

# SIMULAÇÃO NUMÉRICA E VISUALIZAÇÃO GRÁFICA DE CRESCIMENTO DE MACROCRISTAIS

Nanci Naomi Arai

Aluna da Universidade de Taubaté - Bolsa PIBIC/CNPq

Orientadores: Dr. Stephan Stephany, Pesquisador Titular – LAC

Dr. Maurício Fabbri, Professor Titular, Núcleo de Desenvolvimento Tecnológico – NDT

Universidade São Francisco - USF

Esse projeto originou-se de atividades de pesquisa do Laboratório Associado de Sensores e Materiais (LAS)/INPE, ligadas à análise de dados de crescimento de cristais para dispositivos eletro-ópticos de infravermelho, objetivando tanto a otimização dos processos de laboratório como a compreensão dos fenômenos fundamentais de transporte sob condições generalizadas (microgravidade e campos externos). Para a obtenção de dispositivos eletro-ópticos de boa qualidade exige-se amostras de macrocristais semicondutores com boa perfeição cristalina e homogeneidade de composição.

A otimização das técnicas de crescimento é também de muito interesse na pesquisa básica dos processos clássicos de transporte, bem como de modelos de agregação/nucleação. Um grande número de fatores influenciam decisivamente a qualidade do cristal obtido em laboratório: os perfis de temperatura e velocidade do forno, a geometria e as propriedades físicas do material das ampolas, as características próprias do material crescido (diagrama de fase, constantes de difusão, condutividade térmica, etc.).

A solidificação direcionada de ligas totalmente miscíveis a uma taxa de crescimento constante, no interior de uma ampola fechada, origina um problema matemático de difusão em presença da fronteira livre líquido-sólido, cuja solução permite descrever o perfil axial de composição no sólido final [1]. No caso de crescimentos Bridgman em condições de microgravidade, ou em ampolas de diâmetro reduzido, e em regimes distantes do super-resfriamento constitucional, o perfil experimental é bem descrito por um modelo puramente difusivo, em condições de quasi-equilíbrio (onde a constante de redistribuição de soluto segue o diagrama de fase da liga).

Foram implementados modelos físicos e numéricos para a análise de perfis de composição em ligas macrocristalinas crescidas pelo método de Bridgman. As equações de transporte são aproximadas por um modelo unidimensional difusivo, e discretizadas pelas técnicas de diferenças finitas e volumes de controle. A presença da interface sólido-líquido é modelada por um problema de fronteira móvel. Na hipótese de acoplamento térmico perfeito, a velocidade da interface é ditada pela variação da temperatura de fusão com a composição de acordo com o diagrama de fase da liga; este efeito é tanto menor quanto mais lento for o deslocamento da ampola no interior do forno durante o crescimento.

A análise cuidadosa dos dados experimentais disponíveis para a liga PbTe-SnTe a 20% mostra que, mesmo em crescimentos muito lentos, o perfil de composição axial obtido não segue o padrão esperado dos modelos de equipartição de massa (equação de Scheil). O uso de modelos mais refinados, seguido de uma análise de erros das medidas, mostra também que, nestes casos, tanto a influência da convecção na fase líquida como o efeito da variação da temperatura da frente de solidificação com a composição podem ser desprezados. Dentro da suposição que os dados disponíveis sobre o diagrama de fase da liga sejam confiáveis (dentro dos erros experimentais documentados na literatura), uma hipótese provável é uma pequena redistribuição adicional de soluto pela fase sólida, dentro da região de altas temperaturas ao redor da interface, durante o crescimento [2].

O refinamento do modelo difusivo foi implementado seguindo uma equação de difusão média pela fase sólida, acoplada com a difusão pela fase líquida através da fronteira móvel e obedecendo ao coeficiente de distribuição de equilíbrio. Em aplicações práticas, é de muito

interesse a recuperação das constantes físicas de crescimento e, nos casos onde o diagrama de fase não é bem conhecido, a recuperação da taxa instantânea de segregação na interface, a partir do perfil de composição observado no cristal, representando um problema inverso.

O problema inverso é formulado como um problema de otimização não-linear com restrições, no qual o problema direto de difusão é solucionado iterativamente, gerando sucessivas aproximações dos perfis a serem estimados. A iteração continua até que uma função objetivo, que representa a diferença quadrática entre os dados experimentais e aqueles obtidos pelo modelo direto, acabe convergindo para um valor mínimo especificado [3].

Este é o trabalho final que compreende todas as etapas realizadas desde o início da Iniciação científica. Foram realizadas as modelagens numéricas implementadas com as linguagens C e Fortran, os programas executados em estações de trabalho com o sistema operacional Unix, e a visualização dos resultados, a partir de gráficos gerados através da linguagem IDL (Interactive Data Language) [4]. A parte de visualização foi implementada com programas básicos em IDL que possibilitam que os dados gerados pelos métodos numéricos possam ser lidos e exibidos na forma de gráficos que podem ser gravados do formato PostScript.

### Referências Bibliográficas

[1] Arai, N. N. et al.

*Perfis de Composição de Cristais Binários (painel).*

In: painel apresentado no III Encontro de Iniciação Científica da Universidade de Taubaté, SP, 1998.

[2] Arai, N. N., Fabbri, M.

*Perfis de Segregação em Crescimento Bridgmann com Difusão na Fase Sólida (painel).*

In: XX Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada, Caxambu, MG, 1997

[3] Arai, N. N., Fabbri, M., Stephany S.

*Formulação Inversa para a Recuperação das Constantes Físicas e da Taxa de Segregação em Crescimentos Bridgmann Difusivos (painel).*

In: XXI Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada, Caxambu, MG, 1998.

[4] Research System, Inc.

*IDL Version 5.0.*

USA, 1997.