

PACOTE COMPUTACIONAL PARA A ANÁLISE DE DADOS DE CRESCIMENTO BRIDGMAN DE CRISTAIS BINÁRIOS

Eduardo Bartoli de Noronha

aluno do PIBIC
Centro Técnico Aeroespacial - CTA
Instituto Tecnológico de Aeronáutica - ITA
12228-900 São José dos Campos SP

Maurício Fabbri

Pesquisador Responsável
Instituto Nacional de Pesquisas Espaciais - INPE
Laboratório Associado de Materiais e Sensores - LAS
12225 São José dos Campos SP

Descrevemos um pacote computacional implementado para Windows™ que servirá para a análise do crescimento Bridgman de cristais binários.

A meta deste pacote é obter uma boa confiabilidade, de modo que ele possa ser utilizado junto aos dados experimentais.

CÁLCULO DE COMPOSIÇÃO AXIAL

Os cristais binários são uma necessidade na fabricação de dispositivos eletro-ópticos de infravermelho. A largura intermolecular do semicondutor, que determina as propriedades óticas, está diretamente relacionada com a composição local, que é o objeto de nosso estudo. Além disso, devemos ter um cristal sem falhas, para que não haja descontinuidade das propriedades.

Assim, para se obter cristais de boa qualidade, duas técnicas são utilizadas:

- Bridgman-Stockbarger (BS): é basicamente uma solidificação direcional muito lenta sob um gradiente térmico móvel.
- Vapor-Melt-Solid (VMS): uma variante do caso acima, aonde a zona derretida é reduzida a uma fina camada líquida alimentada por vapores, na frente de solidificação.

A liga estequiométrica com a qual trabalhamos, $Pb_xSn_{1-x}Te$, apresenta um diagrama de fase bem comportado, quase ideal, o que facilita bastante as suposições no trabalho numérico. Esta liga, entretanto, é bastante tóxica no estado gasoso em altas temperaturas, devendo ser crescida, portanto, em ampolas fechadas.

A perfeição desejada no cristal depende de uma série de fatores independentes, entre eles a dinâmica de transporte na fase de nutriente, o stress térmico, a cinética de atração, e a morfologia e estabilidade da interface sólido-líquida.

Por todos estes fatores, a modelagem e simulação do crescimento BS/VMS é uma tarefa de fronteira móvel desafiante que tem atraído muita atenção durante as últimas décadas.

TRABALHO COMPUTACIONAL

No crescimento BS, quando $D/lV \ll 1$, temos para o transiente inicial uma simples aplicação de fórmula. Já para o transiente final, temos uma soma de série a ser feita. Esta soma deve ser feita com muito cuidado, pois de acordo com o critério utilizado na convergência pode-se obter resultados inesperados.

Um outro caso do crescimento BS, quando $D/lV \rightarrow 1$, pode ser resolvido aplicando-se a fórmula para o caso de K permanecer constante no crescimento.

Os outros casos do crescimento BS, assim como os do VMS podem ser resolvidos por qualquer fórmula de integração numérica, como a dos trapézios ou a de Simpson.

Além da parte numérica, devemos também desenvolver uma interface para o usuário, uma interface amigável, ao mesmo tempo ágil e de utilização não complicada.

O ambiente mais propício para satisfazer as duas tarefas é sem dúvida alguma o Windows™, que através de vários comandos de mouse facilita em muito a vida do operador.

A programação em Windows, assim como o próprio programa é bastante recente. Ela é baseada nas regras de programação orientada a objeto, que surgiu no início dos anos 80, revolucionando a até então vingente programação estruturada.

Para desenvolvermos o nosso programa, decidimos utilizar, entre as várias opções disponíveis no mercado, as bibliotecas OBJECTS contidas no compilador Borland Pascal 7.0.

As bibliotecas objects contém um conjunto de funções, procedimentos e objetos pré-definidos que realizam nos bastidores boa parte do trabalho incomodo.

O programa final cumpre com os objetivos iniciais, apresentando não somente precisão nos dados, como também sua clara visualização.