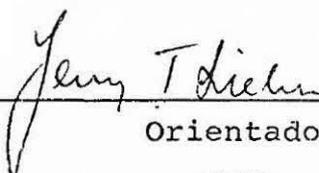


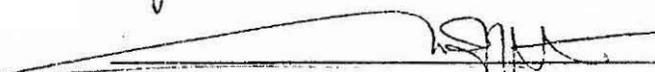
1. Publicação nº <i>INPE-4471-TDL/323</i>	2. Versão	3. Data <i>Fev. 1988</i>	5. Distribuição <input type="checkbox"/> Interna <input checked="" type="checkbox"/> Externa <input type="checkbox"/> Restrita
4. Origem <i>PG/LAS</i>	Programa <i>FRH/ECO</i>		
6. Palavras chaves - selecionadas pelo(s) autor(es) <i>HIDRODINÂMICA DO PROCESSO CZOCHRALSKI</i> <i>TÉCNICA DO MOVIMENTO DE ROTAÇÃO ACELERADO DO CADINHO (ACRT)</i>			
7. C.D.U.: <i>532.78</i>			
8. Título <i>INPE-4471-TDL/323</i> <i>SIMULAÇÃO HIDRODINÂMICA DE CONVECÇÃO FORÇADA NO PROCESSO CZOCHRALSKI</i>		10. Páginas: <i>144</i>	11. Última página: <i>G.2</i>
9. Autoria <i>Paulo Henrique de O. Rappl</i>		12. Revisada por <i>Jerzy T. Sielawa</i> <i>Jerzy T. Sielawa</i>	13. Autorizada por <i>Marco Antonio Raupp</i> <i>Marco Antonio Raupp</i> <i>Diretor Geral</i>
Assinatura responsável <i>PH Rappl</i>			
14. Resumo/Notas <i>Os cristais crescidos pelo processo Czochralski apresentam, para determinadas aplicações específicas, sérios problemas (estrias e defeitos estruturais) relacionados com a homogeneização da fase líquida e transferência de calor, os quais impedem o desenvolvimento tecnológico nas áreas de Microeletrônica e Telecomunicações. Em 1971, Scheel sugeriu a Técnica do Movimento de Rotação Acelerado do Cadinho e/ou do Cristal (ACRT) como um método de homogeneização da fase líquida no processo Czochralski, e desde este tempo há aplicações específicas no crescimento de silício e granadas. No entanto, ainda hoje os detalhes da técnica ACRT no processo Czochralski não são completamente entendidos e nem se sabe como otimizar as variáveis de crescimento. A otimização dos parâmetros, através de experimentos sistemáticos de crescimento de cristais ou de simulação numérica tridimensionais, requer um enorme esforço devido ao grande número de parâmetros envolvidos. Neste trabalho um experimento de visualização de fluxo foi planejado a fim de que os detalhes da técnica ACRT fossem entendidos de uma forma intuitivamente acessível. Os resultados obtidos mostram que regiões indesejáveis com superfícies estagnantes sob o cristal (colunas de Taylor-Proudman) podem ser evitadas com a técnica ACRT e que ótimas condições de mistura na fase líquida podem ser obtidas.</i>			
15. Observações <i>Dissertação de Mestrado em Eletrônica e Telecomunicações/Materiais, aprovada em Novembro de 1987.</i>			

Aprovado pela Banca Examinadora
em cumprimento a requisito exigido
para a obtenção do Título de Mestre
em Eletrônica e Telecomunicações

Dr. Jerzy Tadeusz Sielawa


Orientador/Presidente

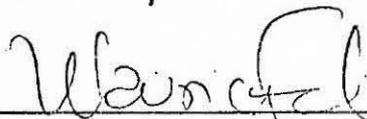
Dr. Marco Aurélio Ortega


Membro da Banca
-convidado-

Dr. Alfredo Gontijo de Oliveira


Membro da Banca
-convidado-

Dr. Maurício Fabbri


Membro da Banca

candidato: Paulo Henrique de Oliveira Rappl

São José dos Campos, 27. de novembro de 1987

À Rosa Maria, minha esposa e à
Katrin, minha filha, dedico este
trabalho.

AGRADECIMENTOS

Expresso os meus mais profundos agradecimentos às pessoas e entidades que direta ou indiretamente colaboraram para a realização deste trabalho. Em particular, aos meus orientadores: Prof. Hans J. Scheel, por ter-me introduzido à área de crescimento de cristais (Czochralski), sugerido o tema desta dissertação e me orientado com grande paciência e dedicação (primeiro no IFQSC/USP, e posteriormente no INPE), e ao Dr. Jerzy T. Sielawa por sua inestimável colaboração na parte teórica da hidrodinâmica de fluido em rotação e no aperfeiçoamento das idéias conceituais. Agradeço ao INPE, nas pessoas do Dr. Nelson de Jesus Parada e do Dr. Marco Antônio Raupp, sob a direção dos quais este trabalho foi realizado, e especialmente ao Dr. Ronald Ranyaud, a possibilidade de tornar possível o estudo que ora completo, bem como suas valiosas sugestões. Outrossim, meus agradecimentos ao Eng. Luiz F. de Matteo Ferraz pela construção do sistema eletrônico de controle ACRT; ao Dr. Dietrich Schiel e Mirian R.X. Barros por terem sugerido e executado o método Schlieren. Agradeço também à assistência técnica de Luiz Barsi; ao Dr. Jarbas C. Castro Neto, responsável pela oficina de ótica (IFQSC); ao Dr. Milton F. de Souza e ao Dr. Ralf Gielow o apoio administrativo; ao Dr. Alfredo Gontijo de Oliveira, Dr. Benhard J. Mokross, Dr. José P. Andreetta ao Eng. José Dias de Matos o auxílio que me proporcionaram. Finalmente, desejo registrar os nomes das seguintes pessoas que de múltiplas formas contribuíram para este trabalho: Glória C. Berti, Neide R. das Neves Cavalcanti, Márcia Perez, Eng. João M. de Toni, Carlos R. dos Santos, Idelfonso de Oliveira Filho e Lúcia E. de Queiroz Vianna.



ABSTRACT

Czochralski-grown crystals contain defects (striations and structural defects caused by inhomogeneous melts and by heat transfer) which are problematic for specific applications and which are critical for the developments in microelectronics and telecommunications. In 1971 Scheel suggested the Accelerated Crucible Rotation Technique (ACRT) to homogenize the Czochralski melts. This method has been applied in growth of silicon and of garnets. However, the detailed knowledge of the action of ACRT in Czochralski melts is incomplete, and optimization of the growth parameters has not been achieved. The optimization by systematic crystal growth experiments or by three-dimensional numerical analysis would require enormous efforts in view of the large number of growth parameters. In this work a flow visualization experiment was planned in order to illustrate in an intuitively accessible way the details of the ACRT action. The results obtained show that the undesirable cells and stagnant shear layers below the crystal (Taylor-Proudman column) can be prevented by ACRT, and that optimum mixing conditions can be achieved.

SUMÁRIO

	<u>Pág.</u>
LISTA DE FIGURAS	xi
LISTA DE SÍMBOLOS	xv
<u>CAPÍTULO 1 - INTRODUÇÃO</u>	1
1.1 - O processo Czochralski e sua importância na produção de cristais	1
1.2 - Problemas no processo Czochralski	4
1.2.1 - Defeitos estruturais	4
1.2.2 - Inomogeneidade	10
1.3 - O papel da hidrodinâmica no processo Czochralski	14
1.3.1 - Observações durante o crescimento de cristais	14
1.3.2 - Estudos em simulação numérica	16
1.3.3 - Estudos em visualização de fluxo	18
1.3.4 - Alternativas para solucionar os problemas do processo Czochralski	20
1.4 - Objetivo deste trabalho	23
<u>CAPÍTULO 2 - ASPECTOS TEÓRICOS DA HIDRODINÂMICA NO PROCESSO CZOCHRALSKI</u>	25
2.1 - Definição das condições de contorno	25
2.2 - Formulação matemática do fluxo no processo Czochralski ...	28
2.3 - Simulação numérica	32
2.4 - Discussão do fluxo no processo Czochralski com números adimensionais	39
<u>CAPÍTULO 3 - ESTUDO EXPERIMENTAL DA HIDRODINÂMICA NO PROCESSO CZOCHRALSKI</u>	49
3.1 - Descrição do aparelho de simulação	49
3.1.1 - Conjunto mecânico	49
3.1.2 - Sistema eletrônico	56
3.1.3 - Sistema de visualização por injeção de tinta	58
3.1.4 - Sistema de visualização por espalhamento de luz	59
3.1.5 - Método Schlieren de visualização	62
3.1.6 - Videogravação	65

	<u>Pág.</u>
3.1.7 - Anemometria Doppler por laser	67
3.2 - Visualização do fluxo de experimentos utilizando a ACRT ..	70
3.2.1 - Experimentos visualizados com injeção de tinta - Cadinho de fundo plano	70
3.2.2 - Experimentos visualizados com injeção de tinta - Cadinho de fundo côncavo	84
3.2.3 - Experimentos com espalhamento de luz - Cadinho de fundo plano	86
<u>CAPÍTULO 4 - CONCLUSÃO</u>	91
REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	93
APÊNDICE A - TERMODINÂMICA E DEFEITOS PONTUAIS	
APÊNDICE B - SEGREGAÇÃO	
APÊNDICE C - COEFICIENTE DE DISTRIBUIÇÃO EFETIVO (B-P-S)	
APÊNDICE D - EQUAÇÃO DE NAVIER-STOKES COM PARÂMETROS ADIMENSIONAIS	
APÊNDICE E - EQUAÇÃO PARA A PRESSÃO (FLUXO GEOSTRÓFICO)	
APÊNDICE F - DIMENSIONAMENTO DE UM SISTEMA SCHLIEREN DE OBSERVAÇÃO	
APÊNDICE G - ANEMOMETRIA DOPPLER POR LASER	

LISTA DE FIGURAS

	<u>Pág.</u>
1.1 - Representação esquemática do processo Czochralski de crescimento de cristais	2
1.2 - Ilustração bidimensional de um sólido cristalino simples, indicando algumas das possíveis imperfeições pontuais	5
1.3 - Representação estrutural de uma deslocação do tipo aresta numa rede cúbica simples	6
1.4 - Representação estrutural de uma deslocação do tipo hélice numa rede cúbica simples	7
1.5 - Um contorno do tipo inclinado simples, numa rede cúbica, formado por deslocações do tipo aresta, distantes entre si de h	8
1.6 - Parte de um diagrama de fase binário	10
1.7 - Distribuição no estado estacionário da concentração de soluto no líquido próximo à interface de solidificação	12
2.1 - Modelo geométrico idealizado do processo Czochralski de crescimento	25
2.2 - No processo de discretização, a seção de corte vertical do líquido é dividida em elementos discretos de fluido	34
2.3 - Evolução temporal do padrão de fluxo obtido por simulação numérica, para a técnica ACRT aplicada no processo Czochralski	38
2.4 - Configuração teórica da coluna e da célula de Taylor-Proudman: a) isorotação, b) contra-rotação	43
2.5 - Configuração esquemática dos vórtices de Taylor transientes	45
2.6 - Estágios sucessivos da distorção espiral de cisalhamento em um tubo circular, contendo dois líquidos distinguíveis, no instante que a rotação é subitamente interrompida	46
2.7 - Redução da velocidade de rotação em função do raio em uma distorção espiral de cisalhamento para vários parâmetros de tempo	47
3.1a - Aparelho de simulação hidrodinâmica	50
3.1b - Aparelho de simulação hidrodinâmica	51
3.2 - Parte A: Rotação do cristal	52
3.3 - Parte B: Visualização do fluxo	53
3.4 - Parte C: Rotação do cadinho	55
3.5 - Diagrama de blocos mostrando o funcionamento do sistema eletrônico do ciclo ACRT.....	57

	<u>Pág.</u>
3.6 - Representação esquemática da técnica de visualização por espalhamento de luz	59
3.7 - Disposição dos componentes que integram o sistema de visualização por espalhamento de luz	60
3.8 - Representação esquemática do método Schlieren de visualização	63
3.9 - Filmagem dos experimentos	65
3.10 - Aplicação da técnica de anemometria Doppler por lasers nos experimentos de simulação ACRT.	69
3.11 - Configuração característica do ciclo ACRT para $T = 114,4s$, $51,0s$ e $12,4s$	71
3.12 - Configuração do fluxo secundário induzida pelo movimento de rotação acelerado do cadinho e do "cristal" em contra-rotação e isorotação para um ciclo ACRT igual a $12,4s$. ..	72
3.13 - Configuração do fluxo secundário induzida pelo movimento de rotação acelerado do cadinho e do "cristal" em contra-rotação e isorotação para um ciclo ACRT igual a $12,4s$. ..	73
3.14 - Configuração do fluxo secundário induzida pelo movimento de rotação acelerado do cadinho ou do "cristal" para um ciclo ACRT igual a $12,4s$	74
3.15 - Configuração do fluxo secundário induzida pelo movimento de rotação acelerado do cadinho e do "cristal" em contra-rotação e isorotação para um ciclo ACRT igual a $12,4s$. ..	75
3.16 - Configuração do fluxo secundário induzida pelo movimento de rotação acelerado do cadinho e do "cristal" em contra-rotação e isorotação para um ciclo ACRT igual a $12,4s$. ..	76
3.17 - Configuração do fluxo secundário induzida pelo movimento de rotação acelerado do cadinho ou do "cristal" para um ciclo ACRT igual a $12,4s$	77
3.18 - Fluxo secundário induzido pela rotação constante do "cristal" e pelo movimento de rotação acelerado do cadinho para um ciclo ACRT igual a $12,4s$	78
3.19 - Fluxo secundário induzido pela rotação constante do "cristal" e pelo movimento de rotação acelerado do cadinho para um ciclo ACRT igual $12,4s$	79
3.20 - Fluxo secundário induzido durante a aceleração e a desaceleração do cadinho, para a) um ciclo ACRT com $T/4 \ll E^{-1/2}\Omega^{-1}$, b) um ciclo ACRT com $T/4 \gg E^{-1/2}\Omega^{-1}$...	82

3.21 - Configuração do fluxo assimétrico transitório resultante da desaceleração do cadinho. Este fenômeno é nitidamente observado quando $T > 63s$	87
3.22 - Região de instabilidade, de mistura eficiente e de mistura insuficiente, obtidas através da variação sistemática dos parâmetros ACRT e submetendo o cristal a velocidades de rotação constantes. Os experimentos foram realizados usando uma solução aquosa de KI ($\nu = 0.64$ centistokes) ..	89
A.1 - Variação da energia livre de um cristal com a concentração de defeitos. Adaptado de Hannay (1973), p. 336	A.3
B.1 - Solidificação ilustrando a segregação	B.1
C.1 - Representação esquemática do transporte de impurezas, próximo à superfície do cristal em rotação, no processo Czochralski	C.1
F.1 - Dimensionamento de um sistema Schlieren	F.2
G.1 - Interferência entre duas ondas planas formando um ângulo θ entre as normais aos planos das ondas. Adaptado de Durst et alii (1981), p. 31	G.2



LISTA DE SÍMBOLOS

\vec{b}	- Vetor de Burgers
B	- $0,17f^{-3}\Omega^{3/2}D^2\nu^{-1/2}$
B	- Componente químico de uma solução binária
c	- Velocidade da luz no vácuo, $2,998 \cdot 10^{10} \text{ cm s}^{-1}$
C	- Concentração, g cm^{-3}
C_l	- Concentração de elementos de soluto (ou impureza) na fase líquida, g cm^{-3}
C_0	- Concentração inicial de soluto (ou impureza) na fase líquida, g cm^{-3}
$C_0' = C_{l(0)}$	- Concentração de soluto (ou impureza) na interface de crescimento, g cm^{-3}
C_s	- Concentração de elementos de soluto (ou impureza) na fase sólida, g cm^{-3}
D	- Coeficiente de difusão do soluto, cm^2s^{-1}
E	- Número de Ekman, $\nu\Omega^{-1}L^{-2}$
f	- Velocidade de crescimento, cm s^{-1}
\vec{f}	- Força gravitacional específica, \vec{F}_p^{-1} , cm s^{-2}
f_1	- Distância focal do espelho 1, cm
f_2	- Distância focal do espelho 2, cm
\vec{F}	- Forças externas (no caso gravitacional) por unidade de volume, $\text{g cm}^{-2}\text{s}^{-2}$
g	- Aceleração da gravidade, $9,81 \cdot 10^2 \text{ cm s}^{-2}$
G	- Energia livre de Gibbs (cristal imperfeito), $G = H - TS$, cal
G	- Constante gravitacional universal, $6,67 \cdot 10^{-8} \text{ dina cm}^2 \text{ g}^{-2}$

G'	- Energia livre de Gibbs (cristal perfeito), $G' = H' - TS'$, cal
h	- Distância vertical média entre as deslocações, cm
H	- Entalpia (cristal imperfeito), cal
H	- Altura do líquido no cadinho, cm
H'	- Entalpia (cristal perfeito), cal
H_a	- Número de Hartmann, $2,62 \cdot 10^{-2} H_0 x$
H_0	- Campo magnético, gauss
k	- Coeficiente de distribuição efetivo
k_0	- Coeficiente de distribuição no equilíbrio
K	- Constante de Boltzmann, $3,29 \cdot 10^{-24} \text{cal } ^\circ\text{K}^{-1}$
ℓ	- Distância do objeto ao espelho, cm
ℓ'	- Distância da imagem ao espelho, cm
L	- Comprimento característico, cm
L	- Fase líquida
n	- Índice de refração
n	- Número de incremento de tempo
n_D	- Índice de refração (raia D do sódio)
n_F	- Número de defeito Frenkel
n_V	- Número de vacância
N	- Número de átomos idênticos na rede
N'	- Número de posições intersticiais
p	- Pressão reduzida, $\text{g cm}^{-1}\text{s}^{-2}$
P	- Pressão específica $P\rho^{-1}$, cm^2s^{-2}
P	- Pressão por unidade de volume, $\text{g cm}^{-1}\text{s}^{-2}$
r	- Raio do "cristal", cm
\vec{r}	- Vetor posição no sistema de coordenadas cilíndricas

r, ϕ, z	- Sistema de coordenadas cilíndricas
$\hat{r}, \hat{\phi}, \hat{z}$	- Vetores unitários, respectivamente nas direções r, ϕ, z
R	- Raio do cadinho, cm
s	- Distância entre as franjas de interferência, cm
S	- Entropia total (cristal imperfeito), cal $^{\circ}\text{K}^{-1}$
S'	- Entropia total (cristal perfeito), cal $^{\circ}\text{K}^{-1}$
S_c	- Entropia configuracional, cal $^{\circ}\text{K}^{-1}$
S_t	- Entropia térmica, cal $^{\circ}\text{K}^{-1}$
t	- Tempo, s
T	- Temperatura absoluta, $^{\circ}\text{K}$
T	- Período do ciclo ACRT, s
u	- Componente da velocidade do fluido, na direção r
\vec{u}	- Vetor velocidade do fluido
\vec{u}_H	- Vetor velocidade horizontal
u_x	- Componente da velocidade, no fluxo induzido pela rotação do cristal, na direção x
U	- Velocidade característica de perturbação, cm s^{-1}
v	- Velocidade de fonte emissora, cm s^{-1}
v	- Componente da velocidade do fluido, na direção ϕ
v'	- Componente da velocidade da partícula, perpendicular às franjas de interferência
\vec{V}	- Vetor velocidade do fluido no sistema de coordenadas cartesianas
V_x	- Componente da velocidade do fluido, na direção x
V_y	- Componente da velocidade do fluido, na direção y
V_z	- Componente da velocidade do fluido, na direção z
V_{cc}	- Tensão máxima de alimentação

x, y, z	- Sistema de coordenadas cartesianas
x	- Distância, cm
x/x_1	- Fração da solução solidificada
$(x_1)_N, (x_1)_{N+1}$	- Pontos de interferência construtiva
w	- Componente da velocidade do fluido, na direção z
W_c	- Número de modos que os átomos podem ser arranjados na rede.
W_t	- Número de modos que a energia vibracional na rede pode ser distribuída
Z	- $D^{-1}fx$
α	- Aumento linear transversal da imagem, cm
β	- Fase sólida
δ	- Espessura da camada limite de difusão, cm
ϵ	- Número de Rossby, $U\Omega^{-1}L^{-1}$
ϵ_F	- Energia de formação por defeito Frenkel, cal
ϵ_V	- Energia de formação por vacância, cal
θ	- Ângulo entre duas ondas planas, rad
θ'	- Desorientação da rede cristalina
λ	- Comprimento de onda da radiação no líquido, cm
λ_0	- Comprimento de onda da radiação no vácuo, cm
μ	- Viscosidade dinâmica, $g\ cm^{-1}s^{-1}$
ν	- Viscosidade cinemática, $\mu\rho^{-1},\ cm^2s^{-1}$
ν'	- Frequência da luz, s^{-1}
ν_D	- Frequência Doppler, s^{-1}
ρ	- Massa específica, $g\ cm^{-3}$
τ	- Parâmetro de tempo, $\nu R^{-2}t$
$\vec{\phi}$	- Fluxo de soluto (ou impureza), $g\ cm^{-2}s^{-1}$

Φ	- Função potencial gravitacional, $-G m m_T d^{-1}$
Ω	- Frequência e velocidade angular, s^{-1}
$\vec{\Omega}$	- Vetor velocidade angular
$\dot{\Omega}$	- Aceleração angular, s^{-2}
Ω_1	- Velocidade de rotação do "cristal", rpm
Ω_2	- Velocidade de rotação do cadinho, rpm
$\Omega_{\text{máx.}}$	- Velocidade de rotação máxima, rpm
Ω_0	- Velocidade de rotação inicial, rpm

ESPECIAIS

$\Delta\nu'$	- Variação na frequência da luz, s^{-1}
Δr	- Parâmetro de discretização, na direção r , cm
ΔS_t	- Variação da entropia térmica por defeito, $\text{cal}^{\circ}\text{K}^{-1}$
Δz	- Parâmetro de discretização, na direção z , cm
Δt	- Incremento de tempo, s
$\frac{D}{Dt}$	- Operador derivada convectiva, $\frac{\partial}{\partial t} + \vec{u} \cdot \vec{\nabla}$
$\vec{\nabla}$	- Operador nabla, $\hat{r} \frac{\partial}{\partial r} + \hat{\phi} \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \phi} + \hat{z} \frac{\partial}{\partial z}$
∇^2	- Operador laplaciano, $\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$
D	- $\vec{\nabla} \cdot \vec{u}$
i, k	- Contadores de incrementos especiais de uma variável, respectivamente nas direções coordenadas r, z



CAPÍTULO 1

INTRODUÇÃO

1.1 - O PROCESSO CZOCHRALSKI E SUA IMPORTÂNCIA NA PRODUÇÃO DE CRISTAIS

O processo Czochralski foi introduzido por Czochralski (1916) não com o objetivo propriamente dito de crescimento de cristais, mas como um método para medir a velocidade de cristalização de metais.

Os princípios do processo Czochralski estão mostrados na Figura 1.1. O material policristalino é fundido dentro de um cadinho. Após o ajuste da temperatura (não muito superior ao ponto de fusão), uma semente do cristal (amostra monocristalina) fixa no extremo inferior de uma haste vertical é então imersa parcialmente dentro do material fundido. A fim de reduzir ou eliminar as deslocções (Seção 1.2.1), a técnica de Dash (1959) é usualmente aplicada, a qual consiste na formação do assim chamado "pescoço do cristal" (Figura 1.1). Em seguida, o diâmetro do cristal é aumentado reduzindo a velocidade de puxamento. O diâmetro do cristal depende principalmente da temperatura da fase líquida e da velocidade de puxamento; assim, para aumentar o diâmetro do cristal a potência ou a velocidade de puxamento é reduzida. A escolha da velocidade de puxamento é geralmente um compromisso entre crescer o cristal tão rápido quanto possível e introduzir defeitos produzidos por esta velocidade. O principal gerador de defeitos, neste caso, é o gradiente de temperatura na interface de crescimento, o qual se for grande resulta em deslocções, e em inclusões se for pequeno (Seção 1.2.1).

Visando reduzir os efeitos de assimetria térmica do sistema e também auxiliar a movimentação do líquido, o cristal simultaneamente com o deslocamento vertical gira em torno de seu eixo de rotação.

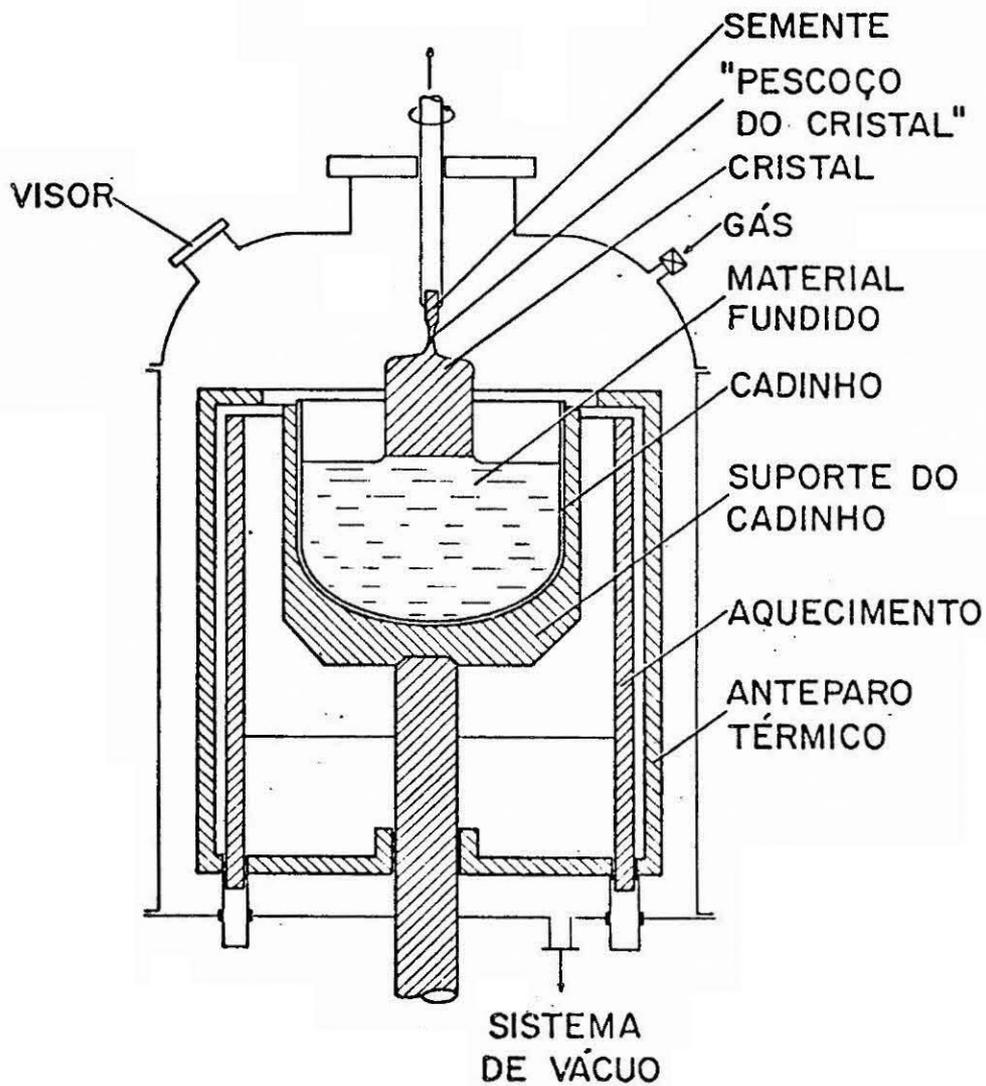


Figura 1.1 - Representação esquemática do processo Czochralski de crescimento de cristais.

O processo Czochralski é suscetível de produzir cristais de qualidade muito boa, mas para tanto requer um excelente controle da velocidade de crescimento e em particular da temperatura. Sofisticados sistemas de controle de temperatura, programas de ajustes da velocidade de rotação e controle automático do diâmetro do cristal têm sido adaptados, com relativo sucesso, aos equipamentos de crescimento de cristais. No entanto, ainda assim os cristais crescidos por este processo apresentam, para determinadas aplicações específicas em Ótica e Eletrônica, sérios problemas de inhomogeneidade originados por flutuações térmicas na interface de crescimento.

Cerca de 80% da produção mundial de silício (Si) tem sido obtida pelo processo Czochralski; sendo crescidos atualmente mais de 3.000 toneladas métricas de silício por ano (Zulehner, 1983). Este processo detém também a maior parte da produção de germânio (Ge), arseneto de gálio (GaAs), fosfetos (GaP e InP), óxidos (LiNbO_3 e Al_2O_3), grânadas e diversos outros monocristais de menor importância comercial.

1.2 - PROBLEMAS NO PROCESSO CZOCHRALSKI

1.2.1 - DEFEITOS ESTRUTURAIS

Em geral, os cristais reais são formados por arranjos periódicos de átomos com unidade estrutural idêntica, dispostos numa rede tridimensional. No entanto, eles contêm imperfeições ou defeitos estruturais que são formados durante o crescimento ou tratamento térmico. Estes defeitos podem ser descritos como descontinuidades da rede espacial e são caracterizados conforme o centro de descontinuidade seja pontual, unidimensional, bidimensional ou tridimensional.

A *vacância* é um defeito pontual caracterizado pela ausência de um átomo¹ num sítio da rede normalmente ocupado. No equilíbrio térmico, para qualquer temperatura $T > 0^{\circ}\text{K}$, haverá sempre um determinado número de vacâncias, devido à tendência do cristal em aumentar sua entropia ou grau de desordem. A concentração de equilíbrio de vacâncias aumenta exponencialmente, com a temperatura, de acordo com (Apêndice A)

$$\frac{n_v}{N} \approx e^{\frac{\Delta S_t}{K}} e^{-\frac{\epsilon_v}{KT}} \quad (1.1)$$

onde n_v é o número de vacâncias, N o número de átomos, ΔS_t a variação na entropia térmica por vacância, K a constante de Boltzmann, ϵ_v a energia de formação por vacância e T a temperatura absoluta.

Um outro tipo de defeito pontual que pode ser tratado num modo similar ao anterior é o *defeito Frenkel*. Este defeito é composto de uma vacância mais um átomo intersticial (Figura 1.2). O número de defeitos Frenkel, em equilíbrio à temperatura T , é dado por (Apêndice A)

¹ Embora exemplificado de forma simples, uma vacância também pode ser caracterizada, numa estrutura cristalina mais complexa, pela ausência de um íon ou molécula.

$$n_F \approx (NN')^{1/2} e^{\Delta S_t/2K} e^{-\epsilon_F/2KT}, \quad (1.2)$$

onde N é o número de átomos, N' o número de posições intersticiais, ΔS_t a variação na entropia térmica por defeito Frenkel e ϵ_F a energia de formação por defeito Frenkel.

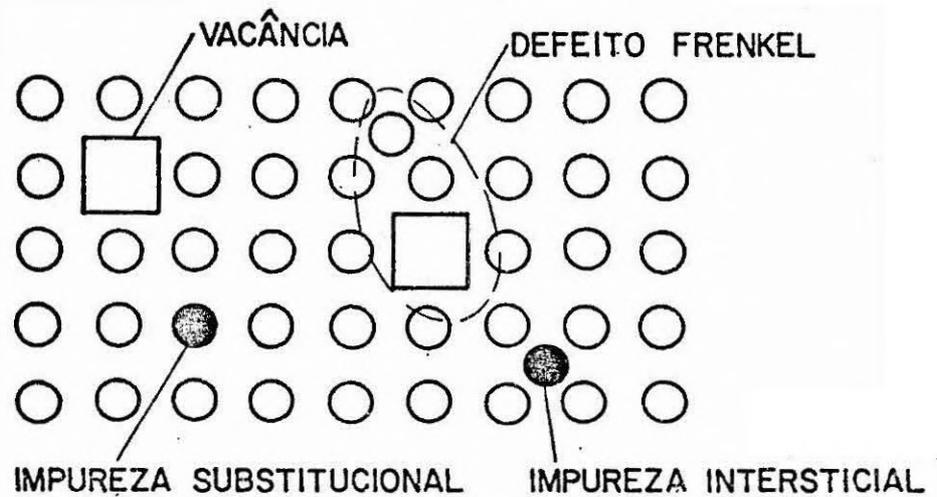


Figura 1.2 - Ilustração bidimensional de um sólido cristalino simples, indicando algumas das possíveis imperfeições pontuais.

Átomos de elementos estranhos (impurezas ou dopantes) incorporados à rede são também defeitos pontuais. Estes átomos estão presentes em qualquer cristal e sua concentração vai depender do coeficiente de distribuição efetivo (k) e da concentração do material policristalino (utilizado no crescimento); a concentração máxima permitida estará limitada pela solubilidade de equilíbrio no sólido. Os átomos de impurezas (ou dopantes) são *substitucionais*, isto é, ocupam o lugar de um átomo da rede, mas podem ser *intersticiais* (Figura 1.2). Qualquer uma destas circunstâncias é um desvio da regularidade; a implicação deste des

vio vai depender da quantidade de distorções resultantes. Embora certos tipos de impurezas e imperfeições afetem drasticamente o tempo de vida útil dos semicondutores, algumas vezes elas são necessárias para otimizar a concentração de portadores. Em geral uma distribuição uniforme de dopantes e impurezas é requerida para a confecção de componentes eletrônicos.

As *deslocações* são defeitos unidimensionais originados por tensões no cristal. Estes defeitos são termodinamicamente instáveis, visto que os átomos são deslocados de suas posições de equilíbrio, aumentando assim a energia livre da rede.

A *deslocação do tipo aresta* ("edge") pode ser descrita por um plano de átomos extras introduzido parcialmente, através de uma seção transversal, num cristal perfeito. A linha que limita a extremidade inferior do plano (de átomos) inserido é chamada linha de deslocação do tipo aresta e, neste caso, ela é sempre normal ao vetor de Burgers (\vec{b}) (Figura 1.3).

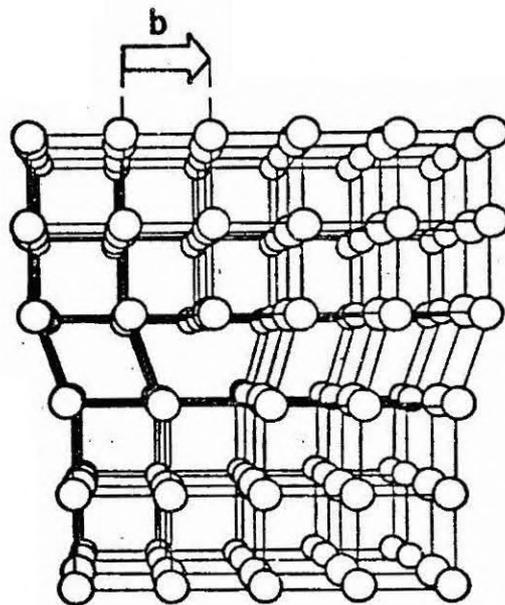


Fig. 1.3 - Representação estrutural de uma deslocação do tipo aresta, numa rede cúbica simples.

FONTE: Kittel (1971), p. 675.

A configuração de uma *deslocação do tipo hlice* ("screw") pode ser imaginada como se metade do bloco, mostrado na Figura 1.4 fosse cortado verticalmente e tensionado na direção do vetor de Burgers. Neste caso, como se pode observar, o vetor \vec{b} é paralelo à linha de deslocação. Frequentemente as deslocações não são inteiramente do tipo aresta ou hlice, mas se apresentam como combinações intermediárias destas duas formas.

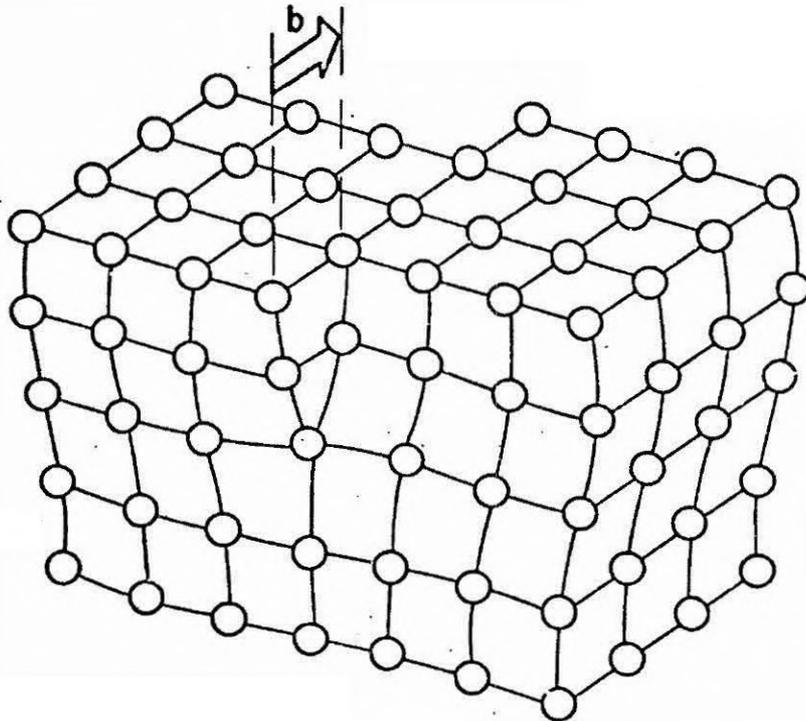


Fig. 1.4 - Representação estrutural de uma deslocação do tipo hlice, numa rede cúbica simples.

Adaptado de Hull (1965), p.17.

O *contorno de pequeno ângulo* é uma imperfeição bidimensional que separa duas orientações diferentes num cristal, e esta de orientação difere de uma pequena rotação θ' . Em geral, os contornos de pequeno ângulo podem ser descritos por arranjos convenientes de deslocações. Um *contorno do tipo inclinado* ("tilt") é composto de deslocações do tipo aresta uma sobre as outras no contorno. O ângulo de inclinação será $\theta' = b/h$, onde b é o módulo do vetor de Burgers e h é a dis

tância vertical média entre as deslocções (a situaçõ mais simples mostrada na Figura 1.5 raramente ocorre na prática, dado que o contorno de pequeno ângulo pode ter uma componente normal ao plano do diagrama). Um outro tipo de contorno de pequeno ângulo é o torcido ("twist"), o qual pode ser descrito em termos de, no mínimo, dois conjuntos de deslocções paralelas do tipo hélice, situados no contorno.

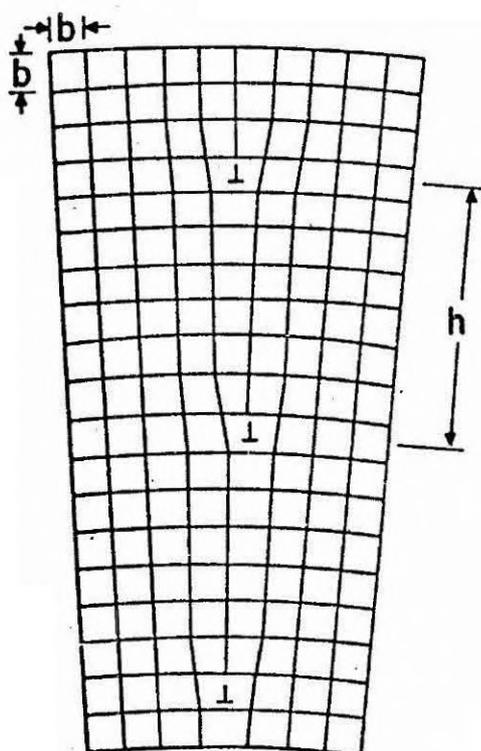


Fig. 1.5 - Um contorno do tipo inclinado simples, numa rede cúbica, formado por deslocções do tipo aresta, distantes entre si de h .

FONTE: Hannay (1973), p. 316.

Os defeitos de empilhamento ("*stacking faults*") são outros tipos de imperfeições bidimensionais. Estas imperfeições resultam do empilhamento de planos atômicos fora da seqüência, enquanto a rede é perfeita de cada lado dos defeitos. Por exemplo, caso se imagine uma seqüência do empilhamento descrita como ABCABCABC ..., por um defeito de empilhamento a seqüência pode mudar para ABCABABCA ... O defeito neste caso é devido ao fato de o plano A de átomos vir após o segundo

B. Tais defeitos de empilhamento podem ocorrer devido à agregação irregular dos átomos durante o crescimento ou resultarem da dissociação de uma deslocação em duas parciais.

O "*twin boundary*" é uma imperfeição bidimensional formada também pela mudança da seqüência de empilhamento, mas neste caso age como um plano de simetria, por exemplo ABCABCBACBA.

A imperfeição bidimensional mais simples talvez seja aquela originada pela associação de vacâncias ("*vacancy cluster*"). Isto é, duas vacâncias podem se unir para formar uma bivacância. Eventualmente uma terceira vacância pode ser incorporada à bivacância, dando origem a uma trivacância, e assim por diante. No entanto, se esta associação de vacâncias exceder suas dimensões de estabilidade ela se aniquila formando uma curva fechada de deslocações. Vacâncias adicionais podem concentrar-se sobre as curvas de deslocações e dependendo de suas dimensões, é possível visualizá-las por microscopia eletrônica de transmissão.

Inclusões são regiões, dentro do cristal, ocupadas por diferentes fases, exceto esta que compõe a matriz. As inclusões podem ser formadas durante o crescimento devido ao resfriamento constitucional de uma camada altamente concentrada (próxima à interface) seguida pelo crescimento rápido de uma outra camada menos concentrada, ou devido à captura de partículas estranhas à composição do cristal (Tiller et alii, 1953; Elwell and Scheel, 1975). As inclusões podem também resultar de precipitados, durante o subsequente resfriamento do cristal à temperatura ambiente, decorrente do decréscimo da solubilidade do soluto no cristal.

1.2.2 - INOMOGENEIDADE

O crescimento de monocristais a partir da fusão, como no caso do processo Czochralski, apresenta sérios problemas de inhomogeneidade. As inhomogeneidades apresentam-se na forma de estrias ou camadas (paralelas à interface de crescimento) com variações, regulares ou não, de composição. Estas variações podem ser constituídas pela distribuição inhomogênea de componentes (soluções sólidas), dopantes, impurezas residuais ou defeitos.

A incorporação de elementos de soluto no cristal pode ser caracterizada por um coeficiente de distribuição. Em se tratando de uma solução binária que contém duas fases (sólida e líquida) em equilíbrio à temperatura T , este coeficiente de distribuição é obtido diretamente do diagrama de fase, ou seja, considerando a porção do diagrama de fase representado na Figura 1.6.

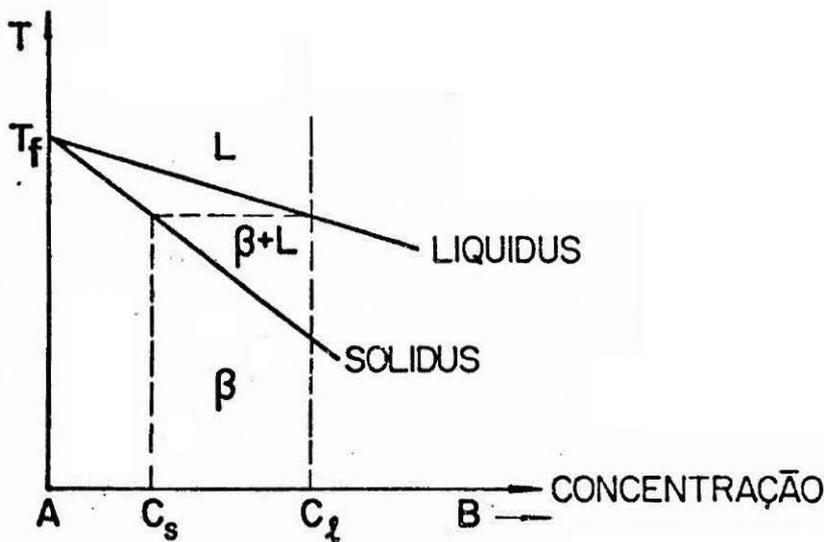


Figura 1.6 - Parte de um diagrama de fase binário.

O coeficiente de distribuição de equilíbrio (k_0) é dado por

$$k_0 = \frac{C_s}{C_l}, \quad (1.3)$$

onde C_s é a concentração (em unidade de massa por unidade de volume) de B em β e C_l a concentração de B em L .

Se a adição de soluto abaixar o ponto de fusão da solução, então $k_0 < 1$, e inversamente se o ponto de fusão aumentar, então $k_0 > 1$. Eventualmente se k_0 for igual à unidade não haverá segregação e, neste caso, $C_s = C_l$.

Quando $k_0 < 1$ e a solidificação ocorre muito vagarosamente, a rejeição do soluto pelo sólido enriquece o líquido, e assim o sólido formado nos últimos estágios torna-se progressivamente mais rico. A concentração C_s por fração solidificada será dada por (Apêndice B)

$$C_s(x) = k_0 C_0 \left(1 - \frac{x}{x_1}\right)^{(k_0 - 1)} \quad \text{para } x < x_1, \quad (1.4)$$

onde C_0 representa a concentração inicial da fase líquida. Neste caso, supõe-se que a difusão no sólido é desprezível e o conceito de equilíbrio $C_s(x) = k_0 C_l(x)$ é usado durante todo o processo.

No entanto, se a solidificação não for vagarosa os átomos do soluto serão rejeitados pelo avanço do sólido a uma velocidade maior que a difusão destes átomos na fase líquida (Figura 1.7). Assim, um gradiente de concentração se desenvolve à frente da interface de crescimento, e esta região enriquecida determina a taxa de incorporação do soluto no sólido.

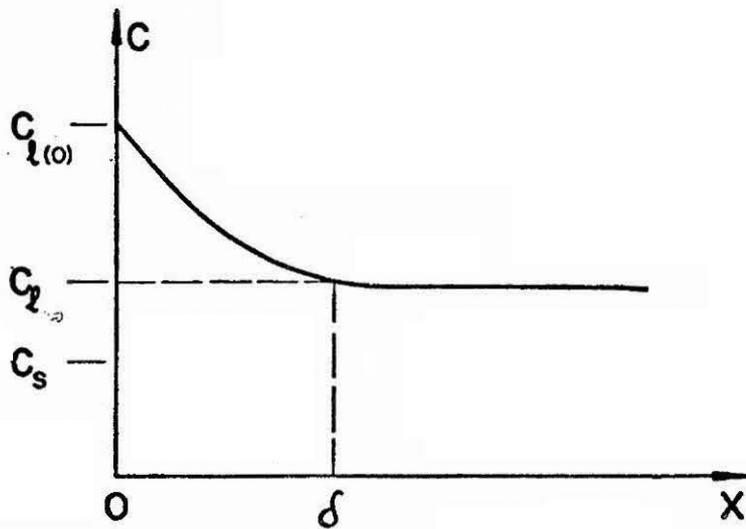


Figura 1.7 - Distribuição no estado estacionário da concentração de soluto no líquido próximo à interface de solidificação.

Burton, Prim e Slichter (1953) definiram um coeficiente de distribuição efetivo (k) que descreve toda a reação de incorporação do soluto no cristal durante o crescimento no estado estacionário. O cálculo de k está baseado sobre o postulado de Nernst (1904), no qual a reação química na interface é instantânea, portanto a velocidade da reação sólido-soluto-líquido é governada pelo processo de transporte por difusão. Assim, o coeficiente de distribuição efetivo é dado pela assim conhecida equação B-P-S (Apêndice C)

$$k = \frac{k_0}{k_0 + (1 - k_0) e^{-\frac{f \cdot \delta}{D}}}, \quad (1.5)$$

onde k_0 é o coeficiente de equilíbrio, f a velocidade de crescimento, δ a espessura da camada limite de difusão, e D o coeficiente de difusão do soluto.

Embora a incorporação de elementos de soluto no cristal dependa do processo de transporte (fase líquida), tem sido reconhecido que a formação de estrias no processo Czochralski origina-se de flutuações térmicas na interface de crescimento, as quais são causadas por uma forma de instabilidade convectiva sobreposta à convecção estacionária (Müller and Wilhelm, 1964). Com vistas nisso, a redução da convecção, durante o processo de crescimento, é uma estratégia que vem sendo pesquisada, por exemplo, com a utilização de campos magnéticos ou microgravidade.

Examinando a equação 1.5, Scheel e Schulz-DuBois (1982) verificaram que para processos de crescimento limitado por difusão (crescimento por fluxo) f é inversamente proporcional a δ . Então flutuações em δ não influenciam o termo exponencial, de modo que k não se altera. Por outro lado, flutuações na velocidade de crescimento devido a flutuações de temperatura não são compensadas desse modo. Em consequência elas produzem flutuações em k as quais se manifestam na forma de estrias. Assim as oscilações hidrodinâmicas, na interface, são resultam em inhomogeneidades se acompanhadas de flutuações térmicas. Um processo similar ocorre no crescimento por fusão, isto é, a redução da camada limite térmica ocasiona o aumento da velocidade de crescimento.

Resultados recentes, obtidos no crescimento de soluções sólidas (Scheel and Sommerauer, 1983), provam que as estrias podem ser eliminadas com a utilização de convecções forçadas aliadas a um controle extremamente preciso de temperatura e um reduzido gradiente térmico bem ajustado.

1.3 - O PAPEL DA HIDRODINÂMICA NO PROCESSO CZOCHRALSKI

1.3.1 - OBSERVAÇÕES DURANTE O CRESCIMENTO DE CRISTAIS

No processo Czochralski tanto o cristal quanto o cadinho são submetidos, em geral, a velocidades de rotação constantes; em muitos casos somente o cristal apresenta movimento rotacional. Estas velocidades têm sido otimizadas intuitivamente ou através de crescimentos sistemáticos para cada tipo de cristal. A interface de crescimento é muito sensível à velocidade de rotação e ao diâmetro do cristal. A altura da fase líquida é também um outro parâmetro que pode modificar o perfil da interface, por exemplo no crescimento de granadas. Brandle (1982) observou uma transição no formato da interface para uma determinada altura crítica da fase líquida, presumivelmente devido à mudança do padrão de fluxo nesta fase. No entanto, o formato da interface pode ser mantido aproximadamente constante com a utilização de um programa¹ de velocidade conveniente, no qual a rotação do cristal é ajustada durante o crescimento.

A formação de estrias, contudo, é um problema que não pôde ser resolvido através da tecnologia convencional do processo Czochralski. Foi observado por Kim et alii (1972) não somente a existência de flutuações na velocidade de crescimento, mas também de velocidades negativas, isto é, refusão. Esta observação foi por eles demonstrada através da diferença entre as velocidades de crescimento microscópica (instantânea) e macroscópica (média) e a correlação destas velocidades na formação de estrias. A solução deste problema por convecção forçada ou reduzida será discutida na Seção 1.3.4.

A otimização dos parâmetros de crescimento através de um modelo bidimensional é insuficiente, requerendo portanto uma simulação

¹ Este programa só pode ser utilizado se o diâmetro do cristal for controlado automaticamente, caso contrário o diâmetro mudará com a velocidade de rotação do cristal.

numérica tridimensional. Porém, devido à complexidade do problema, mesmo sob condições de contorno idealizadas e com o uso do maior centro de computação da Europa, este processo é muito demorado, visto que o tempo mínimo de CPU por experimento (para uma determinada combinação de parâmetros) é da ordem de um dia. Assim, a otimização sistemática de todos os parâmetros requereria diversas centenas de experimentos e, portanto, isto seria inviável numericamente. Todavia, as simulações numéricas são úteis para fornecer informações detalhadas da complexidade hidrodinâmica, as quais podem levar a um melhor entendimento do processo de crescimento de cristais.

1.3.2 - ESTUDOS EM SIMULAÇÃO NUMÉRICA

O uso de simulação numérica para investigar o comportamento da fase líquida no processo Czochralski começou na década passada com um método de simulação no estado estacionário. Este método foi introduzido por Kobayashi e Arizumi (1970).

A importância de usar um método dependente do tempo para simular a hidrodinâmica do processo Czochralski foi percebida por C.C. Shir. Esta idéia foi inicialmente motivada para permitir a simulação dos padrões de fluxo gerados pela técnica ACRT ("ACCELERATED CRUCIBLE ROTATION TECHNIQUE"), e desde então o trabalho publicado por Langlois e Shir (1977) tem sido sinônimo de modelo computacional.

Os estudos hidrodinâmicos do processo Czochralski realizados por meio de simulação numérica estão baseados em configurações idealizadas, obtidas através de aproximações impostas sobre as condições de contorno. Tanto a interface de crescimento quanto a superfície livre (da fase líquida) são consideradas planas e estacionárias e, em geral, a superfície livre é tratada como uma parede rígida, e os efeitos de tensão superficial são ignorados. Os limites físicos do cadinho são especificados a temperaturas constantes e a decisão em considerá-los com ou sem deslizamento dependerá da relação entre o parâmetro de discretização espacial utilizado e a espessura da camada limite produzida num fluido real (Mihelčić et alii, 1981).

A evolução temporal do fluxo é descrita matematicamente pela equação de Navier-Stokes supondo o movimento rotacionalmente simétrico (desprezando as instabilidades dinâmicas). A compressibilidade do fluido é desprezada, exceto nos termos de convecção natural, supondo os coeficientes de transporte constantes.

Estudos recentes em simulação numérica (Mihelčić et alii, 1981, 1982) mostraram que a técnica ACRT causa a mistura completa do lí

quido somente no caso de isorrotação (cristal e cadinho com mesmo sentido de rotação), a despeito das predições intuitivas que tenderiam preferencialmente ao arranjo contra-rotacional. Os resultados obtidos na isorrotação (para as condições específicas dos estudos de Mihelčić et alii (1981, 1982)) mostraram que a região indesejável com superfície estagnante sob o cristal é formada apenas durante a fase de aceleração, enquanto a desaceleração causa o seu desaparecimento.

1.3.3 - ESTUDOS EM VISUALIZAÇÃO DE FLUXO

A necessidade de um conhecimento melhor e a dificuldade de visualização do comportamento da fase líquida durante o processo Czochralski têm motivado diversos pesquisadores à realização de modelos experimentais de simulação hidrodinâmica.

Utilizando um líquido simulador transparente e um cadinho estacionário, Goss e Adlington (1959) observaram, por meio de tinta, os efeitos da rotação do cristal imerso no líquido. Com isto, eles confirmaram que o líquido imediatamente próximo à superfície do disco é espalhado radialmente sob a ação da aceleração centrífuga e que o líquido espalhado é repostado por um fluxo axial em direção ao disco.

Por meio de um sistema de difícil visualização, Turovskii e Mil'vidskii (1962) estudaram o comportamento de um líquido aquecido em rotação. Eles observaram que, neste caso, os fluxos originados pela rotação do cristal e do cadinho estão em oposição, e por esta razão uma região de intensa mistura forma-se sob o cristal.

Carruthers e Nassau (1968) realizaram uma série de experimentos (à temperatura ambiente) utilizando uma solução aquosa de glicerina (1:1) no interior de um cadinho de fundo plano, e em contato com a superfície livre da solução foi usado um disco de alumínio que representa o cristal. O cristal e o cadinho (coaxialmente dispostos) foram submetidos a velocidades de rotação constantes, no mesmo sentido (isorrotação) ou em sentidos opostos (contra-rotação). Os padrões de fluxo foram visualizados por meio de tinta (de densidade neutra) injetada através de uma cânula, no interior da solução. Deste modo eles observaram que quando a velocidade de rotação do cadinho é suficientemente diferente da do cristal, forma-se uma região isolada por uma superfície de estagnação sob o cristal (como predito pelo teorema de Taylor-Proudman). Fora desta região, o líquido gira como um corpo sólido, enquanto dentro da região um fluxo interno é observado. As superfícies de estagnação, as quais evitam a mistura completa do líquido, existem para todos os ca

tos, exceto quando a velocidade de rotação do cadinho é muito pequena em relação à velocidade do cristal. Quando o cristal e o cadinho giram na mesma direção, uma única superfície de estagnação separa duas regiões que não se misturam; durante a contra-rotação pode haver duas superfícies de estagnação e três regiões isoladas (Seção 2.4).

Através de um modelo idealizado, e utilizando diferentes técnicas de observação, Jones (1983a) simulou a configuração do processo Czochralski convencional, levando em consideração também os efeitos térmicos. Sob as bases desse modelo, Jones (1983a) investigou a ocorrência de linhas radiais, conhecidas como "spoke lines", as quais são algumas vezes observadas (sobre a superfície líquida) durante o crescimento de óxidos e fluoretos. Ele propôs que estes padrões são causados por instabilidades de convecção natural e não por efeitos de tensão superficial, como sugerido pela simulação de Miller e Pernel (1982), o que demonstra a complexidade do comportamento hidrodinâmico do processo Czochralski, até agora apenas parcialmente entendido.

1.3.4 - ALTERNATIVAS PARA SOLUCIONAR OS PROBLEMAS DO PROCESSO CZOCHRALSKI

Os cristais crescidos pelo processo Czochralski apresen tam problemas característicos de flutuações na velocidade de crescimento, as quais resultam em inomogeneidades. Mudanças consideráveis na velocidade de crescimento originam variações significantes na concentração do cristal, assim a incorporação de um sistema de controle automati co para monitorar a constância do diâmetro (cristal) é um pré-requisito para a aquisição de cristais de alta qualidade.

As flutuações na velocidade de crescimento têm sido atribu idas às instabilidades térmicas na interface sólido/líquido. As razões da presença destas instabilidades podem ser divididas em três categorias, a saber:

1) Instabilidade mecânica pela rotação do çadinho na presença de assimetria térmica ou excentricidade do eixo de rotação do cristal com relação ao centro térmico do material fundido. Estas instabilidades podem ser reduzidas com a utilização de equipamentos de alta qualidade, cuidadosamente projetados e com ajustes mecânicos de precisão, de modo a assegurar a simetria térmica do sistema. Um exemplo notável de simetria térmica foi dado por Xing et alii (1982) usando um "heat pipe".

2) Variação da potência elétrica fornecida durante o crescimento. A minimização deste problema requer a utilização de um controlador de temperatura de alta precisão constituído por um controlador P.I.D. (com parâmetros otimizados) e fontes estabilizadoras de potência.

3) Flutuação térmica do material transportado à interface por convecção. Diferentes alternativas têm sido sugeridas para reduzir estas flutuações. Visto que as flutuações térmicas estão relacionadas com instabilidades convectivas, a estratégia utilizada, por diversos pesquisadores, para superar este problema foi a de reduzir a convecção, seja por condições de microgravidade ou por amortecimento magnético. Estas alternativas foram revistas por Scheel e Sielawa (1985) através da argumenta ção sobre a microgravidade, amortecimento magnético e técnica ACRT.

Microgravidade - O programa de crescimento de cristais no espaço foi motivado pela correlação existente entre as instabilidades de convecção natural e a formação de estrias, como também por um conhecimento melhor sobre os efeitos de tensão superficial (convecção de Marangoni) no processo de crescimento na ausência de convecção natural.

Embora a microgravidade reduza a convecção natural, as indesejáveis superfícies de estagnação (sob o cristal) e os efeitos de tensão superficial não podem ser eliminadas. Scheel e Sielawa (1985) acrescentam que a contribuição da convecção natural sobre as flutuações térmicas (na interface) é muito pequena quando comparada aos efeitos dos demais fluxos presentes no processo Czochralski convencional, pelo menos na importante área de produção de semicondutores.

Amortecimento magnético - A aplicação de um campo magnético nos processos de crescimento por fusão foi sugerido (Utech and Flemings, 1966; Hurle, 1966) para amortecer as oscilações convectivas. A eficiência do amortecimento convectivo é definido pelo número de Hartmann (Ha). Para a maioria dos metais líquidos e semicondutores $Ha = 2,62 \cdot 10^{-2} H_0 x$, onde H_0 é o campo magnético (em gauss) e x a distância (em cm) sobre a qual o campo atua. Têm sido aplicados campos magnéticos, tipicamente da ordem de 1200 a 3000 gauss, no crescimento de cristais de silício e arseneto de gálio. Com vistas na melhora significativa verificada na homogeneidade dos cristais sob amortecimento magnético já estão sendo desenvolvidos comercialmente equipamentos de crescimento usando campo magnético.

Usando uma estratégia diferente, Scheel e Schulz-DuBois (1971) sugeriram a técnica ACRT para reduzir as flutuações térmicas na interface de crescimento. Em contraste às alternativas anteriores, a técnica ACRT visa a convecção forçada para minimizar as distribuições inhomogêneas (temperatura e concentração) na fase líquida, e requer, por ordens de magnitude, menor investimento comparado à microgravidade e ao amortecimento magnético.

Técnica ACRT - A técnica ACRT foi sugerida como um método de homogeneização da fase líquida, no processo de crescimento por fluxo, e posteriormente aplicada por Scheel e Müller-Krumbhaar (1980) para o processo Czochralski. Nesta técnica o movimento de rotação do cadinho (e do cristal) é acelerado e desacelerado com períodos preestabelecidos, podendo-se inverter ou não o sentido de rotação. O cristal e o cadinho podem ter sentidos opostos de rotação (contra-rotação) ou mesmo sentido (isorrotação).

Embora a técnica ACRT (no processo Czochralski) já seja aplicada na produção de cristais de aplicações específicas (silício com concentração de oxigênio aproximadamente constante, e soluções sólidas de granadas), um conhecimento mais profundo de seu desempenho é requerido para uma vasta aplicação.

Em adição, experimentos provisionais de simulação (Scheel, 1970) e de simulação numérica (Seção 1.3.2) indicaram que a técnica ACRT pode homogeneizar a fase líquida e, sob condições específicas, evitar a formação de superfícies de estagnação no processo Czochralski. Com vistas neste potencial um estudo sistemático dos efeitos da técnica ACRT é justificável, como será discutido na próxima seção.

1.4 - OBJETIVO DESTE TRABALHO

Um estudo completo da hidrodinâmica do processo Czochralski sob os efeitos do movimento de rotação acelerado do cadinho (e/ou do cristal) é um pré-requisito à aplicação, bem sucedida da técnica ACRT na produção de cristais de alta qualidade. A otimização dos parâmetros, através de experimentos sistemáticos de crescimento de cristais ou de simulação numérica tridimensional, requereria um enorme esforço devido ao grande número de parâmetros envolvidos.

Neste trabalho um simples experimento de visualização de fluxo foi planejado de modo a simular a configuração básica do processo Czochralski de crescimento e permitir a realização de experimentos sistemáticos à temperatura ambiente. O aparelho foi projetado de forma a permitir o estudo dos diferentes padrões de fluxo originados pelo movimento de rotação acelerado do cadinho e/ou do "cristal" e a avaliação do desempenho da convecção forçada como meio de homogeneização da fase líquida.

As investigações são realizadas, alternativamente, utilizando um cadinho de fundo côncavo e outro de fundo plano, sob movimentos de rotação acelerados e/ou constantes com magnitudes ajustáveis e com períodos de aceleração/desaceleração variáveis. O "cristal" pode girar no mesmo sentido do cadinho ou em sentido oposto. Estes parâmetros são otimizados por meio de experimentos sistemáticos de simulação hidrodinâmica e observados através de tinta injetada ou por espalhamento de luz por partículas em suspensão. O comportamento do fluido é visualizado diretamente ou por videogravação, e sob condições especiais é possível, utilizando o método Schlieren, evidenciar pequenas variações do índice de refração e deste modo acompanhar o processo de homogeneização da fase líquida.

Num passo seguinte, os resultados deste trabalho devem ser transferidos para as condições reais de crescimento através de simulação numérica.

CAPÍTULO 2

ASPECTOS TEÓRICOS DA HIDRODINÂMICA NO PROCESSO CZOCHRALSKI

2.1 - DEFINIÇÃO DAS CONDIÇÕES DE CONTORNO

Os aspectos teóricos revistos neste trabalho serão discutidos em termos de configuração geométrica idealizada conforme esquematizada na Figura 2.1. Os parâmetros R , r e H denotam respectivamente o raio do cadinho, o raio do cristal e a altura da fase líquida.

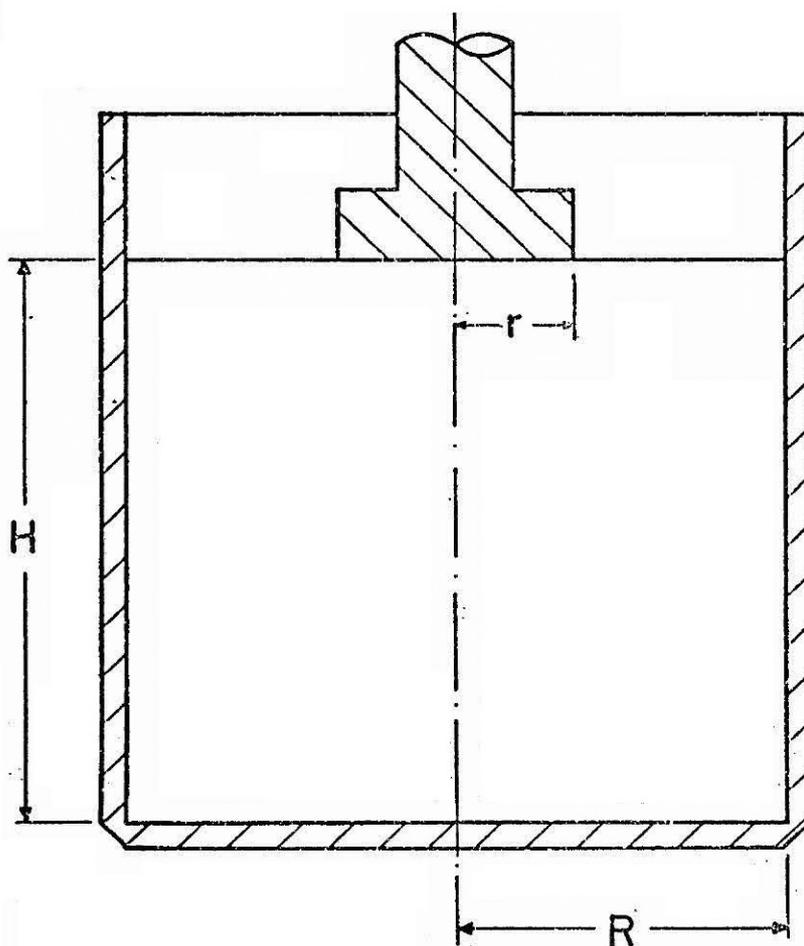


Figura 2.1 - Modelo geométrico idealizado do processo Czochralski de crescimento.

A superfície livre do líquido é considerada horizontal desprezando a deformação parabólica (periódica) causada pela variação da força centrífuga durante a aceleração/desaceleração do cadinho. A interface entre o sólido e o líquido apresenta-se com um perfil plano, o que caracteriza uma condição ideal de crescimento, embora esta condição possa ser sensivelmente desviada durante um crescimento real. Não está sendo considerado também que, sob condições normais de crescimento, o contato entre o cristal e o líquido é mantido ligeiramente acima do nível da superfície livre com a formação de uma coluna líquida sob o cristal (menisco).

Este modelo não leva em conta a ação de gradientes térmicos. O fluido é suposto isotérmico e homogêneo, de forma que a densidade " ρ " e a viscosidade " μ " são consideradas constantes. O líquido é movimentado exclusivamente por convecção forçada (movimento de rotação acelerado/desacelerado do cristal e/ou cadinho) desprezando a existência de convecção natural e convecção de Marangoni (gradiente de tensão superficial).

O movimento do fluido é descrito num sistema de coordenadas cilíndricas (r, ϕ, z) , cuja base é dada pela terna de vetores unitários $(\hat{r}, \hat{\phi}, \hat{z})$. Em adição, $\vec{r} = (r, \phi, z)$ denota o vetor posição e $\vec{u} = (u, v, w)$ o vetor velocidade, sendo u a componente radial, v a componente azimutal e w a componente vertical.

As condições de contorno são definidas supondo o líquido (newtoniano) como um fluido viscoso e, neste caso, a condição de aderência às fronteiras sólidas deve ser satisfeitas. A superfície do cristal em contato com o líquido é considerada também como uma parede rígida com aderência, e as condições de contorno são escritas como segue:

$$r = R, \quad 0 < z < H \rightarrow u = 0, \quad v = \Omega_2 R, \quad w = 0;$$

$$0 < r < R, \quad z = 0 \rightarrow u = 0, \quad v = \Omega_2 r, \quad w = 0;$$

$$0 < r < r, \quad z = H \rightarrow u = 0, \quad v = \Omega_1 r, \quad w = 0;$$

$$r < r < R, \quad z = H \rightarrow \vec{u} \cdot \hat{z} = 0,$$

onde

Ω_1 = velocidade de rotação do cristal e

Ω_2 = velocidade de rotação do cadinho.

Deste modo, a equação de Navier-Stokes, a ser vista na próxima seção, ficará determinada fisicamente mediante as condições de contorno especificadas acima.

2.2 - FORMULAÇÃO MATEMÁTICA DO FLUXO NO PROCESSO CZOCHRALSKI

A evolução temporal do fluxo de um fluido viscoso e incompressível é governada pela equação de Navier-Stokes,

$$\rho \frac{D\vec{u}}{Dt} = \vec{F} - \vec{\nabla}P + \mu \nabla^2 \vec{u}, \quad (2.1)$$

onde ρ é a densidade, $\frac{D\vec{u}}{Dt}$ a aceleração do fluido em relação a um referencial inercial, \vec{F} as forças externas, P a pressão e μ a viscosidade dinâmica.

Esta equação é uma expressão da segunda lei de Newton; a unidade dos seus termos é força por unidade de volume e representa a conservação de quantidade de movimento do sistema.

Reescreve-se a equação de Navier-Stokes em termos de um sistema de coordenadas não-inercial (movimento de rotação acelerado).

$$\rho \left[\frac{D\vec{u}'}{Dt} + \frac{\partial \vec{\Omega}'}{\partial t} \times \vec{r}' + 2\vec{\Omega}' \times \vec{u}' + \vec{\Omega}' \times (\vec{\Omega}' \times \vec{r}') \right] = \vec{F} - \vec{\nabla}P + \mu \nabla^2 \vec{u}', \quad (2.2)$$

onde $D\vec{u}'/Dt$ é a aceleração do fluido em relação ao sistema em rotação, $\frac{\partial \vec{\Omega}'}{\partial t} \times \vec{r}'$ a aceleração devida à variação da velocidade angular, $2\vec{\Omega}' \times \vec{u}'$ a aceleração de Coriolis e $\vec{\Omega}' \times (\vec{\Omega}' \times \vec{r}')$ a aceleração centrífuga.

O termo $D\vec{u}'/Dt$ é chamado derivada convectiva e pode ser escrito na forma

$$\frac{D\vec{u}'}{Dt} = \frac{\partial \vec{u}'}{\partial t} + (\vec{u}' \cdot \vec{\nabla}) \vec{u}'. \quad (2.3)$$

A conservação de massa é expressa matematicamente através da equação

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \rho \vec{\nabla} \cdot \vec{u}' = 0, \quad (2.4)$$

a qual assegura a não-criação, nem a destruição de massa (na ausência de fontes ou sumidouros). Como o fluido é incompressível $\frac{\partial \rho}{\partial t} = 0$, e a conservação de massa é expressa simplesmente por

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{u}' = 0. \quad (2.5)$$

Levando em conta a Condição 2.5, e com o auxílio da Identidade E.2, o termo viscoso $\mu \nabla^2 \vec{u}'$ é dado por $-\mu \vec{\nabla} \times (\vec{\nabla} \times \vec{u}')$. Com vistas nisto a equação 2.2 pode ser reescrita na forma

$$\begin{aligned} \frac{\partial \vec{u}'}{\partial t} + (\vec{u}' \cdot \vec{\nabla}) \vec{u}' + \frac{\partial \vec{\Omega}'}{\partial t} \times \vec{r}' + 2\vec{\Omega}' \times \vec{u}' + \vec{\Omega}' \times (\vec{\Omega}' \times \vec{r}') = \\ = \vec{f} - \frac{1}{\rho} \vec{\nabla} P - \nu \vec{\nabla} \times (\vec{\nabla} \times \vec{u}'), \end{aligned} \quad (2.6)$$

onde $\nu = \mu/\rho$ é a viscosidade cinemática e $\vec{f} = \vec{E}/\rho$ a força gravitacional por unidade de massa.

Sabendo que o campo gravitacional é conservativo, \vec{f} pode ser escrito como

$$\vec{f} = -\vec{\nabla} \phi, \quad (2.7)$$

onde $\phi = -\frac{G m m_T}{d}$ é a função potencial. Como a força centrífuga também pode ser escrita como o gradiente de um escalar,

$$\vec{\Omega}' \times (\vec{\Omega}' \times \vec{r}') = \frac{1}{2} \vec{\nabla} (\vec{\Omega}' \times \vec{r}') \cdot (\vec{\Omega}' \times \vec{r}'), \quad (2.8)$$

a força gravitacional e a centrífuga, expressas respectivamente sob a Forma 2.7 e 2.8, podem ser combinadas com a pressão para compor a pressão reduzida

$$p = P + \rho\Phi - \frac{1}{2} \rho (\vec{\Omega}' \times \vec{r}') \cdot (\vec{\Omega}' \times \vec{r}'), \quad (2.9)$$

a qual \bar{e} utilizada para simplificar a Equação 2.6, que fica:

$$\frac{\partial \vec{u}'}{\partial t} + (\vec{u}' \cdot \vec{\nabla}') \vec{u}' + \frac{\partial \vec{\Omega}'}{\partial t} \times \vec{r}' + 2\vec{\Omega}' \times \vec{u}' = -\frac{1}{\rho} \vec{\nabla}' p - \nu \vec{\nabla}' \times (\vec{\nabla}' \times \vec{u}'). \quad (2.10)$$

Considerando L , Ω^{-1} e U , respectivamente, o comprimento característico, o tempo característico e a velocidade característica de perturbação de um determinado movimento, as seguintes coordenadas e variáveis adimensionais são introduzidas:

$$\vec{r}' = L\vec{r}, \quad t = \Omega^{-1}t, \quad \vec{u}' = U\vec{u}, \quad p = \rho\Omega ULp, \quad \vec{\Omega}' = \Omega^2\vec{\Omega}$$

$$\vec{\Omega} = \Omega\vec{z} \text{ (onde } \Omega = \Omega_{\text{máximo}}\text{)}.$$

Assim, a Equação 2.10 fica

$$\frac{\partial \vec{u}}{\partial t} = -\epsilon (\vec{u} \cdot \vec{\nabla}) \vec{u} - \epsilon^{-1} \dot{\Omega} \vec{z} \times \vec{r} - 2\vec{z} \times \vec{u} - \vec{\nabla} p - E \vec{\nabla} \times (\vec{\nabla} \times \vec{u}), \quad (2.11)$$

onde

$$\epsilon = \frac{U}{\Omega L} \frac{\text{(aceleração convectiva)}}{\text{(aceleração de Coriolis)}} \text{ é o número de Rossby e}$$

$$E = \frac{\nu}{\Omega L^2} \frac{\text{(força viscosa)}}{\text{(força de Coriolis)}} \text{ é o número de Ekman.}$$

Os detalhes que envolvem a obtenção da Equação 2.11 a partir da Equação 2.10, e dos números adimensionais ϵ e E , estão indicados no Apêndice D.

Escrevendo a Equação 2.11 nas direções \hat{r} , $\hat{\phi}$, \hat{z} e indicando as derivadas parciais por subscritos, resulta

$$\begin{aligned} \text{direção } \hat{r} \quad u_t = & -2v - p_r - \epsilon \left(u \cdot u_r + \frac{v}{r} u_\phi - \frac{v^2}{r} + wu_z \right) - \\ & - E \left[\frac{1}{r^2} v_\phi + \frac{1}{r} v_{\phi r} - \frac{1}{r^2} u_{\phi\phi} - u_{zz} + w_{zr} \right], \quad (2.12a) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \text{direção } \hat{\phi} \quad v_t = & -2u - \frac{1}{r} p_\phi - \epsilon^{-1} r \dot{\Omega} - \epsilon \left(uv_r + \frac{vu}{r} + \frac{v}{r} v_\phi + wv_z \right) - \\ & - E \left[\frac{1}{r} w_{z\phi} - v_{zz} - \frac{1}{r} v_r + \frac{v}{r^2} - v_{rr} - \frac{1}{r^2} u_\phi + \frac{1}{r} u_{r\phi} \right], \quad (2.12b) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \text{direção } \hat{z} \quad w_t = & -p_z - \epsilon \left(uw_r + \frac{v}{r} w_\phi + ww_z \right) - \\ & - E \left[\frac{1}{r} u_z + u_{rz} - \frac{1}{r} w_r - w_{rr} - \frac{1}{r^2} w_{\phi\phi} + \frac{1}{r} v_{\phi z} \right]. \quad (2.12c) \end{aligned}$$

Devido às enormes dificuldades matemáticas que envolvem a resolução das equações acima torna-se necessário o uso de métodos aproximados por integração numérica (Seção 2.3).

2.3 - SIMULAÇÃO NUMÉRICA

Diferentes modelos de integração numérica foram introduzidos, nos últimos anos, para simular a hidrodinâmica do processo Czochralski. No entanto, a presente discussão está essencialmente baseada no modelo empregado pelo grupo de Jülich (Miheľićić et alii, 1981), visto que a técnica ACRT tem sido investigada exclusivamente por eles.

No referido modelo, usa-se para descrever o movimento do fluido, um sistema inercial de coordenadas cilíndricas (r, ϕ, z) . O vetor velocidade expresso por $\vec{u} = (u, v, w)$, sendo u a componente radial, v a componente azimutal e w a componente vertical. Com estas definições, a equação de Navier-Stokes, para um fluido viscoso e incompressível, pode ser escrita na forma

$$\frac{\partial \vec{u}}{\partial t} = - \vec{\nabla} \cdot (\vec{u}\vec{u}) - \vec{\nabla} P - \nu \vec{\nabla} \times (\vec{\nabla} \times \vec{u}) + \vec{f}, \quad (2.13)$$

onde $P = \frac{P}{\rho}$, $\nu = \frac{\mu}{\rho}$, $\vec{f} = \frac{\vec{F}}{\rho}$.

Supondo o fluxo com simetria axial e indicando as derivadas parciais pelos subscritos, as equações escalares nas direções \hat{r} , $\hat{\phi}$ e \hat{z} são, respectivamente,

$$u_t = - \frac{1}{r} (ru^2)_r - (wu)_z - P_r + \nu(u_{zz} - w_{zr}) + \frac{v^2}{r}, \quad (2.13a)$$

$$v_t = - \frac{1}{r} (rv)_r - (vw)_z + \nu \left\{ v_{zz} + \left[\frac{1}{r} (rv)_r \right]_r \right\} - \frac{vu}{r}, \quad (2.13b)$$

$$w_t = - \frac{1}{r} (rw)_r - w_z^2 - P_z + \nu \left[\frac{1}{r} (rw)_r - \frac{1}{r} (ru)_z \right] - g, \quad (2.13c)$$

onde g é a aceleração da gravidade.

Para satisfazer a Equação da Continuidade na versão discreta é conveniente obter uma equação para a pressão P . Então, aplicando o operador divergente na Equação 2.13, obtêm-se

$$\nabla^2 P = - \frac{\partial}{\partial t} (\vec{\nabla} \cdot \vec{u}) - \vec{\nabla} \cdot [\vec{\nabla} \cdot (\vec{u}\vec{u})], \quad (2.14)$$

a assim conhecida equação de Poisson. Certamente, no caso contínuo, $\frac{\partial}{\partial t} (\vec{\nabla} \cdot \vec{u})$ desaparece pela Equação da Continuidade 2.5, mas durante o processo de discretização deve-se prestar atenção para este termo, a fim de satisfazer a versão discreta da conservação de massa.

Indicando $\vec{\nabla} \cdot \vec{u}$ por D a Equação 2.14 pode ser escrita na forma

$$D_t = - \frac{1}{r} (ru^2)_{rr} - \frac{2}{r} (wu)_z - 2(uw)_{rz} - w_{zz}^2 - \frac{1}{r} (rP_r)_r - P_{zz} + \frac{1}{r} v_r^2. \quad (2.14.a)$$

Com o objetivo de transformar as equações anteriores num esquema prático de computação, elas são expressas na forma de diferenças finitas. Por esta razão, o sistema de coordenadas (r, z) é substituído por um sistema discreto (r_i, z_k) , indicado na Figura 2.2 simplesmente por (i, k) .

A partir de um arranjo básico de pontos (x) sobre os quais se definem a pressão e a velocidade azimutal respectivamente pelas variáveis $P(i, k)$ e $v(i, k)$, a seção do líquido é dividida em elementos discretos de fluido (centrados em P e v). As componentes de velocidade u e w são definidas pelas coordenadas $u(i + 1/2, k)$ e $w(i, k + 1/2)$, de modo que os pontos (o) de velocidade radial estão situados nas linhas verticais e os pontos (□) de velocidade vertical nas linhas horizontais.

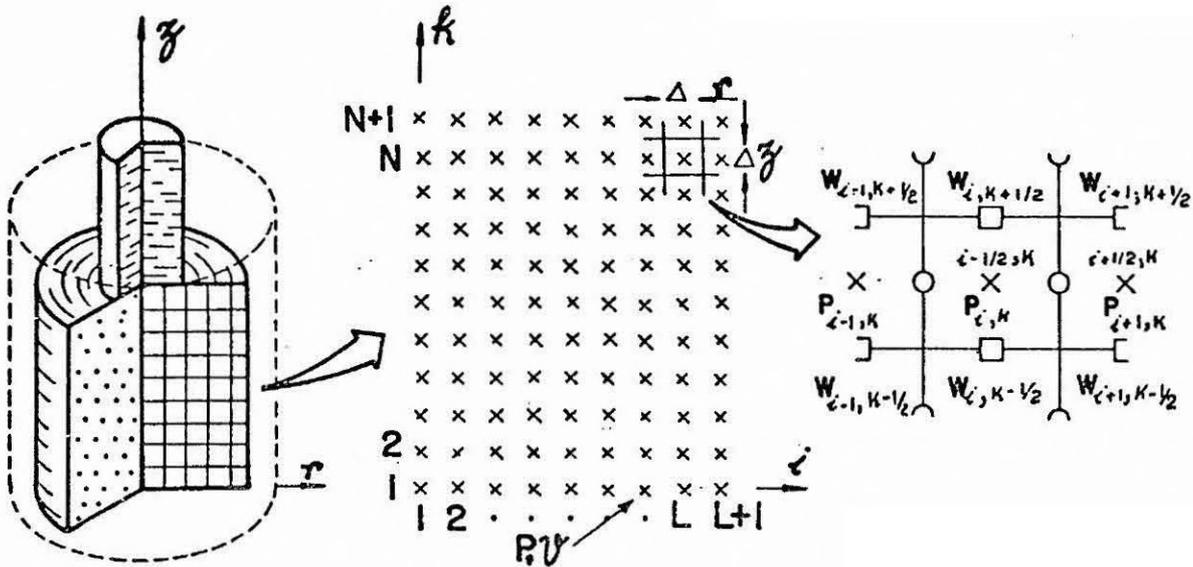


Fig. 2.2 - No processo de discretização, a seção de corte vertical do líquido é dividida em elementos discretos de fluido.

O procedimento de discretização consiste no método MAC ("Marker-and-Cell"), originalmente desenvolvido por Harlow e Welch (1965). Neste método, as derivadas temporais de primeira ordem são aproximadas pelo método de diferença finita, isto é, tomando como exemplo a componente de velocidade radial.

$$\left(\frac{\partial u}{\partial t} \right)^n \approx \frac{u^{n+1} - u^n}{\Delta t} \quad (2.15)$$

onde n se refere ao n -ésimo incremento de tempo, e devido a critérios de estabilidade, deve-se tomar, $\Delta t < \frac{\Delta r^2 \Delta z^2}{2\nu(\Delta r^2 + \Delta z^2)}$.

Os termos que envolvem derivadas espaciais são aproximados por diferenças centrais, por exemplo de acordo com a Figura 2.2,

$$\left(\frac{\partial u}{\partial r} \right)_{i+1/2,k} = \frac{\partial u_{i+1/2,k}}{\partial r} = \frac{u_{i+1,k} - u_{i,k}}{\Delta r} \quad (2.16)$$

Se alguma variável não estiver definida num determinado ponto (por exemplo, $u_{i,k}$ no caso anterior) o seu valor é obtido por meio de média simples, ou seja,

$$u_{i,k} = \frac{1}{2} (u_{i-1/2,k} + u_{i+1/2,k}) . \quad (2.17)$$

Rearranja-se a Equação 2.15 sob a forma

$$u_{i+1/2,k}^{n+1} = u_{i+1/2,k}^n + \Delta t \left(\frac{\partial u_{i+1/2,k}}{\partial t} \right)^n , \quad (2.18)$$

onde $\frac{\partial u_{i+1/2,k}}{\partial t}$ é dado pela versão discreta da Equação 2.13.a, isto é

$$\begin{aligned} \frac{\partial u_{i+1/2,k}}{\partial t} = & \frac{u_{i,k}^2 - u_{i+1,k}^2}{\Delta r} + \frac{(wu)_{i+1/2,k-1/2} - (wu)_{i+1/2,k+1/2}}{\Delta z} + \\ & + \frac{P_{i,k} - P_{i+1,k}}{\Delta r} + v \left(\frac{u_{i+1/2,k+1} - 2u_{i+1/2,k} + u_{i+1/2,k-1}}{\Delta z^2} - \right. \\ & \left. - \frac{w_{i+1,k+1/2} - w_{i+1,k-1/2} - w_{i,k+1/2} + w_{i,k-1/2}}{\Delta r \cdot \Delta z} \right) + \\ & + \frac{1}{r_{i+1/2}} (u_{i+1/2,k}^2 + v_{i+1/2,k}^2) . \end{aligned} \quad (2.19)$$

A pressão é obtida a partir da versão discreta da Equação de Poisson 2.14,

$$P_{i,k} = \frac{1}{2} \cdot \frac{1}{\left[\frac{1}{\Delta r^2} + \frac{1}{\Delta z^2} \right]} \left[\frac{1}{r_{i,k}} \cdot \frac{P_{i+1/2,k} - P_{i-1/2,k}}{\Delta r} + \frac{P_{i+1,k} + P_{i-1,k}}{\Delta r^2} + \frac{P_{i,k+1} + P_{i,k-1}}{\Delta z^2} + M_{i,k} \right], \quad (2.20)$$

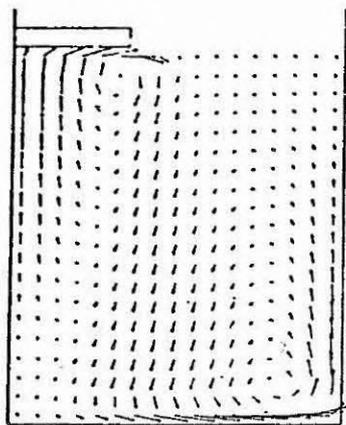
onde

$$M_{i,k} = \frac{\cancel{D_{i,k}^{n+1}} - D_{i,k}}{\Delta t} + \frac{u_{i+1,k} - 2u_{i,k} + u_{i-1,k}}{\Delta r^2} + \frac{2}{r_{i,k}} \left[\frac{u_{i+1/2,k}^2 - u_{i-1/2,k}^2}{\Delta r} \right] - \frac{1}{r_{i,k}} \left[\frac{v_{i+1/2,k}^2 - v_{i-1/2,k}^2}{\Delta r} \right] + \frac{2}{r_{i,k}} \frac{(wu)_{i,k+1/2} - (wu)_{i,k-1/2}}{\Delta z} + 2 \frac{(wu)_{i+1/2,k+1/2} - (wu)_{i-1/2,k+1/2} - (wu)_{i+1/2,k-1/2} + (wu)_{i-1/2,k-1/2}}{\Delta r \Delta z} + \frac{w_{i,k+1} - 2w_{i,k} + w_{i,k-1}}{\Delta z^2}; \quad (2.21)$$

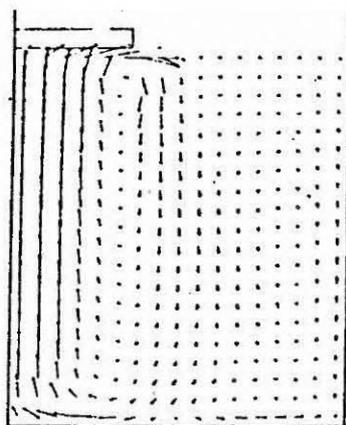
os índices n foram omitidos por conveniência de notação.

Geralmente $D_{i,k} \neq 0$, devido aos erros introduzidos na solução iterativa do campo de pressão, aos erros inerentes ao método de diferença finita e aos arredondamentos no computador. No entanto, a Equação da Continuidade 2.5 requer $D_{i,k} = 0$. Esta exigência é incorporada no método MAC fixando $D_{i,k}^{n+1} = 0$ no Termo 2.21.

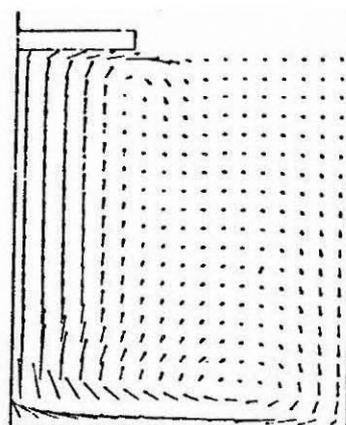
A simulação numérica é então realizada utilizando o seguinte procedimento de cálculo: 1) o valor de $M_{i,k}$ é calculado para todas as células (i.e. elementos discretos de fluido), usando na Equação 2.21 o campo de velocidade obtido a partir das condições iniciais ou do ciclo anterior; 2) o correspondente campo de pressão é obtido iterativamente usando a Equação 2.20; 3) com base nas velocidades do ciclo anterior, o novo campo de velocidade é calculado inserindo os valores de P na Equação 2.19. O mesmo procedimento é realizado para as demais componentes de velocidade. A título de exemplo, a Figura 2.3 mostra a evolução temporal de um padrão de fluxo em isorotação durante a aceleração e desaceleração do cristal e do cadinho, obtido através de simulação numérica. V_{\max} é o maior módulo observado no campo de velocidade mostrado. Os diferentes quadros que compõem a figura referem-se ao transiente inicial e a última configuração revela a situação do fluxo próxima ao regime permanente.



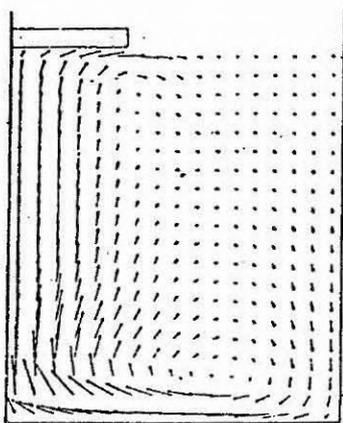
$t=10.0 \text{ s}$
 $v_{\max}=1.4 \text{ cm/s}$



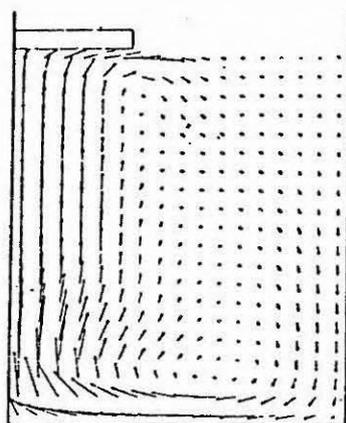
$t=11.0 \text{ s}$
 $v_{\max}=0.81 \text{ cm/s}$



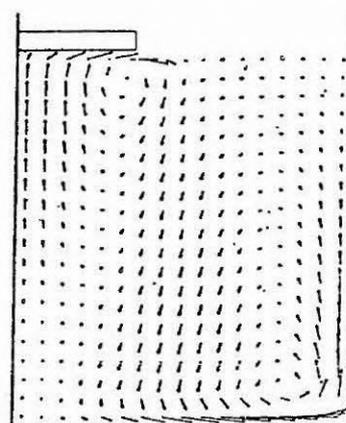
$t=15.0 \text{ s}$
 $v_{\max}=1.3 \text{ cm/s}$



$t=20.0 \text{ s}$
 $v_{\max}=1.4 \text{ cm/s}$



$t=21.0 \text{ s}$
 $v_{\max}=1.1 \text{ cm/s}$



$t=28.0 \text{ s}$
 $v_{\max}=1.5 \text{ cm/s}$

ROTAÇÃO DO CADINHO: 10 : 30 RPM
ROTAÇÃO DO CRISTAL: 40 : 80 RPM
PERÍODO : 10 s

Figura 2.3 - Evolução temporal do padrão de fluxo obtido por simulação numérica, para a técnica ACRT aplicada no processo Czochralski.

FONTE: Mihelčić et alii (1981), p. 352.

2.4 - DISCUSSÃO DO FLUXO NO PROCESSO CZOCHRALSKI COM NÚMEROS ADIMENSIONAIS

Esta seção deve ser considerada apenas como uma introdução aos regimes de fluxo no processo Czochralski e está baseada na teoria dos fluidos em rotação, formulada por Greenspan (1968) e Friedlander (1980). Os aspectos hidrodinâmicos dos fluidos em rotação, embora amplamente investigados, não são, ainda hoje, entendidos por completo, devido à complexidade estrutural das camadas de contorno que envolvem tais eventos.

Considerando inicialmente o fluxo no regime permanente, $(\partial/\partial t) = 0$, com $\Omega_1/\Omega_2 \approx 1$ e sob a aceitação de que, nestas condições, o número de Rossby, ϵ , tende a zero (isto é, o líquido em rotação movimenta-se aproximadamente como um corpo rígido em torno do eixo de simetria), e que na faixa de velocidade de rotação utilizada durante o processo de crescimento, o número de Ekman, E , terá influência considerável somente nas regiões de altos gradientes de velocidade, normalmente junto às fronteiras sólidas (isto é, nas camadas limite). Deste modo a Equação de Quantidade de Movimento 2.11 reduz-se, na maior parte do campo, a um balanço entre a força de Coriolis e o gradiente de pressão, conhecido na literatura como *balanço geostrófico*,

$$2\hat{z} \times \vec{u} = -\vec{\nabla}p. \quad (2.22)$$

Tomando o rotacional da expressão anterior, somando e subtraindo $\partial w/\partial z \hat{z}$, vem

$$\vec{\nabla} \times (2\hat{z} \times \vec{u}) = 0,$$

$$\left(\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (ru) + \frac{1}{r} \frac{\partial v}{\partial \phi} + \frac{\partial w}{\partial z} \right) \hat{z} - \left(\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial z} (ru) \hat{r} + \frac{\partial v}{\partial z} \hat{\phi} + \frac{\partial w}{\partial z} \hat{z} \right) = 0,$$

daí

$$(\vec{\nabla} \cdot \vec{u})\hat{z} - \frac{\partial \vec{u}}{\partial z} = 0,$$

e lembrando que $\vec{\nabla} \cdot \vec{u} = 0$ (Equação 2.5) resulta

$$\frac{\partial \vec{u}}{\partial z} = 0, \quad (2.23)$$

isto é, não há variação no campo de velocidade com respeito a z . Esta propriedade da região geostrofica é conhecida como o teorema de Taylor-Proudman.

Escrevendo a Equação Vetorial 2.22 em termos de componentes tem-se

$$2v = \frac{\partial p}{\partial r}, \quad (2.24)$$

$$-2u = \frac{\partial p}{\partial \phi},$$

$$0 = \frac{\partial p}{\partial z}. \quad (2.25)$$

Na forma vetorial, a Equação 2.24 pode ser escrita como

$$\vec{u}_H = \frac{1}{2} \hat{z} \times \vec{\nabla} p,$$

onde $\vec{u}_H = u\hat{r} + v\hat{\phi}$ (velocidade horizontal). Assim, o campo de velocidade é independente da coordenada vertical \hat{z} , e a velocidade horizontal \vec{u}_H é dada como derivada da pressão $p(r, \phi)$.

Uma diferença entre a velocidade de rotação do cadinho e/ou do cristal e o meio líquido induz a formação de uma camada não-geostrofica estreita próxima ao fundo do cadinho, sob a superfície do cristal e eventualmente em outros lugares. A espessura desta camada de contorno horizontal pode ser determinada considerando a forma estacionária da Equação E.7, desenvolvida no Apêndice E

$$E^2 \nabla^6 p + 4 \frac{\partial^2 p}{\partial z^2} = 0, \quad (2.26)$$

onde o primeiro termo representa a força viscosa e o segundo a força de Coriolis. Sabendo que a espessura da camada de contorno \bar{e} é proporcional à viscosidade, torna-se conveniente a seguinte mudança de variável

$$z = E^\alpha \xi, \quad (2.27)$$

onde α é um expoente a ser determinado.

Assim, a Equação 2.26 torna-se

$$E^2 \left(\nabla_H^2 + E^{-2\alpha} \frac{\partial^2}{\partial \xi^2} \right)^3 p + 4E^{-2\alpha} \frac{\partial^2 p}{\partial \xi^2} = 0 \quad (2.28)$$

$$\text{com } \nabla_H^2 = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2}.$$

Conservando apenas os termos dominantes tem-se

$$E^{2-6\alpha} \frac{\partial^6 p}{\partial \xi^6} + 4E^{-2\alpha} \frac{\partial^2 p}{\partial \xi^2} = 0. \quad (2.29)$$

Sabendo que as camadas limite não são nulas deve haver um balanço entre os dois termos da Equação 2.29 e portanto, como $\frac{\partial^6 p}{\partial \xi^6}$ e $\frac{\partial^2 p}{\partial \xi^2}$ são da ordem de unidade,

$$2 - 6\alpha = -2\alpha \Rightarrow \alpha = 1/2.$$

Então, as camadas de contorno horizontais, as quais são chamadas *camadas de Ekman*, têm uma espessura adimensional $E^{1/2}$. Supondo a velocidade de rotação da fronteira sólida maior do que a do meio líquido, o fluido contido nesta camada tem o seu momento angular acrescido diretamente pela ação viscosa, e o aumento na força de Coriolis domina o gradiente de pressão ao longo da camada de Ekman, o que resulta num fluxo radial em

direção à camada de contorno vertical circunvizinha, denominada *camada de Stewartson*. A espessura desta camada pode ser determinada, de modo análogo ao procedimento anterior, tomando

$$r = E^b \eta, \quad (2.30)$$

onde b é novamente um expoente a ser determinado. Considerando apenas os termos dominantes, a Equação de Pressão 2.26 pode ser escrita como

$$E^{2-6b} \frac{\partial^6 p}{\partial \eta^6} + 4 \frac{\partial^2 p}{\partial z^2} = 0. \quad (2.31)$$

Então, o balanço entre estes dois termos requer

$$2 - 6b = 0 \rightarrow b = 1/3.$$

Assim, a espessura da camada de Stewartson, a qual permite o fluxo vertical de massa, é dada adimensionalmente por $E^{1/3}$.

Essas camadas de contorno (ou de cisalhamento) foram produzidas e estudadas em diferentes combinações de velocidades (constantes) de rotação entre um recipiente cilíndrico e um disco coaxial imerso no líquido. Sob tal situação a natureza do meio hidrodinâmico foi descrita por Hide e Titman (1967) como caracterizada por duas regiões geostroficas, de diferentes velocidades angulares, separadas por uma superfície cilíndrica (camada de Stewartson) desenvolvida sob o disco e simétrica ao eixo de rotação; este fenômeno é conhecido na literatura como *coluna de Taylor-Proudman*.

Posteriormente utilizando um sistema similar, mas adaptado à configuração do processo Czochralski, Carruthers e Nassau (1968) (Seção 1.3.3) investigaram o comportamento do fluxo para diferentes velocidades e sentidos de rotação. Esta análise revelou que a camada de Stewartson (denominada por eles superfície de estagnação), a qual evita a mistura completa do líquido no cadinho, existe para todos os casos,

exceto quando a rotação do cadinho for muito pequena, comparada à rotação do cristal. Eles observaram que na isorotação uma única superfície de estagnação separa duas regiões que não se misturam (coluna de Taylor-Proudman e que na contra-rotação pode haver duas superfícies de estagnação e três regiões que não se misturam (Figura 2.4)

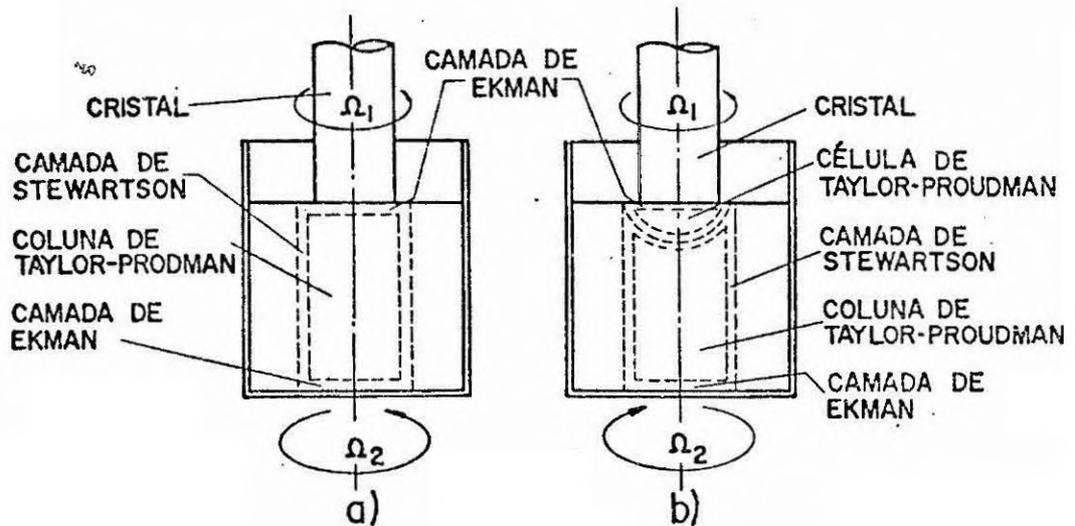


Fig. 2.4 - Configuração teórica da coluna e da célula de Taylor-Proudman; a) isorotação, b) contra-rotação.

O transiente originado pela mudança na velocidade angular das fronteiras sólidas pode ser analisado qualitativamente considerando o aumento instantâneo na rotação do cadinho e do cristal. No início deste processo, apenas as camadas próximas às fronteiras sólidas sofrem os efeitos da variação de velocidade, como consequência direta da ação viscosa, e esta diferença de velocidade angular em relação ao meio hidrodinâmico origina a formação da camada de Ekman (junto ao fundo do cadinho e sob a superfície do cristal). Visto que esta camada é caracterizada por um fluxo radial em direção à parede do cadinho, um fluxo vertical é então induzido no interior do líquido a fim de repor o fluido espalhado, e sob tal situação estas camadas atuam como sumidouros de fluido de baixo momento angular. Deste modo, o fluido absorvido

é convertido num fluxo de alto momento angular, gerando (através das camadas de contorno) um fluxo secundário responsável pelo aumento da velocidade angular do meio hidrodinâmico. Este padrão de fluxo persiste somente durante o transiente, diminuindo gradativamente à medida que a rotação do fluido se assemelha ao movimento de um corpo rígido e desaparece quando isto é obtido. O tempo requerido para que todo o fluido atinja a velocidade angular do novo estado estacionário é dado por $t = E^{-1/2} \Omega^{-1}$ (Greenspan, 1968).

O transiente causado pela redução da velocidade das fronteiras sólidas é caracterizado pela inversão do sentido de convecção descrito anteriormente. Isto ocorre devido ao decréscimo, quase instantâneo, da velocidade angular das camadas de contorno em relação à região central, o que resulta em um desbalanço entre as forças centrífugas. Deste modo, o fluxo de massa, nas camadas de contorno horizontais, passa a ser dominado pela força centrífuga originada pelo efeito de rotação da região central do meio hidrodinâmico.

O fato de a velocidade angular das camadas periféricas ser menor do que a das camadas internas induz (acima de um certo limite crítico) o aparecimento de um fluxo laminar com linhas de escoamento espirais (Figura 2.5), o qual se torna turbulento quando a diferença entre as velocidades é grande. Embora não haja, até o momento, um tratamento teórico deste fenômeno de instabilidade, sabe-se que ele ocorre somente durante a desaceleração e próximo à parede do cadinho. Este transiente foi denominado por Schulz-DuBois (1972), de "*transient Couette flow*", embora seja também conhecido como vórtices de Taylor.

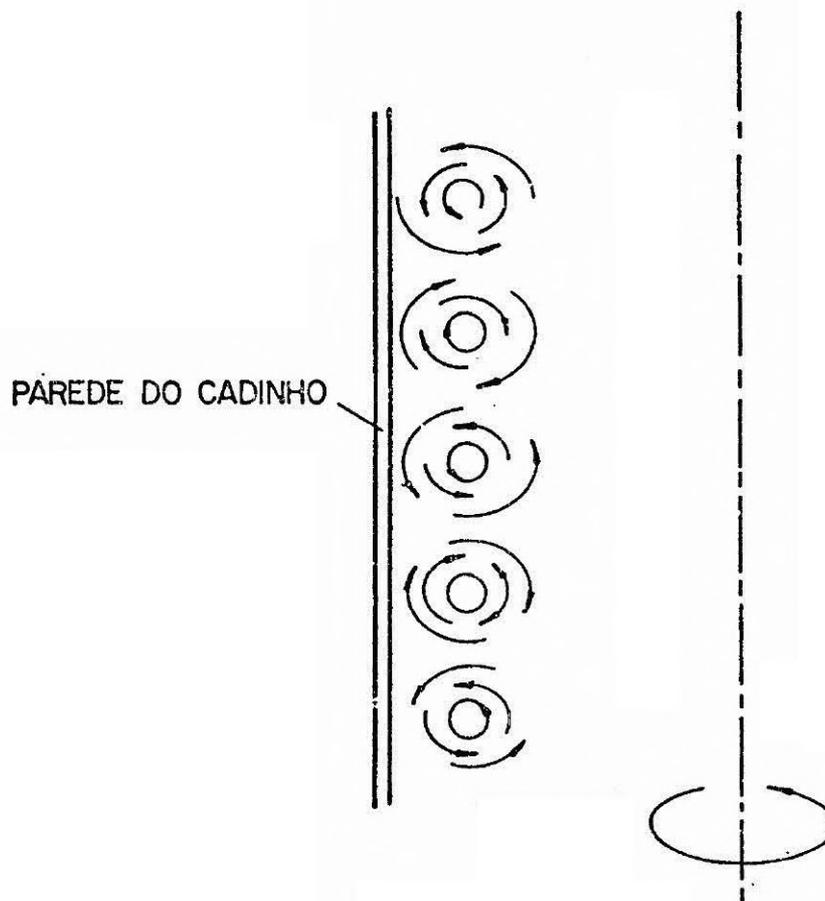


Figura 2.5 - Configuração esquemática dos vórtices de Taylor transientes.

A *distorção espiral de cisalhamento* é um outro padrão de fluxo que pode ocorrer durante o transiente originado pela aceleração e desaceleração do cadinho. Schulz-DuBois (1972) analisou este fluxo supondo dois líquidos imiscíveis com propriedades semelhantes, com exceção da cor, contidos num recipiente cilíndrico suficientemente alto (de maneira que a influência do fundo pode ser negligenciada) com rotação uniforme ($\Omega = \Omega_0$) conforme indicado na Figura 2.6.a. Submetendo este recipiente a uma frenagem instantânea, a velocidade do líquido próximo à parede diminui rapidamente devido à fricção, enquanto no centro a redução da velocidade acontece de forma lenta devido ao momento de inércia do fluido. Assim, o cisalhamento ocorre entre as partes anelares de di

ferentes velocidades, de maneira que as duas partes do líquido são distorcidas em espirais como mostrado nas Figuras 2.6.b-f.

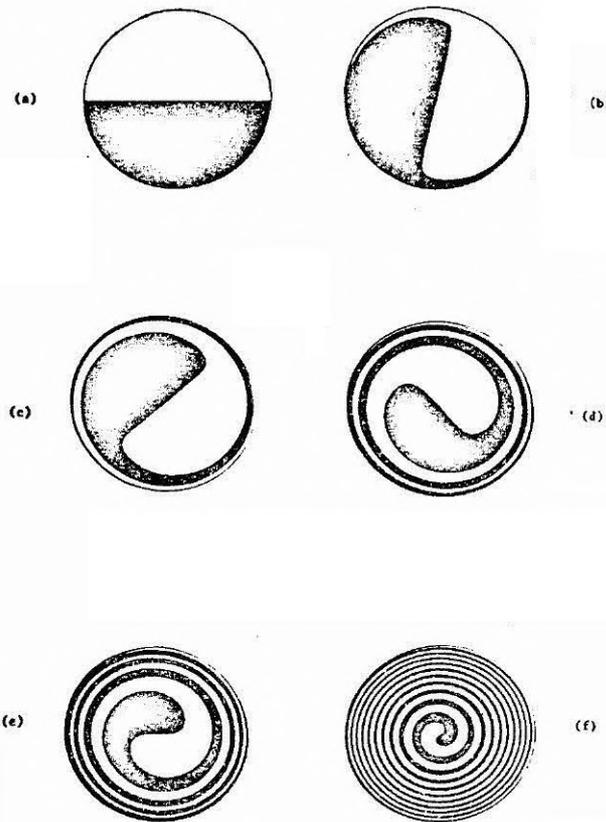


Figura 2.6 - Estágios sucessivos da distorção espiral de cisalhamento em um tubo circular, contendo dois líquidos distinguíveis, no instante que a rotação é subitamente interrompida.

FONTE: Scheel and Schulz-DuBois (1982), p. 491.

O decréscimo da velocidade de rotação em função do raio está indicado na Figura 2.7. A velocidade de rotação na parte central do líquido é reduzida aproximadamente de $0.5\Omega_0$, após um tempo $t = 0.1R^2/\nu$; então para que haja uma mistura perfeita do fluido (nos casos onde a distorção espiral de cisalhamento pode ser dominante) é necessário que o período de aceleração ou desaceleração seja desta ordem.

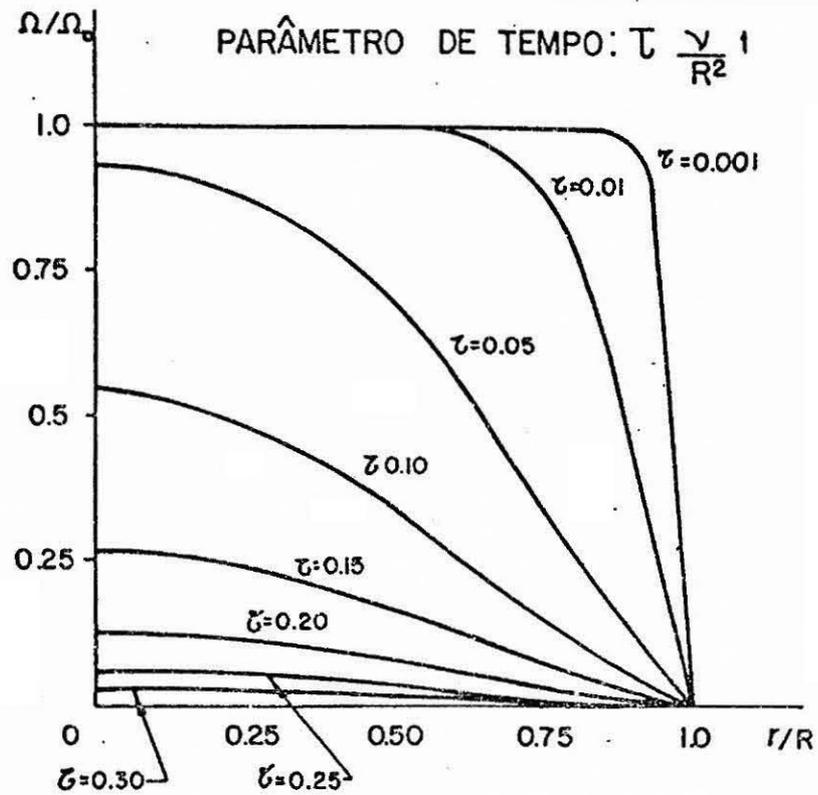


Figura 2.7 - Redução da velocidade de rotação em função do raio em uma distorção espiral de cisalhamento para vários parâmetros de tempo.
FONTE: Schulz-DuBois (1972), p. 84.

Embora com o auxílio dos números adimensionais em certas circunstâncias alguns aspectos qualitativos possam ser previstos analisando a equação de Navier-Stokes, uma investigação experimental é requerida para que os detalhes da técnica ACRT sejam entendidos de forma acessível e imediata, como será descrito no próximo Capítulo.

CAPÍTULO 3

ESTUDO EXPERIMENTAL DA HIDRODINÂMICA NO PROCESSO CZOCHRALSKI

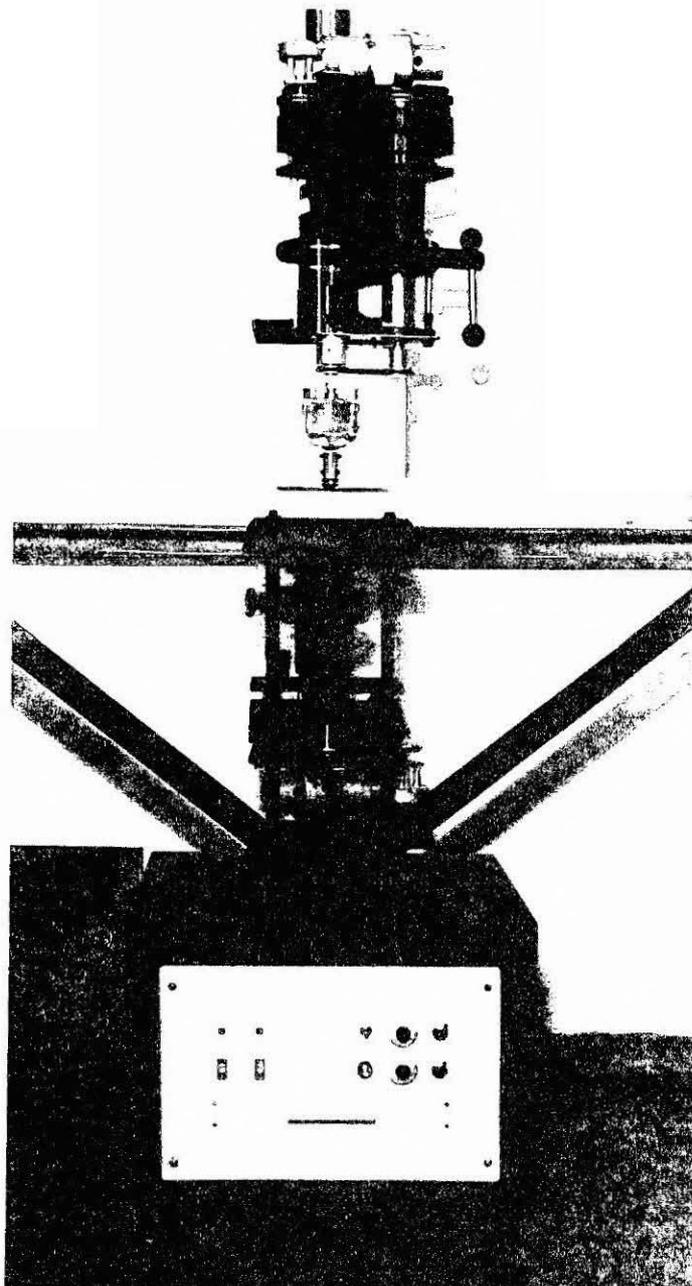
3.1 - DESCRIÇÃO DO APARELHO DE SIMULAÇÃO

3.1.1 - CONJUNTO MECÂNICO

O conjunto mecânico do aparelho de simulação está disposto, em posição vertical, numa coluna de furadeira, como indicado na Figura 3.1a (vista frontal) e 3.1b (vista lateral). Para facilitar a descrição deste conjunto, ele será dividido em três partes distintas, a saber: *rotação do cristal*, *visualização do fluxo* e *rotação do cadinho*.

Rotação do cristal - Esta parte é essencialmente constituída por um cabeçote de furadeira devidamente modificado dadas às necessidades básicas da pesquisa. A rotação do eixo mecânico é provida com um motor de corrente contínua, fixo no extremo superior do cabeçote. A fim de reduzir a interferência das vibrações inerentes ao motor (Diacti, 1/4 HP) sobre os regimes de fluxo, ele foi fixado (Figura 3.2) numa chapa de ferro (espessura = 1,5cm) convenientemente isolada com borracha e presa, sobre um bloco de ferro, por quatro parafusos passando guarnecidos também com borracha. Deste modo, a vibração transmitida através da borracha é parcialmente amortecida pela massa (= 15kg) de ferro contida no bloco. O bloco, por sua vez, está sobreposto a uma outra chapa de ferro semelhante à anterior e preso, nas extremidades, por coxins.

A rotação do motor é transmitida ao eixo mecânico por meio de duas polias interligadas por uma correia de borracha, a fim de atenuar a vibração transmitida pelo eixo do motor. O mesmo procedimento mecânico de transmissão de movimento é utilizado no extremo inferior do eixo, com o objetivo de deslocar o eixo do pseudocristal para possibilitar o transpassar da cânula injetora de corante (Seção 3.1.3).

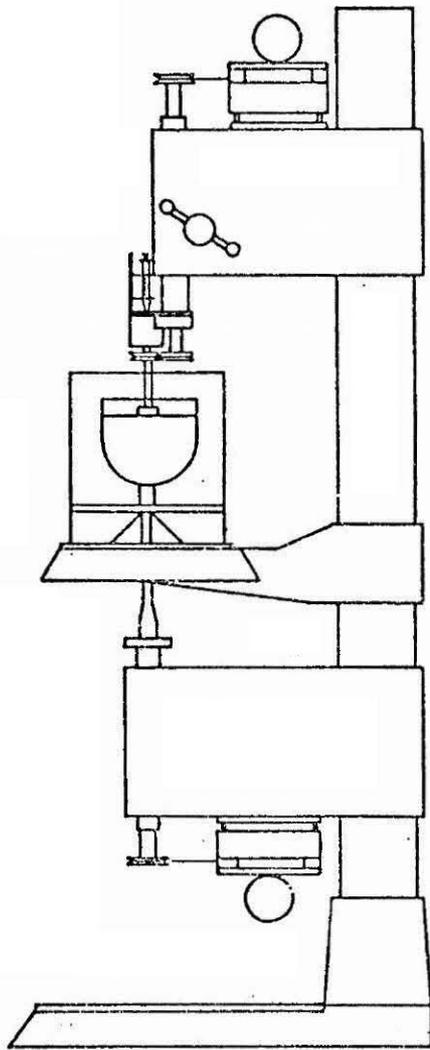


(a)

Figura 3 - Aparelho de simulação hidrodinâmica.

(continua)

Fig. 3 - Conclusão



PARTE A:
ROTAÇÃO DO CRISTAL

PARTE B:
VISUALIZAÇÃO DO FLUXO

PARTE C:
ROTAÇÃO DO CADINHO

(b)

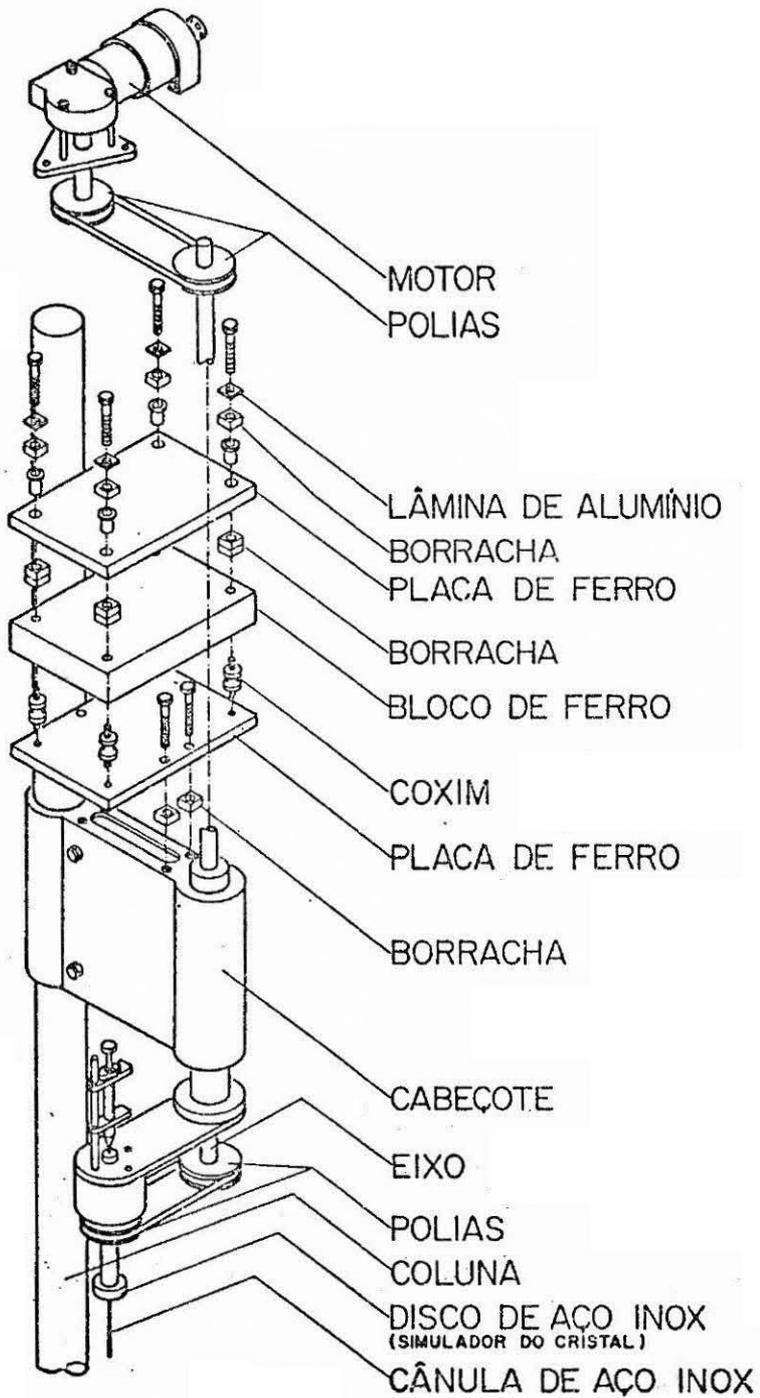


Figura 3.2 - Parte A: Rotação do cristal.

O cristal é simulado por um disco de aço inox ($r=1,65\text{cm}$), cujo ajuste de altura é realizado através do sistema original de cremalheira do cabeçote.

Visualização do fluxo - Esta parte é composta por uma mesa de furadeira presa à coluna e sustentada por dois tarugos de ferro, a fim de assegurar-lhe uma excelente estabilidade mecânica. Sobre a mesa fixa-se um trilho ótico que, pela mesma razão anterior, tem seus extremos presos a dois braços de cantoneiras. O trilho ótico destina-se à aplicação das diferentes técnicas de visualização descritas nas Seções 3.1.4 e 3.1.5.

O contato entre o cadinho e o eixo mecânico do cabeçote inferior é estabelecido por meio de uma abertura usinada através do trilho ótico e da mesa. Conforme indicado na Figura 3.3, a simetria rotacional do cadinho é obtida pelo ajuste de seis parafusos e um suporte cônico de lucite colado no fundo do cadinho.

A distorção de imagem (efeito de lente), originada pela superfície cilíndrica do cadinho, foi minimizada com o uso de uma caixa de vidro (ou lucite) de faces paralelas, preenchida com uma solução aquosa de glicerina, com índice de refração semelhante ao do vidro-quartzo ($n_D = 1,459$) que constitui o cadinho (Carruthers, 1967).

Os experimentos foram realizados utilizando um cadinho de vidro-quartzo, $R = 4,95\text{cm}$ (usado comercialmente no crescimento de cristais de silício), ou um cadinho de fundo plano, $R = 4,5\text{cm}$ (obtido a partir de um tubo de pirex).

Rotação do cadinho - Em princípio, o arranjo mecânico responsável pela rotação do cadinho, mostrado na Figura 3.4, é semelhante ao arranjo descrito anteriormente (*rotação do cristal*). Com exceção da inversão do cabeçote e do acoplamento direto de seu eixo ao suporte do cadinho, o mesmo processo de montagem foi utilizado.

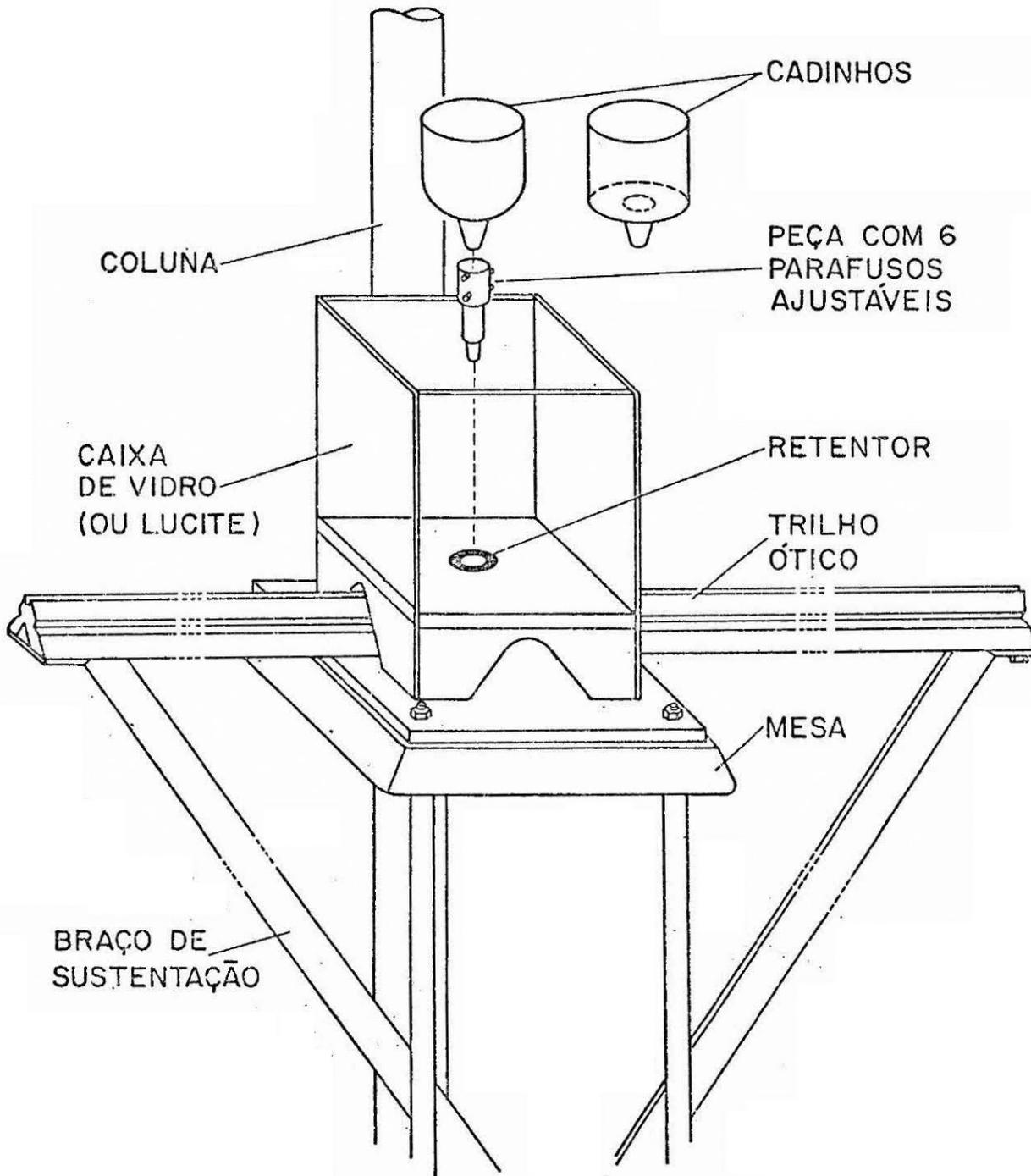


Figura 3.3 - Parte B: Visualização do fluxo.

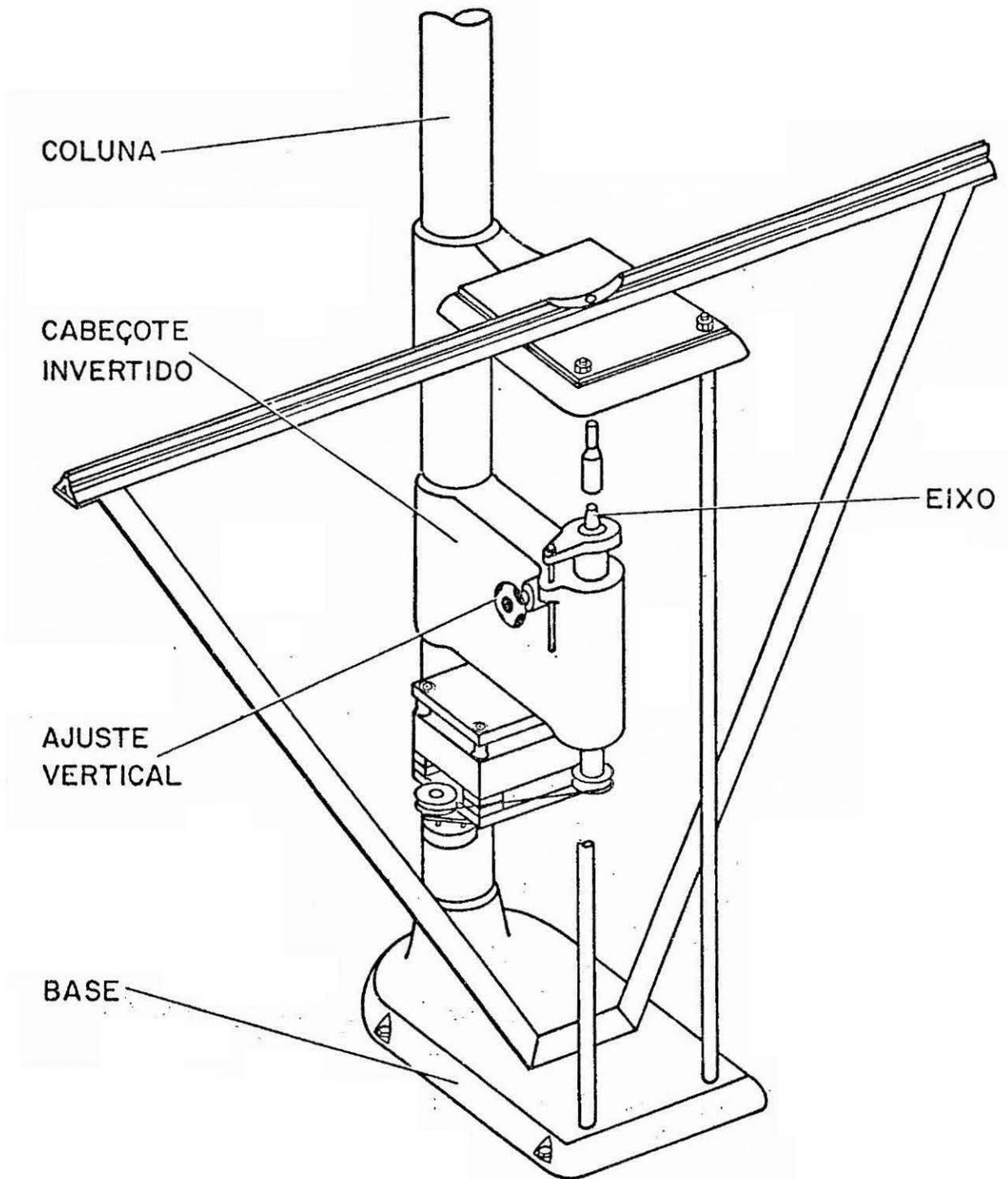


Figura 3.4 - Parte C: Rotação do cadinho.

3.1.2 - SISTEMA ELETRÔNICO

O controlador dos motores é constituído por um sistema eletrônico relativamente simples, composto de uma parte digital e outra analógica. Uma descrição sucinta de seu funcionamento pode ser obtida com o auxílio do diagrama de blocos mostrado na Figura 3.5.

A parte digital consiste em um oscilador de ondas quadradas, um contador "up/down" e um conversor digital/analógico (ambos de 8 bits).

Os pulsos gerados pelo oscilador são convertidos, no estágio seguinte, em palavras de 8 bits, ou seja, cada pulso contado gera uma palavra. Seqüencialmente estas palavras digitais são convertidas em tensões analógicas, as quais geram uma onda triangular. Esta onda triangular sofre, na fase subsequente, um deslocamento para ficar simétrica ao nível zero, de modo que o motor possa girar nos dois sentidos. O deslocamento é obtido pela adição de um nível de tensão contínua negativa em relação à terra. Neste mesmo estágio o sinal é atenuado por um fator 10, a fim de facilitar sua manipulação nas etapas que se sucedem.

No estágio denotado ganho, a velocidade do motor é ajustada variando a tensão do sinal, e no estágio "off-set" um nível de tensão pode ser introduzido no sinal variando-o entre $\pm V_{CC}$ (tensão máxima de alimentação). Isto é feito para que haja possibilidade de girar o motor num determinado sentido. O ganho de potência requerida para o funcionamento do motor é fornecido pelo amplificador.

Um outro circuito analógico, semelhante ao anterior, é conectado em "A" para que os dois motores (cadinho e cristal) possam girar com períodos iguais (Figura 3.5).

Uma descrição mais detalhada do circuito eletrônico deste sistema de controle pode ser obtida em Rappi et alii (1984).

3.1.3 - SISTEMA DE VISUALIZAÇÃO POR INJEÇÃO DE TINTA

A primeira técnica de visualização de fluxo, empregada nos experimentos, envolveu a introdução de tinta no interior do líquido simulador. Um requerimento básico para a utilização, bem sucedida, desta técnica é que tanto a tinta quanto o líquido simulador tenham densidades muito semelhantes. Por esta razão, e devido ao fato de os experimentos terem sido realizados com água, a tinta foi obtida pela dissolução (saturada à temperatura ambiente) de azul de metileno em água.

Um sistema simples de injeção de tinta foi adaptado ao conjunto mecânico, conforme mostrado na Figura 3.2. Uma cânula de aço inox, de $5 \cdot 10^{-2}$ cm de diâmetro externo e aproximadamente $3 \cdot 10^{-2}$ cm de diâmetro interno, é introduzida axialmente (para que sua presença não gere grandes distúrbios no líquido) no interior do cadinho, através de um canal que atravessa o pseudocristal. O volume de tinta injetado dentro do cadinho é controlado por uma seringa graduada, com capacidade de 1ml. A altura que a tinta é injetada, no líquido, é ajustada com a utilização de cânulas de diferentes comprimentos e/ou por meio do deslocamento vertical da seringa.

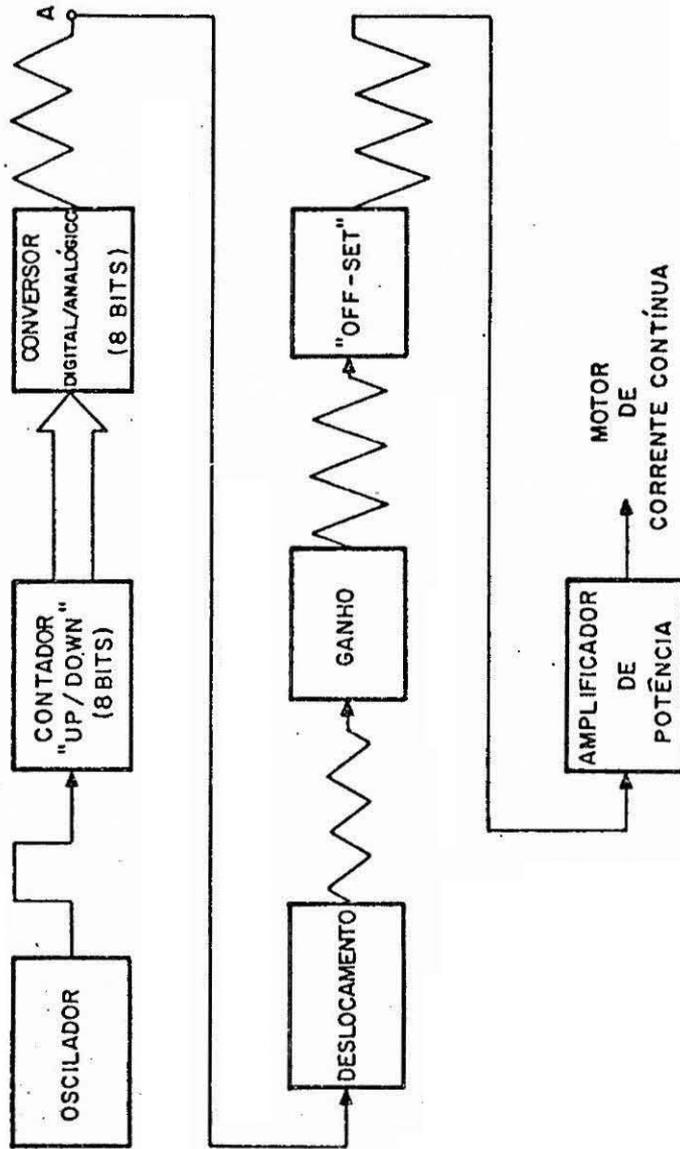


Figura 3.5 - Diagrama de blocos mostrando o funcionamento do sistema eletrônico do ciclo ACRT. Adaptado de Luiz F. Matteo Ferraz (mestra do em preparação).

3.1.4 - SISTEMAS DE VISUALIZAÇÃO POR ESPALHAMENTO DE LUZ

A técnica de visualização de fluxo a ser descrita baseia-se no espalhamento de luz por partículas em suspensão. Em forma esquematizada (Figura 3.6), sua aplicação consiste na utilização de uma fonte luminosa intensa e uma fenda. A fonte luminosa intensa foi obtida pela construção de um sistema composto de uma lente convergente, de uma lâmpada incandescente de 625W (retroprojetor) e de um miniventilador (para refrigerar a lâmpada). Obedecendo à mesma ordem de citação, tais componentes estão dispostos linearmente. A lâmpada está situada no foco principal da lente para prover um feixe aproximadamente paralelo. Este conjunto está contido numa caixa de alumínio provida de uma fenda vertical de 0,5 cm de largura (para permitir a passagem do feixe luminoso) e aberta na face oposta para facilitar a circulação do ar (Figura 3.7). Alternativamente um fluxo luminoso de maior intensidade pode ser obtido através de um espelho esférico côncavo (com a lâmpada situada no seu centro de curvatura) ou através de utilização de duas fontes luminosas contrapostas. A seção do líquido quando iluminado por uma única fonte apresenta uma inconveniente redução progressiva de intensidade luminosa na direção de propagação do feixe. Este problema pode ser atenuado com a utilização de um espelho plano (com as mesmas dimensões da fenda) obrigando, deste modo, o feixe a retornar ao líquido pelo mesmo caminho óptico.

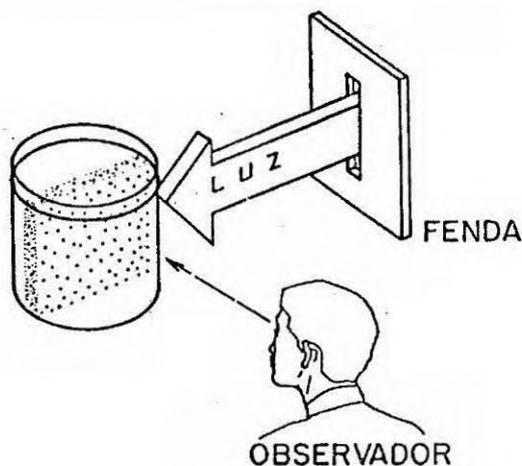


Figura 3.6 - Representação esquemática da técnica de visualização por espalhamento de luz.

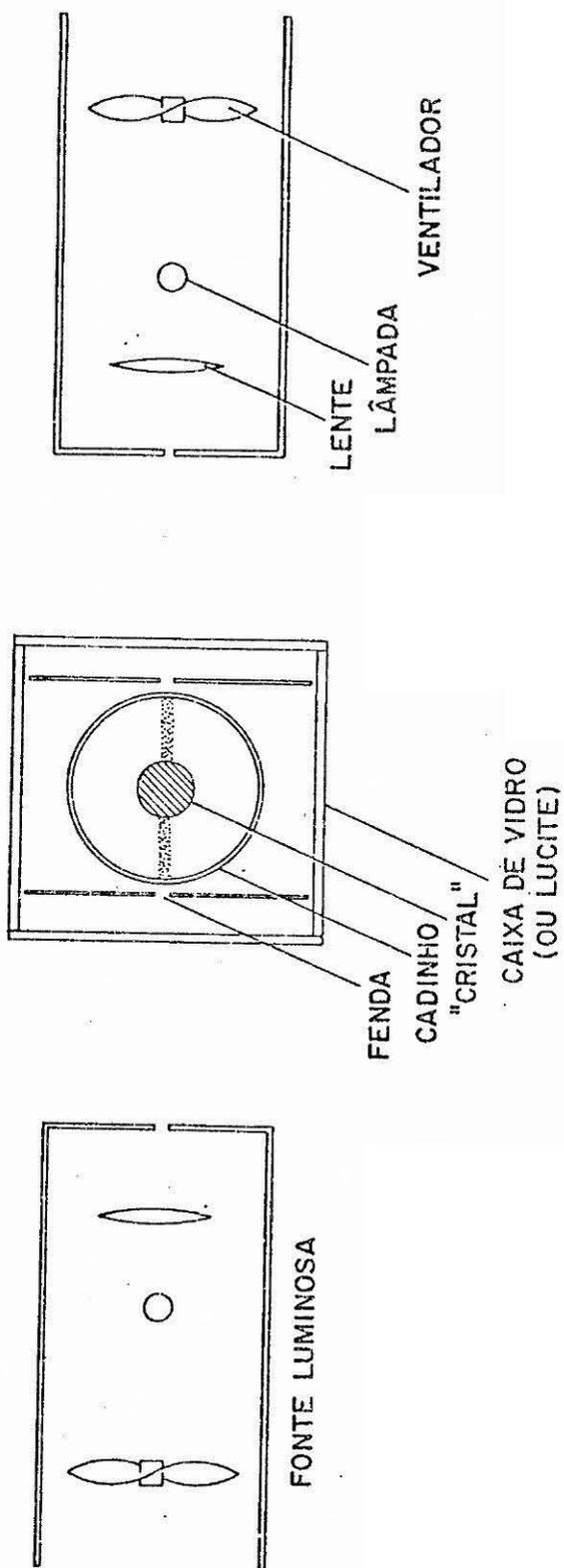


Figura 3.7 - Disposição dos componentes que integram o sistema de visualização por espalhamento de luz.

Uma fenda de 0,6 cm de largura, incisa sobre um anteparo de alumínio, foi colocada próxima ao cadinho a fim de assegurar que apenas uma seção transversal delgada do cadinho fosse iluminada. Para reduzir a reflexão difusa o anteparo de alumínio foi pintado de preto fosco.

Com a ajuda do trilho ótico as fontes luminosas são fixas de modo a iluminar o cadinho lateralmente e possibilitar uma observação frontal. Do mesmo modo uma seção horizontal do líquido pode ser visualizada, por cima do cadinho (com exceção do líquido contido imediatamente sob o cristal, se este não for transparente) posicionando a fenda e a fonte de luz na horizontal.

Evidentemente para melhorar as condições de visualização deve-se escurecer o ambiente no qual o sistema é operado.

Com o auxílio de fotografias com tempo de exposição predeterminado ou de fotografias estroboscópicas (substituindo as fontes luminosas por flashes de disparos automáticos) é possível uma análise semiquantitativa do campo de distribuição de velocidade (das componentes paralelas ao plano iluminado).

Os experimentos foram realizados usando pó de pinho (moído) em suspensão numa solução aquosa de KI (iodeto de potássio), saturada à temperatura ambiente ($\rho = 1,6 \text{ g/cm}^3$, $\nu \approx 6,4$ centistokes). Embora o iodeto de potássio tenha sido dissolvido em água com o objetivo de neutralizar a diferença de densidade existente entre as partículas e o líquido, ainda assim verificou-se um leve domínio da densidade das partículas sobre a solução.

3.1.5 - MÉTODO SCHLIEREN DE VISUALIZAÇÃO

Pequenas variações no índice de refração, de uma determinada região de estudo, podem ser evidenciadas visualmente projetando sua imagem pelo método Schlieren. Embora a aplicação deste método se adapte melhor ao estudo de correntes de ar, sob determinadas condições ele também pode ser utilizado no estudo de meios líquidos:

A prática do método Schlieren requer o uso de uma fonte pontual, dois espelhos côncavos (ou duas lentes convergentes), uma lâmina e um anteparo.

A fonte pontual foi construída utilizando uma lâmpada incandescente de 625W (retroprojetor), devidamente ventilada (como descrito na Seção 3.1.4) e posicionada além do foco principal de uma lente convergente. Sobre a imagem do filamento da lâmpada que a lente conjuga situa-se uma fenda através da qual a intensidade luminosa da fonte pode ser ajustada.

Fixando a fonte pontual no foco principal do primeiro espelho ($f_1 = 100\text{cm}$), o feixe luminoso é refletido paralelamente em direção ao objeto, conforme indicado na Figura 3.8.

Para diminuir a distorção de imagem, isto é ampliação das regiões centrais do líquido e redução das regiões laterais devido ao efeito de lente, o cadinho foi envolvido por uma caixa de vidro (ou lucite) de faces paralelas, conforme mostrado anteriormente na Figura 3.3. O espaço vazio (dentro e fora do cadinho) foi preenchido com uma solução aquosa de glicerina, cujo índice de refração $n = 1,459$ assemelha-se ao índice de refração do material (vidro quartzo) que constitui o cadinho.

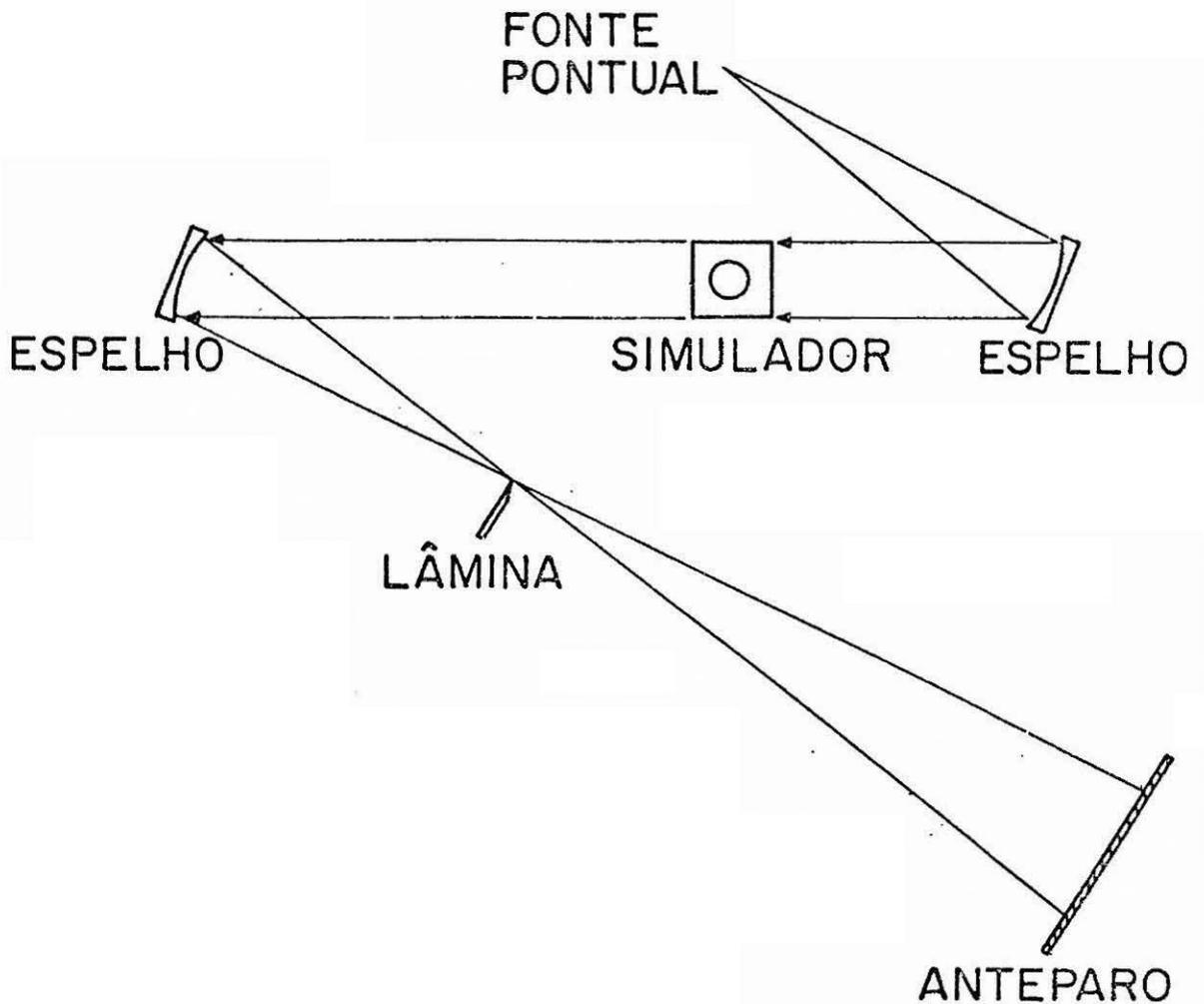


Figura 3.8 - Representação esquemática do método Schlieren de visualização.

Após atravessar o objeto, o feixe luminoso é refletido pelo segundo espelho ($f_2 = 100\text{cm}$) e reconvergido no foco principal dele. Neste ponto situa-se uma lâmina (paralela à fenda da fonte), cujo deslocamento, transversal à linha de incidência do feixe, pode ser ajustado por meio de um parafuso micrométrico.

Se não houver variação no índice de refração do líquido, os raios emergentes do objeto de estudo serão paralelos entre si e, neste caso, convergirão num único ponto. No entanto, se a condição anterior não for verificada, os raios refratados nas regiões de diferentes índices de refração não mais emergirão paralelamente aos demais, originando diferentes pontos de convergência sobre um mesmo plano. É possível, deslocando a lâmina, obstruir aproximadamente a metade desses raios desviados (impedindo-os de serem transmitidos ao anteparo). Focalizando a imagem do objeto sobre o anteparo, os raios desviados que foram obstruídos originam sombras, enquanto os raios desviados que não foram obstruídos se somam à iluminação no anteparo. Em suma, a variação no índice de refração (no líquido) desvia os raios luminosos, os quais são parcialmente obstruídos, originando, com isto, uma mudança na intensidade luminosa dos diferentes pontos que compõem a imagem do objeto.

Como mencionado anteriormente, o líquido simulador foi obtido a partir de uma solução aquosa de glicerina onde, para $n = 1,459$, a maior contribuição em volume é devida à glicerina. A glicerina é uma substância higroscópica, isto é, absorve com facilidade a água contida no ar (na forma de vapor), originando, deste modo, diferentes concentrações de água na superfície do líquido simulador. Sob a ação da convecção forçada esta inhomogeneidade se espalha no volume da solução, e certamente desaparecerá se houver uma mistura efetiva do líquido.

O Apêndice F fornece algumas sugestões que poderão eventualmente auxiliar o dimensionamento de um sistema Schlieren de observação.

3.1.6 - VIDEOGRAVAÇÃO

Alguns dos experimentos foram filmados com uma câmara SABA (semiprofissional) e registrados em fita cassete por meio de um videogravador PANASONIC VHS 366.

Com o auxílio de um anteparo (papel cartão branco) e duas lâmpadas ("fotoflood") de 500W (Figura 3.9), foi possível, sob condições suficientes de luminosidade, a filmagem dos experimentos realizados com injeção de tinta.

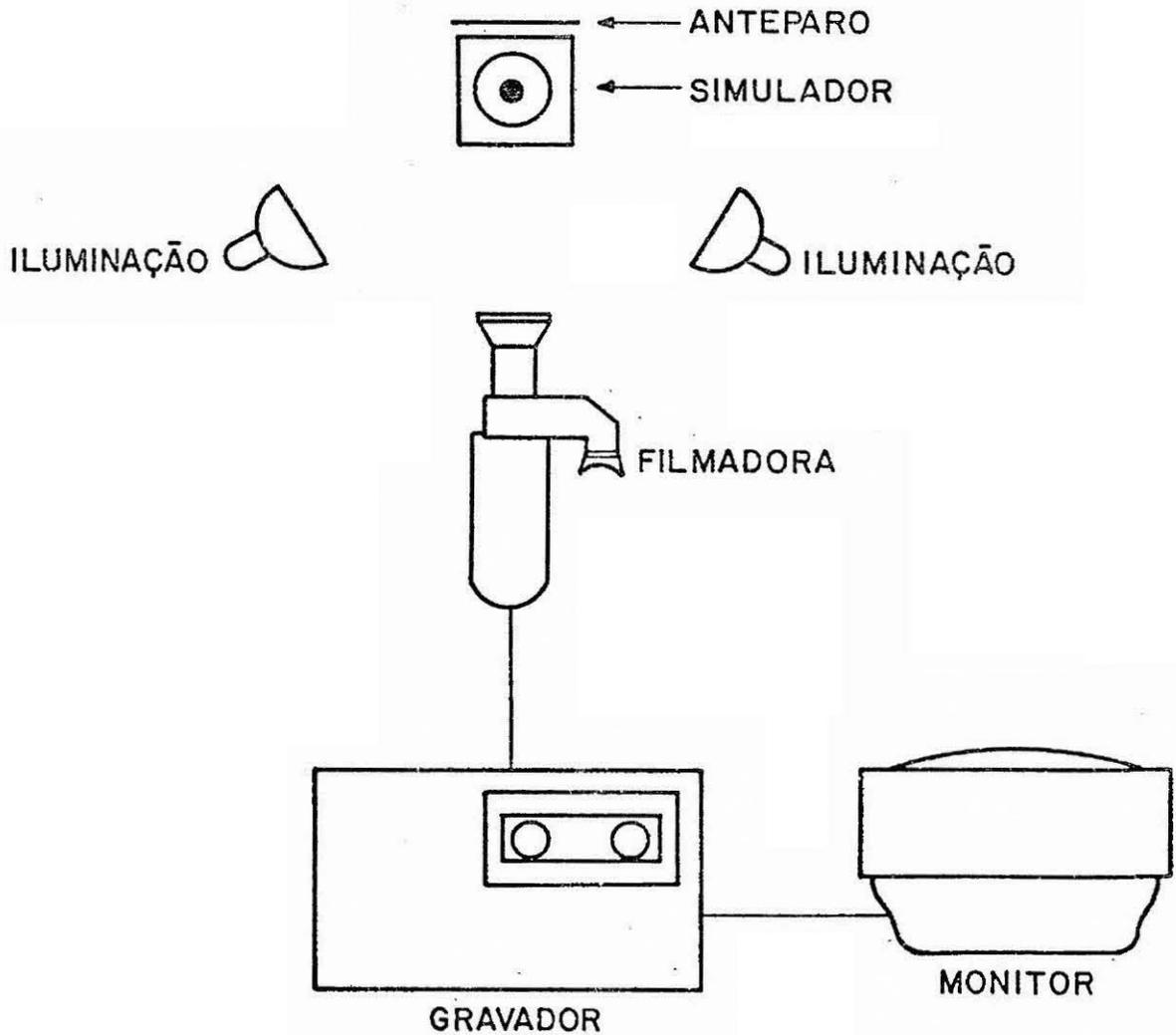


Figura 3.9 - Filmagem dos experimentos.

As imagens produzidas pelo método Schlieren também puderam ser filmadas na ausência de iluminação auxiliar e ambiente.

Os experimentos foram filmados para que: a mesma combinação de parâmetros pudesse ser reobservada sem a repetição da prática experimental, a comparação simultânea de experimentos pudesse ser possibilitada, as observações experimentais e os resultados de simulação numérica pudessem ser confrontados, e a explicação e demonstração das práticas experimentais pudessem ser facilitadas.

3.1.7 - ANEMOMETRIA DOPPLER POR LASER

Embora a técnica descrita na Seção 3.1.4 forneça informações relevantes à distribuição de velocidade do líquido, o mesmo não pode ser dito com relação à exatidão de tais medidas. Entretanto, alta precisão de medida pode ser obtida, utilizando o conceito fundamental de variação de frequência da luz emitida por uma partícula em movimento. Ou seja, quando um feixe de luz monocromática interage com pequenas partículas (contidas no líquido) que refletem parte da luz incidente, a frequência da luz espalhada é levemente alterada pelo efeito Doppler (Apêndice G), e esta variação de frequência é proporcional à velocidade do fluido.

A anemometria Doppler por laser é uma técnica capaz de detectar esta variação, no entanto só para velocidades muito altas esta mudança de frequência pode ser medida diretamente (interferômetro de Fabry-Perot).

Na Figura 3.10 é mostrado um dos diferentes arranjos ópticos disponíveis comercialmente. Neste caso o feixe do laser é separado por duas partes iguais, através de um divisor de feixe. Uma lente colocada antes do objeto converge os feixes dentro do líquido simulador. Quando os dois feixes se cruzam há a formação de uma região alternada (padrão de franjas) de reforço e redução da intensidade luminosa devida ao fenômeno de interferência das ondas de luz. Quando uma partícula atravessa o padrão de franjas, espalha mais luz nas regiões de reforço. Assim, a luz recebida no detector mostrará um sinal elétrico que varia com uma frequência proporcional à velocidade com que a partícula cruza as franjas de interferência. A distância "s" entre as franjas é dada por (Apêndice G)

$$s = \frac{\lambda}{2 \sin\left(\frac{\theta}{2}\right)}, \quad (3.1)$$

onde θ é o ângulo entre os dois feixes convergentes. Se uma partícula passa através das franjas com uma componente de velocidade v' na direção perpendicular (às franjas), o sinal será modulado à frequência

$$v_D = \frac{2v'}{\lambda} \text{sen}(\theta/2) , \quad (3.2)$$

onde λ é o comprimento de onda da radiação no líquido, o qual é diferente no vácuo por um fator igual ao índice de refração, ou seja, $\lambda = \frac{\lambda_0}{n}$. Assim, a frequência Doppler pode ser escrita como

$$v_D = \frac{2nv'}{\lambda_0} \text{sen}(\theta/2) . \quad (3.3)$$

Este sinal é coletado e focalizado sobre o detector, o qual transforma o sinal ótico em sinal elétrico. Após ser amplificado o sinal elétrico é enviado ao processador de sinal e convertido em velocidade.

3.2 - VISUALIZAÇÃO DO FLUXO DE EXPERIMENTOS UTILIZANDO A ACRT

3.2.1 - EXPERIMENTOS VISUALIZADOS COM INJEÇÃO DE TINTA - CADINHO DE FUNDO PLANO

A primeira série de experimentos de simulação hidrodinâmica foi realizada com um cadinho de fundo plano, preenchido com água à altura de 8 cm. O contato entre o "cristal" e o líquido foi mantido ligeiramente acima do nível da superfície livre da fase líquida, para simular a configuração (Czochralski) de crescimento.

O desempenho da técnica ACRT foi investigado através de experimentos sistemáticos, em isorotação e contra-rotação, nos quais o movimento de rotação do cadinho e/ou do cristal foi acelerado e desacelerado de 0 a 20rpm ou de 0 a 60rpm, com uma inversão no sentido de rotação em $\Omega = 0$ e uma periodicidade (T) igual a 12,4s. O que corresponde a um intervalo de aceleração ou desaceleração não superior a 3,1s, isto é, cada período do ciclo ACRT, é composto por quatro intervalos regulares de tempo (duas acelerações e duas desacelerações) e um patamar em $\Omega = 0$, cuja magnitude é inversamente proporcional à velocidade de rotação máxima (Ω_{max}). A configuração característica do ciclo ACRT gerado pelo sistema eletrônico (Seção 3.1.2), para diferentes períodos, está indicada na Figura 3.11.

O comportamento do líquido foi visualizado injetando-se 0,3ml de tinta, por experimento. Visando obter um alto teor instantâneo de contraste e um tempo de distúrbio reduzido, esta quantidade de tinta foi introduzida durante um curto intervalo de tempo (<1s).

A configuração do fluxo secundário estabelecido no decurso da aceleração está indicada através das Figuras¹ 3.12 a 3.19, no entanto deve ser enfatizado que os traços gráficos, que compõem tais figuras, não fornecem nenhuma informação adicional, exceto o sentido do fluxo secundário.

¹ Os experimentos realizados em contra-rotação estão indicados por meio de um sinal negativo, o qual precede o valor da rotação máxima do "cristal".

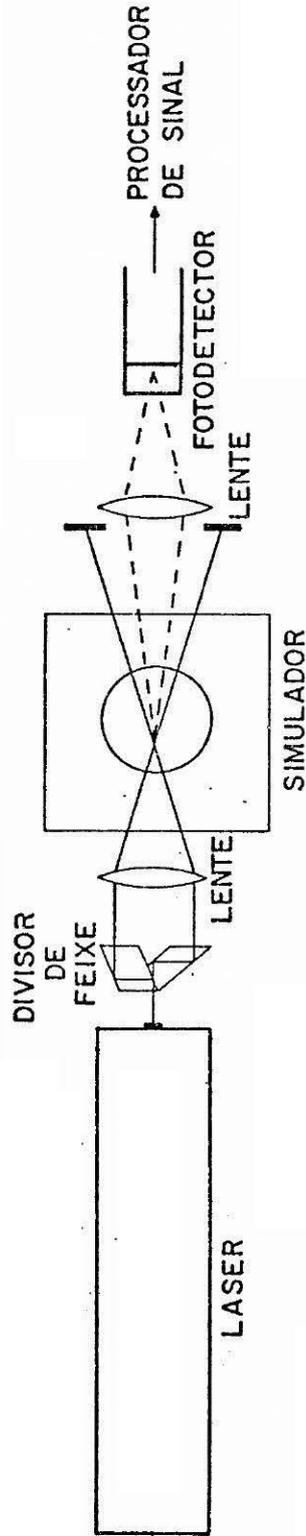


Figura 3.10 - Aplicação da técnica de anemometria Doppler por laser nos experimentos de simulação ACRT.

Adaptado de Durst et alii (1981), p. 4.

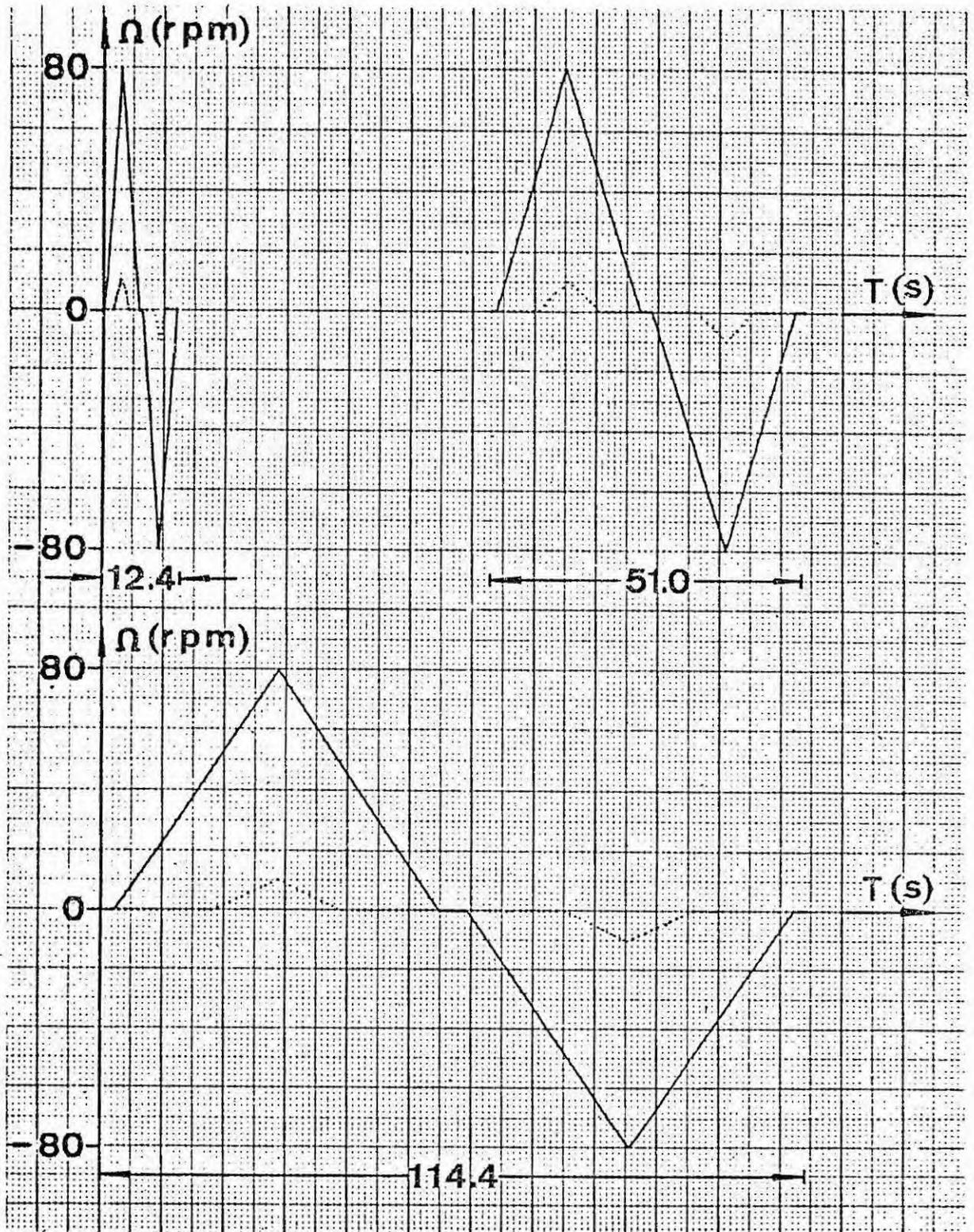


Figura 3.11 - Configuração característica do ciclo ACRT para $T = 114,4s, 51,0s$ e $12,4s$. O comprimento do patamar em $\Omega = 0$ aumenta proporcionalmente com o período do ciclo e diminui com o aumento de Ω_{\max} .

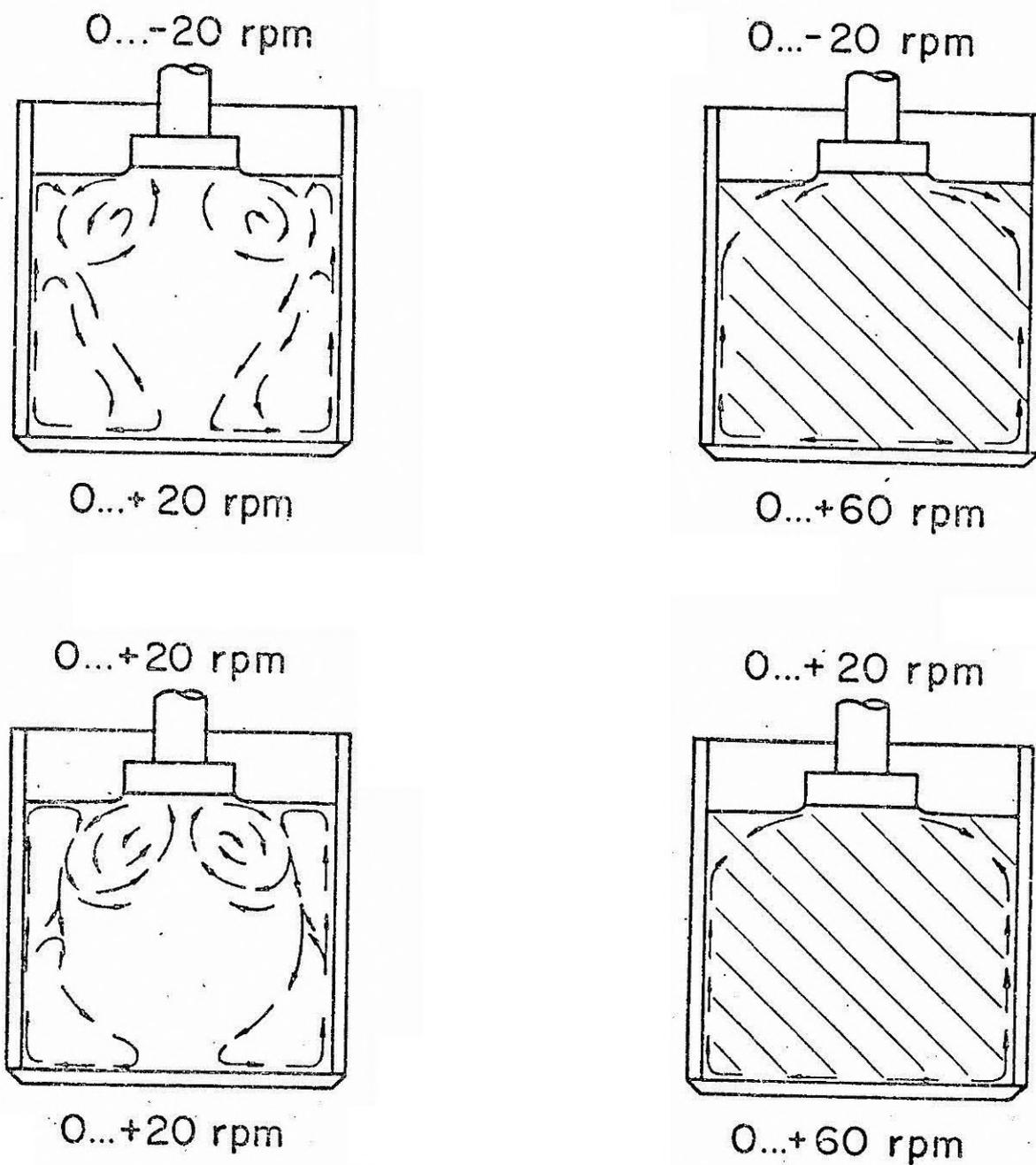


Fig. 3.12 - Configuração do fluxo secundário induzida pelo movimento de rotação acelerado do cadiño e do "cristal" em contra-rotação e isorrotação para um ciclo ACRT igual a 12.4s.

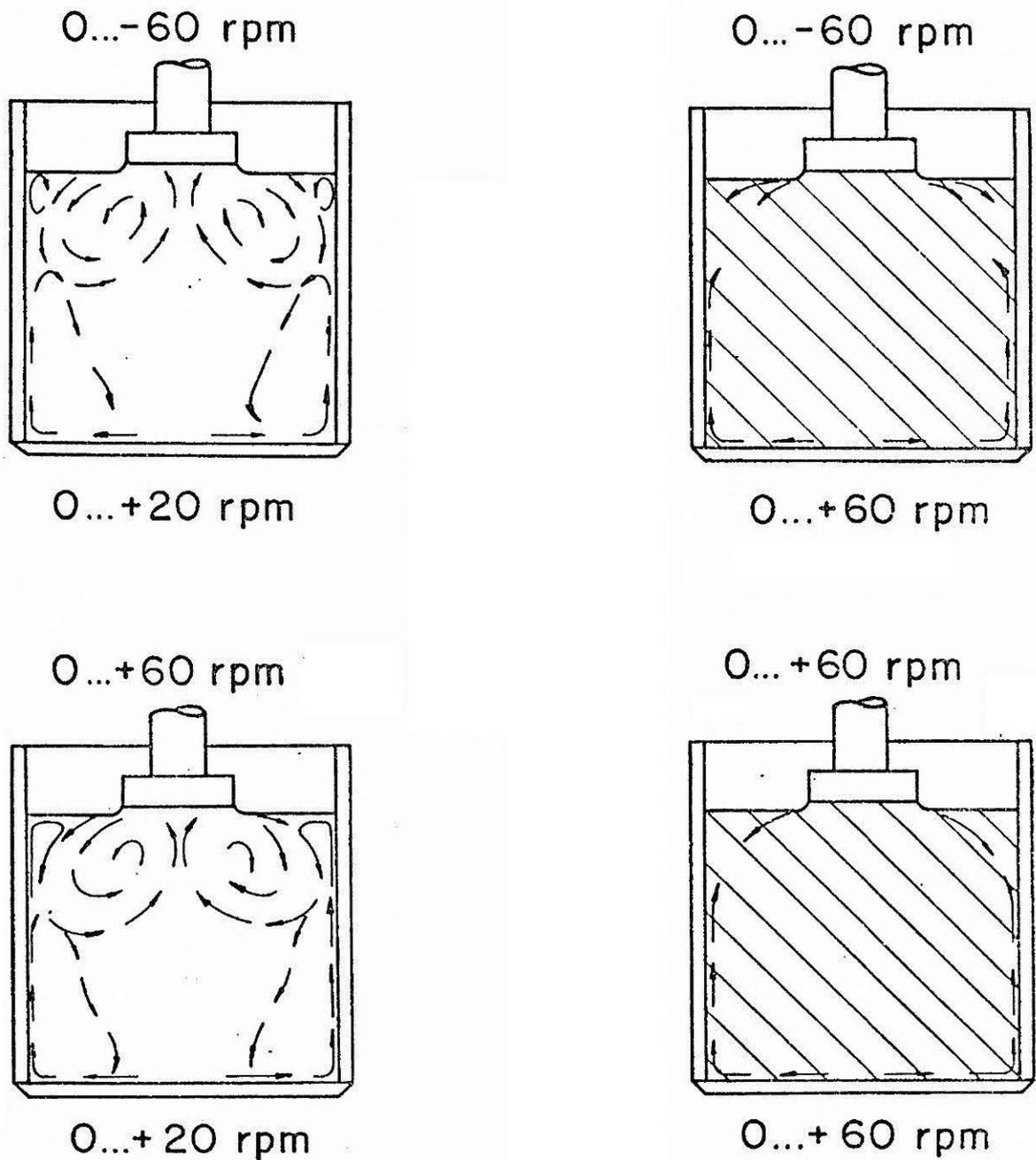
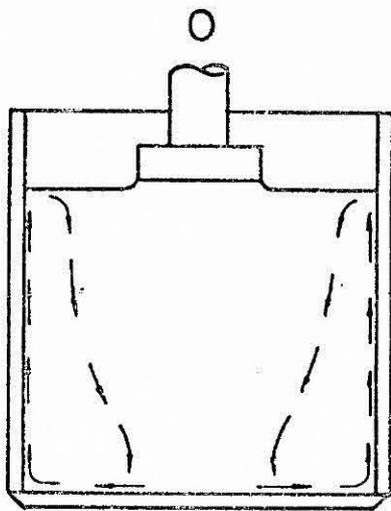
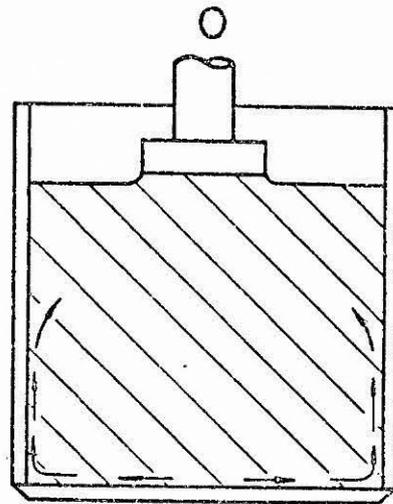


Fig. 3.13 - Configuração do fluxo secundário induzida pelo movimento de rotação acelerado do cadinho e do "cristal" em contra-rotação e isorotação para um ciclo ACRT igual a 12,4s.

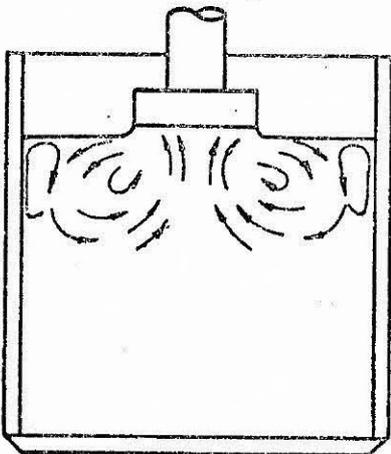


0... 20 rpm



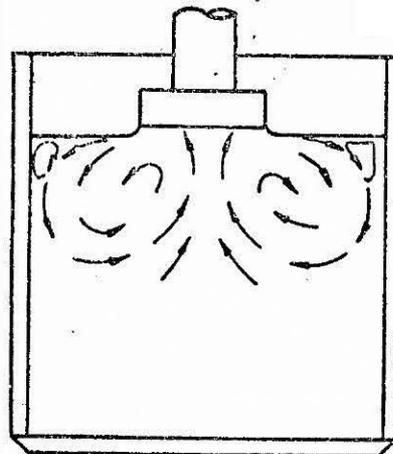
0... 60 rpm

0... 20 rpm



0

0... 60 rpm



0

Fig. 3.14 - Configuração do fluxo secundário induzido pelo movimento de rotação acelerado do cadinho ou do "cristal" para um ciclo ACRT igual a 12,4s.

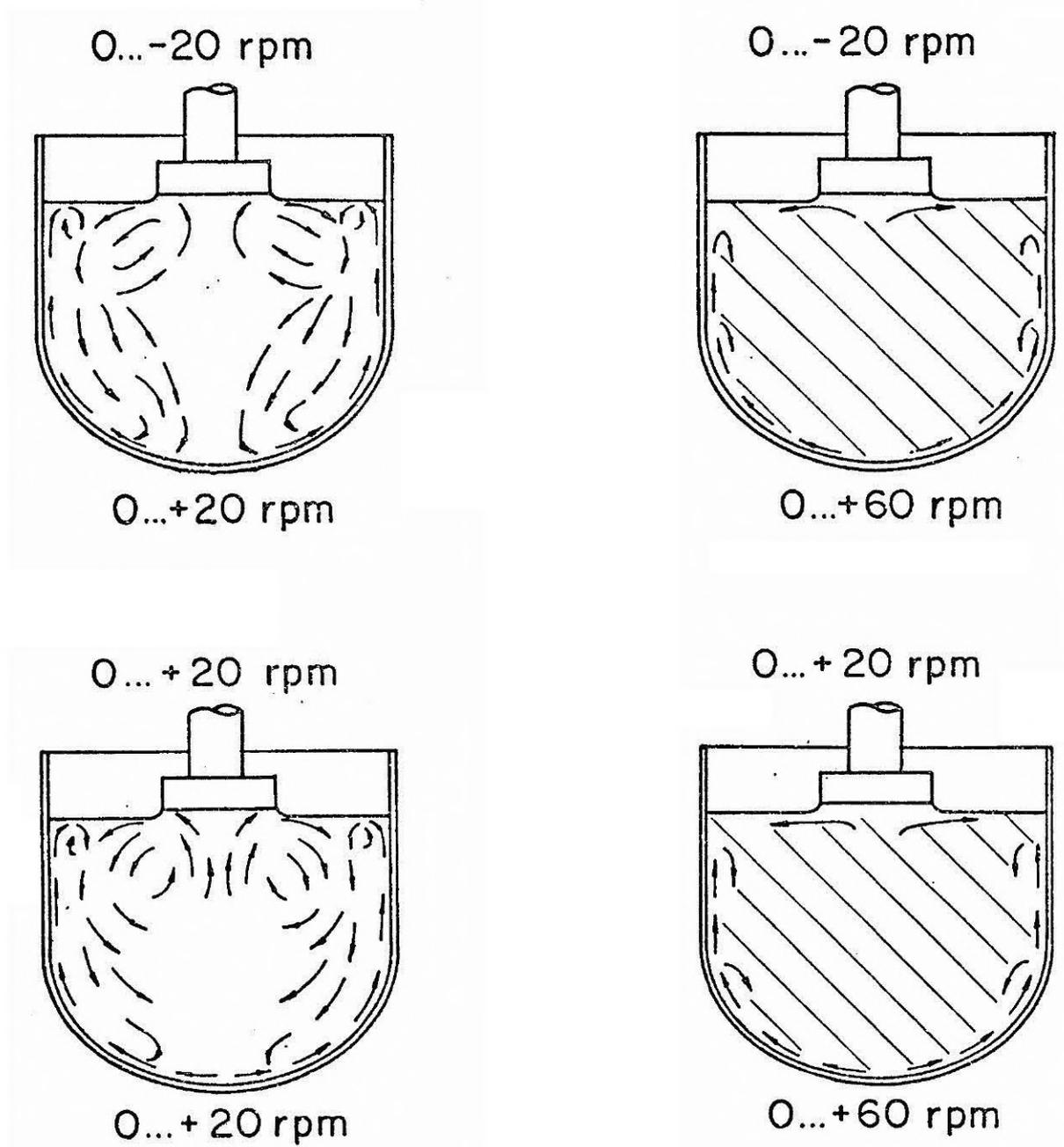


Fig. 3.15 - Configuração do fluxo secundário induzida pelo movimento de rotação acelerado do cadinho e do "cristal" em contra-rotação e isorotação para um ciclo ACRT igual a 12,4s.

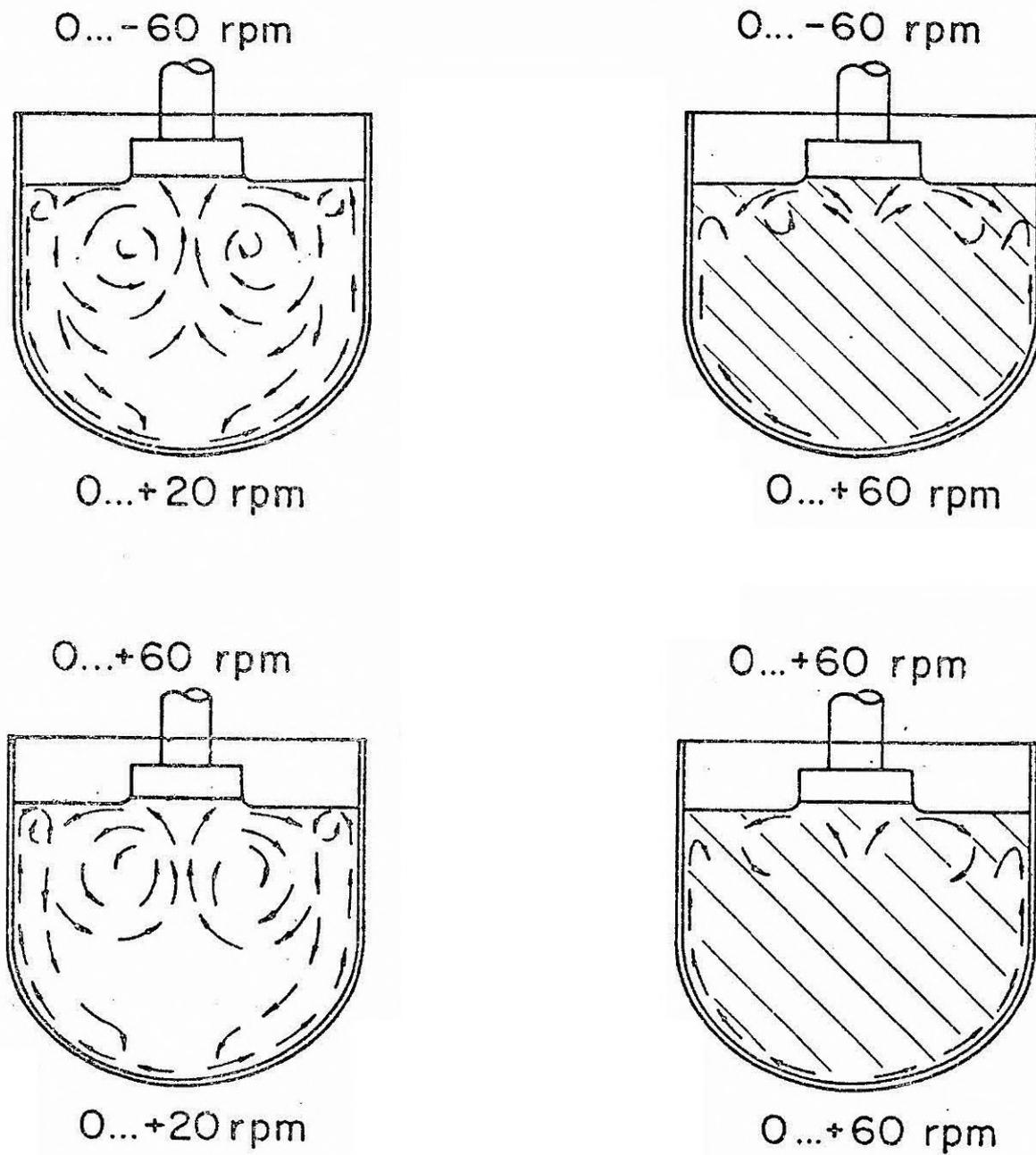
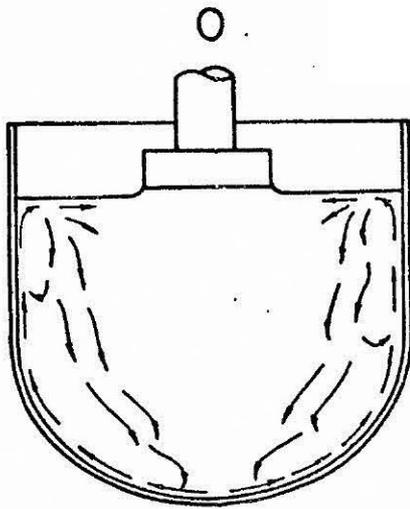
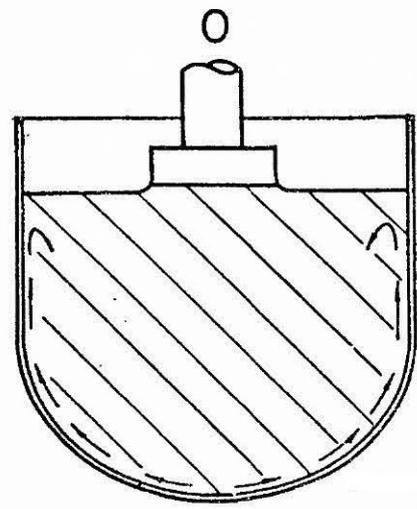


Fig. 3.16 - Configuração do fluxo secundário induzida pelo movimento de rotação acelerado do cadinho e do "cristal" em contra-rotação e isorrotação para um ciclo ACR igual a 12,4s.

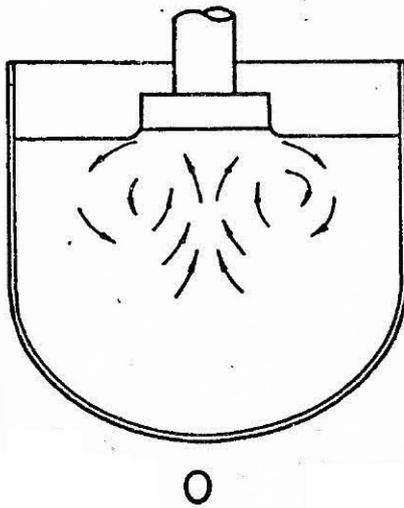


0...20 rpm



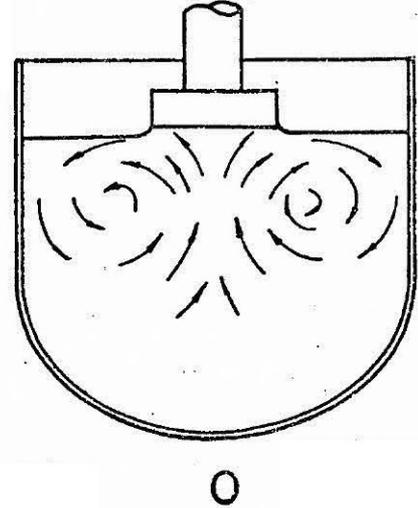
0...60 rpm

0...20 rpm



0

0...60 rpm



0

Fig. 3.17 - Configuração do fluxo secundário induzida pelo movimento de rotação acelerado do cadinho ou do "cristal" para um ciclo ACRT igual a 12,4s.

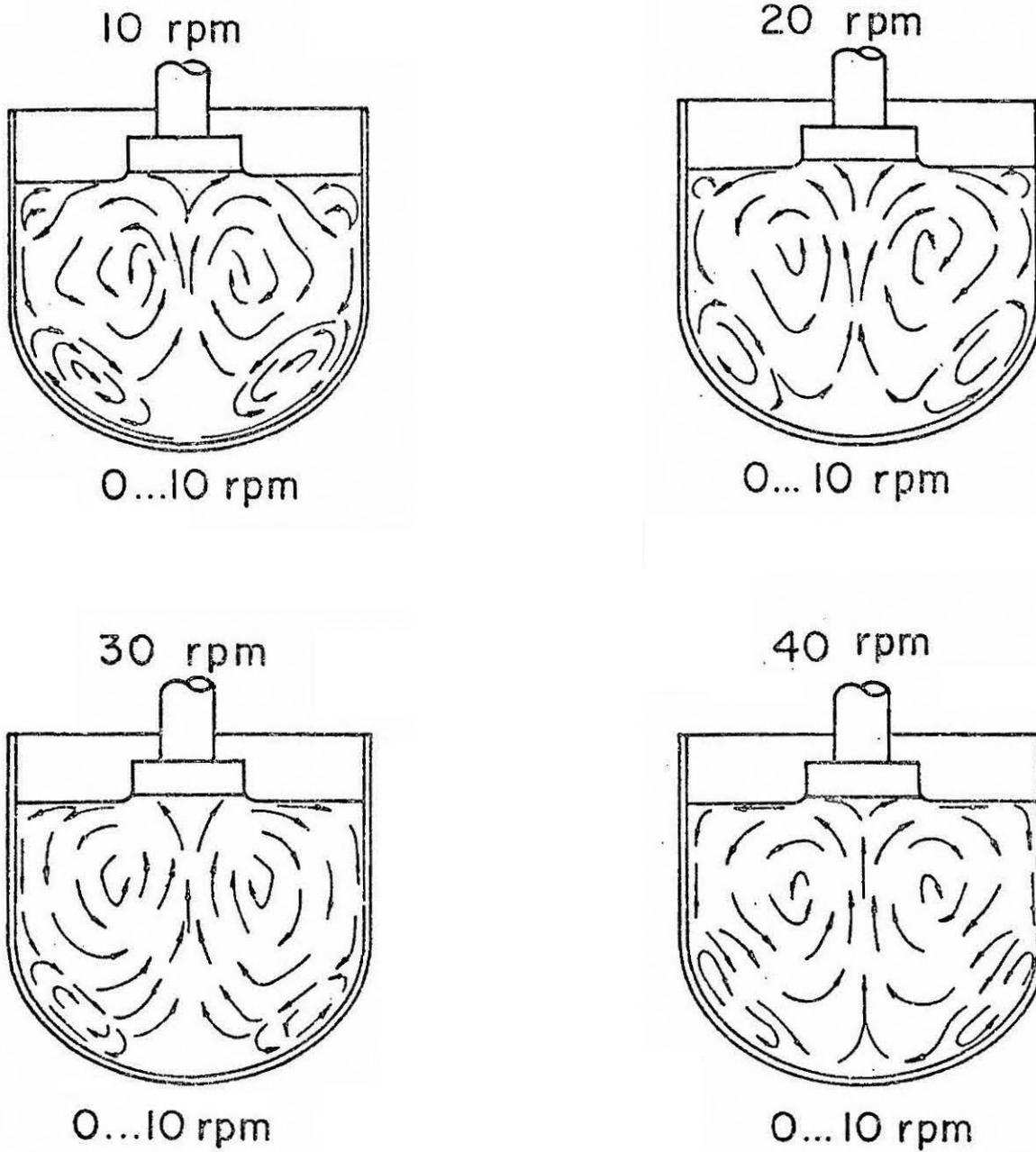


Fig. 3.18 - Fluxo secundário induzido pela rotação constante do "cris-
tal" e pelo movimento de rotação acelerado do cadinho para
um ciclo ACRT igual a 12,4s.

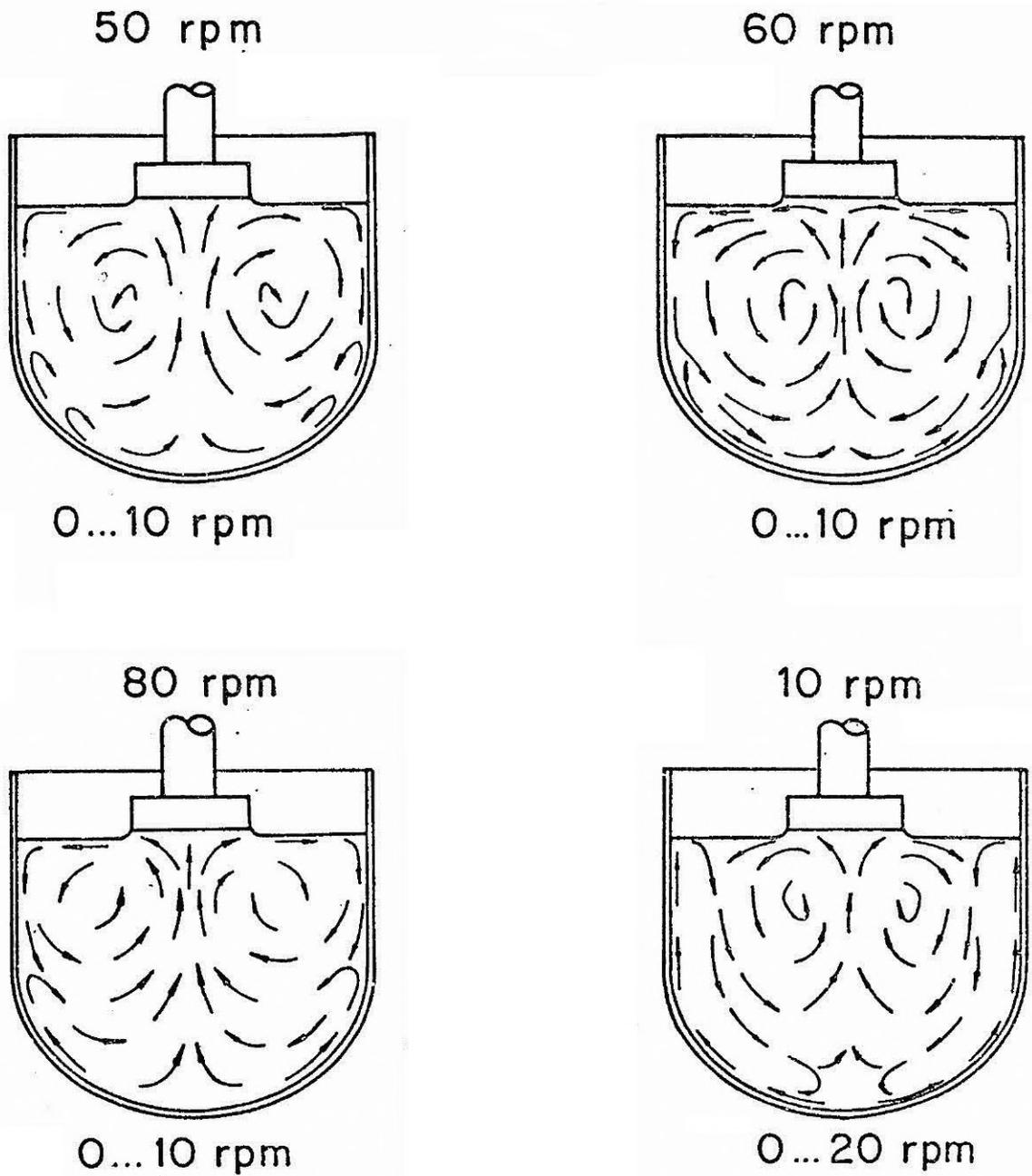


Fig. 3.19 - Fluxo secundário induzido pela rotação constante do "cris-
tal" e pelo movimento de rotação acelerado do cadiño pa-
ra um ciclo ACRT igual a 12,4s.

A presente discussão está fundamentada na análise qualitativa dos resultados experimentais em termos do número adimensional de Ekman (E), o qual é calculado considerando a rotação do cadinho como sendo dominante, desde que $\Omega_2 \neq 0$. Esta aceitação é plenamente justificável lembrando que $R \cong 3r$.

O fato de E ser muito menor do que 1 ($2,09 \leq \Omega_{\text{máx}} \leq 6,28$ rad/s $\rightarrow 7,9 \cdot 10^{-5} \leq E \leq 2,4 \cdot 10^{-4}$, onde $R = 4,5$ cm e $\nu = 1$ centistokes), implica no aparecimento de um escoamento em camada induzido pela diferença existente entre a velocidade de rotação do cadinho e/ou do "cristal" e o meio hidrodinâmico. Analisando inicialmente este escoamento devido à aceleração do cadinho, pode-se observar a ocorrência de um fluxo radial, contido numa estreita camada horizontal (camada de Ekman), formada próximo ao fundo do cadinho. O fluido nesta camada movimenta-se sob a ação da força centrífuga, em direção à parede, conforme indicado nas Figuras 3.12 - 14. O fluxo assim desenvolvido é desviado (verticalmente) subindo ao longo da camada de Stewartson e, devido à continuidade, o fluido removido retorna ao fundo do cadinho através de regiões mais internas. Sob tal circunstância a camada de Ekman pode ser considerada como uma camada de sucção (induzindo a circulação convectiva do fluido que auxilia o aumento da velocidade angular do líquido no interior do cadinho).

Por razões semelhantes, a aceleração do "cristal" também origina um fluxo vertical, a fim de repor o fluido espalhado radialmente através da camada de Ekman. Este fluxo, o qual tem sido chamado indiretamente na literatura como fluxo de Cochran¹, é o responsável pela circulação do líquido próximo à superfície do "cristal".

Como foi visto na Seção 2.4, a desaceleração angular das fronteiras sólidas induz o aparecimento de um fluxo secundário, que é caracterizado pela inversão no sentido da circulação desenvolvida duran

¹ O fluxo de Cochran descreve o escoamento adjacente a um disco girante, de raio infinito, que não é o caso do cristal.

te a aceleração. Contudo, dentro do alcance deste modelo experimental, nem sempre foi possível visualizar a ocorrência de tal efeito e, neste caso, a desaceleração é identificada apenas por um decréscimo na velocidade de escoamento. Provavelmente este fato pode ser justificado por meio de um modelo simples, no qual o efeito de inversão no sentido do fluxo secundário aumenta com o período do ciclo ACRT, tornando-se máximo para $T/4 = E^{-1/2} \Omega^{-1}$ (Seção 2.4 e Greenspan (1969)). Ou seja, para um ciclo de aceleração/desaceleração reduzido, apenas uma estreita camada do fluido, imediatamente próxima às fronteiras sólidas, sofre a variação de velocidade imposta pelo ciclo ACRT, enquanto nas demais regiões pressupõe-se o momento angular quase nulo. Por esta razão, conforme indicado na Figura 3.20a, o efeito de inversão no sentido do fluxo secundário mostra-se pouco perceptível durante a desaceleração. À medida que o período do ciclo ACRT aumenta, a espessura da camada de fluido com vorticidade não nula também aumenta e, como consequência direta deste fato, a inversão no sentido do escoamento torna-se mais evidente, como mostrado na Figura 3.20b.

Embora as Figuras 3.12 - 14 ilustrem o padrão do fluxo secundário estabelecido no decurso da aceleração, a mesma configuração é praticamente observada durante a desaceleração, senão para $\Omega_2 = 60\text{rpm}$, como será discutido adiante. As envoltórias indicadas naquelas figuras, por traços gráficos, denotam as regiões onde a circulação do fluido é induzida pelo escoamento em camada, enquanto a parte central do cadinho é caracterizada (ou aproximadamente caracterizada) pela ausência de convecção e, portanto, baixo momento angular. Este fato talvez justifique a razão pela qual não foi possível visualizar nenhuma camada de cisalhamento (ou superfície de estagnação), decorrente do movimento contra-rotacional (Seção 1.3 e 2.4) e a semelhança existente entre os resultados obtidos em isorotação e em contra-rotação.

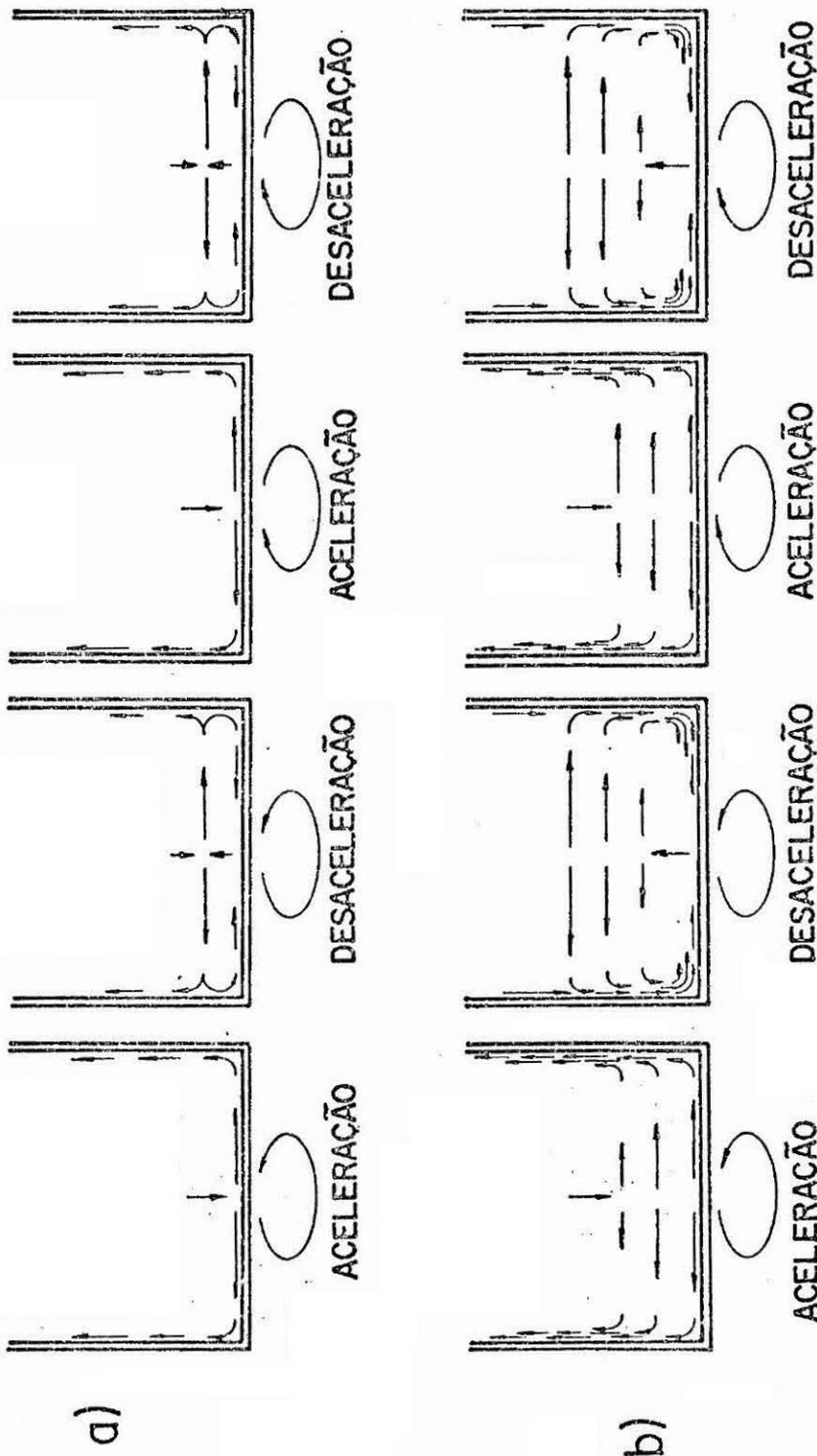


Figura 3.20 - Fluxo secundário induzido durante a aceleração e a desaceleração do caudal, para a) um ciclo ACRT com $T/4 << E^{-1/2}\Omega^{-1}$, b) um ciclo ACRT com $T/4 >> E^{-1/2}\Omega^{-1}$.

Como é esperado, à medida que a velocidade angular aumenta, a circulação do fluido devida ao escoamento em camada torna-se mais eficiente, em virtude do domínio gradativo imposto pela força de Coriolis sobre as forças viscosas. Assim, para $\Omega_2 = 60\text{rpm}$, a tinta injetada no interior do líquido é rapidamente espalhada ao longo das fronteiras sólidas, durante a aceleração, enquanto na desaceleração o fluxo é instável e torna-se turbulento e caracterizado por um transiente com linhas de escoamento espirais (vórtices de Taylor transiente, Seção 2.4) superpostas ao escoamento em camada. Em face da complexidade e da rapidez com que este mecanismo se desenvolve, não foi possível representar através de figuras os detalhes que envolvem o processo de homogeneização verificado neste caso.

Em suma, pode-se dizer que para $\Omega_2 = 20\text{rpm}$ as velocidades são relativamente baixas, até mesmo com $\Omega_1 = 60\text{rpm}$, e que o processo de homogeneização da fase líquida é insuficiente. Para $\Omega_2 = 60\text{rpm}$ observa-se uma mistura completa do líquido, independente da velocidade angular imposta ao "cristal" e que, neste caso, os efeitos de instabilidade são os agentes responsáveis pela homogeneização do fluido. Quando $\Omega_2 = 0$ e $\Omega_1 \neq 0$ a movimentação efetiva do líquido restringe-se às regiões próximas à superfície do "cristal" e o alcance dos efeitos produzidos aumentam com Ω_1 .

3.2.2 - EXPERIMENTOS VISUALIZADOS COM INJEÇÃO DE TINTA - CADINHO DE FUNDO CÔNCAVO

A segunda série de experimentos de simulação hidrodinâmica foi realizada mantendo-se os mesmos parâmetros utilizados na Seção anterior, exceto a utilização de um cadinho de fundo côncavo com o raio igual a 4,95cm.

Os resultados obtidos estão indicados nas Figuras 3.15-19. Embora nenhuma mudança aparente tenha sido verificada com relação à configuração do fluxo secundário descrito na Seção 3.2.1, o escoamento em camada induzido pelo cadinho de fundo côncavo representa ser mais eficiente, dado que o tempo requerido para o espalhamento da tinta injetada é menor.

Os diferentes formatos e tamanhos com que a região central do cadinho aparece indicada naquelas figuras, demonstra a dificuldade que envolve a visualização do fluxo, devido à velocidade baixa do fluido nesta região.

Com o objetivo de viabilizar a convecção do fluido na região central do cadinho, o "cristal" foi submetido a velocidades de rotação constantes. Na verdade, esta idéia foi motivada a partir dos resultados experimentais obtidos através da técnica de visualização por espalhamento de luz (Seção 3.2.3).

Na presente investigação, o cadinho foi acelerado e desacelerado de 0 a 10rpm, com o período do ciclo ACRT fixado em 12,4s, e a velocidade do "cristal" (rotação constante) foi variada de 10 a 80rpm, por experimento. O comportamento do fluido foi visualizado injetando-se pequenas quantidades de tinta, as quais foram introduzidas, desta vez, de forma lenta e sucessiva em diferentes regiões.

Nos casos em questão, a rotação do "cristal" exerce grande influência na circulação do fluido, que é observada inclusive na região central do cadinho, e a extensão desta influência depende do valor de Ω_1 . Em face da magnitude pequena de Ω_2 , a convecção causada pela rotação do cadinho restringe-se apenas às regiões próximas ao fundo do recipiente, e as diferentes formas com que tais regiões estão representadas nas Figuras 3.18 e 3.19 demonstram o domínio dos efeitos produzidos pela rotação do "cristal", à medida que Ω_1 aumenta. Do mesmo modo que na região central do cadinho a circulação do fluido aumenta com Ω_1 , nas regiões periféricas esta circulação aumenta com Ω_2 , conforme ilustrado na Figura 3.19. É interessante salientar que para $\Omega_1 > \Omega_2$, é possível visualizar o efeito produzido pelo escoamento em camada, decorrente da aceleração e desaceleração do cadinho, tendo-se em vista a variação periódica da velocidade do fluxo axial, gerado pela rotação do "cristal" e desenvolvido próximo à região de escoamento.

Embora, nos casos mencionados, a homogeneização no cadinho ocorra de forma relativamente vagarosa, os resultados experimentais podem ser caracterizados pela movimentação completa do líquido.

3.2.3 - EXPERIMENTOS COM ESPALHAMENTO DE LUZ - CADINHO DE FUNDO PLANO

Com o auxílio da técnica de visualização por espalhamento de luz, descrita na Seção 3.1.4, os efeitos da técnica ACRT foram investigados mantendo-se inicialmente $\Omega_1 = 0$, e variando-se, para cada um dos experimentos, a velocidade de rotação máxima do cadinho e o período do ciclo ACRT. Com exceção do líquido simulador (solução aquosa de iodo de potássio, $\nu = 0.64$ centistokes) os demais parâmetros experimentais utilizados nas Seções 3.2.1 e 3.2.2 foram mantidos constantes.

A movimentação do fluido para $T = 12,4s$ e $\Omega_{\text{máx.}} < 40\text{rpm}$, é causada pelo escoamento em camada, o qual gradativamente alcança a superfície livre do líquido à medida que $\Omega_{\text{máx.}}$ aumenta. A eficiência da circulação só ocorre próximo às paredes do cadinho, enquanto as demais regiões mantêm-se praticamente sem movimento. Quando $\Omega_{\text{máx.}} > 40\text{rpm}$, a desaceleração é caracterizada pelo aparecimento de vórtices de Taylor, os quais devido ao momento de inércia do fluido são observados apenas no instante que a rotação do cadinho é nula. Estes vórtices auxiliam a movimentação das camadas internas do líquido e a extensão desta perturbação aumenta com a velocidade angular do cadinho. Quando $\Omega_{\text{máx.}} \simeq 60\text{rpm}$, esta instabilidade originada no decurso da desaceleração torna-se turbulenta.

Por razões semelhantes, observa-se que para $T = 37,9s$ a movimentação do fluido na região central do cadinho só ocorre (embora ainda com velocidade baixa) quando $\Omega_{\text{máx.}} \simeq 30\text{rpm}$. Em tal situação, o líquido é agitado sob a influência dos vórtices de Taylor transientes, os quais parecem tornar-se turbulentos para $\Omega_{\text{máx.}} \simeq 50\text{rpm}$.

Ainda que de forma não tão acentuada, é possível visualizar, neste caso, a inversão no sentido do escoamento em camada no instante que $\Omega_2 = 0$. Nota-se também, no mesmo instante, haver para $\Omega_{\text{máx.}} > 40\text{rpm}$ indícios de assimetria no padrão do fluxo.

Embora a intensidade de todos os efeitos, descritos anteriormente, aumentem com o período do ciclo ACRT, observa-se que para $T > 63,4s$ o fluxo passa a ser caracterizado por uma configuração assimétrica transitória. Este fenômeno é identificado pela ocorrência de superfícies de cisalhamento (colunas), as quais são originadas pela desaceleração do cadinho. À medida que ω_{\max} aumenta, estas instabilidades alcançam a superfície livre do líquido, e a perturbação por elas provocada manifesta-se sob a forma de ondas. Ainda que a título de exemplo, apenas duas destas colunas tenham sido representadas na Figura 3.21, este número aumenta quando o período do ciclo ACRT cresce.

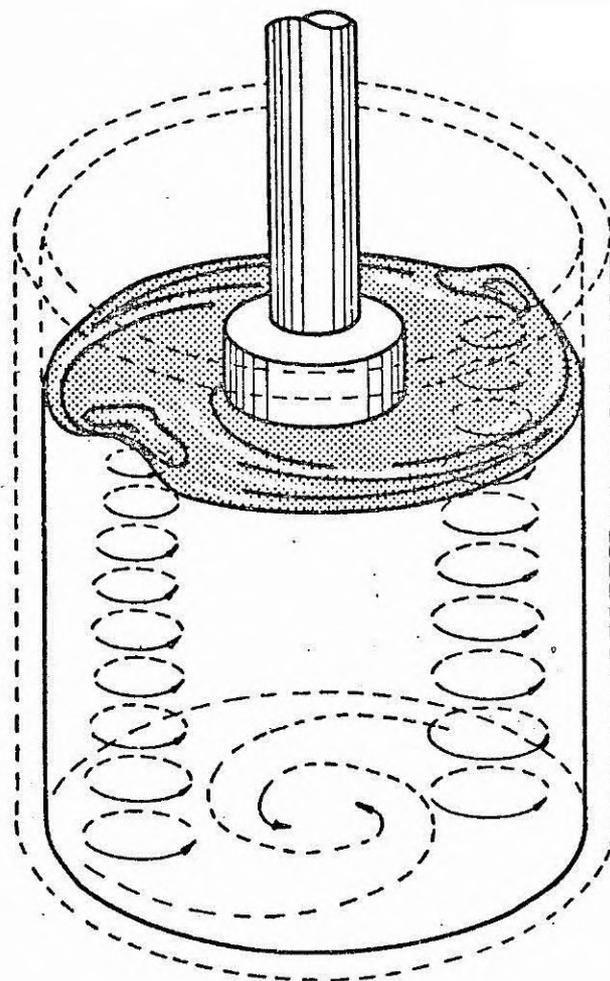


Figura 3.21 - Configuração do fluxo assimétrico transitório resultante da desaceleração do cadinho. Este fenômeno é nitidamente observado quando $T > 63s$.

Posteriormente, mantendo $\Omega_2 = 0$ e variando, para cada um dos experimentos, a velocidade de rotação máxima do "cristal" e o período do ciclo ACRT, observou-se que a influência da rotação do "cristal" sobre a circulação do líquido na região central do cadinho aumenta com a velocidade angular e com o período do ciclo ACRT. Como deve-se esperar, a circulação do fluido próximo à interface sólido-líquido é caracterizada por variações periódicas de velocidade, as quais correspondem à periodicidade do ciclo ACRT.

No entanto, submetendo-se o "cristal" a velocidades de rotação constantes, a penetrabilidade dos efeitos produzidos é superior aquela observada nos movimentos acelerados. Além disto, a convecção secundária parece, em certos casos, evitar que as perturbações induzidas, pela rotação do cadinho, alcancem a superfície do "cristal".

Os resultados experimentais, obtidos sob tais condições e conforme indicados na Figura 3.22, são caracterizados pela superposição de efeitos, exceto quando a velocidade de rotação do cadinho é muito baixa, a convecção secundária é devida exclusivamente ao escoamento em camada. Em virtude da magnitude pequena de Ω_2 , a ação do escoamento em camada não é suficiente para homogeneizar o líquido, requerendo que a velocidade de rotação do cristal seja maior do que 80rpm. Esta situação é identificada na Figura 3.22, como uma *região de mistura insuficiente*. A mistura efetiva do líquido se deve à ação conjunta do escoamento em camada (induzido pela rotação do cadinho e do "cristal") e dos efeitos de instabilidade (vórtices de Taylor transientes e assimetria no fluxo) produzidos pela desaceleração, o que caracteriza uma *região de mistura eficiente*. Embora para $T \gtrsim 88,9$ s esta região apresente, em certos casos, aspecto turbulento, a rotação do cristal ($\Omega_1 \gtrsim 40$ rpm) parece evitar que as perturbações alcancem a superfície do "cristal". Certamente que a eficiência da mistura aumenta com Ω_1 e Ω_2 , no entanto quando Ω_2 é muito grande o fluxo torna-se instável, podendo causar problemas durante o processo de crescimento. Esta situação é indicada na Figura 3.22 como uma *região de instabilidade*.

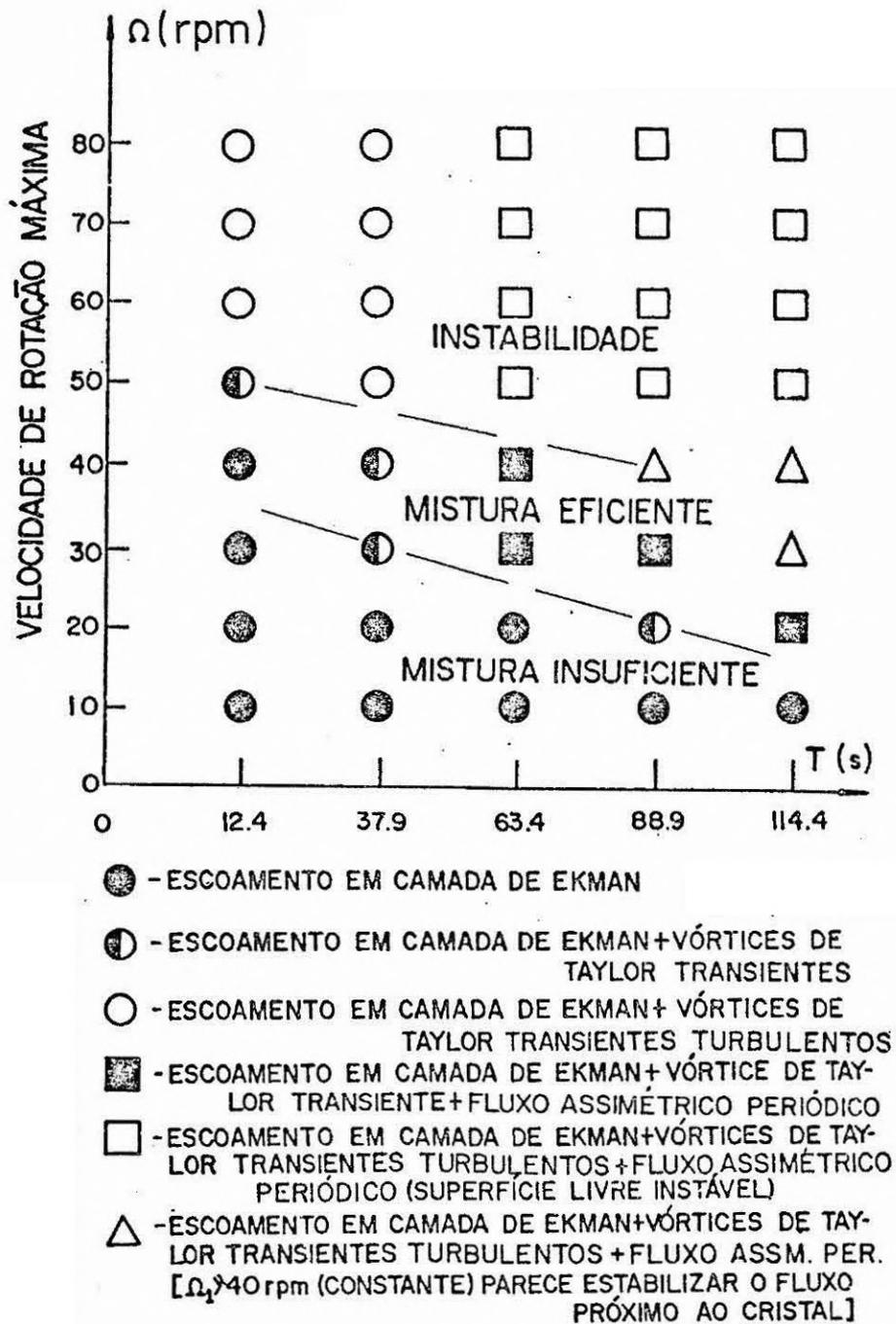


Figura 3.22 - Região de instabilidade, de mistura eficiente e de mistura insuficiente, obtidas através da variação sistemática dos parâmetros ACRT e submetendo o cristal a velocidades de rotação constantes. Os experimentos foram realizados usando uma solução aquosa de KI ($\nu = 0.64$ centistokes). Adaptado de Rappl et alii, 1984.

Deve ser enfatizado que para $T \gg 114s$ a eficiência da técnica ACRT diminui, a menos que a velocidade de rotação seja muito grande. Com vistas nisto, espera-se que a *região de mistura eficiente* tenda para um comportamento assintótico.

CAPÍTULO 4

CONCLUSÃO

Os experimentos sistemáticos de simulação hidrodinâmica, à temperatura ambiente, revelaram aspectos interessantes sobre a configuração da convecção forçada e o desempenho da técnica ACRT no processo Czochralski, conforme a análise subsequente.

A técnica de visualização por injeção de tinta, utilizada neste trabalho, permitiu, de forma simples e eficiente, uma avaliação tridimensional do padrão de fluxo. Embora a técnica de visualização por espalhamento de luz faculte apenas uma observação bidimensional do fluxo, sua aplicação não exerce influência sobre o sistema hidrodinâmico. O método Schlieren permite, sob condições específicas, avaliar o comportamento do fluido próximo às camadas de contorno. Visto que estas técnicas complementam-se entre si, é possível, por meio da combinação dos resultados obtidos, adquirir um bom entendimento do fluxo no processo Czochralski, especialmente quando as observações experimentais são assessoradas por considerações de similaridade (usando números adimensionais) e por meio de simulação numérica. Com vistas no futuro, é de interesse a correlação quantitativa entre os experimentos, no que diz respeito à determinação da distribuição de velocidade, por espalhamento de luz (fotografias, por anemometria Doppler por laser, como também por integração numérica.

Dentro do alcance deste modelo experimental nenhuma mudança significativa foi observada na configuração do fluxo, com relação à isorotação, contra-rotação e ao formato do fundo do cadinho, embora a técnica ACRT pareça ser mais eficiente quando aplicada em cadinho de fundo côncavo.

Deve ser enfatizado que a indesejável coluna e célula de Taylor-Proudman, as quais impedem a mistura completa do líquido no processo Czochralski convencional, podem ser eliminadas com a aplicação da técnica ACRT.

Observou-se que o período do ciclo ACRT com $T \approx 63,4s$ o fluxo passa a ser caracterizado por uma configuração assimétrica transitória, resultante da desaceleração do cadinho, mas devido ao momento de inércia do fluido o fenômeno só é visualizado quando $\Omega_2 \approx 0$. Esta instabilidade é identificada pelo aparecimento de um certo número de colunas de fluido (com uma vorticidade adicional), as quais, embora sejam originadas nas regiões periféricas do recipiente, movem-se em direção ao centro do cadinho, onde são desfeitas. À medida que Ω_{max} aumenta, a altura das colunas também aumenta e quando esta instabilidade alcança a superfície livre do líquido observa-se a formação de ondas. O autor não tem conhecimento, até o presente momento que este fenômeno tenha sido observado antes.

Observou-se que as condições ótimas de mistura podem ser obtidas submetendo o "cristal" à rotação constante e mantendo o cadinho em movimento de rotação acelerado. Assim, quando o período do ciclo ACRT diminui, a rotação do "cristal" induz a circulação do fluido na região central do cadinho, e parece se contrapor aos efeitos de instabilidade (próximo à superfície do cristal) quando o período do ciclo ACRT aumenta. Neste caso, a técnica ACRT demonstrou ser um método eficiente de homogeneização da fase líquida e demonstrou também ser possível conciliar a movimentação efetiva do líquido sem os efeitos de instabilidade (próximo ao cristal) por meio do ajuste conveniente dos parâmetros ACRT - veja Rappi et alii, 1984.

Os experimentos de simulação limitaram-se ao estudo da convecção forçada em condições isotérmicas, em face à complexidade que as considerações térmicas envolveriam. Embora os resultados obtidos devam ser cuidadosamente transferidos às condições reais de crescimento, já é possível esperar a influência destes resultados sobre o crescimento Czochralski de cristais mais homogêneos.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- BENNET, A.; HAMILTON, D.; MARADUDIN, A.; MILLER, R.; MURPHY, J. *Crystal perfect and imperfect*. New York, Westing House Search Books, 1965.
- BRANDLE, C.D. Flow transitions in Czochralski oxide melts. *Journal of Crystal Growth*, 57(1):65-70, 1982.
- BRICE, J.C.; WHIFFIN, P.A.C. Solute striae in pulled crystals of zinc tungstate. *British Journal of Applied Physics*, 18:581-585, 1967.
- BROSTOW, W. *Science of materials*. New York, John Wiley, 1979.
- BURTON, J.A.; PRIM, R.C.; SLICHTER, W.P. The distribution of solute in crystals grown from the melt. Part I Theoretical. *Journal of Chemical Physics*, 21(11):1987-1991, Nov. 1953.
- CARRUTHERS, J.R. Radial solute segregation in Czochralski growth. *Journal of the Electrochemical Society: SOLID STATE SCIENCE*, 114(9): 959-962, Sept. 1967.
- CARRUTHERS, J.R.; NASSAU, K. Nonmixing cells due to crucible rotation during Czochralski crystal growth. *Journal of Applied Physics*, 39(11):5205-5214, Oct. 1968.
- COCKAYNE, B.; GATES, M.P. Growth striations in vertically pulled oxide and fluoride single crystals, *Journal of Materials Science*, 2:118-123, 1967.
- COCHRAN, W.G. The flow due to a rotating disc. *Proceedings of the Philosophical Society*, 30(s.f.):365-375, 1934.
- CZOCHRALSKI, J. Ein neues Verfahren zur Messung der Kristallisationsgeschwindigkeit von Metallen. *Zeitschrift für Physikalische Chemie*, 92(s.f.):219-221, 1917.
- DASH, W.C. Growth of silicon crystals free from dislocations. *Journal of Applied Physics*, 30:459-474, 1959.
- DEKKER, A.J. *Solid state physics*. Englewood Cliffs, NJ, Prentice-Hall, s.d.
- DURST, F.; MELLING, A.; WHITELAW, J.H. *Principles and practice of laser doppler anemometry*. 2. ed. London, Academic, 1981.

- ELWELL, D.; SCHEEL, H.J. *Crystal growth from high-temperature solutions*. London, Academic, 1975.
- FRIEDLANDER, S. *An introduction to the mathematical theory of geophysical fluid dynamics*. Amsterdam, North-Holland, 1980.
- GILMAN, J.J. ed. *The art and science of growing crystals*. New York, John Wiley, 1963.
- GOOLDMAN, C.H.L. ed. *Crystal growth theory and techniques*. London, Plenum, 1974, V. 1.
- GOSS, A.J.; ADLINGTON, R.E. The effects of seed rotation on silicon crystals. *The Marconi Review*, 22:18-36, 1959.
- GREENSPAN, H.P. *The theory of rotating fluids*. New York, Cambridge University Press, 1968.
- HANNAY, N.B. *Treatise on solid state chemistry*. New York, NY, Plenum Press, 1973, V. 1, The chemical structure of solids.
- HARLOW, F.H.; WELCH, J.E. Numerical calculation of time-dependent viscous incompressible flow of fluid with free surface. *The Physics of Fluids*, 8(12):2182-2189, Dec. 1965.
- HIDE, R.; TITMAN, C.W. Detached shear layers in a rotating fluid. *Journal of Fluid Mechanics*, 29(1):39-60, 1967.
- HULL, D. *Introduction to dislocations*. Oxford, Pergamon, 1965.
- HURLE, D.T.J. Temperature oscillations in molten metals and their relationship to growth striae in melt-grown crystals. *Philosophical Magazine*, 13(122):305-310, Feb. 1966.
- HURLE, D.T.J. Convective transport in melt growth systems. *Journal of Crystal Growth*, 65(1-3):124-132, Dec. 1983.
- JONES, A.D.W. An experimental model of the flow in Czochralski growth. *Journal of Crystal Growth*, 61(2):235-244, Mar. 1983a.
- JONES, A.D.W. Spoke Patterns. *Journal of Crystal Growth*, 63(1):70-76, Sept. 1983b.
- KALLARD, T. *Exploring laser light*. New York, Optosonic, 1977.

- KIM, K.M.; WITT, A.F.; GATOS, H.C. Crystal growth from the melt under destabilizing thermal gradients. *Journal of the Electrochemical Society: SOLID-STATE SCIENCE AND TECHNOLOGY*, 119(9):1218-1226, Sept. 1972.
- KITTEL, C. *Introduction to solid state physics*. 4. ed. New York, John Wiley, 1971.
- KOBAYASHI, N.; ARIZUMI, T. The numerical analysis of the solid-liquid interface shapes during the crystal growth by the Czochralski method. *Japanese Journal of Applied Physics*, 9(4):361-367, Apr. 1970.
- LANGLOIS, W.E. Convection in Czochralski growth melts. *PCH Physicochemical Hydrodynamics*, 2(4):245-261, 1981.
- LANGLOIS, W.E.; SHIR, C.C. Digital simulation of flow patterns in the Czochralski crystal-pulling process. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 12:145-152, 1977.
- MIHELČIĆ, M.; SCHROECK-PAULI, C.; WINGERATH, K.; WENZL, H.; UELHOFF, W.; VAN DER HART, A. Numerical simulation of forced convection in the classical Czochralski method, in ACRT and CACRT. *Journal of Crystal Growth*, 53(2):337-354, 1981.
- MIHELČIĆ, M.; SCHRÖCK-PAULI, C.; WINGERATH, K.; WENZL, H.; UELHOFF, W.; VAN DER HART, A. Numerical simulation of free and forced convection in the classical Czochralski method and in CACRT. *Journal of Crystal Growth*, 57(2):300-317, Apr. 1982.
- MILLER, D.C.; PERNELL, T.L. Fluid flow patterns in a simulation garnet melt. *Journal of Crystal Growth*, 58:253-260, 1982.
- MÜLLER, A.; WILHELM, M. Periodische Temperaturschwankungen in flüssigem InSb als Ursache schichtweisen Einbaus von Te in kristallisierendes InSb. *Zeitschrift fuer Naturforschung*, 19a:254-263, 1964.
- NERNST, W. Theorie der Reaktionsgeschwindigkeit in heterogenen Systemen. *Zeitschrift fuer Physikalische Chemie*, 47(s.f.):52-55, 1904.
- PALMER, C.H. *Optics: experiments and demonstrations*. Baltimore, MD, John Hopkins, 1969. 312 p.

- PAMPLIN, B.R. ed. *Crystal growth*. Oxford, Pergamon, 1975.
- RAPPL, P.H.O.; MATTEO FERRAZ, L.F.; SCHEEL, H.J.; BARROS, M.R.X.; SCHIEL, D. Hydrodynamic simulation of forced convection in Czochralski melts. *Journal of Crystal Growth*, 70(1/2):49-55, Dec. 1984.
- READ, JR., W.T. *Dislocations in crystals*. New York, NY, McGraw-Hill, 1953.
- READY, F.J. *Industrial applications of lasers*. New York, NY, Academic, 1978.
- RYTZ, D.; SCHEEL, H.J. Crystal growth of $\text{KTa}_{1-x}\text{Nb}_x\text{O}_3$ ($0 < x \leq 0.04$) solid solutions by a slow-cooling method. *Journal of Crystal Growth*, 59(3):468-484, Oct. 1982.
- SCHEEL, H.J. Accelerated crucible rotation: A novel stirring technique in high-temperature solution growth. *Journal of Crystal Growth*, 13/14:560-565, 1972.
- _____ ACRT - Czochralski simulation, 1970. A ser publicado.
- _____ Developments in crystal growth from high-temperature solutions. *Progress in Crystal Growth and Characterization*, 5:277-290, 1982.
- _____ Recent development in crystal growth from high-temperature solutions. *International Specialist School on Crystal Growth*, 4., Suzdal, USSR, Sept. 17-25, 1980. Invited lecture.
- SCHEEL, H.J.; MÜLLER-KRUMBHAAR, H. Crystal pulling using ACRT. *Journal of Crystal Growth*, 49:291-196, 1980.
- SCHEEL, H.J.; SCHULZ-DuBOIS, E.O. Flux growth of large crystals by accelerated crucible-rotation technique. *Journal of Crystal Growth*, 8(3):304-306, Mar. 1971.
- SCHEEL, H.J.; SCHULZ-DuBOIS, E.O. The role of hydrodynamics in crystal growth from high-temperature solutions. In: ZIEREP, J.; OERTEL, H., ed. *Convective transport and instability phenomena*. Karlsruhe, Braun, 1982. p. 491-513.
- SCHEEL, H.J.; SIELAWA, J.T. Optimum convection conditions for Czochralski growth of semiconductors. *International Symposium High-Purity Materials in Science and Technology*, 6., Dresden, GDR, May 6-10, 1985. 13 p.

- SCHEEL, H.J.; SOMMERAUER, J. Crystal growth and characterization of "striation-free" $\text{KTa}_{1-x}\text{Nb}_x\text{O}_3$ ($x \approx 0.26$) solid solutions. *Journal of Crystal Growth*, 62:291-298, 1983.
- SCHULZ-DuBOIS, E.O. Accelerated crucible rotation: Hydrodynamics and stirring effect. *Journal of Crystal Growth*, 12:81-87, 1972.
- TILLER, W.A.; JACKSON, K.A.; RUTTER, J.W.; CHALMERS, B. The redistribution of solute atoms during the solidification of metals. *Acta Metallurgica*, 1:428-437, July 1953.
- TUROVSKII, B.M.; MIL'VIDSKII, M.G. Mixing model for melts during Czochralski crystal growth, *Kristallografija*, 6:759-762, 1961.
- UTECH, H.P.; FLEMINGS, M. Elimination of solute banding in indium antimonide crystals by growth in a magnetic field. *Journal of Applied Physics*, 37(5):2021-2024, Apr. 1966.
- XING, Z.J.; KENNEDY, J.K.; WITT, A.F. Segregation behavior during Czochralski growth with radial thermal symmetry. *Journal of Crystal Growth*, 59:659-661, 1982.
- ZULEHNER, W. Czochralski growth of silicon. *Journal of Crystal Growth*, 65:189-213, 1983.

APÊNDICE A

TERMODINÂMICA E DEFEITOS PONTUAIS

De acordo com a Termodinâmica, para uma temperatura T , a condição de equilíbrio de um cristal é o estado de mínima energia livre. Assim, imaginando-se uma rede perfeita contendo N átomos idênticos e su pondo a pressão constante, a energia livre deste cristal (instável) se rã

$$G' = H' - TS' , \quad (A.1)$$

onde H' e S' representam respectivamente a entalpia e a entropia total do cristal perfeito.

A entropia total é dada pela soma da entropia térmica (S_t) e configuracional (S_c), isto é,

$$S = S_t + S_c . \quad (A.2)$$

A entropia térmica é determinada pelo número de diferentes modos W_t , nos quais a energia vibracional total do cristal pode ser distribuída. De acordo com a relação de Boltzmann (Dekker, s.d.), S_t é dada por

$$S_t = K \log W_t \quad (A.3)$$

onde K é a constante de Boltzmann. A entropia configuracional é determinada pelo número de diferentes modos W_c , nos quais os átomos podem ser arranjados na rede, e de forma análoga

$$S_c = K \log W_c . \quad (A.4)$$

No caso específico de A.1, $S' = S'_t$, pois $S'_c = 0$. Ou seja, imaginando-se um cristal perfeito contendo N átomos idênticos, $W_c = \frac{N!}{N!} = 1$ (i.e. só existe um arranjo de átomos possível).

Supondo-se agora que n_v vacâncias sejam criadas, e que ϵ_v seja a energia requerida por unidade de vacâncias criadas. Supondo-se também que ϵ_v seja independente de n_v (o que é razoável para $n_v \ll N$), e que nenhuma vacância tenha como vizinho mais próximo outra vacância, a entalpia (H) do cristal imperfeito será então aumentada de $n_v \epsilon_v$ em relação ao cristal perfeito, isto é,

$$H = H' + n_v \epsilon_v . \quad (A.5)$$

Substituindo-se em A.5 a entalpia do cristal perfeito (H') dada por (A.1), tem-se

$$H = G' + n_v \epsilon_v + TS'_t . \quad (A.6)$$

Com o auxílio de A.6 a energia livre do cristal imperfeito ($G = H - TS$) pode ser escrita como

$$G = G' + n_v \epsilon_v + TS'_t - TS_t - TS_c . \quad (A.7)$$

Admitindo-se que a entropia térmica (S_t) aumente de uma quantidade ΔS_t por vacância (Dekker, s.d.),

$$S_t = S'_t + n_v \Delta S_t \quad (A.8)$$

e substituindo-se A.8 em A.7, a energia livre do cristal imperfeito será

$$G = G' + n_v \epsilon_v - n_v T \Delta S_t - TS_c . \quad (A.9)$$

No equilíbrio térmico, para qualquer temperatura $T > 0^\circ K$, haverá sempre um determinado número de defeitos (cuja distribuição e concentração na rede são governadas por leis termodinâmicas), devido à tendência do cristal em aumentar sua entropia ou grau de desordem. Quando os defeitos são introduzidos no cristal, a entropia (ΔS) aumenta, no entanto este aumento estará limitado pela entalpia (ΔH) necessária para

criar os defeitos. Assim, o número de defeitos presentes, à temperatura T , é aquele que de acordo com a Equação A.9 minimiza a energia livre do cristal. A maneira em que cada termo dessa equação muda com a concentração de defeitos está indicada na Figura A.1 e, como pode ser visto, o aumento na entropia é contrabalançado pelo aumento na entalpia, de modo que um mínimo da energia livre é obtido quando os termos representados pelas curvas 1, 2 e 3 são somados.

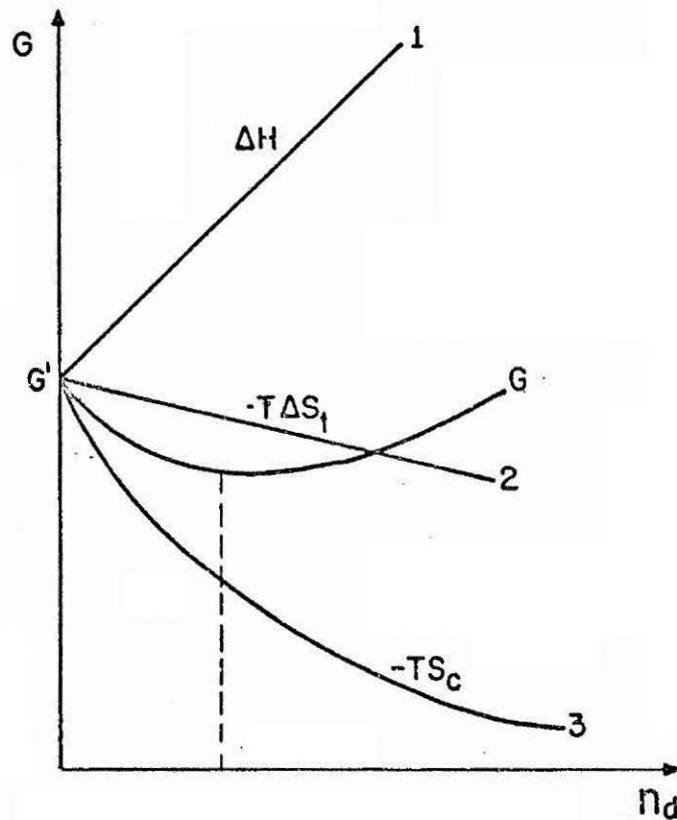


Figura A.1 - Variação da energia livre de um cristal com a concentração de defeitos.

Adaptado de Hannay (1973), p. 336.

Embora a variação na entropia vibracional seja suposta positiva na figura, o seu valor depende do tipo de defeito considerado. No entanto, mesmo nos casos onde ela é negativa, a mudança na entropia configuracional é, em geral, suficiente para causar um mínimo em G .

A.1 - CONCENTRAÇÃO DE VACÂNCIAS NO EQUILÍBRIO

Substituindo-se a entropia configuracional (S_c) dada por A.4 em A.9, tem-se

$$G = G' + n_V \epsilon_V - n_V T \Delta S_t - KT \log W_C, \quad (\text{A.10})$$

onde, no caso,

$$W_C = \frac{(N + n_V)!}{N! n_V!}, \quad (\text{A.11})$$

assim, A.10 é dada por

$$G = G' + n_V \epsilon_V - n_V T \Delta S_t - KT \log \frac{(N + n_V)!}{N! n_V!}. \quad (\text{A.12})$$

Usando a aproximação de Stirling,

$$\log \frac{(N + n_V)!}{N! n_V!} = (N + n_V) \log (N + n_V) - N \log N - n \log n, \quad (\text{A.13})$$

e lembrando que no equilíbrio n_V é determinado pelo valor mínimo da energia livre (Figura A.1), o que implica $\left(\frac{\partial G}{\partial n_V}\right)_T = 0$. Deste modo, a equação A.12 é dada por

$$\epsilon_V - T \Delta S_t + KT [\log n_V - \log(N + n_V)] = 0,$$

ou seja,

$$\log \frac{n_V}{N + n_V} = \frac{\Delta S_t}{K} - \frac{\epsilon_V}{KT}. \quad (\text{A.14})$$

Como no caso $n_v \ll N$, a concentração de vacâncias no equilíbrio é dada por

$$\frac{n_v}{N} \approx e^{\frac{\Delta S_t}{K}} \cdot e^{-\frac{\epsilon_v}{KT}} \quad (\text{A.15})$$

A.2 - NÚMERO DE DEFEITOS FRENKEL NO EQUILÍBRIO

Seja n_F o número de defeitos Frenkel criados, ϵ_F a energia requerida por unidade de defeitos criados, N o número de átomos idênticos na rede perfeita e N' o número de posições intersticiais. Supondo-se ϵ_F independente de n_F e que nenhum defeito tenha como vizinho mais próximo outro defeito Frenkel, a energia livre do cristal imperfeito é dada, de modo análogo a A.10, por

$$G = G' + n_F \epsilon_F - n_F T \Delta S_t - KT \log W_C, \quad (\text{A.16})$$

onde, neste caso,

$$W_C = \frac{(N + n_F)!}{N! n_F!} \cdot \frac{(N' + n_F)!}{N'! n_F!}.$$

Usando A.13, a equação A.16 pode ser escrita como

$$G = G' + n_F \epsilon_F - n_F T \Delta S_t - KT [(N+n_F) \log(N+n_F) - N \log N - n_F \log n_F + (N'+n_F) \log(N'+n_F) - N' \log N' - n_F \log n_F], \quad (\text{A.17})$$

visto que $\left(\frac{\partial G}{\partial n_F}\right)_T = 0$, tem-se

$$\epsilon_F - T \Delta S_t - KT [\log(N+n_F) - 2 \log n_F + \log(N'+n_F)] = 0, \quad (\text{A.18})$$

assim,

$$\log \frac{n_F^2}{(N + n_F)(N' + n_F)} = \frac{\Delta S_t}{K} - \frac{\epsilon_F}{KT}, \quad (\text{A.19})$$

mas, $N \gg n_F$ e $N' \gg n_F$, então A.19 é dada por

$$n_F^2 \approx N \cdot N' \cdot e^{\frac{\Delta S_t}{K}} \cdot e^{-\frac{\epsilon_F}{KT}},$$

$$n_F \approx (N \cdot N')^{1/2} \cdot e^{\frac{\Delta S_t}{2K}} \cdot e^{-\frac{\epsilon_F}{2KT}}. \quad (\text{A.20})$$

O presente tratamento refere-se a uma estrutura monoatômica simples. Para estruturas mais complexas, compostas de íons ou moléculas e também para as soluções sólidas, o cálculo da concentração de defeitos é muito mais complexo, tendo em vista a grande variedade de defeitos.

APÊNDICE B

SEGREGAÇÃO

Usando as informações fornecidas por uma parte do diagrama de fase binário, mostrado na Figura 1.6, e supondo inicialmente que a solução formada por uma única fase líquida, de composição uniforme C_0 , seja lentamente resfriada, conforme indicado na Figura B.1. A primeira fração da solução a solidificar em $x = 0$ tem uma concentração $C_S(0)$. Visto que a concentração de B no líquido é C_0 , tem-se

$$C_S(0) = k_0 C_0 . \quad (B.1)$$



Figura B.1 - Solidificação ilustrando a segregação.

Considerando a difusão no sólido desprezível e usando o conceito de equilíbrio local, pode-se supor que na interface sólido/líquido

$$C_S(x) = k_0 C_L(x) . \quad (B.2)$$

A descrição completa deste processo pode ser obtida por meio de um balanço material de B (por facilidade de cálculo estamos ignorando mudanças de volume),

$$C_L(x) (x_1 - x) + \int_0^x C_S(x') dx' = C_0 x_0 , \quad (B.3)$$

isto é, a concentração de B no líquido (o qual tem uma composição uniforme em qualquer instante) mais a quantidade de B no sólido (no qual a composição varia com a posição no sólido devido à segregação) é igual à quantidade total de B presente na solução líquida inicial.

Usando B.2, B.3 torna-se

$$\frac{C_S(x)}{k_0} \left(1 - \frac{x}{x_1}\right) x_1 + \int_0^x C_S(x') dx' = C_0 x_1 . \quad (B.4)$$

Diferenciando B.4 em relação a x , tem-se

$$\frac{x_1}{k_0} \left(1 - \frac{x}{x_1}\right) \frac{d}{dx} C_S(x) - \frac{C_S(x)}{k_0} + C_S(x) = 0 . \quad (B.5)$$

Reescrevendo B.5 e integrando, segue

$$\int \frac{dC_S(x)}{C_S(x)} = \frac{(1 - k_0)}{x_1} \int \frac{dx}{\left(1 - \frac{x}{x_1}\right)} + \ln \gamma , \quad (B.6)$$

$$\ln C_S(x) = (k_0 - 1) \ln \left(1 - \frac{x}{x_1}\right) + \ln \gamma , \quad (B.7)$$

onde γ é uma constante de integração, a qual é determinada lembrando que para $x = 0$, B.1 deve ser satisfeita, e portanto $\gamma = k_0 C_0$.

Então a concentração C_S por fração solidificada será dada por

$$C_S(x) = k_0 C_0 \left(1 - \frac{x}{x_1}\right)^{(k_0 - 1)} \quad \text{para } x < x_1 . \quad (\text{B.8})$$

Assim, no equilíbrio o sólido formado a qualquer instante tem a composição $C_S = k_0 C_\ell$. Supondo $k_0 < 1$, à medida que a solidificação procede, a rejeição de impureza pelo sólido aumenta C_ℓ e, deste modo, o sólido formado nos últimos estágios torna-se progressivamente mais rico.

A Equação B.8 é conhecida na literatura como Equação de Pfann.

APÊNDICE C

COEFICIENTE DE DISTRIBUIÇÃO EFETIVO (B-P-S)

Na subsequente discussão o fenômeno de segregação, para as condições de não equilíbrio, é apresentado para o processo Czochralski. Com vistas nisto, este apêndice está fundamentado no artigo clássico de Burton, Prim e Slichter (1953).

O processo Czochralski convencional envolve uma rotação contínua do cristal durante o puxamento. Esta rotação produz um fluxo axial ascendente que tende a zero próximo à interface, exceto o fluxo normal (a interface), devido à velocidade de crescimento. Deste modo, na região do líquido próximo ao cristal o transporte de impurezas para fora da interface ocorre por difusão, enquanto o transporte de impurezas por convecção predomina em regiões mais distantes (Figura C.1).

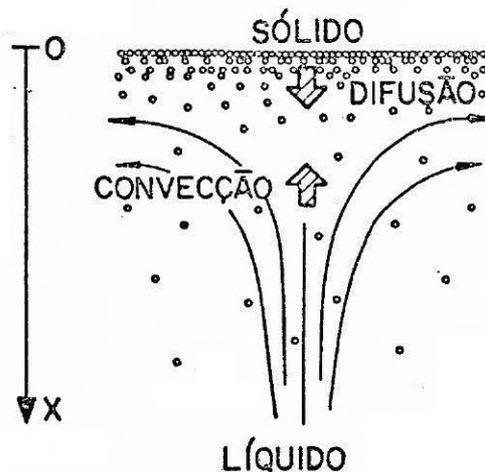


Figura C.1 - Representação esquemática do transporte de impurezas, próximo à superfície do cristal em rotação, no processo Czochralski.

A conservação dos átomos de impureza no líquido é expressa pela Equação da Continuidade,

$$\frac{\partial C}{\partial t} = - \vec{\nabla} \cdot \vec{\phi} . \quad (C.1)$$

Neste caso, o fluxo $\vec{\phi}$ é dado por

$$\vec{\phi} = C\vec{V} - D\vec{\nabla}C , \quad (C.2)$$

onde \vec{V} é o vetor velocidade do fluido ($\vec{V} = V_x\hat{x} + V_y\hat{y} + V_z\hat{z}$) e D o coeficiente de difusão da impureza.

Substituindo a Expressão C.2 na Equação C.1, tem-se

$$\frac{\partial C}{\partial t} = - \vec{\nabla} \cdot (C\vec{V} - D\vec{\nabla}C) , \quad (C.3)$$

mas no estado estacionário, a equação anterior é descrita na forma

$$- \vec{\nabla}\vec{\nabla}C + D\nabla^2C = 0 , \quad (C.4)$$

dado que $\vec{\nabla} \cdot \vec{V} = 0$ (o fluido é suposto incompressível) e $\vec{\nabla}D = 0$ (o coeficiente de difusão da impureza é considerado constante).

Como a concentração de impurezas no sólido é virtualmente uniforme na direção radial, um tratamento unidimensional é apropriado e, deste modo, a Equação C.4 é dada por

$$D \frac{d^2C}{dx^2} - V_x \frac{dC}{dx} = 0 . \quad (C.5)$$

As condições de contorno para um crescimento no estado são as seguintes:

$$\text{para } x \rightarrow \infty , \quad C \rightarrow C_\ell ; \quad (C.6)$$

$$\text{para } x = 0 , \quad (C'_0 - C_s)f + D \frac{dC}{dx} = 0 . \quad (C.7)$$

Fixando a interface de crescimento em $x = 0$, o fluido à frente do cristal, crescendo à velocidade f , se comporta como um fluxo de velocidade $-f$. Assim,

$$V_x = -(u_x + f) , \quad (C.8)$$

onde u_x representa a componente normal do fluxo induzido pela rotação do cristal. Para os valores pequenos de x , os quais são de interesse aqui, Cochran (1934) dá a seguinte aproximação para u_x :

$$u_x = 0,51\Omega^{3/2}\nu^{-1/2}x^2 \quad \text{para } x < \left(\frac{\nu}{\Omega}\right)^{1/2} , \quad (C.9)$$

onde Ω é a velocidade de rotação de um disco infinito e ν a viscosidade cinemática. Agora, tomando $g = 0,51\Omega^{3/2} \cdot \nu^{-1/2}$, a Expressão C.8 é dada por

$$V_x = -(gx^2 + f) . \quad (C.10)$$

Substituindo a expressão acima na Equação C.5, tem-se

$$D \frac{d^2C}{dx^2} + (gx^2 + f) \frac{dC}{dx} = 0 , \quad (C.11)$$

tomando $\frac{dC}{dx} = y$ e integrando a equação anterior, segue

$$\ln y + D^{-1}(1/3gx^3 + fx) = b , \quad (C.12)$$

onde b é uma constante de integração, a qual é determinada aplicando a Condição C.7 na Equação C.12, ou seja,

$$b = \ln(C_0 - C_s)D^{-1}f . \quad (C.13)$$

Substituindo a relação acima na Equação C.12, segue

- C.4 -

$$-\frac{dC}{(C_0' - C_S)} = e^{-(1/3D^{-1}gx^3 + D^{-1}fx)} D^{-1}f dx, \quad (C.14)$$

tomando $D^{-1}fx = Z$, tem-se

$$-\frac{dC}{(C_0' - C_S)} = e^{-(BZ^3 + Z)} dZ, \quad (C.15)$$

onde $B = 0,17f^{-3}\Omega^{3/2}D^2\nu^{-1/2}$. Integrando a equação acima, segue

$$\frac{1}{(C_0' - C_S)} \int_0^\infty -dC = \int_0^\infty e^{-(BZ^3 + Z)} dZ,$$

isto é,

$$\frac{C_0' - C_\ell}{C_0' - C_S} = \int_0^\infty e^{-(BZ^3 + Z)} dZ. \quad (C.16)$$

Por propósitos práticos, é conveniente fazer uma aproximação igual à de Nernst (1904), isto é,

para $x > \delta$, o fluxo mantém a concentração do líquido uniforme igual a C_ℓ ,

para $0 < x < \delta$, V_x é simplesmente igual a $-f$, pois nesta região u_x é suposto nulo.

Deste modo, a Equação C.1 é dada por

$$D \frac{d^2C}{dx^2} + f \frac{dC}{dx} = 0, \quad (C.17)$$

e a Condição C.6 como segue,

$$\text{para } x = \delta, \quad C = C_{\ell}. \quad (\text{C.18})$$

Agora, integrando a Equação C.17, obtêm-se

$$D \frac{dC}{dx} + fC = b_1, \quad (\text{C.19})$$

onde b_1 é uma constante de integração, a qual é determinada lembrando que para $x = 0$ a Condição C.7 é verificada e que $C = C_0'$. Assim, a constante b_1 fica determinada por

$$b_1 = C_S f, \quad (\text{C.20})$$

e a Equação C.19 é dada como segue,

$$D \frac{dC}{dx} + (C - C_S) f = 0,$$

isto é,

$$\frac{dC}{(C - C_S)} + \frac{f}{D} dx = 0. \quad (\text{C.21})$$

Integrando a equação acima e usando a Condição C.18, tem-se

$$\frac{C_0' - C_S}{C_{\ell} - C_S} = e^{\frac{f \cdot \delta}{D}}. \quad (\text{C.22})$$

A quantidade δ , a qual é um tanto arbitrária, pode ser caracterizada de modo a produzir a mesma dependência de composição dada pela solução mais exata (Equação C.16). Assim, escrevendo a Equação C.22 na forma

$$\frac{C_L - C_0'}{C_0' - C_S} + 1 = e^{-\frac{f \cdot \delta}{D}}$$

tem-se

$$\int_0^{\infty} e^{-(BZ^3 + Z)} dZ + 1 = e^{-\frac{f \cdot \delta}{D}} \quad (C.23)$$

Quando a velocidade de crescimento \bar{v} é suficientemente baixa (ou quando $B^{-1/3}$ é suficientemente pequeno) os resultados analíticos para δ levam à aproximação

$$\delta = 1,6D^{1/3} \bar{v}^{1/6} \Omega^{-1/2} \quad (C.24)$$

O tratamento precedente descreve o transporte de impureza no estado estacionário, tanto para a solidificação quanto para a fusão. No caso da solidificação há uma relação adicional entre C_S e C_0' , a qual é dada na forma mais simples pelo coeficiente de distribuição de equilíbrio

$$k_0 = \frac{C_S}{C_0'} \quad (C.25)$$

A relação é descrita de modo geral, como dependendo de f , e possivelmente de outras quantidades, como aceleração,

$$\frac{C_S}{C_0'} = k^* \left(f, \frac{\partial f}{\partial t}, \dots \right) \quad (C.26)$$

Nenhuma atenção especial será dedicada à maneira como k^* depende destes fatores. Qualquer que seja a forma de k^* , as Equações C.22 e C.26 fornecem

$$\frac{C_{\ell} - C_S}{C_0'} = e^{-\frac{f\delta}{D}} \cdot \frac{(C_0' - C_S)}{C_0'},$$

isto é,

$$\frac{C_{\ell}}{C_0'} - k^* = e^{-\frac{f\delta}{D}} (1 - k^*),$$

então,

$$k^* \cdot \frac{C_{\ell}}{C_S} = k^* + (1 - k^*)e^{-\frac{f\delta}{D}},$$

definindo $\frac{C_S}{C_{\ell}} = k$ (coeficiente de distribuição efetivo no estado estacionário), tem-se

$$k = \frac{k^*}{k^* + (1 - k^*)e^{-\frac{f\delta}{D}}}. \quad (C.27)$$

No equilíbrio, a interface é virtualmente independente da velocidade de crescimento e , neste caso, tem-se

$$k = \frac{k_0}{k_0 + (1 - k_0)e^{-\frac{f\delta}{D}}}. \quad (C.28)$$

Visto que no equilíbrio k_0 não varia, o coeficiente de distribuição efetivo depende apenas da velocidade de crescimento, já que os demais fatores são constantes.

APÊNDICE D

EQUAÇÃO DE NAVIER-STOKES COM PARÂMETROS ADIMENSIONAIS

Introduzindo as coordenadas dimensionais $\vec{r}' = L\vec{r}$, $t = \Omega^{-1}t$, $\vec{u}' = U\vec{u}$, $p = \rho\Omega ULp$, $\vec{\Omega}' = \Omega^2\vec{\Omega}$, $\vec{\Omega} = \Omega\hat{z}$ (onde $\Omega = \Omega_{\text{máximo}}$), na equação de Navier-Stokes, e indicando cada um dos termos subscritos,

$$\frac{\partial \vec{u}'}{\partial t} + (\vec{u}' \cdot \vec{\nabla})\vec{u}' + \frac{\partial \vec{\Omega}'}{\partial t} \times \vec{r}' + 2\vec{\Omega}' \times \vec{u}' = - \frac{1}{\rho} \vec{\nabla} p - \nu \vec{\nabla} \times (\vec{\nabla} \times \vec{u}'), \quad (D.1)$$

(a) (b) (c) (d) (e) (f)

tem-se que

$$(a) \quad \frac{\partial \vec{u}'}{\partial t} = U\Omega \left[\frac{\partial u}{\partial t} \hat{r} + \frac{\partial v}{\partial t} \hat{\phi} + \frac{\partial w}{\partial t} \hat{z} \right]. \quad (D.1.a)$$

$$(b) \quad (\vec{u}' \cdot \vec{\nabla})\vec{u}' = \left[U(u\hat{r} + v\hat{\phi} + w\hat{z}) \cdot \frac{1}{L} \left[\hat{r} \frac{\partial}{\partial r} + \hat{\phi} \cdot \frac{1}{r} \cdot \frac{\partial}{\partial \phi} + \hat{z} \frac{\partial}{\partial z} \right] \right] U(u\hat{r} + v\hat{\phi} + w\hat{z}) .$$

$$= \frac{U^2}{L} \left[\left(u \frac{\partial u}{\partial r} + \frac{v}{r} \frac{\partial u}{\partial \phi} - \frac{v^2}{r} + w \frac{\partial u}{\partial z} \right) \hat{r} + \left(u \frac{\partial v}{\partial r} + \frac{vu}{r} + \frac{v}{r} \frac{\partial v}{\partial \phi} + w \frac{\partial v}{\partial z} \right) \hat{\phi} + \right.$$

$$\left. + \left(u \frac{\partial w}{\partial r} + \frac{v}{r} \frac{\partial w}{\partial \phi} + w \frac{\partial w}{\partial z} \right) \hat{z} \right]. \quad (D.1.b)$$

$$(c) \quad \frac{\partial}{\partial t} \vec{\Omega}' \times \vec{r}' = \begin{vmatrix} \hat{r} & \hat{\phi} & \hat{z} \\ 0 & 0 & \Omega^2 \hat{\Omega} \\ Lr & 0 & Lz \end{vmatrix} = L\Omega^2 r \hat{\Omega} \hat{\phi} \quad (D.1.c)$$

$$(d) \quad 2\vec{\Omega}' \times \vec{u}' = 2 \begin{vmatrix} \hat{r} & \hat{\phi} & \hat{z} \\ 0 & 0 & \Omega \\ Uu & Uv & Uw \end{vmatrix} = 2U\Omega(u\hat{\phi} - v\hat{r}). \quad (D.1.d)$$

$$\begin{aligned}
 \text{(e)} \quad -\frac{1}{\rho} \vec{\nabla} p &= -\Omega U L \left[\frac{1}{L} \frac{\partial p}{\partial r} \hat{r} + \frac{1}{Lr} \frac{\partial p}{\partial \phi} \hat{\phi} + \frac{1}{L} \frac{\partial p}{\partial z} \hat{z} \right] = \\
 &= -\Omega U \left[\frac{\partial p}{\partial r} \hat{r} + \frac{1}{r} \frac{\partial p}{\partial \phi} \hat{\phi} + \frac{\partial p}{\partial z} \hat{z} \right]. \quad \text{(D.1.e)}
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 \text{(f)} \quad \nu \vec{\nabla} \times (\vec{\nabla} \times \vec{u}') &= \nu \vec{\nabla} \times \left[\frac{U}{L} \left(\frac{1}{r} \frac{\partial w}{\partial \phi} - \frac{\partial v}{\partial z} \right) \hat{r} + \frac{U}{L} \left(\frac{\partial v}{\partial z} - \frac{\partial w}{\partial r} \right) \hat{\phi} + \frac{U}{L} \left(\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (rv) - \frac{1}{r} \frac{\partial u}{\partial \phi} \right) \hat{z} \right] \\
 &= \frac{\nu U}{L^2} \left[\left(\frac{1}{r^2} \frac{\partial v}{\partial \phi} + \frac{1}{r} \frac{\partial^2 v}{\partial \phi \partial r} - \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 u}{\partial \phi^2} - \frac{\partial^2 u}{\partial z^2} + \frac{\partial^2 w}{\partial z \partial r} \right) \hat{r} + \right. \\
 &\quad \left. + \left(\frac{1}{r} \frac{\partial^2 w}{\partial z \partial \phi} - \frac{\partial^2 v}{\partial z^2} - \frac{1}{r} \frac{\partial v}{\partial r} + \frac{v}{r^2} - \frac{\partial^2 v}{\partial r^2} - \frac{1}{r^2} \frac{\partial u}{\partial \phi} + \frac{1}{r} \frac{\partial^2 u}{\partial r \partial \phi} \right) \hat{\phi} + \right. \\
 &\quad \left. + \left(\frac{1}{r} \frac{\partial u}{\partial z} + \frac{\partial^2 u}{\partial r \partial z} - \frac{1}{r} \frac{\partial w}{\partial r} - \frac{\partial^2 w}{\partial r^2} - \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 w}{\partial \phi^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial^2 v}{\partial \phi \partial z} \right) \hat{z} \right]. \quad \text{(D.1.f)}
 \end{aligned}$$

Agora, multiplicando a Equação D.1 por $(\Omega U)^{-1}$ tem-se

$$\begin{aligned}
 &\left(\frac{\partial u}{\partial t} \hat{r} + \frac{\partial v}{\partial t} \hat{\phi} + \frac{\partial w}{\partial t} \hat{z} \right) + \frac{U}{\Omega L} \left[\left(u \frac{\partial u}{\partial r} + \frac{v}{r} \frac{\partial u}{\partial \phi} - \frac{v^2}{r} + w \frac{\partial u}{\partial z} \right) \hat{r} + \left(u \frac{\partial v}{\partial r} + \frac{vu}{r} + \frac{v}{r} \frac{\partial v}{\partial \phi} + \right. \right. \\
 &\quad \left. \left. + w \frac{\partial v}{\partial z} \right) \hat{\phi} + \left(u \frac{\partial w}{\partial r} + \frac{v}{r} \frac{\partial w}{\partial \phi} + w \frac{\partial w}{\partial z} \right) \hat{z} \right] + \frac{\Omega L}{U} (r\dot{\Omega}) \hat{\phi} + 2(u\dot{\phi} - v\dot{r}) = \\
 &= - \left[\frac{\partial p}{\partial r} \hat{r} + \frac{1}{r} \frac{\partial p}{\partial \phi} \hat{\phi} + \frac{\partial p}{\partial z} \hat{z} \right] - \frac{\nu}{\Omega L^2} \left[\left(\frac{1}{r^2} \frac{\partial v}{\partial \phi} + \frac{1}{r} \frac{\partial^2 v}{\partial \phi \partial r} - \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 u}{\partial \phi^2} - \frac{\partial^2 u}{\partial z^2} + \right. \right. \\
 &\quad \left. \left. + \frac{\partial^2 w}{\partial z \partial r} \right) \hat{r} + \left(\frac{1}{r} \frac{\partial^2 w}{\partial z \partial \phi} - \frac{\partial^2 v}{\partial z^2} - \frac{1}{r} \frac{\partial v}{\partial r} + \frac{v}{r^2} - \frac{\partial^2 v}{\partial r^2} - \frac{1}{r^2} \frac{\partial u}{\partial \phi} + \frac{1}{r} \frac{\partial^2 u}{\partial r \partial \phi} \right) \hat{\phi} + \right. \\
 &\quad \left. + \left(\frac{1}{r} \frac{\partial u}{\partial z} + \frac{\partial^2 u}{\partial r \partial z} - \frac{1}{r} \frac{\partial w}{\partial r} - \frac{\partial^2 w}{\partial r^2} - \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 w}{\partial \phi^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial^2 v}{\partial \phi \partial z} \right) \hat{z} \right], \quad \text{(D.2)}
 \end{aligned}$$

o que resulta no aparecimento de dois números adimensionais importantes, o número de Ekman e o número de Rossby, onde o primeiro é uma comparação entre a força viscosa e a força de Coriolis, isto é,

$$\begin{aligned} \text{força viscosa} & - F_v = \mu UL \\ \text{força de Coriolis} & - F_c \approx \rho L^3 U \Omega \end{aligned} \quad \therefore E = \frac{\nu}{\Omega L^2},$$

onde $\nu = \mu/\rho$ (viscosidade cinemática); e o número de Rossby é a razão da aceleração convectiva pela aceleração de Coriolis:

$$\begin{aligned} \text{aceleração convectiva} & - U\Omega \\ \text{aceleração de Coriolis} & - L\Omega^2 \end{aligned} \quad \therefore \epsilon = \frac{U}{\Omega L}.$$

Assim, reescrevendo a Equação de Navier-Stokes na forma adimensional, para cada direção, têm-se

direção \hat{r}

$$\begin{aligned} \frac{\partial u}{\partial t} = -\epsilon \left(u \frac{\partial u}{\partial r} + \frac{v}{r} \frac{\partial u}{\partial \phi} - \frac{v^2}{r} + w \frac{\partial u}{\partial z} \right) - 2v - \frac{\partial p}{\partial r} - \\ - E \left(\frac{1}{r^2} \frac{\partial v}{\partial \phi} + \frac{1}{r} \frac{\partial^2 v}{\partial \phi \partial r} - \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 u}{\partial \phi^2} - \frac{\partial^2 w}{\partial z^2} + \frac{\partial^2 w}{\partial z \partial r} \right), \end{aligned} \quad (D.2.a)$$

direção $\hat{\phi}$

$$\begin{aligned} \frac{\partial v}{\partial t} = -\epsilon \left(u \frac{\partial v}{\partial r} + \frac{vu}{r} + \frac{v}{r} \frac{\partial v}{\partial \phi} + w \frac{\partial v}{\partial z} \right) - \epsilon^{-1} r \dot{\Omega} - 2u - \frac{1}{r} \frac{\partial p}{\partial \phi} - \\ - E \left(\frac{1}{r} \frac{\partial^2 w}{\partial z \partial \phi} - \frac{\partial^2 v}{\partial z^2} - \frac{1}{r} \frac{\partial v}{\partial r} + \frac{v}{r^2} - \frac{\partial^2 v}{\partial r^2} - \frac{1}{r^2} \frac{\partial u}{\partial \phi} + \frac{1}{r} \frac{\partial^2 u}{\partial r \partial \phi} \right), \end{aligned} \quad (D.2.b)$$

direção \hat{z}

$$\frac{\partial w}{\partial t} = -\epsilon \left(u \frac{\partial w}{\partial r} + \frac{v}{r} \frac{\partial w}{\partial \phi} + w \frac{\partial w}{\partial z} \right) - \frac{\partial p}{\partial z}$$

$$= -\epsilon \left(\frac{1}{r} \frac{\partial u}{\partial z} + \frac{\partial^2 u}{\partial r \partial z} - \frac{1}{r} \frac{\partial w}{\partial r} - \frac{\partial^2 w}{\partial r^2} - \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 w}{\partial \phi^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial^2 v}{\partial \phi \partial z} \right). \quad (D.2.c)$$

APÊNDICE E

EQUAÇÃO PARA A PRESSÃO (FLUXO GEOSTRÓFICO)

Considerando um fluido em rotação uniforme sob a condição de $\epsilon \rightarrow 0$ (veja Seção 2.4), e usando a Condição 2.5, a Equação de Quantidade de Movimento 2.11 pode ser escrita na forma

$$\frac{\partial \vec{u}}{\partial t} + 2\hat{z} \times \vec{u} = -\vec{\nabla}p + E\nabla^2\vec{u}, \quad (\text{E.1})$$

Lembrando que

$$\nabla^2\vec{u} = \vec{\nabla}(\vec{\nabla} \cdot \vec{u}) - \vec{\nabla} \times (\vec{\nabla} \times \vec{u}). \quad (\text{E.2})$$

Com o propósito de transformar a equação de momento em uma equação para a pressão, a manipulação vetorial que se segue é justificada. Logo, multiplicando escalarmente \hat{z} pela Equação E.1, tem-se

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} (\hat{z} \cdot \vec{u}) &= -\frac{\partial p}{\partial z} + E\nabla^2(\hat{z} \cdot \vec{u}), \\ \left(\frac{\partial}{\partial t} - E\nabla^2 \right) (\hat{z} \cdot \vec{u}) &= -\frac{\partial p}{\partial z}. \end{aligned} \quad (\text{E.3})$$

Multiplicando escalarmente \hat{z} pelo rotacional da Equação E.1, tem-se

$$\frac{\partial}{\partial t} (\hat{z} \cdot \vec{\nabla} \times \vec{u}) + 2 \left(\vec{\nabla} \cdot \vec{u} - \frac{\partial w}{\partial z} \right) = E\nabla^2 (\hat{z} \cdot \vec{\nabla} \times \vec{u}),$$

usando a Condição 2.5 e indicando $\frac{\partial w}{\partial z} \equiv \frac{\partial}{\partial z} (\hat{z} \cdot \vec{u})$, a equação anterior pode ser escrita na forma

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} - E\nabla^2 \right) (\hat{z} \cdot \vec{\nabla} \times \vec{u}) - 2 \frac{\partial}{\partial z} (\hat{z} \cdot \vec{u}) = 0. \quad (\text{E.4})$$

Derivando a Equação E.3 em relação a z tem-se

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} - E\nabla^2 \right) \frac{\partial}{\partial z} (\hat{z} \cdot \vec{u}) = - \frac{\partial^2 p}{\partial z^2} ,$$

e usando a Equação E.4 tem-se

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} - E\nabla^2 \right)^2 (\hat{z} \cdot \vec{\nabla} \times \vec{u}) = - 2 \frac{\partial^2 p}{\partial z^2} , \quad (\text{E.5})$$

mas $\vec{\nabla} \cdot (\text{E.1}) \rightarrow 2\vec{\nabla} \cdot (\hat{z} \times \vec{u}) = - \nabla^2 p$

$$2\hat{z} \cdot \vec{\nabla} \times \vec{u} = \nabla^2 p , \quad (\text{E.6})$$

portanto, substituindo a Equação E.6 na E.5 segue

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} - E\nabla^2 \right)^2 \nabla^2 p + 4 \frac{\partial^2 p}{\partial z^2} = 0 \quad (\text{E.7})$$

APÊNDICE F

DIMENSIONAMENTO DE UM SISTEMA SCHLIEREN DE OBSERVAÇÃO

Abaixo relacionam-se algumas sugestões que poderão ser úteis no dimensionamento de um sistema Schlieren de observação:

- a) Visto que o objeto é atravessado por um feixe de raios paralelos, a superfície refletora do espelho e as dimensões do objeto devem no mínimo obedecer à razão 1:1.
- b) Para produzir uma imagem real maior do que o objeto, este deve situar-se entre o foco principal (f_2) e o centro de curvatura (C_2) do segundo espelho.
- c) A posição da imagem é determinada pela Equação de Gauss, por exemplo (Figura F.1):

Supondo $f_2 = 100\text{cm}$, $\ell = 140\text{cm}$ e $\ell' = ?$, e aplicando-se a Equação de Gauss, $\frac{1}{\ell'} = \frac{\ell - f_2}{f_2 \cdot \ell}$, tem-se

$$\ell' = \frac{100 \times 140}{140 - 100} \rightarrow \ell' = 350\text{cm} .$$

- d) Aumento linear transversal (α)

$$\alpha = -\frac{\ell'}{\ell} \rightarrow \alpha = -\frac{350}{140} \therefore \alpha = -2,5 ,$$

Lembrando que para α negativo a imagem é invertida e no caso tem 2,5 vezes a grandeza do objeto. É óbvio que o aumento de ℓ' resulta o aumento de α , no entanto tal procedimento implica em uma redução da intensidade luminosa e, como consequência, uma menor definição da imagem.

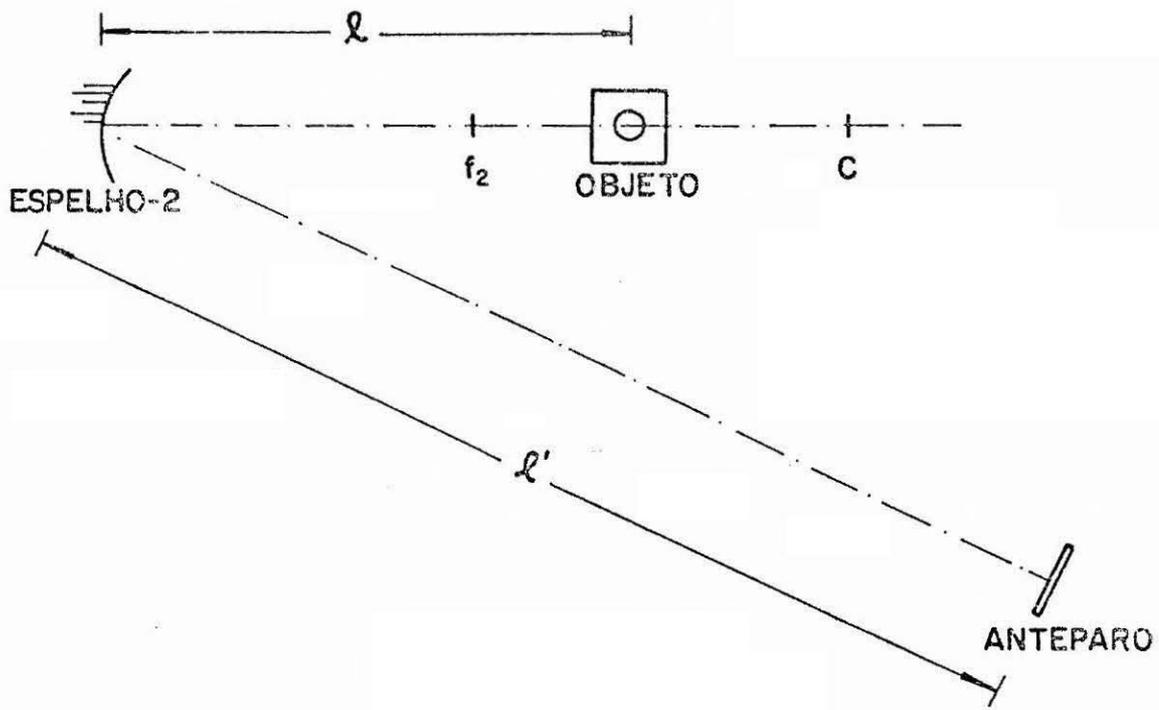


Figura F.1 - Dimensionamento de um sistema Schlieren.

APÊNDICE G

ANEMOMETRIA DOPPLER POR LASER

G.1 - EFEITO DOPPLER

Quando a luz de frequência ν' é emitida (ou refletida) de uma superfície em movimento à velocidade v , há uma mudança na frequência devida ao efeito Doppler. Este efeito relaciona a frequência de uma onda com as velocidades relativas do emissor e do receptor.

A magnitude $\Delta\nu'$ da mudança Doppler é dada por

$$\frac{\Delta\nu'}{\nu'} = \frac{2v}{c}, \quad (\text{G.1})$$

onde c é a velocidade da luz.

Dado que v é muito menor do que c , a mudança na frequência será uma fração pequena da frequência original.

G.2 - DISTÂNCIA ENTRE AS FRANJAS DE INTERFERÊNCIA

O espaçamento entre as franjas pode ser calculado (Figura G.1), introduzindo-se

$$\eta_2 = x_2 \cos \frac{\theta}{2} - x_1 \cos \frac{\theta}{2}, \quad (\text{G.2})$$

$$\xi_2 = x_2 \cos \frac{\theta}{2} + x_1 \sin \frac{\theta}{2}. \quad (\text{G.3})$$

Subtraindo-se G.3 de G.2 tem-se

$$(\xi_2 - \eta_2) = 2x_1 \sin \frac{\theta}{2}. \quad (\text{G.4})$$

Impondo-se que N e $N + 1$ sejam pontos de interferência construtiva, G.4 é dada por

$$N\lambda = 2(x_1)_N \operatorname{sen} \frac{\theta}{2}, \quad (\text{G.5})$$

$$(N + 1)\lambda = 2(x_1)_{N+1} \operatorname{sen} \frac{\theta}{2}, \quad (\text{G.6})$$

Subtraindo-se G.6 de G.5 tem-se

$$\lambda = 2 \left[(x_1)_{N+1} - (x_1)_N \right] \operatorname{sen} \frac{\theta}{2}, \quad (\text{G.7})$$

ou seja,

$$s = \frac{\lambda}{2 \operatorname{sen} \frac{\theta}{2}}, \quad (\text{G.8})$$

onde $s = (x_1)_{N+1} - (x_1)_N$ é o espaçamento entre as franjas.

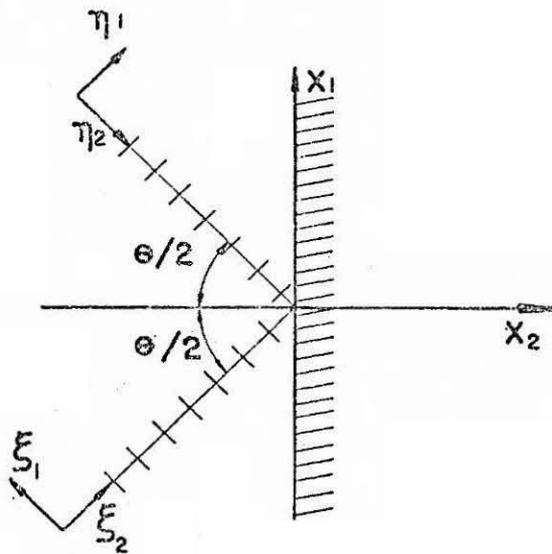


Figura G.1 - Interferência entre duas ondas planas formando um ângulo θ entre as normais aos planos das ondas.

Adaptado de Durst et alii (1981), p. 31.