

SIMULAÇÃO NUMÉRICA E VISUALIZAÇÃO GRÁFICA DE CRESCIMENTOS DE MACROCRISTAIS

Nanci Naomi Arai

Aluna da Universidade de Taubaté - Bolsa PIBIC/CNPq

Orientador: Dr. Maurício Fabbri, Pesquisador
Laboratório Associado de Sensores e Materiais

A obtenção de ligas semicondutoras de estrutura monocristalina em laboratório é um passo básico na obtenção de dispositivos optoeletrônicos. A faixa de sensibilidade desses dispositivos depende essencialmente da composição local e da distribuição composicional média da amostra utilizada na sua fabricação. Desse modo, amostras homogêneas permitem a utilização de substratos de maior área, ou a fabricação de mais dispositivos para cada monocristal obtido. Um dos processos de crescimento mais comum, no caso de semicondutores que envolvem ligas de chumbo ou mercúrio, é a solidificação direcionada. Nesta técnica, a mistura que forma a liga é solidificada lentamente, ao ser deslocada da região quente para a região fria no interior de um forno (método de Bridgman).

Durante o crescimento, os efeitos de segregação são os responsáveis pela não homogeneidade em composição do cristal obtido. Estes efeitos são ditados, primordialmente, pelo diagrama de fase de equilíbrio da liga, e a composição final do cristal depende da interação entre as trocas de calor (condução, convecção e radiação), massa (difusão) e momento (convecção) durante o processo de crescimento. Em ambiente de microgravidade, os efeitos de convecção na fase líquida são bastante minimizados, e é então possível obter um regime de crescimento dominado pelos processos de condução e difusão. Ainda, em crescimentos lentos, em regime de quasi-equilíbrio, a amostra permanece essencialmente em equilíbrio térmico com o forno. Dessa maneira, na quase totalidade dos crescimentos de ligas semicondutoras em microgravidade pela técnica de solidificação direcionada, a difusão de massa é o fenômeno que governa a homogeneidade composicional resultante¹.

A análise de crescimentos em condições especiais, tais como microgravidade e campos eletromagnéticos externos, pode ser feita através da simulação numérica dos processos de transporte clássicos que ocorrem na mistura líquida. Os modelos composicionais mais simples e de uso mais comum, são descritos através de dois parâmetros, que representam os coeficientes efetivos de segregação e de difusão na fase líquida.

Neste projeto, desenvolvemos modelos físicos e numéricos, bem como uma interface gráfica simples, para a análise de perfis de composição em ligas macrocristalinas crescidas pelo método de Bridgman. As equações de transporte são aproximadas por um modelo médio unidimensional difusivo, e discretizadas pelas técnicas de diferenças finitas e volumes de controle². A presença da interface líquido-sólido 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 crescimento³.

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 equi-partição de massa (equação de Scheil)⁴. 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 de que os dados disponíveis sobre o diagrama de fase da liga são 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.

O refinamento do modelo difusivo foi feito através de 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. Os primeiros resultados parecem mostrar que, dependendo da velocidade média de deslocamento do forno, o perfil de composição resultante pode ser sensível a uma contribuição de até duas ordens de magnitude menor da difusão na fase sólida em relação à fase líquida, dentro dos erros experimentais esperados⁵. A solução numérica da equação de difusão mista foi feita através de uma discretização conservativa por diferenças finitas.

¹Fabbri, M. “*Modelamento Numérico e Simulação Computacional Aplicados ao Crescimento de Cristais*” I Escola de Verão em Crescimento de Cristais, IPEN-SP, 25-28 Fev.1997, p.81-102.

²Maliska, C.R. “*Transferência de Calor e Mecânica dos Fluidos Computacional*” LTC, RJ, 1995.

³Fabbri, M. “*Análise de Perfis de Composição em Macrocristais Pseudo-Binários Crescidos em Microgravidade*”, 2º Simpósio Brasileiro de Tecnologia Aeroespacial - BSAT, S.J.Campos, SP, 17-21 Out 1994.

⁴Kurz, W. and Fisher, D.J. “*Fundamentals of Solidification*”, Trans-Tech, Aedermannsdorf, Sw, 1992.

⁵Arai, N.N. e Fabbri, M. “*Perfis de Segregação em Crescimentos Bridgman com Difusão na Fase Sólida*” Aceito para apresentação no XX Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada, Caxambú, MG, 10 a 14 de Junho de 1997.