

Convection thermique au cours de la croissance cristalline en Bridgman verticale

Khalid Achoubir

Ecole Supérieure de Technologie, Sortie des Arcs, Salé

Abdelkhalek Cheddadi

Ecole Mohammadia d'Ingénieurs, Av. Ibn Sina, Rabat

Auteur correspondant : cheddadi@emi.ac.ma

Abstract

The object of this work is the numerical study of the flow regime in an inverse *vertical Bridgman* crystal growth cavity, the height effect of the liquid zone variable during the phase change on the flow regime is illustrated. This investigation shows that the flow has less stability when the height exceeds the width of the cavity, which is often the case with the starting of the process of the crystal growth. It is also shown that this instability is due to the loss of symmetry related to the geometry of the cavity and could generate oscillatory modes.

Résumé

L'objet de ce travail est l'étude numérique du régime d'écoulement dans une cavité de Bridgman verticale inverse. L'effet de la hauteur de la zone liquide variable au cours du changement de phase sur le mode d'écoulement a été illustré. Cette investigation a montré que l'écoulement présente moins de stabilité lorsque la hauteur dépasse la largeur de la cavité, ce qui est souvent le cas au démarrage du procédé de la croissance cristalline, et que cette instabilité est due à la perte de symétrie liée à la géométrie de la cavité et qu'elle génère éventuellement des modes oscillatoires.

Nomenclature

<i>C</i>	fraction massique	Symboles grecs	
<i>D</i>	coefficient de diffusion massique	α	diffusivité thermique
<i>g</i>	accélération gravitationnelle	β	coefficient d'expansion thermique
<i>Pr</i>	nombre de Prandtl	ν	viscosité cinématique
<i>Ra_T</i>	nombre de Rayleigh thermique	ρ	masse volumique
<i>t</i>	temps adimensionnel	Indices	
<i>T</i>	température adimensionnelle	<i>C</i>	chaud
<i>u</i>	vitesse suivant la direction <i>x</i>	<i>F</i>	froid
<i>v</i>	vitesse suivant la direction <i>y</i>	<i>T</i>	thermique
<i>x,y</i>	coordonnées cartésiennes		

1. INTRODUCTION

L'étude de la convection dans la phase liquide au cours de la solidification ne cesse de susciter l'intérêt de travaux de recherche [1-4]. Les transferts étudiés peuvent être d'origine thermique, voire thermosolutale. Dans une cavité de Bridgman Verticale Inverse (IBV) le moteur de l'écoulement est constitué par les gradients thermiques vertical et horizontal. La cavité rectangulaire a été largement investiguée et des corrélations ont été déduites pour évaluer les transferts thermiques [5]. La

configuration étudiée dans ce travail est inspirée directement du procédé de croissance cristalline de Bridgman-Stockbarger [6], d'où la particularité des conditions aux limites considérées. Au cours de la solidification, l'espace occupé par la phase liquide dans une cavité de Bridgman passe d'un rectangle de hauteur égale à celle de la cavité initiale à une hauteur nulle à la fin de la solidification. Par conséquent, comprendre l'effet de la hauteur occupée par la phase liquide sur la convection sera nécessairement utile à la compréhension du développement de la convection tout au cours de la solidification. On sait par ailleurs que cette convection influence notablement la qualité du produit résultant de la solidification [7].

Dans ce travail, nous nous intéressons à l'étude de l'écoulement et à l'identification numérique de la bifurcation éventuelle vers un régime instationnaire.

2. MODELE ET APPROXIMATIONS NUMERIQUES

Le fluide considéré est supposé Newtonien, incompressible et en écoulement laminaire. Les propriétés thermophysiques sont constantes sauf la densité qui est approchée dans le terme de gravité par l'hypothèse de Boussinesq.

$$\rho = \rho_0 [1 - \beta_T (T' - T'_0)] \quad (1)$$

où T'_0 est la température de référence. Les variables adimensionnelles sont définies par :

$$\begin{aligned} (x, y) &= \left(\frac{x'}{L_{ref}}, \frac{y'}{L_{ref}} \right) ; t = \alpha \frac{t'}{L_{ref}^2} \\ (u, v) &= \left(L_{ref} \frac{u'}{\alpha}, L_{ref} \frac{v'}{\alpha} \right) ; T = \frac{T' - T'_0}{\Delta T} \end{aligned} \quad (2)$$

où $\Delta T = T'_C - T'_F$ et L_{ref} désigne la hauteur de référence. Le mouvement du fluide est gouverné par les équations de conservation qui s'écrivent sous forme adimensionnelle en formulation (Ω - Ψ) Vorticité - Fonction de courant [8]:

$$\frac{\partial \Omega}{\partial t} + u \frac{\partial \Omega}{\partial x} + v \frac{\partial \Omega}{\partial y} = \text{Pr} \nabla^2 \Omega - Ra_T \text{Pr} \frac{\partial T}{\partial x} \quad (3)$$

$$\frac{\partial T}{\partial t} + u \frac{\partial T}{\partial x} + v \frac{\partial T}{\partial y} = \nabla^2 T \quad (4)$$

$$\Omega = -\frac{\partial w}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial z} \quad (5)$$

$$u = -\frac{\partial \Psi}{\partial z} ; w = \frac{\partial \Psi}{\partial x} \quad (6)$$

$$\text{Avec : } Ra_T = \frac{g \beta_T \Delta T L_{ref}^3}{\nu \alpha} \quad \text{et } \text{Pr} = \frac{\nu}{\alpha} .$$

L'adimensionnalisation adoptée est de type thermique, la vitesse de référence est prise égale à $\frac{\alpha}{L_{ref}}$.

3. CONFIGURATION

La configuration étudiée est choisie de façon à ce qu'elle soit proche du cas réel du procédé de croissance cristalline de Bridgman inverse.

Les parois horizontales inférieure et supérieure de la cavité étudiée (Fig.1) sont portées respectivement aux températures chaude et froide. Les parois verticales sont portées à la même température que celle du bas sauf une zone considérée adiabatique du côté de la paroi froide. Cette zone de hauteur égale à $L_{ref}/4$ est conçue pour relaxer le déplacement de l'interface solide/liquide dans les configurations de croissance cristalline à tirage vertical. L'étude suivante portera sur un fluide de nombre de Prandtl $Pr=0.01$, la valeur de Ra_T est prise égale à 10^4 .

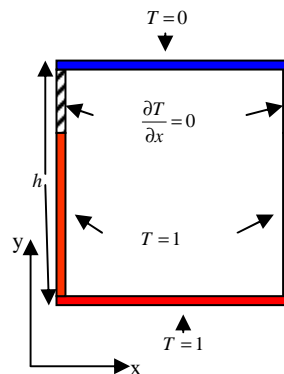


Figure 1 : Configuration géométrique

La hauteur de référence est prise égale à la largeur de la cavité. La hauteur adimensionnelle de la cavité est : $h = \frac{H}{L_{ref}}$, où H désigne la hauteur dimensionnelle. Les conditions aux limites sont données par:

$$\begin{aligned}
 T = 1 \text{ pour : } y = 0 \quad ; \quad x = 0, 1 \text{ et } y \in [0, (h - 0.25)] & \quad T = 0 \text{ pour : } y = h \\
 \frac{\partial T}{\partial x} = 0 \text{ pour : } x = 0, 1 \text{ et } y \in [(h - 0.25), h] & \quad (7)
 \end{aligned}$$

Lorsque h est inférieur à 0.25, les parois verticales sont totalement adiabatiques (Rayleigh-Bénard). La discrétisation des équations est effectuée à l'aide d'une méthode de différences finies centrées d'une précision de deuxième ordre en espace. Le schéma de la méthode ADI est adopté pour la résolution du système obtenu. La convergence des calculs est déclarée pour une valeur maximale de variation relative de toutes les variables inférieure à 10^{-5} .

Le code a été validé par comparaison avec les résultats classiques de G. de Vahl-Davis [9]. Pour une cavité carrée bidimensionnelle, aux parois verticales différentiellement chauffées et aux parois horizontales adiabatiques. Les valeurs comparées sont celles du nombre de Nusselt (Nug : valeur globale ; $Nupc$: paroi chaude ; $Numilieu$: verticale médiane ; $Numax$: maximale). Les comparaisons sont relatives à des simulations concernant les valeurs suivantes : $Pr=0.7$ et $Ra_T=10^4$.

	De Vahl Davis	Code présent
Nug	2,234	2,207
Nupc	2,242	2,253
Numilieu	2,235	2,183
Numax	3,545	3,590

Tableau 1: Comparaison des résultats avec [9]

Ce tableau (Tab. 1) montre une très bonne concordance de nos résultats avec ceux de De Vahl Davis [9].

4. RESULTATS ET DISCUSSION

L'espace occupé par la phase liquide dans une cavité de Bridgman passe d'une hauteur qui est celle de l'ensemble de la cavité au démarrage de la solidification à une hauteur nulle à la fin de la solidification. L'écoulement induit par la convection thermique dépend de cette hauteur. L'effet de cette hauteur sur l'écoulement est illustré par la figure suivante (Fig.2):

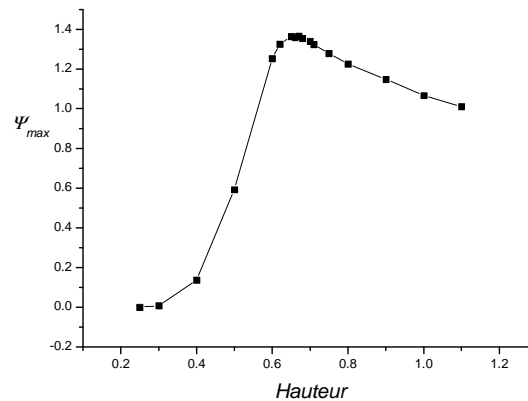


Figure 2: Intensité maximale de l'écoulement en fonction de la hauteur de la cavité

Lorsque h est inférieur à 0,25 (parois verticales totalement adiabatiques), le transfert de chaleur ne se fait que par conduction. Au-delà de 0,25, la configuration présente une partie adiabatique près de la paroi froide en haut, et le reste des parois verticales est maintenu à une température égale à celle de la paroi chaude en bas. Lorsque h présente une valeur supérieure à 0,25 la convection est amorcée par les parties isothermes des parois verticales. La structure de l'écoulement est symétrique et comporte deux cellules contra-rotatives. Plus la partie isotherme des parois verticales est grande, plus l'écoulement devient intense jusqu'à ce qu'il atteigne une intensité maximale de 1,36 à $h = 0,67$. Mais à partir de $h = 0,67$ l'augmentation de cette hauteur réduit l'intensité de l'écoulement. Un autre phénomène pourrait alors être responsable de cette diminution.

L'analyse de l'intensité de l'écoulement montre qu'au-delà de cette hauteur chacune des deux cellules occupe la totalité de la moitié de la cavité qu'elle domine, ainsi la zone entre les deux cellules qui ne présente pas de forte convection pour les faibles valeurs de h présente cette fois une forte intensité d'écoulement au voisinage de la ligne ($x = 0,5$). Les deux cellules sont alors latéralement aplaties et leurs formes passent de cellules quasiment circulaires à celles de cellules de forme ovale. Cette

déformation résulte de l'interaction entre les deux cellules, suite à la variation du rapport de forme de la cavité (Fig.3).

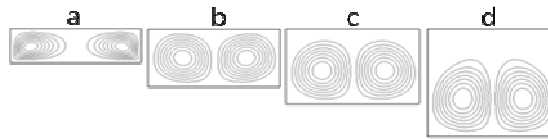


Figure 3: Ψ pour $h = 0.3$ (a), $h = 0.5$ (b), $h = 0.67$ (c) , $h = 1.0$ (d)

Ces interactions vont finalement donner lieu à une bifurcation vers un régime oscillatoire lorsque la valeur de h dépasse 1.1. En effet lorsque la hauteur est importante, les deux cellules prennent latéralement une forme de plus en plus plate. Mais cette forme ne présente pas un état très stable pour l'écoulement, alors l'une des cellules va s'étaler au détriment de l'autre sur toute la largeur la cavité. Le suivi temporel pour $h = 2$ (Fig.4) montre que les oscillations apparaissent aussi bien pour la valeur de l'intensité maximale positive correspondant à la plus grande cellule tournant dans le sens des aiguilles d'une montre, que sur l'intensité minimale de signe opposé correspondant à la cellule tournant dans le sens opposé. Ces intensités sont comprises en valeur absolue entre 2.23 et 0.58.

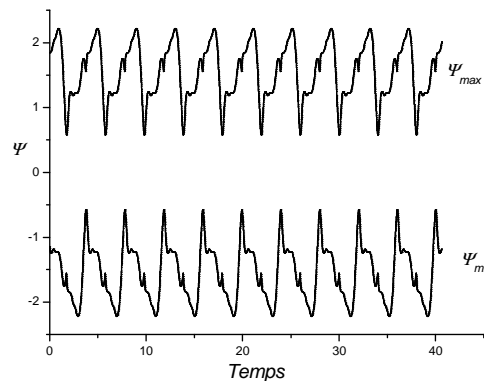


Figure 4: Ψ_{max} et Ψ_{min} pour $h = 2.0$

La représentation de l'écoulement au cours d'une période (Fig.5) montre que ces oscillations ne présentent pas seulement une compétition entre deux cellules bien déterminées. Mais plutôt une compétition entre une série de trois cellules superposées. La cellule (C1) est au-dessus d'une autre cellule tournant dans le sens contraire (C2). Lorsque la cellule (C2) gagne de l'espace en remontant en haut, une autre cellule (C3) apparaît en dessous, tournant dans le même sens que (C1). En s'approchant de la paroi du haut, la cellule (C1) se comprime et glisse progressivement vers le bas le long de l'une des parois verticales, afin de fusionner avec la cellule (C3). Le même scénario est repris avec (C2) prenant le rôle de (C1) et la cellule (C1-3) résultant de la fusion de (C1) et (C3) prenant le rôle de (C2), alors qu'une autre cellule (C4) apparue en bas prend le rôle de la cellule (C3).

Le point où l'intensité d'écoulement est maximale dans la figure (Fig.5) correspond en fait à l'instant où la cellule (C1) en haut présente ce maximum, avant qu'elle ne commence à s'amenuiser simultanément avec l'augmentation de l'intensité de (C2). Le pic en bas de la courbe correspond au point où l'intensité d'écoulement de la cellule (C1) en haut présente la même valeur que la nouvelle cellule remontant du bas (C3). A partir de ce point la courbe suit la fonction de courant de la cellule (C3) ensuite celle de la fusion de (C1-3). La cellule (C1-3) remonte, occupe plus d'espace et son

intensité augmente. Une perturbation de cette croissance est remarquée (maximum et minimum locaux). Ces pics représentent le démarrage de la remontée asymétrique de la cellule (C1-3).

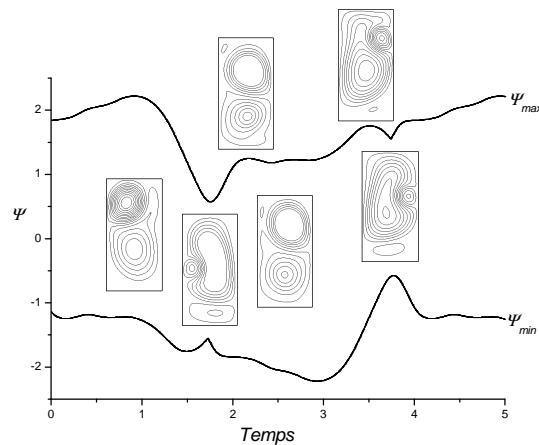


Figure 5 : Visualisation de l'écoulement sur une période

L'écoulement est composé de deux à trois cellules en interaction. Il est à remarquer qu'une augmentation de la hauteur jusqu'à 10 pour les paramètres de contrôle considérés, ne favorise pas l'apparition d'autres cellules, mais donne lieu surtout à une zone faiblement convective en bas comme le montre la figure (Fig.6).

5. CONCLUSION

Dans ce travail nous avons étudié numériquement le régime d'écoulement dans une cavité de Bridgman verticale inverse pour différentes hauteurs. L'investigation numérique montre que l'écoulement présente moins de stabilité lorsque la hauteur dépasse la largeur de la cavité correspondant au démarrage de la solidification. Cette instabilité est traduite sous forme d'oscillations au niveau de l'intensité de l'écoulement. Le suivi temporel de ces oscillations nous a permis de les relier à l'interaction entre les différentes cellules de l'écoulement, et démontrer qu'elles sont surtout dues à la perte de symétrie liée à la géométrie de la cavité.

6. REFERENCES

1. Kim M. G., Kim G. O. & Park B. K.: Numerical Study on the Vertical Bridgman Crystal Growth with Thermosolutal Convection, *KSME International Journal*, 15(8) (2001) 1188-1195
2. Chang J. & Brown R. A., Radial segregation induced by natural convection and melt-solid interface shape in vertical Bridgman growth, *J. Crystal Growth*, 63 (1983) 343-364
3. Guérin R. Z., Billia B. & Haldenwang P., Onset of solutal convection during directional solidification of a binary alloy in a cylinder, *Phys. Fluids A*, 3(8) (1991) 1873-1879
4. Parakash C. & Voller V., On the numerical solution of continuum mixture model equation describing binary solid-liquid phase change, *Numerical Heat Transfer, Part. B* (15) (1989) 171-189
5. Ostrach S.: Natural convection in enclosures, *Adv. Heat Transfer*, Vol.8, pp. 161-227, 1972.

6. Robert B. A.: Theory of transport processes in single crystal growth from the melt, *AIChE Journal*, Volume 34, Issue 6 , p. 881 – 911, 1988.
7. Muller G.: *Convection and Inhomogeneities in Crystal Growth from the Melt. Crystal: Growth, Properties, and Applications*. Springer, Berlin, 1988.
8. Roache P. J.: *Computational Fluid Dynamics*, Albuquerque, 1976.
9. De Vahl Davis G.: Natural convection of air in square cavity, a benchmark numerical solution, *Int. J. Num. Methods in Fluids*, vol 3, p. 249-264, 1983.