

*RELATÓRIO PARCIAL*

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

ALUNO: *Eduardo Bartoli de Noronha (fase 1)*  
*Nanci Naomi Arai (fase 2)*

ORIENTADOR: *Maurício Fabbri*

PERÍODO: *Fevereiro/96 a Julho/96*

**OBSERVAÇÕES DO ORIENTADOR:**

Encaminho à SPG o relatório anexo, elaborado pela própria Aluna, referente ao último semestre de atividades do referido projeto de IC.

Minha avaliação pessoal do desempenho do Aluno e do andamento dos trabalhos é muito boa, tendo em vista que a substituição da bolsa foi efetivada apenas em Abril passado. Mesmo assim, os objetivos do projeto têm sido respeitados na íntegra.

Do ponto de vista didático, acredito termos alcançado uma integração muito boa Pesquisador/Aluno, de modo que já no início da vigência do próximo período será possível iniciar a parte aplicada dos trabalhos.

Atenciosamente,



Maurício Fabbri  
INPE/LAS

## *RELATÓRIO PARCIAL*

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

ALUNO:

*Nanci Naomi Arai*  
Departamento de Informática  
Universidade de Taubaté - UNITAU  
12080-000 Taubaté SP

ORIENTADOR:

*Maurício Fabbri*  
Instituto Nacional de Pesquisas Espaciais - INPE  
Laboratório Associado de Materiais e Sensores - LAS  
12201-970 São José dos Campos SP

PERÍODO: Fevereiro/96 a Julho/96

## Introdução

Em substituição ao bolsista anterior, cujo trabalho consistia na implementação de um pacote computacional para a otimização dos processos de obtenção de perfis de cristais, envolvi-me nesse projeto.

Visando dar continuidade a esse projeto, que consta basicamente de uma parte teórica e uma parte computacional, dediquei-me a um estudo e avaliação do que já havia sido elaborado.

Devido à contínua evolução na área de informática, e o aprimoramento de softwares, a parte computacional iniciada a cerca de dois anos não mais se aplica aos propósitos atuais, por apresentar falhas que poderão ser sanadas com a utilização de versões atualizadas, que apresentarão um resultado superior aos já obtidos.

Inicialmente dediquei-me a parte teórica. Certos conhecimentos já adquiridos puderam ser demonstrados por ocasião do Segundo Seminário de Iniciação Científica do INPE. Este relatório engloba esse trabalho, que apresenta apenas uma visão geral, sem se aprofundar em detalhes devido à recente substituição ocorrida, e outros estudos realizados após esse evento.

# PARTE TEÓRICA

## CRISTAL

É formado pela associação de partículas dispostas regularmente em relação a um modelo reproduzido em forma e em orientação por todo o cristal.

Essas partículas podem ser átomos, íons ou moléculas. Há uma organização na disposição destas partículas, um arranjo periódico dos átomos que compõem o material cristalino. É essa organização interna que permite que o cristal possua uma série de propriedades, propriedades estas que são utilizadas, por exemplo, na fabricação de células solares.

## Célula solar

Converte a luz do Sol diretamente em eletricidade. As células solares são a fonte predominante da energia dos satélites.

Cargas positivas e negativas são geradas em células solares pela absorção de fótons. A carga espalha-se por toda a célula, até que é recombinada ou separada e apanhada por uma inhomogeneidade elétrica, tipicamente uma junção entre duas regiões semicondutoras.

O cristal possui bandas de energia que permitem a presença de elétrons (valência e condução) e bandas que proíbem a presença de elétrons (banda proibida). Passagem de elétrons da banda de valência para a banda de condução gera um fluxo de corrente, causado pela absorção de fótons.

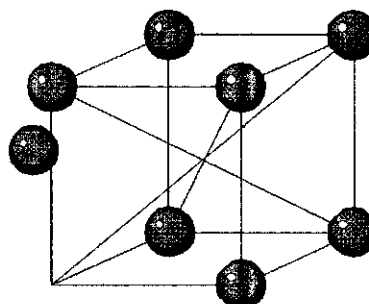
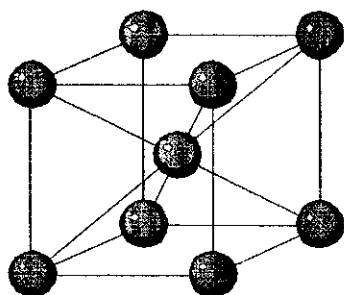
O material mais utilizado na fabricação é o silício. E esse silício deve ser puro, ter estrutura monocristalina e ter baixa densidade de defeitos na rede.

Através dos processos de crescimento de cristais, é possível fabricar uma célula solar que tenha as propriedades necessárias ao seu funcionamento, utilizando-se métodos de dopagem e difusão controlada.

## Defeito na disposição dos átomos (geométrica)

A presença de defeitos no cristal acarreta descontinuidade das propriedades, comprometendo a eficiência do dispositivo.

O defeito na disposição geométrica dos átomos consiste na falta ou excesso de partículas ou numa localização errônea destas.



## Inomogeneidade

Diferença de concentração das substâncias, que compõem uma liga, em cada ponto do cristal. Não é considerada um defeito, embora altere o desempenho do dispositivo.

Durante o crescimento do cristal, a convecção ajuda a homogeneizar o líquido, na medida em que espalha o soluto pelo líquido, mas é um fenômeno sobre o qual não temos controle e ele gera áreas de estagnação, onde ocorre acúmulo do soluto e diferenças de concentração.

## Técnicas de crescimento de cristais

**Bridgman:** solidificação direcional sob um gradiente térmico móvel.

Este método consiste em, dentro de um forno, fundir o material contido numa ampola e deslocá-lo lentamente para a zona fria ocorrendo a solidificação. Pode haver deslocamento da ampola ou do forno. O deslocamento do forno evita a vibração da ampola, do material que está sendo solidificado.

**Vapor-Líquido-Sólido:** é uma variante do método anterior, aonde a zona derretida, na frente de solidificação, é reduzida a uma fina camada líquida alimentada por vapores.

Dentro de um forno, a ampola cheia de vapores é deslocada para a zona fria, ocorrendo contínua condensação de vapor formando uma camada líquida entre o vapor e o sólido que está sendo formado.

A vantagem deste método para o anterior é que a camada líquida fina diminui os efeitos de convecção.

## Simulação Numérica

Nos processos de crescimento de cristais, ocorre problemas na concentração dos componentes da liga no sólido formado. Para calcular e estudar essas concentrações há equações:

$$\text{Caso geral: } D \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} = \frac{\partial C}{\partial t} \quad \begin{array}{l} x \in (s(t), l) \\ t \geq 0 \\ s(0) = 0 \end{array}$$

$$\begin{array}{l} D \frac{\partial C}{\partial x} \Big|_{x=s(t)^+} = (K-1)VC(s_+, t) \\ V = \frac{ds}{dt} \\ K = C_s / C(s_+, t) \end{array}$$

$$\frac{\partial C}{\partial x} \Big|_{x=l} = 0$$

$$C(x, 0) = C_0$$

aonde:

- (x,t) = (posição, tempo)
- C(x,t) = concentração
- s(t) = posição da interface
- D = constante de difusão mutua
- L = largura da ampola
- K = fator de segregação interfacial
- V = velocidade da interface
- C<sub>0</sub> = concentração inicial do líquido homogêneo
- ± subscrito indica posição logo à frente (+) ou atrás (-) da interface.

### Difusão muito lenta: Smith - Tiller - Ruther

Quando  $D/IV \ll 1$ , a equação acima prevê um regime estável dominado por difusão. Neste caso, e para D, K e V constantes a solução é obtida analiticamente pela bem conhecida forma de Smith, Tiller e Rutter.

Assim sendo, a concentração no transiente inicial é dada por:

$$C_s(x) = \frac{C_0}{2} \left\{ 1 + \operatorname{erf} \left( \frac{1}{2} \sqrt{\frac{V}{D}} x \right) + (2K - 1) \exp[-K(1 - K)(Vx/D)] \times \operatorname{erfc} \left[ \left( \frac{2K - 1}{2} \right) \sqrt{\frac{V}{D}} x \right] \right\},$$

e no transiente final:

$$C_s(x) = C_0 \left\{ 1 + \sum_{n=1}^{\infty} (2n+1) \frac{(1-K)(2-K)\dots(n-K)}{(1+K)(2+K)\dots(n+K)} \times \exp[-n(n+1)V(1-x)/D] \right\}.$$

### Difusão Instantânea: Scheil.

Quando  $D/IV$  (o número de Peclet do soluto) se aproxima de 1, a redistribuição de soluto é dada pelo regime normal de solidificação de Scheil[7], cuja fórmula diferencial é:

$$\frac{dC}{C - C_s} = \frac{df_s}{1 - f_s},$$

aonde  $f_s$  é a fração de sólido crescido. O caso particular no qual K permanece constante conduz a:

$$C_s = KC_0(1 - f_s)^{K-1}.$$

Para valores intermediários de  $D/IV$  teremos que utilizar métodos numéricos

# PARTE COMPUTACIONAL

## Objetivo do programa

**Fitting:** ajuste, comparação entre os modelos teóricos e dados experimentais.

O programa fornecerá um gráfico com o modelo teórico; o usuário fornecerá os dados experimentais e ocorrerá comparação entre esses dados.

**Interface amigável:** Programa para Windows com menus, caixas de diálogo, teclas de atalho e ajuda on-line.

Um programa que qualquer pessoa possa utilizar, o uso do mouse somado a presença de menus facilita a vida do usuário que não precisará saber qual o comando que ele irá usar, basta selecionar o que pretende fazer e o programa o fará.

## Novidades

**Programação visual:** facilidade de implementação, de criação de menus e caixas de diálogo.

A programação em Windows será desenvolvida em Visual Basic, que representa atualmente um método eficaz e simples para o desenvolvimento de programas, enquanto que os programas numéricos envolvidos no cálculo da composição do cristal serão desenvolvidos em C.

O Visual Basic fornece um ambiente de desenvolvimento de interface superior, e a linguagem C fornece um alto desempenho em programas complexos e a combinação entre eles representa uma técnica de programação poderosa.

**Melhorando a parte numérica:** rotinas para soma de séries infinitas.

No cálculo da composição do cristal, da concentração, quando a difusão é muito lenta, requer uma soma de série. E em casos de convergências lentas, se não for escolhido um critério adequado pode-se obter resultados inesperados. Já tínhamos rotinas para esses cálculos, mas os resultados obtidos não foram satisfatórios. Estamos estudando esses casos de convergência para desenvolvermos rotinas que façam esse cálculo com a precisão desejada.

São José dos Campos, 6 de julho de 1996.

*Nanci Naomi Arai*  
Nanci Naomi Arai