

## Effet de la rotation sur les instabilités thermocapillaires dans un pont liquide chauffé latéralement

L. Kahouadji<sup>a</sup>, L. Martin Witkowski<sup>a</sup> & J.S. Walker<sup>b</sup>

CNRS<sup>a</sup> – Université Pierre et Marie Curie<sup>a</sup>  
LIMSIS-CNRS<sup>a</sup>  
BP 133 91403 Orsay cedex France<sup>a</sup>  
witko@limsi.fr

University of Illinois at Urbana-Champaign<sup>b</sup>  
Dept. of Mechanical & Science Eng.<sup>b</sup>  
1206 W. Green Street, Urbana IL, 61801-2906 USA<sup>b</sup>

### Résumé :

*Dans les procédés de croissance cristalline, la rotation est souvent utilisée comme moyen pour éliminer les défauts d'axisymétrie du chauffage. La rotation du système de chauffage étant en général difficile à mettre en œuvre, une solution consiste à faire tourner à la fois le cristal et le polycristal soit dans le même sens soit dans des directions opposées. Les vitesses optimales de rotation du cristal et du polycristal sont souvent déterminées empiriquement. A l'aide d'une étude numérique de stabilité linéaire tridimensionnelle puis d'un bilan d'énergie, nous avons cherché à comprendre les effets de rotation sur l'instabilité thermocapillaire en zone flottante. Nous présentons des résultats où nous montrons que la rotation peut avoir des effets surprenants de stabilisation ou de déstabilisation et proposons des pistes pour l'interprétation.*

### Abstract :

*Rotation is involved in many industrial processes for crystal growth. The main reason is that heating is usually not uniform in the azimuthal direction and rotation aims to minimize the impact of this deleterious asymmetry. As rotation of the heater is technically difficult to achieve, the most common situation is to rotate the feed rod, the crystal or both. The optimum ratio of angular velocities of the feed rod and crystal is usually found empirically. In order to have a better understanding of the effect of rotation rate and rotation ratio on the critical Marangoni number for a laterally heated liquid bridge, we have studied the stability of tridimensional perturbation by a linear analysis and performed an a-posteriori energy analysis in order to give some possible interpretations on the surprising effect of destabilisation by rotation.*

### Mots-clefs :

**Convection Marangoni, Instabilité, Croissance cristalline**

## 1 Introduction

La production de cristaux de haute qualité est un enjeu important pour l'industrie de l'opto-electronique et de l'électronique. Diverses techniques d'élaboration existent et parmi celles-ci, le procédé Float-Zone Needle Eye (zone flottante chas d'aiguille) est celui qui permet d'obtenir les cristaux les plus purs pour un diamètre raisonnable (environ 15 cm dans le cas du silicium légèrement dopé). Le principe est le suivant. Un barreau polycristallin est déplacé dans une zone de chauffage produite par un inducteur haute fréquence (voir figure 1 a). Le silicium fondu se solidifie sur un cristal ayant l'arrangement adéquat. Ce procédé de "tirage" permet d'obtenir le barreau cristallin souhaité. Deux dangers principaux peuvent cependant rendre inutilisable le barreau obtenu. En cas d'échec, il est nécessaire de refondre le barreau. Le premier danger est la présence de dislocation, c'est-à-dire un défaut d'arrangement cristallin. Contrairement aux techniques utilisant un creuset qui exerce une contrainte lors de la solidification, la zone flottante permet assez facilement d'obtenir des cristaux sans dislocation. L'autre danger, appelé

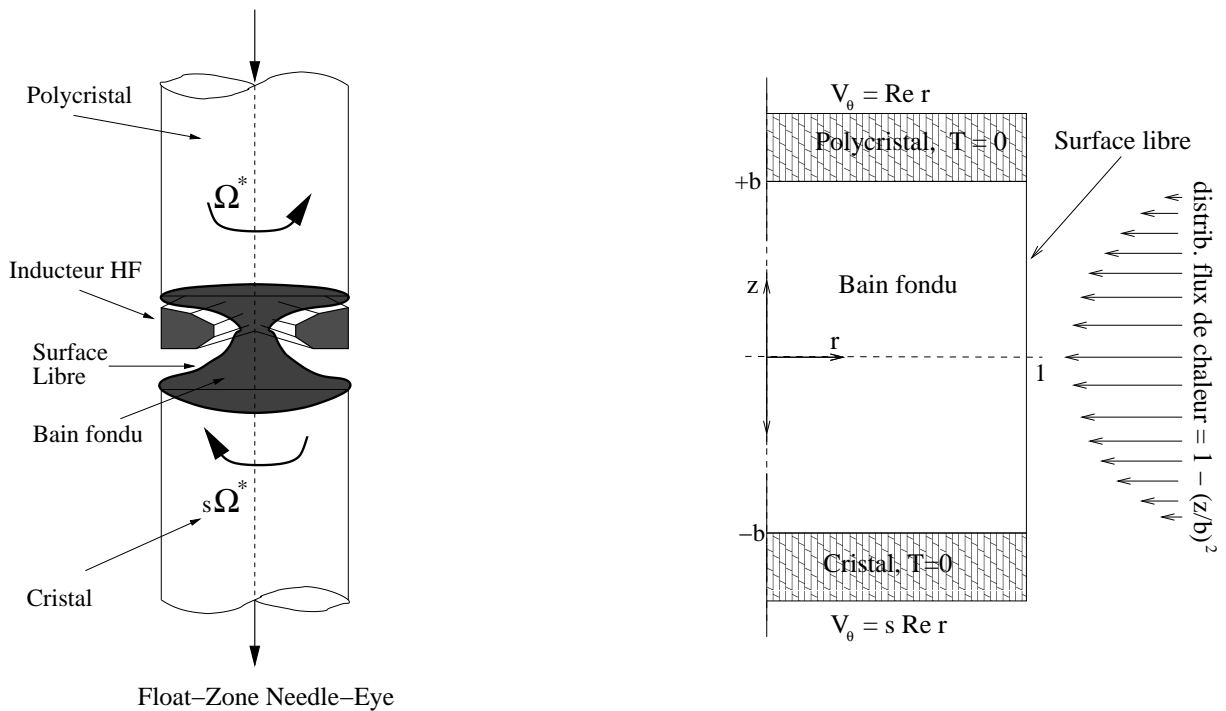


FIG. 1 – (a) Schéma du procédé industriel, (b) modèle académique utilisé.

ségrégation, correspond à une mauvaise distribution du dopant à petite échelle (striations) ou bien à grande échelle (macro ségrégations). Le bon contrôle de l'écoulement, notamment au front de solidification est déterminant dans la qualité du cristal obtenu. Les fluctuations de vitesse (et de température) doivent être soit éliminées soit parfaitement maîtrisées.

Un modèle académique de la zone flottante est présenté sur la figure 1 b. La surface libre est considérée comme un cylindre de section circulaire, la distribution du flux de chaleur est modélisée à l'aide d'un profil parabolique. Bien que d'autres sources de mouvement existent dans le procédé, nous considérons que la source du mouvement dans le fluide est uniquement due à la convection Marangoni (ou convection thermocapillaire) c'est-à-dire aux variations de tension superficielle à la surface libre.

Les instabilités thermocapillaires dans le contexte de la zone flottante ont été souvent étudiées. Une bonne synthèse de la littérature peut être trouvée dans Kuhlmann (1999). Ces écoulements sont maintenant bien répertoriés. Assez curieusement, peu d'études s'intéressent à l'influence de la rotation du cristal et du polycristal alors que la rotation est présente dans la majeure partie des procédés industriels de fabrication de cristaux.

## 2 Formulation du problème et méthode de résolution

### 2.1 Équations et adimensionnalisation

La géométrie du modèle représenté sur la figure 1 b conduit assez naturellement à exprimer les équations dans un système de coordonnées cylindriques  $(r^*, \theta, z^*)$ . La surface libre est située à un rayon  $R^*$  constant et la distance entre le cristal et le polycristal est fixée à  $2bR^*$  ce qui définit le rapport d'aspect  $b$ . Nous étudions le fluide considéré comme newtonien avec des propriétés physiques constantes à l'exception de la tension superficielle  $\gamma^*$  qui sera approchée par une fonction linéaire de la température  $T^*$  soit  $\gamma^*(T^*) = \gamma^*(T_S^*)(1 + \frac{d\gamma^*}{dT^*}(T^* - T_S^*))$  où  $T_S^*$  désigne la température de solidification. Le polycristal et le cristal sont supposés plans au front de fusion

et perpendiculaires à l'axe de révolution. Ils tournent respectivement à la vitesse angulaire  $\Omega^*$  et  $s\Omega^*$  ce qui définit le rapport des vitesses angulaires  $s$ . Nous utilisons une adimensionnalisation basée sur la viscosité cinématique  $\nu^*$  pour la vitesse caractéristique soit  $V^* = \nu^*/R^*$ . Les longueurs, le temps et la pression sont adimensionnés par  $R^*$ ,  $R^*/V^*$  et  $\rho^*V^{*2}$  respectivement où  $\rho^*$  est la masse volumique du fluide. L'écart de la température  $T^*$  dans le bain fondu à la température de solidification  $T_S^*$  a été adimensionné de la manière suivante  $T = (T^* - T_S^*)/\Delta T^*$  où l'écart de température caractéristique  $\Delta T^* = q^*R^*/k^*$  est basé sur le maximum  $q^*$  du flux de chaleur parabolique  $k^*\frac{\partial T^*}{\partial r^*} = q^*\left(1 - \left(\frac{z^*}{bR^*}\right)^2\right)$  imposé le long de la surface libre. La conductivité thermique est désignée par  $k^*$ . Les quantités adimensionnées apparaissent sans étoile. Les équations de continuité, de Navier–Stokes et d'énergie s'écrivent :

$$\text{div}(\mathbf{v}) = 0, \quad \partial_t \mathbf{v} + (\mathbf{v} \cdot \nabla) \mathbf{v} = -\nabla p + \nabla^2 \mathbf{v}, \quad \partial_t T + (\mathbf{v} \cdot \nabla) T = \frac{1}{\text{Pr}} \nabla^2 T. \quad (1)$$

Les conditions aux limites sont

$$V_r = 0, \quad \frac{\partial}{\partial r} \left( \frac{V_\theta}{r} \right) = -\frac{\text{Ma}}{\text{Pr}} f_z \frac{\partial T}{\partial \theta}, \quad \frac{\partial V_z}{\partial r} = -\frac{\text{Ma}}{\text{Pr}} f_z \frac{\partial T}{\partial z}, \quad \frac{\partial T}{\partial r} = 1 - \left( \frac{z}{b} \right)^2 \quad \text{à} \quad r = 1, \quad (2)$$

$$V_r = 0, \quad V_\theta = \text{Re } r, \quad V_z = 0, \quad T = 0 \quad \text{à} \quad z = b, \quad (3)$$

$$\text{et } V_r = 0, \quad V_\theta = s \text{Re } r, \quad V_z = 0, \quad T = 0 \quad \text{à} \quad z = -b. \quad (4)$$

Les nombres adimensionnels qui apparaissent dans ces équations et dans les conditions aux limites sont le nombre de Marangoni, le nombre de Prandtl et le nombre de Reynolds définis respectivement par :

$$\text{Ma} = \frac{\left| \frac{d\gamma^*}{dT^*} \right| q^* R^{*2}}{\rho^* \nu^* \kappa^* k^*}, \quad \text{Pr} = \frac{\nu^*}{\kappa^*}, \quad \text{et} \quad \text{Re} = \frac{\Omega^* R^{*2}}{\nu^*} \quad (5)$$

où  $\kappa^*$  est la diffusivité thermique. La valeur absolue est utilisée pour la dérivée de tension superficielle en fonction de la température car pour la plupart des matériaux elle est négative. La singularité en  $r = 1$  et  $z = \pm b$  est traitée en utilisant une fonction de régularisation  $f_z = 1 - \exp(-\alpha(1 - (z/b)^2)^2)$  où  $\alpha$  est un paramètre arbitraire pris égal à 200. Cette procédure est discutée dans les travaux de Chénier *et al.* (1999).

## 2.2 Ecoulement de base

L'écoulement de base, avant la première bifurcation, est stationnaire et axisymétrique ce qui permet d'introduire deux fonctions scalaires, la vorticité  $\omega^b$  et la fonction de courant  $\psi^b$  pour exprimer les composantes méridiennes  $V_r^b$  et  $V_z^b$  du champ de vitesse à l'aide des relations

$$\omega^b = \frac{\partial V_r^b}{\partial z} - \frac{\partial V_z^b}{\partial r}, \quad V_r^b = \frac{1}{r} \frac{\partial \psi^b}{\partial z} \quad \text{et} \quad V_z^b = -\frac{1}{r} \frac{\partial \psi^b}{\partial r}. \quad (6)$$

Les équations, la discrétisation et la méthode de résolution sont très similaires à celles présentées dans Martin Witkowski et Walker (2001) avec comme différences notables, l'absence de symétrie par rapport au plan  $z = 0$ , une force de volume nulle et des conditions aux limites non-nulles pour la vitesse azimutale en  $z = \pm b$ .

### 2.3 Analyse de stabilité linéaire et bilan d'énergie

Le champ de vitesse et de température est décomposé de la manière suivante :

$$\mathbf{V}(r, \theta, z, t) = \mathbf{V}^b(r, z) + \epsilon \text{Real}[(v_r(r, z), iv_\theta(r, z), v_z(r, z)) \exp(\lambda t + im\theta)] \quad (7)$$

où  $\epsilon$  est un petit paramètre,  $m$  est le nombre d'onde azimutal et  $\lambda = \lambda_r + i\lambda_i$  définit le taux de croissance  $\lambda_r$  et la fréquence  $\lambda_i$ . Les variables  $v_r, v_\theta, v_z$  sont complexes. Une formulation similaire est utilisée pour la perturbation de pression  $p$  et de température  $\Theta$ . En introduisant la décomposition (7) dans (1) à (4) les équations à l'ordre  $\epsilon$  s'écrivent :

$$\frac{1}{r} \frac{\partial(rv_r)}{\partial r} - \frac{mv_\theta}{r} + \frac{\partial v_z}{\partial z} = 0, \quad (8)$$

$$\begin{aligned} & \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} (rv_r V_r) - \frac{mv_\theta V_r}{r} + i \frac{mv_r V_\theta}{r} - i \frac{2v_\theta V_\theta}{r} + \frac{\partial}{\partial z} (v_r V_z) + \frac{\partial}{\partial z} (v_z V_r) \\ & + \frac{\partial p}{\partial r} - \left( \frac{\partial^2 v_r}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial v_r}{\partial r} - \frac{(1+m^2)v_r}{r^2} + \frac{2mv_\theta}{r^2} + \frac{\partial^2 v_r}{\partial z^2} \right) = -\lambda v_r, \end{aligned} \quad (9)$$

$$\begin{aligned} & \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (rv_\theta V_r) + \frac{v_\theta V_r}{r} + i \frac{2mv_\theta V_\theta}{r} - \frac{i}{r} \frac{\partial}{\partial r} (rv_r V_\theta) - i \frac{v_r V_\theta}{r} - i \frac{\partial}{\partial z} (v_z V_\theta) + \frac{\partial}{\partial z} (v_\theta V_z) \\ & + \frac{mp}{r} - \left( \frac{\partial^2 v_\theta}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial v_\theta}{\partial r} - \frac{(1+m^2)v_\theta}{r^2} + \frac{2mv_r}{r^2} + \frac{\partial^2 v_\theta}{\partial z^2} \right) = -\lambda v_\theta, \end{aligned} \quad (10)$$

$$\begin{aligned} & \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (rv_r V_z) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (rV_r v_z) + i \frac{mv_z V_\theta}{r} - \frac{mv_\theta V_z}{r} + 2 \frac{\partial}{\partial z} (v_z V_z) + \frac{\partial p}{\partial z} \\ & - \left( \frac{\partial^2 v_z}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial v_z}{\partial r} - \frac{m^2 v_z}{r^2} + \frac{\partial^2 v_z}{\partial z^2} \right) = -\lambda v_z, \end{aligned} \quad (11)$$

$$\begin{aligned} & V_r \frac{\partial \Theta}{\partial r} + v_r \frac{\partial T}{\partial r} + i \frac{m\Theta V_\theta}{r} + V_z \frac{\partial \Theta}{\partial z} + v_z \frac{\partial T}{\partial z} \\ & - \frac{1}{\text{Pr}} \left( \frac{\partial^2 \Theta}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial \Theta}{\partial r} - \frac{m^2 \Theta}{r^2} + \frac{\partial^2 \Theta}{\partial z^2} \right) = -\lambda \Theta. \end{aligned} \quad (12)$$

L'exposant  $b$  pour le champ de vitesse  $\mathbf{V}^b$  et la température  $T^b$  de base a été supprimé pour alléger les notations. A l'ordre  $\epsilon$ , les conditions aux limites s'écrivent

$$\text{en } z = \pm b, \quad v_r = 0, \quad v_\theta = 0, \quad v_z = 0, \quad \Theta = 0 \quad (13)$$

$$\text{et en } r = 1, \quad v_r = 0, \quad \frac{\partial}{\partial r} \left( \frac{v_\theta}{r} \right) = -\frac{\text{Ma}}{\text{Pr}} f_z m \Theta, \quad \frac{\partial v_z}{\partial r} = -\frac{\text{Ma}}{\text{Pr}} f_z \frac{\partial \Theta}{\partial z}, \quad \frac{\partial \Theta}{\partial r} = 0. \quad (14)$$

Les équations (8) à (12) et les conditions aux limites associées conduisent à un problème aux valeurs propres généralisé. La recherche des valeurs propres dominantes, i.e. celles de plus grandes parties réelles, s'appuie sur la méthode d'Arnoldi. La recherche du Marangoni critique  $\text{Ma}_c$ , tous les autres paramètres étant fixés, est une recherche de zéro sur  $\lambda_r$  la partie réelle de la valeur propre dominante.

Afin d'analyser les mécanismes d'instabilité, il est possible de distinguer différentes contributions (source ou puits) pour la perturbation à l'aide d'une étude a-posteriori basée sur l'évolution temporelle de l'énergie cinétique de la perturbation. Cette équation d'évolution s'obtient à

l'aide du produit scalaire du membre de gauche des équations (et de leur complexes conjugués) (9) à (11) avec le vecteur  $(v_r, v_\theta, v_z)$  et son complexe conjugué. L'utilisation des variables complexes dans la décomposition (7) permet assez simplement d'exprimer la puissance moyenne intégrée dans le volume de fluide. Cette analyse est proche de celle présentée par Wanschura *et al.* (1995).

### 3 Résultats et discussions

Nous avons fixé le nombre de Prandtl à 0.02 et le rapport d'aspect  $b$  à 1 qui correspondent aux valeurs typiques pour le silicium fondu et à la configuration de zone flottante. Les valeurs critiques du nombre de Marangoni sont déterminées en fonction du nombre de Reynolds pour différentes valeurs de  $s$  comprises entre  $-1$  et  $1$ . Nous limiterons ici notre discussion à trois cas l'isrotation  $s = 1$ , le cas rotor-stator  $s = 0$  et l'exacte contrarotation  $s = -1$ .

L'écoulement de base pour les cas  $Re = 0$  ou  $Ma = 0$  peuvent se décrire assez simplement. Sans rotation, la variation de tension superficielle avec la température entraîne le fluide du point chaud en  $z = 0$  à la surface libre vers les fronts froids. Cela engendre deux cellules de recirculation l'une tournant dans le sens trigonométrique pour  $z > 0$  et inversement pour  $z < 0$ . En l'absence de convection Marangoni ( $Ma = 0$ ), l'écoulement de base se décompose en un écoulement azimutal dû à la rotation des disques et, sauf pour l'isrotation, d'une ou plusieurs recirculations dans le plan méridien conséquences de la variation axiale de la vitesse azimutale. Dans le cas de l'exacte contrarotation, le sens des recirculations dans le plan méridien est opposé à la convection Marangoni *i.e.* le fluide est dirigé de l'axe vers la surface libre le long des disques et vers l'axe dans le plan de symétrie. Le cas rotor-stator brise la symétrie en  $z$ , l'écoulement méridien n'est alors constitué que d'une seule cellule allant d'un disque à l'autre tournant dans le sens trigonométrique inverse.

En cherchant à prévoir pour les deux cas les plus simples ( $s = -1$  et  $s = 1$ ) l'effet de la rotation sur la stabilité de l'écoulement Marangoni, il est aisé de prédire la mauvaise réponse : "la rotation stabilise" en se basant sur deux arguments a-priori séduisants mais qui s'avèrent faux. Le premier argument faux s'appliquerait pour  $s = -1$  : les recirculations dues à la convection Marangoni seront freinées par celles engendrées par la rotation des disques. Le deuxième argument, pour  $s = 1$ , consiste à évoquer le théorème de Taylor-Proudman qui nous dit que la rotation bidimensionalise l'écoulement ce qui se traduit par des vitesses indépendantes de  $z$  et de fait forcerait une diminution de l'intensité de la recirculation dans le plan méridien.

Les résultats sur la figure 2 révèlent que la valeur du nombre de  $Ma_c$  n'est pas une fonction croissante de  $Re$  pour des taux de rotation faible. En effet, la valeur de  $Ma_c$  est plus petite que celle à  $Re = 0$  jusqu'à  $Re \sim 65$  pour l'isrotation ou l'exacte contrarotation et  $Re \sim 220$  pour le cas rotor-stator. L'erreur du premier argument se comprend en observant à  $s = -1$ , l'évolution de l'écoulement de base pour une valeur  $Ma$  fixée (proche de  $Ma_c = 31.0$  à  $Re = 0$ ) en fonction de  $Re$ . Les deux recirculations ne s'additionnent pas simplement car la convection Marangoni, dominante, redistribue le moment angulaire  $rV_\theta$  et empêche la formation de recirculations en sens opposés. L'erreur du second argument est plus facile à comprendre. Le théorème de Taylor-Proudman ne s'applique pas, mais surtout, ne se prolonge pas dans la région de faible rotation. En revanche, il s'applique parfaitement et explique la stabilisation aux forts taux de rotation. Cette stabilisation s'observe pour tout  $s$ . Le cas de l'exacte contrarotation a cependant la particularité d'avoir des branches d'instabilité purement hydrodynamique naissant à  $Ma = 0$ ,  $Re_c \sim 76$  et  $Re_c \sim 91$  pour  $m = 2$  et  $m = 3$  respectivement. Ces branches sont très spécifiques et sensibles à la symétrie en  $z$  de l'exacte contrarotation. En effet, la valeur du  $Re_c$  devient très élevée dès que l'on s'éloigne de  $s = -1$  (pour  $s = -0.93$  et  $m = 2$ , on trouve

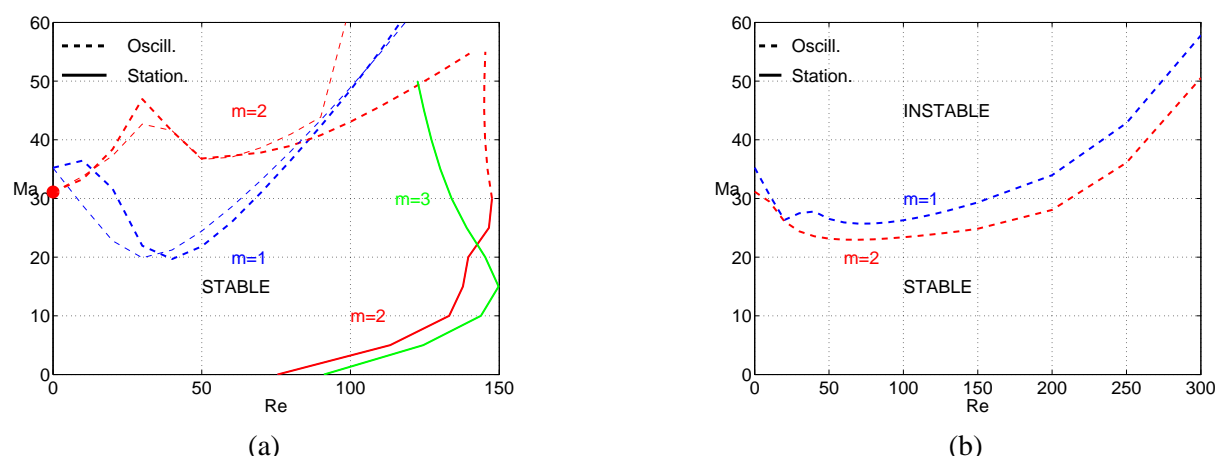


FIG. 2 – Courbes neutres ( $\lambda_r = 0$ ) dans le plan  $(Ma, Re)$  pour  $Pr = 0.02$ ,  $b = 1$ . Les traits pleins désignent une bifurcation stationnaire ( $\lambda_i = 0$ ) et les traits discontinus les bifurcations de Hopf ( $\lambda_i \neq 0$ ): (a) Contrarotation exacte  $s = -1$  traits épais et Isorotation  $s = 1$  traits fins (b) Rotor–stator  $s = 0$

$Re_c > 250$ ).

Il reste à expliquer la déstabilisation à faible taux de rotation. Notons tout d’abord que les courbes neutres pour l’isorotation et l’exacte contrarotation sont proches. Cela permet d’écarter une explication de la déstabilisation due à un cisaillement global créé par la rotation différentielle des disques. Si tel avait été le cas, nous aurions eu aucune déstabilisation à  $s = 1$  et une déstabilisation d’autant plus efficace que  $s \rightarrow -1$ . L’analyse énergétique sera d’un certain secours pour nous aiguiller. Nous pouvons mesurer sur chaque branche la contribution de chaque terme. Par exemple à  $Re = 0$  et pour  $m = 1$ , la source principale de l’instabilité vient du terme  $2|v_z|^2 \partial_z V_z$ . En revanche pour  $m = 2$ , c’est  $v_r v_z \partial_r V_z$ <sup>1</sup> qui contribue le plus. Les premiers résultats montrent une implication croissante des termes dépendant de  $V_\theta$  comme source quand  $Re$  augmente. La chute de la valeur de  $Ma_c$  viendrait en conséquence plus de ces nouvelles sources que d’une modification de l’écoulement méridien  $V_r, V_z$  par la rotation.

En conclusion, l’influence de la rotation sur la stabilité de l’écoulement thermocapillaire dans un pont liquide soumis à un flux de chauffage latéral a été étudié et a révélé une zone où la rotation joue un rôle déstabilisant. Plusieurs pistes pouvant expliquer ce phénomène ont été écartées. Une étude a-posteriori par un bilan énergétique a recentré notre réflexion sur de nouvelles voies et permettra de cerner plus finement les mécanismes sous-jacents.

## Références

- Chénier E., Delcarte C., Labrosse G. 1999 Stability of the axisymmetric buoyant-capillary flows in a laterally heated liquid bridge. *Phys. Fluids* **11** 527–541
- Kuhlmann H.C. 1999 *Thermocapillary convection in models of crystal growth*, tome 152 de *Springer tracts in modern physics*. Springer
- Martin Witkowski L., Walker J.S. 2001 Flow driven by Marangoni convection and rotating magnetic field in a floating-zone configuration. *Magnetohydrodynamics* **37** 112–118
- Wanschura M., Shevtsova V.M., Kuhlmann H.C., Rath H.J. 1995 Convective instability mechanisms in thermocapillary liquid bridges. *Phys. Fluids* **7** 912–925

<sup>1</sup>La notation n’est pas rigoureuse car il faudrait écrire les combinaisons avec les complexes conjugués.