit des atomes formant le réseau du cristal, qui ont quitté leurs sites réguliers pour occuper des sites interstitiels. Vu que l'énergie d'insertion x_i est grande vis-à-vis de l'énergie de formation des lacunes, la probabilité d'insertion des atomes propres du

réseau dans les sites interstitiels est notablement plus petite que la probabilité de formation de lacunes.

La combinaison d'une lacune et d'un interstitiel (auto-interstitiel), qui se forme lorsqu'un atome passe d'un site régulier dans un site interstitiel est désignée sous le nom de défauts de Frenkel. L'énergie de formation des défauts de Frenkel est approximativement égale à la somme des énergies de formation des lacunes et des interstitiels. [14]

La concentration minimum de défauts ponctuels pouvant exister dans le cristal CdTe, correspond à une température T voisine du zéro absolu. A mesure que la température s'élève, l'amplitude des vibrations thermiques des atomes occupant des sites réguliers du réseau augmente, et certaines atomes passent des sites réguliers dans des sites interstitiels, auto-interstitiels, et laissent derrière eux des lacunes. Donc, à toute température différente de zéro ($T \neq 0$).

Le réseau comporte une certaine concentration de défauts ponctuels (lacunes + interstitiels). Cependant ces défauts peuvent apparaître dans le réseau d'un cristal également sous l'influence de différentes actions externes, susceptibles de modifier son énergie (irradiation, contraintes mécaniques ou électriques, etc.).

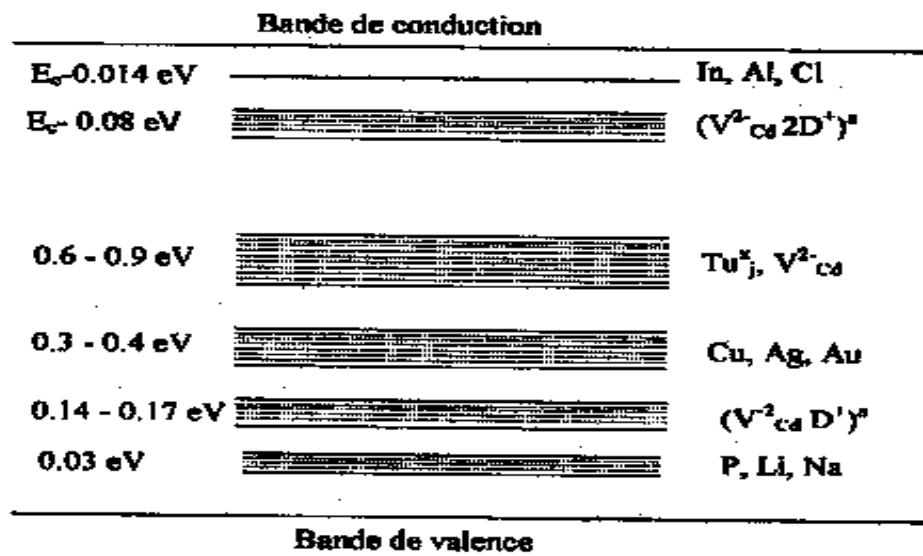


Fig. 1-5 La structure de bande électronique de CdTe dans la direction de la système principale.

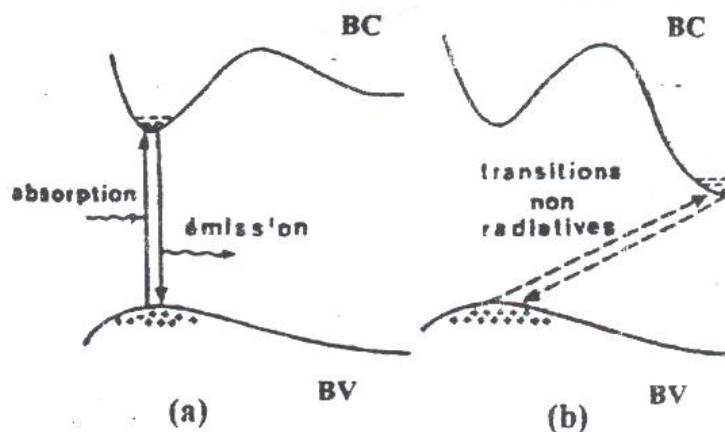


Fig. 1-6 Transition électronique entre les extrêmes des bandes de valence et de condition.

- (a) semiconducteur à gap direct, les transitions sont verticales (radiatives).
- (b) semiconducteur à gap indirect, les transitions sont obliques (non radiatives)

I-4-2-3 Les atomes d'impuretés:

Il s'agit des défauts qui tiennent à la présence d'atomes étrangers au cristal parfait. Il peut y avoir une impureté en substitution ou bien en site interstitiel.

Les donneurs simples (As, P en substitution dans le silicium) ont une faible énergie d'ionisation, relativement à l'énergie de la bande interdite. On dit que ces centres sont <<peu profond>> ou << superficiels>> (<<shallow centers>>). Plus d'impureté introduite perturbe localement le cristal, c'est à dire plus le potentiel perturbateur est fort, plus l'énergie d'électron ou trous est grande. Ainsi, elle est de même ordre de grandeur que la bande interdite du semi-conducteur dans le cas de Au ou Fe dans le silicium: on parle alors de << centre profond >> (<<deep center>>) [15].

Les impuretés en substitution peuvent être classées selon la place qu'elles occupent dans le tableau périodique par rapport à l'atome remplacé. D'abord, si l'impureté appartient à la même ligne elle est dite <<isocore>>. Si l'impureté appartient à la même colonne elle est << isovalente>> (ou << isoélectronique>>). Si l'impureté appartient à une colonne située à droite, elle libère ses électrons de valence en surnombre et devient positive (c'est-à-dire qu'elle libère un nombre égale à l'écart entre la valence de l'atome de remplacement et celle de l'atome remplacé) et reconstitue avec le restant les liaisons covalentes avec les atomes voisins. Si l'impureté appartient à une colonne située à gauche, le site puise parmi les électrons les plus accessibles du cristal-en premier lieu parmi les électrons de valence- le complément d'électrons nécessaire à la reconstitution des liaisons covalentes avec les proche voisins et devient négative[15].

Les états de charges positifs d'une impureté sont appelés états donneurs ; Les états de charges négatifs d'une impureté sont appelés états accepteurs (Fig I-5).

Selon cette définition, une impureté peut offrir un ou plusieurs états donneurs dans ce cas on dit que cette impureté qu'elle est *donneuse*. De même, une impureté peut offrir un ou plusieurs états accepteurs et l'on dit que cette impureté qu'elle est *accepteur*. Il existe des impuretés qui peuvent offrir des états donneurs et des états accepteurs, on dit qu'elles sont *amphotères* [16].

I-4-3 Les défauts linéaires (dislocations):

On entend par dislocations les distorsions du réseau cristallin produites par le glissement de certaines parties du cristal par rapport à d'autres. Deux cas limites de ces

glissements dont la combinaison permet de décrire n'importe quel type de glissement dans les cristaux) caractérisent les dislocations coins et les dislocations vis. La dislocation coin (Fig. I-6) est la droite marquant le bord du demi-plan réticulaire excédentaire, déterminant la distorsion du réseau. Il est évident que la plus forte perturbation du réseau situe à proximité immédiate de la ligne de dislocation; les atomes se trouvant immédiatement au-dessus de cette ligne sont soumis à des contraintes de compression. Les rangées d'atomes se trouvant immédiatement au-dessous du bord du demi-plan réticulaire excédentaire se trouvant cependant à des distances plus grandes que dans un cristal non disloqués qui signifie que cette région du cristal est tendue.

Une dislocation vis peut être considérée comme le résultat de déplacement d'une partie du cristal par rapport à l'autre, parallèlement à l'axe de dislocation AB (Fig. I-7); on peut dire qu'un cristal comporte une dislocation vis est constituée par un seul plan réticulaire incurvé selon une surface hélicoïdale de telle sorte qu'à chaque rotation autour de l'axe de dislocation, ce plan s'élève (ou s'abaisse) d'un pas d'hélice égal à la distance inter-réticulaire a (paramètre de réseau).

Il découle des définitions de ces deux types de dislocations qu'un contour bâti sur les vecteurs de translation du réseau considérée tout autour de la ligne de dislocation ne peut être fermé. Le vecteur b que l'on doit ajouter pour fermer ce contour est appelé vecteur de Burgers. Dans le cas d'une dislocation coin b est perpendiculaire à la ligne de dislocation et correspond à la distance inter-réticulaire introduite par le demi-plan réticulaire excédentaire. Dans le cas d'une dislocation vis le vecteur b définit le pas d'hélice et sa direction est parallèle à l'axe de dislocation [14].

L'énergie de formation des dislocations rapportées à une distance interatomique le long de la ligne de dislocation varie selon les cristaux et vaut de 3 à 30 eV. Du fait de la grande valeur des énergies de formation des dislocations, leur nombre ne dépend pratiquement pas de la température (les dislocations ne sont pas des défauts thermiques).

I-4-4 Les défauts plans :

I-4-4-1 Les joints de grains:

A partir de 1930, les joints de grains furent considérés comme des zones de transition raccordant des cristaux d'orientation différente. Ces joints de grains peuvent jouer le rôle de sources et de puits des défauts (lacunes, interstitiels) et dislocations. Au cours d'une trempe, par exemple, les lacunes s'éliminent beaucoup plus vite au voisinage des joints qu'à l'intérieur des grains. Le rôle des joints au cours de la déformation plastique est très important: sous l'action d'une concentration de contrainte, ils peuvent émettre des dislocations; A haute température, une partie non négligeable de la déformation plastique est attribuée au glissement relatif des cristaux contigus le long des joints de grains (glissement intergranulaire). D'autre part, les atomes d'impuretés peuvent ségréguer aux joints de grains, ce qui a pour effet d'abaisser l'énergie interfaciale en CdTe [15].

I-4-4-2 Les surfaces et les interfaces cristallines:

La surface cristalline constitue aussi un autre type des défauts bidimensionnels parce que, à la surface du semi-conducteur les états électroniques (du volume) sont modifiés en raison d'une part d'un phénomène intrinsèque et d'autre part des phénomènes extrinsèques. Le phénomène intrinsèque résulte de la rupture de la périodicité du réseau. Cette rupture de périodicité entraîne l'existence d'états électroniques différents de ceux existant dans le volume, ce sont les *états de surface*. A ce phénomène intrinsèque, il faut ajouter des phénomènes extrinsèques

Résultant de l'adsorption à la surface d'atomes étrangers dont les plus courants sont les atomes d'oxygène qui entraînant une oxydation de la surface du semi-conducteur. On dit alors qu'il existe oxydation de la surface du semi-conducteur une couche d'oxyde natif. La présence d'une part d'atomes étrangers et d'autre part de distorsions du réseau, résultant de la différence de maille entre le semi-conducteur et son oxyde, entraîne l'existence d'états de surface extrinsèques [16].

Si on considère l'interface entre deux matériaux au niveau d'une hétérostructure (la surface étant le cas particulier de l'interface du semi-conducteur avec le vide), le réseau passe sur une distance de quelques angströms de la périodicité d'un matériau à celle de l'autre. Il en résulte des états électroniques différents de ceux de chacun des matériaux, ce sont les *états d'interface*.

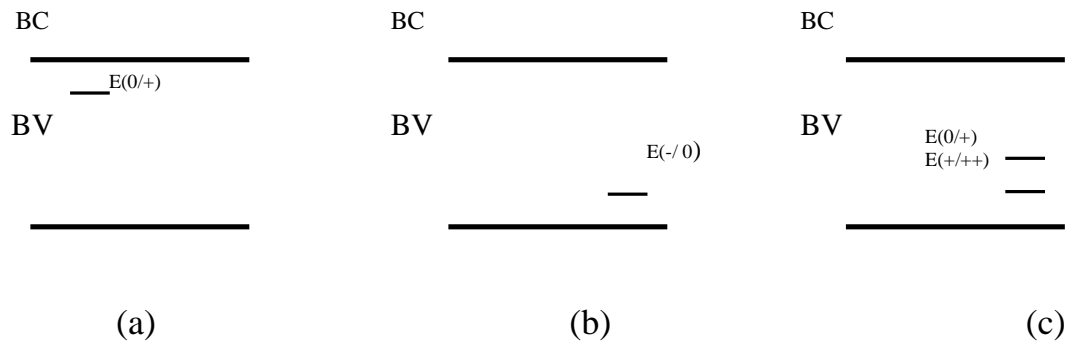


Fig. I – 7: Disposition conventionnelle des <<niveaux d'ionisation >> dans la bande interdite d'un semi-conducteur: a. donneur simple ; b. accepteur simple; c. donneur double.

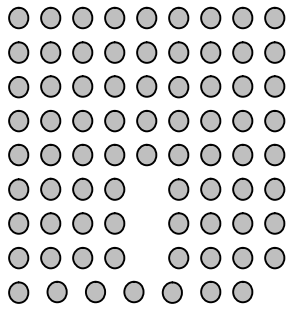


Fig.I - 8

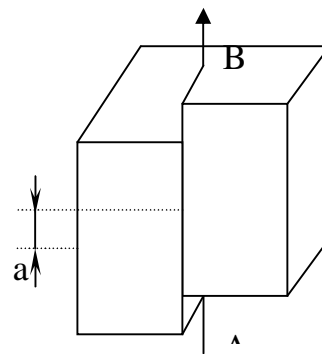


Fig. I -9

Tableau I. 1 propriétés physiques de CdTe

CRISTALLOGRAPHIQUE ET ENERGETIQUE		
Grandeur	Symbole (unité)	Valeur
Paramètre de maille	a (Å)	6.089
Longueur de liaison	L _{CdTe} (Å)	2.81
Plan de clivage	(110)	
Nombre de molécules CdTe par cellule		4
Concentration volumique de CdTe (ou Te)	(cm ⁻³)	1.469×10 ²³
Numéro atomique de Cd	Z _{Cd}	48
Masse atomique de Cd	M _{Cd} (g/mole)	112.4
Energie de migration d'atome de Cd	H _{Cd} (eV)	5.6
Numéro atomique de Te	Z _{Te}	52
Masse atomique de Te	M _{Te} (g/mole)	127.6
Energie de migration d'atome de Te	H _{Te} (eV)	7.8
Affinité électronique	χ (eV)	4.28
Ionicité	f _i	0.72
PROPRIETES ELECTRIQUES		
Largeur du gap (à 2°K)	E _g (eV)	1.606
Largeur du gap (à 300°K)	E _g (eV)	1.50±0.02
Dépendance de E _g avec la température	E _g (ev/deg.K)	-5.6×10 ⁻⁴
Mobilité maximale des électrons à(300°K)	μ _e (cm ² .V ⁻¹ .S ⁻¹)	1200
Mobilité maximale des trous à(300°K)	μ _t (cm ² .V ⁻¹ .S ⁻¹)	80
Durée de vie moyenne de porteurs minoritaires (e ou t).	τ (s)	10 ⁻⁶
Masse effective des électrons	m _{eff} (m ₀)	0.096 m ₀
Masse effective des trous	m _{eff}	0.60 m ₀

CHAPITRE I: GENERALITES SUR CdTe ET TECHNIQUES D'ELABORATION

Densité d'états dans la bande de conduction (à 300°K)	N_c (cm ⁻³)	7.46×10^{14}
Densité d'états dans la bande de valence (à 300°K)	N_v (cm ⁻³)	1.16×10^{19}
Vitesse thermique des électrons (à 300°K)	v_e (cm.s ⁻¹)	3.7×10^7
Vitesse thermique des trous (à 300°K)	v_t (cm.s ⁻¹)	1.5×10^7
Densité des porteurs intrinsèques (à 300°K)	n_i (cm ⁻³)	6.9×10^5
Résistivité maximale pratique (à 300°K)	ρ (Ω. cm)	10^9
Résistivité théorique (à 300°K)	ρ_{th} (Ω.cm)	10^{11}
PROPRIETES THERMIQUES		
Température de fusion	T_f (°c)	1092
Densité	d (g.cm ⁻³)	5.85
Conductivité thermique	(W.cm ⁻¹ .K ⁻¹)	0.075
Chaleur spécifique (à 300°K)	C (cal.g ⁻¹ .K ⁻¹)	0.44
Coefficient de dilatation thermique (à 300°K)	(K ⁻¹)	4.96×10^{-6}
PROPRIETES OPTIQUES		
Réflexivité à 10.6 μm		20.7%
indice de réfraction à 10 μm	N	2.67

I-5 Visualisation des défauts :

L'imagerie rend compte des défauts cristallins dans CdTe. Elle est faite essentiellement par topographie de rayon X [17,18], par cathodoluminescence [17] ou par EBIC [19]. La révélation des défauts par attaque chimique [20] restera une méthode grossière pouvant aider à estimer approximativement la densité de dislocation et sera donc dans ce contexte très utile pour comparer les cristaux entre eux.

La figure (I-10) est une image de cathodoluminescence qui permet de voir les différents défauts cristallins dans CdTe [21].

Une correspondance et une complémentarité sont déduites de l'observation combinée des images de topographie de rayons X et de cathodoluminescence. Les défauts ainsi observés ont été identifiés comme des sous joints de grains et des dislocations vis [17].

Une autre corrélation a été faite entre la cathodoluminescence et les Etch pits. L'échantillon déformé à température ambiante et les dislocations ainsi introduites sont visualisées par Etch pits et cathodoluminescence. Les points noirs représentent des dislocations émergeant en surface, ce qui est en très bon accord avec les piqûres d'attaque qui représentent à leur tour les mêmes dislocations émergeantes [22].

Une étude regroupant la topographie de rayons X, la cathodoluminescence, l'EBIC a été réalisée par Auleytner et al [23] pour mettre en évidence les différents défauts cristallins de CdTe et consolider les observations en corrélant les différentes méthodes entre elles.

I-6 Influence des paramètres de croissance sur la méthode de Bridgman :

Les chercheurs travaillant sur la croissance de CdTe en Bridgman sont d'accord sur le fait que le taux de croissance et les contraintes thermiques durant la croissance jouent un rôle important dans la qualité cristalline du matériau [47].

O.Odal et al [25] présentent dans leurs travaux les conditions optimale pour faire croître des cristaux de bonne qualité cristalline; ces conditions se résument en un taux de croissance de (1mm/h) avec un gradient de température de (10C°/cm). Les cristaux obtenus présentent une largeur de Rocking- curve (FWHM \approx 60"). Pour réduire les contraintes thermomécaniques dans la masse du cristal, d'autres auteurs [25] on préparé des cristaux en Bridgman horizontale. Ils ont obtenu des cristaux a 80% monocristallins

présentant une haute qualité cristalline attestée par une densité de dislocation de 10^4cm^{-2} et une largeur de rocking- curve à mi-hauteur (FWHM=9").

Des mesures électriques [47], indiquent une amélioration par rapport aux cristaux préparés par la méthode de Bridgman vertical.

I-6-1 Influence de la vitesse de tirage sur l'état cristallin:

L'influence de la vitesse de croissance sur l'état cristallin met en évidence:

- Pour les très faibles vitesses (0.76 cm / j) on obtient de gros monocristaux, mais une qualité cristalline médiocre.
- Pour les vitesses un peu plus élevées (1.6 à 1.7 cm / j) on obtient de moins gros monocristaux, mais avec une moyenne ou une bonne qualité cristalline [47].

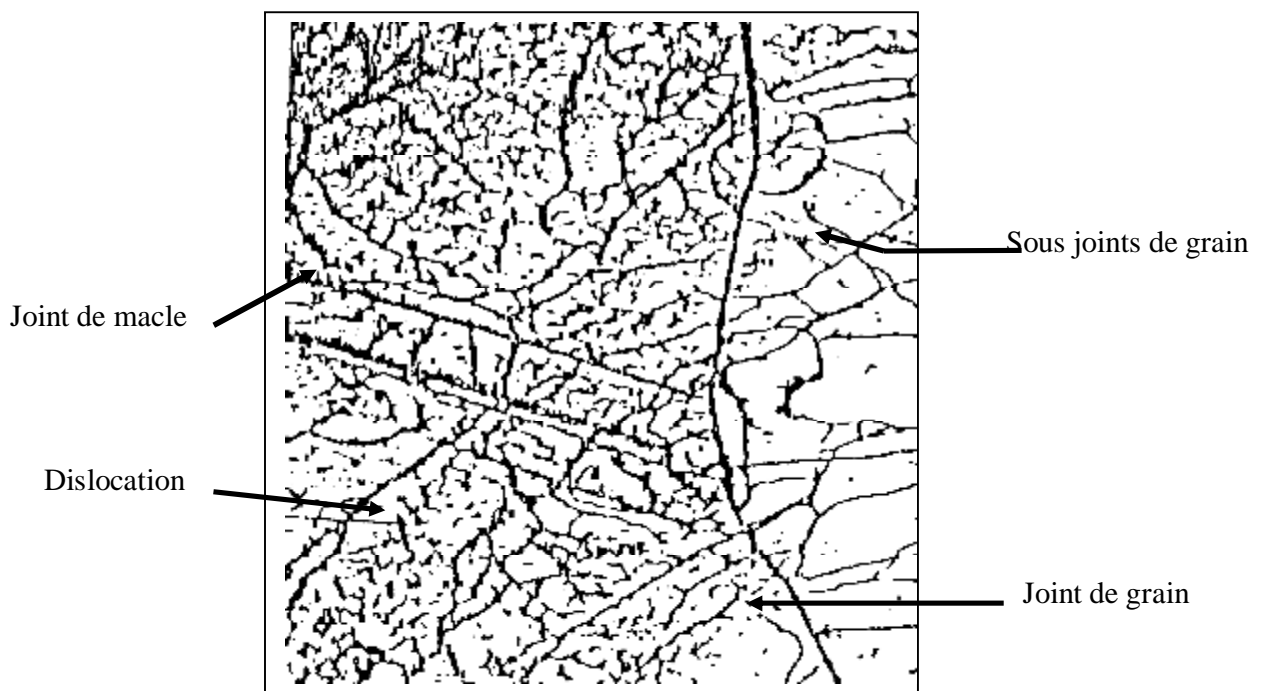


Fig. I-10: Les différents défauts pouvant exister dans CdTe obtenus à partir des Images de cathodoluminescence.

I-7 Méthodes d'élaboration des monocristaux

Les méthodes de croissance des monocristaux sont généralement classées en trois catégories:

- Croissance en bain de fusion
- Croissance en solution
- Croissance en phase vapeur

Le choix d'une méthode est souvent guidé par sa nature (possibilité de réalisation, rentabilisation), ainsi que par les propriétés matériaux donné

Par exemple les grenats de fer d'Yttrium (YIG) ne fondent pas convenablement, CaCo_3 et SiC à la pression atmosphérique, se décomposent avant leur fusion, et SiO_2 présente une transformation de phase à l'état solide entre le point de fusion et la température ambiante; par conséquent aucun monocristal de ces matériaux ne peut être obtenu par croissance en bain de fusion.

Dans plusieurs cas, du point de vue thermodynamique, les trois méthodes peuvent être utilisées pour la croissance des monocristaux des matériaux donnés. Dans de tels cas le choix d'une méthode doit être basé sur la cinétique de croissance (vitesse de croissance) et les exigences de volume, forme, pureté, qualité, et économie. Par exemple, comme tous les solvants ont une solubilité finie dans SiC solide, les cristaux de ce dernier de haute pureté ne peuvent être obtenus en solution. De même comme la vitesse de la croissance en phase vapeur est nettement inférieure à celle de la croissance en bain de fusion, l'économie (au moins à présent) empêche l'obtention de très grands cristaux en phase vapeur.

Dans chacune des catégories de méthodes de croissance il existe plusieurs techniques, dont beaucoup d'entre elles sont spécifiques à une série d'exigences particulières. Dans ce qui suit les principes généraux, les avantages et les inconvénients des méthodes les plus utilisées seront brièvement examinées.

I-7-1 Croissance en solution :

La cristallisation à partir d'une solution est le fait de l'abandon par le solvant de l'excédent de la matière dissoute. Il en résulte que les cristaux ne peuvent précipiter que dans des solutions sursaturées.

La sursaturation peut être obtenue de différentes manières, selon la solubilité du matériau dans le solvant choisi, et les résultats désirés. Ainsi on peut:

- 1) Eliminer une partie du solvant par évaporation
- 2) Abaisser la température de la solution
- 3) Additionner le soluté

Bien que la croissance en solution soit largement utilisée pour la fabrication de produits Commerciaux sous forme de petits grains de monocristaux, elle est aussi très utilisée dans les laboratoires de cristallogenèse pour l'étude de phénomènes de la croissance cristalline, vu sa simplicité de réalisation et qu'elle permet, surtout, l'observation et le contrôle direct de la croissance.

Avec cette méthode on peut fabriquer de gros cristaux avec des qualités convenable tels que, ADP, KDP, ALUN, RS...

I-7-2 Croissance en phase vapeur:

Lorsque les matériaux se décomposent ou présentent des changements de phase bien qu'elle soit très sophistiquée dans son implantation pratique. La technique Cz est très simple dans ses principes: un bain de silicium fondu est maintenu dans Avant sa fusion, et quand les solvants adéquats ne sont pas disponibles, la seule alternative qui reste pour les obtenir sous forme de monocristaux, est de les faire croître à partir de la phase vapeur.

En général il est très difficile de faire croître de gros cristaux à partir de la phase vapeur en comparaison avec a croissance en bain de fusion ou en solution. Malgré cela, la méthode offre plusieurs avantages:

h Le degré de sursaturation est plus facile à contrôler que dans la croissance en bain de fusion, de plus les gaz sont généralement obtenus avec des degrés de pureté supérieurs à ceux des liquides, et cette pureté peut être facilement maintenue pendant la croissance.

Pour ces raisons la croissance en phase vapeur est souvent la méthode préférée pour étudier les processus de croissance.

Les nombreux appareils utilisés en pratique. Reposent sur le même principe, qui consiste à faire condenser la vapeur des substances cristallisantes, obtenues à haute température, dans des régions froides. La différence entre ces appareils réside dans la manière d'accomplir ce processus.

I-7-3 Croissance en bain de fusion:

En principe, tous les matériaux peuvent donner des monocristaux en bain de fusion, à condition qu'ils fondent convenablement, ne se décomposent pas avant de fondre, et ne présentent aucune transformation de phase entre le point de fusion et la température de la salle. Car les transformations de phase sont généralement accompagnées de changements de volume impliquant des tensions excessives, défauts ou polycristallisation.

La croissance en bain de fusion est de loin la méthode de croissance la plus rapide, du fait que sa vitesse de croissance ne dépend pas du processus de transport de masse, contrairement à la croissance en solution et en phase vapeur. Elle peut être obtenue par une large variété de technique dépendant des propriétés spécifiques du matériau, telle que la contraction ou l'expansion durant la solidification, et aussi des exigences de volume, forme et composition (distribution du dopant).

Enfin dans cette méthode on utilise parfois des semences ou germes (seed) pour faciliter la cristallisation ou pour obtenir des cristaux avec des orientations bien définies.

I-7-3-1 Technique de Czochralski (CZ):

Imaginée par Czochralski en 1917 [29,30] dans le but d'étudier la vitesse de cristallisation des métaux (Fig. I-10). Un creuset à une température légèrement supérieure à la température de fusion et un germe monocristal est plongé dans le bain. L'évacuation de la chaleur par le germe et la tige de support doit alors permettre de refroidir suffisamment le bain pour provoquer une solidification. Si la balance thermique est favorable, les atomes du matériau fondu s'agglomèrent sur le germe monocristallin en épousant sa structure. Un solide ordonné se forme progressivement, le germe est alors écarté du bain avec une vitesse de tirage de l'ordre de quelques centimètres par heure, entraînant avec lui le lingot monocristalin produit. Au cours de la croissance, le creuset se vide au fur et à mesure perturbant l'équilibre thermique axisymétrique et pour mieux contrôler l'écoulement du fluide dans le bain et la distribution des éléments dopants ou des impuretés près de l'interface. Un isolant thermique est souvent placé au-dessus du creuset afin d'atteindre le taux de transfert radiatif désiré. Le système complet est protégé par une enceinte en acier inoxydable.

Le gradient de température dans le système de croissance est à l'origine des courants de convection dans le bain. Ces écoulements jouent un rôle important dans le processus de croissance en agissant sur la forme et la stabilité de l'interface de croissance, ainsi que sur la distribution radiale des dopants dans le cristal.

I-7-3-2 Technique de la zone flottante:

Inventée par Keck et Golay en 1953 pour la purification du Silicium. La technique de croissance cristalline dite de zone flottante permet d'obtenir des cristaux de haute qualité (Fig. I-11). Elle consiste à fondre, par chauffage radiatif, une zone joignant deux barreaux solides dont l'un a une structure monocristalline. La zone fondue se maintient par capillarité. Le déplacement de la source de chaleur permet de forcer la solidification du fluide sur le monocristal, le matériau se solidifie en adoptant la structure. La zone liquide est le siège d'un écoulement thermocapillaire lié à l'inhomogénéité de la tension de surface liée à la surface libre, due à celle de la température. Ce type de convection est prédominant en micro-gravité, ce qui est le cas des expériences effectuées dans l'espace. Les écoulements ainsi obtenus ne sont pas stationnaires, ce qui a pour effet de créer des striations dans la structure du matériau [48].

I-7-3-3 Technique T.H.M (Travelling Heater Method):

Dans cette technique une zone fondue est créée à l'une des extrémités de l'échantillon polycristallin (Fig. I-12), ensuite elle est déplacée vers l'autre extrémité en translatant le four ou l'échantillon [31].

La matière polycristalline fond et recristallise en monocristal au fur et à mesure que la zone fondue avance. Cette technique est très bien connue comme technique de purification, car passages répétés de la zone, le segment cristallin devient progressivement pur (raffinage par zone).

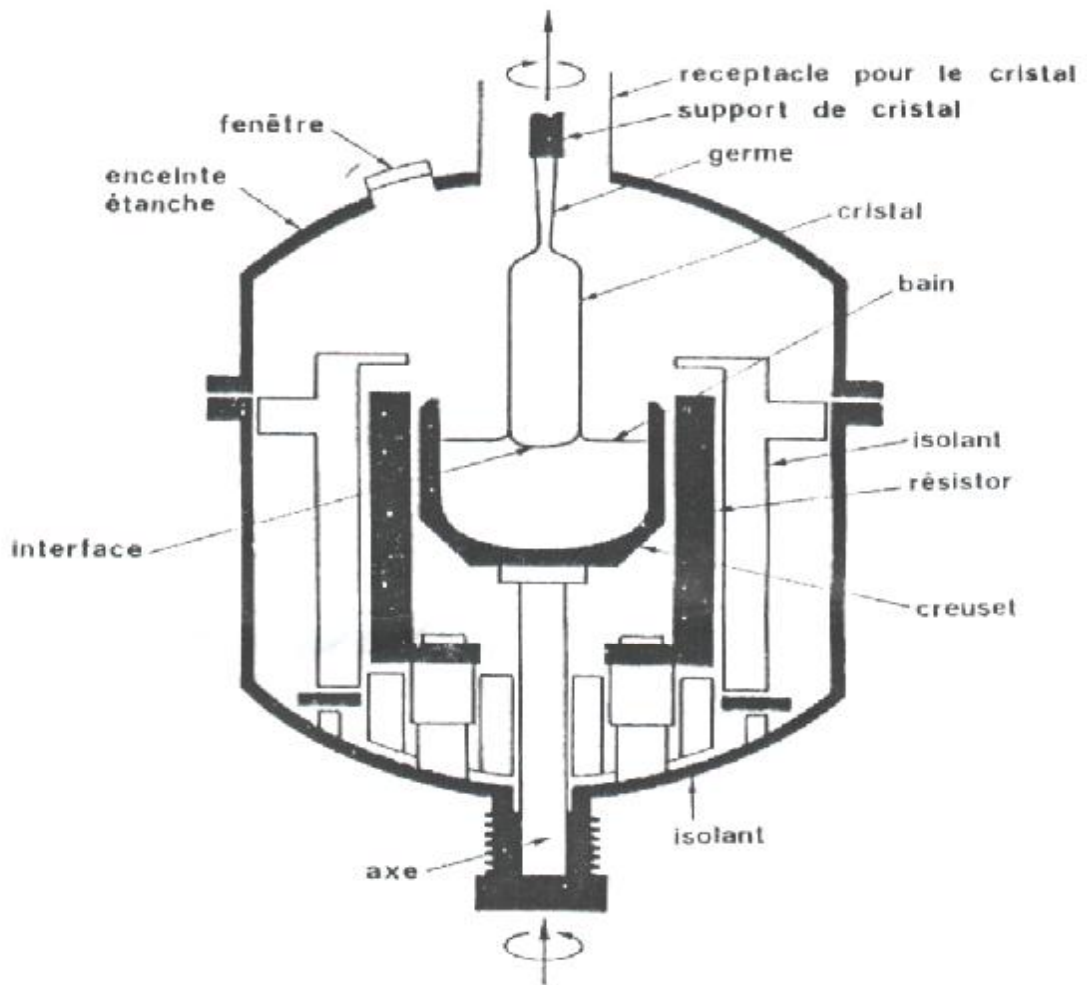


Fig. I-11 Schéma du four Czochralski

I-7-3-4 Technique de Bridgman:

Elle a été inventée par Bridgman en 1925 pour la croissance des cristaux métalliques (W, Sb, Bi, Te, Zn, Sn). Par la suite, Stockbarger l'a étendue pour la croissance des cristaux Alkali-halides (KCl, NaCl,.....)[31].

La technique Bridgman est basée sur le principe de la migration de l'ampoule contenant CdTe suivant un gradient de température. Dans cette technique deux configurations sont adoptées; l'une consiste en la translation horizontale de l'ampoule (Bridgman horizontale), et l'autre à la translation verticale (Bridgman verticale) (Fig. I-13 - a, b).

I-8 Croissance des cristaux CdTe par la méthode Bridgman horizontale:

La technique de Bridgman horizontale peut être assumée pour avoir de bonnes perspectives pour usage du futur [6]. Depuis la qualité de cristaux a obtenu de la volonté dans quelques paramètres décisifs ceux-là qui peuvent être produits par la technique CZ, et la méthode Bridgman verticale.

Le modèle le plus simple d'un four Bridgman horizontale est représenté sur la figure (I-15)

- Une zone chaude (hot zone); c'est la partie supérieure du four, les résistances chauffantes permettent de maintenir à cette zone une température T_{haute} inférieure à la température de fusion de matériau.

- Une zone froide (cold zone); c'est la partie inférieure du four, les résistances chauffantes permettent de maintenir cette zone à une température T_{basse} inférieure à la température de fusion de matériau

- Les deux zones précédentes sont séparées par une zone démunie de résistances chauffantes, les parois de cette zone sont adiabatiques. Ainsi la différence de température entre ces deux zones laisse naître un gradient thermique, pour cette raison on l'appelle zone de transition, zone adiabatique ou zone à gradient. Bridgman horizontale de croissance cristallin, formé par un creuset en quartz qui contient un CdTe.

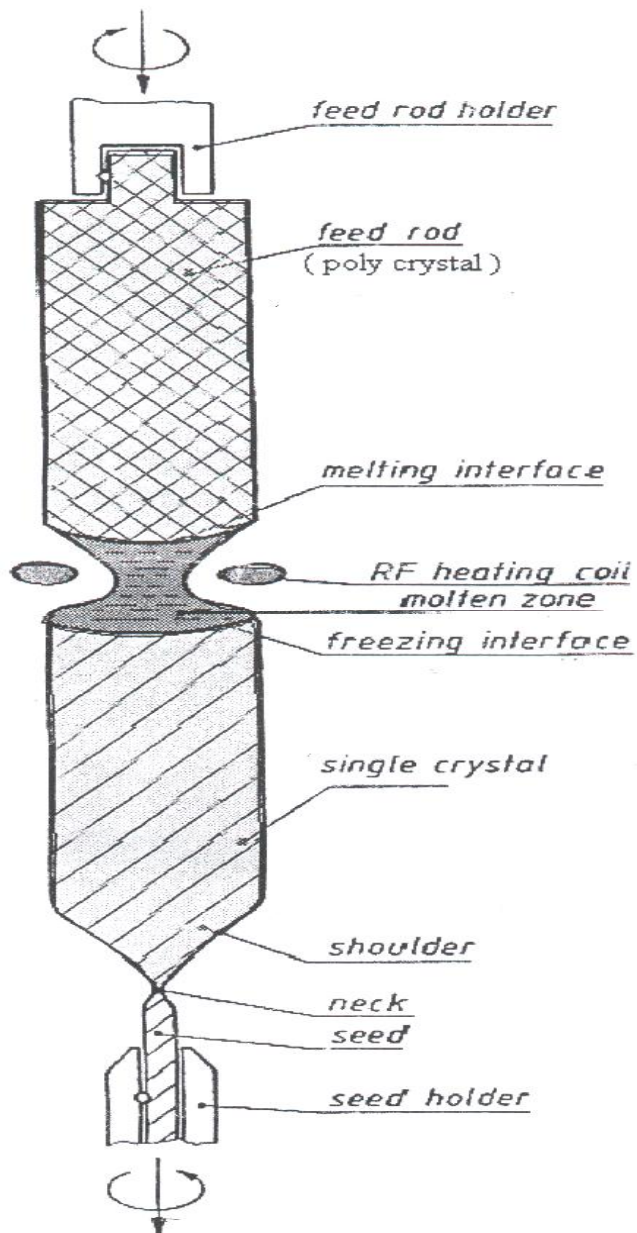


Fig.I-12: Schéma de la méthode (FZ)

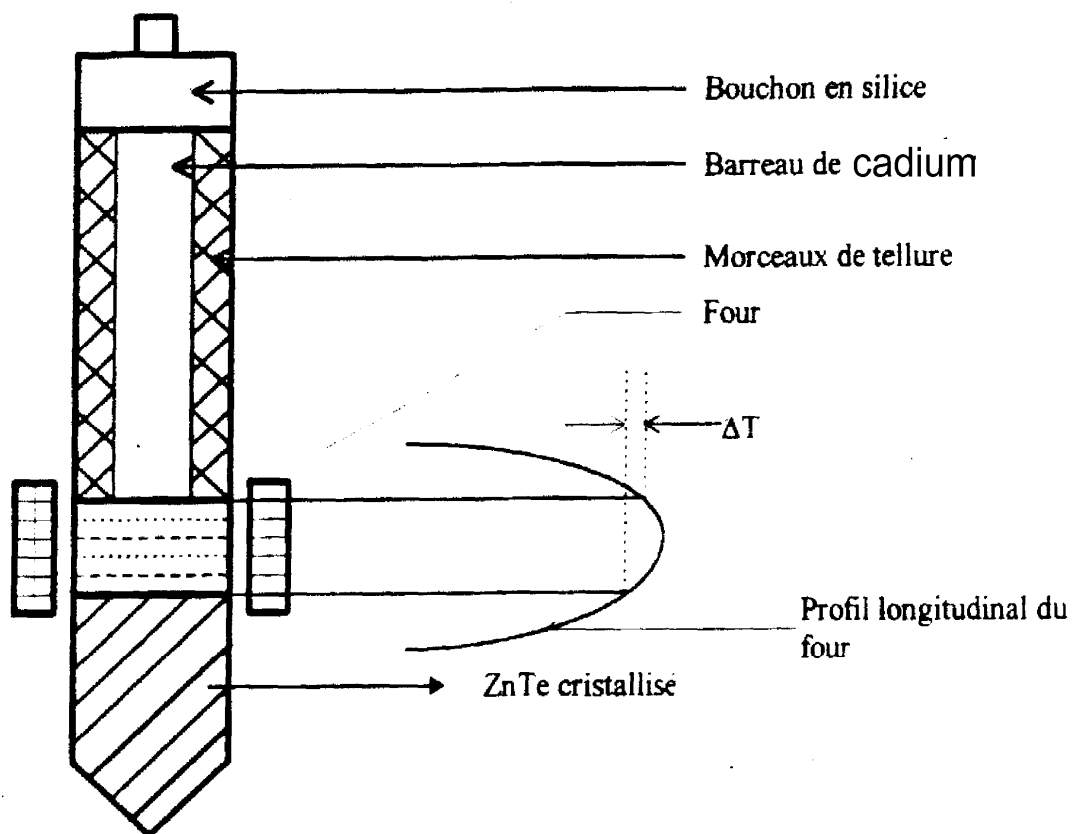
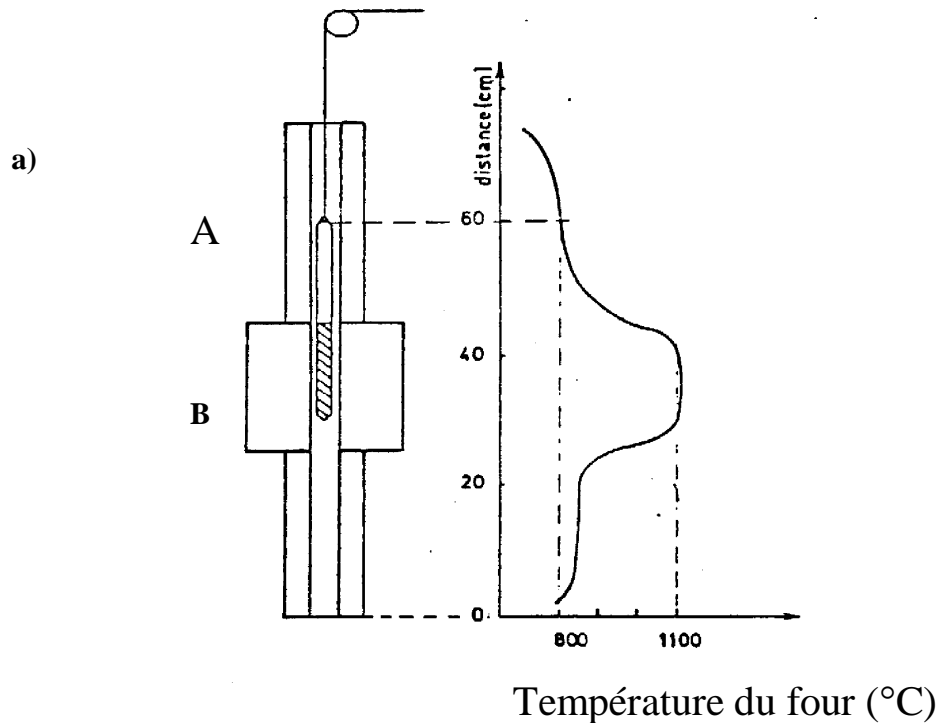


Fig. I-13: Schéma représentant le principe de la méthode de croissance T.H.M.



ABC : Fours

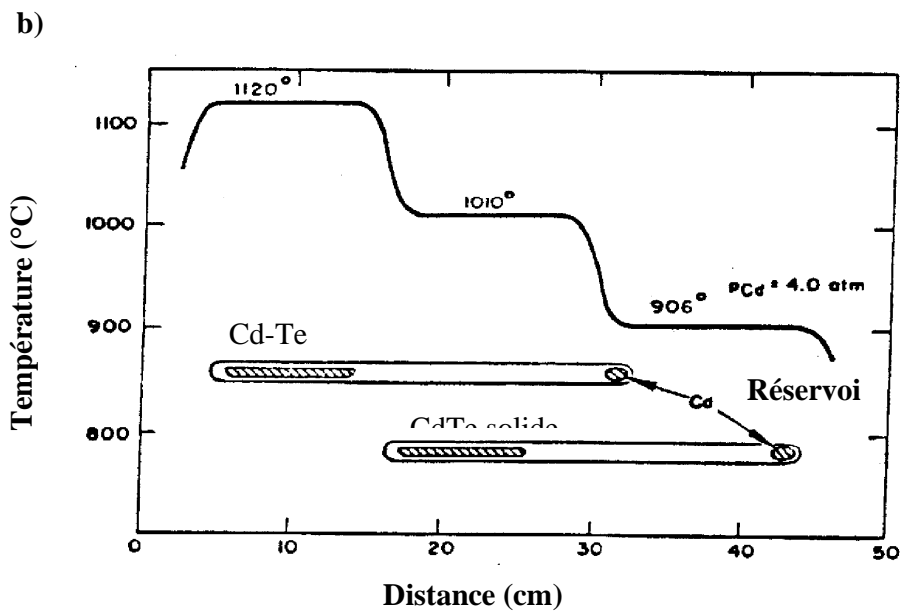


Fig.I-14: Méthode de croissance Bridgman: a) Vertical. b) horizontal

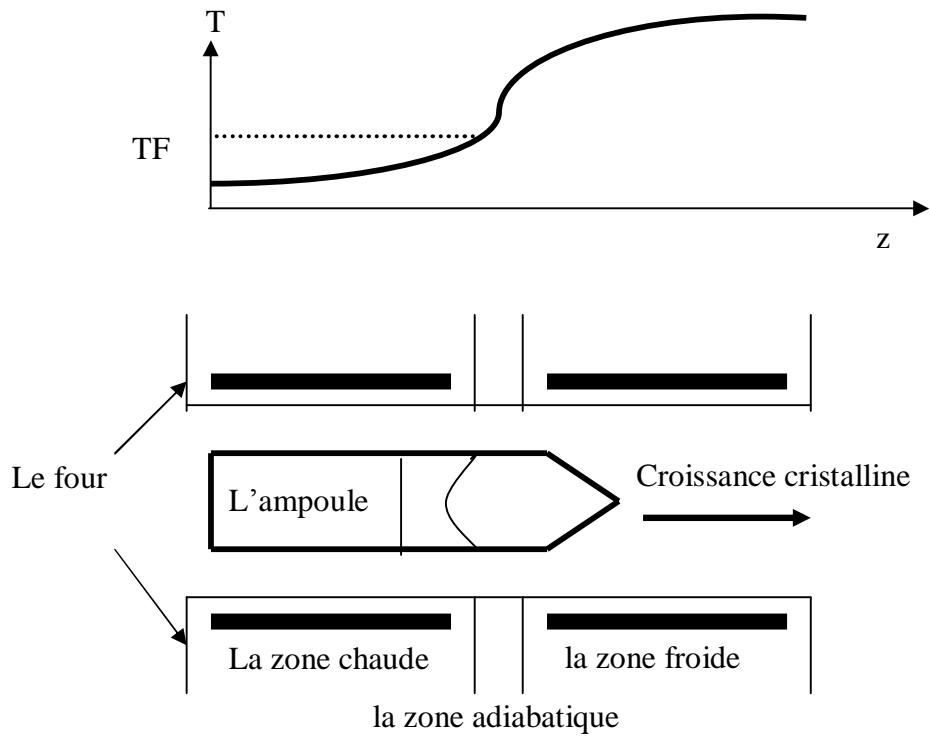


Fig I- 15 Schéma d'un four Bridgman horizontale et distribution de la température.

II - 1 Introduction:

Dans ce chapitre, nous décrivons et nous formulons le modèle physique qui régit notre problème en expliquant et en déterminant l'interface liquide / solide.

On met en équations le problème de la conduction de chaleur dans les deux phases liquide et solide, et ainsi que celui des contraintes à trois dimensions avec des conditions aux limites, et des hypothèses simplificatrices.

II-2 Etude thermique:

II-2-1L'équation différentielle de la conduction de chaleur à l'état quasi-stationnaire:

L'analyse de la distribution de la température dans le cristal doit avoir une résolution de l'équation différentielle de la conduction de la chaleur [6].

$$dQ = J.ds dt = \text{div } J.d \tau dt \quad (\text{II-1})$$

J est le vecteur de flux thermique, dQ est la chaleur de transfert dans la surface ds dans le volume d τ durant un temps infinitésimal dt.

Il est possible de considérer la variation de la quantité de chaleur Q pendant le temps dt, et dans le volume d τ , sous ces conditions, l'équation de conservation de l'énergie est écrite sous la forme:

$$\text{div}J.d \tau dt - Q.d \tau dt = -\rho c d \tau dt \quad (\text{II-2})$$

ρ est la masse volumique, c est la capacité calorifique Par dérivation on aboutit à:

$$\frac{K}{\rho c} \nabla^2 T + \frac{Q}{\rho c} = \frac{\partial T}{\partial t} \quad (\text{II-3})$$

K est la conductivité thermique, l'équation (II-2) devienne Dans notre cas, Q est une fonction de la vitesse de tirage v dans la direction z

$$Q = -v \rho \frac{\partial T}{\partial z} \quad (\text{II-4})$$

De (II-3) et (II-4) l'équation de la conduction de chaleur devient:

$$\frac{K}{\rho c} \nabla^2 T = \frac{\partial T}{\partial t} + v \frac{\partial T}{\partial z} \quad (\text{II-5})$$

La vitesse de tirage varie entre 1 et 4 mm/h, le terme $v \frac{\partial T}{\partial z}$ est donc négligeable [50], et on aura donc:

$$\frac{K}{\rho c} \nabla^2 T = \frac{\partial T}{\partial t} + S \quad (\text{II-6})$$

S est le terme source induit le dégagement ou de l'absorption du chaleur à l'interface solide/liquide.

Dans le cas d'un problème à une géométrie cylindrique axisymétrique, l'équation différentielle de la conduction de chaleur dans un repère de coordonnées cylindriques (r, θ, z) s'écrit comme suit:

$$\rho c \frac{\partial T}{\partial t} = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(rK \frac{\partial T}{\partial r} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(rK \frac{\partial T}{\partial z} \right) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\frac{K}{r} \frac{\partial T}{\partial \theta} \right) + S \quad (\text{II-7})$$

On a déjà signalé que la vitesse de tirage est négligeable, dans notre cas (la croissance du Bridgman horizontale), donc, l'état étudié est un état quasi-stationnaire, c'est à dire le cas le étudié est en phénomène indépendant du temps ($\frac{\partial T}{\partial t} = 0$), d'autre part on néglige le phénomène de convection dans la phase liquide ($u_x = u_y = u_z = 0$), alors l'équation différentiel de la conduction de la chaleur pour un milieu isotrope et axisymétrique à trois dimensions s'écrit:

$$K \left(\frac{\partial^2 T}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial T}{\partial r} + \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 T}{\partial \theta^2} \right) + S = 0 \quad (\text{II-8})$$

II-2-2 Modèle physique:

Le modèle le plus simple d'un four Bridgman horizontale est représenté sur (fig. II-1), c'est le système Bridgman horizontale de croissance cristalline. Le matériau de départ est fondu dans un creuset en quartz puis solidifié par un déplacement unidirectionnel lent a travers un gradient de température maintenu par un four spécial qui a un axe parfaitement aligné à la horizontale, en lasse l'ampoule immobile jusqu'à ce que le matériau polycristalline puis en entraîne le creuset lentement horizontalement causant la solidification.

II-2-3 Hypothèse simplificatrices:

Les hypothèses que nous considérons dans notre étude sont les suivantes:

- Le bain fondu est un fluide newtonien (la contrainte est une fonction linéaire de la dérivée primaire de la vitesse) incompressible ($\rho = \text{cte}$).
- L'écoulement du liquide au sein du creuset est tridimensionnel.
- Dans notre étude on considérant l'état stationnaire, donc les variations de la température avec le temps sont nulles.
- Le champ thermique dans le système est axisymétrique.
- L'influence des parois de l'ampoule de croissance est négligeable.

- Le gradient de température dans le système de croissance est à l'origine des courants de convection dans le bain.

- quand le fondu est un dilué le mélange, la solidification connecté aussi correspond au point de fusion isotherme: $T_m = T_l = T_f$

II-2-4 Equations de problème:

Notre problème à une géométrie cylindrique axisymétrique de rayon R et de hauteur Z, et donc le système Bridgman étudié est représentée à moitié (Fig. II-2), il est divisé en deux domaines, le liquide (D1), et le solide (D2), les contours sont notés (dDi). Les équations aux dérivées partielles qui expriment l'équilibre énergétique dans les deux phases sont:

a - Phase liquide:

L'équation de la conduction dans la phase liquide représentée sur le domaine (Dl) est:

$$\frac{\partial}{\partial r} \left(rK_l \frac{\partial T}{\partial r} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(rK_l \frac{\partial T}{\partial z} \right) + \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\frac{K_l}{r} \frac{\partial T}{\partial \theta} \right) = 0 \quad (\text{II-9})$$

K_l est la conductivité thermique du liquide.

B - Phase solide:

L'équation de la conduction dans la phase solide représentée sur le domaine (Ds) est:

$$\frac{\partial}{\partial r} \left(rK_s \frac{\partial T}{\partial r} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(rK_s \frac{\partial T}{\partial z} \right) + \frac{\partial}{\partial q} \left(\frac{K_s}{r} \frac{\partial T}{\partial q} \right) = 0$$

(II-10)

K_s est la conductivité thermique du solide.

c- Etude de l'interface :

Nous avons supposé que l'interface liquide/solide est une isotherme pour $T = T_f$, T_f est la température de fusion du matériau. D'autre part il est le siège d'un dégagement de chaleur. Au voisinage de l'interface, l'évacuation de la chaleur par liquide, le germe doit alors permettre de refroidir suffisamment le bain de croissance pour provoquer une solidification, donc la chaleur dégagée à l'interface provient de la chaleur latente de solidification. Donc l'équation différentielle de la conduction s'écrit :

$$\frac{\partial}{\partial r} \left(rK_s \frac{\partial T}{\partial r} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(rK_s \frac{\partial T}{\partial z} \right) + \frac{\partial}{\partial q} \left(\frac{K_s}{r} \frac{\partial T}{\partial q} \right) + rS = 0 \quad (\text{II-11})$$

La chaleur dégagée à l'interface dépend de la vitesse de croissance [32]. (La condition de Stefan).

II-2-5 Traitement de terme source:

Dans la simulation numérique de ces problèmes comme pour la croissance Bridgman horizontale qui est un problème de changement de phase en tenant compte le changement dans les propriétés de deux phases et la libération / absorption de chaleur latente de fusion à l'interface solide/liquide (Fig.II-3) [32].

S Est une énergie volumique, elle est donnée par l'intégrale:

$$S = \int_V s d(x - x_f) dV \quad (\text{II-12})$$

$\delta(x - x_f)$ Est une fonction delta de distribution qui s'annule partout sauf à l'interface $X = X_f$ (rf, zf). [33] tel que:

$$\begin{cases} \delta(x - x_f) = 0, x \neq x_f \\ \delta(x - x_f) \neq 0, x = x_f \end{cases} \quad (\text{II-13})$$

On a aussi: $s = \rho_s V L$

$$\dot{V} = \left(\frac{dx_f}{dt} \right) \cdot \mathbf{n}$$

Et $L = \rho_s \Delta H$ (II-14)

\mathbf{n} est la normale à l'interface solide/liquide, \dot{V}_n est la vitesse normale à l'interface, r_s est la masse volumique du solide, ΔH est la chaleur latente de fusion absorbée ou libérée à l'interface.

Le changement de phase est illustré par la condition de Stefan:

$$K_l \left(\frac{\partial T}{\partial n} \right)_l + K_s \left(\frac{\partial T}{\partial n} \right)_s = r_s \dot{V}_n \Delta H \quad (\text{II-15})$$

On a:

$$\dot{V}_n = V_p \cos q$$

Avec $\theta = (\mathbf{n}, \mathbf{Z})$

L'équation (II-15) devient:

$$- K_l \left(\frac{\partial T}{\partial n} \right)_l + K_s \left(\frac{\partial T}{\partial n} \right)_s = r_s V_p \Delta H \cos q \quad (\text{II-16})$$

Le second membre de l'équation (II-16) est égale à la chaleur dégagée à l'interface donc il est le terme source:

$$S = r_s V_p \Delta H \cos q \quad (\text{II-17})$$

À l'interface:

$$T = T_f \quad (\text{II-18})$$

I-2-6 Détermination de l'interface:

Dans les études du transfert thermique avec changement de phase, la source des difficultés réside dans la détermination de la forme et la position de l'interface solide/liquide, surtout dans le cas des problèmes multidimensionnels comme dans notre cas le problème à trois dimensions. Hsich et Choi, et, Bratikus et Meiron ont utilisé la méthode de source de chaleur (l'interface solide/liquide) en mouvement pour la condition de Stefan simple. Cette méthode est basée sur la libération (ou absorption) de chaleur latente de fusion, par une source (ou puit) en mouvement située à l'interface. (La plupart des simulations, sont basées sur une technique d'immobilisation de l'interface: Wu, Prud'homme et Nguuyen [48]. On appliqué, un maillage adapté à la forme de l'interface pour simuler la fusion autour d'un cylindre horizontale isotherme).

II-2-7 Effet de la conductivité thermique sur la forme de l'interface:

Le calcul de la forme de l'interface solide/liquide au cours de la croissance en Bridgman est réalisé par la méthode des éléments finis [37] il est en accord avec les expériences de décantation et les analyse par balance de chaleur menée par Feigelson et Route sur CdGeAs₂ [36], ils aboutissent aux conclusions suivantes:

-Un gradient de température uniforme avec une valeur égale de la conductivité thermique du liquide K_l et du solide K_s donne une interface plane.

-Si la conductivité thermique du liquide est plus, grande de celle de solide toujours dans le cas de la température uniforme, l'interface sera concave.

-Toujours pour K_l plus grand de K_s , mais avec une réduction ou une augmentation abrupte du gradient de température respectivement au-dessus ou dessous de l'interface solide/liquide, cela permet de compenser l'effet de la conductivité thermique de liquide et solide. On aura une interface convexe. [47].

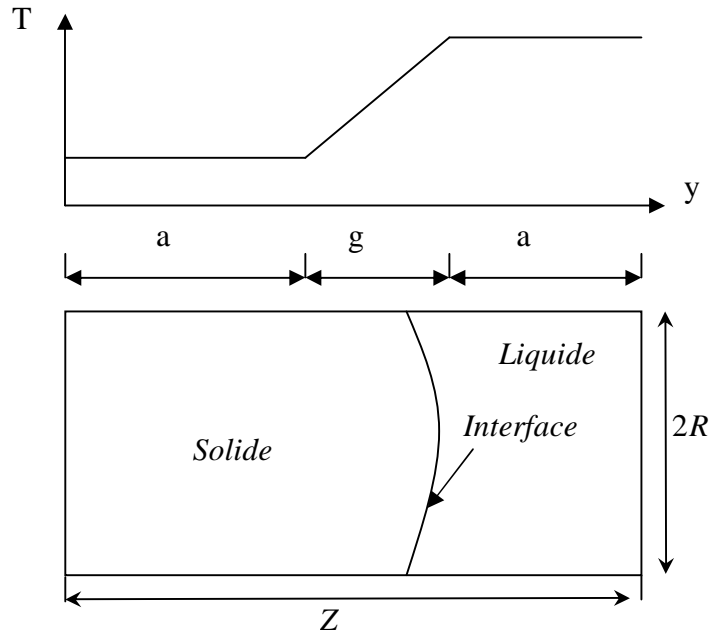


Fig. II-1: Géométrie d'un Bridgman horizontale avec le profil de température imposée

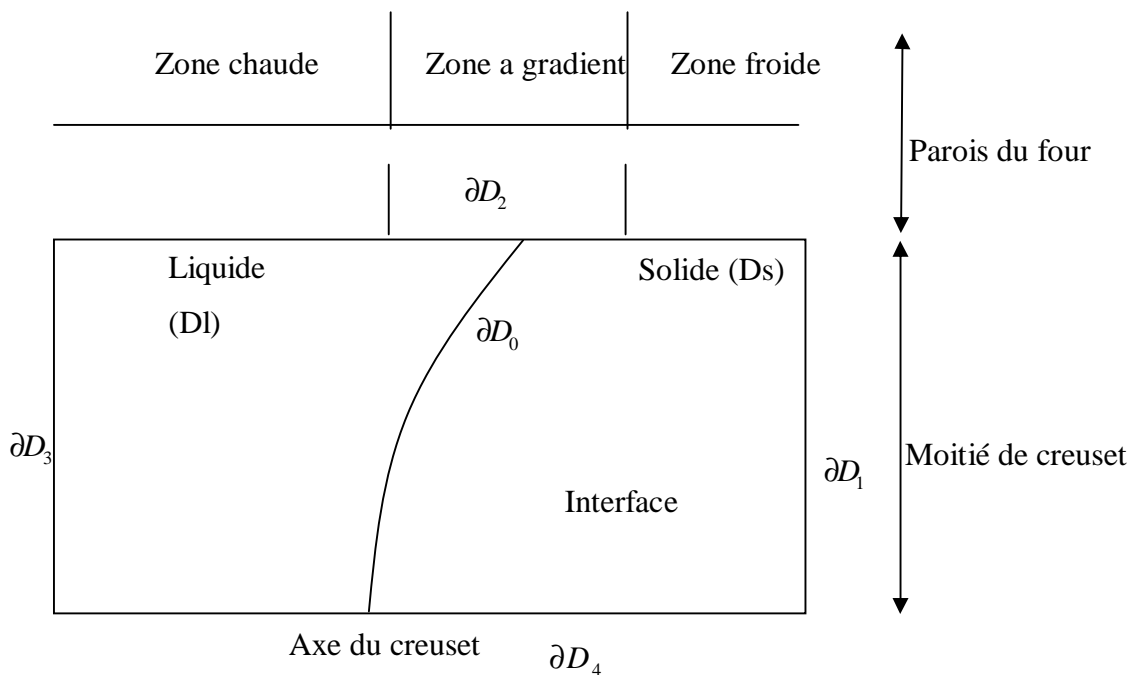


Fig. II-2: Schéma du système étudié

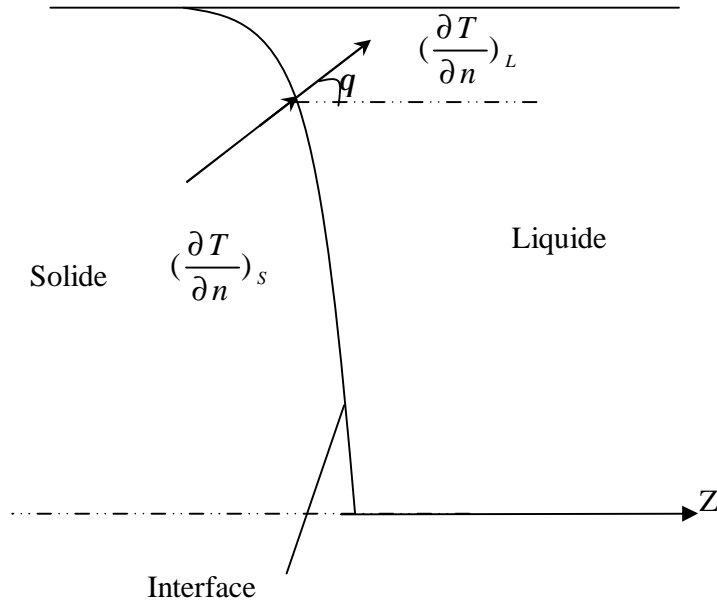


Figure II - 3: Gradient thermique à l'interface

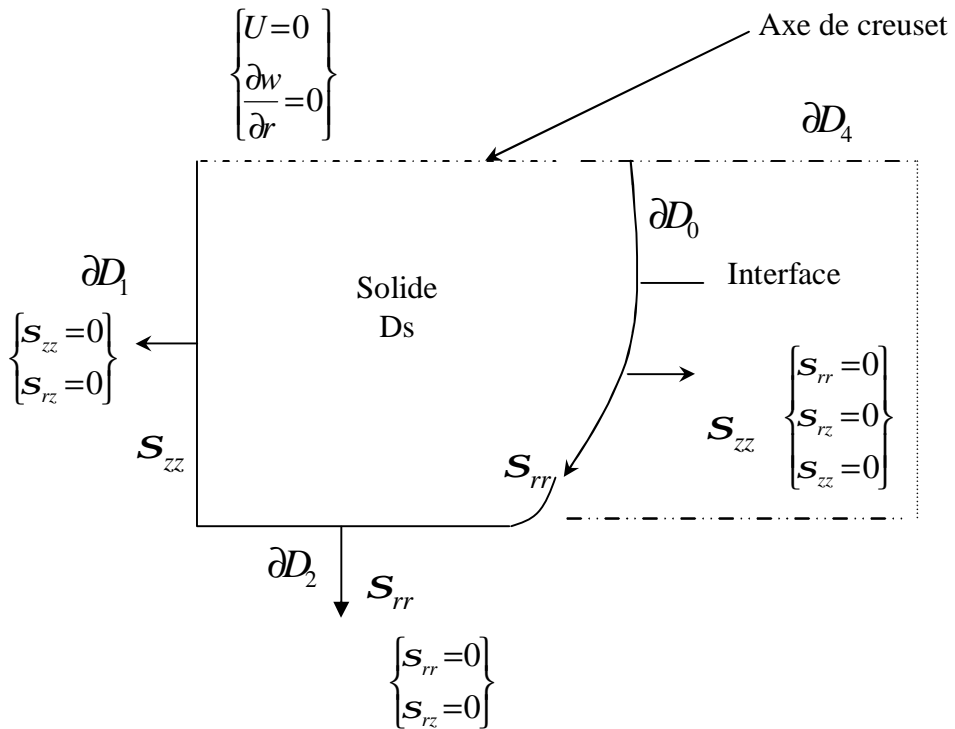


Fig. II-4: La phase solide et conditions aux limites

II-2-8 Formulation finale de l'équation de conduction :

Les équations (II-11) et (II-14) incorporent la balance d'énergie à l'interface et les calculs numériques du champ de température dans les deux phases sont très simples. On sépare la phase solide et la phase liquide avec une fonction indicatrice $I(x)$ (l'annexe A), et elle est définie comme suit [33]:

$$I(x) = 1 \quad \text{pour la phase solide}$$

$$I(x) = 0 \quad \text{pour la phase liquide}$$

Cette fonction sert à donner une seule équation de conductivité thermique:

$$K(x) = K_l + (K_s - K_l) I(x) \quad (\text{II-19})$$

Donc les équations qui gouvernent notre problème sont:

$$\frac{\partial}{\partial r} \left(r K_s \frac{\partial T}{\partial r} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(r K_s \frac{\partial T}{\partial z} \right) + \frac{\partial}{\partial q} \left(\frac{K_s}{r} \frac{\partial T}{\partial q} \right) + S = 0 \quad (\text{II-20})$$

$$S = \int_V s \delta(x - x_f) dV \quad (\text{II-21})$$

$$s = \rho V \Delta H \quad (\text{II-22})$$

II-2-9 Conditions aux limites:

Les conditions aux limites, sont de plusieurs types, flux thermique nul, parois isothermes, surface libre. Ces différentes conditions sont résumées comme suit (fig. II-4):

✓ Surface libre de bain:

$$0 < z < Z$$

$$r = 0$$

✓ surface latérale de creuset :

$$r = R \quad 0 \leq z \leq a \quad T = T_b$$

$$a \leq z \leq a+g \quad T = T_b + \left(\frac{z - z_a}{z_{a+g} - z_a} \right) \frac{\partial T}{\partial z}$$

$$a+g \leq z \leq Z \quad T = T_h$$

✓ Surface latérale droite du creuset:

$$z = Z \quad 0 \leq r \leq R \quad T = T_n$$

✓ Surface latérale gauche de creuset :

$$z = 0 \quad 0 \leq z \leq Z \quad T = T_b$$

✓ Axe central du creuset (condition de symétrie) :

$$r=0 \quad 0 \leq r \leq R \quad \frac{\partial T}{\partial r} = 0$$

II-3 Résumé de la formulation de problèmes thermoélastiques:

II-3-1 Introduction:

Le problème considéré consiste en la détermination des constantes élastiques et les déformations dans les corps solides soumis à des distributions de température.

La formulation a été basée sur trois principales suppositions : la température peut être déterminée indépendamment des déformations du corps, les déformations sont petites, et le matériau se comporte d'une façon élastique à tout moment.

II-3-2 Contrainte thermique dans les cristaux aux cours de la croissance Bridgman:

Le but de ce paragraphe est de faire un calcul détaillé de l'état de contrainte des cristaux de CdTe en croissance Bridgman horizontale.

La distribution de la température dans le cristal, pendant la croissance à partir d'un bain fondu, crée des contraintes thermiques.

La nucléation de dislocation peut être expliquée par la formation de boucles d'interstitiels ou de lacunes pouvant ensuite agir comme des sources de Frank-Read.

Une autre explication est liée à d'éventuels glissements cristallographiques se présentant lorsque les contraintes thermiques engendrées pendant la croissance dépassant une certaine valeur critique nommée de la contrainte CRSS (Critical Resolved Shear Stress).

La propagation et la multiplication des dislocations dans le lingot sont essentiellement dues à ces contraintes thermiques.

Une bonne connaissance de l'état de contrainte du lingot peut donc nous aider à la compréhension des phénomènes de nucléation, de propagation et de multiplication des dislocations pendant la croissance.

II-3-3 Analyse théorique des contraintes thermoélastique:

Le but de ce paragraphe de faire un calcul détaillé de l'état des contraintes des cristaux CdTe en croissance Bridgman horizontale.

Pour résoudre les problèmes en théorie d'élasticité par la méthode des différences finies, il faut prendre en compte le champ des déplacements. Comme les déplacements sont connus, il est possible de trouver les déformations et les contraintes [37], avec des hypothèses simplifiées et des conditions aux limites appropriées.

Pour un corps solide thermoélastique, les contraintes sont reliées aux déformation selon la loi de Hooke [38, 39, 40] comme suis:

$$\{\sigma\} = [C] \{\varepsilon\} - [C] \{\varepsilon_0\} \quad (\text{II-23})$$

$\{\sigma\}$ Est le tenseur de contrainte pour un système axisymétrique, il est donnée par:

$$\{\sigma\} = \begin{Bmatrix} \sigma_{rr} \\ \sigma_{zz} \\ \sigma_{\theta\theta} \\ \sigma_{rz} \\ \sigma_{r\theta} \\ \sigma_{z\theta} \end{Bmatrix} \quad (\text{II-24})$$

$(\sigma_{rr}, \sigma_{zz}, \sigma_{\theta\theta}, \sigma_{rz}, \sigma_{r\theta}, \sigma_{z\theta})$ Sont les composantes du tenseur des contraintes.

$[C]$ Représente une matrice des constants élastiques caractérisant le matériau isotrope et liée au module d'Young E et au coefficient de Poisson ν . Dans le cas d'un système cubique, trois constantes élastique sont indépendantes C_{11}, C_{12}, C_{44} . (théorie de dislocation) [41].

$$[C] = \begin{bmatrix} c_{11} & c_{12} & c_{12} & 0 & 0 & 0 \\ c_{12} & c_{11} & c_{12} & 0 & 0 & 0 \\ c_{12} & c_{12} & c_{11} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & c_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & c_{44} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & c_{44} \end{bmatrix} \quad (\text{II-25})$$

$$c_{11} = \frac{(1-\nu)E}{(1+\nu) \times (1-2\nu)}$$

$$c_{11} = \frac{\nu E}{(1+\nu) \times (1-2\nu)} \quad (\text{II-26})$$

$$c_{44} = \frac{(1-\nu)E}{2(1+\nu) \times (1-2\nu)}$$

$\{\varepsilon\}$ Indique le vecteur colonne relatif à la déformation totale due aux déplacements.

$\varepsilon_{rr}, \varepsilon_{zz}, \varepsilon_{\theta\theta}, \gamma_{rz}, \gamma_{r\theta}, \gamma_{z\theta}$ Sont les composantes du tenseur de déformation, et ils sont déterminés à partir des déplacements comme suit:

$$\begin{aligned}
 \varepsilon_{rr} &= \frac{\partial u}{\partial r} \\
 \varepsilon_{zz} &= \frac{\partial w}{\partial z} \\
 \varepsilon_{\theta\theta} &= \frac{u}{r} + \frac{1}{r} \frac{\partial v}{\partial \theta} \\
 \varepsilon_{r\theta} &= \frac{1}{2} \left(\frac{1}{r} \frac{\partial u}{\partial \theta} + \frac{\partial v}{\partial r} - \frac{v}{r} \right) \\
 \varepsilon_{rz} &= \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial r} \right) \\
 \varepsilon_{z\theta} &= \frac{1}{2} \left(\frac{\partial v}{\partial z} + \frac{1}{r} \frac{\partial w}{\partial \theta} \right)
 \end{aligned} \tag{II-28}$$

Et $\{\varepsilon_0\}$ est le vecteur colonne relatif à la distribution de température dans le cristal, elle définie par:

$$\{\varepsilon_0\} = \alpha(T - T_0) \begin{Bmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{Bmatrix} \tag{II-29}$$

α Est le coefficient de dilatation.

T est la température du corps à la croissance Bridgman horizontale.

T_0 est la température du corps à un état initiale (sans déformation).

II-3-4 Equations d'équilibre en terme de contraintes :

L'équation d'équilibre est le même que celle d'élasticité. Dans les coordonnes cylindrique r, θ , z les équations de l'équilibre[37] sont:

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial s_{rr}}{\partial r} + \frac{1}{r} \frac{\partial s_{rq}}{\partial q} + \frac{\partial s_{rz}}{\partial z} + \frac{s_{rr} - s_{qq}}{r} + R &= 0 \\
 \frac{\partial s_{rz}}{\partial r} + \frac{1}{r} \frac{\partial s_{rq}}{\partial q} + \frac{\partial s_{zz}}{\partial z} + \frac{s_{rz}}{r} + Z &= 0 \\
 \frac{\partial s_{rq}}{\partial r} + \frac{1}{r} \frac{\partial s_{qq}}{\partial q} + \frac{\partial s_{qz}}{\partial z} + \frac{2s_{rq}}{r} + \Theta &= 0
 \end{aligned} \tag{II-30}$$

Où R, Z et Θ sont les composants de la force volumique suivant les directions r, z et θ respectivement appliquées sur le corps.

II-3-5 La relations entre la déformation et les déplacements:

Les déformations sont en rapport avec les déplacements dans l'élasticité isotherme, dans une coordonnée cylindriques [37], ces rapports prennent la forme:

$$\begin{aligned}
 \varepsilon_{rr} &= \frac{\partial u}{\partial r} \\
 \varepsilon_{zz} &= \frac{\partial w}{\partial z} \\
 \varepsilon_{\theta\theta} &= \frac{u}{r} + \frac{1}{r} \frac{\partial v}{\partial \theta} \\
 \varepsilon_{r\theta} &= \frac{1}{2} \left(\frac{1}{r} \frac{\partial u}{\partial \theta} + \frac{\partial v}{\partial r} - \frac{v}{r} \right) \\
 \varepsilon_{rz} &= \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial r} \right) \\
 \varepsilon_{z\theta} &= \frac{1}{2} \left(\frac{\partial v}{\partial z} + \frac{1}{r} \frac{\partial w}{\partial \theta} \right)
 \end{aligned} \tag{II-31}$$

Où u, v, et w représentent ici les composants du vecteur du déplacement dans les directions r, z et θ respectivement. [37]

II-3-5-1 Equation d'équilibre en terme déplacement:

L'équation d'équilibre en forme de déplacement (en coordonnées cylindriques): est donnée par:

$$\begin{aligned}
 (\lambda + 2\mu) \frac{\partial e}{\partial r} - 2\mu \left(\frac{1}{r} \frac{\partial w_z}{\partial \theta} - \frac{\partial w_\theta}{\partial z} \right) - (3\lambda + 2\mu) \alpha \frac{\partial T}{\partial r} + R &= 0 \\
 (\lambda + 2\mu) \frac{1}{r} \frac{\partial e}{\partial \theta} - 2\mu \left(\frac{\partial w_r}{\partial z} - \frac{\partial w_z}{\partial r} \right) - (3\lambda + 2\mu) \frac{\alpha}{r} \frac{\partial T}{\partial \theta} + \Theta &= 0 \\
 (\lambda + 2\mu) \frac{\partial e}{\partial z} - \frac{2\mu}{r} \left(\frac{\partial(rv_\theta)}{\partial r} - \frac{\partial w_r}{\partial \theta} \right) - (3\lambda + 2\mu) \alpha \frac{\partial T}{\partial z} + Z &= 0
 \end{aligned} \tag{II-32}$$

Où la dilatation et les composants de rotation dans ce système des coordonné sont:

$$\begin{aligned}
 e &= \frac{1}{r} \frac{\partial (ru)}{\partial r} + \frac{1}{r} \frac{\partial v}{\partial \theta} + \frac{\partial w}{\partial z} \\
 w_r &= \frac{1}{2} \left(\frac{1}{r} \frac{\partial w}{\partial \theta} - \frac{\partial v}{\partial z} \right) \\
 w_z &= \frac{1}{2r} \left(\frac{\partial(rv)}{\partial r} - \frac{\partial u}{\partial \theta} \right) \\
 w_\theta &= \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u}{\partial z} - \frac{\partial w}{\partial r} \right)
 \end{aligned} \tag{II-33}$$

II-4 Contrainte de Von. Misis:

La contrainte de Von Mises est un scalaire important dans la discussion des contraintes dans un corps solide notamment pour la croissance cristalline, tel que le sont des composantes tenseur des contraintes. [37]

$$S_{VM} = \frac{\sqrt{(s_{rr} - s_{zz})^2 + (s_{rr} - s_{\theta\theta})^2 + (s_{zz} - s_{\theta\theta})^2 + 6s_{rz}^2 + 6s_{r\theta}^2 + 6s_{z\theta}^2}}{2} \quad (\text{II-34})$$

Où les composantes de tenseur sont:

$$\begin{aligned} \sigma_{rr} &= \frac{E}{1+\nu} \left[\frac{\partial u}{\partial r} + \frac{\nu}{1-2\nu} \phi + \frac{1+\nu}{1-2\nu} \alpha (T - T_f) \right] \\ \sigma_{\theta\theta} &= \frac{E}{1+\nu} \left[\frac{u}{r} + \frac{1}{r} \frac{\partial v}{\partial \theta} + \frac{\nu}{1-2\nu} + \frac{1+\nu}{1-2\nu} (T - T_f) \right] \end{aligned} \quad (\text{II-35})$$

$$\begin{aligned} \sigma_{zz} &= \frac{E}{1+\nu} \left[\frac{\partial w}{\partial z} + \frac{\nu}{1-2\nu} \phi + \frac{1+\nu}{1-2\nu} \alpha (T - T_f) \right] \\ \sigma_{rz} &= \frac{E}{4(1+\nu)} \left[\frac{\partial w}{\partial r} + \frac{\partial u}{\partial z} \right] \\ \sigma_{r\theta} &= \frac{E}{4(1+\nu)} \left[\frac{1}{r} \frac{\partial u}{\partial \theta} + \frac{\partial v}{\partial r} - \frac{v}{r} \right] \\ \sigma_{z\theta} &= \frac{E}{4(1+\nu)} \left[\frac{\partial v}{\partial z} + \frac{1}{r} \frac{\partial w}{\partial \theta} \right] \end{aligned} \quad (\text{II-36})$$

II-5 Les Conditions aux limites

Les types généraux des conditions aux limites qui peuvent être considérées à propos de problèmes du thermoélastique sont été montrés pour être suffisant pour la validité du théorème de l'originalité a présenté ici. Dans la plupart des problèmes, cependant, ce sera possible de restreindre la discussion à sur du suivant deux cas spéciaux. [37]

II-5-1 les conditions limites de la traction:

Les conditions aux limites pour ce cas sont exprimées quant aux composants du stress à travers l'équation suivante [37], être satisfaite à chaque point de la surface de la limite:

$$\begin{aligned} \bar{R} &= \sigma_{rr} n_r + \sigma_{rz} n_z + \sigma_{r\theta} n_\theta \\ \bar{Z} &= \sigma_{zr} n_r + \sigma_{zz} n_z + \sigma_{z\theta} n_\theta \\ \bar{\theta} &= \sigma_{\theta r} n_r + \sigma_{\theta z} n_z + \sigma_{\theta\theta} n_\theta \end{aligned} \quad (\text{II-37})$$

Où \bar{R} , \bar{Z} , et $\bar{\theta}$ sont respectivement les composantes de la traction de la surface prescrite dans la direction r , z et θ , n_r , n_z , n_θ sont les cosinus directeurs de la surface extérieure.

II-5-2 Les conditions aux limites du déplacement

Les conditions aux limites pour ce cas sont exprimées à travers l'équation suivante être satisfait à chaque point P de la borne de la surface: Où f, g, et h sont prescrits des fonctions.

Parfois, les conditions aux limite plus compliquées peuvent être rencontrées, par exemple, les conditions aux limite d'équation(II-37) peuvent être spécifiées sur une portion de le borne du surface et que d'équation (II-37) sur le reste de la surface. Donc à chaque point l'un ou l'autre trois composants de la traction ou trois composants du déplacement sont prescrits, ce sont connu comme (mêlé) conditions aux limite. Comme un autre exemple, nous pouvons spécifier à chaque point de la Born de surface trois quantités quelques-uns de qui sont composants de la traction et les composants du déplacement du reste. Cependant, afin que pas plus qu'une quantité est associée avec une direction de la coordonnée particulière, c'est donc admissible prescrire, dites, \bar{R} , \bar{Z} , et v à point particulier, mais pas \bar{R} , \bar{Z} et w. [37]

Une autre possibilité est représentée par condition de support élastique dans lequel une relation utilitaire existe entre quelques déplacements et quelques composants de la traction, comme dans le cas de deux corps dans le contact. Les difficultés qui surviennent dans tel problème ne sont pas particulières à thermoélasticité mais sont trouvées aussi dans un élasticité isotherme.

Les deux types de conditions aux limite son résumés comme suit:

pour l'axe de symétrie: le déplacement radiale nul $u=0$ [40]

§

§ pour les surfaces libres, traduis

$$\sigma_{i,j} n_j = 0 \tag{II-38}$$

On à:

- (S₀) l'axe de symétrie:

Les conditions aux limites s'écrivent:

$$\begin{cases} u = 0 \\ \frac{\partial w}{\partial z} = \frac{\partial v}{\partial \theta} = 0 \end{cases} \tag{II-39}$$

- à (S_{s/l}) l'interface solide/liquide):

$$\begin{cases} \sigma_{rz} = \sigma_{zz} = \sigma_{\theta z} = 0 \\ \sigma_{rr} = 0 \end{cases} \tag{II-40}$$

Les conditions aux limites s'écrivent:

$$\begin{cases} \frac{\partial w}{\partial r} + \frac{\partial u}{\partial z} = 0 \\ \frac{\partial w}{\partial z} = \frac{\partial u}{\partial r} \\ \frac{\partial v}{\partial z} + \frac{1}{r} \frac{\partial w}{\partial \theta} = 0 \end{cases} \quad (\text{II-41})$$

à (S₁)

$$\sigma_{zr} = \sigma_{rr} = \sigma_{\theta r} = 0 \quad (\text{II-42})$$

Les conditions aux limites s'écrivent:

$$\begin{cases} \frac{\partial u}{\partial r} + \frac{v}{1-2\nu} \phi + \frac{1+\nu}{1-2\nu} \alpha (T - T_F) \\ \frac{\partial u}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial r} = 0 \\ \frac{\partial v}{\partial r} - \frac{v}{r} + \frac{1}{r} \frac{\partial u}{\partial \theta} = 0 \end{cases} \quad (\text{II-43})$$

• à (S₂)

$$\sigma_{\theta\theta} = \sigma_{r\theta} = \sigma_{\theta z} = 0$$

$$\begin{cases} \frac{u}{r} + \frac{1}{r} \frac{\partial v}{\partial \theta} + \nu \phi + \frac{1+\nu}{1-2\nu} \alpha (T - T_f) \\ \frac{\partial v}{\partial r} - \frac{v}{r} + \frac{1}{r} \frac{\partial u}{\partial \theta} = 0 \\ \frac{\partial v}{\partial z} + \frac{1}{r} \frac{\partial w}{\partial \theta} = 0 \end{cases} \quad (\text{II-44})$$

• à (S₃):

$$w_z = \frac{1}{2r} \left(\frac{\partial(rv)}{\partial r} - \frac{\partial u}{\partial \theta} \right) \quad (\text{II-45})$$

$$w_\theta = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u}{\partial z} - \frac{\partial w}{\partial r} \right)$$

Donc:

$$\frac{\partial e}{\partial r} = \frac{1}{r} \frac{\partial u}{\partial r} - \frac{u}{r^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial^2 v}{\partial r \partial \theta} - \frac{1}{r^2} \frac{\partial v}{\partial \theta} + \frac{\partial^2 w}{\partial r \partial z} \quad (\text{II-46})$$

$$\frac{\partial w_z}{\partial \theta} = \frac{1}{2} \left(\frac{1}{r} \frac{\partial v}{\partial \theta} + \frac{\partial^2 v}{\partial \theta \partial r} - \frac{1}{r} \frac{\partial^2 u}{\partial \theta^2} \right)$$

$$\frac{\partial w_\theta}{\partial z} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial^2 u}{\partial z^2} - \frac{\partial^2 w}{\partial z \partial r} \right)$$

En utilisant l'équation (II-46)

$$(I + 2m) \left[\frac{d^2 u}{dr^2} + \frac{1}{r} \frac{du}{dr} - \frac{u}{r^2} \right] + (I + m) \left[\frac{1}{r} \frac{d^2 n}{dr \partial r \partial q} + \frac{d^2 w}{dr \partial z} \right] - (I + 3m) \left[\frac{1}{r^2} \frac{dn}{dq} \right] + m \left[\frac{1}{r} \frac{d^2 u}{dq^2} + \frac{d^2 u}{dz^2} \right] - (3I + 2m) \mathfrak{a} \left[\frac{dT}{dr} \right] + R = 0 \quad (\text{II-47})$$

Avec les dérivées partielles de composants de la déformation sont:

$$\begin{aligned} \frac{\partial e}{\partial \theta} &= \frac{1}{r} \frac{\partial u}{\partial \theta} + \frac{\partial^2 u}{\partial r \partial \theta} + \frac{1}{r} \frac{\partial^2 v}{\partial^2 \theta} + \frac{\partial^2 w}{\partial \theta \partial z} \\ \frac{\partial w_z}{\partial r} &= \frac{1}{2} \left(\frac{1}{r} \frac{\partial v}{\partial r} - \frac{v}{r^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial r^2} - \frac{1}{r} \frac{\partial^2 u}{\partial r \partial \theta} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial u}{\partial \theta} \right) \\ \frac{\partial w_r}{\partial z} &= \frac{1}{2} \left(\frac{1}{r} \frac{\partial^2 w}{\partial z \partial \theta} - \frac{\partial^2 v}{\partial z^2} \right) \end{aligned} \quad (\text{II-48})$$

En remplaçant les équations (II-48)

$$(I + 2m) \left[\frac{1}{r^2} \frac{d^2 v}{dq^2} \right] + (I + m) \left[\frac{1}{r} \frac{d^2 u}{dr dq} + \frac{1}{r} \frac{d^2 w}{dq dz} \right] + (I + 3m) \left[\frac{1}{r} \frac{du}{dq} \right] + m \left[\frac{d^2 v}{dz^2} + \frac{1}{r} \frac{dv}{dr} - \frac{v}{r^2} + \frac{d^2 v}{dr^2} \right] - (3I + 2m) \mathfrak{a} \left[\frac{1}{r} \frac{dT}{dq} \right] + \Theta = 0 \quad (\text{III} - 49)$$

On à aussi:

$$\begin{aligned} \frac{\partial e}{\partial z} &= \frac{\partial^2 u}{\partial z dr} + \frac{1}{r} \frac{\partial u}{\partial z} + \frac{1}{r} \frac{\partial^2 v}{\partial z \partial \theta} + \frac{\partial^2 w}{\partial z^2} \\ \frac{\partial w_r}{\partial \theta} &= \frac{1}{2} \left(\frac{1}{r} \frac{\partial^2 w}{\partial \theta^2} - \frac{\partial^2 v}{\partial \theta \partial z} \right) \\ \frac{\partial (rw_\theta)}{\partial r} &= \frac{1}{2} \left[r \frac{\partial^2 u}{\partial r \partial z} + \frac{\partial u}{\partial z} - \frac{\partial w}{\partial r} - r \frac{\partial^2 w}{\partial r^2} \right] \end{aligned} \quad (\text{II-50})$$

En remplaçant l'équation (II-50) dans l'équation (II-49):

$$(I + 2m) \left[\frac{d^2 w}{dz^2} \right] + (I + m) \left[\frac{d^2 u}{dr dz} + \frac{1}{r} \frac{du}{dz} + \frac{1}{r} \frac{d^2 v}{dz dq} \right] + m \left[\frac{1}{r} \frac{dw}{dr} + \frac{d^2 w}{dr^2} + \frac{1}{r^2} \frac{d^2 w}{dq^2} \right] - (3I + 2m) \mathfrak{a} \left[\frac{dT}{dz} \right] + z = 0 \quad (\text{II-51})$$

III-1 Introduction:

Vu l'énorme avantage que représente l'approche numérique par rapport aux autres approches, celle-ci est devenue la science de base que les chercheurs dans le domaine de la croissance cristalline utilisée dans leurs travaux. La majorité des problèmes posés dans ce domaine sont gouvernés par des équations différentielles à dérivées partielles non linéaires dont la résolution analytique est très complexe. Donc, la résolution numérique reste une des méthodes appropriées puisqu'elle permet l'obtention rapide de bons résultats avec des moyens plus économiques.

Actuellement il existe beaucoup de méthodes numériques modernes et efficaces pour résoudre ce genre de problèmes. Ces méthodes comprennent deux parties: la première concerne la discrétisation du domaine physique et des équations différentielles, la deuxième traite la résolution numérique de ces équations.

III-2 Méthodes numériques:

Il y a plusieurs méthodes numériques pour la discrétisation des équations différentielles aux dérivées partielles, le but commun de ces techniques est de transformer un système d'équations différentielles en un système d'équations algébriques dans le domaine étudié.

Ci-dessous nous présentons brièvement quelques-unes.

III-2-1 Méthode des éléments finis:

La méthode des éléments finis est utilisée pour résoudre les équations d'un modèle mathématique dans un domaine physique arbitraire. La méthode des éléments finis connaît un développement rapide et significatif dans le plus part de ses applications aux différents domaines des sciences appliquées. Les problèmes de transfert de chaleur bénéficient donc de l'outil numérique que représente cette méthode. Il est cependant difficile, dans un mémoire de fin d'étude synthétisé, de présenter tous les détails et toutes les particularités concernant la méthode des éléments finis. C'est pourquoi, il ne faudrait pas considérer ce qui suit comme une description générale exhaustive de la méthode des éléments finis, mais plutôt comme un aperçu de ses principales caractéristiques et un exemple d'application au problème de conduction de chaleur.

III-2-2 Méthode des volumes finis:

Le domaine de calcul est divisé en sous domaines distincts appelés volumes de contrôle. Chaque volume de contrôle comporte un nœud placé en son centre géométrique. L'équation différentielle est discrétisée sur le groupe de nœuds considéré,

en exprimant un certain principe de conservation de la variable dépendante en question sur le volume de contrôle. L'équation différentielle est alors intégrée localement sur chaque volume.

III-2-3 Méthode des différences finies:

C'est la méthode la plus simple et la plus directe pour résoudre une équation ou un système d'équations différentielles aux dérivées partielles.

La méthode des différences finies est largement utilisée dans tous les problèmes qui englobent les types d'écoulements et de conduction thermique suivants: La méthode suggérée dans notre cas est la méthode de *différences finies* car elle satisfait la nature elliptique hyperbolique de l'équation différentielle gouvernant le problème de conduction.

Quand l'écoulement est subsonique les perturbations se propagent dans les 8 sens alors on peut le représenter par un schéma de différences centrées, quand l'écoulement est localement supersonique les perturbations se propagent sous forme de cône alors il est possible de le représenter par schéma décentré.

III-3 Principe de la méthode des différences finies:

Le principe de cette technique consiste à remplacer les dérivées partielles par les différences finies à partir d'un développement [45] en série de Taylor limité (Annexe A).

III- 4 Discrétisation par la méthode des différences finie:

III-4-1 Discrétisation du domaine:

Les calculs par différences finis sont effectués suivant un maillage dans le domaine de calcul (Fig.III-1), Obtenu par l'intersection d'un cercle de rayon r avec les lignes droites z, θ . On définit un nœud M de coordonnées (r_M, z_M, θ_M) , Si les parallèles aux axes r, z et les cercles de rayon r_i sont espacés de h et t , respectivement, le nœud a comme coordonnées $r_M = i h, z_M = j h, \theta_M = kt$. Alors les points de maillage peuvent être indexés aussi comme suit: (r_i, z_j, θ_k) . et on donne les points voisins $(r-h, z, \theta)$, $(r+h, z, \theta)$, $(r, z+h, \theta)$, $(r, z-h, \theta)$, $(r, z, \theta+t)$, $(r, z, \theta-t)$ (Fig.III-2-a, b).

La discrétisation d'équation dans un autre système de coordonnées, on considère deux dimensions polaire (r, θ) (Fig.III-3),

III-4-2 Discrétisation de l'équation de la conduction:

Le schéma des points (nœuds) intervenant dans la discrétisation de l'équation de conduction est représenté sur la figure (III-3). Pour approcher les dérivées partielles

on utilise les formules des différences centrées (A-10), (A-13) et (A-24) de l'annexe A.

On obtient l'équation:

$$\frac{\partial^2 T}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial T}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 T}{\partial q^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} = \left\{ \frac{T_{i+1,j,k} - 2T_{i,j,k} + T_{i-1,j,k}}{h^2} \right\} + \frac{1}{(1-i)h} \left\{ \frac{T_{i+1,j,k} - T_{i-1,j,k}}{2h} \right\} + \frac{1}{((1-i)h^2)} \left\{ \frac{T_{i,j,k+1} - 2T_{i,j,k} + T_{i,j,k-1}}{(\Delta q)^2} \right\} + \left\{ \frac{T_{i,j+1,k} - 2T_{i,j,k} + T_{i,j-1,k}}{h^2} \right\} \quad (\text{II-1})$$

Après arrangement :

$$\frac{\partial^2 T}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial T}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 T}{\partial q^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} = \frac{1}{h^2} \left(1 - \frac{1}{2(1-i)} \right) T_{i-1,j,k} + \frac{1}{h^2} \left(1 + \frac{1}{2(1-i)} \right) T_{i+1,j,k} + \frac{1}{h^2} T_{i,j+1,k} + \frac{1}{h^2} T_{i,j-1,k} \quad (\text{III-2})$$

$$+ \frac{1}{h^2 (\Delta q)^2} \left(\frac{1}{(1-i)} \right) T_{i,j,k-1} + \frac{1}{h^2 (\Delta q)^2} \left(\frac{1}{(1-i)} \right) T_{i,j,k+1} - \frac{4}{h^2} \left(1 + \frac{1}{2(1-i)(\Delta q)^2} \right) T_{i,j,k}$$

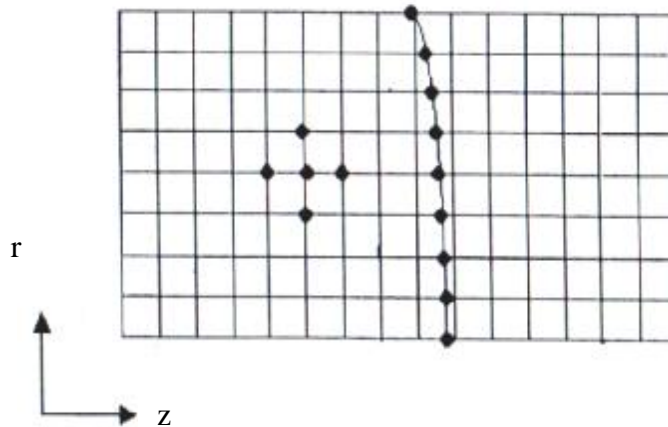


Fig. III-1 Représentation du maillage de système

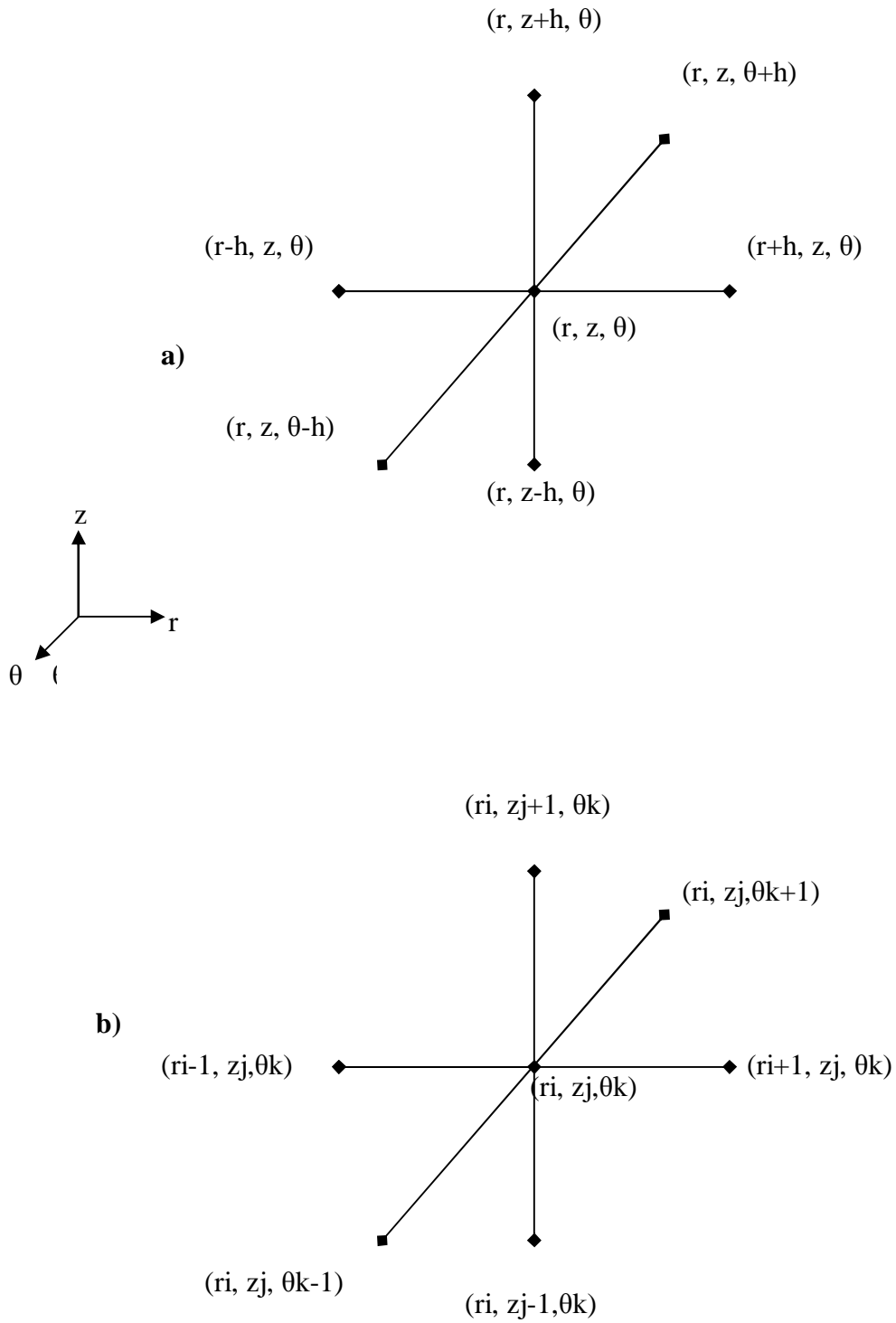


Fig. III-2 Schéma à 7 points utilisé dans la discrétisation

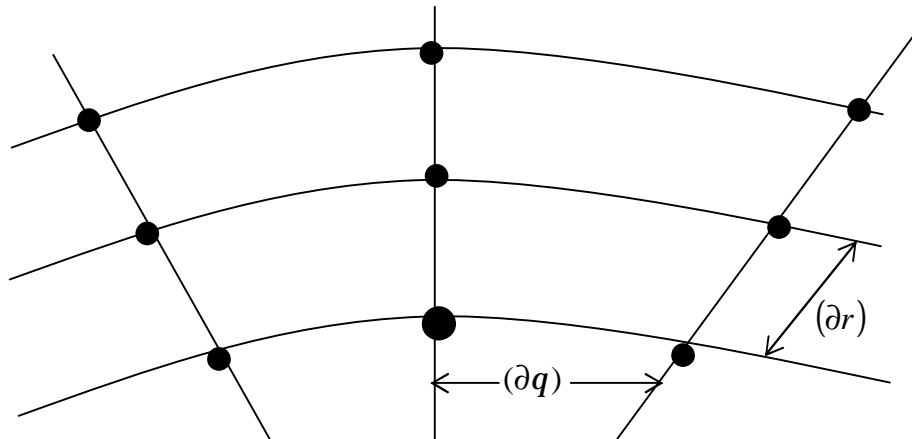


Fig. III-3 La discrétisation dans le système de cordonner polaire.

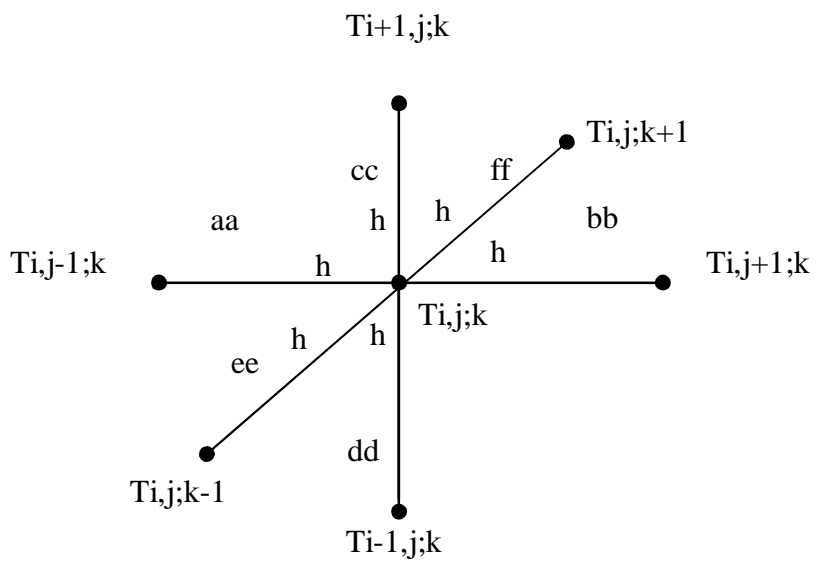


Fig.III-4 Points intervenant dans la discrétisation de l'équation de conduction

La figure (III-5) montre l'indexation, r est la distance radiale dans l'équation (III-2) est approchée comme suit:

$$r = (1-i) h$$

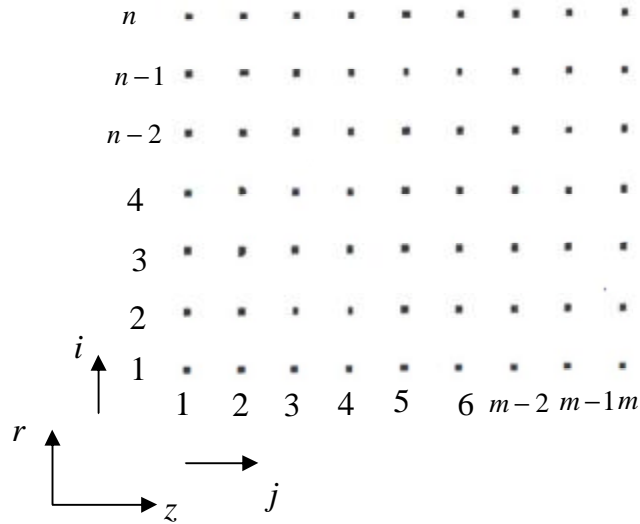


Fig. III-5: indexation des noeuds du domaine de calcul

III-4-3 Discrétisation du terme source:

La chaleur latente de solidification à chaque point de contrôle de l'interface X_c (les noeuds irréguliers) par l'équation (II-16):

$$S_k = r_s V_P \Delta H \cos q \tag{III-3}$$

Les cosinus directeurs de la normale à l'interface, (fig. III- 6) (l'annexe B-2):

$$\text{Cos}\theta_c = \frac{g'c}{\sqrt{g'c^2 + h'c^2}} \tag{III-4}$$

$$S_c = \rho_s V_P \Delta H \frac{g'c}{\sqrt{g'c^2 + h'c^2}} \tag{III-5}$$

La contribution de l'ensemble des points de contrôle de l'interface à chaque noeud de maillage (annexeB-7):

$$S_{ij} = \sum_c S_c F_{ij}(X_c) \Delta S_c \tag{III-6}$$

Alors la formule finale discrétisée du terme droite de l'équation de conduction s'écrit:

$$-\frac{1}{c} = -\frac{1}{c} \sum_c r_s V_P \Delta H \frac{g'c}{\sqrt{g'c^2 + h'c^2}} F_{ij}(X_c) \Delta S_c \tag{III-7}$$

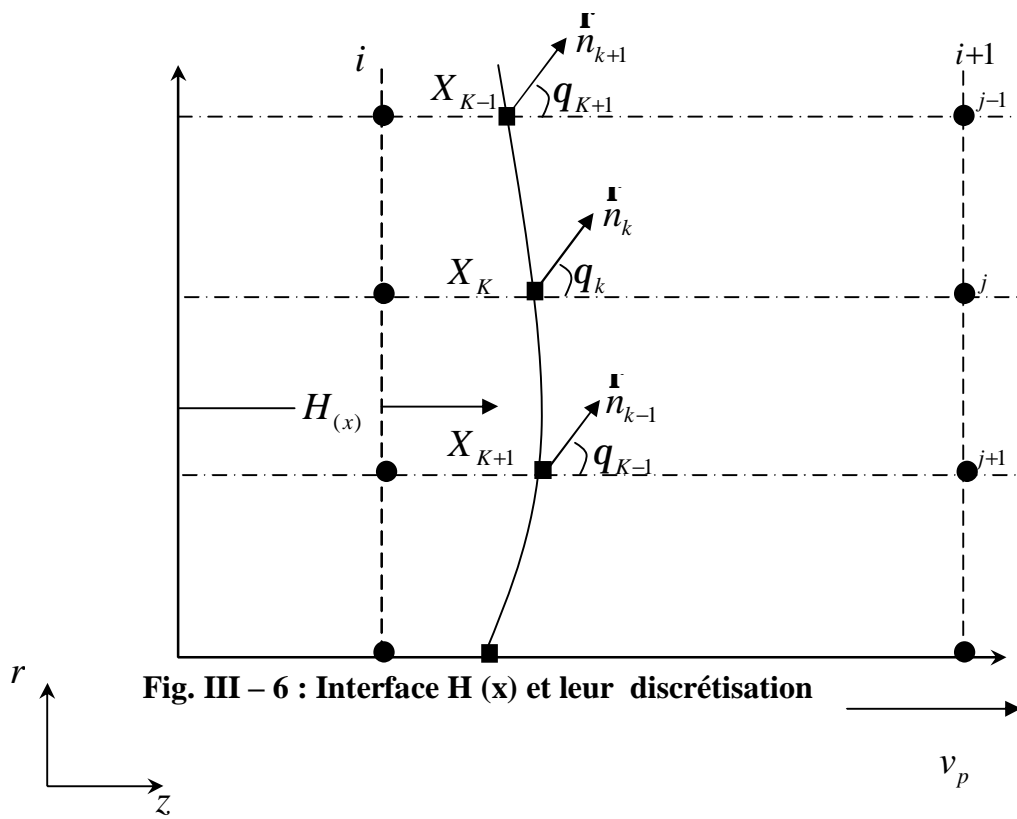


Fig. III – 6 : Interface $H(x)$ et leur discrétisation

III-4-4 Equation finale de discrétisation:

On a l'équation finale de discrétisation sous la forme

$$ee T_{i,j,k} = aa T_{i-1,j,k} + bb T_{i+1,j,k} + cc T_{i,j-1,k} + dd T_{i,j+1,k} + ee T_{i,j,k-1} + ff T_{i,j,k+1} + gg T_{i,j,k} \quad k(l+1)$$

Par comparaison l'équation (III-2) et l'équation (III-8), on obtient:

$$\left\{ \begin{array}{l} aa = \left(1 - \frac{1}{2(1-i)} \right) \\ bb = \left(1 + \frac{1}{2(1-i)} \right) \\ cc = 1 \\ dd = 1 \\ ee = 4 \\ ff = \frac{1}{(\Delta q)^2} \frac{1}{(1-i)} \\ gg = \frac{1}{(\Delta q)^2} \frac{1}{(1-i)} \\ hh = \frac{h^2}{c} \sum r s V p \Delta H \frac{g' c}{\sqrt{g' c^2 + h' c^2}} F_{ij}(X_c) \Delta S c \end{array} \right. \quad (III-9)$$

Le système d'équations algébriques (III-8) dont la matrice des coefficients (III-9) est pente diagonale est résolu par la méthode itérative SOR.

III-4-4 Discrétisation des conditions aux limites:

III-4-4 -1 Formule relative à un point de l'axe de symétrie:

Les nœuds situés sur l'axe de symétrie, on a $\left(\frac{\partial T}{\partial r} = 0 \right)$ la condition de symétrie,

on utilise l'approximation à l'ordre 2 de la dérivée première les différences à droite, (l'annexe A-15):

$$T_{i,j,k} = \frac{4T_{i+1,j,k} - T_{i-1,j,k}}{3} \quad (III-10)$$

III-4-4-2 Surfaces de creuset:

Les surfaces du creuset se sont des isothermes, et aussi la zone gradient la température de ses points est fixe et non recalculés à chaque itération.

III-4-5 Algorithme de calcul de la location de l'interface et du champ de la température:

L'algorithme de calcul consiste à résoudre l'équation de la conduction thermique, les opérations séquentielles sont présentées sur la figure (III-7). Le Champ de la conductivité est déterminé de (II-19) Les itérations commencent avec une approximation initial $z = Hk(x)$

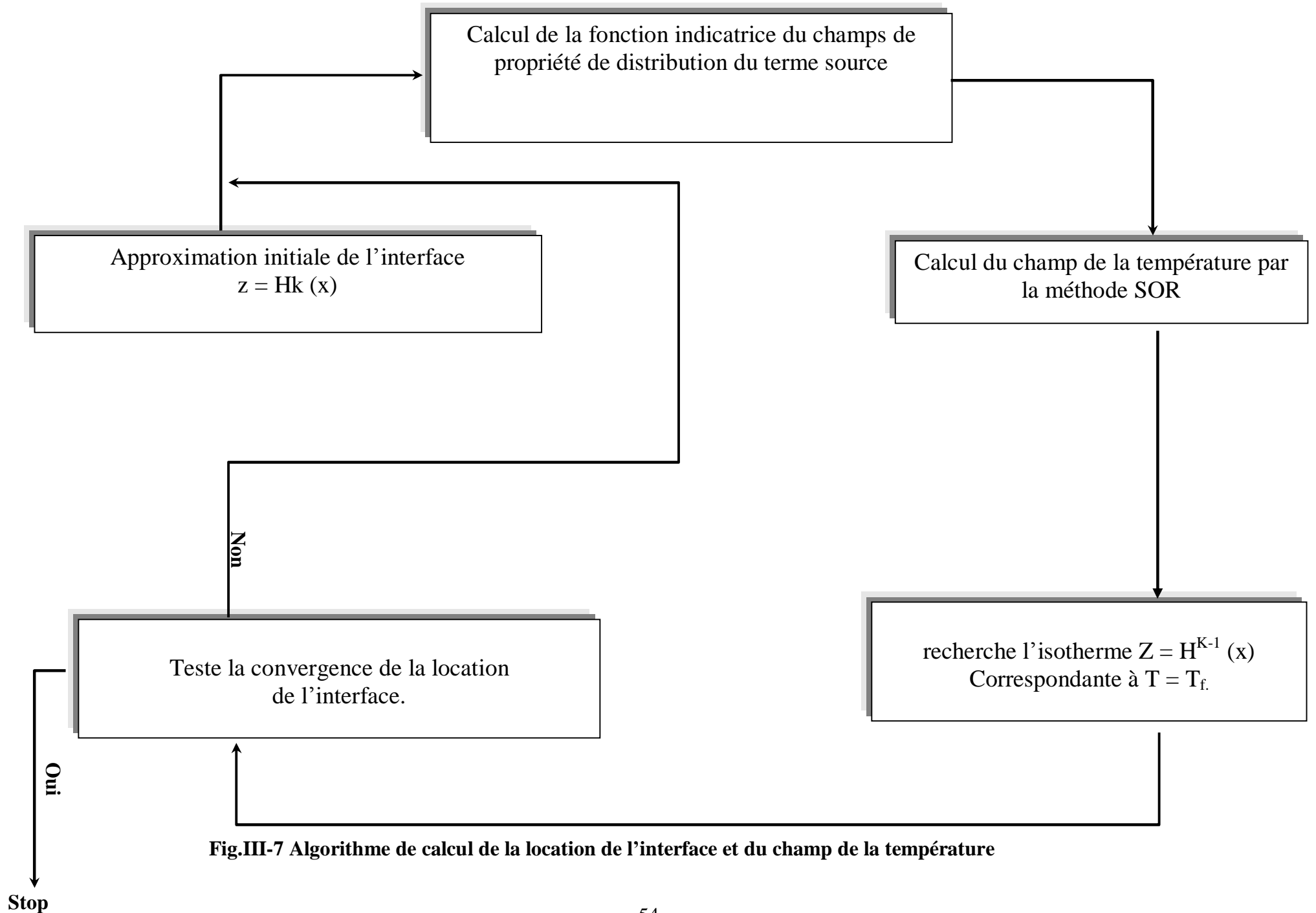


Fig.III-7 Algorithme de calcul de la location de l'interface et du champ de la température

de l'interface, de cette interface la fonction indicatrice est construite comme montrer dans (l'annexe B). En utilisant la méthode SOR (Successive Over Relaxation) pour résoudre le système algébrique (III-X) avant ça en donne une forme initiale à l'interface, un champ de température, et les champs des propriétés physique. A condition que l'interface initiale coïncide avec l'isotherme ($T=T_f$), on a: $z = H_k(x)$ pour (II-18), une nouvelle estimation $z = H_{k+1}(x)$ est faite par l'interpolation du champ de température en utilisant (II-18). En fin on tester la convergence de la location de l'interface; ce qui veut dire approcher aux milieux la solution stable des systèmes d'équations en un nombre optimale d'itérations, lorsque les itérations ultérieures ne produisent aucun changement significatif, donc la location de l'interface converge.

III-5-1 Discrétisation des équations thermoélastiques par la méthode des différences finies:

L'équations de l'équilibre en forme de déplacement (en coordonnées cylindriques) est donnée par les équations (II-32) contiennent des dérivées partielles des composantes u, w, v , leur discrétisation se fait de la même chose que pour les équations de la conduction de chaleur.

III-5-1 Discrétisation des équations thermoélastiques au nœuds réguliers:

On a les équations thermoélastiques:

$$(I + 2m) \left[\frac{d^2 u}{dr^2} + \frac{1}{r} \frac{du}{dr} - \frac{u}{r^2} \right] + (I + m) \left[\frac{1}{r} \frac{d^2 n}{\partial r \partial q} + \frac{d^2 w}{dr dz} \right] - (I + 3m) \left[\frac{1}{r^2} \frac{dn}{dq} \right] + m \left[\frac{1}{r} \frac{d^2 u}{dq^2} + \frac{d^2 u}{dz^2} \right] - (3I + 2m) a \left[\frac{dT}{dr} \right] + R = 0 \quad (III-11)$$

$$(I + 2m) \left[\frac{1}{r^2} \frac{d^2 v}{dq^2} \right] + (I + m) \left[\frac{1}{r} \frac{d^2 u}{dr dq} + \frac{1}{r} \frac{d^2 w}{dq dz} \right] + (I + 3m) \left[\frac{1}{r} \frac{du}{dq} \right] + m \left[\frac{d^2 v}{dz^2} + \frac{1}{r} \frac{dv}{dr} - \frac{v}{r^2} + \frac{d^2 v}{dr^2} \right] - (3I + 2m) a \left[\frac{1}{r} \frac{dT}{dq} \right] + \Theta = 0 \quad (II - 47)$$

$$(I + 2m) \left[\frac{d^2 w}{dz^2} \right] + (I + m) \left[\frac{d^2 u}{dr dz} + \frac{1}{r} \frac{du}{dz} + \frac{1}{r} \frac{d^2 v}{dz dq} \right] + m \left[\frac{1}{r} \frac{dw}{dr} + \frac{d^2 w}{dr^2} + \frac{1}{r^2} \frac{d^2 w}{dq^2} \right] - (3I + 2m) a \left[\frac{dT}{dz} \right] + z = 0 \quad (III-13)$$

Avec

$$\begin{cases} aa = \lambda + 2\mu \\ bb = \lambda + \mu \\ cc = \mu \\ dd = 3\lambda + \mu \\ ee = 3\lambda + 2\mu \end{cases} \quad (\text{III-14})$$

Pour discrétiser les équations (III-11), (III-12) et (III-13) on utilise les formules (A-10), (A-13) et (A-24) pour approcher la dérivée première et seconde des déplacements, pour la dérivée mixte on utilise (A-25) (annexe A). Alors l'équation (III-11) devient:

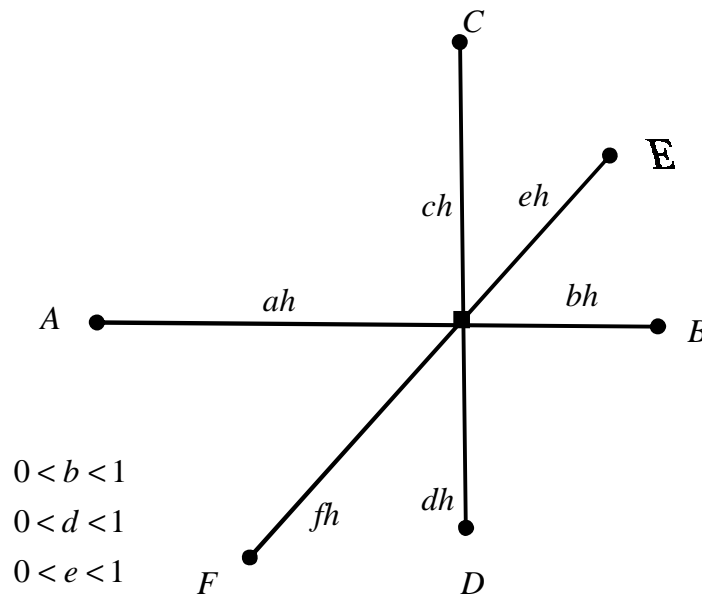


Fig.III – 8 : Schéma de discrétisation d'un nœud irrégulier.

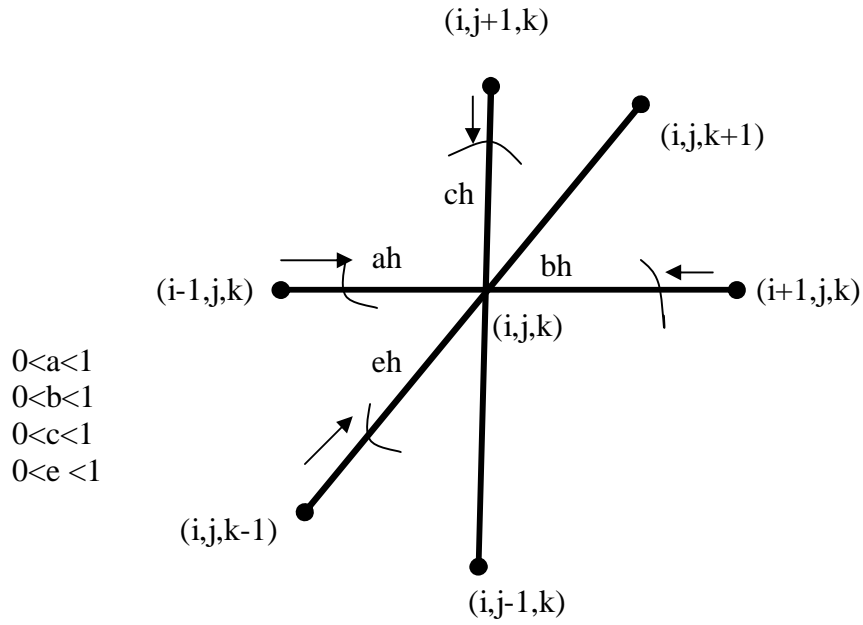
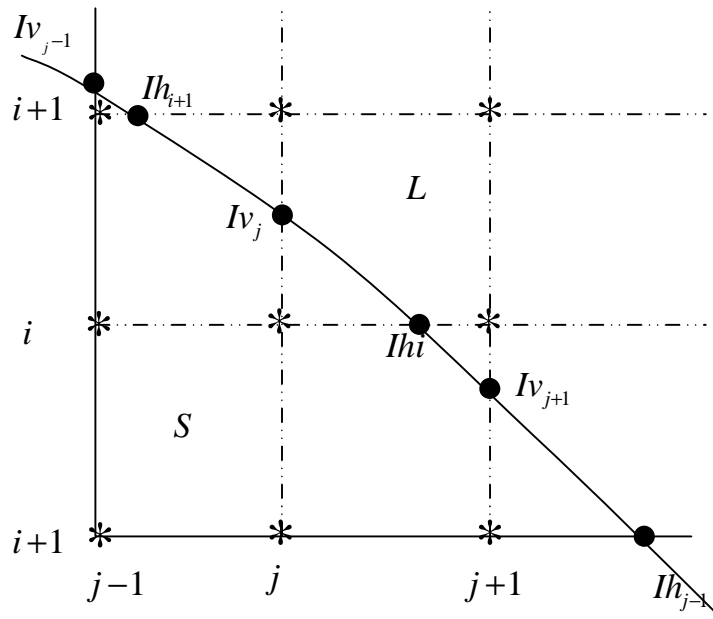


Fig. III-9 Nouvelles positions des points du schéma de discrétisation



$$\begin{aligned}
 & aa \left(\left\{ \frac{u_{i+1,j,k} - 2u_{i,j,k} + u_{i-1,j,k}}{h^2} \right\} + \frac{1}{(1-i)h} \left\{ \frac{u_{i+1,j,k} - u_{i-1,j,k}}{2h} \right\} - \left\{ \frac{u_{i,j,k}}{(1-i)^2 h^2} \right\} \right) \\
 & + bb \left(\frac{1}{(i-1)h} \left\{ \frac{v_{i+1,j,k+1} + v_{i-1,j,k-1} - v_{i-1,j,k+1} - v_{i+1,j,k-1}}{4h\Delta q} \right\} + \left\{ \frac{w_{i+1,j+1,k} + w_{i-1,j-1,k} - w_{i-1,j+1,k} - w_{i+1,j-1,k}}{4h\Delta q} \right\} \right) \\
 & + cc \left(\frac{1}{(1-i)^2 h^2} \left\{ \frac{u_{i,j,k+1} - 2u_{i,j,k} + u_{i,j,k-1}}{\Delta q^2} \right\} + \left\{ \frac{u_{i,j+1,k} - 2u_{i,j,k} + u_{i,j-1,k}}{h^2} \right\} \right) \\
 & - dd \left(\frac{1}{(1-i)^2 h^2} \left\{ \frac{v_{i,j,k+1} - v_{i,j,k-1}}{2\Delta q} \right\} \right) = ee \left\{ \frac{T_{i+1,j,k} - T_{i-1,j,k}}{2h} \right\} \quad (III-15)
 \end{aligned}$$

Après arrangement on trouve:

$$\begin{aligned}
 & \left(2aa + \frac{1}{(1-i)^2} + 2cc + \frac{2cc}{(1-i)^2 \Delta \theta^2} \right) u_{i,j,k} = \left(aa + \frac{aa}{2(i-1)} \right) u_{i+1,j,k} + \left(aa - \frac{aa}{2(i-1)} \right) u_{i-1,j,k} + cc u_{i,j+1,k} + cc u_{i,j-1,k} \\
 & + \left(\frac{cc}{(i-1)^2 (\Delta \theta)^2} \right) u_{i,j,k+1} + \left(\frac{cc}{(i-1)^2 (\Delta \theta)^2} \right) u_{i,j,k-1} + Ru = 0 \quad (III-16)
 \end{aligned}$$

Avec

$$\begin{aligned}
 Ru = & bb \left(\frac{1}{(1-i)} \left\{ \frac{v_{i+1,j,k+1} + v_{i-1,j,k-1} - v_{i-1,j,k+1} - v_{i+1,j,k-1}}{4\Delta q} \right\} + \left\{ \frac{w_{i+1,j+1,k} + w_{i-1,j-1,k} - w_{i-1,j+1,k} - w_{i+1,j-1,k}}{4\Delta q} \right\} \right) \\
 & - dd \left(\frac{1}{(1-i)^2} \left\{ \frac{v_{i,j,k+1} - v_{i,j,k-1}}{2\Delta q} \right\} \right) - ee h \left(\frac{T_{i+1,j,k} - T_{i-1,j,k}}{2} \right) \quad (III-17)
 \end{aligned}$$

De la même façon l'équation (III-12):

$$\begin{aligned}
 w_{i,j,k} = & \left(2aa + 2cc + \frac{2cc}{(1-i)^2 (\Delta q)^2} \right) w_{i,j,k} = \left(cc + \frac{cc}{2(1-i)} \right) w_{i+1,j,k} + \left(cc - \frac{cc}{2(i-1)} \right) w_{i-1,j,k} + aa w_{i,j+1,k} + aa w_{i,j-1,k} \\
 & + \left(\frac{cc}{(1-i)^2 (\Delta q)^2} \right) w_{i,j,k+1} + \left(\frac{cc}{(1-i)^2 (\Delta q)^2} \right) w_{i,j,k-1} + R w = 0 \quad (III-18)
 \end{aligned}$$

Avec

$$\begin{aligned}
 R w = & bb \left(\left\{ \frac{u_{i+1,j+1,k} - u_{i-1,j+1,k} - u_{i-1,j-1,k} + u_{i+1,j-1,k}}{4} \right\} + \frac{1}{(1-i)} \left\{ \frac{u_{i,j+1,k} - u_{i,j-1,k}}{2} \right\} + \frac{1}{(1-i)} \left\{ \frac{v_{i,j+1,k+1} - v_{i,j-1,k+1} - v_{i,j-1,k-1} + v_{i,j+1,k-1}}{4\Delta \theta} \right\} \right) \\
 & - ee h \left(\frac{T_{i,j+1,k} - T_{i,j-1,k}}{2} \right) \quad (III-19)
 \end{aligned}$$

(III-19)

Et pour l'équation (III-13) on à:

$$v_{i,j,k} \left(4cc + \frac{2aa}{(1-i)^2(\Delta\theta)^2} + \frac{cc}{(1-i)^2} \right) = \left(cc + \frac{cc}{2(1-i)} \right) v_{i+1,j,k} + \left(cc - \frac{cc}{2(1-i)} \right) v_{i-1,j,k} + cc v_{i,j+1,k} + cc v_{i,j-1,k} \quad (\text{III-20})$$

$$+ \left(\frac{aa}{(1-i)^2(\Delta\theta)^2} \right) v_{i,j,k+1} + \left(\frac{aa}{(1-i)^2(\Delta\theta)^2} \right) v_{i,j,k-1} + Rv = 0$$

Avec

$$Rv = bh \left(\frac{1}{(1-i)} \left[\frac{u_{i+1,j,k+1} - u_{i-1,j,k+1} - u_{i-1,j,k-1} + u_{i+1,j,k-1}}{4\Delta q} \right] + \frac{1}{(1-i)} \left[\frac{w_{i,j+1,k+1} - w_{i,j-1,k} - w_{i,j-1,k-1} + w_{i,j+1,k}}{4\Delta q} \right] \right) \quad (\text{III-21})$$

$$+ dd \left(\frac{1}{(1-i)} \left[\frac{u_{i,j,k+1} - u_{i,j,k-1}}{2\Delta q} \right] \right) - eeh \left(\frac{1}{(1-i)} \left[\frac{T_{i,j,k+1} - T_{i,j,k-1}}{2\Delta q} \right] \right)$$

III-5-2 Discrétisation des nœuds irréguliers

III-5-2-1 approximation des dérivées partielles aux nœuds irréguliers:

Pour les nœuds irréguliers un schéma de discrétisation à sept points dont les distances est non uniforme et utilisé (fig.III-8). L'interface peut passer aussi au voisinage d'un nœud du maillage. Pour discrétiser les équations thermoélastiques au voisinage de l'interface on peut utiliser les nœud du maillage les plu proches, mais ceci engendre des erreurs considérables. Pour obtenir des résultats plus précises en déplacent les nœuds du maillage les plus proches jusqu'à ce qu'elles coïncident sur l'interface. La discrétisation des équations (III-11), (III-11) et (III-11) se fait en utilisant un schémat à 7 point à pas non uniforme (fig.III-9), en utilisant les formules (A-33), (A-34), (A-35) et (A-36) de l'annexe A.

Les termes de (III-11) sont approchés comme suit:

$$\frac{\partial^2 u}{\partial r^2} = \frac{2}{h^2} \left(\frac{u_{i-1,j,k} - u_{i,j,k}}{a[a+b]} + \frac{u_{i+1,j,k} - u_{i,j,k}}{b(a+b)} \right)$$

$$\frac{1}{r} \frac{\partial u}{\partial r} = \frac{2}{(i-1)h^2} \left(\frac{u_{i+1,j,k} - u_{i-1,j,k}}{(a+b)} \right) \quad (\text{III-22})$$

$$\frac{u}{r^2} = \frac{u_{i,j,k}}{(i-1)^2 h^2}$$

$$\frac{\partial^2 u}{\partial z^2} = \frac{2}{h^2} \left(\frac{u_{i,j-1,k} - u_{i,j,k}}{(1+c)} + \frac{u_{i,j+1,k} - u_{i,j,k}}{c(1+c)} \right)$$

$$\frac{\partial^2 u}{\partial \theta^2} = \frac{2}{(\Delta\theta)^2} \left(\frac{u_{i,j,k-1} - u_{i,j,k}}{m(m+n)} + \frac{u_{i,j,k+1} - u_{i,j,k}}{n(m+n)} \right)$$

$$\frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 u}{\partial r^2} = \frac{2}{(i-1)^2 h^4} \left(\frac{u_{i-1,j,k} - u_{i,j,k}}{a[a+b]} + \frac{u_{i+1,j,k} - u_{i,j,k}}{b(a+b)} \right)$$

$$\frac{1}{r^2} \frac{\partial u}{\partial q} = \frac{2}{(i-1)^2 h^2 \Delta q} \left(\frac{u_{i,j,k+1} - u_{i,j,k-1}}{(m+n)} \right)$$

$$\frac{\partial T}{\partial r} = \frac{1}{h} \left(\frac{T_{i+1,j,k} - T_{i-1,j,k}}{(a+b)} \right)$$

$$\frac{\partial T}{\partial r} = \frac{1}{h} \left(\frac{T_{i,j+1,k} - T_{i,j-1,k}}{(1+c)} \right)$$

$$\frac{\partial T}{\partial \theta} = \frac{1}{\Delta \theta} \left(\frac{T_{i,j,k+1} - T_{i,j,k-1}}{(m+n)} \right)$$

III-5-2-2 approximation des dérivées mixte aux nœuds avoisinant une frontière irrégulière:

Pour la dérivées mixte $\frac{\partial^2 u}{\partial r \partial z}$ est difficile à approcher sur un nœud irrégulier

et pour l'approcher à un nœud près de l'interface, en utilisant les formule des différences finis de l'annexe A, on exprime la variable u comme une fonction polynomiale interpolée à partir de huit points avoisinants ce nœud en question (sept nœuds de maillage et l'autre point détermine la position de l'interface) (fig. III-10) [26].

$$U(r, z, \theta) = c_1 r z^2 + c_4 r^2 + c_2 r z + c_3 z + c_5 r + c_6 r \theta + c_7 \theta + c_8 \quad (\text{III-23})$$

Cette fonction est quadratique en r, en z, linière en θ .

$$\begin{Bmatrix} w_1 \\ w_2 \\ w_3 \\ w_4 \\ w_5 \\ w_6 \end{Bmatrix} = \begin{bmatrix} r_1 z_1^2 & r_1^2 & r_1 z_1 & z_1 & r_1 & r_1 q_1 & q_1 & 1 \\ r_2 z_2^2 & r_2^2 & r_2 z_2 & z_2 & r_2 & r_2 q_2 & q_2 & 1 \\ r_3 z_3^2 & r_3^2 & r_3 z_3 & z_3 & r_3 & r_3 q_3 & q_3 & 1 \\ r_4 z_4^2 & r_4^2 & r_4 z_4 & z_4 & r_4 & r_4 q_4 & q_4 & 1 \\ r_5 z_5^2 & r_5^2 & r_5 z_5 & z_5 & r_5 & r_5 q_5 & q_5 & 1 \\ r_6 z_6^2 & r_6^2 & r_6 z_6 & z_6 & r_6 & r_6 q_6 & q_6 & 1 \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} c_1 \\ c_2 \\ c_3 \\ c_4 \\ c_5 \\ c_6 \end{Bmatrix} \quad (\text{III-24})$$

Pour déterminée les coefficients $\{c_i\}$ en résolve le système (III-24), en suit en calcule la valeur de la dérivé mixte de l'équation (III-23):

$$dmu = \frac{\partial^2 u}{\partial r \partial z} = 2 c_1 z + c_2 \quad (\text{III-25})$$

La discrétisation des nœuds irréguliers, en remplaçant les approximations précédentes à l'équation (III-11), on obtient:

$$\begin{aligned}
 & a d \left(\frac{2}{h} \left[\frac{u_{i-1,j,k} - u_{i,j,k}}{d(a+b)} + \frac{u_{i+1,j,k} - u_{i,j,k}}{b(a+b)} \right] + \frac{2}{(i-1)h^2} \left[\frac{u_{i+1,j,k} - u_{i-1,j,k}}{(a+b)} \right] - \left[\frac{u_{i,j,k}}{(i-1)^2 h^2} \right] \right) + b b \left(\frac{1}{(i-1)h} \mathbf{b} \mathbf{v} + \mathbf{g} \mathbf{v} \right) \\
 & + c c \left(\frac{2}{(i-1)^2 h^4} \left[\frac{u_{i,j,k-1} - u_{i,j,k}}{m(m+n)} + \frac{u_{i,j,k+1} - u_{i,j,k}}{n(m+n)} \right] + \frac{2}{h^2} \left[\frac{u_{i,j-1,k} - u_{i,j,k}}{(1+c)} + \frac{u_{i,j+1,k} - u_{i,j,k}}{c(1+c)} \right] \right) \\
 & - d d \left(\frac{2}{(i-1)^2 h^3} \left[\frac{v_{i,j,k+1} - v_{i,j,k-1}}{m+n} \right] \right) = e e \left(\frac{1}{h} \left[\frac{T_{i+1,j,k} - T_{i-1,j,k}}{(1+c)} \right] \right)
 \end{aligned} \tag{III-26}$$

De la même façon l'équation (III-12):

$$\begin{aligned}
 & a d \left(\frac{2}{h^2} \left[\frac{w_{i,j-1,k} - w_{i,j,k}}{(1+c)} + \frac{w_{i,j+1,k} - w_{i,j,k}}{c(1+c)} \right] \right) + b b \left(\frac{2}{(1-i)h^2} \left[\frac{u_{i,j+1,k} - u_{i,j-1,k}}{1+c} \right] + \mathbf{g} \mathbf{t} + \frac{1}{[1-i]h} \mathbf{e} \mathbf{v} \right) \\
 & + c d \left(\frac{2}{(1-i)h^2} \left[\frac{w_{i+1,j,k} - w_{i-1,j,k}}{(b+c)} \right] + \frac{2}{h^2} \left[\frac{w_{i-1,j,k} - w_{i,j,k}}{d(a+b)} + \frac{w_{i+1,j,k} - w_{i,j,k}}{b(a+b)} \right] + \frac{2}{(1-i)^2 h^2} \left[\frac{w_{i,j,k-1} - w_{i,j,k}}{m(m+n)} + \frac{w_{i,j,k+1} - w_{i,j,k}}{n(m+n)} \right] \right) \\
 & = e e \left(\frac{T_{i,j+1,k} - T_{i,j-1,k}}{(1+c)} \right)
 \end{aligned} \tag{III-27}$$

En faisant la même démarche avec l'équation (III-13) .

III-6 Equations finales de discrétisation des équations d'équilibre en termes de déplacement.

De (III-16), (III-18), (III-20), (III-26), (III-27) et (III-28) on obtient les équations finales de discrétisation des équations d'équilibre en termes de déplacement.

$$\begin{cases}
 f u_{i,j,k} = f_1 u_{i+1,j,k} + f_{-1} u_{i-1,j,k} + f_2 u_{i,j+1,k} + f_{-2} u_{i,j-1,k} + f_3 u_{i,j,k+1} + f_{-3} u_{i,j,k-1} + f u \\
 g u_{i,j,k} = g_1 w_{i+1,j,k} + g_{-1} w_{i-1,j,k} + g_2 w_{i,j+1,k} + g_{-2} w_{i,j-1,k} + g_3 w_{i,j,k+1} + g_{-3} w_{i,j,k-1} + g w \\
 h v_{i,j,k} = h_1 v_{i+1,j,k} + h_{-1} v_{i-1,j,k} + h_2 v_{i,j+1,k} + h_{-2} v_{i,j-1,k} + h_3 v_{i,j,k+1} + h_{-3} v_{i,j,k-1} + h v
 \end{cases} \tag{III-29}$$

Les coefficients correspondantes sont comme suit:

Pour la première équation:

$$\left\{ \begin{array}{l}
 f = 2(aa + cc) + \frac{1}{(1-i)^2} \left(1 + \frac{2c}{(\Delta q)^2} \right) \\
 f_1 = aa \left(1 + \frac{1}{2(1-i)} \right) \\
 f_{-1} = cc \\
 f_2 = cc \\
 f_{-2} = cc \\
 f_3 = \frac{cc}{(1-i)^2 (\Delta q)^2} \\
 f_{-3} = \frac{cc}{(1-i)^2 (\Delta q)^2} \\
 fu = bb \left(\frac{1}{(1-i)} \left\{ \frac{v_{i+1,j,k+1} + v_{i-1,j,k-1} - v_{i-1,j,k+1} - v_{i+1,j,k-1}}{4\Delta q} \right\} + \right. \\
 \left. - dd \left(\frac{1}{(1-i)^2} \left\{ \frac{v_{i,j,k+1} - v_{i,j,k-1}}{2\Delta q} \right\} \right) - eeh \left(\frac{T_{i+1,j,k} - T_{i-1,j,k}}{2} \right) \right)
 \end{array} \right. \quad (\text{III-30})$$

Pour la deuxième équation:

$$\left\{ \begin{array}{l}
 g = 2aa + 2cc + \frac{2cc}{(1-i)^2 (\Delta q)^2} \\
 g_1 = cc \left(1 + \frac{1}{2(1-i)} \right) \\
 g_{-1} = cc \left(1 - \frac{1}{2(1-i)} \right) \\
 g_2 = aa \\
 g_{-2} = aa \\
 g_3 = \frac{cc}{(1-i)^2 (\Delta q)^2} \\
 g_{-3} = \frac{cc}{(1-i)^2 (\Delta q)^2} \\
 gw = bb \left(\left\{ \frac{u_{i+1,j+1,k} - u_{i-1,j+1,k} - u_{i-1,j-1,k} + u_{i+1,j-1,k}}{4} \right\} + \frac{1}{(1-i)} \left\{ \frac{u_{i,j+1,k} - u_{i,j-1,k}}{2} \right\} + \right. \\
 \left. \left\{ \frac{1}{(1-i)} \left\{ \frac{v_{i,j+1,k+1} - v_{i,j-1,k+1} - v_{i,j-1,k-1} + v_{i,j+1,k-1}}{4\Delta q} \right\} \right\} \right)
 \end{array} \right. \quad (\text{III-31})$$

Pour la troisième équation :

$$\left\{ \begin{array}{l}
 h = \frac{2aa}{(1-i)^2(\Delta q)^2} + 2cd \left(2 + \frac{1}{2(1-i)^2} \right) \\
 h_1 = cd \left(1 + \frac{1}{2(1-i)} \right) \\
 h_{-1} = cd \left(1 - \frac{1}{2(1-i)} \right) \\
 h_2 = cc \\
 h_{-2} = cc \\
 h_3 = \frac{aa}{(1-i)^2(\Delta q)^2} \\
 h_{-3} = \frac{aa}{(1-i)^2(\Delta q)^2} \\
 hv = bb \left\{ \frac{1}{(1-i)} \left[\frac{u_{i+1,j,k+1} - u_{i-1,j,k+1} - u_{i-1,j,k-1} + u_{i+1,j,k-1}}{4\Delta q} \right] + \frac{1}{(1-i)} \left[\frac{w_{i,j+1,k+1} - w_{i,j-1,k} - w_{i,j-1,k-1} + w_{i,j+1,k}}{4\Delta q} \right] \right\} \\
 + dd \left(\frac{1}{(1-i)} \left[\frac{u_{i,j,k+1} - u_{i,j,k-1}}{4\Delta q} \right] \right) - ee \left(\frac{1}{(1-i)} \left[\frac{T_{i,j,k+1} - T_{i,j,k-1}}{2\Delta q} \right] \right)
 \end{array} \right. \quad (III-32)$$

De même pour les nœuds irréguliers:

$$\left\{ \begin{array}{l}
 f = \left\{ 2aa \left(\frac{1}{a} + \frac{1}{b} \right) + \frac{2cc}{(1-i)^2(m+n)h^2} \left(\frac{1}{m} + \frac{1}{n} \right) - \frac{2cc}{(1+c)} \left(1 + \frac{1}{c} \right) + \frac{1}{(1-i)^2} \right\} \\
 f_1 = \frac{2aa}{(a+b)} \left(\frac{1}{b} + \frac{1}{(1-i)} \right) \\
 f_{-1} = \frac{2aa}{(a+b)} \left(\frac{1}{a} - \frac{1}{(1-i)} \right) \\
 f_2 = \frac{2cc}{c(1+c)} \\
 f_{-2} = \frac{2cc}{(1+c)} \\
 f_3 = \frac{2cc}{n(m+n)(1-i)^2 h^2} \\
 f_{-3} = \frac{2cc}{m(m+n)(1-i)^2 h^2} \\
 fu = bb \left\{ \frac{h}{(1-i)} \beta v + h^2 \gamma w \right\} + dd \left\{ \frac{2}{(1-i)^2 h} \left(\frac{v_{i,j,k+1} - v_{i,j,k-1}}{(m+n)} \right) \right\} - ee \left\{ \frac{h}{(b+c)} \left(\frac{T_{i+1,j,k} - T_{i-1,j,k}}{(b+c)} \right) \right\}
 \end{array} \right. \quad (III-33)$$

Et

$$\left\{ \begin{array}{l}
 g = \left\{ \frac{2aa}{(1+c)} \left(1 + \frac{1}{c} \right) + \frac{2cc}{(a+b)} \left(\frac{1}{a} + \frac{1}{b} \right) + \frac{2cc}{(1-i)(m+n)h^2} \left(\frac{1}{m} + \frac{1}{n} \right) \right\} \\
 g_1 = \frac{2cc}{(a+b)} \left(\frac{1}{(1-i)} + \frac{1}{b} \right) \\
 g_{-1} = \frac{2cc}{(a+b)} \left(\frac{1}{a} - \frac{1}{(1-i)} \right) \\
 g_2 = \frac{2aa}{c(1+c)} \\
 g_{-2} = \frac{2aa}{(1+c)} \\
 g_3 = \frac{2cc}{n(m+n)(1-i)^2 h^2} \\
 g_{-3} = \frac{2cc}{m(m+n)(1-i)^2 h^2} \\
 gw = bb \left\{ \frac{2}{(1-i)} \left(\frac{u_{i,j+1,k} - u_{i,j-1,k}}{(1+c)} \right) + h^2 \gamma u + \frac{h}{(1-i)} \varepsilon v \right\} - ee \left\{ \frac{h^2}{(1+c)} \left(\frac{T_{i,j+1,k} - T_{i,j-1,k}}{(1+c)} \right) \right\}
 \end{array} \right. \quad (III-34)$$

Et aussi :

$$\left\{ \begin{array}{l}
 h = \left\{ \frac{2aa}{(1-i)^2(m+n)h^2} \left(\frac{1}{m} + \frac{1}{n} \right) + \frac{2cc}{(1+c)} \left(1 + \frac{1}{c} \right) + 2cc \left(\frac{1}{a} + \frac{1}{b} \right) + \frac{cc}{(1-i)^2} \right\} \\
 h_1 = \frac{2cc}{(a+b)} \left(\frac{1}{b} + \frac{1}{(1-i)} \right) \\
 h_{-1} = \frac{2cc}{(a+b)} \left(\frac{1}{a} - \frac{1}{(1-i)} \right) \\
 h_2 = \frac{2cc}{c(1+c)} \\
 h_{-2} = \frac{2cc}{(1+c)} \\
 h_3 = \frac{2aa}{n(m+n)(1-i)^2 h^2} \\
 h_{-3} = \frac{2aa}{m(m+n)(1-i)^2 h^2} \\
 hv = bb \left\{ \frac{2h}{(1-i)} (\beta u + \varepsilon v) \right\} + dd \left\{ \frac{2}{(1-i)^2 h} \left(\frac{u_{i,j,k+1} - u_{i,j,k-1}}{(m+n)} \right) \right\} - ee \left\{ \frac{h}{(1-i)} \left(\frac{T_{i,j,k+1} - T_{i,j,k-1}}{(m+n)} \right) \right\}
 \end{array} \right. \quad (III-35)$$

V – 1 Introduction:

Pour des raisons économiques les substrats à large diamètre sont préférables, d'autre part un degré élevé de défauts conduit à une détérioration rapide du composant électronique. Pour ces raisons le monocristal dont le substrat est coupé, doit avoir une bonne qualité structurale avec une faible densité de défauts. Ainsi beaucoup d'efforts sont faits pour produire des cristaux adéquats. Les tels défauts, les dislocations, les interstitiels et les lacunes sont inévitables.

Pendant le processus de croissance le monocristal a un bout froid près du germe alors que l'interface solide / liquide est exactement à la température de fusion. Cette région est appelée interface de croissance. Une interface convexe est nécessaire pour améliorer la qualité cristalline du CdTe.[41]

A l'aide de la méthode Bridgman horizontale, on a étudié l'effet de plusieurs paramètres.

La région séparant le liquide et le solide, appelée interface de croissance doit être de forme convexe (vue du liquide). En effet en général, les nucléaires parasites ont tendances à croître à partir de la zone en contact avec les parois de l'ampoule de croissance et une interface concave aurait tendance à propager ces cristaux vers le centre empêchant la croissance des cristaux déjà présents. Une interface convexe a plutôt tendance à rejeter les cristaux parasites vers l'extérieur. Alors le maintien d'un front de cristallisation convexe est nécessaire pour minimiser le nombre des cristaux parasite croissance à l'interface [37].

L'obtention de composants électronique à base du CdTe de bonne qualité ayant une durée de vie assez importante est étroitement liée à la qualité cristalline du CdTe dont ils ont été fabriqués, l'amélioration de cette dernière est le souci permanent des chercheurs.

IV –2 Résultats et discussions:

A l'aide de la méthode de calcul décrite précédemment, nous avons déterminé les répartitions de la température pour différentes conditions aux limites et pour différents paramètres; nous avons obtenu la forme de l'interface et les gradients thermiques.

Ainsi on a exploré l'effet du gradient thermique, température des zones chaude et froide, sur la convexité de l'interface.

Plusieurs simulations ont été effectuées en jouant sur les paramètres cités, par les auteurs [3, 13,14] pour les conductivités thermiques on prend des valeurs qui correspondent à des températures moyennes pour le liquide et le solide. La convexité de

l'interface est prise comme la différence entre les hauteurs de la position de l'interface au centre et aux parois externes du cristal.

IV – 2- 1 Effet du gradient thermique sur la forme de l'interface:

Le creuset utilisé dans le système étudié est divisé en trois parties: la zone chaude, la zone froide, et la zone de transition, pour la première et la deuxième la température des parois latérales est constante, mais pour la troisième zone le gradient est constant.

En imposant, dans notre simulation une vitesse de tirage de 1mm /h, l'écart entre la température élevée et celle de fusion est $\Delta T = T_h - T_f = 5^\circ\text{C}$ et $T_b = 1057^\circ\text{C}$, dans un creuset C1 ($Z = 8\text{ cm}$, $R = 2\text{ cm}$). Les différentes valeurs du gradient thermique imposés à la zone de transition sont: $G = 5^\circ\text{C/cm}$, 10°C/cm , 20°C/cm et 40°C/cm .

Dans le premier cas pour un faible gradient ($G = 5^\circ\text{C/cm}$) la répartition de la température est représentée sur la figure: IV – 1.

- Les figures IV – 2, 3, 4 représentent la distribution de température en $^\circ\text{C}$ pour $G = 10^\circ\text{C/cm}$, 20°C/cm , 40°C/cm .

On remarque que pour un gradient inférieur à 10°C/cm l'interface est concave (vue à partir du liquide), et elle devient convexe quand il dépasse cette valeur, pour laquelle l'interface est plane, et pour des gradients supérieurs à 15°C/cm l'interface prend la forme convexe. Donc la forme de l'interface dépend du gradient thermique

Ce résultat permet de conclure que la qualité cristalline peut être améliorée avec des gradients inférieurs à 10°C/cm ; ceci trouve son explication dans le fait que la concavité de l'interface facilite l'écoulement du liquide vers les parois de l'ampoule et évite la naissance des contraintes au cours de la croissance, contrairement à la figuration de l'interface convexe.[40,41,42].

- La figure IV –5, représente la convexité de l'interface en fonction des gradients thermiques imposés à la zone de transition.

- Les figures IV – 6, 7, 8, représentent les isothermes pour $G = 5^\circ\text{C}$, 10°C et 20°C .

Dans le cas de l'angle $\theta = 90$, elles sont montrées que l'interface change sa place pour $G=5^\circ\text{C}$ elle se trouve à la zone froide, et elle passe vers la zone chaude pour $G=20^\circ\text{C}$, et pour $G=10^\circ\text{C}$ elle se trouve au centre.

- Le traitement de ces isothermes montre que l'interface change sa place, pour $G = 10^\circ\text{C/cm}$ elle est au milieu, pour les gradients supérieurs à 10°C/cm .

IV-2 -2 Effet de la température de la zone chaude T_{haute} sur la forme de l'interface:

Dans cette partie nous sommes intéressés à l'effet de la température de la zone chaude T_{haute} sur la forme de l'interface.

On impose un gradient thermique nul dans la zone chaude et froide mais dans la zone de transition $G = 20 \text{ C}^\circ/\text{cm}$. On varie la température T_{haute} , on prend différentes valeurs de $\Delta T = T_h - T_f = 2 \text{ C}^\circ/\text{cm}$, $5 \text{ C}^\circ/\text{cm}$, $10 \text{ C}^\circ/\text{cm}$, on a aussi la température T_{basse} de la zone froide du four prend les valeurs $T_b = T_{haute} - 40$. Dans le creuset C1 ($Z=8\text{cm}$, $R=2\text{cm}$).

Pour ce qui concerne l'effet de la température de la zone chaude nous constatons que la concavité de l'interface diminue quand la température de la zone chaude augmente, une petite différence $\Delta T = T_h - T_f$, l'interface devient convexe. Pour ce cas il faut varier la température de la zone chaude et en gardant le gradient thermique constant. La quantité de chaleur évacuée par conduction dans le solide est égale à la quantité de chaleur transportée par conduction à travers le liquide. Donc la diminution de T_{haute} produit la diminution de la quantité de chaleur dissipée et l'interface devient plus convexe.

On remarque que la diminution de la température de la zone chaude T_{haute} entraîne la diminution de la quantité de chaleur dissipée à l'interface.

- Les figures IV-9, 10 représentent la répartition des températures en $^\circ\text{C}$.

- La figure IV-11 représente la convexité de l'interface en fonction de la température: $\Delta T = T_h - T_f$.

- Les figures IV-9, 10, 11 représentent la variation de la convexité de l'interface en fonction de la différence $\Delta T = T_h - T_f$. On constate que la variation de la température de la zone chaude a un grand effet sur la convexité de l'interface bien que le gradient thermique reste constant.

Donc la diminution de T_{basse} entraîne la diminution de la quantité de chaleur, dissipée et l'interface devient plus convexe.

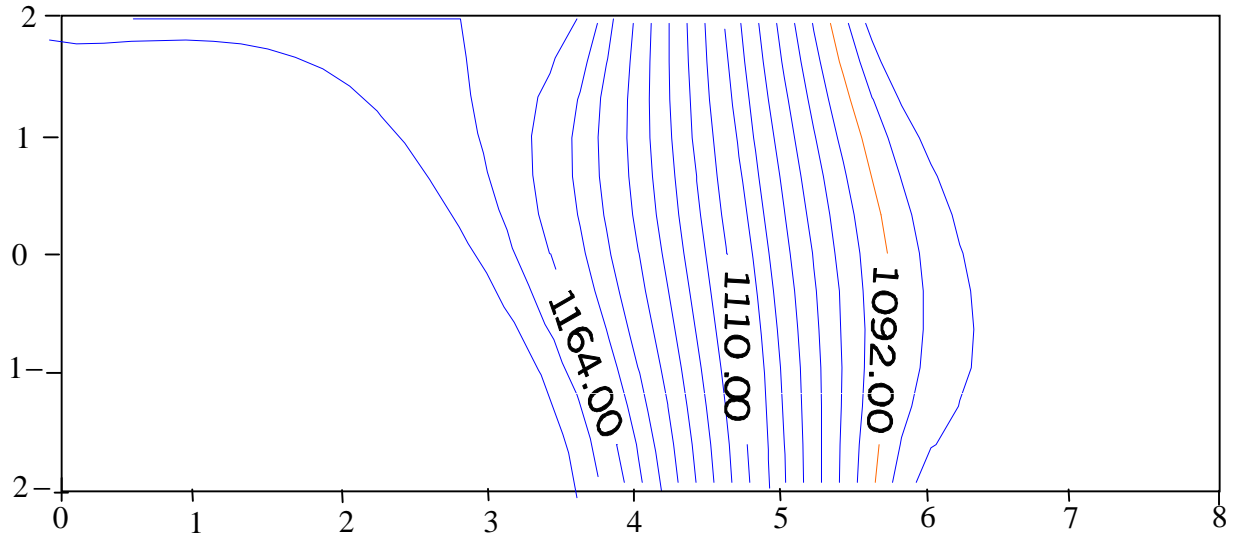


Fig. IV-1 Effet du gradient thermique, avec $G = 5^\circ\text{C/cm}$

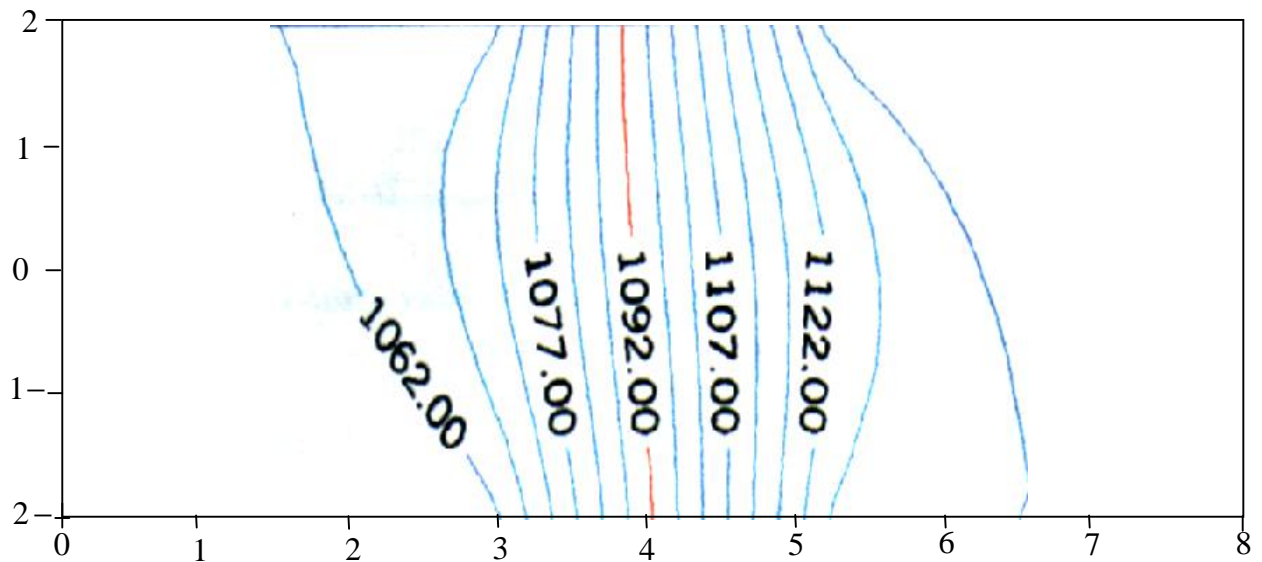


Fig. IV-2 Effet du gradient thermique, avec $G = 10^\circ\text{C/cm}$

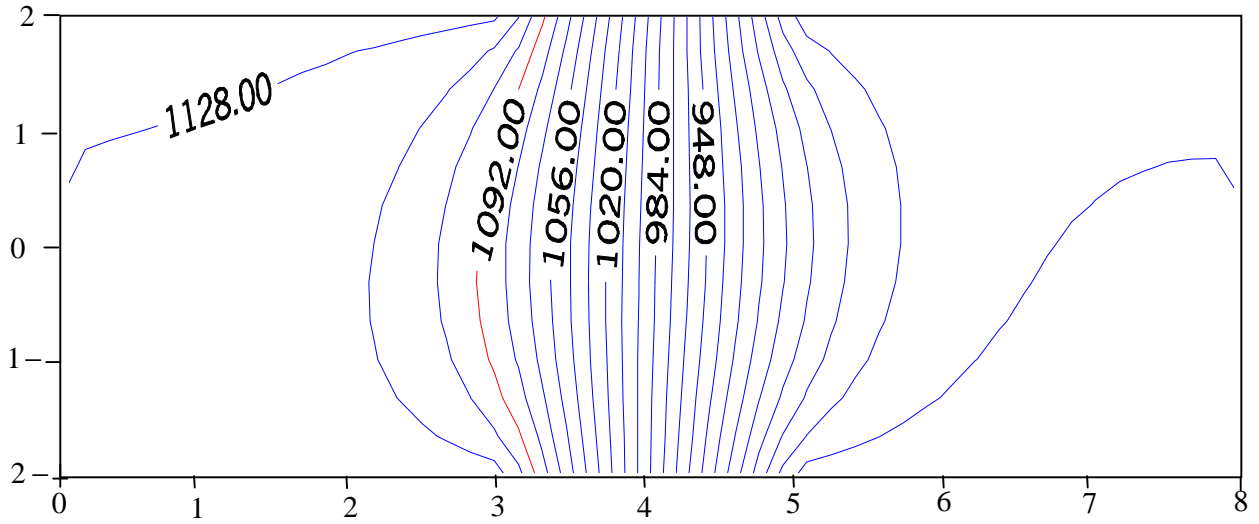


Fig. IV-3 Effet du gradient thermique, avec $G = 20 \text{ }^\circ\text{C /cm}$

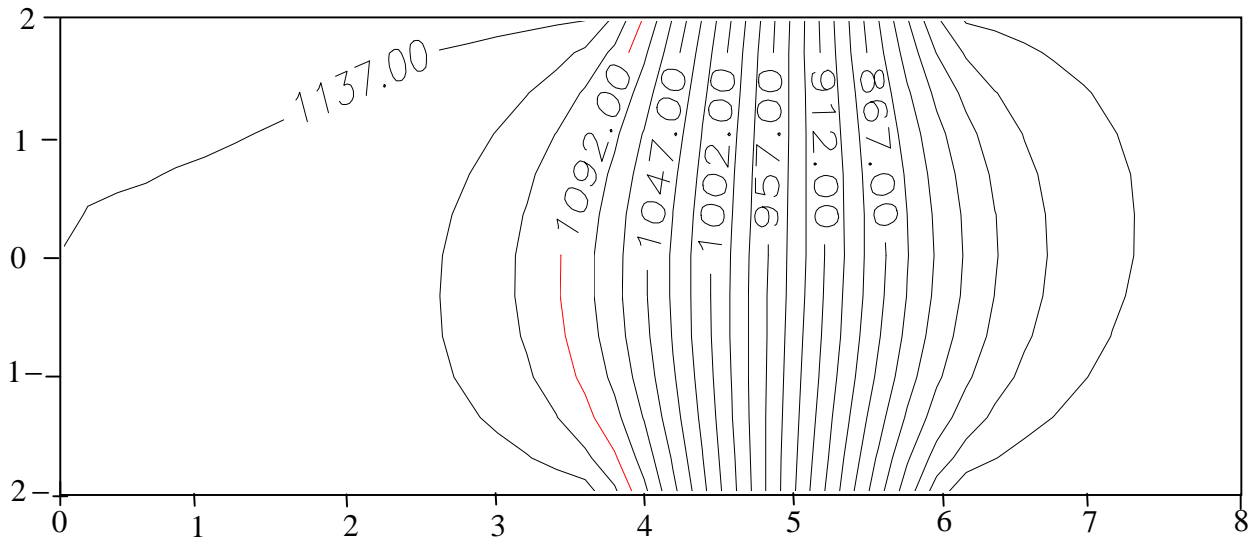


Fig. IV-4 Effet du gradient thermique, avec $G = 40 \text{ }^\circ\text{C /cm}$

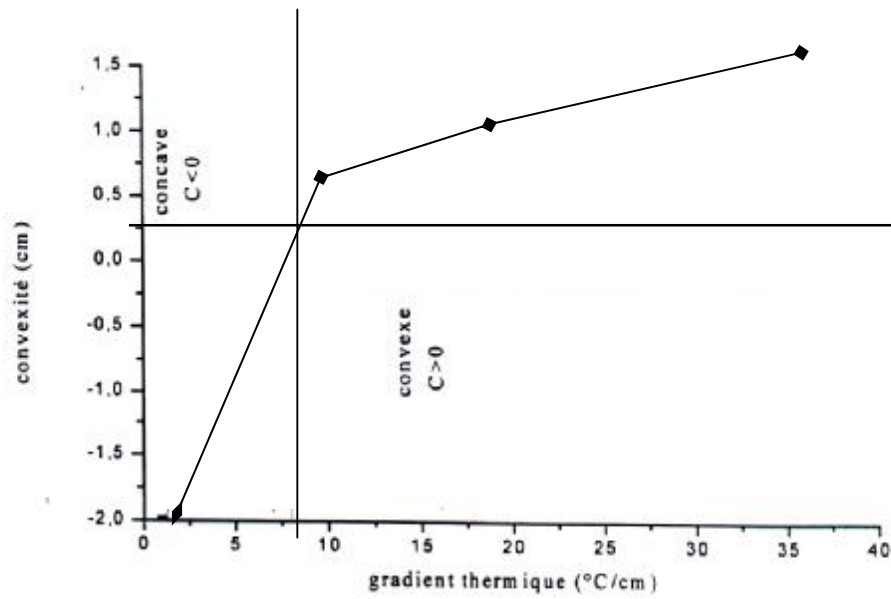


Fig. IV-5: Convexité de l'interface en fonction des gradients thermiques imposés à la zone de transition.

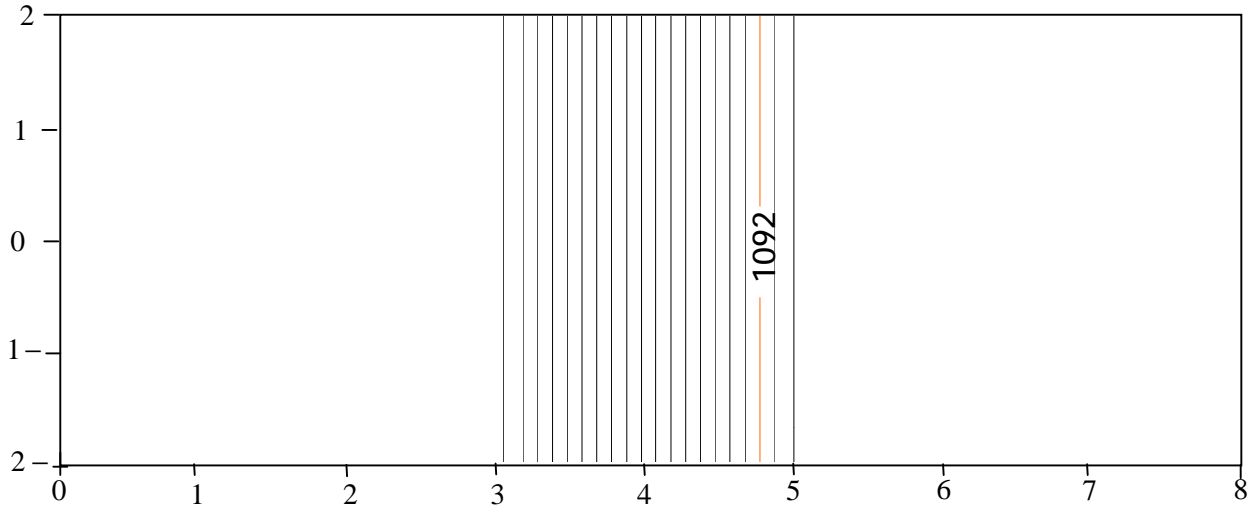


Fig. IV-6 Effet du gradient thermique, avec $G = 05 \text{ }^\circ\text{C/cm}$, et $\theta = 90^\circ$

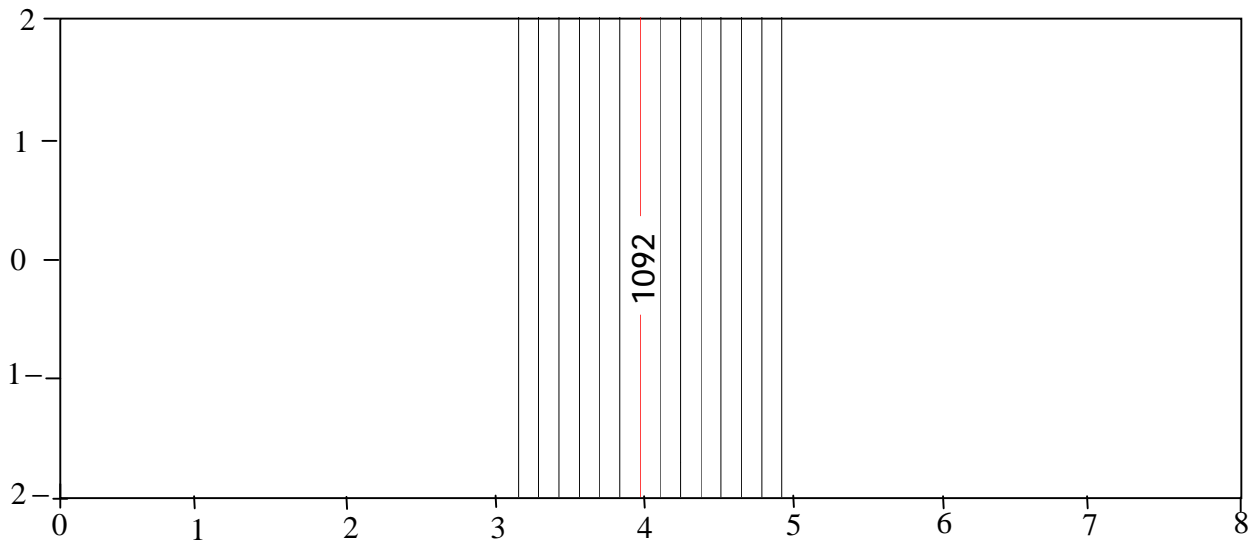


Fig. IV-7 Effet du gradient thermique, avec $G = 10^\circ\text{C/cm}$ et $\theta = 90^\circ$

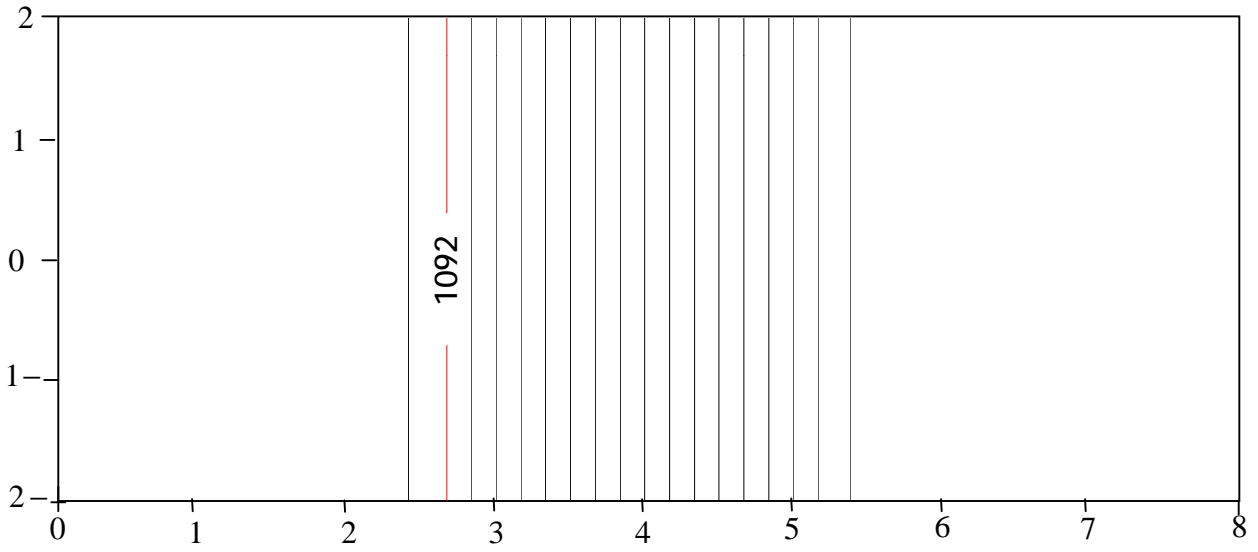


Fig. IV-8 Effet du gradient thermique, avec $G = 20^{\circ}\text{C} / \text{cm}$, et $\theta = 90^{\circ}$

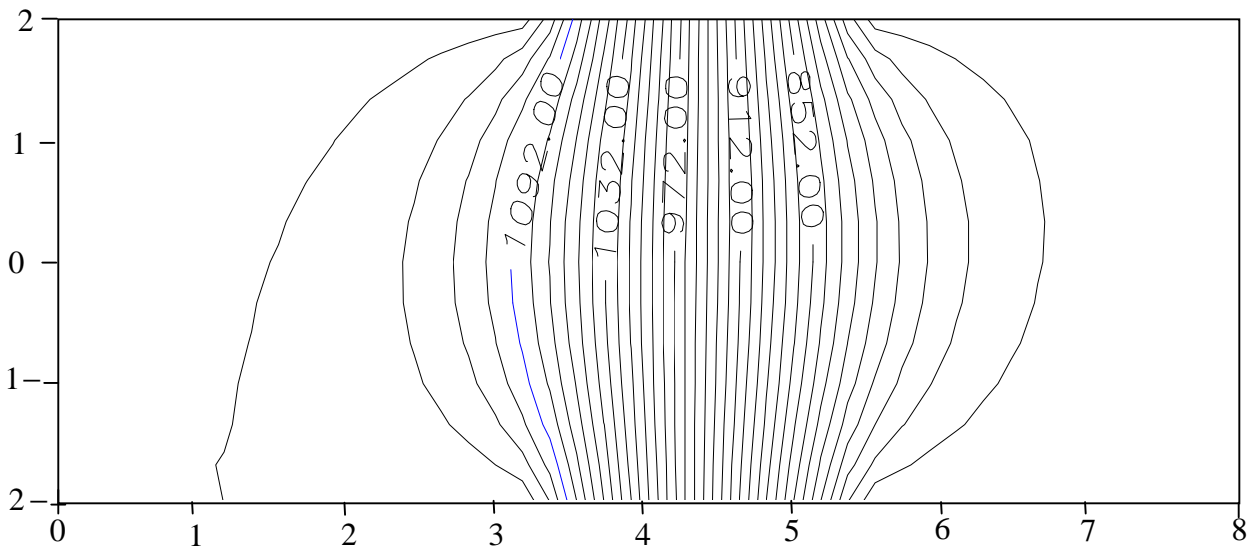


Fig. IV-9 Effet de la température T_{haute} $\Delta T = T_h - T_f = 2^{\circ}\text{C}$

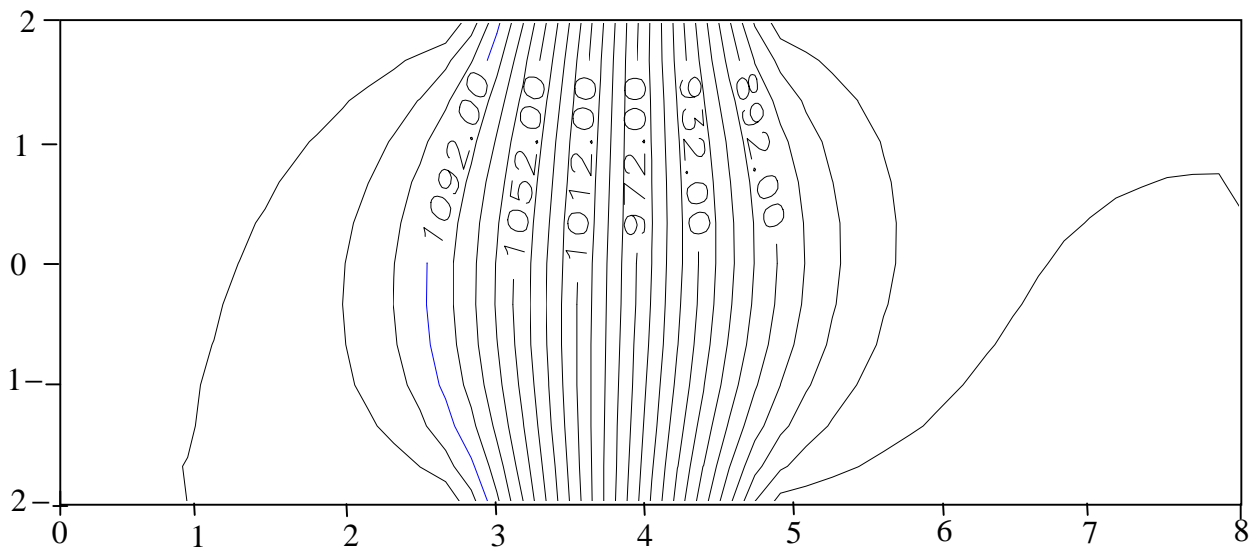


Fig.IV-10 Effet de la température T_{haute} , $\Delta T = T_h - T_f = 10^\circ\text{C}$

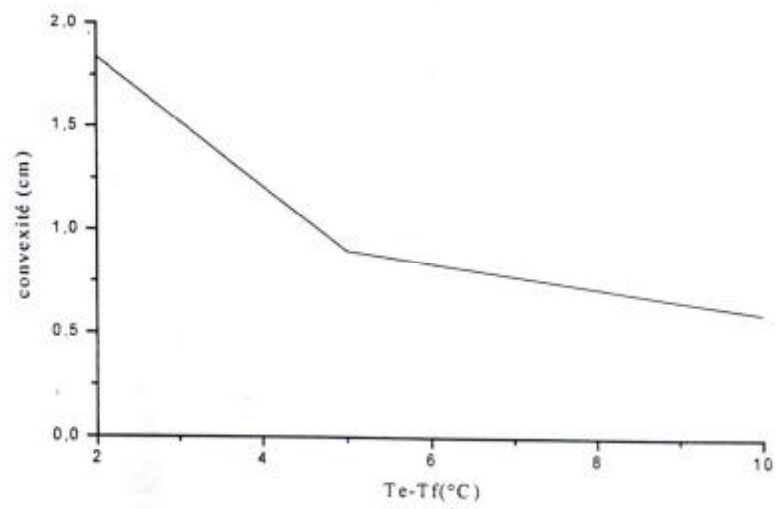


Fig. IV-11: Convexité de l'interface en fonction de la différence de température $\Delta T = T_h - T_f$

IV-2-3 Effet de la taille de l'ampoule sur la forme de l'interface:

IV-2-3-1 Effet de la longueur de l'ampoule:

Pour étudier l'effet de la taille de l'ampoule, on prend deux ampoules C2 ($Z=10\text{cm}$, $R=2\text{cm}$), C3 ($Z=12\text{cm}$, $R=2\text{cm}$), et on fixe la vitesse de tirage à 1 mm/s , le gradient thermique imposé est $G = 20\text{ C}^\circ/\text{cm}$ dans la zone de transition, et $\Delta T = T_h - T_f = 5\text{ C}^\circ/\text{cm}$, $T_f - T_b = 35\text{ C}^\circ$.

Les principaux résultats obtenus grâce à la simulation numérique sont présentés comme suit:

Les Répartitions des températures en C° , sont représentées sur les figures: IV-12, 13.

- la figure IV- 14 représente la convexité de l'interface en fonction de la longueur du creuset.

De l'examen de ces résultats, on obtient que la convexité de l'interface reste constante, quand on augmente la longueur de l'ampoule.

IV-2-3-2 Effet du rayon de l'ampoule:

Pour illustrer l'effet du rayon de l'ampoule on prend deux ampoules, C4 ($Z=8\text{cm}$, $R=1\text{cm}$), C5 ($Z=8\text{cm}$, $R=3\text{cm}$), dans les mêmes conditions que l'étude précédente.

Les résultats sont représentés sur les figures IV-15, 16.

La figure IV- 17 représente la convexité de l'interface en fonction du rayon de l'ampoule.

L'examen de ces résultats, on obtient que la convexité de l'interface augmente légèrement avec l'augmentation du rayon de l'ampoule, et aussi nous permet d'avoir une grande partie de cristal soumise à de faibles niveaux de contraintes.

IV-2-4 Effet de la vitesse de tirage sur la forme de l'interface:

Pour examiner l'effet de la vitesse de tirage sur la forme de l'interface, on prend une ampoule C2 en imposant le fait que le gradient thermique possède le même profil que dans l'étude précédente (nul dans la zone chaude et froide, égale à $20\text{ C}^\circ/\text{cm}$ dans la zone de transition), et $\Delta T = T_h - T_f = 5\text{ C}^\circ/\text{cm}$, $T_f - T_b = 35\text{ C}^\circ$.

On varie ensuite la vitesse de tirage: de la manière suivante:

2 mm/s , 3 mm/s . Les principaux résultats obtenus grâce à la simulation numérique sont présentés comme suit:

Les répartitions des températures en C° , sont représentées sur les figures: IV-18, 19.

- la figure IV-20 représente la convexité de l'interface en fonction de la vitesse de tirage.

Les résultats obtenues montrent que l'augmentation de la vitesse de tirage de l'ampoule a cause de la discontinuité du gradient thermique permet a déduit une légère augmentation de la convexité de l'interface.

On conclue donc que l'effet de la vitesse de tirage sur la forme de l'interface est négligeable.

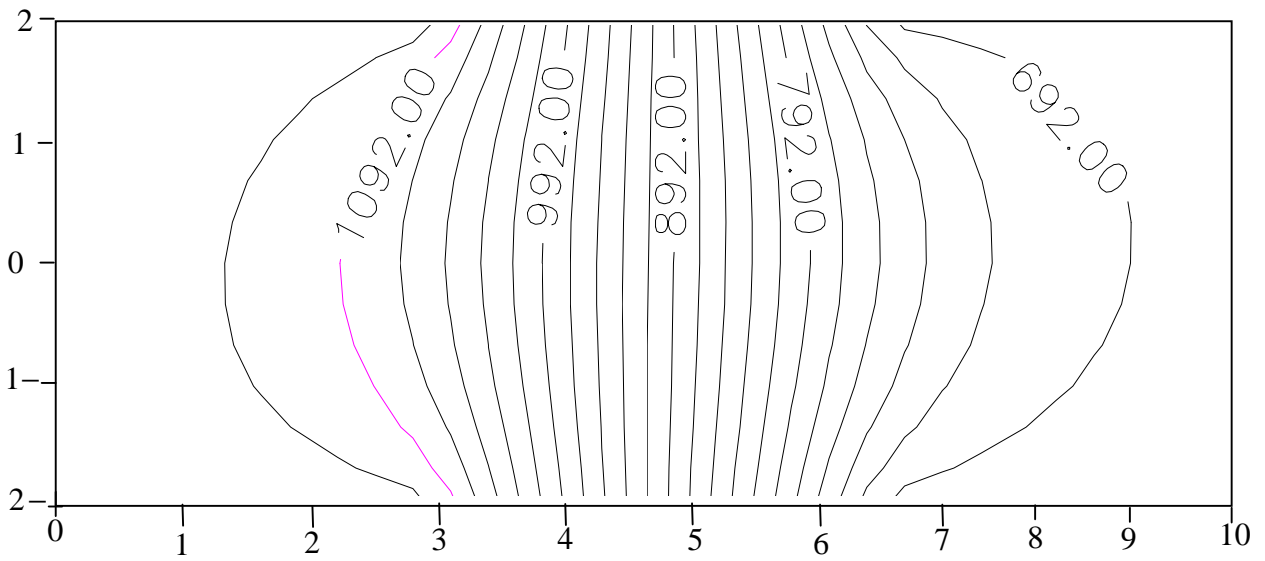


Fig. IV-12 Effet de la longueur du creuset, avec Z=10cm

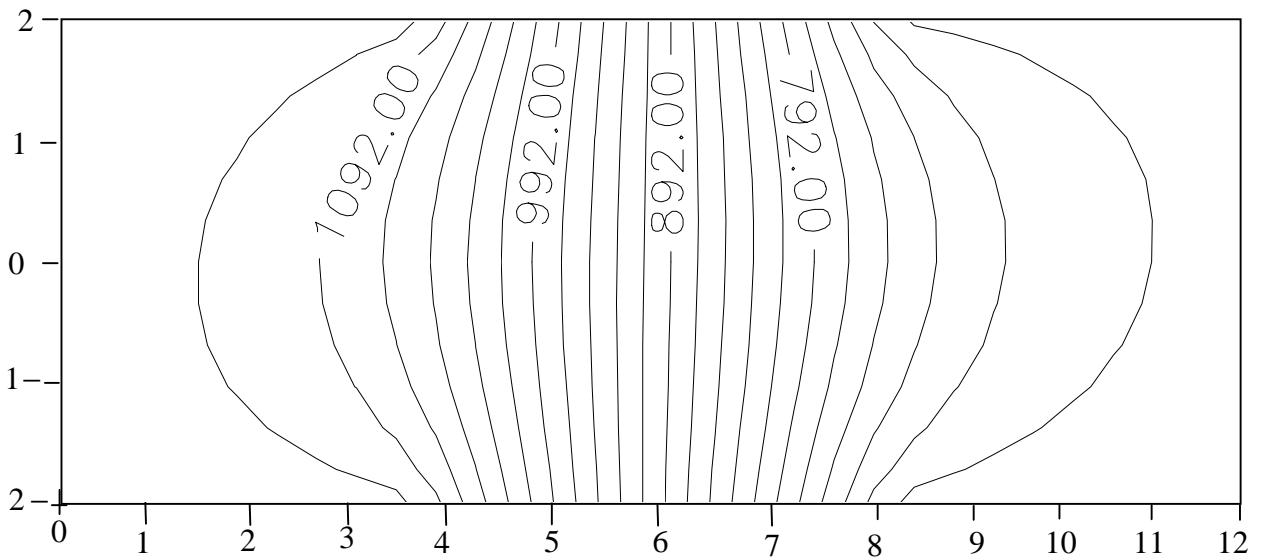


Fig. IV-13 Effet de la longueur du creuset, avec Z=12cm

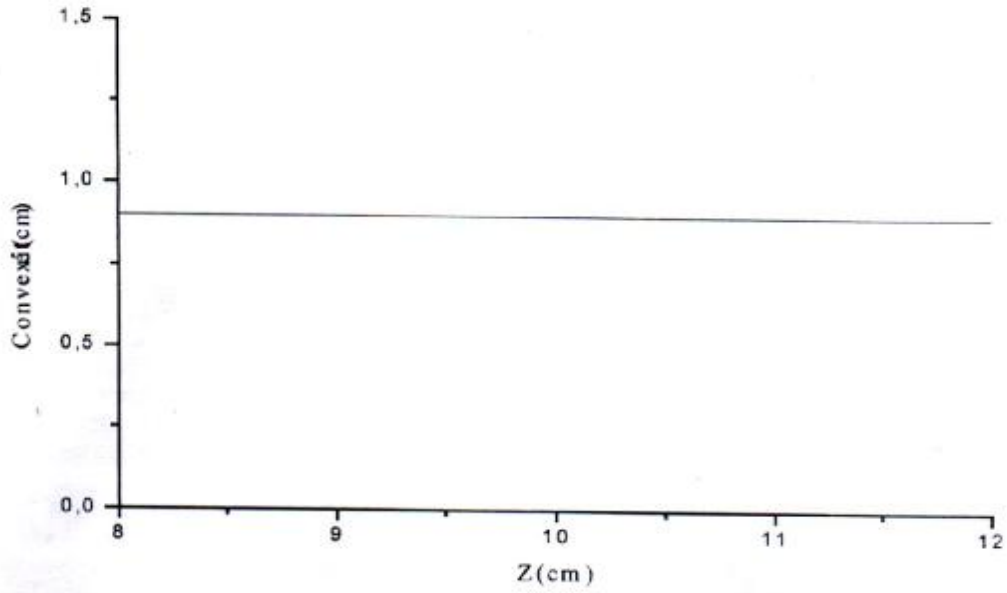


Fig. IV-14: Convexité de l'interface en fonction de la longueur du creuset

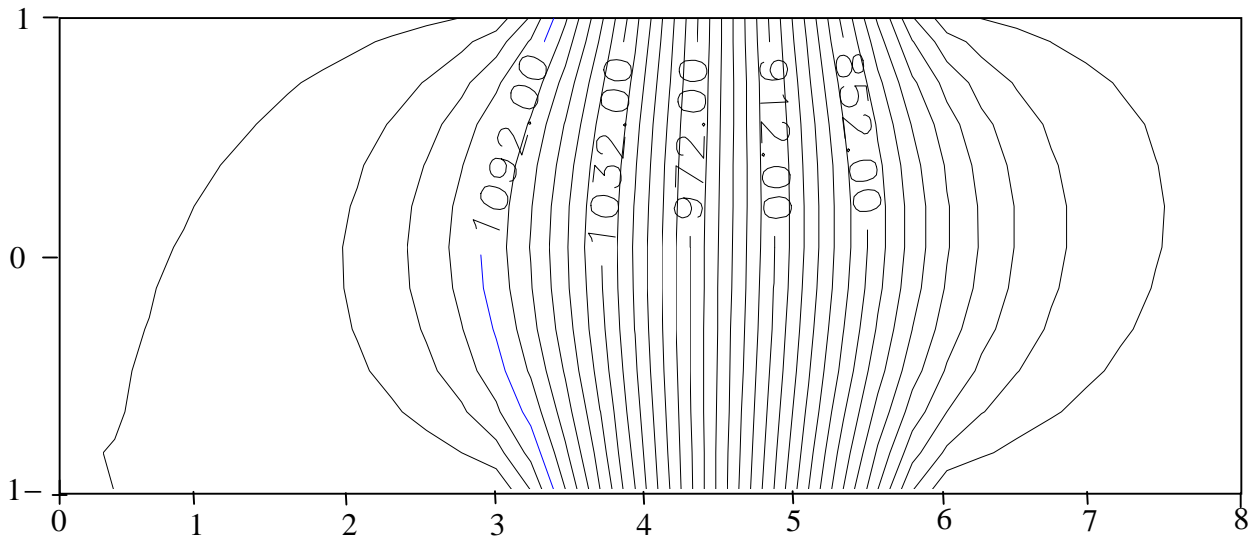


Fig. IV-15 Effet du rayon du creuset, avec R=1cm

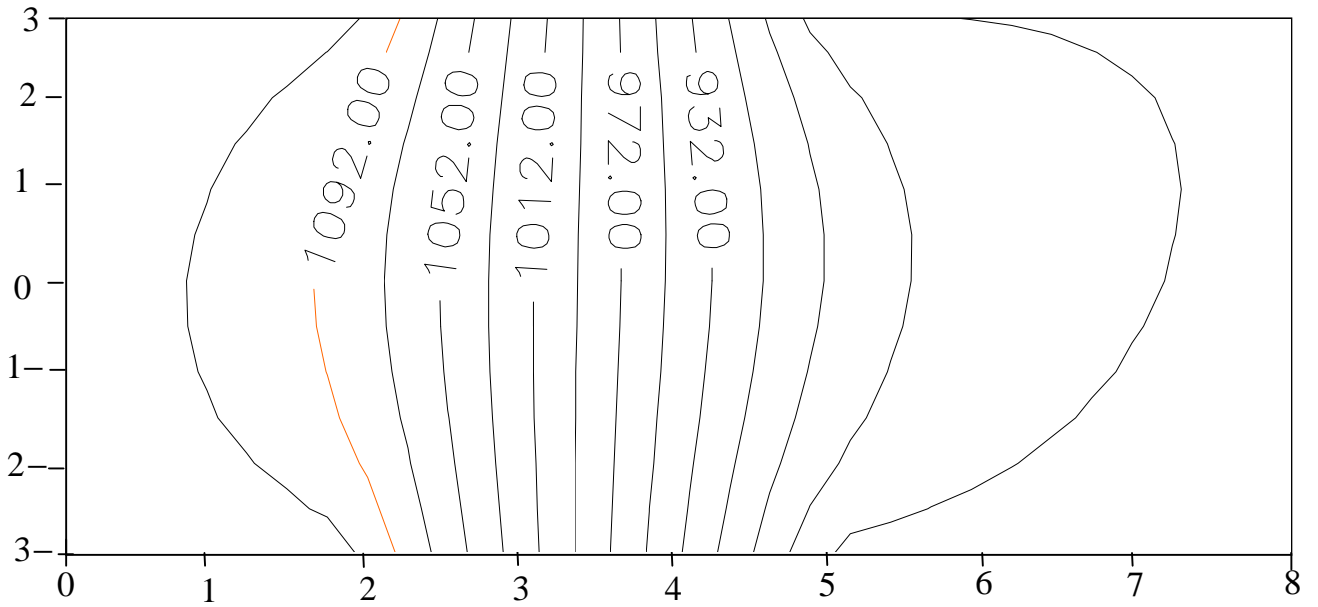


Fig. IV-16 Effet du rayon du creuset, avec $R=3$ cm

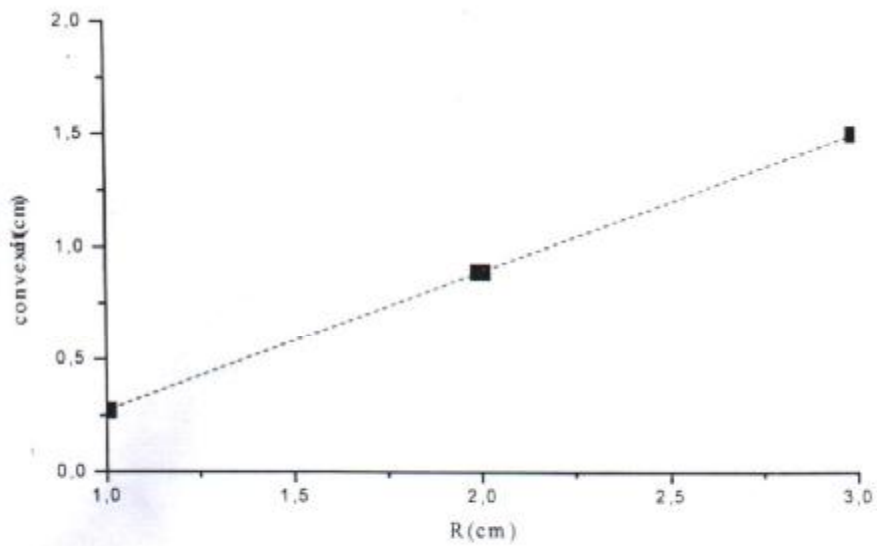


Fig. IV-17: Convexité de l'interface en fonction du rayon du creuset

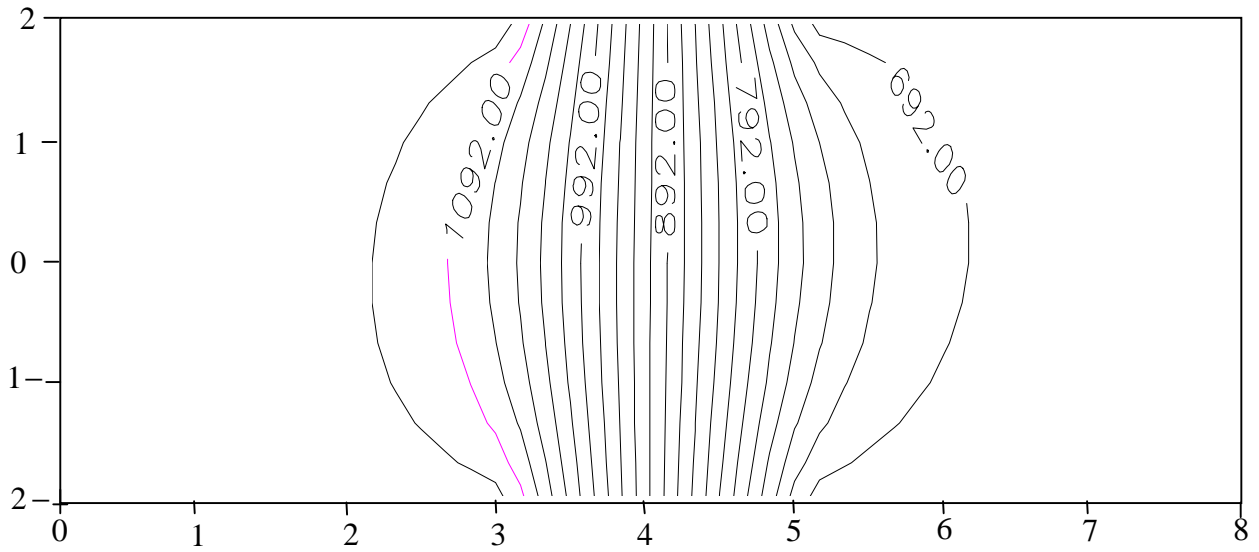


Fig. IV-18 Effet de la vitesse du tirage, avec $V_p = 2$ mm/h

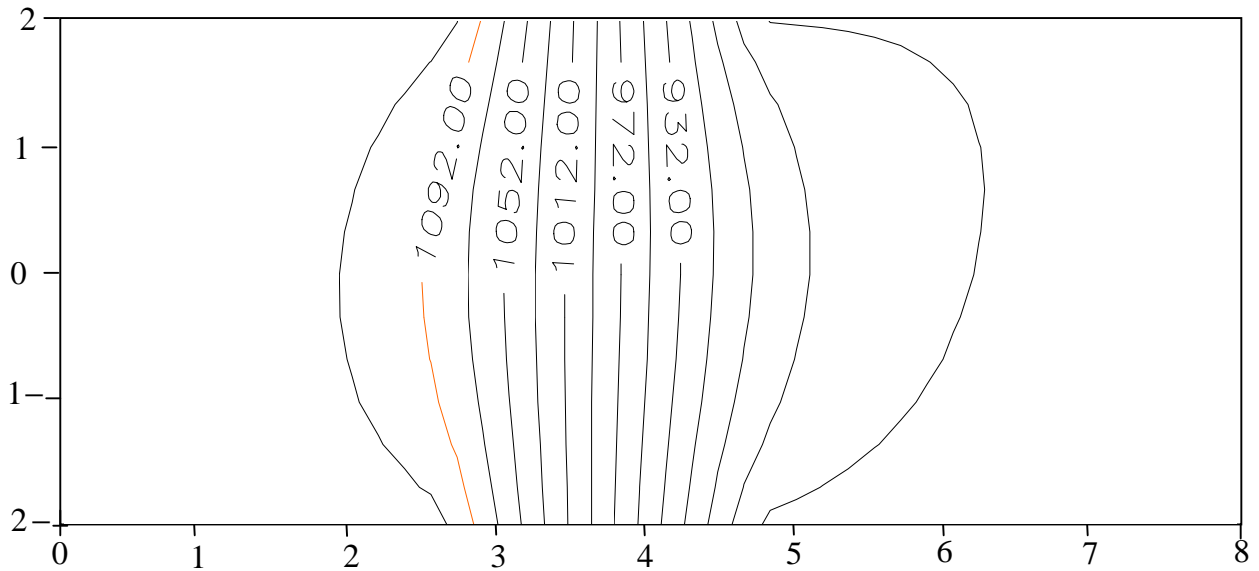


Fig. IV-19 Effet de la vitesse du tirage, avec $V_p = 3$ mm/h

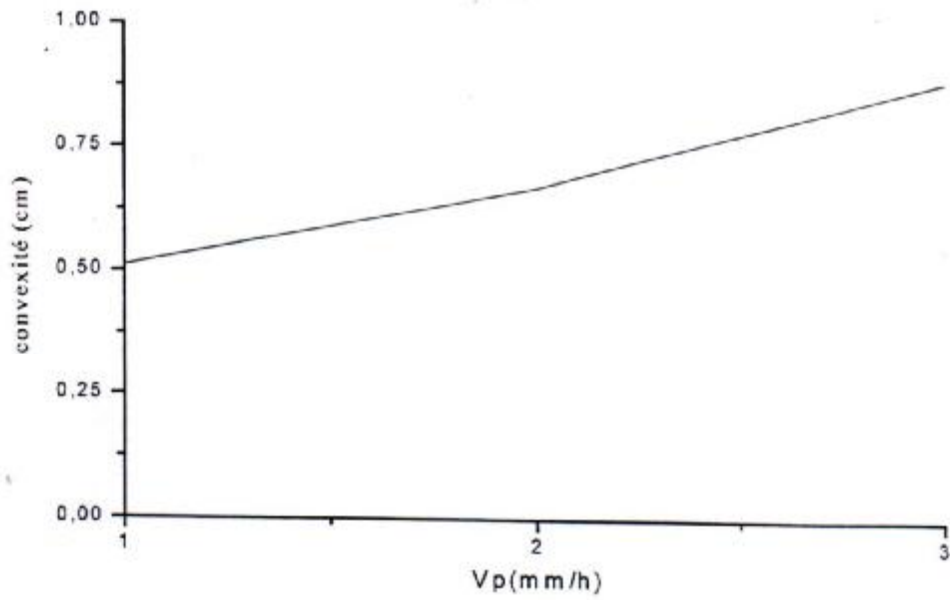


Fig. IV-20: Convexité de l'interface en fonction de la vitesse de tirage.

L'objectif de ce travail est l'étude de l'influence des différents paramètres du four Bridgman horizontale sur la forme de l'interface solide/liquide qui est un facteur déterminant pour la qualité cristalline des cristaux semi-conducteurs CdTe. Cette étude est une simulation numérique pour la croissance de ce cristal et cela par calcul numérique pour la distribution de champ de température dans le creuset croissance.

Le modèle mathématiques étudié est:

- Un état stationnaire de la conduction de chaleur

Les caractérisations du système étudié sont:

- le système est axisymétrique
- les propriétés sont constantes dans les deux phases
- le système est unibloque

L'implémentation de ces modèles mathématiques proposés est basée sur la méthode des différences finies et le marquage explicite de l'interface liquide/solide.

Les résultats principaux obtenus:

1- Effet du gradient thermique.

En augmentant le gradient thermique l'interface devient convexe au alentour de 8-10C/cm.

Pour des gradients $<5C/cm$ la convexité augmente rapidement avec la diminution du gradient, pour des gradients $>15C/cm$ la convexité augmente lentement avec l'augmentation du gradient.

- l'augmentation du gradient thermique imposé à la zone de transition implique l'augmentation des contraintes thermiques.

2- Effet de la température de la zone chaude T_{haute}

- Une petite différence entre T_{haute} produit une interface convexe.
- La variation de T_{haute} a un grand effet sur la convexité de l'interface.

3- Effet de la taille de l'ampoule

- La convexité de l'interface reste constante avec l'augmentation de la longueur de l'ampoule de croissance.
- La convexité de l'interface augmente avec l'augmentation du rayon de l'ampoule de croissance.

4- Effet de la vitesse de tirage :

- L'effet de la vitesse de tirage sur la convexité de l'interface est négligeable, la convexité reste toujours constante.

Enfin comme application à notre étude, nous avons déterminé les différents paramètres qui régissent la croissance des semi-conducteurs CdTe sont: une basse température T_{haute} ($T_{\text{h}}-T = 2$ à 5°C), un gradient thermique imposé à la zone de transition (de 15 à $20^{\circ}\text{C}/\text{cm}$).

Approximation des équations aux dérivées partielles par des différences finies:

Un problème aux dérivées partielles nécessite la donnée:

- d'un domaine D
- D'une équation aux dérivées partielles (EDP)
- De conditions aux limites
- De conditions initiales (pour les problèmes d'évolution).

Pour obtenir une approximation numérique de la solution de ce problème nous devons approcher les dérivées partielles de l'EDP en chaque nœud du domaine discrétisé (maillage) en utilisant les valeurs de la variable dépendante en ces nœuds avoisinants [36].

A-1 Discrétisation du domaine:

Les calculs par différences finies sont effectués suivant un maillage obtenu par un double réseau de parallèles aux axes régulièrement espacés. L'intersection de deux droites du maillage définit un nœud M de coordonnées (X_m, Y_m) . Si les parallèles à l'axe x sont espacées de $\Delta x = h$ et les parallèles à l'axe de $\Delta y = k$, le nœud a comme coordonnées $X_m = i \Delta x = ih$, et $y_m = j \Delta y = j k$ ou d'une manière condensée (i, j) . Ainsi la fonction $U(x, y)$ prend au point M (X_m, Y_m) la valeur $U(i \Delta x, j \Delta y) = U(i h, j k)$

A-2- Approximation des dérivées:

Soit $U(x, y)$ une fonction de deux variables indépendantes que nous supposons suffisamment différentiable. Si nous écrivons son développement en séries de Taylor en un point $(x+h, y+k)$, nous avons:

$$U(x+h, y+k) = U(x,y) + h \frac{\partial U}{\partial x}(x,y) + k \frac{\partial U}{\partial y}(x,y) + \frac{h^2}{2!} \frac{\partial^2 U}{\partial x^2}(x,y) + \dots \quad A-1$$

$$+ \frac{1}{(n-1)!} \left(h \frac{\partial}{\partial x} + k \frac{\partial}{\partial y} \right)^{(n-1)} U(x,y) + R_n.$$

Où le résidu R_n est donné par:

$$R_n = \frac{1}{n!} \left(h \frac{\partial}{\partial x} + k \frac{\partial}{\partial y} \right)^n U(x + \xi h, y + \eta k) \quad A-2$$

$$\xi \in]0, 1[, \eta \in]0, 1[$$

$$\text{ou encore } R_n = O[(|h| + |k|)^n]$$

L'équation (A-2) signifie qu'il existe un nombre positif constant M tel que:

$$A-3$$

$$|R_n| = M (|h| + |k|)^n$$

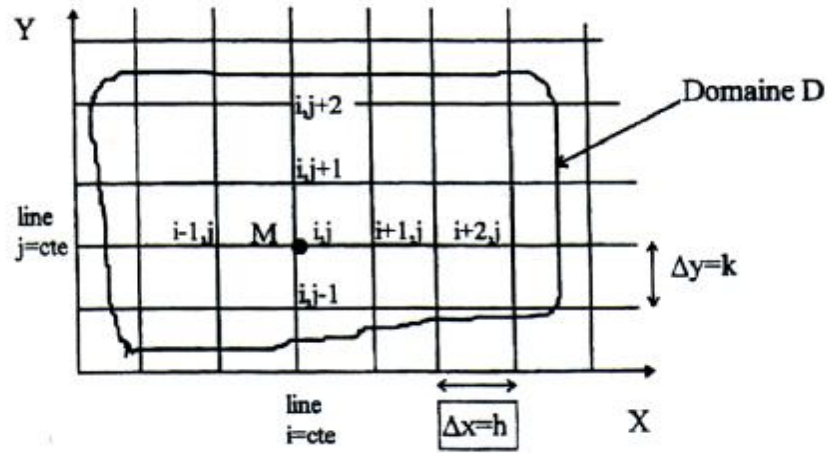


Fig. A - 1 le maillage

Le nœud $(i \Delta x, j \Delta y)$ est entouré par les nœuds avoisinants montrés sur la figure (A-1), en développant en série de Taylor pour $U_{i-1,j}$, $U_{i+1,j}$, $U_{i-2,j}$, $U_{i+2,j}$ autour de la valeur centrale $U_{i,j}$, nous obtenons:

$$U_{i-1,j} = U_{i,j} - h U_x + \frac{h^2}{2!} U_{xx} - \frac{h^3}{3!} U_{xxx} + \frac{h^4}{4!} U_{xxxx} + R_5 \quad A-4$$

$$U_{i+1,j} = U_{i,j} + h U_x + \frac{h^2}{2!} U_{xx} + \frac{h^3}{3!} U_{xxx} + \frac{h^4}{4!} U_{xxxx} + R'_5 \quad A-5$$

$$U_{i-2,j} = U_{i,j} - 2h U_x + 2h^2 U_{xx} - \frac{8}{6} h^3 U_{xxx} + \frac{2}{3} h^4 U_{xxxx} + R''_5 \quad A-6$$

$$U_{i+2,j} = U_{i,j} + 2h U_x + 2h^2 U_{xx} + \frac{8}{6} h^3 U_{xxx} + \frac{2}{3} h^4 U_{xxxx} + R'''_5 \quad A-7$$

Ici $U_x = \frac{\partial U}{\partial x}$; $U_{xx} = \frac{\partial^2 U}{\partial x^2}$, etc.... Et toutes les dérivées sont évaluées au nœud (i, j) .

A-2-1 Approximation à l'ordre 1 en h de la dérivée première:

En négligeant les termes d'ordre 2 et plus dans les équations (A-4) et (A-5) nous obtenons:

$$\frac{\partial U}{\partial x} \Big|_{i,j,k} = \frac{U_{i+1,j,k} - U_{i,j,k}}{h} + O(h) \quad (A-8)$$

$$\frac{\partial U}{\partial x} \Big|_{i,j,k} = \frac{U_{i,j,k} - U_{i-1,j,k}}{h} + O(h) \quad (A-9)$$

Nous avons donc approché U_x par des différences finies d'ordre 1 progressives (où à droite) et progressives (où à gauche) respectivement.

A-2-2 Approximation à l'ordre 2 en h de la dérivée première par les différences centrées:

En soustrayant (A-4) de (A-5) et en négligeant les termes d'ordre 4 et plus nous obtenant:

$$\frac{\partial^2 U}{\partial^2 x} \Big|_{i,j,k} = \frac{U_{i,j,k} - U_{i-1,j,k}}{h} + O(h^2) \quad (\text{A-10})$$

C'est l'approximation de U_x par des différences finies centrées d'ordre 2.

A-2-3- Approximation à l'ordre 1 en h de dérivée seconde:

En multipliant l'équation (A-5) par (-2), en ajoutant le résultat à l'équation (A-5) et en négligeant les termes d'ordre 3 et plus, nous obtenons:

$$\frac{\partial^2 U}{\partial^2 x} \Big|_{i,j,k} = \frac{U_{i,j,k} - 2U_{i+1,j,k} + U_{i+2,j,k}}{h^2} + O(h) \quad (\text{A-11})$$

C'est l'approximation de dérivée seconde à l'ordre 1 en h par les différences, à droite. De même, en utilisant les équations (A-4) et (A-6), nous obtenons l'approximation à l'ordre 1 en h de U_{xx} par différences à gauche:

$$\frac{\partial^2 U}{\partial^2 x} \Big|_{i,j,k} = \frac{U_{i,j,k} - 2U_{i-1,j,k} + U_{i-2,j,k}}{h^2} + O(h) \quad (\text{A-12})$$

A-2-4- Approximation à l'ordre 2 en h de la dérivée seconde:

En ajoutant les équations (A-4) et (A-5) et en négligeant les termes d'ordre 4 et plus, nous obtenons:

$$\frac{\partial^2 U}{\partial^2 x} \Big|_{i,j} = \frac{U_{i+1,j} - 2U_{i,j} + U_{i-1,j}}{h^2} + O(h) \quad (\text{A-13})$$

C'est l'approximation de la dérivée seconde à l'ordre 2 en h par les différences centrées.

A-2-5- Approximation à l'ordre 2 en h de la dérivée première par les différences à droite et à gauche:

De l'équation (A-5) nous pouvons tirer:

$$\frac{\partial U}{\partial x} \Big|_{i,j} = \frac{U_{i+1,j} - U_{i,j}}{h} - \frac{h}{2} U_{xx} \Big|_{i,j} - \frac{h^2}{6} U_{xxx} \Big|_{i,j} + O(h^3) \quad \text{A-14}$$

En substituant pour $U_{xx/i,j}$ de l'équation (A-11) nous obtenons:

$$\left. \frac{\partial U}{\partial x} \right|_{i,j} = \frac{-3U_{i,j} + 4U_{i+1,j} - U_{i+2,j}}{2h} + O(h^2) \quad \text{A-15}$$

C'est l'approximation d'ordre 2 en h de la dérivée première U_x par les différences à droite. De même en utilisant les équations (A, 4) et (A-12), nous obtenons

l'approximation à l'ordre 2 en h de la dérivée première U_x par les différences à gauche

$$\left. \frac{\partial U}{\partial x} \right|_{i,j} = \frac{3U_{i,j} - 4U_{i+1,j} + U_{i+2,j}}{2h} + O(h^2) \quad \text{A-16}$$

B-2-6 Approximation de U_y et U_{yy}

Les approximations de U_y et de U_{yy} sont obtenues de la même façon que celles de U_x et U_{xx} et sont données ci-dessous

$$\left. \frac{\partial U}{\partial y} \right|_{i,j} = \frac{U_{i,j+1} - U_{i,j}}{k} + O(k) \quad \text{A-17}$$

$$\left. \frac{\partial U}{\partial y} \right|_{i,j} = \frac{U_{i,j} - U_{i,j-1}}{k} + O(k) \quad \text{A-18}$$

$$\left. \frac{\partial U}{\partial y} \right|_{i,j} = \frac{U_{i,j+1} - U_{i,j-1}}{2k} + O(k^2) \quad \text{A-19}$$

$$\left. \frac{\partial U}{\partial y} \right|_{i,j} = \frac{-3U_{i,j} + 4U_{i,j+1} - U_{i,j+2}}{2k} + O(k^2) \quad \text{A-20}$$

$$\left. \frac{\partial U}{\partial y} \right|_{i,j} = \frac{+3U_{i,j} - 4U_{i,j-1} + U_{i,j-2}}{2k} + O(k^2) \quad \text{A-21}$$

$$\left. \frac{\partial^2 U}{\partial y^2} \right|_{i,j} = \frac{U_{i,j} - 2U_{i,j+1} + U_{i,j+2}}{k^2} + O(k) \quad \text{A-22}$$

$$\left. \frac{\partial^2 U}{\partial y^2} \right|_{i,j} = \frac{U_{i,j} - 2U_{i,j-1} + U_{i,j-2}}{k^2} + O(k) \quad \text{A-23}$$

$$\left. \frac{\partial^2 U}{\partial y^2} \right|_{i,j} = \frac{U_{i,j+1} - 2U_{i,j} + U_{i,j-1}}{k^2} + O(k^2) \quad \text{A-24}$$

B-2-7 Approximation de la dérivée croisée Uxy

$$\left. \frac{\partial^2 U}{\partial x \partial y} \right|_{i,j} = \frac{\partial}{\partial y} \left[\left. \frac{\partial U}{\partial x} \right|_{i,j} \right] = \frac{\left. \frac{\partial U}{\partial x} \right|_{i,j+1} - \left. \frac{\partial U}{\partial x} \right|_{i,j-1}}{2k} + O(k^2) \quad \text{A-25}$$

$$\text{or } \left. \frac{\partial U}{\partial x} \right|_{i,j+1} = \frac{U_{i+1,j+1} - U_{i-1,j+1}}{2h} + O(h^2) \quad \text{d'après} \quad \text{A-26}$$

$$\text{et } \left. \frac{\partial U}{\partial x} \right|_{i,j-1} = \frac{U_{i+1,j-1} - U_{i-1,j-1}}{2h} + O(h^2) \quad \text{d'après} \quad \text{A-27}$$

donc :

$$\left. \frac{\partial^2 U}{\partial x \partial y} \right|_{i,j} = \frac{\partial}{\partial y} \left[\left. \frac{\partial U}{\partial x} \right|_{i,j} \right] = \frac{1}{4hk} [U_{i+1,j+1} - U_{i-1,j+1} - U_{i+1,j-1} + U_{i-1,j-1}] + O(h^2 + k^2) \quad \text{A-28}$$

A-2-8 Approximation à l'ordre n en h des dérivées:

En prenant un nombre de points avoisinants de plus en plus grand, on peut obtenir un nombre illimité d'autres approximations pour chaque dérivée.

Cependant les formes ci-dessus sont les plus compactes et les plus utilisées usuellement.

A-3- Approximation des dérivées aux nœuds avoisinants une frontière irrégulière:

Si la frontière rencontre le maillage rectangulaire en des points qui ne sont pas des nœuds du maillage (voire la figure A-2), nous pouvons traiter cette irrégularité de deux façons:

- Utiliser les points du maillage les plus proches comme des points de frontière, cet effet perturbe le domaine initial de façon à le rendre coïncider avec les nœuds du maillage.
- Changer le pas des mailles près de cette frontière de façon à avoir des nœuds à cette frontière.

La première approche est très simple à traiter et à programmer, mais elle engendre une erreur considérable. Pour obtenir des résultats précise on déplace les nœuds du maillage jusqu'à ce qu'elles coïncident avec cette frontière (Fig. A-2), on remarque sur cette figure les cinq points ont des distances non uniformes.

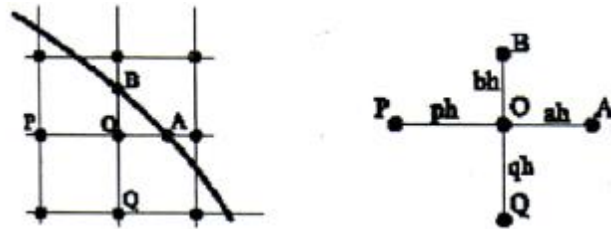


Fig. A-2: Maillage avoisinant une frontière

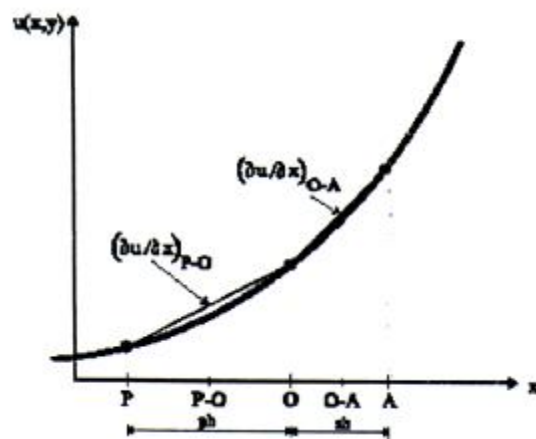


Fig. A-3- Allure possible d'une fonction $u(x, y)$ pour un y fixe dans un domaine irrégulier

Soit, P-O le point à mi-distance entre P et O et O-A celui de O et A, comme on peut le voir sur la figure A-3, la dérivée première à ces deux points peut être approcher en utilisant les différences centrées comme suit:

$$\left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)_{o-A} \approx \frac{U_o - U_p}{Ph} \quad (A-29)$$

$$\left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)_{o-A} \approx \frac{U_A - U_o}{ah} \quad (A-30)$$

La dérivée seconde s'écrit:

$$\left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}\right)_{o-A} = \frac{\partial U}{\partial x} \left(\frac{\partial U}{\partial x}\right) \quad (A-31)$$

La distance entre les points P-O et O-A est $\frac{1}{2}(ph+ah)$, donc on peut établir une approximation de la dérivée partielle du seconde ordre comme suit:

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \approx \frac{\left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)_{o-A} - \left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)_{p-o}}{\frac{1}{2}h(p+a)} = \frac{\frac{U_A - U_o}{ah} - \frac{U_o - U_p}{ph}}{\frac{1}{2}h(p+a)} \quad (A-32).$$

Après arrangement on trouve:

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \approx \frac{2}{h^2} \left(\frac{uP - uO}{p(p+a)} + \frac{uA - uO}{a(p+a)} \right) \quad (A-33)$$

De même façon on trouve:

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \approx \frac{2}{h^2} \left(\frac{uQ - uO}{q(q+b)} + \frac{uB - uO}{b(q+b)} \right) \quad (A-34)$$

L'approximation de la dérivée partielle du premier ordre est donnée par:

$$\frac{\partial u}{\partial x} \approx \frac{2}{h} \left(\frac{uA - uP}{(p+a)} \right) \quad (A-35)$$

$$\frac{\partial u}{\partial y} \approx \frac{2}{h} \left(\frac{uB - uQ}{(q+b)} \right) \quad (A-36)$$

PROBLEME PHYSIQUE AVEC INTERFACE:

Des interfaces ou frontières internes sont présents dans plusieurs applications physique, comme dans les problèmes de transformation de phase et les écoulements multi-phases (fig. B-1-a) Mathématiquement, un problème physique avec interface se traduit par une équation différentielle partielle (E.D.P) à qui ses coefficients et sa solution ont des discontinuités à travers cette interface.

Dans la simulation numérique de ces problèmes comme pour la croissance Bridgman horizontale qui est un problème de changement de phase, le marquage et la représentation de l'interface nécessitent.

- 1- Une représentation de l'interface pour calculer les quantités locales comme la courbure, la normale et la tangente.
- 2- Une reconstitution de l'interface avec chaque déformation et changement topologie.
- 3- Distribution et interpolation pour transmettre les informations entre l'interface et les nœuds du maillage uniforme.
- 4- Construction d'une fonction indicatrice, pour former le champ de chaque propriété physique dans le domaine étudié.

B-1- Représentation de l'interface:

Pour marquer explicitement une interface interne entre deux différents milieux, on utilise un jeu discret de n , points (X_k, Y_k) (point de contrôle) qui forment un bord de dimension un lié aux nœuds du maillage uniforme de dimension deux (Fig. B-1-b).

L'interface est représentée par le vecteur d'équation paramétrique (Fig. B-1-b).

$$\mathbf{R}(u) = g(u)\mathbf{i} + h(u)\mathbf{j} \quad (\text{B-1})$$

Où on peut trouver la normale, la tangente et la courbure de l'interface à tous points de l'interface en utilisant les formules.

$$\mathbf{n} = \frac{-h'\mathbf{i} + g'\mathbf{j}}{\sqrt{g'^2 + h'^2}} \quad (\text{B-2})$$

$$\mathbf{t} = \frac{g'\mathbf{i} + h'\mathbf{j}}{\sqrt{g'^2 + h'^2}} \quad (\text{B-3})$$

$$k = \frac{g'h'' - g''h'}{\sqrt{g'^2 + h'^2}} \quad (\text{B-4})$$

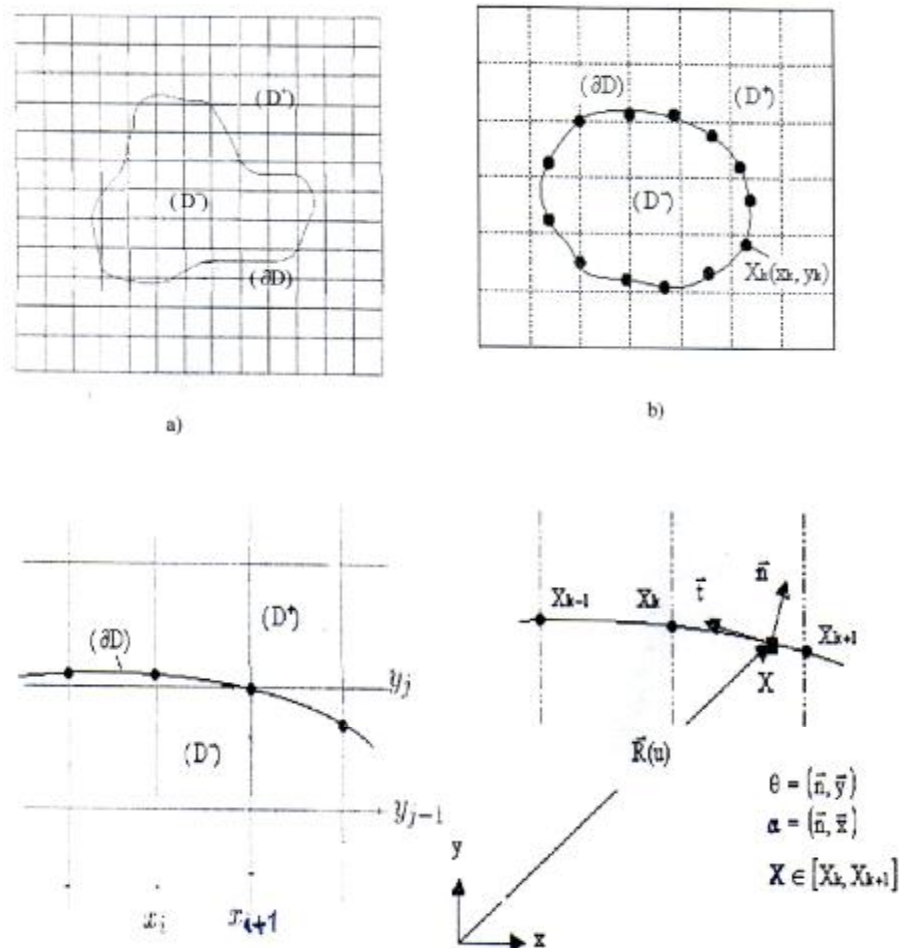


Fig. B-1:a) Interface arbitraire séparant deux milieux différents
 b) Ensemble des points de contrôle d'une interface
 c) Points de contrôle d'une interface dans le cas d'une système de révolution (ex: Bridgman horizontal)
 d) Un point arbitraire $X(x, y)$ de l'interface

Où les primes dénotent les différentiations par rapport au paramètre u , i et j sont les vecteurs unitaires dans la direction x et y respectivement, dans la pratique lorsque les positions des points de contrôle sont connues (pour notre cas les positions des points de contrôle de l'interface sont les intersections des verticales du maillage avec l'interface (fig. B-1-c), les formules des fonctions g et h sont développées par un polynôme de Lagrange d'ordre n à travers $n+1$ points adjacents (interpolation du type Lagrange).

$$g_n(u) = \sum_{i=0}^n L_i(u) X_i, \quad h_n(u) = \sum_{i=0}^n L_i(u) y_i \quad (\text{B-5})$$

$$\text{Où: } L_i(u) = \prod_{j=0, j \neq i}^n \frac{u - u_j}{u_i - u_j} \quad (\text{B-6})$$

Et (X_i, Y_i) est les coordonnées des points de contrôle.

B-2- Reconstitution de l'interface:

La topologie de l'interface change au cours de la simulation car pour les problèmes d'évolution qui dépend du temps l'interface bouge conformément à certains physique, aussi pour les problèmes stationnaires, la position de l'interface change avec chaque itération si nous utilisons une méthode itérative dans notre résolution numérique.

Donc il faut reconstruite notre interface (trouve un nouveau jeux discret de point de contrôle) au four et à mesure que l'interface se déforme.

B-3- Distribution et interpolation:

A chaque pas du temps pour les problèmes d'évolution à chaque itération pour les problèmes stationnaire, il faut que les informations passent entre les points discrets formant l'interface X_k et les nœuds X_{ij} formant le maillage uniforme de notre domaine qui ne se coïncide pas nécessairement.

Pour prendre en compte les grandeurs singulières, comme les sources thermiques (dues à la libération /absorption de la chaleur latente de fusion) ces grandeurs sont approchées par une fonction de distribution en distribuant ces sources qui se trouvent à l'interface sur les points de maillage avoisinant l'interface. De la même manière cette fonction est utilisée pour interpoler les champs de variables (comme le champs de la température) à partir des points du maillage à l'interface [33, 26,46].

En utilisant les sources, S_{ij} , te la température, T , comme exemples, les sources à l'interface S_k peuvent être distribuées aux nœuds du maillage et le champs de température $T_{i,j}$ peut être interpolé à l'interface par les sommations discrétisés.

$$S_{ij} = \sum_k S_k F_{ij}(X_k) \Delta S_k \quad (\text{B-7})$$

$$T_k = \sum_{ij} h^2 T_{ij} F_{ij}(X_k) \quad (\text{B-8})$$

Où S_k est la moyenne des deux distances entre le point K et ces deux voisins proches des deux cotés de K . F_{ij} est une fonction de distributions qui est une approximation de la fonction de Dirac. Pour (X_k, Y_k) on a utilisé la fonction de distribution suggérée par Peskin [46] donnée par:

$$F_i(x_s) = \frac{f(x_s/h - i)f(y_s/h - j)}{h^2} \quad \text{B-9}$$

$$f(r) = \begin{cases} f(r), & |r| < 1 \\ 1/2 - f(2 - |r|), & 1 < |r| < 2 \\ 0, & |r| \geq 2 \end{cases} \quad \text{B-10}$$

$$f(r) = \frac{3 - 2|r| + \sqrt{1 + 4|r| - 4r^2}}{8} \quad \text{B-11}$$

H est le pas du maillage uniforme.

B-4 – Calcul de la fonction indicatrice:

Les discontinuités dans les propriétés physiques comme la discontinuité de la conductivité thermique, la masse volumique etc., entre la phase liquide et solide, peuvent être traitées facilement en construisant une fonction indicatrice $I(X_{ij})$. Elle est construite facilement pour un problème de changement de phase de phase liquide et solide comme suit:

$$I(X_{ij}) = \begin{cases} 1 & \text{si } T_{ij} \leq T_f \\ 0 & \text{si } T_{ij} > T_f \end{cases} \quad \text{B-12}$$

T_f est la température de fusion de matériaux.

Cette fonction indicatrice nous permet de calculer le champ de chaque propriété physique dans le domaine étudié.

- [1] G.K. Teal and E. Buehler, Growth of Silicon single crystals and of single crystal silicon p - n junctions, Phys. Rev. 87 (1952) 190.
- [2] E. Kaldis, Crystal Growth of Electronic Materials, North Holland (1985).Based on the (1983lectures at the 5th ISSCG (Davos, 1983)
- [3] Krishan lal. (Ed), Synthesis, Crystal Growth and Characterization, North Holland (1982). Based on the Proceedings of the International School on Synthesis, Crystal Growth and (Characterization of Materials for Energy Conversion and Storage (New-Delhi,1981)
- [4] N. Kobayashi, Computational simulation of the melt flow during Czochralski growth, Journal of Crystal Growth, 43 (1978) 357-363.
- [5] A. S. Jordan, R. A. Caruso and A .R Von neida, A thermoelastic analysis of dislocation generation in pulled GaAs crystals, Bell System Technical Journal, 59 (1980) 593-637.
- [6] Temperature profile and thermal stress calculation in GaAs crystals growing from the melt, Journal of crystal growth, 61 (1983) 576-590, North- Holland publishing Company.
- [7] J. Volkl and G. Muller, A New Model for the calculation of dislocation formation in semiconductor melts growth by taking into account the dynamics of plastic deformation. 145-136 (1979)Journal of crystal growth 97.
- [8] P. Baranski, V. Klottenkove, I. Potykeritch « électronique des semiconducteurs », EDMIR. MOSCOU (1978).
- [9] A. Chelouche, Etude des propriétés optique des excitons dans les nanocristaux des semiconducteurs ZnSe et ZnO disperses dans la matrice cristalline de KBr.
- [10] K. Zanio, semiconductors and semimetals, R. K. Willardson and C. Beer, Academic Press New York (1978)
- [11] H. Hartmann, R. Mach and B. Sell, Current topics in materials science, Vol .9, E. Kaldis north Holland (1982).
- [12] R. Boudaira, Effet de lhydrogene sur les défauts ponctuels dans CdTe et CdZnTe, Thèse de Magistère, Université de Constantine, (2001) .
- [13] N. ohkubo et al, J.Appl.Phys.Lett53 (12), 16 septembre.
- [14] N. ohkubo et al, J.Appl.Phys.73 (2), 15 January 1993.
- [15] Y.Sayad, Modélisation de défauts due au traitements thermiques dans les semi-conducteurs.
- [16] Max Brousseau, les défauts ponctuels dans les semi-conducteurs, (les éditions de physique)
- [17] Klimkiewicz and J. Auleytner, Colloque C4, supplément au n 9, Tome 44, 313 (1983)
- [18] B. K. Tanner, X Ray diffraction topographie", Pergamon international Library, Vol. 10.

- [19] B. Sieber and M. Dupuy, Colloque C4, supplément au n° 9, Tome 44, 297 (1983).
- [20] M. Inoue, I. Teramoto and S. Takayanagi, J. Applied physics, Vol. 33, n° 8, 2578 (1962).
- [21] J. P. Chamonal, Thèse de 3^{ème} cycle, Université scientifique et Médicale, Grenoble (1982).
- [22] K. Nakagawa, Maeda and S. Takeuchi, Appl. Phys. Lett. 34 (9), 574 (1979).
- [23] M. Klimkiewicz, J. Quleytner, T. Warminski, Crystal. Res. Tech, 16, 2, 175 - 181 (1981).
- [24] Zhilin Li, The immersed interface method, a numerical approach for partial Differential equations with Interfaces, PhD Thesis, University of Washington, (1994).
- [25] D. Oda, K. Matsumoto and I. Tsuboya, J. Crystal. Growth, 71, 273 - 276 (1985).
- [26] T. Ye, R. Mittal, H. S. Udaykumar, and W. Shyy, An accurate Cartesian grid method for viscous incompressible flows with complex immersed boundaries, Journal of Computational Physics 156, 209-240 (1999)
- [27] CE Huang, D. Elwell and R. S. Feigelson, J. of crystal. Growth, 64, 441 - 447 (1983).
- [28] Shahryar Motakef, Thermoelastic analysis of GaAs in LEC growth configuration, I- Effect of liquid encapsulation on thermal stress, journal of crystal Growth, 80 (1987) 37-50.
- [29] P. Wooters, Simulation numérique des échanges thermiques et application à la croissance des cristaux semiconducteurs, Thèse de p.H. D Université cathodique de Louvain Belgique (1985).
- [30] C. STEER, Croissance des monocristaux de Tellure de Cadmium par la méthode thèse de doctorat, (1993)
- [31] W. Zulehner: Czochralski growth of silicon, J. Crystal Growth 65 (1983) 189.
- [32] M. Lallemand, influence des paramètres thermique sur la pureté et la forme des monocristaux de gallium obtenus pour tirage, thèse de doctorat, 1997.
- [33] Dami Juric, computation of phase change, PhD thesis, university of Michigan, (1996).
- [34] R.K Route and Feigelson, Interface studies during vertical Bridgman CdTe crystal growth, 70 (1984) 379 - 385.
- [35] A. Harkati, Simulation numérique des transferts thermique pendant la croissance Czochralski du silicium, Thèse de Magister U. S. TH. B (1998).
- [36] R. S. Feigelson and R. K. Route, J. of Crystal. Growth, 64, 441 - 447 (1983).
- [37] B. A. Boley and J. H. Weiner, Theory of thermal stress, Krieger, Malabar, FL, (1985).
- [38] S. P. Timoshenko and N. Goodier, Theory of elasticity, third edition, McGrawHill, (1982).

- [39] John C. Lambropoulos, Stress near the solid- liquid interface during the growth of Czochralski crystal, *Journal of Crystal Growth*, 80 (1987) 245-256.
- [40] C. Schvezov, I. V. Samarasekera and F. Weinberg, Mathematical modeling of the liquid encapsulated Czochralski growth. II-Stress model, *Journal of Crystal Growth* 84(1987) 219-230.
- [41] V. M Lkeenhovm V.B Ufimtsev, N. I Shmotov, Vu. F. Schelk. Numeric simulation of vertical Bridgman growth of Cd_{1-x}Zn_xTe melts *Journal of crystal growth*, 197 (1999)443-448.
- [42] M. Duseaux, Contribution à l'étude de l'élimination des dislocation dans GaAs pendant la croissance CZ, Thèse de doctorat, Université Paris 6, (1982).
- [43] M.J. Crocher, F. Dupret and Y.Ryckmans, Numerical simulation of crystal growth in a vertical Bridgman furnace, *Journal of Crystal Growth*, 97 (1989) 173 - 187.
- [44] C. Parfeniuk, F. Weinberg, I.V Samarasekera, C. Schvezov and L. Li, Measured critical resolved shear stress and calculated temperature and stress fields during growth of CdZnTe, *Journal of Crystal Growth*, 119 (1992), 261-270.
- [45] M. Kadja, Résolution numérique des équation aux dérives partielle: Méthode des différences finies, 2000/ 2001, premier édition.
- [46] C. S. Peskin, Numerical analysis of blood in heart, *J. Compt. Physique*, 25:220-252.
- [47] K.Guergouri, étude des défauts cristallins et des propriétés physiques associées dans CdTe et ces alliages avec ZnTe MnTe, thèse de doctorat, université paris 6 (1987).
- [48] A. Bouroucha, Simulation numérique de l'état des contraintes thermiques dans la croissance Bridgman verticale du Tellure de Cadmium.

Résumé:

L'objectif de ce présent travail est l'étude numérique du croissance cristalline par la méthode de Bridgman horizontale, pour les semi-conducteur CdTe.

Pour cela on a fait une étude d'influence de gradient thermique dans le four de la température de la zone chaude et la zone froide, la vitesse de tirage et la taille de l'ampoule. Le mesure du creuset et la vitesse de tirage sur le courbure de l' interface solide/liquide.

Cette simulation montre que la convexité de l'interface est reliée avec la distribution de la température dans le creuset de croissance .

Mots clés: simulation numérique, l'interface solide/liquide, différence finies , Bridgman horizontal, CdTe.

ملخص:

الهدف من هذا العمل هو الدراسة العددية للنمو البلورات بطريقة بریدجیمان للأنصاف النواقل

.CdTe

وفي الدراسة قمنا بمحاكاة عددية لنمو هذه البلورات وذلك بحساب عدديا توزيع الحقل الحراري في بوتقة النمو, لذلك قمنا بدراسة تأثير التدرج الحراري في الفرن, درجة حرارة المنطقة الساخنة والباردة, مقياس البوتقة و سرعة النمو على انحناء الحاجز سائلا/صلب.

فبينت هذه الدراسة أن الانحناء سائل/صلب مرتبط بتوزيع الحرارة، وأن لسرعة النمو أيضا تأثير طفيف على الإجهاد الحراري.

الكلمات المفتاحية: محاكاة عددية، بریدجیمان الأفقية، طرق الفروق المنتهية، الحاجز سائل / صلب.CdTe .

Abstract:

The objective of our work is the numerical simulation of the thermal transfers in the Bridgman horizontal growth of the CdTe crystals.

The present study of numerical simulation relates to the exploitation of the effects of the furnace temperature gradient, like those of the hot zone temperature furnace, crucible size and pulling rate of on the convexity of the solid interface / liquid in the horizontal Bridgman growth. The method the finite difference is used in this simulation.

This study shows that the convexity of the solid interface / liquid is connected to the distribution of the Temperature, and the pulling rate a neglect effect on interface curvature.

Key words: CdTe, numerical simulation, interface solid / liquid, differences finished, horizontal Bridgman growth.