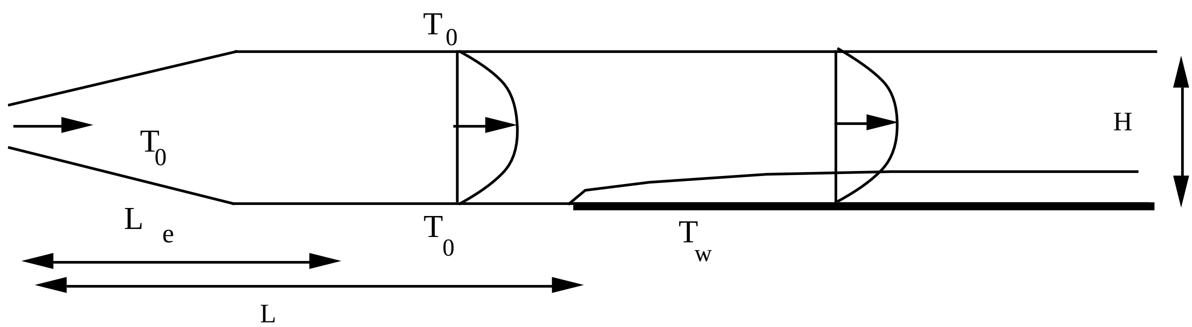
Cours **MF201**

14 Décembre 98

Transferts Thermiques dans les fluides.

Durée: 2 heures
Tout document personnel autorisé.

L'objet de ce problème est l'étude d'un réacteur d'Épitaxie en Phase Gazeuse d'Organos Métalliques (MOCVD). Il s'agit d'un procédé de pointe (au CNET, chez Alcatel, Motorola...) pour déposer des fines couches d'atomes les unes sur les autres pour faire des composants semi conducteurs pour l'optoélectronique (diodes, micro lasers, transistors...).
Concrètement le fluide (de l'Hélium) qui transporte les réactifs (composés de Germanium ou d'Arsine ou d'Aluminium) est initialement à la température T_0, il s'écoule dans un canal (dont les parois sont portées à T_0) et rencontre (en x=0) une portion de la paroi du bas (en y=0 et qui s'étend à partir de x=0) chauffée à une température T_w. Cette partie chauffée est le "suscepteur" en Silicium, c'est là uniquement que se produit la réaction chimique: il n'y a pas de de réaction chimique dans l'écoulement (il s'agit d'approximations).
Le problème est stationnaire 2D, H est la largeur du réacteur. L'écoulement est supposé incompressible, et de viscosité faible (le nombre de Reynolds est très grand). L'écoulement est en régime établi de Poiseuille. Le fluide est non pesant. Les notations sont classiques μ viscosité, ρ densité du fluide porteur, D coefficient de diffusion binaire, k conductivité thermique du fluide...



1ère partie. Écoulement de base.

1.1. Compte tenu de l'invariance par translation du profil des vitesses, montrer rapidement que celui ci peut s'écrire sous la forme $(u(x,y), v(x,y))=(U_0\,\bar{u}, 0)$ avec :

$$\bar{u} = \bar{y}(1- \bar{y}),$$

définir la jauge de u et de y en fonction de H, du gradient de pression longitudinal constant imposé noté Π et de μ. On pose $Re=\rho U_0 H/\mu$.

1.2. En réalité le tube est de section rectangulaire (de largeur L_1), quel petit paramètre a - t-il fallu poser pour pouvoir admettre que l'écoulement est plan (2D)? (répondre $\varepsilon_1=\ldots$)

1.3. Pour établir la solution de la question 1.1, on a supposé que $\partial u/\partial x=0$, revenons un instant sur cette hypothèse. Soit L la distance entre l'entrée et le suscepteur montrer rapidement en jaugeant $\mu\partial^2u/\partial y^2$ et $\rho u\partial u/\partial x$ (u et y sont jaugés comme dans la question 1, et x est jaugé avec L) qu'il existe une longueur L_e telle que si $L>>L_e$ on a effectivement:

$$\mu\partial^2u/\partial y^2 >>\rho u\partial u/\partial x.$$

Montrer que L_e s'exprime en fonction Re et H.

2ème partie. Transfert de masse.

2.1. Soit c(x,y) la concentration (supposée petite) du réactif par rapport au fluide. Écrire la conservation de cette concentration compte tenu de la loi de Fick. Les parois du réacteur (sauf la partie chauffée) sont non réactives, donc le flux y est nul. En revanche sur le suscepteur, le réactif réagit totalement: sa concentration est nulle en (y=0, x>0). Montrer qu'en amont du chauffage $c=c_0$ constante est solution de l'équation du transport de c.

2.2. Montrer que, si on adimensionne x avec H, compte tenu du fait que le nombre de Reynolds est très grand et que le nombre de Schmidt $Sc=\mu/(\rho D)$ est d'ordre un (environ 3 pour les gaz intervenant en MOCVD) alors le problème précédent écrit sans dimensions est singulier en $\bar{y}=0$, $\bar{x}>0$ lorsque $Re>>1$.

2.3. Réécrire le problème de la question 2.1 en introduisant une nouvelle échelle transverse εH près de la paroi inférieure. Déterminer ε par moindre dégénérescence. Montrer que le problème obtenu est semblable et que la variable de similitude est $\tilde{y}\bar{x}^{-1/3}$. Résoudre et tracer à main levée le profil de concentration.

2.4 En déduire l'expression du nombre de Sherwood $Sh(\bar{x})$ à la paroi, le tracer à main levée en fonction de $\bar{x}$. Les couches d'atomes croissent à une vitesse proportionnelle au nombre de Sherwood local. En déduire une condition sur la vitesse de cette croissance pour que l'écoulement ne soit pas perturbé (c'est le cas!!!).

3ème partie. Épitaxie sélective.

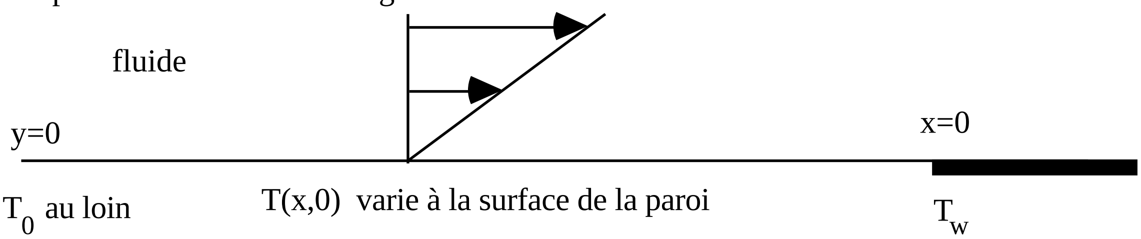
Une autre possibilité est de faire un cache non réactif sur le suscepteur (par exemple en $\bar{x}$=0.5 on met un cache de longueur relative λ), la croissance se faisant de part et d'autre du cache (on crée ainsi un puits quantique...). Montrer qu'il existe une échelle λH (λ<<1) telle qu'à cette échelle le problème à résoudre est $x=\lambda H x'$ et $y=\lambda H y'$:

$$y' \frac{\partial}{\partial x'} c = \frac{\partial}{\partial y'}\left(\frac{\partial}{\partial y'} c\right) + \frac{\partial}{\partial x'}\left(\frac{\partial}{\partial x'} c\right).$$

Application numérique U_0=0.4m/s H=4cm D=0.4$10^{-4}$SI. Conclure que si la taille du cache est environ 100µm l'équation à résoudre est simplement le Laplacien nul.

4ème partie. Conduction en amont du suscepteur.

On se place en $\bar{x}$<0, donc avant le chauffage, en fait, il est impossible d'assurer une discontinuité brusque de température à la paroi. La température de la surface de cette dernière varie donc, à l'échelle H, de $T(\bar{x}\to-\infty,0)=T_0$ à $T(\bar{x}\geq 0,0)=T_W$ par conduction et échange avec l'extérieur qui est à la température T_0. On modélise donc tout l'espace y<0 et $\bar{x}$<0 par un coefficient d'échange constant noté h.



4.1 Montrer que l'équation de la chaleur pour le fluide est:

$$\hat{y}\frac{\partial}{\partial \bar{x}}\hat{T} = \frac{\partial^2}{\partial \hat{y}^2}\hat{T}.$$

et quelle admet des solutions de la forme:

$$T = T_0 + (\delta T)\exp(K\bar{x})\,\mathrm{Ai}(\beta\tilde{y})$$

où Ai(η) est la fonction d'Airy telle que (Ai"(η) - ηAi(η)) = 0 avec Ai(0)=0.355 et Ai'(0)=-0.259 et Ai(∞)=0 .

4.2 En écrivant les conditions aux limites conclure sur le champ de température dans le fluide en $\bar{x}$<0.

Il y aurait encore beaucoup de problèmes amusants à étudier: le rayonnement, le cas de plusieurs réactions chimiques, le couplage avec la dynamique car ρ dépend de T, la modélisation précise du coefficient h sur les différentes parois...
Ce problème est inspiré d'un article de Van de Ven et al, Journal of Crystal Growth n°76 (1986) pp. 352-372 qui présente des résultats très favorables entre les questions 2.3/2.4 et l'expérience.

Éléments de Correction
Réacteur d'Épitaxie

1.1. Comme $\partial u/\partial x=0$, l'équation de l'incompressibilité ($\frac{\partial v}{\partial y}=0$) et les conditions d'adhérence donnent v=0. La composante radiale de l'équation de quantité de mouvement donne $\partial p/\partial y=0$, la pression ne dépend que de la variable longitudinale, d'où:

$0=-\frac{dp}{dx}+\mu\frac{\partial^2}{\partial y^2}u$, d'où par intégration: $\Pi=-\frac{dp}{dx}$ et $u=\frac{1}{\mu}\Pi\, y(H-y)$.

L'équation précédente s'écrit $u(y)=U_0\,\bar{u}$, avec $\bar{u}=\bar{y}(1-\bar{y})$ $\bar{y}=y/H$ et $U_0=\frac{1}{2\mu}\Pi\, H^2$. Si on préfère $\Pi=\frac{2\rho U_0^2}{H\ R_e}$, $R_e=U_0H/\nu$.

1.2. de manière évidente $\varepsilon=L_1/H<<1$.

1.3. $\mu\partial^2u/\partial y^2>>\rho u\partial u/\partial x$ s'écrit en jauges $\mu U_0H^{-2}>>\rho U_0^2/L$.

Donc si $L>>H\,(U_0H/\nu)$, L'écoulement de Poiseuille, encore appelé régime établi est obtenu à une distance de l'entrée L_e égale à environ la hauteur fois le nombre de Reynolds $L_e=H\,(U_0H/\nu)$. Au delà l'écoulement à "oublié" l'existence de l'entrée;

2.1 L'équation fondamentale est $\frac{\partial}{\partial t}(\rho c)+\_\_\ (\rho c\underline{u})+\_\_\ \underline{j}=w$. La loi de Fick pour un mélange binaire $\underline{j}=-\rho D\ \_\_c$, comme $u=u(y)$, $v=0$ et ici il n'y a pas de de réaction chimique dans l'écoulement w=0. Donc

$$u(y)\frac{\partial}{\partial x}c = D\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}\right)c.$$

2.2 En x<0, $\frac{\partial^2}{\partial y^2}c=0$ et pas de flux ($\frac{\partial}{\partial y}c=0$) sur les parois: $c=c_0$ partout en x<0.

$$\bar{u}\frac{\partial}{\partial \bar{x}}\bar{c} = \frac{1}{Re\ Sc}\left(\frac{\partial^2}{\partial \bar{x}^2}+\frac{\partial^2}{\partial \tilde{y}^2}\right)\bar{c}.$$

Si Re Sc>>1 $\bar{u}\frac{\partial}{\partial \bar{x}}\bar{c}=0$, $\bar{c}=1$ en x>0, y>0 et $\bar{c}=0$ en y=0, il faut introduire une couche limite qui permet à $\bar{c}$ de diffuser transversalement.

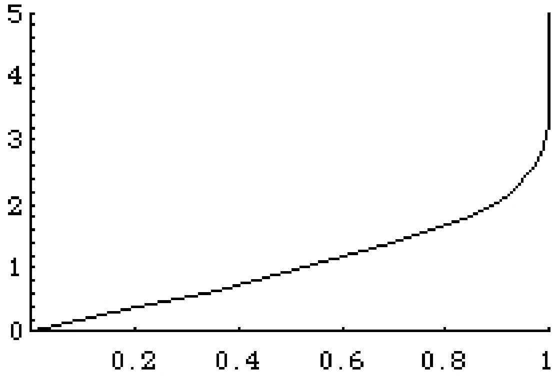
2.3 Le calcul est exactement celui de la PC 2 en plus simple

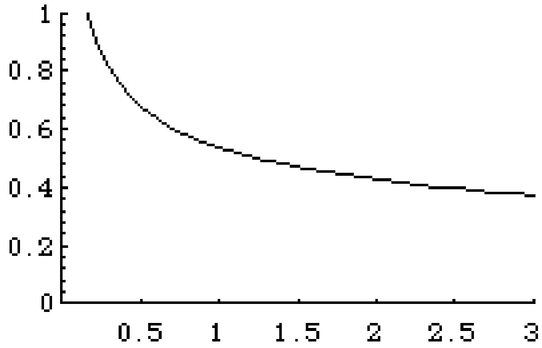
$u/U_0=\varepsilon.\tilde{y}(1-\varepsilon.\tilde{y})\sim\varepsilon.\tilde{y}$, le terme dominant du MdG (RHS) est donc $\varepsilon\tilde{y}\frac{\partial}{\partial \bar{x}}\tilde{c}$, le terme dominant du MdD (LHS) est donc $(D/Sc)\varepsilon^{-2}\frac{\partial^2}{\partial \tilde{y}^2}\tilde{c}$, donc $\varepsilon=(Sc\ Re)^{-1/3}$ et

$$\tilde{y}\frac{\partial}{\partial \bar{x}}\tilde{c} = \frac{\partial^2}{\partial \tilde{y}^2}\tilde{c}.$$

$\tilde{c}=0$ en $\tilde{y}=0$, $\tilde{c}\to 1$ (raccord de $\bar{c}=1$ en $\bar{x}>0$, $\bar{y}>0$) pour $\tilde{y}\to\infty$. La variable de similitude est bien (*c.f.* PC) $\tilde{y}\bar{x}^{-1/3}$. On trouve : $\tilde{c}=1-\Gamma(1/3,\ \tilde{y}^3/\bar{x}/9)/\Gamma(1/3)=\int_0^{\tilde{y}\bar{x}^{-1/3}}\exp(-\xi^3/9)d\xi/\int_0^{\infty}\exp(-\xi^3/9)d\xi$

La quantité utile est le flux de masse à la paroi: $\frac{\partial}{\partial \tilde{y}}\tilde{c} = 3^{1/3}\bar{x}^{-1/3}/\Gamma(1/3) = 0.538366\ \bar{x}^{-1/3}$





profil de concentration

$\partial\tilde{c}/\partial\tilde{y}$ en 0.

2.4 Sh= $-j/(D(c(0)-c(\infty))/L) = (Sc\ Re)^{1/3}\ 0.538\ (L/x)^{1/3}$

La paroi s'épaissit de $\partial y/\partial t$=KSh. qui doit être $<<U_0$. C'est certain en pratique car on dépose quelques dizaines de couches d'atomes en 15min!

3. le gradient de vitesse près de la paroi est environ U_0=0.4m/s H=4cm

$U_0/H=1/\tau=10s^{-1}$, et D~.4$10^{-4}$SI. On est toujours dans la partie linéaire de la paroi: $u(y)\sim y/\tau$, l'équation de convection diffusion:

$$y\frac{\partial}{\partial x}c = D\tau\left(\frac{\partial}{\partial y}\left(\frac{\partial}{\partial y}c\right) + \frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{\partial}{\partial x}c\right)\right)$$

si on veut garder les trois termes on pose $x=\varepsilon Hx'$ et $y=\varepsilon Hy'$ avec ε à trouver.

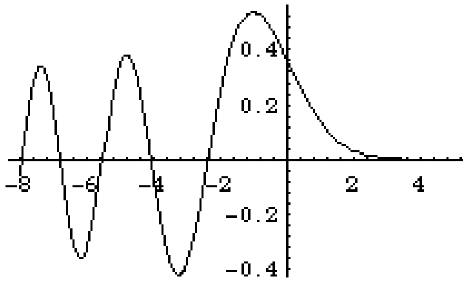
$$y'\frac{\partial}{\partial x'}c = D\tau/(\varepsilon H)^2\left(\frac{\partial}{\partial y'}\left(\frac{\partial}{\partial y'}c\right) + \frac{\partial}{\partial x'}\left(\frac{\partial}{\partial x'}c\right)\right).$$

le bon choix de ε est $\sqrt{(D\tau)}/H$. L'échelle complète est donc 2mm=2000µm. Dans le cas pratique, on a un accident de longueur 100µm<<2000µm. Le membre de gauche s'évanouit.

4.1 Si $\hat{y} = y/(H(PrRe)^{-1/3})$ on a:

$$\hat{y}\frac{\partial}{\partial \bar{x}}\hat{T} = \frac{\partial^2}{\partial \hat{y}^2}\hat{T}.$$

et quelle admet des solutions de la forme: $T = T_0 + (T_w - T_0)\exp(K\bar{x})\,Ai(K^{1/3}\tilde{y})/Ai(0)$ où $Ai(\eta)$ est la fonction d'Airy



$Ai(\eta)$

4.2 L'extérieur est modélisé par un coefficient d'échange $h(T-T_0)=-k\frac{\partial T}{\partial y}$: attention, il faut remettre les dimensions. Donc $K=[h/(k/(H(PrRe)^{-1/3}))/(-Ai'(0)/Ai(0))]^3$

ce qui nous donne la longueur 1/K de pénétration de la température T_w dans la paroi horizontale.