

UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO
INSTITUTO DE FÍSICA E QUÍMICA DE SÃO CARLOS



"SIMULAÇÃO NUMÉRICA DA FASE LÍQUIDA DO
CRESCIMENTO DE SILÍCIO PELO MÉTODO
CZOCHRALSKI".

LUIS VICENTE DE ANDRADE SCALVI

Dissertação apresentada ao
Instituto de Física e Química de São
Carlos para obtenção do título de Me
stre em Física Aplicada.

Orientador Prof. Dr. BERNHARD JOACHIM MOKROSS

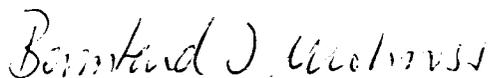
Departamento de Física e Ciência dos Materiais
SÃO CARLOS
- 1986 -



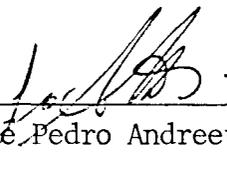
MEMBROS DA COMISSÃO JULGADORA DA DISSERTAÇÃO DE MESTRADO DE _____
Luis Vicente de Andrade Scalvi

APRESENTADA AO INSTITUTO DE FÍSICA E QUÍMICA DE SÃO CARLOS, DA
UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO, EM 13 DE maio DE 1986.

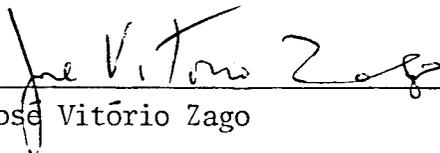
COMISSÃO JULGADORA:



Dr. Bernhard Joachim Mokross - Orientador



Dr. José Pedro Andreetta



Dr. José Vitório Zago

À

meus pais

AGRADECIMENTOS

Ao Professor Dr. Bernhard J. Mokross, meu orientador, por todo o apoio e incentivo.

Ao Professor Dr. Milton Ferreira de Souza, meu orientador em parte do curso, pelo grande incentivo ao desenvolvimento do meu trabalho.

Ao Professor Dr. José V. Zago do I.M.E.C.C. - UNICAMP, sem o qual a realização deste trabalho seria impossível.

Ao técnico Valdeci Massaro, pela ajuda na resolução dos problemas computacionais.

Ao CNPq e FAPESP pelo suporte financeiro.

INDICE

LISTA DE TABELAS E ILUSTRAÇÕES	i
NOTAÇÃO	v
RESUMO	vii
ABSTRACT	viii
INTRODUÇÃO	01
CAPÍTULO I - O CRESCIMENTO DE SILÍCIO PELO MÉTODO CZOCHRALSKI	03
CAPÍTULO II - OS FLUXOS NA FASE LÍQUIDA	08
2.1 - As Equações que Determinam o Escoamen to	08
2.2 - A Convecção Forçada. Algumas Evidên cias Experimentais. Uma Breve Análise.	13
CAPÍTULO III - A PRESENÇA DE IMPUREZAS NO SILÍCIO	23
3.1 - A Interface de Crescimento e a Incor poração de Impurezas	23
3.2 - Efeitos da Presença de Oxigênio e Ou tras Impurezas no Cristal	32
CAPÍTULO IV - O MÉTODO NUMÉRICO PARA RESOLUÇÃO DO PROBLE MA	37
4.1 - O Método de Elementos Finitos	37
4.1.1 - Métodos Variacionais de Elementos Finitos (Método Clássico de Ritz).	38
4.1.2 - O Método Residual de Galerkin	47
4.2 - Discretização das Equações	49

4.2.1 - Colocação do Problema	49
4.2.2 - Aplicação do Método de Galerkin ..	53
CAPÍTULO V - TESTES PARA O PROGRAMA	61
CAPÍTULO VI - SIMULAÇÃO NUMÉRICA PARA SILÍCIO	73
CONCLUSÃO	102
APÊNDICE I - TEOREMA DE TAYLOR-PROUDMAN - O FLUIDO EM RO TAÇÃO	104
APÊNDICE II - O MÉTODO VARIACIONAL E O ESPAÇO DE HILBERT	107
BIBLIOGRAFIA	112

LISTA DE TABELAS

Tabela III.1 - Análise de Poli-Si CVD e Cz-Si monocristali no	31
Tabela III.2 - Análise de Sílica Sintética e Natural	35
Tabela V.1 - Comparação com os Resultados de Crochet et alii	64
Tabela V.2 - Comparação com os Resultados de Mihelcic et alii	64
Tabela VI.1 - Valores de Propriedades Físicas de Silício Fundido	75
Tabela VI.2 - Parâmetros Obtidos da Simulação Numérica pa ra Silício	97
Tabela VI.3 - Resumo das Discussões em Relação à Qualida de do Silício Obtidos da Simulação Numérica	98

LISTA DE FIGURAS

Figura 1.1 - Esquema do Puxamento de Silício pelo Método Czchralski	03
Figura 1.2 - Condições de Escoamento de Calor durante Crescimento de Cristais Czochralski	04
Figura 2.1 - Diagramas de Vetor Velocidade Obtidos por Mihelcic et alii	12
Figura 2.2 - Diagrama Esquemático da Aparelhagem utiliza da por Hide-Titman	15

Figura 2.3	- Camadas Separadas no Fluido em Rotação	16
Figura 2.4	- Formas Esperadas das Células de Taylor-Proudman	17
Figura 2.5	- Variação da Estrutura dos Fluxos com a Velocidade Relativa de Cadinho/Cristal	20
Figura 3.1	- Modelos de Diagramas de Fase para Baixas Concentrações de Impurezas em Silício	24
Figura 3.2	- Características do Escoamento em um Cadinho Czochralski	28
Figura 3.3	- Distribuição Axial de Oxigênio em Monocristais Si - CZ	31
Figura 3.4	- Influência da Taxa de Rotação do Cristal na Resistividade Radial em Monocristais Si-CZ.	32
Figura 4.1	- Representação da Base Linear de Funções ...	42
Figura 4.2	- Funções Base Dentro de um Elemento Finito para Aproximação Quadrática	46
Figura 4.3	- Aproximação Linear para Problema em duas Dimensões	47
Figura 4.4	- Condições de Contorno para a Geometria do Crescimento Czochralski	55
Figura 4.5	- Aproximações dentro de um Elemento Finito Padrão	59
Figura 5.1	- Resultados de Literatura para Teste com o Programa	67

Figura 5.2	- Teste para o Programa - Res. Crochet $Re_S = 0$, $Re_C = 100$	68
Figura 5.3	- Teste para o Programa - Res. Crochet $Re_S = 125$, $Re_C = -375$	69
Figura 5.4	- Teste para o Programa - Liq. - <u>Água/Glicerina</u> (50%) $\omega_S = 0$ RPM, $\omega_C = 15$ RPM	70
Figura 5.5	- Teste para o Programa - Liq. - <u>Água/Glicerina</u> (50%) $\omega_S = -50$ RPM, $\omega_C = 10$ RPM.	71
Figura 5.6	- Teste para o Programa - Liq. - <u>Água/Glicerina</u> (50%) $\omega_S = 60$ RPM, $\omega_C = 15$ RPM	72
Figura 6.1	- Simulação Numérica para Silício $\omega_S = 45$ RPM, $\omega_C = 5$ RPM, Alt. Fluido = 4.5 cm	77
Figura 6.2	- Simulação Numérica para Silício $\omega_S = 30$ RPM, $\omega_C = 4$ RPM, Alt. Fluido = 4.5 cm	78
Figura 6.3	- Simulação Numérica para Silício $\omega_S = -30$ RPM, $\omega_C = 4$ RPM, Alt. Fluido = 4.5 cm	79
Figura 6.4	- Simulação Numérica para Silício $\omega_S = -22$ RPM, $\omega_C = 4$ RPM, Alt. Fluido = 4.5 cm	81
Figura 6.5	- Simulação Numérica para Silício $\omega_S = -11$ RPM, $\omega_C = 2$ RPM, Alt. Fluido = 4.5 cm	82
Figura 6.6	- Simulação Numérica para Silício $\omega_S = 10$ RPM, $\omega_C = 2$ RPM, Alt. Fluido = 4.5 cm	83
Figura 6.7	- Simulação Numérica para Silício $\omega_S = 10$ RPM, $\omega_C = 2$ RPM, Alt. Fluido = 3.5 cm	85

Figura 6.8	- Simulação Numérica para Silício $\omega_S = 10$ RPM, $\omega_C = 2$ RPM, Alt. Fluido = 3.5 cm, Largura Cristal = 1.45 cm	86
Figura 6.9	- Simulação Numérica para Silício $\omega_S = 10$ RPM, $\omega_C = 2$ RPM, Alt. Fluido = 2.0 cm	87
Figura 6.10	- Simulação Numérica para Silício $\omega_S = 2$ RPM, $\omega_C = 10$ RPM, Alt. Fluido = 4.5 cm	88
Figura 6.11	- Simulação Numérica para Silício $\omega_S = -10$ RPM, $\omega_C = 2$ RPM, Alt. Fluido = 4.5 cm	90
Figura 6.12	- Simulação Numérica para Silício $\omega_S = -10$ RPM, $\omega_C = 2$ RPM, Alt. Fluido = 3.5 cm	91
Figura 6.13	- Simulação Numérica para Silício $\omega_S = -10$ RPM, $\omega_C = 2$ RPM, Alt. Fluido = 2.0 cm	92
Figura 6.14	- Simulação Numérica para Silício $\omega_S = -10$ RPM, $\omega_C = 2$ RPM, Alt. Fluido = 3.5 cm, Largura Cristal = 1.45 cm	94
Figura 6.15	- Simulação Numérica para Silício $\omega_S = -10$ RPM, $\omega_C = 2$ RPM, Alt. Fluido = 3.5 cm, Largura Cristal = 1.885 cm	95
Figura 6.16	- Simulação Numérica para Silício $\omega_S = 10$ RPM, $\omega_C = -2$ RPM, Alt. Fluido = 4.5 cm	96
Figura 6.17	- Simulação Numérica para Silício $\omega_S = -2$ RPM, $\omega_C = 10$ RPM, Alt. Fluido = 4.5 cm	100
Figura 6.18	- Simulação Numérica para Silício $\omega_S = -10$ RPM, $\omega_C = 10$ RPM, Alt. Fluido = 4.5 cm	101

NOTAÇÃO

- r - coordenada radial
 θ - coordenada azimutal
 z - coordenada axial
 u - componente da velocidade na direção radial
 v - componente da velocidade na direção azimutal
 w - componente da velocidade na direção axial
 μ - viscosidade dinâmica
 ρ - densidade
 ν - viscosidade cinemática ($= \mu/\rho$)
 f_r, f_θ, f_z - força externa por unidade de volume na direção indicada pelo índice
 ω_S - velocidade angular do cristal
 ω_C - velocidade angular do cadinho
 p - pressão
 T - temperatura
 t - tempo
 a - raio do cristal
 b - raio do cadinho
 C_p - calor específico a pressão constante
 k - condutividade térmica
 Ro - número de Rossby ($= 2 (\omega_S - \omega_C) / (\omega_S + \omega_C)$)
 E - número de Ekman ($= 2\nu/a^2 (\omega_S + \omega_C)$)
 Re_S - número de Reynolds do cristal ($= \omega_S \cdot b^2/\nu$)
 Re_C - número de Reynolds do cadinho ($= \omega_C \cdot b^2/\nu$)
 Re - número de Reynolds do movimento global
 $(= |\omega_C - \omega_S| \cdot b^2/\nu)$

$$\langle A, B \rangle = \iint AB r \, dr \, dz$$

div - operador divergente

grad - operador gradiente

RESUMO

Visando compreender os fluxos na fase líquida do crescimento de Silício pelo método Czochralski, é feita a Simulação Numérica do silício fundido, resolvendo-se as equações que governam o fenômeno da convecção forçada no fluido: Balanço de Quantidade de Movimento e Balanço de Massa. A técnica numérica escolhida é a de Elementos Finitos, onde é utilizada a Formulação de Galerkin, com aproximações quadráticas nas componentes da velocidade e linear na pressão. A partir de várias combinações de rotações cadinho-cristal, os perfis de velocidade obtidos são analisados com relação aos efeitos de incorporação de impurezas e/ou dopantes no cristal em crescimento.

ABSTRACT

In order to visualise the flow conditions during crystal growth of Silicon by the Czochralski technique, a numerical simulation is done. It is used the Finite Element Method with the Galerkin Formulation, and with quadratic approximations on the components of the velocity and linear approximations on the pressure. Many combinations of crystal and crucible rotations are analysed and discussed considering optimal growth conditions.

INTRODUÇÃO

A forte presença da eletrônica no desenvolvimento da tecnologia moderna é incontestável. Também é altamente provável que sua importância continue a crescer cada vez mais. A maioria dos equipamentos eletrônicos hoje produzidos estão baseados em dispositivos de silício.

O método de Czochralski é responsável pela grande maioria do Silício monocristalino produzido hoje no mundo e que já atinge uma alta quantidade. Em 1980 cerca de 2000 toneladas de silício monocristalino livre de deslocamentos foram produzidos pelo método Czochralski. Os cristais crescidos por esta técnica são indicados especialmente para dispositivos de baixa potência, particularmente para LSI (circuitos integrados em larga escala) e VLSI (Circuitos integrados em muito larga escala), dispositivos necessários para eletrônica lógica e de controle.

Apesar de alguns países já terem desenvolvido um alto conhecimento na produção de Silício, no Brasil este conhecimento é praticamente inexistente e, desta forma, é necessário que se desenvolvam trabalhos que visem aprender e desenvolver esta tecnologia o mais rápido possível, para que o Brasil não se afaste demais dos países que já detêm esta tecnologia, com relação ao mercado internacional e principalmente o mercado interno, já que o setor de Informática, que é baseado na indústria eletrônica, é hoje uma das questões primordiais da economia no Brasil.

A melhoria do Silício crescido pela técnica Czochralski está relacionado a um conhecimento dos fenômenos de transporte que ocorrem na fase líquida. Um trabalho experi

mental com Silício fundido apresenta inúmeras dificuldades, principalmente com relação à alta temperatura e visualização dos fluxos internos no líquido.

Desta forma, um trabalho de simulação numérica da fase líquida se torna altamente interessante, pois constrói um modelo dos fluxos, ainda que ele não possa (ainda) ser provado experimentalmente, e assim é possível um conhecimento teórico da fase líquida a partir das equações que regem o escoamento.

Portanto, esperamos que este trabalho venha a contribuir para um conhecimento mais aprofundado da produção de Silício pelo método Czochralski, requisito essencial para desenvolvimento de alta tecnologia de Silício no Brasil.

CAPÍTULO I

O CRESCIMENTO DE SILÍCIO PELO MÉTODO CZOCHRALSKI

Um esquema do puxamento de Silício pelo método Czochralski é mostrado na Figura 1.1. Silício policristalino (também chamado poli-Silício) é introduzido num cadinho onde é fundido e mantido a uma temperatura superior ao Ponto de Fusão de Silício ($\approx 1420^{\circ}\text{C}$). Uma semente do cristal é mergulhada no líquido e então puxada lentamente. A transmissão de ca

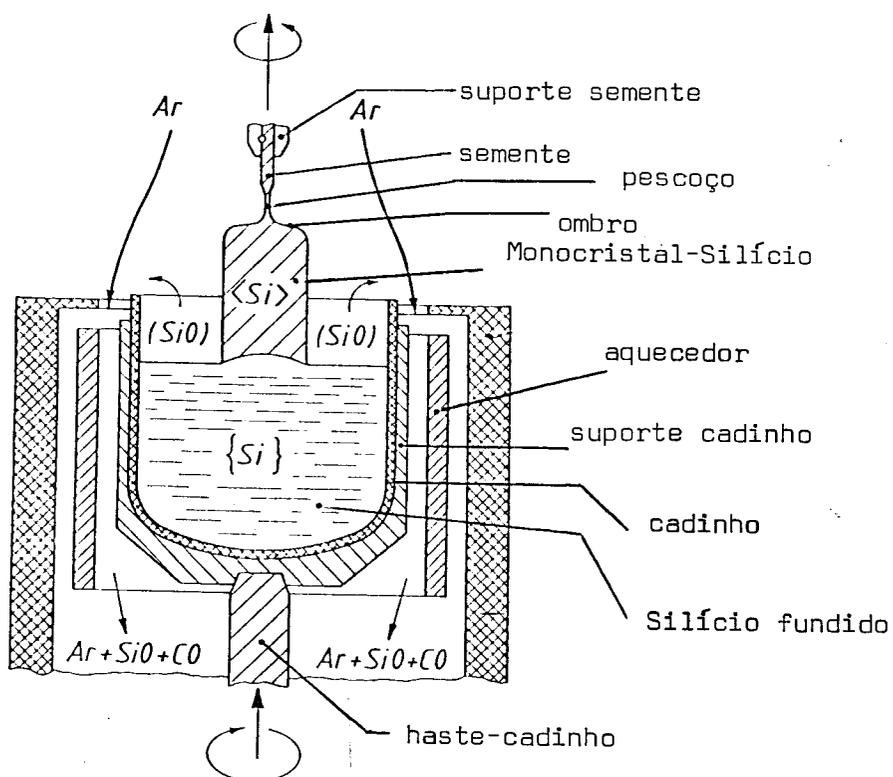


Figura 1.1 - Esquema do Puxamento de Silício pelo Método Czochralski¹.

lor por condução através da semente permite a eliminação do calor latente gerado pelo silício que se solidifica na interface semente-líquido. As partes mais frias que sustentam a semente são refrigeradas continuamente, permitindo o transporte de ca

la rotação de cadinho e/ou cristal (Esta rotação tem objetivos bem definidos e será discutida em detalhes no Capítulo 2). Calor é perdido por radiação através da superfície livre, devido à alta temperatura, apesar da baixa emissividade do Silício, e por condução através da parte central da base do cadinho (resfriada pelo suporte do cadinho). Essas perdas fazem com que haja uma distribuição de temperaturas decrescente do cadinho para o cristal, e o silício em torno da superfície de crescimento tem uma temperatura próxima da temperatura de fusão. O calor latente gerado pela solidificação do Silício é liberado por condução através do cristal para as partes superiores do sistema, mantidas à temperatura inferior. Calor também pode ser liberado por radiação nas partes do cristal mantidas acima do nível do líquido, conforme mostra a Figura 1.2.a.

A medida que o crescimento prossegue, algumas condições de transporte de calor vão se modificando, até atingir o estágio mostrado na Figura 1.2.b. Com o abaixamento do aquecedor, calor é absorvido por radiação pelo suporte do cadinho e flui para o Silício fundido por condução. Radiação também ocorre do cadinho para o cristal e também da base de grafite (que sustenta o cadinho de sílica), material que possui boas emissividade e condutividade térmica, para fora do sistema de aquecimento. Devido ao calor absorvido pelas partes superiores do cristal, o gradiente de calor no cristal é reduzido e desta forma, o transporte de calor é feito de maneira mais lenta. Consequentemente a velocidade de puxamento deve ser reduzida.

A necessidade do suporte de grafite advém do fato que a sílica utilizada como material de cadinho é muito mole na temperatura de crescimento, e possui uma alta taxa de erosão pelo silício fundido, porém é utilizada devido ao produ

to da reação entre cadinho e silício fundido - monóxido de silício (SiO) - possuir uma pressão de vapor relativamente alta (12 mbar) e ser facilmente eliminado da solução.

Pequenas quantidades de calor podem também ser transportadas pela evaporação de SiO e pela convecção forçada gerada pela corrente de Argônio que é continuamente alimentada. A função principal da corrente do gás é eliminar o monóxido de Silício e subprodutos tais como monóxido de Carbono (CO), gerado pela redução de SiO nas partes de grafite, transportando-os para fora do sistema de aquecimento, e impedindo assim o retorno ao líquido.

A estrutura dos fluxos na fase líquida é o principal fator na formação da camada limite de difusão na superfície de solidificação. O líquido deve ser misturado adequadamente e isto é conseguido, em primeira análise, se todas as partes do fluido estão em movimento e a velocidade máxima ocorre próxima da interface de crescimento (em estado estacionário). Este tipo de estrutura de fluxos permite que o oxigênio presente no líquido seja mais facilmente liberado e também uma distribuição radial monotônica de temperaturas no silício fundido, pois caso esta não ocorra, o gradiente radial de temperatura pode ir a zero em algum ponto, fazendo com que seja difícil o controle do diâmetro nestas posições radiais, e, além disso, com uma distribuição adversa de temperaturas, pode ocorrer pontos de nucleação espontânea.

Com relação às velocidades próximas à interface, apesar de contribuírem para eliminação de impurezas, elas devem ser previstas e controladas pois têm forte influência sobre a forma da interface de crescimento cristal-líquido, além da espessura e forma da camada limite de difusão nesta interfa

ce. Principalmente para o caso de crescimento com dopantes, uma forma irregular da camada-limite ocasionaria uma distribuição radial não-homogênea de dopantes e/ou uma baixa concentração, pois a alta velocidade do fluido em sentido adverso pode fazer com que a espessura da camada não permita que a situação de equilíbrio na segregação de dopantes entre sólido e líquido se ja aproximada e assim as concentrações serão diferentes das previstas pelos coeficientes de segregação (Capítulo 3).

O controle da distribuição de velocidades na fase líquida é feito pela rotação de cadinho e/ou cristal. Nas combinações de rotações usadas atualmente para a produção industrial de silício, a estrutura dos fluxos próximos de interface cristal-líquido é fortemente influenciada pela convecção forçada (controlada pela rotação). Apesar disso a convecção natural gerada pelos gradientes de temperatura, pode acarretar instabilidades (perturbações não-estacionárias) que ocasionam variações locais na temperatura e velocidade do fluxo³. Variações na temperatura levam para variações na taxa de crescimento, enquanto variações na velocidade causam mudanças temporais na espessura da camada-limite na interface de crescimento. Estes processos não estacionários resultam em flutuações composicionais na forma de estrias ("striations") paralelas à interface de crescimento.

CAPÍTULO II

OS FLUXOS NA FASE LÍQUIDA

2.1 - As Equações que Determinam o Escoamento

Para se fazer uma análise do comportamento da fase líquida de Silício, o primeiro passo é a modelagem matemática. Assumindo-se a hipótese de que silício líquido tem um comportamento de Fluido Newtoniano, as equações que melhor representam o comportamento do líquido são os Balanços de Massa (Continuidade), Energia e Quantidade de Movimento (Navier-Stokes). Em coordenadas cilíndricas, as três componentes das equações de Navier-Stokes, o balanço de energia e o balanço de massa são, respectivamente^{4,5}:

$$\begin{aligned} \rho \left(\frac{\partial u}{\partial t} + u \frac{\partial u}{\partial r} + \frac{v}{r} \frac{\partial v}{\partial \theta} - \frac{v^2}{r} + w \frac{\partial u}{\partial z} \right) = \\ = f_r - \frac{\partial p}{\partial r} + \mu \left(\frac{\partial^2 u}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial u}{\partial r} - \frac{u}{r^2} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 u}{\partial \theta^2} - \right. \\ \left. - \frac{2}{r^2} \frac{\partial v}{\partial \theta} + \frac{\partial^2 u}{\partial z^2} \right) \end{aligned} \quad (2.1)$$

$$\begin{aligned} \rho \left(\frac{\partial v}{\partial t} + u \frac{\partial v}{\partial r} + \frac{v}{r} \frac{\partial v}{\partial \theta} + \frac{uv}{r} + w \frac{\partial v}{\partial z} \right) = \\ = f_\theta - \frac{1}{r} \frac{\partial p}{\partial \theta} + \mu \left(\frac{\partial^2 v}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial v}{\partial r} - \frac{v}{r^2} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 v}{\partial \theta^2} + \right. \\ \left. + \frac{2}{r^2} \frac{\partial u}{\partial \theta} + \frac{\partial^2 v}{\partial z^2} \right) \end{aligned} \quad (2.2)$$

$$\rho \left(\frac{\partial w}{\partial t} + u \frac{\partial w}{\partial r} + \frac{v}{r} \frac{\partial w}{\partial \theta} + w \frac{\partial w}{\partial z} \right) = f_z - \frac{\partial p}{\partial z} + \mu \left(\frac{\partial^2 w}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial w}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 w}{\partial \theta^2} + \frac{\partial^2 w}{\partial z^2} \right) \quad (2.3)$$

$$\frac{\partial T}{\partial t} + u \frac{\partial T}{\partial r} + \frac{v}{r} \frac{\partial T}{\partial \theta} + w \frac{\partial T}{\partial z} = \frac{k}{C_p \rho} \left[\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial T}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 T}{\partial \theta^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} \right] \quad (2.4)$$

$$\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r u) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} v + \frac{\partial w}{\partial z} = 0 \quad (2.5)$$

Nas equações acima estamos considerando o fluido como incompressível e na Equação (2.4), C_p e k são constantes.

Como estamos preocupados com o movimento do fluido, a viscosidade (μ) é uma propriedade particularmente interessante. É bem conhecido que a viscosidade tem uma variação sensível com a temperatura, desta forma uma outra relação deveria ser adicionada às equações acima:

$$\mu = f(T) \quad (2.6)$$

Porém, é bem difícil se medir a viscosidade de silício fundido e ainda mais de se estimar sua variação com a temperatura. Sendo assim, deve-se aceitar a hipótese de viscosidade constante, pois a incerteza no valor da medida é maior que o erro por se desprezar a variação com a temperatura. Ainda assim, em termos de se efetuar uma resolução numérica dessas equações, uma correlação para viscosidade em função da tem

peratura seria facilmente acrescentada ao algoritmo.

Um outro ponto a ser considerado é que estamos trabalhando num campo gravitacional sujeito à gradientes de temperatura. Desta forma, as partículas do fluido sujeitas a um campo não isotérmico sofrerão diferentes dilatações conforme sua posição dentro do fluido. O efeito dessa não-homogeneidade na densidade das partículas de fluido é que sob a ação da gravidade, as partículas mais pesadas (mais frias) tenderão a descer, enquanto as mais leves (mais quentes) tenderão a subir, trocando sempre de lugar em relação à sua posição no campo de temperaturas, e gerando um movimento contínuo no seio do líquido (Convecção Natural). O efeito da variação de densidade é incorporado nas equações de Navier-Stokes pelo termo de força:

$$f_z = g \rho \beta (T - T_m) \quad (2.7)$$

onde: β - coeficiente de dilatação térmica

T - temperatura local

T_m - temperatura de fusão do Silício

(temperatura da interface sólido-líquido)

Apesar deste termo passar a ser muito importante nesta equação, os efeitos de compressibilidade nos demais termos do balanço diferencial podem ser facilmente desprezados, conforme demonstrou Polhausen⁶ na análise da convecção natural gerada por uma placa plana vertical no aquecimento de um fluido.

Desta forma assumimos as propriedades físicas do fluido como constantes e as variáveis que são obtidas a partir da resolução deste conjunto de equações são u , v , w , p e T .

A Figura 2.1 mostra resultados obtidos por

Mihelcic et alii⁸ em uma simulação numérica utilizando o método de diferenças finitas. Está mostrado apenas metade do cadinho devido à hipótese de axissimetria (velocidades, pressão e temperatura têm derivada nula em relação à coordenada azimutal). Essas figuras são diagramas de vetor-velocidade obtidos das componentes radial e axial (fluido de trabalho - cobre - $\nu = 0.005 \text{ cm}^2/\text{s}$). No primeiro caso (Figuras 2.1.a e 2.1.b) é mostrada a distribuição de velocidades gerada pela rotação de cadinho e/ou cristal (isotérmica). Esse esquema visa mostrar o efeito da rotação no transporte de massa e energia no fluido, ou o efeito da Convecção Forçada. Já nas Figuras 2.1.c e 2.1.d, os contornos adquirem temperaturas diferenciadas e o sistema passa a ser não isotérmico, devendo ocorrer então Convecção Natural. Conforme pode-se perceber, as figuras não apresentam diferenças sensíveis, principalmente nas proximidades da interface de crescimento.

Desta forma, podemos dizer que a grande influência na distribuição de velocidades nas vizinhanças da interface de crescimento é dado pela convecção forçada. Obviamente, os casos mostrados são poucos para se afirmar com certeza que esta regra é válida para todos os casos, mas seguramente pode-se dizer que a convecção forçada é um fator fundamental no transporte de massa e energia na fase líquida do crescimento Czochralski. Segundo Carruthers e Nassau,⁹ o efeito da convecção natural devido aos gradientes não-verticais de temperatura aparece fundamentalmente numa região externa do fluido (secção 2.2), enquanto na região interna (e portanto, próxima do interface) a influência é reduzida pelos fortes fluxos internos.

Portanto, um estudo da convecção forçada no crescimento de silício pelo método Czochralski torna-se importante

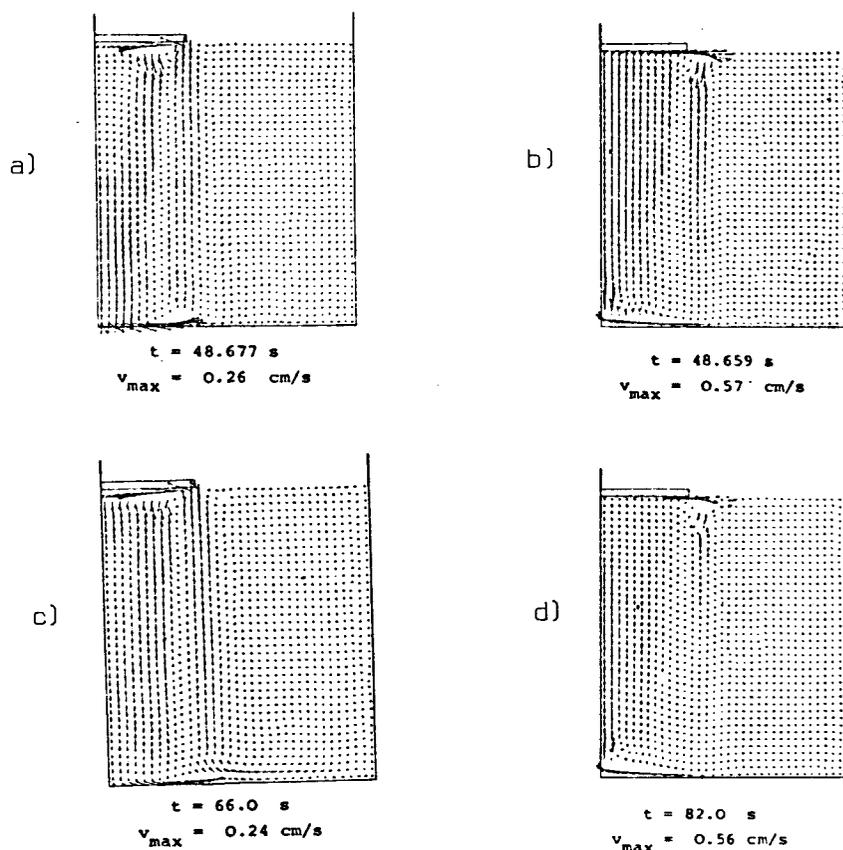


Figura 2.1 - Diagramas de Vetor-Velocidade obtidos por Mihelcic et alii⁸

a) $\omega_S = 0 \text{ RPM}$, $\omega_C = 15 \text{ RPM}$. b) $\omega_S = 60 \text{ RPM}$, $\omega_C = 15 \text{ RPM}$.

c) $\omega_S = 0 \text{ RPM}$, $\omega_C = 15 \text{ RPM}$, $\Delta T = 66^\circ \text{ K}$.

d) $\omega_S = 60 \text{ RPM}$, $\omega_C = 15 \text{ RPM}$, $\Delta T = 66^\circ \text{ K}$.

e pode fornecer subsídios para a otimização do crescimento com relação à incorporação de impurezas e distribuição de dopantes. Desta forma as variáveis se reduzem a u , v , w e p e descartamos a equação (2.4).

Hipóteses adicionais serão feitas em nosso trabalho. A primeira é a de regime estacionário, que não nos permitirá prever as instabilidades temporais (Conforme visto no Capítulo 1, a maior causa das instabilidades é a convecção natural, e assim eliminamos a possibilidade de prevê-las, mais pela consideração da ausência de gradientes de temperatura do que pelo regime estacionário propriamente dito). A segunda hipóte

se é a de axissimetria, que nos permite formas de visualização dos resultados através de gráficos usando duas dimensões. Em outros termos, estas hipóteses são:

$$\text{(Reg. Estacionário)} \quad \frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial w}{\partial t} = \frac{\partial v}{\partial t} = 0 \quad (2.8)$$

$$\text{(Axissimetria)} \quad \frac{\partial u}{\partial \theta} = \frac{\partial w}{\partial \theta} = \frac{\partial v}{\partial \theta} = \frac{\partial p}{\partial \theta} = 0 \quad (2.9)$$

Então, as equações a serem resolvidas são:

$$\begin{aligned} & \rho \left(u \frac{\partial u}{\partial r} - \frac{v^2}{r} + w \frac{\partial u}{\partial z} \right) = \\ & = f_r - \frac{\partial p}{\partial r} + \mu \left(\frac{\partial^2 u}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial u}{\partial r} - \frac{u}{r^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial z^2} \right) \end{aligned} \quad (2.10)$$

$$\begin{aligned} & \rho \left(u \frac{\partial v}{\partial r} + \frac{uv}{r} + w \frac{\partial v}{\partial z} \right) = \\ & = f_\theta + \mu \left(\frac{\partial^2 v}{\partial r^2} - \frac{1}{r} \frac{\partial v}{\partial r} - \frac{v}{r^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial z^2} \right) \end{aligned} \quad (2.11)$$

$$\begin{aligned} & \rho \left(u \frac{\partial w}{\partial r} + w \frac{\partial w}{\partial z} \right) = \\ & = f_z - \frac{\partial p}{\partial z} + \mu \left(\frac{\partial^2 w}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial w}{\partial r} + \frac{\partial^2 w}{\partial z^2} \right) \end{aligned} \quad (2.12)$$

$$\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r u) + \frac{\partial w}{\partial z} = 0 \quad (2.13)$$

2.2 - A Convecção Forçada - Algumas Evidências Experimentais. Uma Breve Análise

Uma análise detalhada do escoamento do fluido nu

ma geometria bastante próxima à do crescimento de cristais pelo método Czchralski foi feita por Hide e Titman¹⁰, que mostraram a existência de diferentes regiões do fluido caracterizadas por diferentes balanços de força. A geometria utilizada por eles em seus cálculos e experimentos estão na Figura 2.2. A existência de tais regiões estão ligadas a baixos valores de Ro e E . A hipótese de axissimetria pode ser considerada como válida desde que $|Ro| < |Ro_T|$, onde Ro_T é um número de Rossby crítico. A relação experimental obtida por eles foi:

$$|Ro_T| = A \cdot E^n \quad (2.14)$$

onde: $A = 16.8 \pm 2.2$

$n = 0.568 \pm 0.013$

A Figura 2.3 mostra a separação do fluido nas diferentes regiões. Regiões \underline{i} e \underline{j} são caracterizadas por um balanço entre forças de pressão e forças de Coriolis (ver Apêndice I). Região \underline{j} roda com o recipiente a Ω_0 rad/s^(*) e a região \underline{i} roda a $1/2 (\Omega_1 + \Omega_0)$ rad/s. Portanto dentro da região \underline{m} , a velocidade angular de rotação sofre uma variação de $1/2 (\Omega_1 - \Omega_0)$ rad/s. Regiões \underline{k} e \underline{l} são camadas limite de Ekman onde a velocidade angular de rotação muda de $1/2 (\Omega_1 + \Omega_0)$ rad/s seu valor em \underline{i} , para Ω_1 rad/s no caso da região \underline{k} e Ω_0 rad/s no caso da região \underline{l} . Partículas de fluido nas regiões \underline{i} movem-se em direção ao disco a:

$$(\Omega_1 - \Omega_0) \left(2 \cdot \nu / (\Omega_1 - \Omega_0) \right)^{1/2} \text{ cm/s}$$

(*) Nota - Nesta secção adotaremos a nomenclatura de acordo com a Fig. 2.2

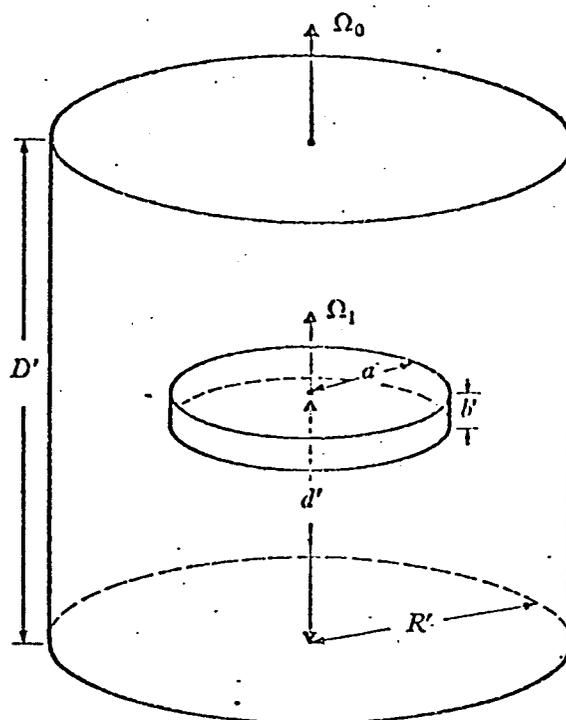


Figura 2.2 - Diagrama Esquemático da Aparelhagem utilizada por

¹⁰
Hide-Titman .

e são aceleradas radialmente para o centro ou para os lados nas regiões \underline{k} de acordo com $\Omega_1 > \Omega_0$ e vice-versa para região \underline{l} , e completa o circuito meridional pela região \underline{m} .

Desta forma temos duas regiões que não se misturam, a região externa (\underline{j}) que roda praticamente como um corpo sólido e a região interna com movimentos característicos para a relação de velocidades recipiente-disco.

A formação desta região cilíndrica foi primeiro detectada por Taylor⁹ com um experimento introduzindo tinta em um líquido em rotação levemente perturbado. Esta região é concêntrica com o eixo de rotação. Taylor e Proudman mostraram que

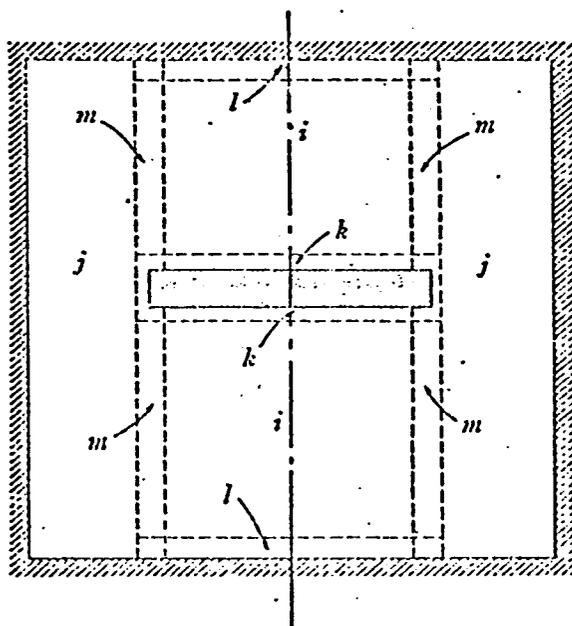


Figura 2.3 - Camadas Separadas no fluido em rotação¹⁰.

o fluxo estacionário do líquido em rotação é bidimensional com respeito a um sistema de coordenadas rodando com o líquido. Este importante resultado é conhecido como "Teorema de Taylor-Proudman". Se o eixo vertical de rotação coincide com o eixo z , o teorema pode ser enunciado como (ver Apêndice I):

$$\frac{\partial p}{\partial z} = \frac{\partial u}{\partial z} = \frac{\partial v}{\partial z} = \frac{\partial w}{\partial z} = 0 \quad (2.15)$$

As implicações deste teorema são melhor compreendidas quando o escoamento estacionário é considerado em torno de um objeto em contato, ou imerso em um líquido rodando, que possui uma diferente velocidade angular. No caso do disco imerso no tanque, uma diferença na velocidade angular de disco e recipiente causará uma superfície cilíndrica de estagnação que

é desenvolvida abaixo e acima e concêntrica com o disco. A região interna à superfície de estagnação é chamada célula de Taylor-Proudman.

O trabalho de Hide e Titman introduz a idéia de regiões distintas de fluxo para o caso da isorrotação (disco e tanque girando no mesmo sentido). Um trabalho para a geometria do crescimento de cristais pelo método Czochralski é feita por Carruthers e Nassau⁹ que analisam o caso da isorrotação e rotação contrária de cadinho e cristal. Um diagrama esquemático dos fluxos dentro do silício fundido encontram-se na Figura 2.4.

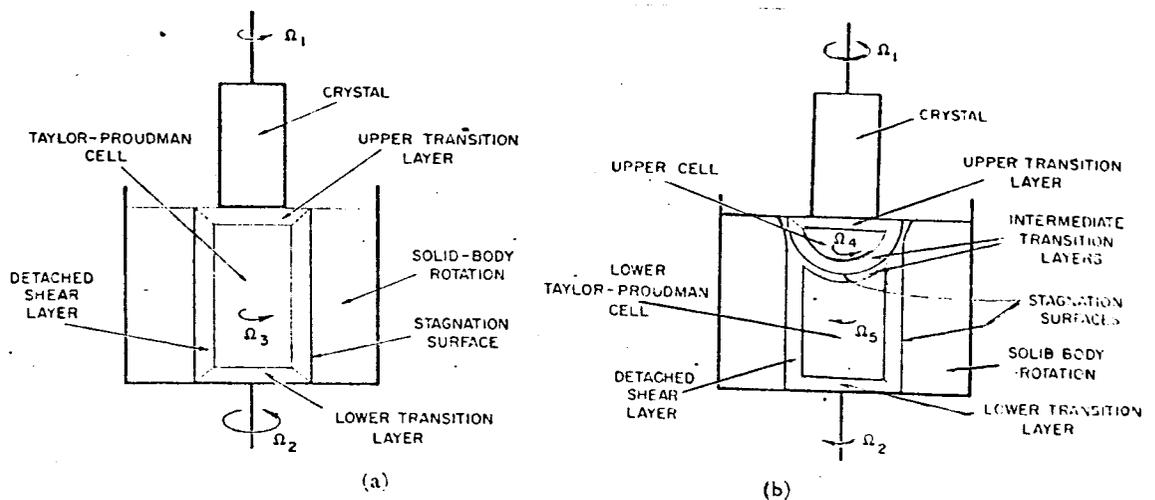


Figura 2.4 - Formas Esperadas das Células de Taylor-Proudman.⁹

Conforme pode ser visto na Figura 2.4, para o caso da isorrotação, o esquema é idêntico ao de Hide-Titman da metade para baixo e assim a estrutura dos fluxos já foram descritas. Já no caso da rotação contrária, a disposição das regiões de fluxo é substancialmente diferente, com o aparecimento de uma nova superfície de estagnação na parte superior do cadinho. A rotação do cristal controla a convecção acima da no

va superfície de estagnação, enquanto as considerações anteriores se aplicam para a célula de Taylor-Proudman inferior. Neste caso, o líquido possui três regiões distintas de escoamento, essencialmente sem se misturar. A região inferior roda como no caso da isorotação ($1/2 (\Omega_0 + \Omega_1)$), enquanto a região superior roda a ($2/3 \Omega_1 + 1/3 \Omega_0$).

Para o caso da isorotação, a presença de taxas diferentes de rotação entre base e topo do líquido ocasiona o aparecimento de uma variação do gradiente radial de pressão com a altura, i.e., um gradiente de pressão axial que fará com que existam fluxos verticais. Em líquidos em rotação, haverá um fluxo de uma camada com menor aceleração centrífuga (menor gradiente radial de pressão) para uma com maior aceleração centrífuga. Na geometria Czochralski isto ocorre na região de mais alta diferença de pressão vertical que possui um raio de dimensões próximas ao raio do cristal.

Carruthers¹² observou experimentalmente a existência de células de Taylor-Proudman, somente quando a velocidade de rotação do cadinho é suficientemente diferente da velocidade de rotação do cristal. O corpo externo de líquido rodando com o cristal mostrou movimentos somente devido às correntes de convecção térmica, enquanto o líquido dentro da célula apresenta fluxos associados com as variações de pressão devido a aceleração centrífuga causada pelas rotações diferenciadas de cadinho e cristal.

A Figura 2.5 mostra uma comparação entre os fluxos existentes devido à convecção forçada na geometria Czochralski (a análise mostrada na Figura 2.5 é baseada na geometria utilizada por Carruthers e Nassau⁹, cujo esquema é mostrado na Figura 2.4 e que é descrita como um cadinho de 7.0 cm

de diâmetro, cheio com água-glicerina (1 : 1) a 4.0 cm de altura e um "cristal" de alumínio de 2.5 cm de diâmetro), mostrando o domínio relativo de velocidades de cristal e cadinho. Para uma taxa de rotação do cristal de zero e uma pequena taxa de rotação do cadinho, ilustrado na Figura 2.5 (i), um fluxo central para baixo é observado, com um fluxo de retorno lateral consistindo de uma pequena espiral subindo. O escoamento é como esperado, da região de menor aceleração radial para a de maior, dentro da célula. Neste caso, o contorno da célula de Taylor-Proudman não é bem-definido. Quando a taxa de rotação do cadinho é aumentada, como na Figura 2.5 (ii), a célula de Taylor-Proudman torna-se mais claramente definida com o fluxo de retorno lateral consistindo de espirais mais juntas.

Quando a taxa de rotação do cristal é aumentada para a mesma velocidade angular do cadinho, tanto em magnitude como em sinal como na Figura 2.5 (iii), a espiral se desembaraça e resulta em zero de movimento no líquido.

Se a rotação do cadinho é agora diminuída tal que a rotação do cristal predomina, obtem-se a Figura 2.5 (iv). Quando a rotação do cristal é muito maior que a rotação do cadinho, o líquido sofre mudanças rápidas na aceleração centrífuga, próximo mas fora da posição do raio do cristal. Nesta região a rotação do corpo sólido não ocorrerá portanto, e um forte fluxo vertical existe. Observações experimentais verificaram estas afirmações mostrando que o contorno da célula de Taylor-Proudman é mal-definido e nas vizinhanças do raio do cristal como esquematizado na Figura 2.5 (iv). O fluxo interno é para cima na célula com o fluxo de retorno sendo uma espiral para baixo, bastante sinuosa em torno da superfície da célula de Taylor-Proudman.

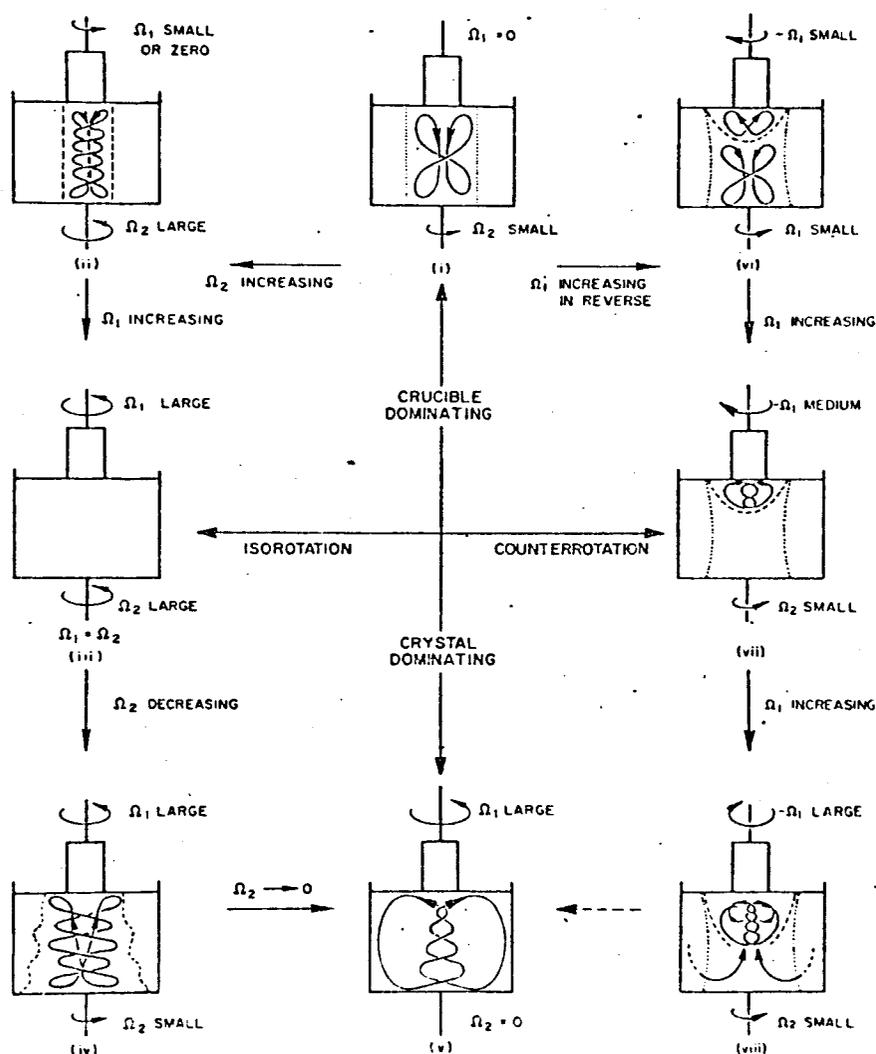


Figura 2.5 - Variação da Estrutura dos Fluxos com a Velocidade Relativa de Cadinho/Cristal.

Na Figura 2.5 (v) a rotação do cadinho é zero e somente o fluxo devido a rotação do cristal é observado. Neste caso a espiral externa terá se desmanchado e a célula de Taylor Proudman se expande para encher todo o cadinho.

Algumas conclusões que podem ser tiradas para a isorotação são que, para uma boa primeira aproximação a velocidade vertical no centro da célula é proporcional em magnitu

de e sentido a $(\Omega_1 - \Omega_0)$, o fluxo positivo sendo tomado para cima. O fluxo de retorno no contorno da célula tem velocidade menor, como esperado devido à maior área envolvida. No escoamento da Figura 2.5 (v), porém, ambas as velocidades são iguais, desde que o fluxo de retorno não é confinado aos limites da célula. Exceto para este caso todos fluxos de retorno rodam a taxa de rotação do cadinho Ω_0 .

Passando-se a uma análise de rotação contrária, começaremos novamente da Figura 2.5 (i). A taxa de rotação do cristal é aumentada para um pequeno valor na direção oposta à da rotação do cadinho, dando a Figura 2-5 (vi). A região de fluxo dominada pela rotação do cadinho é confinada a uma região na parte baixa do cadinho, pelo aparecimento de uma nova superfície de estagnação e uma célula superior associada com a rotação do cristal. Esta célula é pequena e aumenta em todas suas dimensões com a rotação do cristal e diminui com a rotação do cadinho. O cálculo bem como a interpretação da variação da aceleração radial é complicado pela presença de uma nova superfície de estagnação. Esta nova superfície de estagnação é esperada interceptar a parte superior da superfície do líquido a uma posição bem em torno do raio do cristal como indicado na Figura 2.4 (b) e observado experimentalmente. Isto também causa um aumento no diâmetro da célula de Taylor-Proudman próximo da base do cadinho para prover fluxos de compensação (desde que todas as velocidades são zero nesta nova superfície de estagnação). Além disso, deve ser esperado que a célula inferior estenda-se em torno da célula superior para dar uma zona intermediária entre célula superior e região externa.

Aumentando-se a taxa de rotação do cristal chega-se a um valor para o qual a taxa de rotação da célula infe

rior é zero (como mostra a Figura 2.5 (vii)). A partir daí, aumentando-se a rotação do cristal, tanto a célula superior como a célula inferior rodam no mesmo sentido, podendo-se esperar que a célula de estagnação torne-se instável e possa ser penetrada (Figura 2.5 (viii)). Em outras palavras, a rotação do cristal dominaria a rotação contrária do cadinho, de forma que o único efeito seria a formação de uma célula simples. Fazendo-se a rotação do cadinho zero, resultaria agora um aumento das dimensões desta célula até encher o cadinho, tendo-se novamente a situação da Figura 2.5 (v).

CAPÍTULO III

A PRESENÇA DE IMPUREZAS NO SILÍCIO

3.1 - A Interface de Crescimento e a Incorporação de Impurezas

Átomos de impurezas têm solubilidades diferentes em silício líquido ou sólido. A maioria dos elementos abaixam a temperatura de fusão de silício, constituindo um diagrama de fase como mostrado na Figura 3.1.a. A baixas concentrações do elemento A, as linhas podem ser consideradas, em boa aproximação, como retas, e assim as equações que descrevem as curvas sólido e líquido são:

$$T - T_S = m_S C_S \quad (3.1)$$

$$T - T_S = m_L C_L \quad (3.2)$$

onde: T_S - temperatura de fusão de silício puro

m_S, m_L - coeficientes angulares

C_S, C_L - concentrações das fases sólida e líquida respectivamente.

Assim:

$$\frac{m_L}{m_S} = \frac{C_S}{C_L} = \text{constante} \quad (3.3)$$

definimos esta constante como k_0 → Coeficiente de Distribuição ou Segregação de Equilíbrio.

Para elementos que aumentam o ponto de fusão de silício, é válida a Figura 3.2.b e a mesma relação (3.3) é obtida. A diferença entre os dois diagramas é que para o primeiro caso $k_0 < 1$ e para o segundo, $k_0 > 1$.

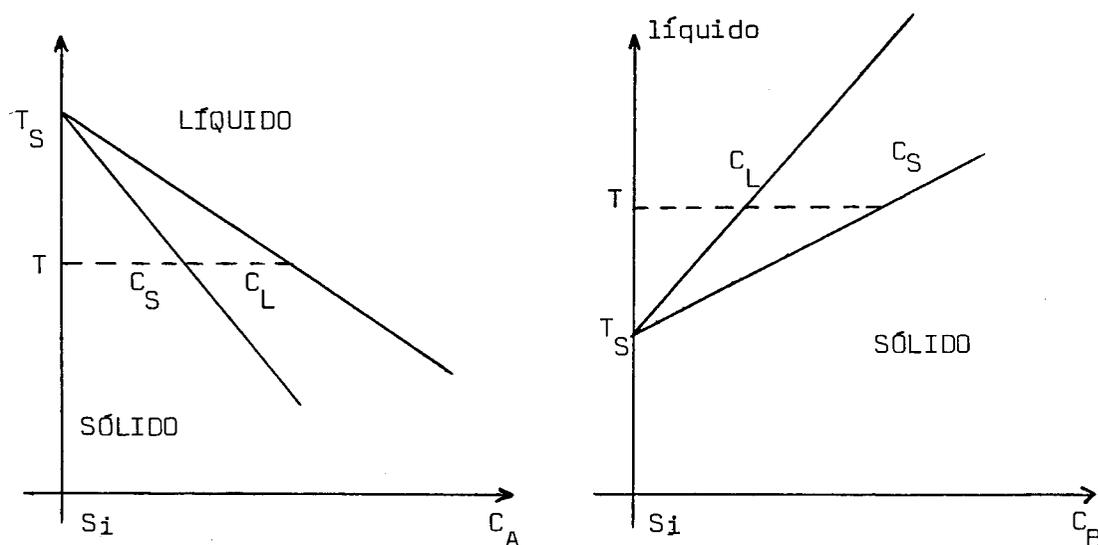


Figura 3.1 - Modelos de Diagramas de Fase para Baixas Concentrações de Impurezas em Silício.

$k_0 < 1$ representa quase todos os casos conhecidos para Silício (por exemplo²: Boro - $k_0 = 8 \times 10^{-1}$, Fósforo - $k_0 = 3.5 \times 10^{-1}$, Carbono - $k_0 = 7 \times 10^{-2}$, Antimônio - $k_0 = 2.3 \times 10^{-2}$). O único caso conhecido de $k_0 > 1$ é para o oxigênio, $k_0 = 1.4$.

Para o crescimento Czochralski, a lei de "Solidificação Normal" pode ser considerada como válida, uma vez que ela se aplica quando o líquido se solidifica lentamente, passo por passo, ou em outras palavras, o processo está em equilíbrio em todos os estágios. Para o crescimento Czochralski com puxamento de cristal suficientemente lento para que o equilíbrio

seja aproximado, a concentração axial de impurezas é dada por ¹³.

$$\frac{C}{C_0} = k_0 (1 - g)^{k_0 - 1} \quad (3.4)$$

onde: C - concentração de impurezas no cristal na interface de crescimento presentes após a fração g do volume inicial ter se cristalizado.

C₀ - concentração inicial do líquido.

Desta forma, a incorporação de impurezas na interface de solidificação é dependente do coeficiente de distribuição k₀. Aumentando-se a velocidade de crescimento, o coeficiente de distribuição deve aumentar também, tendendo assintoticamente para o valor 1. Este fenômeno está ligado à difusão da impureza no líquido, que retarda a velocidade do processo de mistura do líquido fazendo com que a mudança de concentração na interface de crescimento, causada pela segregação, não possa ser dissipada de modo suficiente rápido. Camadas de fluido de concentração de impurezas mais altas (ou mais baixas se k₀ > 1) são formadas imediatamente abaixo da interface de solidificação. Constitui-se assim a chamada Camada de Difusão que apresenta um perfil de concentrações decrescente (ou crescente se k₀ > 1) da interface para o líquido residual. O efeito deste fenômeno é incorporado no cristal. Assim torna-se necessário a definição de um novo parâmetro para compensar os efeitos de velocidade de crescimento e difusão no líquido. De acordo com Burton et alii ¹⁴

$$k_{ef} = \frac{k_0}{\left[k_0 + (1 - k_0) \exp \left(-\frac{vd}{D} \right) \right]} \quad (3.5)$$

onde: k_{ef} - coeficiente efetivo de segregação.

k_o - coeficiente de segregação no equilíbrio.

v - velocidade de solidificação.

d - espessura da camada de difusão.

D - constante de difusão da impureza no líquido (difusividade).

A espessura da camada de difusão depende não somente da difusividade da impureza no líquido, mas também do movimento relativo entre cadinho e cristal, isto é, da estrutura dos fluxos. Segundo Burton et alii¹⁴:

$$d = 1,6 \cdot D^{1/3} \cdot v^{1/6} \cdot w^{-1/2} \quad (3.6)$$

onde: w - velocidade angular do cristal.

Silício tem uma estrutura cristalina como o diamante, ou seja cúbica de face centrada. Um cristal de silício $\{111\}$ tende a crescer pela adição de camadas $\{111\}$ que têm uma interface perfeitamente plana. Isto significa que é difícil formar núcleos de cristalização (um degrau na interface) nas superfícies $\{111\}$ que têm um denso empacotamento. Devido a isto, cristais de silício crescidos na direção $\langle 111 \rangle$ têm um crescimento "menos estacionário" que em outras direções, por exemplo $\langle 211 \rangle$. A superfície $\{111\}$, que é aproximadamente perfeita, necessita um certo grau de sub-resfriamento para a formação de um núcleo. Como as isotermas de solidificação são normalmente côncavas, o crescimento das camadas começa nos lados e tende a caminhar para o centro, parando o crescimento nas áreas de temperatura mais alta. Portanto, quanto mais plana a isoterma de solidificação, mais regular é o crescimento da camada, no caso

extremo atravessando todo o cristal (Ainda assim o crescimento da camada pode ser interrompido pelo aumento local de temperatura devido ao calor latente de solidificação). Estas variações abruptas (não estacionárias) na velocidade de crescimento influem no coeficiente de segregação efetivo (k_{ef}) e consequentemente na concentração de impurezas incorporadas no cristal. Desta forma se desenvolvem as chamadas "estrias" que são camadas com diferentes concentrações de impurezas. Um outro aspecto é que devido ao crescimento lateral, as impurezas são acumuladas preferencialmente no centro. As estrias podem também ocorrer pelas instabilidades na distribuição de velocidades, que mudam abruptamente a concentração na camada de difusão.

Conforme já mencionado, a espessura da camada de difusão é fortemente influenciada pela estrutura dos fluxos na fase líquida. Além disso, esta estrutura é responsável pelo suprimento de impurezas para a interface de crescimento também em escala macroscópica. A camada de difusão varia com a posição e com o tempo, dependendo das correntes abaixo da camada de solidificação e das perturbações (instabilidades).

A Figura 3.2 mostra como as características básicas do escoamento causado pela rotação do cadinho e/ou cristal podem influenciar a interface de crescimento. Os esquemas mostrados são baseados na estrutura dos fluxos descritos na seção 2.2. A Figura 3.2.a. é um exemplo de convecção natural e é mostrada apenas para efeito de comparação. O silício fundido é mais quente (menos denso) na parede do cadinho e mais frio (mais denso) no eixo de rotação. Uma importante característica é que o líquido escoar da parede para a superfície livre onde pode evaporar SiO facilmente, antes que ele atinja o cristal. A troca direta de massa entre o líquido da base do cadinho e o cristal na Figura 3.2.b, leva a uma baixa taxa de eva

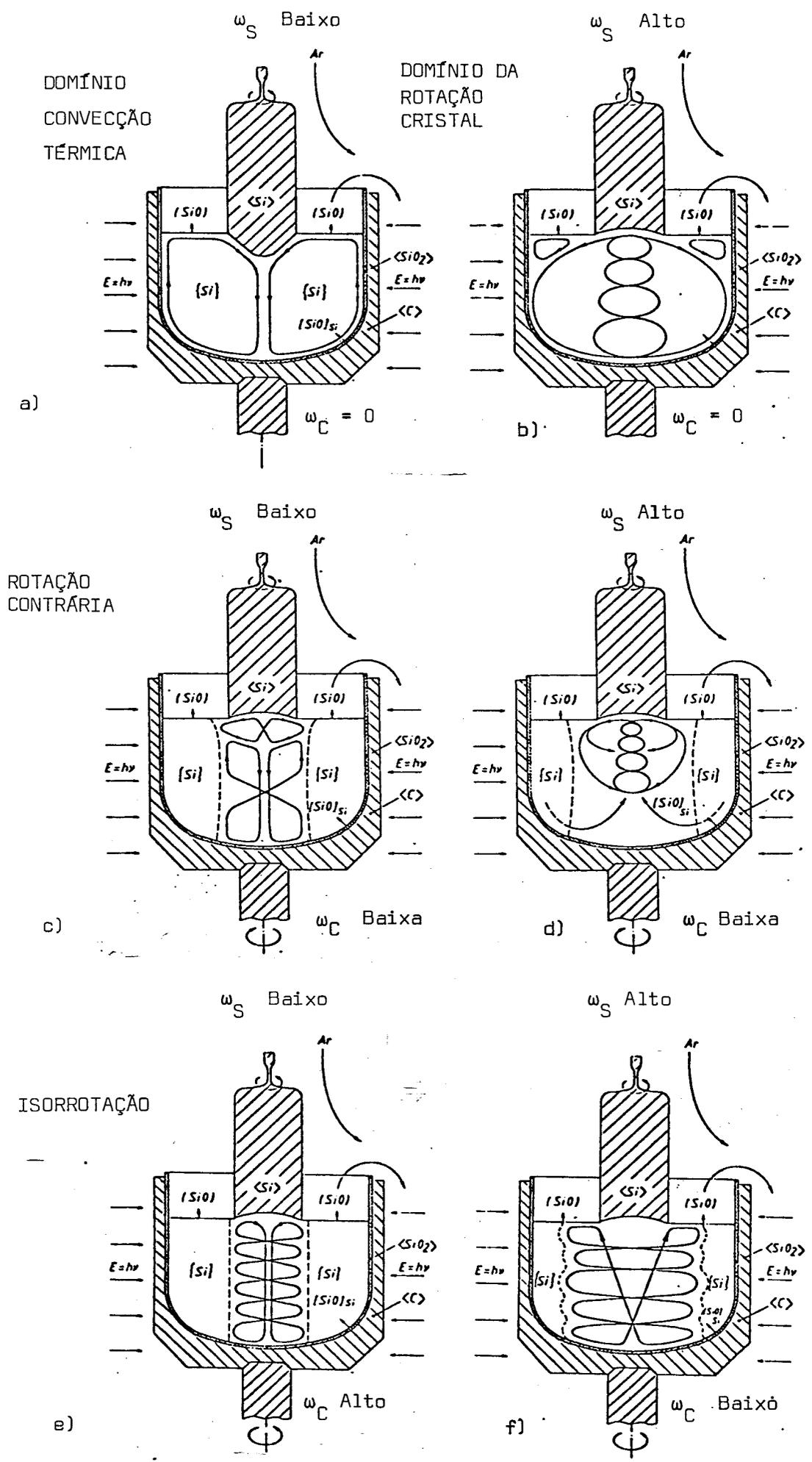


Figura 3.2 - Características do Escoamento em um Cadinho Czochralski².

INSTITUTO DE FÍSICA DE CARACAS
UNIVERSIDADE FEDERAL DO PARANÁ

poração de SiO, fazendo com que a concentração de oxigênio no cristal seja mais alta. O escoamento radial do centro para os lados reduz o enriquecimento de dopantes no centro. Conforme já dito, o enriquecimento de dopantes, quando a solidificação começa do lado para o centro, é maior no centro. Desta forma, este tipo de corrente tem um efeito contrário e leva a uma distribuição radial mais homogênea.

Em produção industrial de silício, normalmente cadinho e cristal têm rotações em sentidos opostos e dois casos deste tipo são mostrados nas Figuras 3.2.c e 3.2.d. A principal característica da Figura 3.2.c é a célula de estagnação abaixo do cristal em rotação. Com boa eficiência, ela evita a troca de impurezas entre o líquido imediatamente abaixo do cristal e o líquido restante. No caso de rotação mais alta do cristal, um conteúdo maior de oxigênio e uma dopagem radial mais constante devem ser esperados.

As Figuras 3.2.e e 3.2.f são dois casos de isorotação. Neste tipo de escoamento, existem estruturas de fluxos que favorecem extremamente o transporte de oxigênio do cadinho para o cristal, por um lado, e estruturas que evitam em um alto grau, por outro. Tanto altas concentrações como baixas concentrações de oxigênio podem ser obtidas com isorotação dependendo das velocidades relativas de cadinho e cristal. Com relação a distribuição radial de dopantes, por exemplo, no caso da Figura 3.2.e, o escoamento faz com que haja enriquecimento no centro do cristal. A isorotação não tem sido muito usada também pelo fato de ser muito instável e causar variações na concentração axial de oxigênio. É importante ressaltar que estes fluxos mostrados na Figura 3.2 são apenas modelos baseados no que foi exposto na seção 2.2. Esta extrapolação para silício fundido não tem sido provada experimentalmente, devido às dificuldades de medida em silício líquido.

Resumindo, podemos dizer que a variação da concentração de impurezas no silício fundido e no cristal, pode ser causada por evaporação, segregação, dissolução e homogeneização insuficiente do líquido.

A Tabela III.1 traz uma análise dos tipos de impurezas normalmente presentes numa amostra de poli-Si.

A Figura 3.3 mostra a distribuição axial de oxigênio de 11 cristais crescidos pela técnica Czochralski (CZ). Todos os cristais têm o mesmo diâmetro e comprimento. Os cristais 1 e 2, dados pelas duas linhas pontilhadas foram crescidos por uma técnica comum de puxamento.

Para esta técnica, ocorre um decréscimo axial na concentração de oxigênio, começando com cerca de $11 \times 10^{17} / \text{cm}^3$ na semente e terminando com cerca de $5.5 \times 10^{17} / \text{cm}^3$ na base do cristal. Os outros cristais 3 a 11, foram crescidos com uma técnica de puxamento melhorada e diferem somente pelas rotações de cadinho e cristal, exceto o cristal 3 que foi puxado com uma pressão e alimentação diferentes de Argônio. Como pode ser visto das curvas 4 a 11, é possível mudar o conteúdo de oxigênio em cristais CZ por um fator 10 somente pela variação da rotação de cadinho e/ou cristal.

Os efeitos dos fluxos na incorporação de dopantes é mostrado na Figura 3.4. Dois cristais foram crescidos com rotação contrária do cadinho e do cristal. Enquanto a rotação do cadinho foi mantida constante a 5 RPM, um cristal foi puxado com uma taxa de rotação de 5 RPM e o outro com 25 RPM. No caso do cristal girado com 25 RPM, o enriquecimento de Fósforo no centro é menor, devido à rotação mais alta ter causado um forte fluxo do centro para os lados, reduzindo a segregação radial. Isto é claro na Figura 3.4 pela menor variação da resistividade radial no cristal com 25 RPM.

Tabela III.1 - Análise de poli-Si CVD e CZ-Si monocristalino¹.
(dados em ppba)

Impurity	CVD Si	CZ Si
Ag	0.01	< 0.0008
As	0.01	0.015
Au	0.00001	< 0.00001
Cd	< 0.006	0.008
Co	0.002	< 0.001
Cr	< 0.02	< 0.02
Cu	0.1	≤ 0.1
Fe	< 0.5	< 0.5
K	< 0.2	< 0.2
Mn	< 0.2	< 0.2
Na	< 0.3	< 0.3
Ni	0.4	< 0.2
Pt	< 0.01	< 0.01
Sb	0.0008	0.01
Ti	< 0.5	-
Zn	0.1	< 0.05
Zr	< 0.5	< 0.5

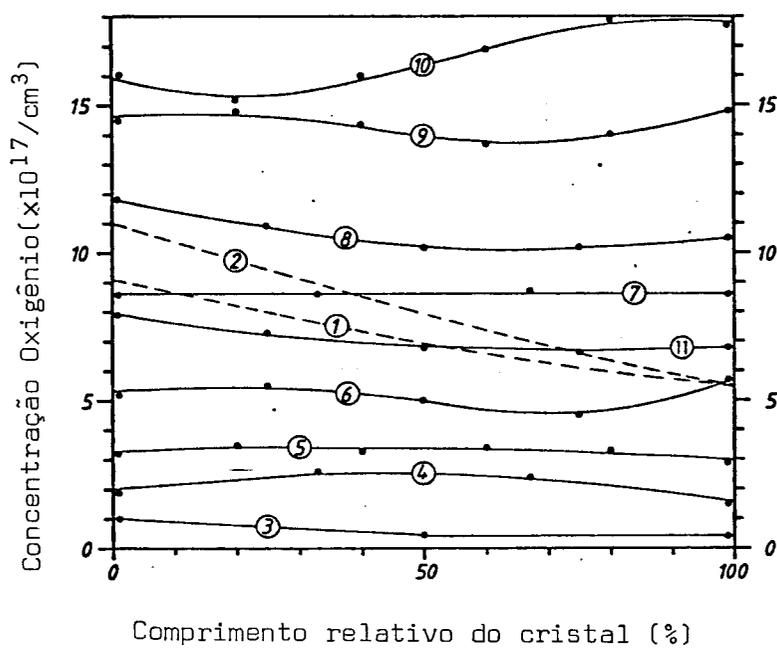


Figura 3.3 - Distribuição Axial de Oxigênio em monocristais Si-CZ².

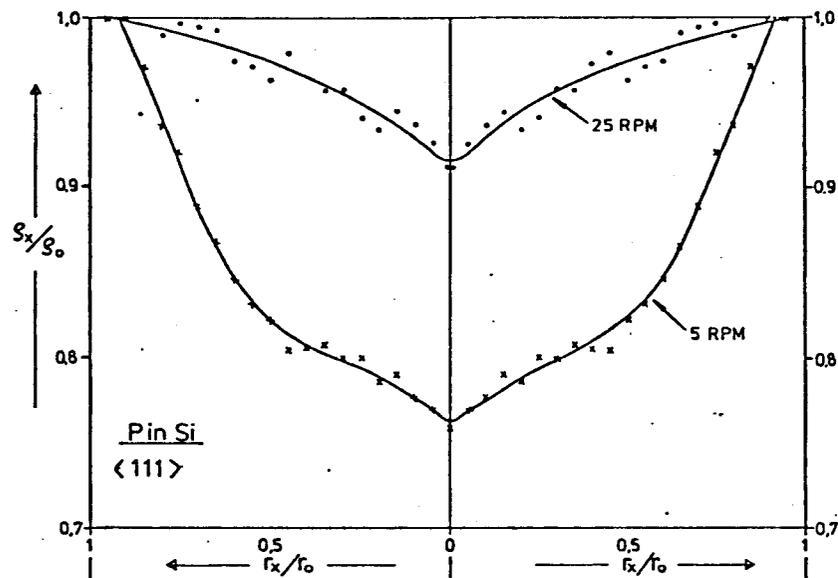


Figura 3.4 - Influência da Taxa de Rotação do Cristal na Resistividade Radial em Monocristais Si-CZ².

3.2 - Efeitos da Presença de Oxigênio e Outras Impurezas no Cristal

Na maioria dos cristais de silício crescidos pelo método Czochralski, oxigênio é a impureza mais abundante, com concentrações da ordem de 10^{18} /cm³ ou 20 ppma. Somente em cristais com alta dopagem, a concentração de dopantes pode exceder o conteúdo em oxigênio. Carbono, que seria o segundo na escala de abundância, já ocorre em concentrações bem menores, tipicamente 10-200 vezes abaixo do nível de oxigênio. Normalmente, o oxigênio é dissolvido atômica e intersticialmente, ocupando sítios intersticiais da rede, possuindo uma difusividade relativamente alta e uma solubilidade que diminui fortemente com a temperatura.

A presença de oxigênio pode dar origem aos chamados doadores térmicos ou doadores de oxigênio, o que ocorre, com maior intensidade, à temperaturas em torno de 450°C . Este efeito foi primeiro publicado por Fuller et alii^{15,16}. Kaiser et alii¹⁷ propuseram um modelo para explicar este efeito, segundo o qual, à já algumas centenas de graus, ocorre a formação de Sílica (SiO_2), isto é, a polimerização do oxigênio. Certos intermediários nesta polimerização são doadores eletricamente ativos, especialmente complexos de $|\text{SiO}_4|$. O resfriamento do cristal de altas temperaturas para baixas, deve gerar uma certa quantidade destes doadores, sendo que sua concentração é função do intervalo de tempo entre 500 e 400°C e também da concentração de oxigênio no material. (Doadores adicionais de oxigênio podem ser formados a cerca de 550 , 650 e entre 750 e 800°C ¹⁸, mas sua formação está ligada, além do pré-aquecimento e concentração de oxigênio, à presença de carbono.) A presença de doadores é uma propriedade negativa com respeito à construção de dispositivos eletrônicos. Para se destruir estes doadores deve-se proceder a um recozimento acima de 550°C , com um rápido resfriamento subsequente. No caso de cristais maiores, é difícil conseguir um resfriamento rápido no seio do cristal, mais pelo processo de transmissão de calor na interface cristal-refrigerante (comumente-soprimento de ar), do que pela condutividade térmica do Silício. Assim, para o caso de cristais grandes, deve-se proceder ao resfriamento dos substratos ("wafers") que são rapidamente resfriadas e tornam a formação de doadores térmicos muito baixa.

Além desta característica negativa de formação de doadores, oxigênio em silício tem outras propriedades importantes, algumas negativas, mas outras positivas. Quando se procede ao tratamento térmico para eliminação dos doadores, pode

ocorrer a formação de precipitados de oxigênio. Estes precipitados podem agir como centros para uma falha de empilhamento ("stacking faults"). A formação perto das áreas eletronicamente ativas do substrato polido pode piorar a qualidade do dispositivo devido às correntes de fuga, diminuição do tempo de vida dos portadores, já que nos defeitos, os elétrons gerados por oxidação ocupam estados de energia acima do nível de Fermi e assim podem agir como centros de recombinação para portadores positivos (buracos)¹⁹.

A geração de precipitados de oxigênio próximos da superfície pode ser prevenida por técnicas de processamento adequadas, levando à formação de precipitados de oxigênio somente no interior do material. Pequenos anéis de deslocamentos e falhas de empilhamento podem ser formados em torno desses precipitados, mas a uma profundidade suficiente de modo que a superfície polida não seja afetada. Neste caso os defeitos da rede no interior do "wafer" têm aspectos positivos. Em primeiro lugar, elas agem como centros absorvedores de impurezas de difusão rápida como Cu, Fe, Na, Ag (que causariam efeitos prejudiciais ao funcionamento do dispositivo eletrônico). E em segundo lugar elas causam um endurecimento da rede, restringindo o movimento de deslocamentos. A possibilidade da existência dos centros de absorção ("getters") é uma vantagem decisiva do silício obtido pelo método Czochralski para a manufatura de circuitos LSI e especialmente VLSI. Os circuitos altamente integrados, num futuro próximo, provavelmente não existirão sem a presença destes centros de absorção de impurezas. Apesar disso, a concentração de oxigênio bem como a temperatura de tratamento devem ser controladas, pois se o oxigênio é precipitado sobre tensão à temperaturas altas demais, precipitados podem ter dimensões muito grandes envolvidos em grandes anéis de desloca

ções. Na presença de tensão, esses anéis crescem e movem-se através da rede, cobrindo grandes distâncias, e finalmente penetrando a superfície do substrato.

Existem várias fontes para as impurezas que são encontradas em um cristal de silício CZ. A primeira fonte seria o poli-Si utilizado como material de partida, porém as técnicas de processamento de poli-Si já atingiram um alto grau de perfeição. Um exemplo de impurezas presentes em poli-Si já foi apresentado na Tabela III.1. Uma segunda fonte é a contaminação introduzida quando o poli-Si é triturado e transferido para o cadinho, quando ele pode estar em contato com materiais contaminadores ou pó.

Tabela III.2 - Análise de Sílica Sintética e Natural - dados em ppmw.¹

Impurity	Synthetic silica		Natural silica	
	Min.	Max.	Min.	Max.
OH	-	1200	<1	450
Al	0.1	< 0.25	<10	74
Ca	< 0.1	< 0.7	0.4	16
Na	0.04	< 0.1	1	9
K	< 0.001	0.1	0.8	7
Li	< 0.004	< 0.05	0.5	7
Fe	< 0.2	0.2	0.3	7
Ti	< 0.03	< 0.1	0.5	3
Mg	< 0.1	0.1	0.1	4
B	0.007	0.1	0.06	3
Zr	-	< 0.2	< 0.1	3
Cr	< 0.02	0.3	< 0.09	3
Cu	< 0.001	< 1	0.04	1
Mn	< 0.0005	< 0.02	0.01	2
Ni	-	< 0.4	0.4	0.5
Sb	< 0.001	0.1	< 0.06	0.3
P	< 0.001	0.05	< 0.01	0.4
As	< 0.001	0.03	< 0.01	0.1

A terceira fonte é o próprio material do cadinho. Conforme já citado o cadinho é dissolvido, durante o crescimento de silício Czochralski, de acordo com o tempo, temperatura e superfície de sílica exposta. Assim as impurezas presentes no cadinho vão diretamente para o silício fundido. Um exemplo de impurezas normalmente presentes em cadinhos está na Tabela

III.2. A quarta fonte seria a atmosfera que envolve o cadinho. O aquecimento das partes do forno pode acarretar evaporação de impurezas, que devem ser adequadamente purgadas por um gás inerte para evitar a difusão para o silício fundido. A pureza do gás inerte é também importante.

Muitas das impurezas, porém, são eletricamente neutras e não afetam diretamente os cristais com respeito a sua eficiência para dispositivos eletrônicos. Ainda assim, elas podem influenciar a precipitação de silício intersticial, vacâncias, oxigênio e outros elementos, através da formação de pequenos precipitados que agem como centros de nucleação. De grande importância são elementos de difusão rápida como Cu ou Fe. Sobre certas circunstâncias eles são eletricamente ativos e são capazes de se difundir para qualquer lugar durante o processamento do wafer. Eles tendem a se acumular nas áreas eletricamente ativas, particularmente em torno dos defeitos do cristal. Para evitar ou minimizar os efeitos elétricos negativos, a concentração destes elementos no cristal deve ser mantida muito baixa.

CAPÍTULO IV

O MÉTODO NUMÉRICO PARA RESOLUÇÃO DO PROBLEMA

4.1 - O Método de Elementos Finitos

A técnica de análise estrutural que subseqüentemente veio a ser conhecida como método de Elementos Finitos foi originalmente desenvolvida como uma extensão do procedimento padrão para análise estrutural, criada para aplicação no projeto de estruturas de aviões, e a princípio foi reconhecida somente dentro deste contexto limitado. Porém, seu campo de aplicações estendeu-se rapidamente e no começo dos anos 60, tornou-se claro que o método de Elementos Finitos é essencialmente um procedimento especial de discretização que pode ser empregado numa larga faixa de problemas de campo, incluindo-se portanto a Mecânica de Fluidos.

No método de Elementos Finitos ocorre a subdivisão da região em subdomínios ou elementos finitos, com alguma representação funcional da solução sendo adotada dentro do elemento tal que os parâmetros da representação tornam-se as incógnitas do problema. Podemos definir três categorias de métodos de Elementos Finitos de acordo com a série (finita) de parâmetros nas equações que governam o problema:

- a) Métodos Nodais - os parâmetros são os valores das u_i (variáveis dependentes) e suas derivadas nos nodos (Um nodo é um ponto fixo escolhido dentro do

elemento finito, por exemplo, conforme será visto podem ser usados quadrados como elementos dentro de um problema bidimensional. Um vértice do quadrado é um nodo).

- b) Métodos de Coeficientes - os parâmetros são valores dos coeficientes da representação funcional sobre o elemento.
- c) Métodos de Celas - os parâmetros são representativos (por exemplo, média) dos valores das u_i e suas derivadas nas faces ou dentro do subdomínio do elemento.

Dentro desta divisão será visto apenas a primeira classe já que é com este tipo de método que se trabalhou aqui. Mais ainda, nos restringiremos apenas a dois tipos de métodos nodais: Métodos Variacionais, pois contém as idéias principais da fundamentação de Elementos Finitos e o Método Residual de Galerkin através do qual foi resolvido nosso problema. (Para outros métodos, vide referências |21|, |22|, |23|, |24|.)

4.1.1 - Métodos Variacionais de Elementos Finitos (Método Clássico de Ritz).

O problema original pode ser expresso como uma série de equações da forma:

$$f_D(u_1, u_2, \dots, u_m; x_1, x_2, \dots, x_n) = 0 \quad (4.1)$$

onde: u_i - variáveis dependentes

x_i - variáveis independentes

nas condições de contorno representadas por equações da forma:

$$f_S (u_1, u_2, \dots, u_m ; x_1, x_2, \dots, x_n) = 0 \quad (4.2)$$

desde que as equações de campo representadas pela equação (4.1) são frequentemente obtidas pela consideração de equilíbrio do fenômeno (ex.: conservação de massa, momento ou energia) elas são comumente referidas como equações de "equilíbrio" ou "ba_lanço" do sistema.

Desde que estas equações obedecem a certos requisitos (Apêndice II), um princípio variacional pode ser determinado para o problema, levando a uma formulação variacional equivalente do problema em termos de um princípio extremo: uma série de funcionais, ou uma série de equações variacionais. Na forma funcional, um enunciado alternativo do problema pode ser:

"Existem um ou mais funcionais para o problema. Cada funcional é uma soma de integrais sobre o domínio (e frequentemente sobre o contorno também), com as integrais sendo formadas das "funções admissíveis" v_1, v_2, \dots, v_m , e suas derivadas com respeito a x_1, x_2, \dots, x_n . Cada funcional sendo representado como:

$$X = F_{D,S} (v_1, v_2, \dots, v_m ; x_1, x_2, \dots, x_n) \quad (4.3)$$

As funções admissíveis v_1, v_2, \dots, v_m , são possíveis soluções para u_1, u_2, \dots, u_m , que satisfazem as respectivas condições de contorno essenciais. Estas soluções para $v_1,$

v_2, \dots, v_m que dão um mínimo (ou pelo menos um estacionário) para cada dos funcionais, pode ser mostrado serem, respectivamente, as soluções u_1, u_2, \dots, u_m que satisfazem as equações originais (6.1) e as condições de contorno (6.2) (Apêndice II)."

Desta forma, o problema passa a ser a melhor forma de minimizar (ou encontrar um ponto estacionário) para a equação (6.3).

Visando dar maior clareza ao método, vamos trabalhar com um problema unidimensional. A idéia de Rayleigh-Ritz²⁵ é escolher uma série de funções-tentativa ϕ_1, \dots, ϕ_N (o índice aqui significa uma função tentativa e não uma variável dependente, já que temos apenas uma) e entre todas suas combinações lineares $u = \sum_j q_j \phi_j$ aquela que minimiza o funcional. Os parâmetros q_j são encontrados por um sistema de N equações algébricas, transformando o problema inicial da equação diferencial (de campo) em um sistema simples de equações facilmente solúvel por um computador. O problema passa a ser como escolher funções-tentativa ϕ_j que sejam convenientes, pois sempre é possível se encontrar um espaço de funções quando $N \rightarrow \infty$, porém nosso problema é encontrar um número finito que aproxime a solução e que o computador consiga trabalhar. Na técnica de elementos finitos, dentro de cada subdomínio (elemento finito), a função solução é aproximada por funções simples: polinômios. A precisão da aproximação pode ser aumentada, se necessário, não pelo método clássico de Ritz de se incluir mais e mais funções complexas. Ao contrário, os mesmos polinômios são mantidos, e a subdivisão é refinada.

Resumindo as idéias: o problema inicial na forma de uma equação diferencial nas condições de contorno essenciais é transformado num funcional, cuja minimização por funções-ten

tativas (no caso elementos finitos) leva a um sistema algébrico de equações cuja resolução é (aproximadamente) a solução da equação diferencial inicial.

Vamos supor o problema (unidimensional) de se encontrar a solução da equação:

$$-\frac{d}{dx} \left[p(x) \frac{du}{dx} \right] + q(x) = f(x) \quad (4.4)$$

nas condições de contorno: $u(0) = 0$

$$u'(\pi) = 0$$

pode ser mostrado (Apêndice II), que o funcional equivalente é dado por:

$$I(v) = \int_0^\pi \left[p(v')^2 + qv^2 - 2fv \right] dx \quad (4.5)$$

Vamos dividir o domínio (eixo x) em sub-elementos de tamanho h e aproximar a solução pela função tentativa:

$$v(x) = \sum_1^N q_j \phi_j^h(x) \quad (4.6)$$

Sendo as funções ϕ_j^h definidas funcionalmente conforme a Figura 4.1, ou seja ϕ_j^h é igual a 1 no nodo j e zero nos demais nodos, e é linear entre dois nodos consecutivos.

Ou seja, q_j é igual ao valor da função v em cada nodo. Deve-se notar que as ϕ_j^h formam uma base local, pois ϕ_{j-1}^h é ortogonal a ϕ_{j+1}^h . Com os coeficientes normalizados para $p(x) = q(x) = 1$, o problema é minimizar:

$$I(v) = \int_0^\pi \left[(v')^2 + v^2 - 2fv \right] dx \quad (4.7)$$

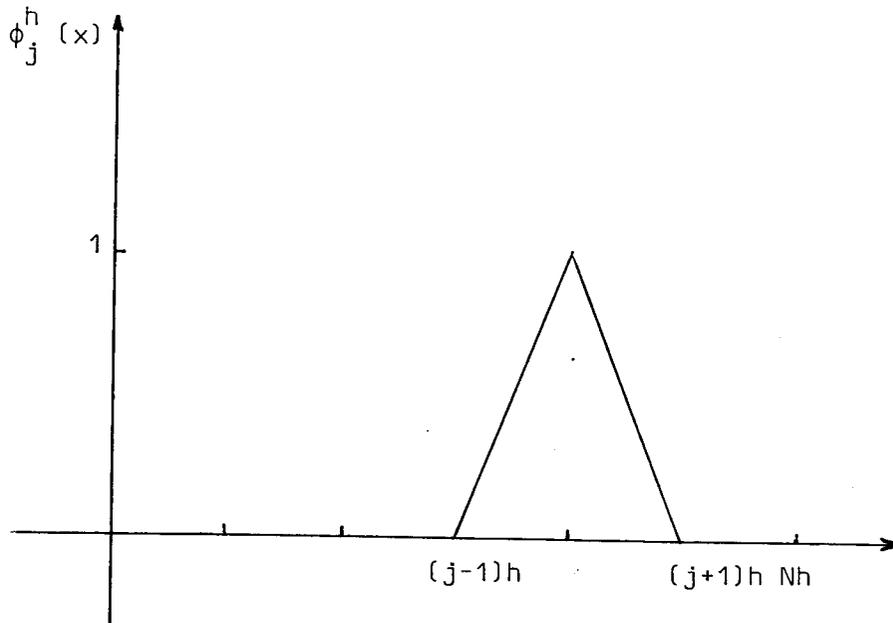


Figura 4.1 - Representação da Base Linear de Funções

Em um intervalo j -ésimo:

$$\int_{(j-1)h}^{jh} (v')^2 dx = \frac{(q_j - q_{j-1})^2}{h} \quad (4.8)$$

de forma análoga:

$$\int_{(j-1)h}^{jh} v^2 dx = \frac{h}{3} (q_j^2 + q_j q_{j-1} + q_{j-1}^2) \quad (4.9)$$

Desta forma, em todo o domínio, a integral torna-se:

$$\int_0^\pi \left[(v')^2 + v^2 \right] dx = \sum_1^N \frac{(q_j - q_{j-1})^2}{h} + \frac{h}{3} (q_j^2 + q_j q_{j-1} + q_{j-1}^2) \quad (4.10)$$

É mais conveniente se escrever o problema numa forma matricial. Assim as equações (4.8) e (4.9) podem ser escritas como:

$$\begin{aligned} \frac{(q_j - q_{j-1})^2}{h} &= (q_{j-1} \ q_j) \frac{1}{h} \begin{pmatrix} 1 & -1 \\ -1 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} q_{j-1} \\ q_j \end{pmatrix} = \\ &= (q_{j-1} \ q_j) \ k_1 \begin{pmatrix} q_{j-1} \\ q_j \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (4.11)$$

$$\begin{aligned} \frac{h}{3} (q_{j-1}^2 + q_{j-1} q_j + q_j^2) &= (q_{j-1} \ q_j) \frac{h}{6} \begin{pmatrix} 2 & 1 \\ 1 & 2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} q_{j-1} \\ q_j \end{pmatrix} = \\ &= (q_{j-1} \ q_j) \ k_0 \begin{pmatrix} q_{j-1} \\ q_j \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (4.12)$$

Fazendo-se o mesmo procedimento para todos os elementos, obtemos uma matriz K_1 , quando se faz a integração total:

$$\begin{aligned} K_1 &\equiv \frac{1}{h} \begin{bmatrix} 1 \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \end{bmatrix} + \frac{1}{h} \begin{bmatrix} 1 & -1 \\ -1 & 1 \\ \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot \end{bmatrix} + \dots + \frac{1}{h} \begin{bmatrix} \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot \\ 1 & -1 \\ -1 & 1 \end{bmatrix} = \\ &= \frac{1}{h} \begin{bmatrix} 2 & -1 & 0 & 0 & \cdot \\ -1 & 2 & -1 & \cdot & 0 \\ 0 & -1 & \cdot & -1 & 0 \\ 0 & \cdot & -1 & 2 & -1 \\ \cdot & 0 & 0 & -1 & 1 \end{bmatrix} \end{aligned} \quad (4.13)$$

Analogamente para equação (4.12):

$$k_0 = \frac{h}{6} \begin{bmatrix} 4 & 1 & 0 & 0 & . \\ 1 & 4 & 1 & . & 0 \\ 0 & 1 & . & 1 & 0 \\ 0 & . & 1 & 4 & 1 \\ . & 0 & 0 & 1 & 2 \end{bmatrix} \quad (4.14)$$

Assim:

$$\int_0^\pi \left[(v')^2 + v^2 \right] dx = (q_1 \dots q_N) K_0 \begin{bmatrix} q_1 \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ q_N \end{bmatrix} + (q_1 \dots q_N) K_1 \begin{bmatrix} q_1 \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ q_N \end{bmatrix} \quad (4.15)$$

ou

$$\int_0^\pi \left[(v')^2 + v^2 \right] dx = q^T K_0 q + q^T K_1 q = q^T K q \quad (4.16)$$

onde q e q^T são respectivamente as matrizes dos coeficientes q_j e sua transposta.

A última integral a ser avaliada é:

$$\int_0^\pi f v dx = \sum_1^N q_j \int_0^\pi f \phi_j^h dx = F_q^T \quad (4.17)$$

onde as coordenadas do vetor F_q^T são dadas por

$$F_j = \int_0^\pi f \phi_j^h dx \quad (4.18)$$

Dependendo da forma de $f(x)$, estas integrais não podem ser avaliadas exatamente e assim podem ser obtidas por algum método de integração numérica²¹.

O nosso funcional pode então ser escrito como:

$$I(v) = q^T K q - 2 F^T q \quad (4.19)$$

O ponto de mínimo ocorre quando $\frac{\partial I}{\partial q_j} = 0$.

Derivando a expressão (4.19) e igualando a zero; obteremos:

$$KQ = F \quad (4.20)$$

onde Q é o vetor solução, ou seja, o vetor dos valores nodais da função solução u . Deve-se notar que este procedimento transformou o problema inicial num sistema algébrico linear com a matriz K sendo tridiagonal.

Apesar de termos usado uma aproximação linear para ϕ_j^h , poderíamos ter usado polinômios de grau mais alto. Um dado $u(x)$ é melhor aproximado por interpolação quadrática ou cúbica, o que corresponde a um aumento na precisão de u dentro de cada elemento. Para interpolação quadrática, uma base pode ser construída pela introdução de pontos intermediários $x = (j \pm \frac{1}{2} h)$ como nodos. Estas funções são de dois tipos, dependendo se q_j é um ponto extremo ou intermediário, como na Figura 4.2.

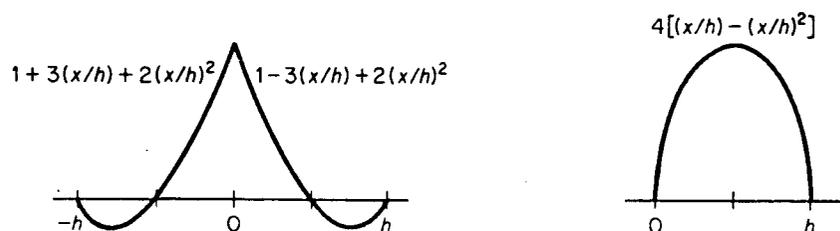


Figura 4.2 - Funções Base Dentro de um Elemento Finito para Aproximação Quadrática.

Estas funções são iguais a 1 em j^h ou $(j \pm \frac{1}{2})^h$ e zero nos demais nodos, da mesma forma que a aproximação linear usada anteriormente. Neste caso a função v pode ser escrita dentro do elemento finito, como:

$$v^h(x) = q_0 \left(1 - \frac{3x}{h} + \frac{2x^2}{h^2} \right) + q_{1/2} \left(\frac{4x}{h} - \frac{4x^2}{h^2} \right) + q_1 \left(-\frac{x}{h} + \frac{2x^2}{h^2} \right) \quad (4.21)$$

e a matriz k_1 seria escrita para o mesmo problema como:

$$k_1 = \frac{1}{3h} \begin{bmatrix} 7 & -8 & 1 \\ -8 & 16 & -8 \\ -1 & -8 & 7 \end{bmatrix} \quad (4.22)$$

Desta forma a matriz K terá mais algumas linhas paralelas à diagonal principal. Raciocínio análogo pode ser feito para aproximações cúbicas, pelo aumento do número de nodos intermediários ou pela aproximação de Hermite^{2,22}, constituindo um nodo duplo em j^h , ou seja ao invés de se determinar os valo

res em $0, h/3, 2h/3, h$, a aproximação cúbica é agora determinada pelos valores nos nodos j_h e por suas derivadas.

Apesar de termos tratado um problema unidimensional, a validade do método atinge duas ou mais dimensões, com uma ou mais variáveis dependentes. A interpolação linear para um problema bidimensional por exemplo, seria como no caso da Figura 4.3. Como nosso problema é bidimensional com quatro variáveis dependentes, as idéias expostas serão vistas de uma maneira um pouco mais complexa na secção 4.2.

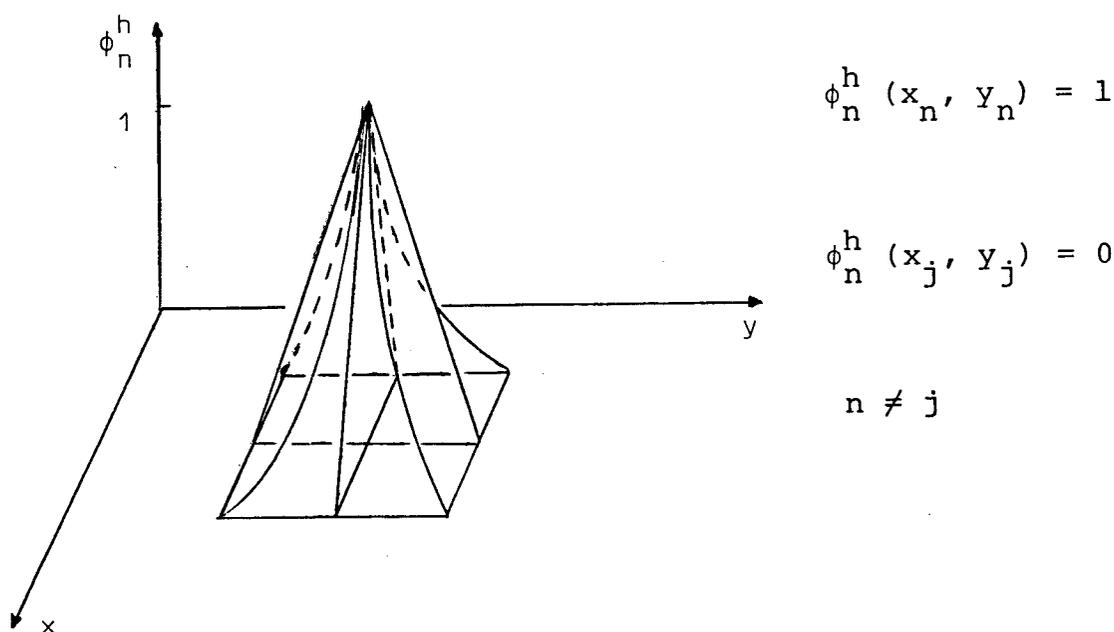


Figura 4.3 - Aproximação Linear para Problema em duas Dimensões.

4.1.2 - O Método Residual de Galerkin

A técnica de Ritz aplica-se somente a problemas do tipo variacional clássico, em que um funcional deve ser minimizado. A equação de Euler correspondente tem características especiais (Apêndice II). Quando não existe o funcional correspondente pode-se aplicar o chamado Método Residual de Galerkin.

As funções-tentativa v_1, v_2, \dots, v_N são escolhidas da classe de soluções admissíveis que satisfazem todas as condições de contorno. Num problema geral a ser resolvido, teremos N equações do tipo:

$$f_D(u_i; x_j) = 0 \quad (4.23)$$

uma equação residual (ou erro) R é formada da seguinte forma:

$$R = f_D(u_i; x_j) - f_D(v_i; x_j) \quad (4.24)$$

Substituindo (4.23) em (4.24)

$$R = - f_D(v_i; x_j) \quad (4.25)$$

De modo a deixar a solução-tentativa, o mais próximo possível da solução real, todos os resíduos R devem ser aproximados de zero tanto quanto seja possível.

O critério de minimização de R de Galerkin pode ser resumido como:

- 1) Escreve-se as funções-tentativa:

$$v_i = \sum_1^N q_{ij} \phi_j^h \quad (4.26)$$

- 2) Cria-se as funções suporte δ_j^h do mesmo tipo das funções-tentativa, ou seja, definidas também dentro de cada elemento finito.

3) Multiplica-se R pelas funções-suporte, integra-se sobre todo o domínio e iguala-se a zero. Assim, teremos N equações do tipo:

$$\int_D \delta_j^h R \, dD = 0 \quad (4.27)$$

ou

$$\int_D \delta_j^h \left[-f_D(v_i, x_j) \right] \, dD = 0 \quad (4.28)$$

Desenvolvendo-se as integrais da equação (4.28), a forma de definição tanto das funções suporte como das funções-solução (tentativa), faz com que as N equações sejam desmembradas em um sistema muito maior de equações algébricas que pode ser resolvido por métodos convencionais.

4.2 - Discretização das Equações

4.2.1 - Colocação do Problema

A equação de Constituição de um fluido viscoso é expressa por ²⁶ :

$$T = -p \, l + 2\mu D \quad (4.29)$$

onde:

T - tensor de tensões

l - tensor unitário

D - tensor cujas componentes são definidas pela matriz (em coordenadas cilíndricas):

$$D = \begin{bmatrix} \sigma_r & \tau_{r\theta} & \tau_{rz} \\ \tau_{\theta r} & \sigma_\theta & \tau_{\theta z} \\ \tau_{zr} & \tau_{z\theta} & \sigma_z \end{bmatrix} \quad (4.30)$$

que pode ser escrita como⁴ :

$$D = \begin{bmatrix} \frac{\partial u}{\partial r} & \frac{1}{2} \left[r \frac{\partial}{\partial r} \left(\frac{v}{r} \right) + \frac{1}{r} \frac{\partial u}{\partial \theta} \right] & \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u}{\partial r} + \frac{\partial w}{\partial r} \right) \\ \frac{1}{2} \left[r \frac{\partial}{\partial r} \left(\frac{v}{r} \right) + \frac{1}{r} \frac{\partial u}{\partial \theta} \right] & \frac{1}{r} \frac{\partial v}{\partial \theta} + \frac{u}{r} & \frac{1}{2} \left(\frac{\partial v}{\partial z} + \frac{1}{r} \frac{\partial w}{\partial \theta} \right) \\ \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial r} \right) & \frac{1}{2} \left(\frac{\partial v}{\partial z} + \frac{1}{r} \frac{\partial w}{\partial \theta} \right) & \frac{\partial w}{\partial z} \end{bmatrix} \quad (4.31)$$

da hipótese de axissimetria resulta:

$$D = \begin{bmatrix} \frac{\partial u}{\partial r} & \frac{1}{2} \left(\frac{\partial v}{\partial r} - \frac{v}{r} \right) & \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial r} \right) \\ \frac{1}{2} \left(\frac{\partial v}{\partial r} - \frac{v}{r} \right) & \frac{u}{r} & - \frac{1}{2} \frac{\partial v}{\partial z} \\ \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial r} \right) & \frac{1}{2} \frac{\partial v}{\partial z} & \frac{\partial w}{\partial z} \end{bmatrix} \quad (4.32)$$

A equação do movimento, que exprime o balanço de quantidade de movimento, é dada por²⁶ :

$$\rho \frac{D\vec{V}}{Dt} = \vec{F} + \text{div } \vec{T} \quad (4.33)$$

onde a notação $\frac{D\vec{V}}{Dt}$ exprime a derivada substantiva da velocidade, dada por:

$$\frac{D\vec{V}}{Dt} = \frac{\partial\vec{V}}{\partial t} + \vec{V} \cdot \text{grad } \vec{V} \quad (4.34)$$

A equação (4.33) pode ser escrita componente a componente como (em estado estacionário):

$$\begin{aligned} -\frac{\partial p}{\partial r} + \mu \left[2 \frac{\partial^2 u}{\partial r^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial z^2} + \frac{\partial^2 w}{\partial z \partial r} + 2 \left(\frac{\partial u}{\partial r} \frac{1}{r} - \frac{u}{r^2} \right) \right] + f_r = \\ = \rho \left(u \frac{\partial u}{\partial r} - \frac{v^2}{r} + w \frac{\partial u}{\partial z} \right) \end{aligned} \quad (4.35)$$

$$\begin{aligned} \mu \left(\frac{\partial^2 v}{\partial r^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial z^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial v}{\partial r} - \frac{v}{r^2} \right) + f_\theta = \\ = \rho \left(u \frac{\partial v}{\partial r} + \frac{uv}{r} + w \frac{\partial v}{\partial z} \right) \end{aligned} \quad (4.36)$$

$$\begin{aligned} -\frac{\partial p}{\partial z} + \mu \left(\frac{\partial^2 u}{\partial r \partial z} + \frac{\partial^2 w}{\partial r^2} + 2 \frac{\partial^2 w}{\partial z^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial u}{\partial z} + \frac{1}{r} \frac{\partial w}{\partial r} \right) + f_z = \\ = \rho \left(u \frac{\partial w}{\partial r} + w \frac{\partial w}{\partial z} \right) \end{aligned} \quad (4.37)$$

A equação da Continuidade (balanço de massa) pode ser escrita como:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \text{div } (\rho \vec{V}) = 0 \quad (4.38)$$

Para um fluido incompressível:

$$\text{div } \vec{V} = 0 \quad (4.39)$$

Em termos das componentes (e na consideração de axissimetria):

$$\frac{\partial u}{\partial r} + \frac{u}{r} + \frac{\partial w}{\partial z} = 0 \quad (4.40)$$

Da equação (4.40) podem ser obtidas as relações:

$$\frac{\partial u}{\partial r \partial z} + \frac{1}{r} \frac{\partial u}{\partial z} + \frac{\partial^2 w}{\partial z^2} = 0 \quad (4.41)$$

$$\frac{\partial^2 u}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial u}{\partial r} - \frac{u}{r^2} + \frac{\partial^2 w}{\partial z \partial r} = 0 \quad (4.42)$$

Com a ajuda das relações (4.41) e (4.42) as equações (4.35) a (4.37) transformam-se equações de Navier-Stokes:

$$\begin{aligned} -\frac{\partial p}{\partial r} + \mu \left(\frac{\partial^2 u}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial u}{\partial r} + \frac{\partial^2 u}{\partial z^2} - \frac{u}{r^2} \right) + f_r &= \\ &= \rho \left(u \frac{\partial u}{\partial r} - \frac{v^2}{r} + w \frac{\partial u}{\partial z} \right) \end{aligned} \quad (2.10)$$

$$\begin{aligned} \mu \left(\frac{\partial^2 v}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial v}{\partial r} + \frac{\partial^2 v}{\partial z^2} - \frac{v}{r^2} \right) + f_\theta &= \\ &= \rho \left(u \frac{\partial v}{\partial r} + \frac{uv}{r} + \frac{w \partial v}{\partial z} \right) \end{aligned} \quad (2.11)$$

$$\begin{aligned} -\frac{\partial p}{\partial z} + \mu \left(\frac{\partial^2 w}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial w}{\partial r} + \frac{\partial^2 w}{\partial z^2} \right) + f_z &= \\ &= \rho \left(u \frac{\partial w}{\partial r} + w \frac{\partial w}{\partial z} \right) \end{aligned} \quad (2.12)$$

4.2.2 - Aplicação do Método de Galerkin

Serão resolvidas as equações de balanço de quantidade de movimento originais (4.35 a 4.37) mais a equação da Continuidade (4.40).

Utilizaremos o método de Galerkin e assim vamos usar as funções suporte ξ e ϕ que serão definidas a seguir. Desta forma, o balanço de quantidade de movimento torna-se (vamos considerar que a única força externa é a gravidade e assim $f_{\theta} = f_r = 0$):

$$- \left\langle \phi, \frac{\partial p}{\partial r} \right\rangle + \mu \left\langle \phi, \left[\frac{\partial^2 u}{\partial r^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial z^2} + \frac{\partial^2 w}{\partial r \partial z} + \frac{2}{r} \frac{\partial u}{\partial r} - \frac{2u}{r^2} \right] \right\rangle = \rho \left\langle \phi, \left[u \frac{\partial u}{\partial r} - \frac{v^2}{r} + w \frac{\partial u}{\partial z} \right] \right\rangle \quad (4.43)$$

$$\mu \left\langle \phi, \left[\frac{\partial^2 v}{\partial r^2} - \frac{v}{r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial v}{\partial r} + \frac{\partial^2 v}{\partial z^2} \right] \right\rangle = \rho \left\langle \phi, \left[u \frac{\partial v}{\partial r} + \frac{uv}{r} + w \frac{\partial v}{\partial z} \right] \right\rangle \quad (4.44)$$

$$- \left\langle \phi, \frac{\partial p}{\partial z} \right\rangle + \mu \left\langle \phi, \left[\frac{\partial^2 u}{\partial r \partial z} + \frac{\partial^2 w}{\partial r^2} + 2 \frac{\partial^2 w}{\partial z^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial u}{\partial z} + \frac{1}{r} \frac{\partial w}{\partial r} \right] \right\rangle + \left\langle \phi, f_z \right\rangle = \rho \left\langle \phi, \left[u \frac{\partial w}{\partial r} + w \frac{\partial w}{\partial z} \right] \right\rangle \quad (4.45)$$

Para que se possa usar aproximações de menor ordem dentro dos elementos finitos, os termos de segunda ordem nas componentes da velocidade e os termos de pressão serão integrados por partes. Assim, da equação (4.43):

$$\begin{aligned} \langle \phi, \frac{\partial p}{\partial r} \rangle &= \int_C p \cdot \phi \cdot r \cdot dz - \langle \phi, \frac{1}{r} p \rangle - \\ &- \langle \frac{\partial \phi}{\partial r}, p \rangle \end{aligned} \quad (4.46)$$

$$\begin{aligned} \langle \phi, \frac{\partial^2 u}{\partial r^2} \rangle &= \int_C \frac{\partial u}{\partial r} \cdot \phi \cdot r \cdot dz - \langle \phi, \frac{1}{r} \frac{\partial u}{\partial r} \rangle - \\ &- \langle \frac{\partial \phi}{\partial r}, \frac{\partial u}{\partial r} \rangle \end{aligned} \quad (4.47)$$

$$\langle \phi, \frac{\partial^2 w}{\partial z^2} \rangle = \int_C \frac{\partial w}{\partial z} \cdot \phi \cdot r \cdot dr - \langle \frac{\partial \phi}{\partial z}, \frac{\partial w}{\partial z} \rangle \quad (4.48)$$

$$\langle \phi, \frac{\partial^2 w}{\partial z \partial r} \rangle = \int_C \frac{\partial w}{\partial r} \cdot \phi \cdot r \cdot dr - \langle \frac{\partial \phi}{\partial z}, \frac{\partial w}{\partial r} \rangle \quad (4.49)$$

A integração por partes possibilita o aparecimento das condições de fronteira naturais²¹, que não necessitam ser impostas e desta forma os termos de fronteira não serão considerados. Quando temos necessidade de impor uma condição essencial na fronteira, como os valores de velocidade, isto será feito pela substituição dos valores de velocidade na própria matriz resultante da discretização das equações. As condições de contorno para a resolução do problema estão na Figura 4.4.

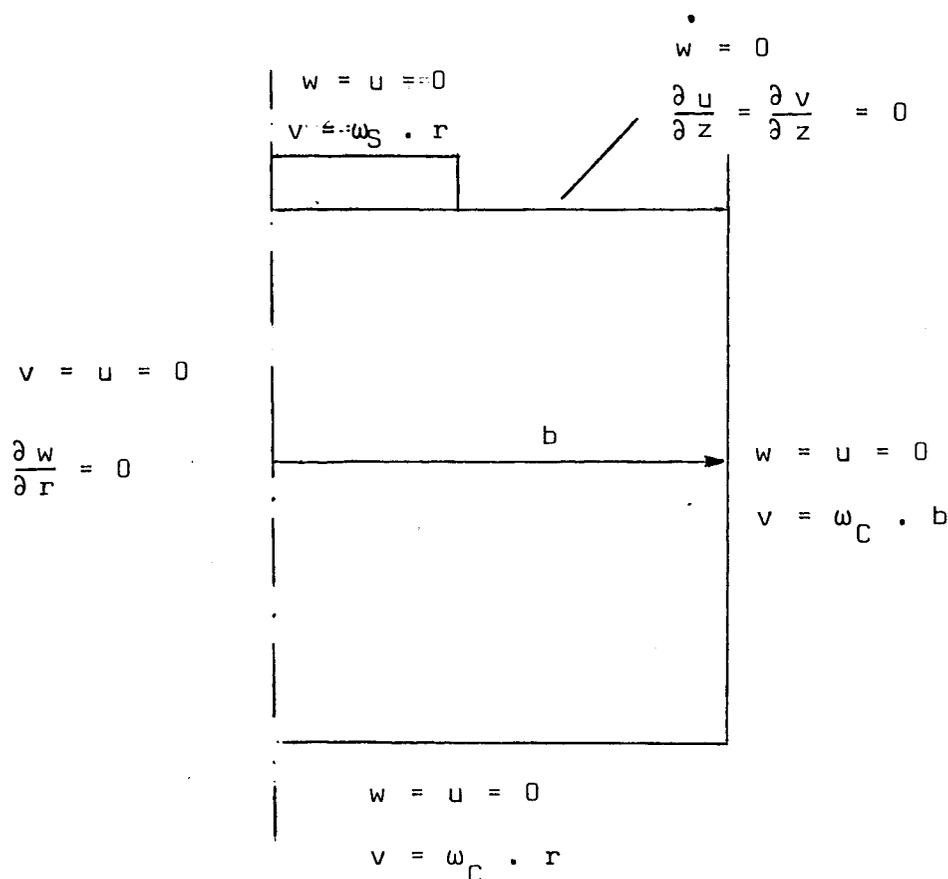


Figura 4.4 - Condições de Contorno para a Geometria do Crescimento Czochralski.

Substituindo as relações (4.46) a (4.49) na equação (4.43) e fazendo as devidas simplificações teremos:

$$\begin{aligned}
 & - \left\langle \frac{\partial \phi}{\partial r}, p \right\rangle - \left\langle \phi, \frac{1}{r} p \right\rangle + 2\mu \left\langle \frac{\partial \phi}{\partial r}, \frac{\partial u}{\partial r} \right\rangle + \\
 & + \mu \left\langle \frac{\partial \phi}{\partial z}, \left(\frac{\partial u}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial r} \right) \right\rangle + 2\mu \left\langle \phi, \frac{u}{r^2} \right\rangle + \\
 & + p \left\langle \phi, \left(u \frac{\partial u}{\partial r} + w \frac{\partial u}{\partial z} - \frac{v^2}{r} \right) \right\rangle = 0
 \end{aligned}
 \tag{4.50}$$

Analogamente ao procedimento realizado para a equação (4.43), obtemos as relações abaixo a partir das equações (4.44) e (4.45):

$$\begin{aligned} \mu < \frac{\partial \phi}{\partial r}, \left(\frac{\partial v}{\partial r} - \frac{v}{r} \right) > + \mu < \frac{\partial \phi}{\partial z}, \frac{\partial v}{\partial z} > \\ < \phi, \left(\frac{1}{r} \frac{\partial v}{\partial r} - \frac{v}{r^2} \right) > + \rho < \phi, \left(u \frac{\partial v}{\partial r} + w \frac{\partial v}{\partial z} + \frac{vu}{r} \right) > = 0 \end{aligned} \quad (4.51)$$

$$\begin{aligned} - < \frac{\partial \phi}{\partial z}, p > + \mu < \frac{\partial \phi}{\partial r}, \left(\frac{\partial u}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial r} \right) > + 2\mu < \frac{\partial \phi}{\partial z}, \frac{\partial w}{\partial z} > + \\ - < \phi, f_z > + \rho < \phi, \left(u \frac{\partial w}{\partial r} + w \frac{\partial w}{\partial z} \right) > = 0 \end{aligned} \quad (4.52)$$

E a equação da Continuidade:

$$< \xi, \left(\frac{\partial u}{\partial r} + \frac{\partial w}{\partial z} + \frac{u}{r} \right) > = 0 \quad (4.53)$$

Para chegarmos as formas discretizadas das equações, passaremos a usar a convenção da soma, ou seja, índices repetidos indicam somatória. As variáveis serão aproximadas por:

$$\begin{aligned} v &= v_j \phi_j, & u &= u_j \phi_j, & w &= w_j \phi_j \\ p &= p_k \xi_k & j &= 1, 2, \dots, N \\ & & k &= 1, 2, \dots, M \end{aligned}$$

E assim obteremos as seguintes formas discretizadas das equações de balanço de quantidade de movimento e conti

nuidade:

$$\begin{aligned}
 F1(i) = & - \left(\left\langle \frac{\partial \phi_i}{\partial r}, \xi_j \right\rangle + \left\langle \phi_i, \xi_j \frac{1}{r} \right\rangle \right) p_j + \\
 & + \mu \left(2 \left\langle \frac{\partial \phi_i}{\partial r}, \frac{\partial \phi_j}{\partial r} \right\rangle u_j + \left\langle \frac{\partial \phi_i}{\partial z}, \frac{\partial \phi_j}{\partial z} \right\rangle u_j + \right. \\
 & + \left. \left\langle \frac{\partial \phi_i}{\partial r}, \frac{\partial \phi_j}{\partial z} \right\rangle w_j + 2 \left\langle \frac{1}{r^2} \phi_i, \phi_j \right\rangle u_j \right) + \\
 & + \rho \left(\left\langle \phi_i \phi_j, \frac{\partial \phi_k}{\partial r} \right\rangle u_j u_k + \left\langle \phi_i \phi_j, \frac{\partial \phi_k}{\partial z} \right\rangle w_j u_k + \right. \\
 & + \left. \left\langle \frac{1}{r} \phi_i \phi_j, \phi_k \right\rangle v_j v_k \right) \quad (4.54)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 F2(i) = & \mu \left(\left\langle \frac{\partial \phi_i}{\partial r}, \frac{\partial \phi_j}{\partial r} \right\rangle v_j + \left\langle \frac{\partial \phi_i}{\partial z}, \frac{\partial \phi_j}{\partial z} \right\rangle v_j + \right. \\
 & - \left\langle \frac{1}{r} \frac{\partial \phi_i}{\partial r}, \phi_j \right\rangle v_j - \left\langle \frac{1}{r} \frac{\partial \phi_j}{\partial r}, \phi_i \right\rangle v_j + \\
 & + \left. \left\langle \frac{1}{r^2} \phi_i, \phi_j \right\rangle v_j \right) + \rho \left(\left\langle \phi_i \phi_j, \frac{\partial \phi_k}{\partial r} \right\rangle u_j v_k + \right. \\
 & + \left. \left\langle \phi_i \phi_j, \frac{\partial \phi_k}{\partial z} \right\rangle w_j v_k + \left\langle \frac{1}{r} \phi_i \phi_j, \phi_k \right\rangle u_j v_k \right) \quad (4.55)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
F_3(i) = & - \left\langle \frac{\partial \phi_i}{\partial r}, \xi_j \right\rangle p_j + \mu \left(\left\langle \frac{\partial \phi_i}{\partial r}, \frac{\partial \phi_j}{\partial z} \right\rangle u_j + \right. \\
& \left. + \left\langle \frac{\partial \phi_i}{\partial r}, \frac{\partial \phi_j}{\partial r} \right\rangle w_j + \left\langle \frac{\partial \phi_i}{\partial z}, \frac{\partial \phi_j}{\partial z} \right\rangle w_j \right) - \left\langle \phi_i, f_z \right\rangle + \\
& + \rho \left(\left\langle \phi_i \phi_j, \frac{\partial \phi_k}{\partial r} \right\rangle u_j w_k + \left\langle \phi_i \phi_j, \frac{\partial \phi_k}{\partial z} \right\rangle w_j w_k \right)
\end{aligned} \tag{4.56}$$

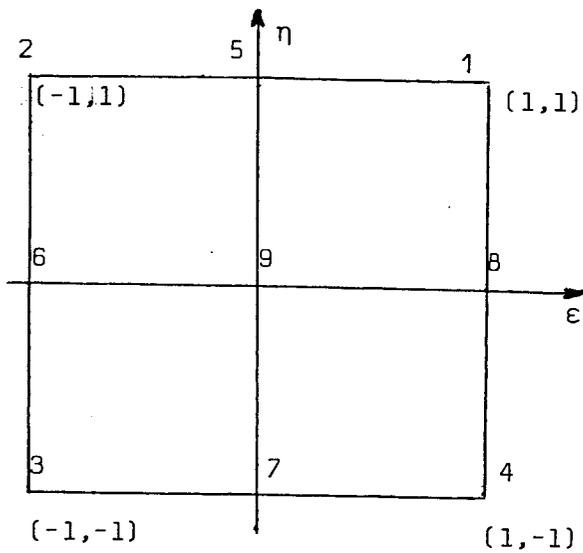
$$\begin{aligned}
F_4(i) = & \left(\left\langle \frac{\partial \phi_j}{\partial r}, \xi_i \right\rangle + \left\langle \frac{1}{r} \phi_j, \xi_i \right\rangle \right) u_j + \\
& + \left\langle \frac{\partial \phi_j}{\partial z}, \xi_i \right\rangle w_j
\end{aligned} \tag{4.57}$$

As funções-tentativa e de suporte são aproxima-
das dentro de um elemento finito usando interpolações quadráti-
cas nas velocidades e lineares nas pressões. Conforme a secção
4.1, numa interpolação quadrática, aparecem os nodos interme-
diários e assim teremos nove pontos de cálculo para as compo-
nentes da velocidade e quatro pontos para a estimativa das pres-
sões.

As funções serão aproximadas dentro de um elemen-
to-finito padrão de acordo com a Figura 4.5.

O elemento real é relacionado ao elemento padrão,
através das seguintes aplicações:

$$r = r_i \xi_i(\epsilon, \eta) \quad z = z_i \xi_i(\epsilon, \eta) \tag{4.58}$$



$$\xi_1(\epsilon, \eta) = (1 + \epsilon)(1 + \eta)/4$$

$$\xi_2(\epsilon, \eta) = (1 - \epsilon)(1 + \eta)/4$$

$$\xi_3(\epsilon, \eta) = (1 - \epsilon)(1 - \eta)/4$$

$$\xi_4(\epsilon, \eta) = (1 + \epsilon)(1 - \eta)/4$$

$$\phi_1(\epsilon, \eta) = \epsilon(1 + \epsilon)\eta(1 + \eta)/4$$

$$\phi_2(\epsilon, \eta) = -\epsilon(1 - \epsilon)\eta(1 + \eta)/4$$

$$\phi_3(\epsilon, \eta) = \epsilon(1 - \epsilon)\eta(1 - \eta)/4$$

$$\phi_4(\epsilon, \eta) = -\epsilon(1 + \epsilon)\eta(1 - \eta)/4$$

$$\phi_5(\epsilon, \eta) = (1 - \epsilon^2)\eta(1 + \eta)/2$$

$$\phi_6(\epsilon, \eta) = -\epsilon(1 - \epsilon)(1 - \eta^2)/2$$

$$\phi_7(\epsilon, \eta) = -(1 - \epsilon^2)\eta(1 - \eta)/2$$

$$\phi_8(\epsilon, \eta) = \epsilon(1 + \epsilon)(1 - \eta^2)/2$$

$$\phi_9(\epsilon, \eta) = (1 - \epsilon^2)(1 - \eta^2)$$

Podemos observar que:

$$\xi_j(\epsilon(i), \eta(i)) = \begin{cases} 1, & i = j \\ 0, & i \neq j \end{cases}$$

$$\phi_j(\epsilon(i), \eta(i)) = \begin{cases} 1, & i = j \\ 0, & i \neq j \end{cases}$$

Figura 4.5 - Aproximações Dentro de um Elemento Finito Padrão.

As equações discretizadas são linearizadas e resolvidas pelo Método de Newton. As integrais que aparecem nas equações F1 a F4 são calculadas numericamente pela regra de Gauss²¹ e o sistema esparso resultante é resolvido pelo Método de Gauss na sua versão Frontal²⁸.

CAPÍTULO V

TESTES PARA O PROGRAMA

Antes de se realizar a Simulação Numérica para Silício, torna-se necessária a realização de alguns testes visando dar confiabilidade aos cálculos realizados. Para a realização destes testes contou-se com dois trabalhos publicados de Simulação Numérica da fase líquida de crescimento de Cristais. O primeiro realizado por Crochet et alii²⁹ e o segundo por Mihelcic et alii⁷.

No trabalho de Crochet et alii as equações de Navier-Stokes e Continuidade são resolvidas em uma forma adimensional e os resultados dados através da função Linha de Corrente adimensional, definida como:

$$\frac{\partial \Psi^*}{\partial z^*} = 2 r^* u^* \quad (5.1)$$

$$\frac{\partial \Psi^*}{\partial r^*} = -2 r^* w^* \quad (5.2)$$

onde: z^* = coordenada axial adimensional (= z/b)

r^* = coordenada radial adimensional (= r/b)

u^* = velocidade na direção radial adimensional (= ub/v)

w^* = velocidade na direção axial adimensional (= wb/v)

As linhas de $\Psi^* = \text{constante}$ representam as linhas de Corrente. É facilmente verificada que a equação da Continuidade é obedecida.

As Figuras 5.1.a e 5.1.b são reproduções de alguns dos resultados obtidos por eles para a convecção forçada. Neste trabalho as equações são resolvidas pela técnica de Elementos Finitos utilizando as mesmas hipóteses feitas por nós (axissimetria, regime estacionário), e assim é de se esperar uma boa concordância com nossos resultados.

No trabalho de Mihelcic et alii as equações são resolvidas nas suas variáveis primitivas (pressão e velocidade) utilizando a hipótese de axissimetria porém em estado transiente. As Figuras 5.1.c e 5.1.e são reproduções de tempos onde o regime é praticamente estacionário. Neste trabalho é utilizada a técnica de Células e Marcadores ("Marker-and-Cell" - MAC) originalmente desenvolvida por Welch e Harlow³¹ que é um método de diferenças finitas utilizando um esquema de diferenças para a frente para as derivadas de primeira ordem no tempo, diferenças centrais para as derivadas espaciais^{7,8}. O modo de apresentação dos resultados é através de diagramas de vetor-velocidade obtidos das componentes axial e radial, onde:

$$|\vec{V}| = (u^2 + w^2)^{1/2} \quad (5.3)$$

Tanto os diagramas para Linha de Corrente como os de vetor-velocidade são bastante interessantes e assim em nosso trabalho eles aparecerão sempre juntos. As Figuras 5.2 a 5.6 são resultados obtidos para comparação com estes resultados de literatura. Os diagramas para vetor velocidade são obtidos do mesmo modo que no trabalho de Mihelcic et alii, porém a definição para Linha de Corrente é um pouco diferente da definição de Crochet et alii já que também trabalhamos nas variáveis primitivas. Assim:

$$\frac{\partial \Psi}{\partial z} = - r u \quad (5.4)$$

$$\frac{\partial \Psi}{\partial r} = r w \quad (5.5)$$

Podemos ver que a equação da Continuidade é satisfeita.

$$\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (ru) + \frac{\partial w}{\partial z} = - \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(\frac{1}{r} r \frac{\partial \Psi}{\partial z} \right) + \frac{1}{r} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial z \partial r} = 0 \quad (5.6)$$

Para o cálculo de Ψ no programa, as equações (5.4) e (5.5) são derivadas e somadas:

$$\frac{\partial^2 \Psi}{\partial z^2} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial r^2} = - r \frac{\partial u}{\partial z} + r \frac{\partial w}{\partial r} + w \quad (5.7)$$

Este procedimento visa utilizar os valores de u e w da resolução das equações do escoamento e resolver a equação (5.7) pelo método de Elementos Finitos com aproximações quadráticas para Ψ e condições de contorno de $\Psi = 0$.

A Tabela V.1 mostra a comparação entre os resultados de Crochet et alii e os nossos. Como eles trabalham com adimensionais seus resultados são controlados pelo número de Reynolds (Re_i) onde:

$$Re_i = \frac{\omega_i b^2}{\nu} \quad (5.8)$$

onde: ω_i = rotação do componente i ($i = C \rightarrow$ cadinho
 $i = S \rightarrow$ cristal)

Para o nosso programa utilizamos $b = 1$ cm e $\nu = 0.01$ cm²/s e variamos a velocidade angular ω_i . O raio do cristal é igual a 0.5 cm.

Tabela V.1 - Comparação com os Resultados de Crochet et alii²⁹.

Re_S	Re_C	Ψ_{max}^* 29	Ψ_{max}^* OBTIDO	% DESVIO	Ψ_{min}^* 29	Ψ_{min}^* OBTIDO	% DESVIO
0	100	0.80	0.80	0.0	0.0	0.0	0.0
125	-375	2.08	2.20	5.45	-0.110	-0.097	11.82

Na Tabela V.1 os nossos valores da função Linha de Corrente são tornados adimensionais:

$$\Psi^* = \frac{2}{vb} \Psi \quad (5.9)$$

A Tabela V.2 mostra a comparação entre os resultados obtidos por Mihelcic et alii e os nossos. Em nosso cálculo utilizamos $\nu = 0.06 \text{ cm}^2/\text{s}$ ⁷ e $\rho = 1.124 \text{ g/cm}^3$ ³². Parâmetros: raio do cadinho = 3.4 cm, raio do cristal = 1.2 cm e altura do fluido = 4 cm.

Tabela V.2 - Comparação com os Resultados de Mihelcic et alii⁷.

ω_S (RPM)	ω_C (RPM)	V_{max}^7 (cm/s)	V_{max} OBTIDO	% DESVIO
0	15	0.33	0.33	0.0
-50	10	0.64	1.08	40.74
60	15	0.83	1.22	31.19

Da Tabela V.1 pode-se ver que a concordância com os resultados de Crochet et alii é muito boa, principalmente a baixa velocidade. Das Figuras 5.1, 5.2 e 5.3 nota-se que quali

tativamente, a concordância é excelente. Para taxas maiores de velocidade, porém os valores máximo e mínimo da função linha de corrente mostra que a concordância quantitativa não é perfeita, mas ainda assim o desvio relativo é razoavelmente pequeno. No trabalho de Crochet são utilizados redes de elementos finitos maiores que as nossas (200 elementos, desigualmente espaçados), e assim, é possível que os resultados obtidos por eles sejam mais precisos. Nossa rede contém 120 elementos finitos o que significa 143 pontos de cálculo de pressão, 525 pontos de cálculo das componentes da velocidade (1575 valores discretos). Para aumentarmos o sua precisão teríamos que dispor de mais memória do computador e aumentaríamos consideravelmente o tempo de processamento do programa, que já é bem grande. Conforme será visto no Capítulo 6, a rede atual é perfeita para a aplicação a que se destina - resultados qualitativos para crescimento de Silício. Com tantas hipóteses (interface plana, superfícies livre fixa, estado estacionário, axissimetria, temperatura constante) o desvio de 11,82% pode ser considerado irrelevante, já que a estimativa da distribuição de velocidades, que é o que realmente nos importa, foi obtida satisfatoriamente.

Com relação à Tabela V.2, nota-se que os valores de velocidade máxima (que é o parâmetro fornecido por Mihelcic et alii) diferem significativamente a alta velocidade e ainda mais, por comparação entre as Figuras 5.1, 5.4 a 5.6 verifica-se que a posição dos vórtices por nós obtidos está um pouco deslocada em relação às figuras da literatura. Os desvios verificados provavelmente estão relacionados com as diferenças entre os métodos numéricos empregados.

De qualquer forma, a medida que se trabalha com valores mais altos de velocidade, tende-se a um regime turbu

lento e independente de métodos numéricos, vai ficando mais difícil um levantamento do perfil de velocidades. Desta forma podemos dizer que nossos resultados são muito bons para velocidades baixas e razoáveis à médias e altas velocidades.

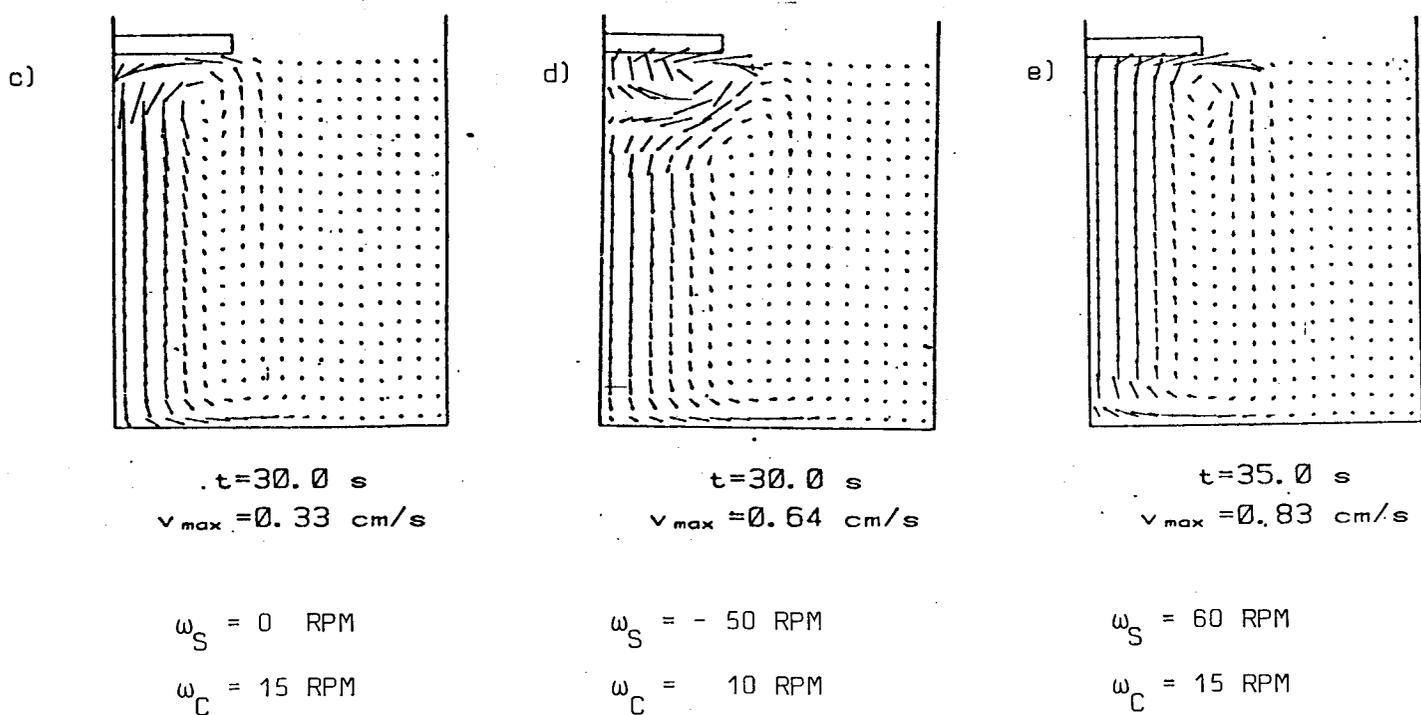
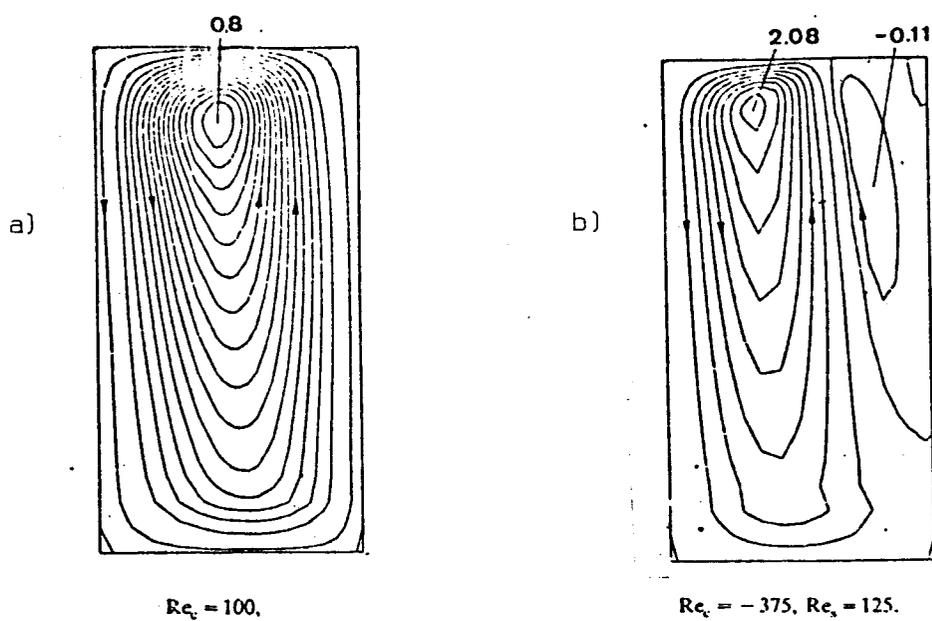


Figura 5.1 - Resultados de Literatura para Teste com o Programa.
 a), b) Crochet et alii²⁹. c), d), e) Mihelcic et alii⁷.
 (Líquido = Água/Glicerina (50 %)).

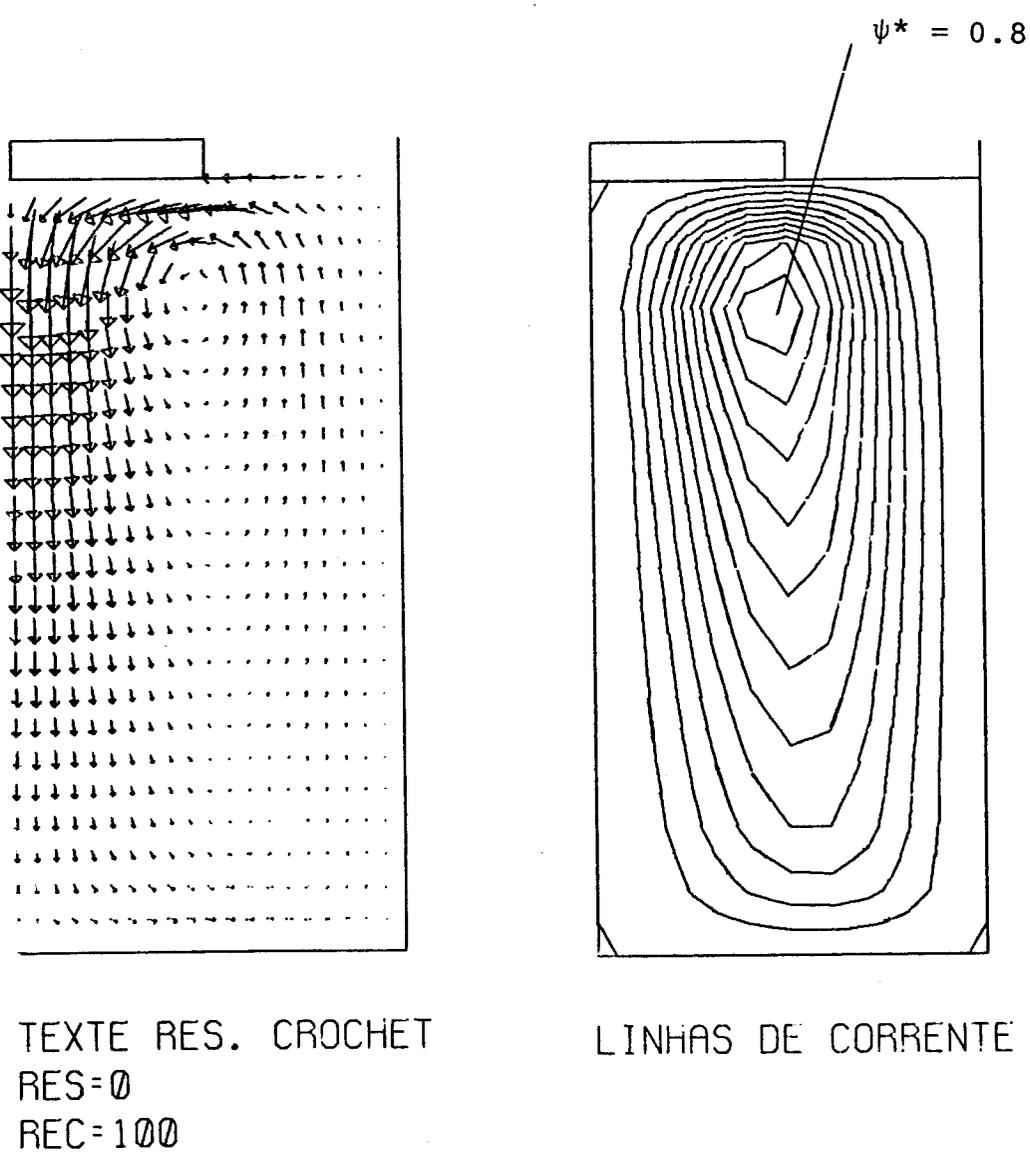


Figura 5.2 - Teste para o Programa

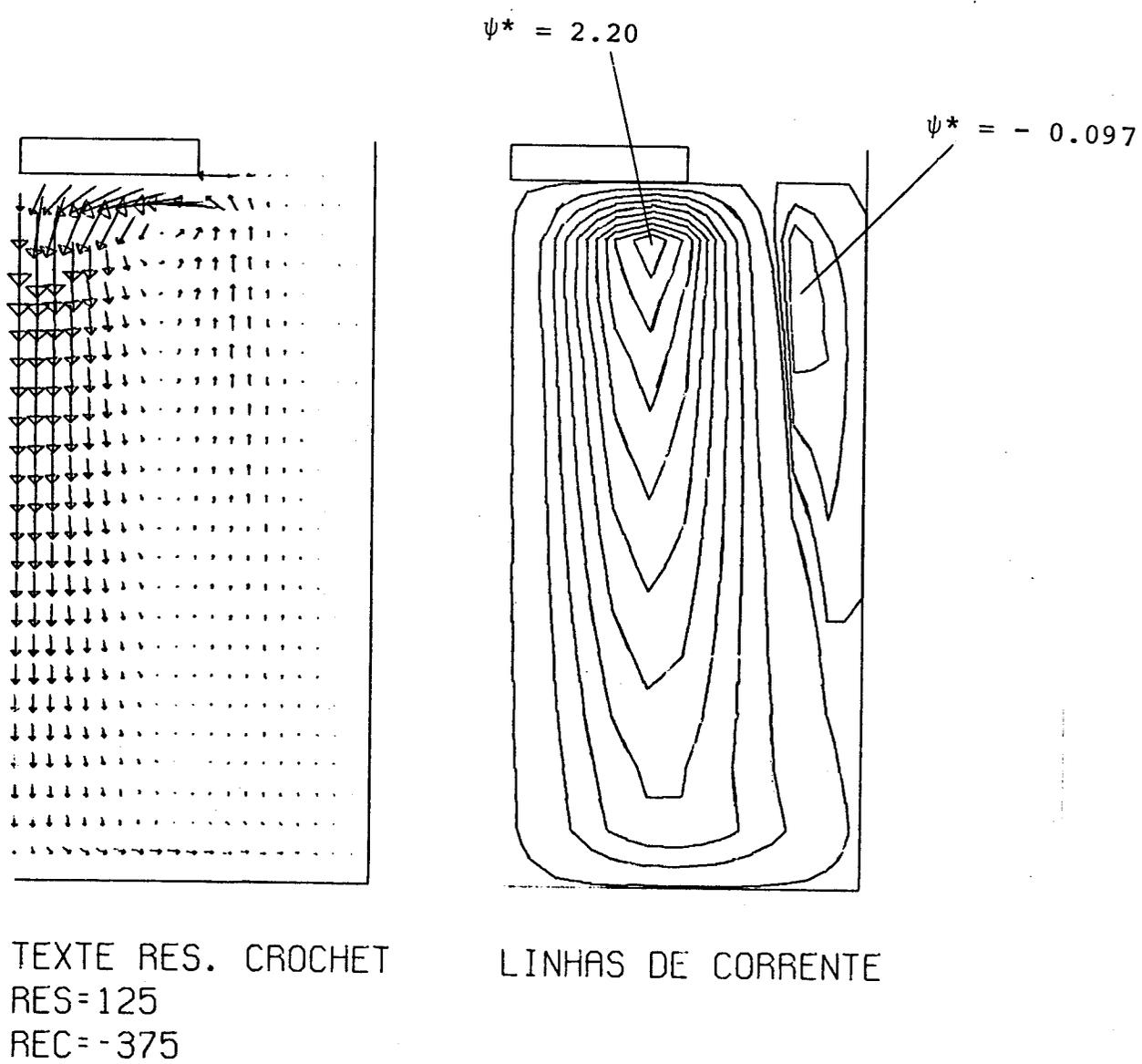
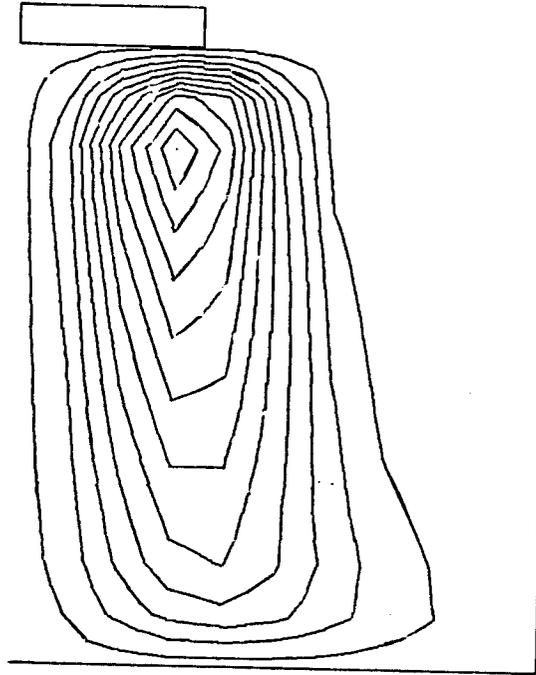
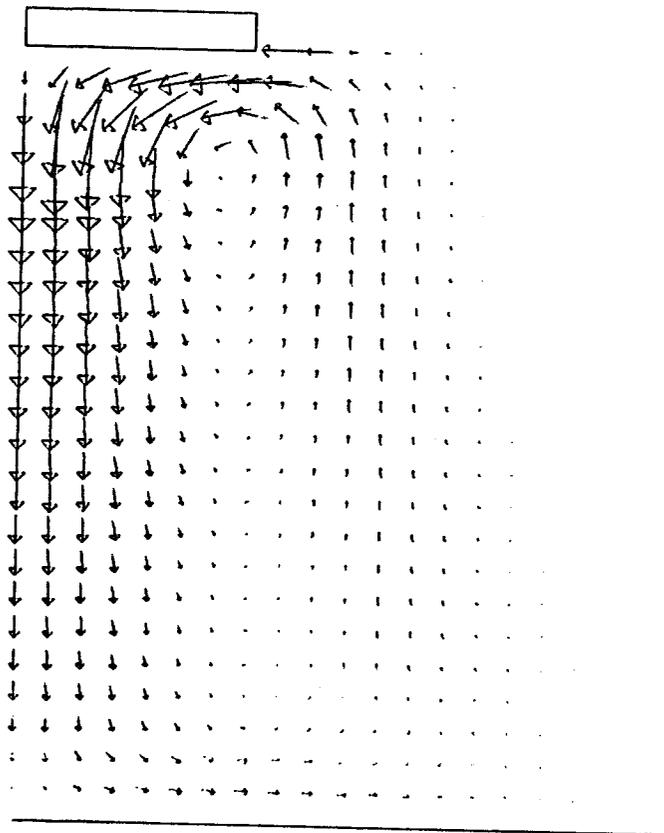


Figura 5.3 - Teste para o Programa



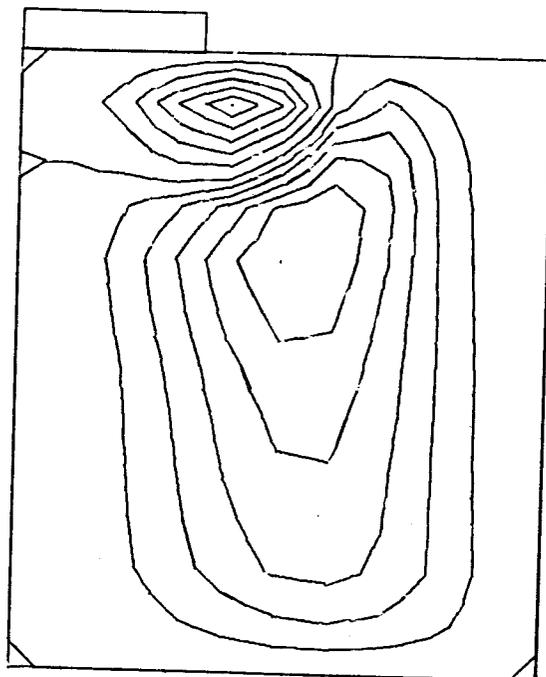
LINHAS DE CORRENTE



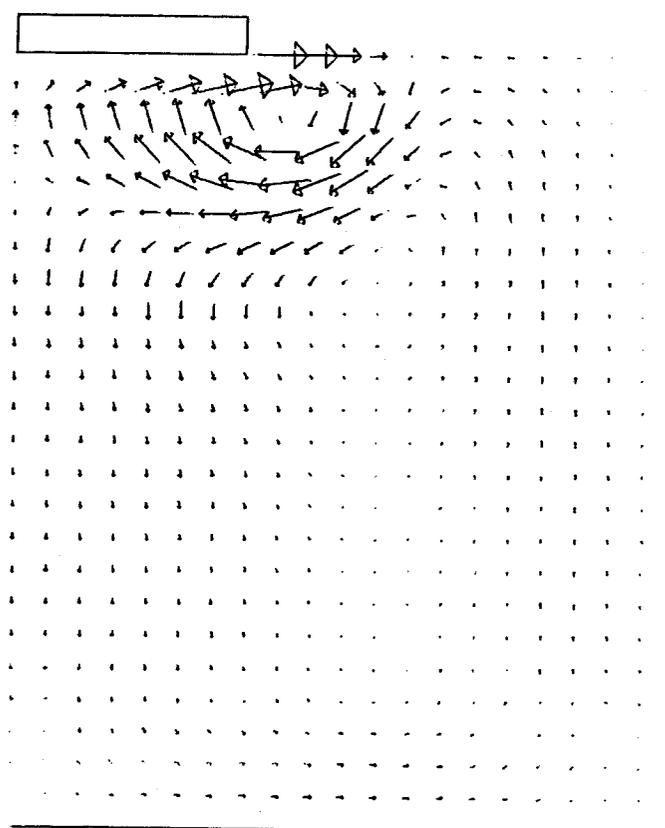
LIO. AGUA/GLICERINA (50%)
WS=0 RPM
WC=15 RPM

Figura 5.4 - Teste para o Programa

$$V_{max} = 0.33 \text{ cm/s.}$$



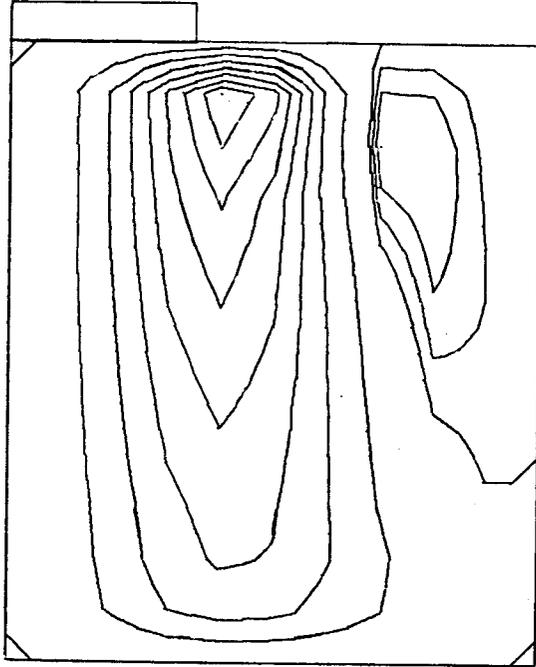
LINHAS DE CORRENTE



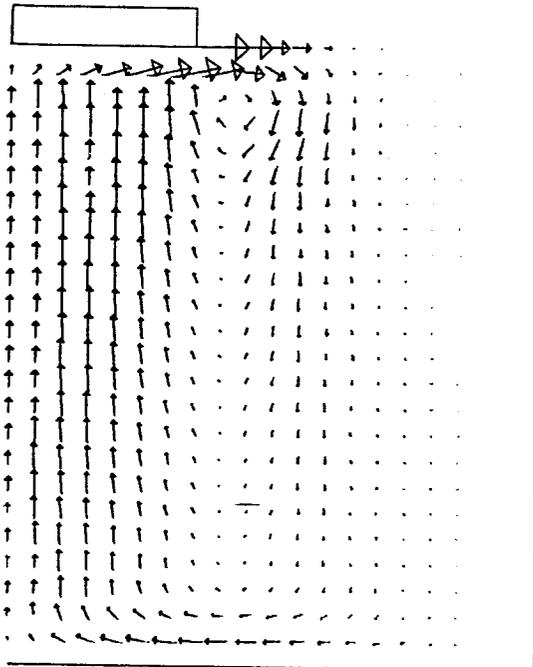
LIQ. AGUA/GLICERINA(50)
WS=-50 RPM
WC=10 RPM

Figura 5.5 - Teste para o Programa

$$V_{max} = 1.08 \text{ cm/s.}$$



LINHAS DE CORRENTE.



LIQ. - AGUA/GLICERINA(50%)
 WS= 60 RPM
 WC= 15 RPM

Figura 5.6 - Teste para o Programa

$$V_{max} = 1.22 \text{ cm/s.}$$

CAPÍTULO VI

SIMULAÇÃO NUMÉRICA PARA SILÍCIO

Nosso principal objetivo é melhorar a qualidade do silício obtido em nossos laboratórios. Desta forma um modelo do escoamento na fase líquida faz sentido a partir do que adotemos como parâmetros de cálculo as dimensões de nossos aparatos, ou seja: raio e altura do cadinho e raio do cristal. O tamanho do cristal não é uma dimensão fixa, porém o raio do cadinho é 5.8 cm e a altura 12.7 cm. Manteremos a altura do fluido, obviamente, abaixo da altura do cadinho.

Ao tentarmos realizar a simulação com as dimensões reais do cadinho, deparamos com o problema de que mesmo para velocidades relativamente baixas ocorria a não convergência do programa. A precisão do cálculo está relacionada com o tamanho adotado para o elemento finito. Para as dimensões reais do cadinho, para que o programa tivesse uma precisão razoável seria necessário aumentar o tamanho da rede, ou seja, o número de elementos finitos que seriam, portanto, menores. Além do aumento de espaço de memória que isso ocasionaria no computador, teríamos um aumento considerável no tempo de processamento. Para a rede atual com 120 elementos finitos, o tempo de C.P.U. (Unidade Central de Processamento) é de no mínimo 50 minutos só com o cálculo numérico, para que se tenha uma boa precisão. Considerando-se que o VAX-11/780 trabalha rodando simultaneamente programas de todos os usuários dividindo o tempo de operação do sistema em porcentagens entre os usuários, num dia

de uso intenso, o tempo de processamento da parte numérica chega a ser 3 a 4 vezes o tempo de C.P.U. Assim se aumentássemos o número de elementos finitos da rede, é fácil prever os inúmeros problemas que enfrentaríamos, já que para concluir o trabalho tínhamos necessidade de rodar o programa um número razoável de vezes.

Para contornarmos este problema optamos por diminuir as dimensões do cadinho e conseqüentemente aumentarmos a precisão do cálculo para a mesma rede. Assim as dimensões foram divididas ao meio. Para a aplicação a uma situação real de crescimento, já que o raio do cadinho é 2 vezes o valor do raio no modelo obtido da simulação numérica, a altura do fluido também é dobrada. A velocidade é corrigida pelo número de Reynolds, e assim o modelo de distribuição de velocidades deve ser aproximado na situação real. É importante ressaltar que apesar de termos usado um fator 2 para a correção, este tipo de análise aplica-se a cadinhos com quaisquer dimensões, e as correções podem ser feitas por um fator adequado dividindo-se o raio do cadinho real pelo raio do cadinho no modelo e a altura do fluido no modelo é multiplicada por este fator para se ter a altura real do fluido.

Nosso estudo se concentrou na escolha de um conjunto de velocidades cujos módulos pudessem ser atribuídos tanto ao cadinho como ao cristal e os resultados obtidos tivessem boa precisão. Em outras palavras fazemos uma simulação onde a rotação do cadinho é 2 RPM e a do cristal 10 RPM e no caso seguinte trocamos estas rotações. Foram também tomados como parâmetros altura do fluido no cadinho e raio do cristal. Estes parâmetros visam simular o que o próprio crescimento do cristal ocasionaria no movimento do fluido no cadinho. Apesar de termos trabalhado com as Equações em estado estacionário, conside

rando-se que o puxamento se dá a uma velocidade relativamente baixa (0.5 a 3.5 mm/min¹), podemos aceitar que cada estágio do crescimento é suficientemente lento para que o estado estacionário seja aproximado.

Existem controvérsias sobre o valor da viscosidade de Silício, provavelmente devido à grande dificuldade de medida. A Tabela VI.1 dá alguns dos valores de literatura encontrados. Optamos por trabalhar com o valor $\nu = 0.025$ cm²/s por se tratar de publicação mais recente. Nas figuras colocadas neste capítulo, salvo indicação em contrário, o raio do cristal é 1.015 cm.

Tabela VI.1 - Valores de Propriedades Físicas de Silício Fundido

PROPRIEDADE	UNIDADE	VALOR	REFERÊNCIA
Viscosidade	cm ² /s	0.0106	14 , 33
Cinemática (ν)		0.0035	34
		0.0250	8
Densidade (ρ)	g/cm ³	2.54	34

Conforme é bem conhecido da Mecânica dos Fluidos, existe um regime laminar onde as velocidades de um determinado ponto do fluido podem variar com o tempo (estado transiente) ou serem constantes (estado estacionário), porém sempre presas a limites bem determinados. Um outro regime seria o turbulento, onde o perfil bem comportado do regime laminar dá lugar a uma distribuição complexa de velocidades e de tratamento numérico muito difícil. A faixa de transição entre os dois regimes depende da geometria do problema que está sendo tratado. Para a geometria do crescimento de cristais, a transição deveria merecer um estudo mais aprofundado, pois como é sabido, os trans

portes de quantidade de movimento, massa e energia estão intimamente ligados e diferem grandemente de um regime para outro. A Figura 6.1 é uma combinação de rotações cadinho-cristal que resultou num perfil complexo de velocidades. Poderíamos incorrer no erro de dizer que estamos num regime turbulento, porém conforme discutido no Capítulo 5 o programa tende a apresentar resultados piores à medida que se aumenta a velocidade, até atingirmos uma combinação de rotações onde não mais ocorra a convergência do programa, resultando numa distribuição de velocidades que pode não estar traduzindo a situação real que ainda seria de um regime laminar. Assim baixamos o valor das rotações até atingirmos um valor onde a convergência era perfeita, isto está mostrado na Figura 6.2. Aplicando-se o mesmo conjunto de rotações para um caso de rotação contrária cadinho-cristal, novamente o programa deixa de convergir conforme mostra a Figura 6.3. Citando-se novamente o Capítulo 5, estão lá colocados as definições dadas por Crochet et alii²⁹ para o número de Reynolds de cadinho e cristal. O número de Reynolds conforme sua definição, de uma relação das forças de inércia pelas forças de atrito, deve caracterizar o movimento global e a transição laminar-turbulenta. Os números de Reynolds para cadinho e cristal conforme definido por Crochet et alii nada mais são que velocidades adimensionais e assim tanto no caso da Figura 6.2 como 6.3 têm os mesmos valores, apenas mudando os sinais, e não traduzem o quão diferentes são os movimentos. Desta forma optamos por dar uma nova definição ao número de Reynolds para esta geometria:

$$Re = \frac{|\omega_C - \omega_S| \cdot b^2}{\nu} \quad (6.1)$$

Assim, na Figura 6.2 $\rightarrow Re = 915.5$. Desta forma

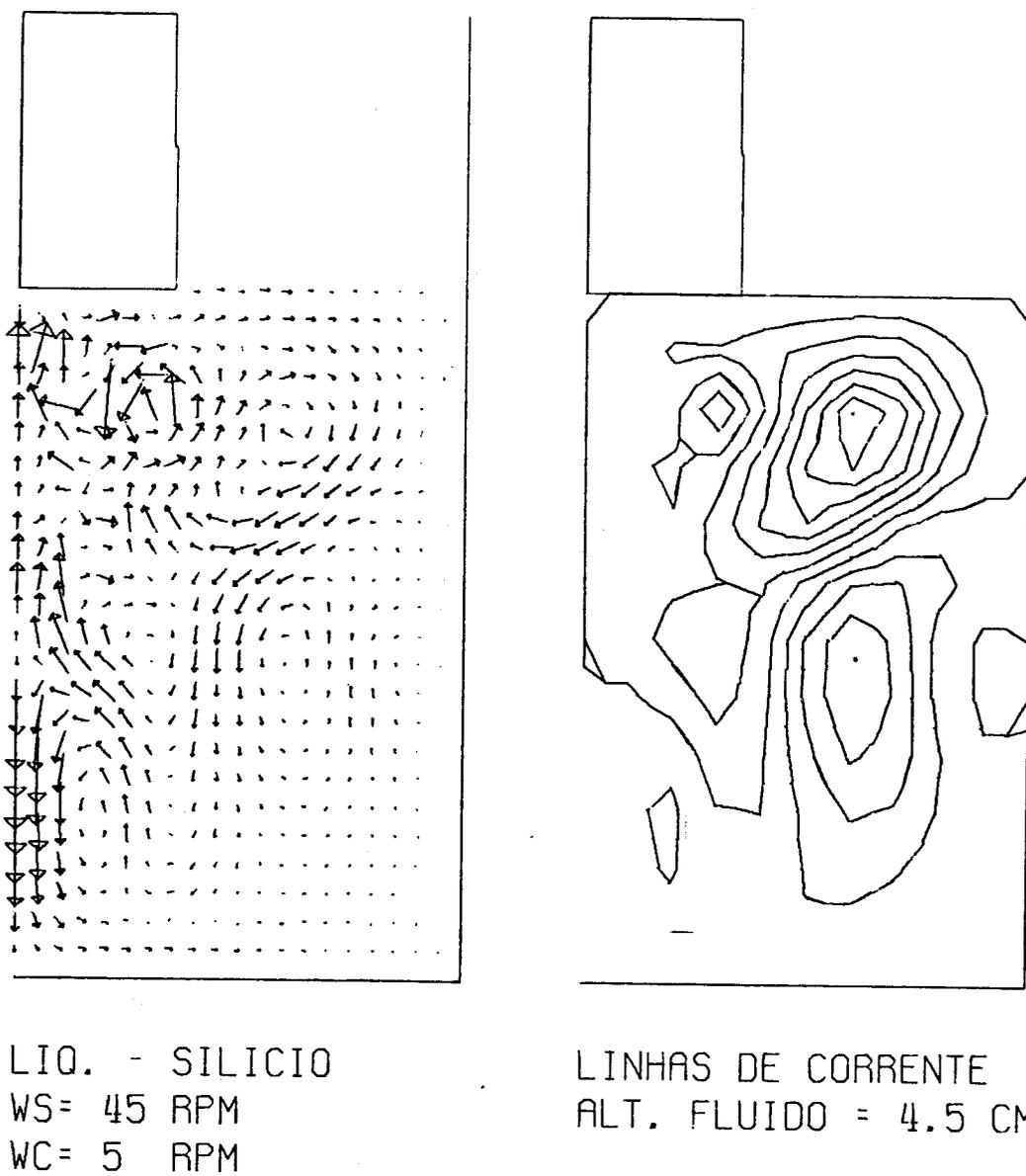
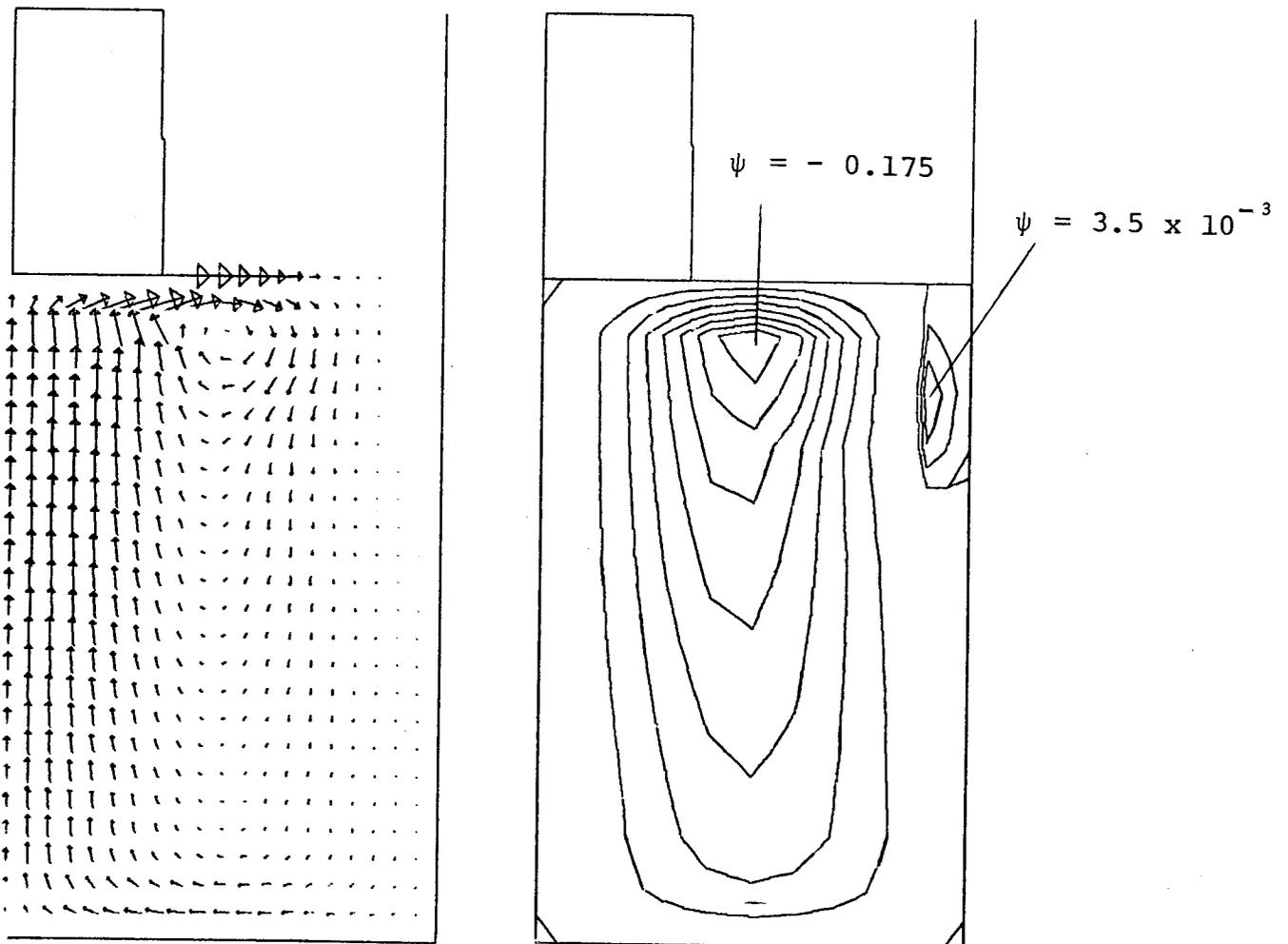


Figura 6.1 - Simulação Numérica para Silício



LIQ. - SILICIO
WS= 30 RPM
WC= 4 RPM

LINHAS DE CORRENTE
ALT. FLUIDO = 4.5 CM

Figura 6.2 - Simulação Numérica para Silício

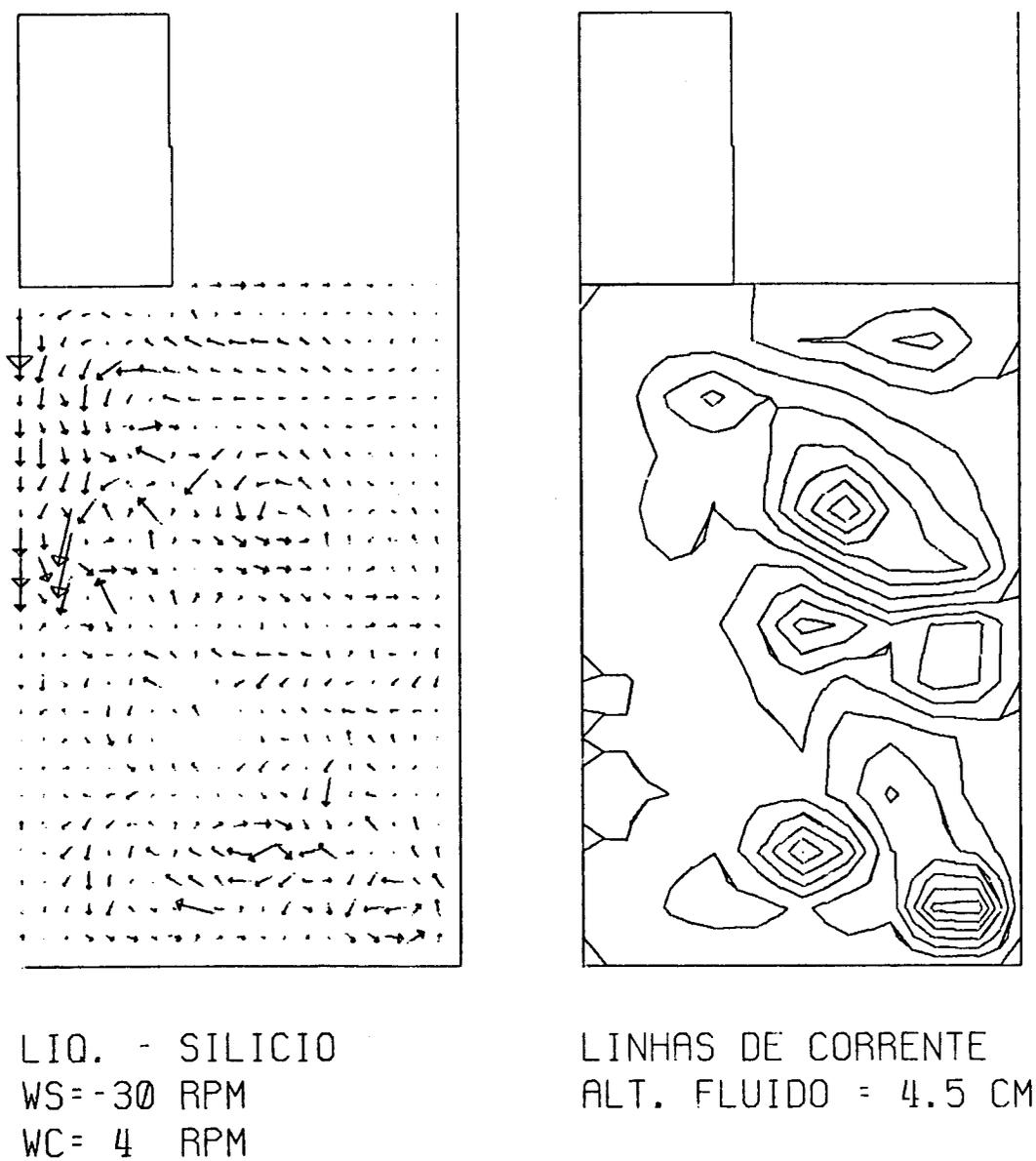


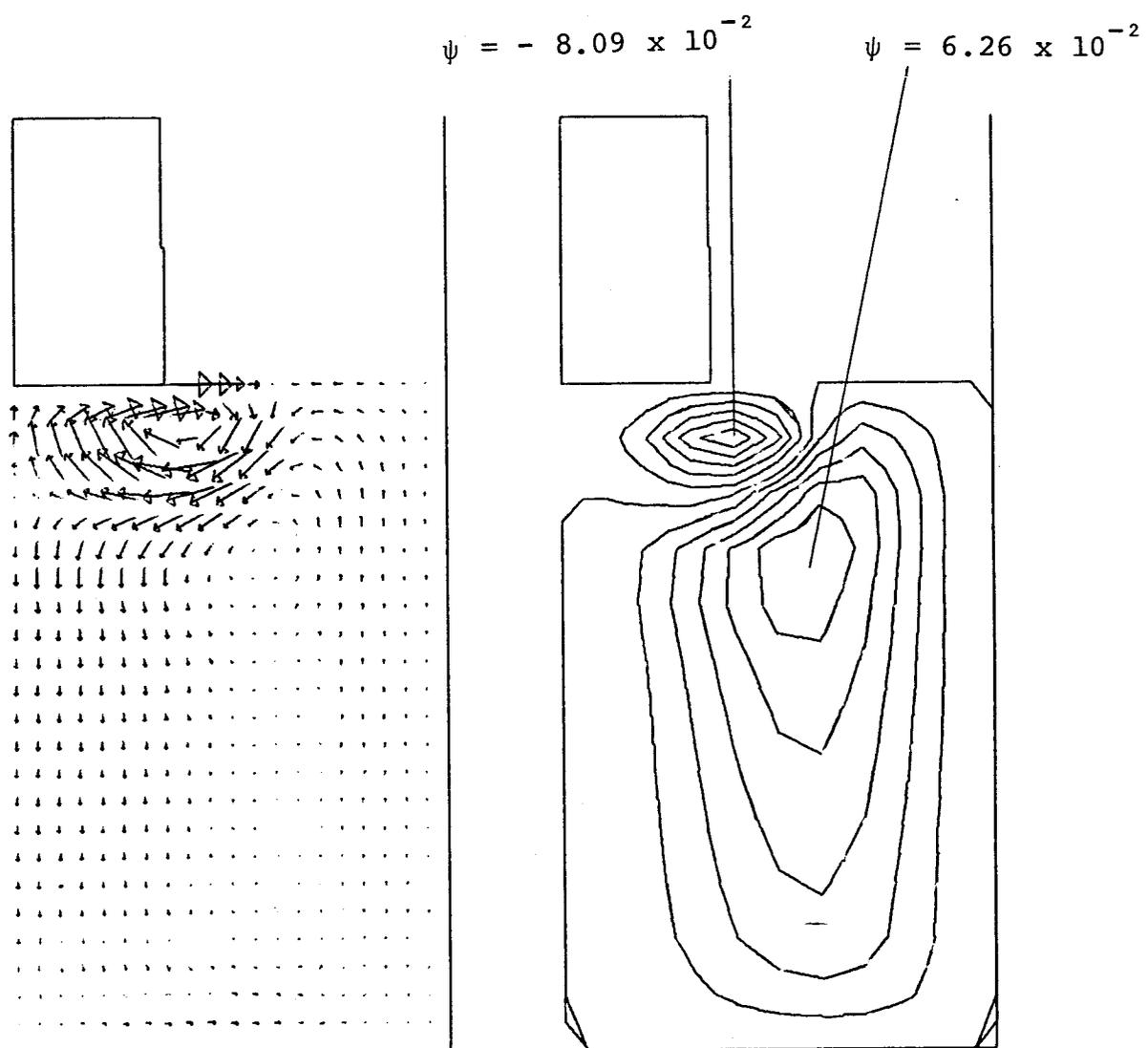
Figura 6.3 - Simulação Numérica para Silício

se escolhermos uma combinação de rotações de tal forma que tenhamos um Re de aproximadamente 915, o programa deveria apresentar bons resultados, e assim escolhemos $\omega_c = 4$ RPM e $\omega_s = -22$ RPM. Conforme a Figura 6.4, podemos ver que o perfil de velocidades é bastante claro.

Os resultados discutíveis, obtidos a alta velocidade nos sugeriu que reduzíssemos as rotações de cadinho e cristal para fazermos um modelo da incorporação de impurezas e/ou dopantes. Na Figura 6.5 dividimos por dois a combinação de velocidades angulares da Figura 6.4 e resultou um perfil de velocidades completamente diferente, inclusive o parâmetro velocidade máxima (V_{max}) passa de 0.346 cm/s para 0.151 cm/s, ou seja, cai para menos da metade. Isto seria de se esperar, pois apesar da proporcionalidade entre as rotações, o cadinho é uma superfície muito maior e domina o movimento numa maior parte do fluido, sendo assim, a queda na rotação do cadinho de 4 RPM para 2 RPM ocasiona um aumento na importância da rotação do cristal para o movimento global e assim a célula de estagnação gerada abaixo do cristal passa a ser mais pronunciada.

Vamos trabalhar com baixas velocidades buscando um modelamento da incorporação de impurezas e/ou dopantes. Qualitativamente, o que for obtido pode ser aplicado para velocidades mais altas, pois conforme mostram as Figuras 6.4 e 6.5, apesar de diferentes, os perfis de velocidade têm a mesma estrutura básica.

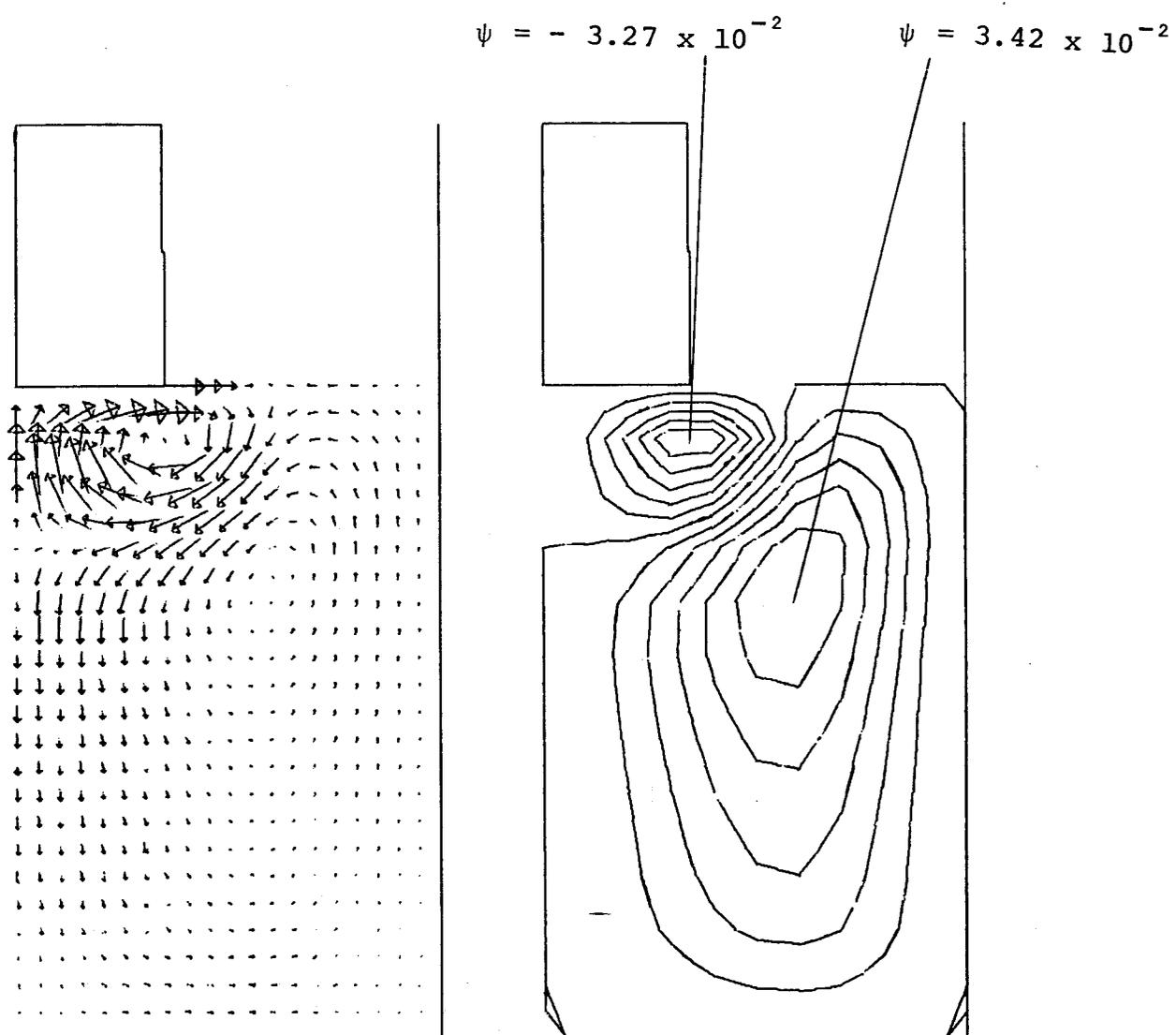
A Figura 6.6 representa um caso de isorotação de cadinho-cristal com o cristal a uma velocidade maior. Conforme pode ser visto, o perfil de velocidades próximo da parede lateral do cadinho é contrário à tendência de evaporação de SiO . A situação se agrava no fundo do cadinho de onde o oxigênio é transportado diretamente para o cristal. Com relação à in



LIQ. - SILICIO
WS = -22 RPM
WC = 4 RPM

LINHAS DE CORRENTE
ALT. FLUIDO = 4.5 CM

Figura 6.4 - Simulação Numérica para Silício



LIQ. - SILICIO
WS = -11 RPM
WC = 2 RPM

LINHAS DE CORRENTE
ALT. FLUIDO = 4.5 CM

Figura 6.5 - Simulação Numérica para Silício

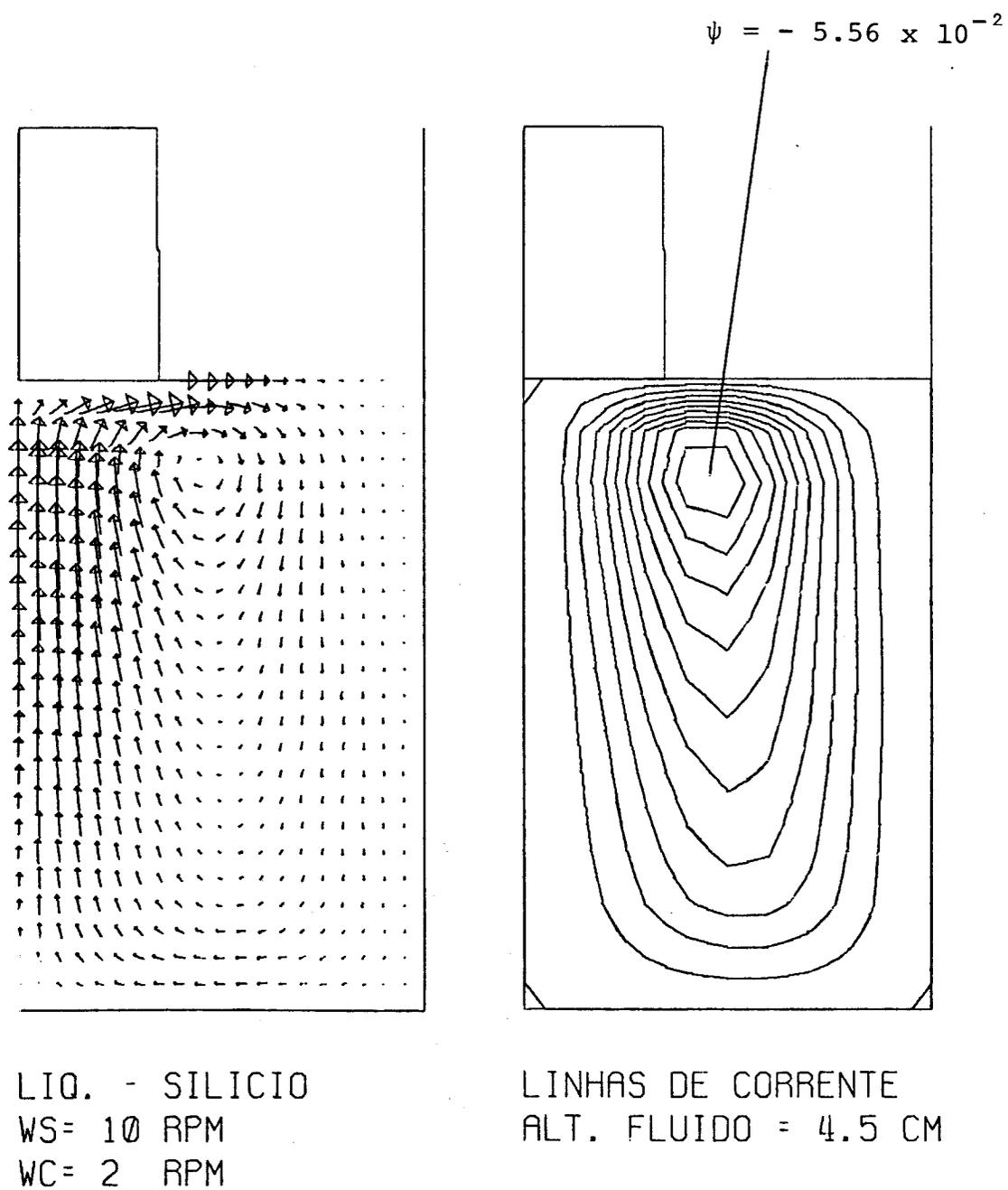


Figura 6.6.- Simulação Numérica para Silício

incorporação de dopantes, para o caso onde há tendência de acúmulo preferencial no centro, como no caso do silício - $|111|$ (Capítulo 3); este tipo de rotação diminui esta tendência, pois o perfil de velocidades próximo da interface de crescimento é do centro para os lados. Quando diminuimos a altura do fluido no cadinho para uma situação intermediária no crescimento real, pouca modificação ocorre. A velocidade máxima (que ocorre próximo da interface cristal líquido \rightarrow conforme mostram as dimensões dos vetores) conserva seu módulo (Tabela VI.2) e a única mudança é o encurtamento do caminho do oxigênio que desta forma tem menor possibilidade de se volatilizar (Figura 6.7). Na Figura 6.8, a largura do cristal é aumentada, tentando simular uma possível situação real do crescimento. O aumento da superfície do cristal em contato com o fluido gera o aumento da velocidade máxima que tende a ser, porém, mais longe do centro, e desta forma é discutível se a distribuição de dopantes seria melhor. A incorporação de oxigênio é péssima neste caso, pois não há espaço para a evaporação de SiO. Já no caso da Figura 6.9, a velocidade na interface diminui e isto deve corresponder a uma pior distribuição radial de dopantes no fim do cristal.

Na Figura 6.10, as rotações de cadinho e cristal são trocadas em relação às figuras anteriores e, como seria de esperar, o único efeito é a inversão do sentido do fluxo no líquido. Nesta situação ocorre o que chamamos de célula de Taylor Proudman (Capítulo 2), pois na parte mais externa do fluido existe (praticamente) apenas movimento na direção azimutal, ou seja, o fluido apresenta a rotação de um corpo sólido. Na verdade existe um vórtice nesta região, conforme mostra o diagrama de Linhas de Corrente, porém ele é cerca de 20 vezes menos

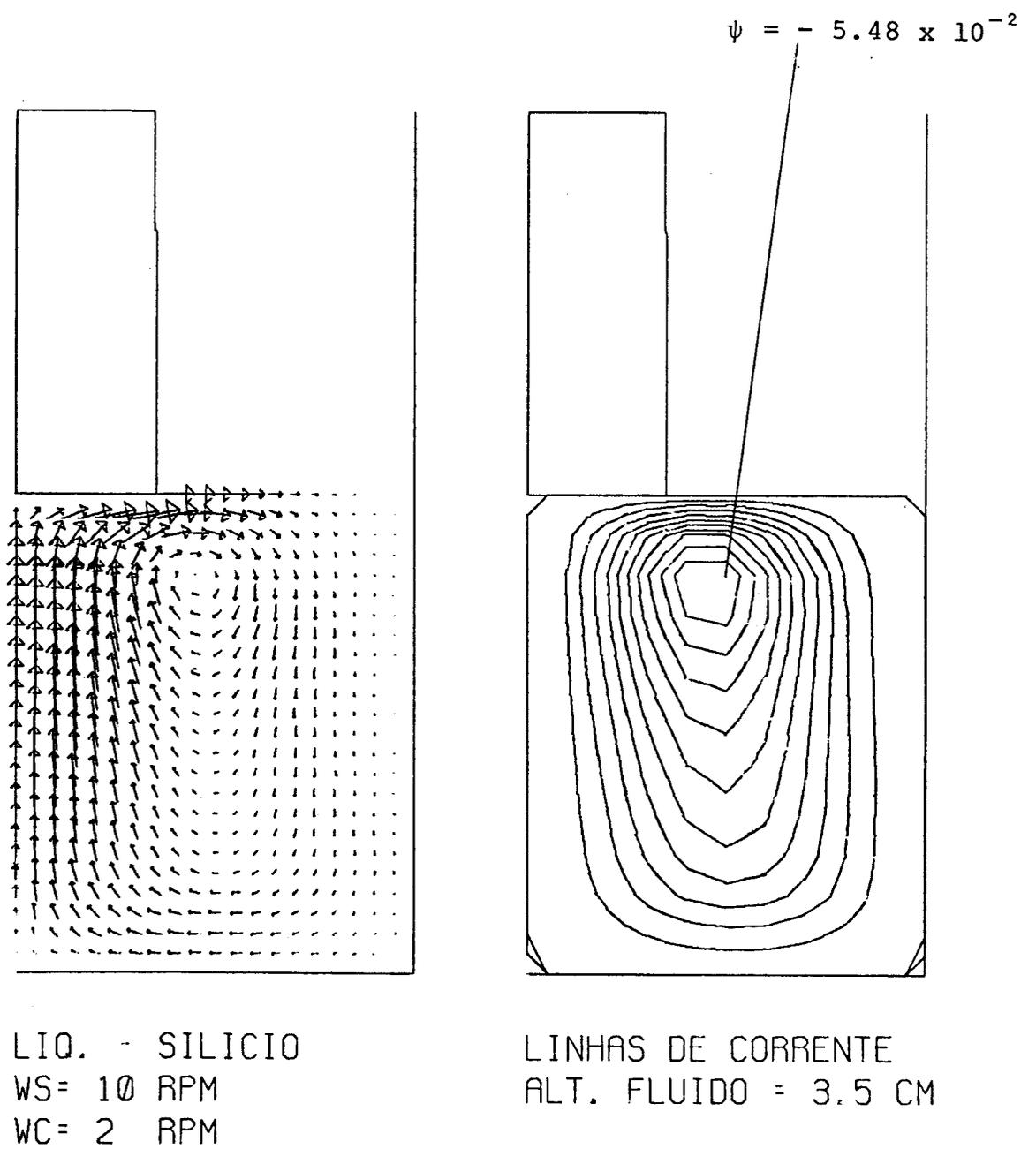


Figura 6.7 - Simulação Numérica para Silício

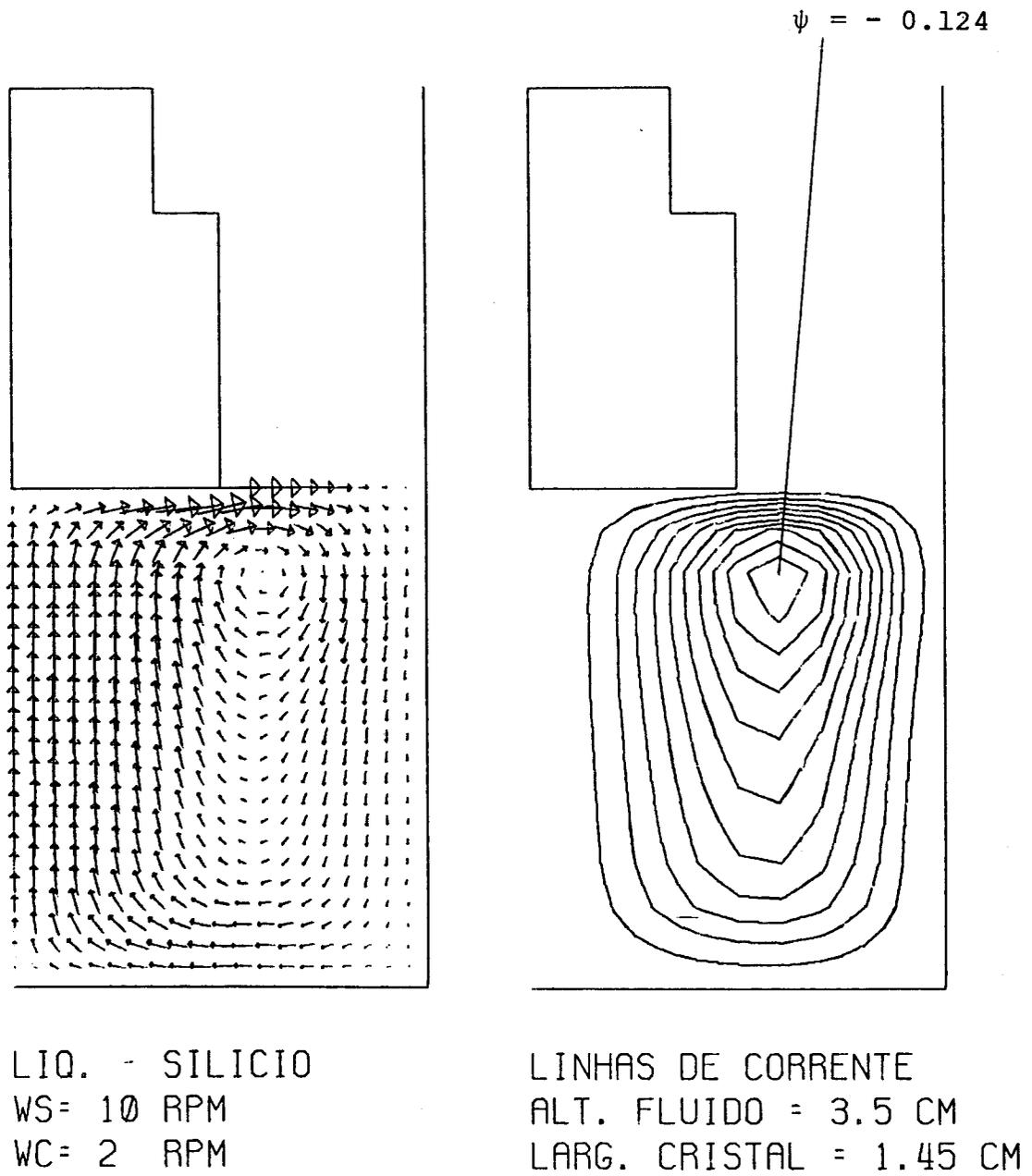


Figura 6.8 - Simulação Numérica para Silício

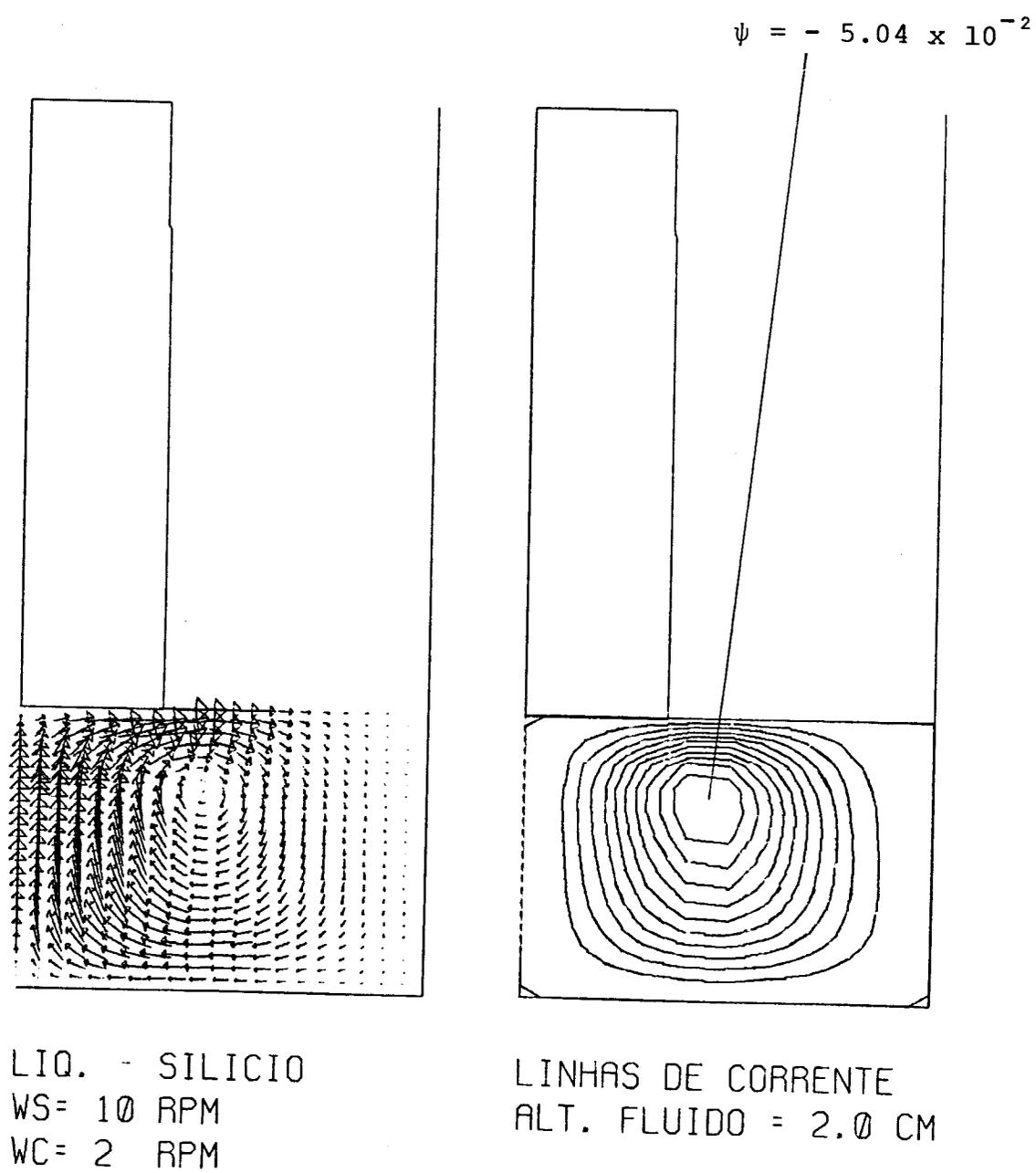


Figura 6.9 - Simulação Numérica para Silício

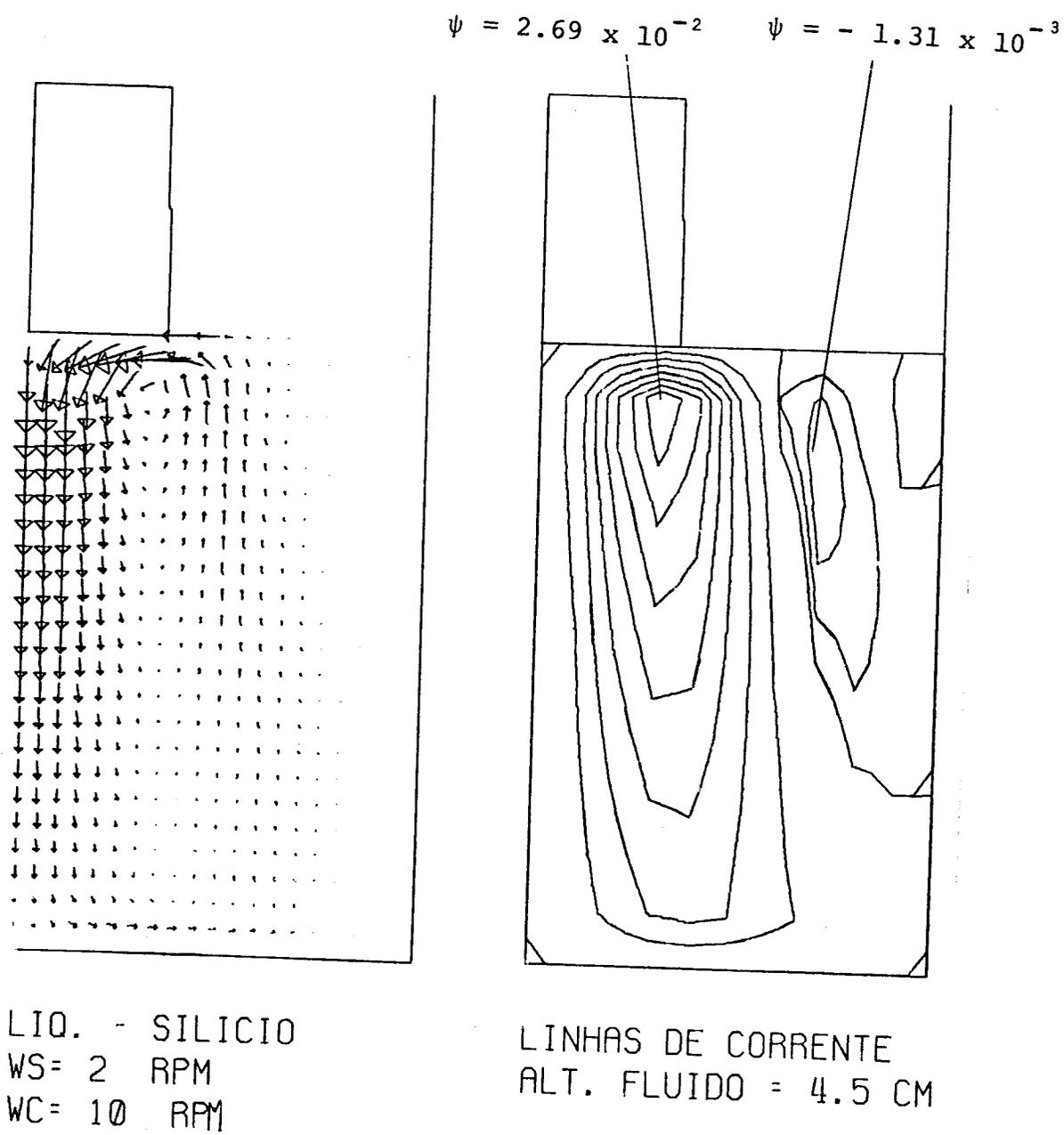
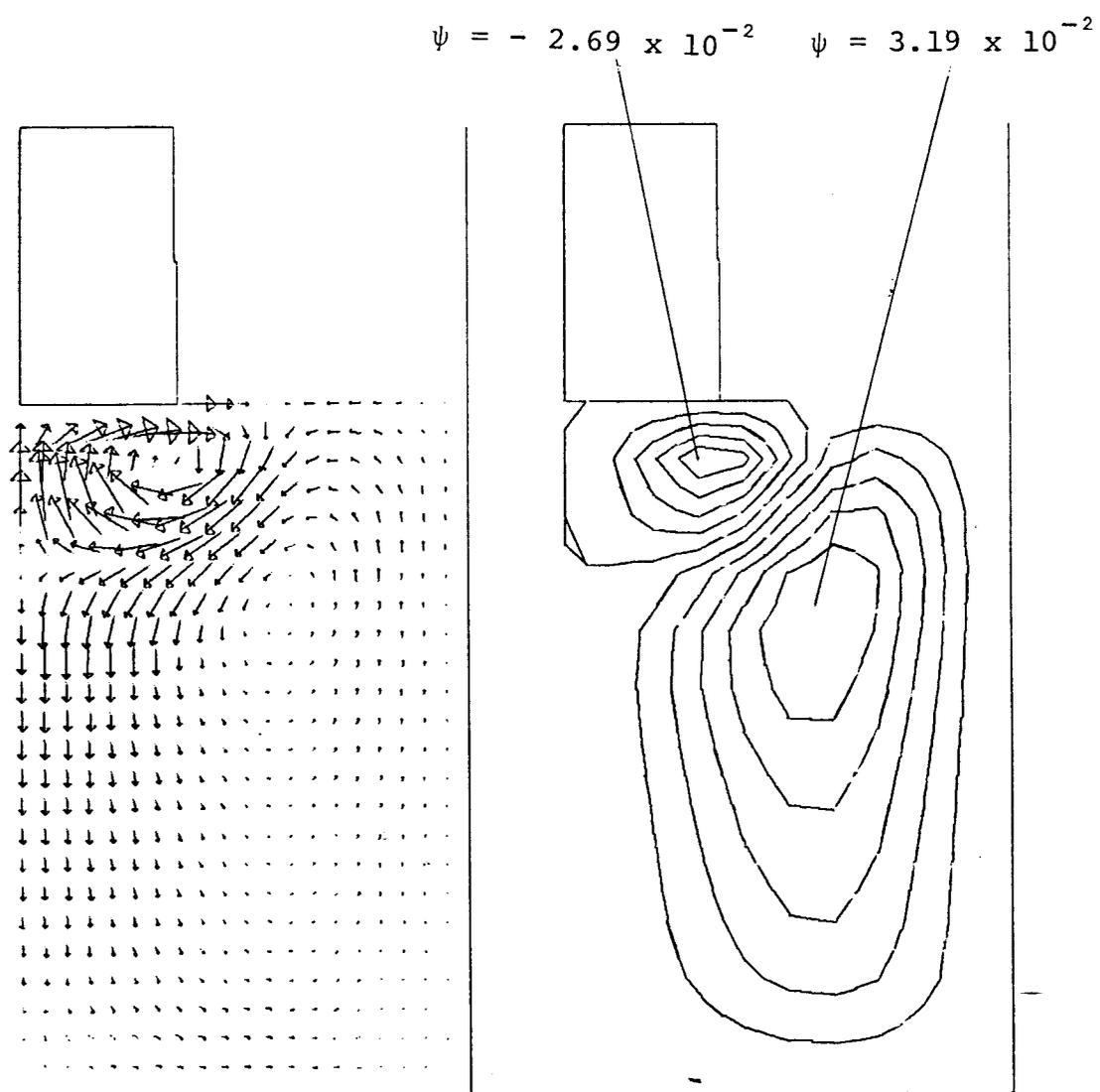


Figura 6.10 - Simulação Numérica para Silício

intenso que o vórtice positivo, e desta forma não aparece no diagrama de vetor-velocidade. Desta forma, podemos considerar que praticamente não existe movimento nas direções radial e axial. Com este tipo de perfil de velocidades, a concentração de oxigênio é diminuída e a distribuição radial de dopantes piorada.

O número de Ro para a situação da Figura 6.6 é de 1.33 e o $Ro_T = 2.64$. Desta forma, segundo o raciocínio exposto no Capítulo 2, a situação de axissimetria deve ser verificada experimentalmente. Raciocínio análogo mostra que isto é aplicável a todas as situações de isorotação a partir da Figura 6.6.

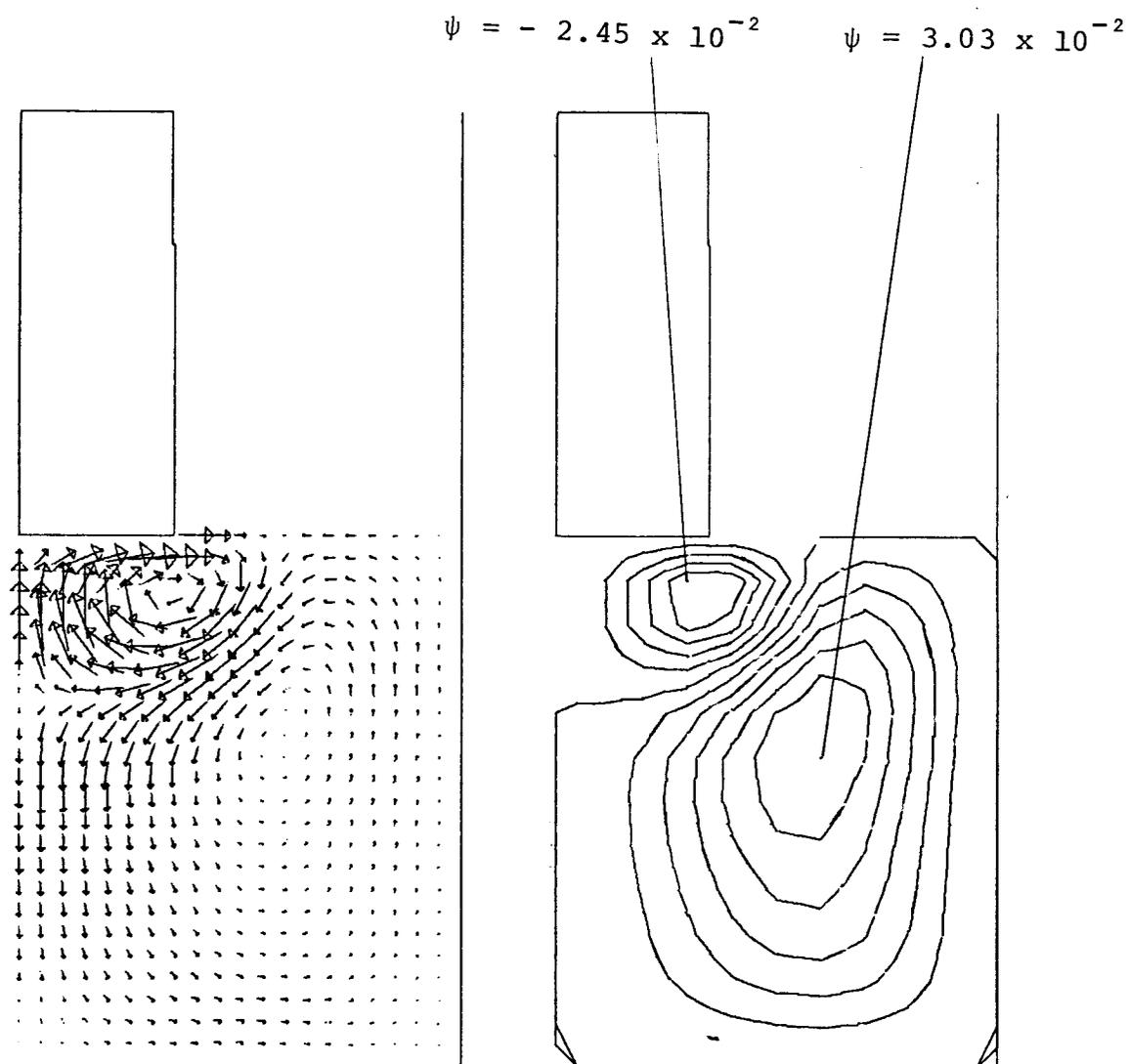
A partir da Figura 6.11, passamos a analisar o caso em que se adotam rotações contrárias de cadinho e cristal. A distribuição de velocidades na Figura 6.11 é altamente conveniente, tanto para a eliminação de oxigênio como para a otimização na distribuição de dopantes. A formação da célula superior de estagnação, conforme prevista anteriormente (Capítulo 2) faz com que o oxigênio gerado pela parede do cadinho seja eliminado sem ir para o cristal, e o sentido da velocidade na interface de crescimento, do centro para os lados, melhora a distribuição radial de dopantes. Na Figura 6.12, a altura do fluido é diminuída e não existe modificação significativa do movimento. A velocidade na interface tem um pequeno aumento (Tabela VI.2) que não deve ser sensível para a incorporação de dopantes. Esta velocidade volta a cair para o caso da Figura 6.13. O vórtice devido ao cristal passa a quase dominar o movimento global, restringindo o vórtice positivo a um menor espaço à direita. Isto faz com que o oxigênio gerado no centro da base do cadinho possa subir e penetrar a célula superior de estagnação, indo para o cristal e assim poderia aumentar a concentração de



LIQ. - SILÍCIO
 WS = -10 RPM
 WC = 2 RPM

LINHAS DE CORRENTE
 ALT. FLUIDO = 4.5 CM

Figura 6.11 - Simulação Numérica para Silício



LIQ. - SILICIO
WS = -10 RPM
WC = 2 RPM

LINHAS DE CORRENTE
ALT. FLUIDO = 3.5 CM

Figura 6.12 - Simulação Numérica para Silício

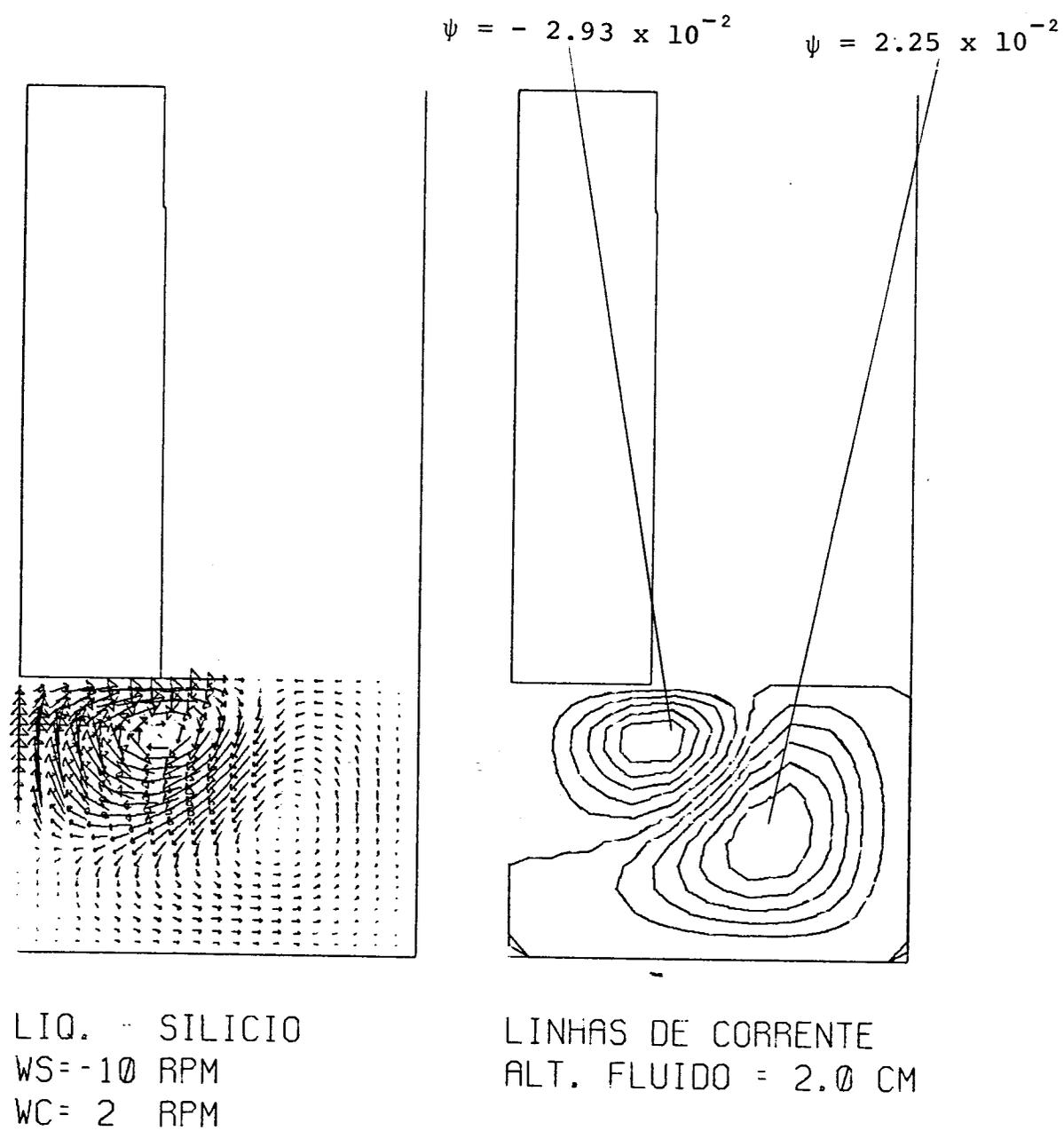


Figura 6.13 - Simulação Numérica para Silício

oxigênio no fim do cristal.

Visando, outra vez, simular uma possível situação real, fizemos a expansão do cristal para os lados, tentando cobrir todas as possíveis hipóteses do crescimento. No caso da Figura 6.14, pode-se notar que a célula superior de estagnação cresceu e atingiu a parede do cadinho. Nesta situação, o SiO gerado na parte inferior, devido a sua alta volatilidade, deve causar uma pressão na célula superior que deve ser penetrada periodicamente, causando variações na distribuição axial de oxigênio no silício em crescimento. Na Figura 6.15, já quase não existe espaço para a evaporação de SiO que deve ir para o cristal. Da Figura 6.12 para a Figura 6.15 ocorrem variações sensíveis na velocidade do fluido próximo da interface, o que corresponderia a diferentes situações para a incorporação de dopantes, conforme fosse a largura real do cristal numa situação prática.

A Figura 6.16 corresponde à situação de inversão de sinal nas velocidades de cadinho e cristal. Conforme comparação com a Figura 6.11 e a Tabela VI.2, as situações são idênticas. A diferença entre estas situações estaria na direção azimutal que não aparece na Figura e cujos vetores teriam sentido inverso. Isto mostra que o sentido do movimento relativo entre cadinho e cristal não é importante. Para as velocidades nas direções que não a direção de rotação do cristal, o movimento é determinado pelo módulo de cada velocidade e pelo módulo da velocidade relativa.

Na Figura 6.17 trocamos as velocidades de cadinho e cristal. A baixa rotação do cristal não é suficiente para a criação da célula de estagnação superior. Aparece também a célula de Taylor-Proudman em uma situação idêntica àquela dis

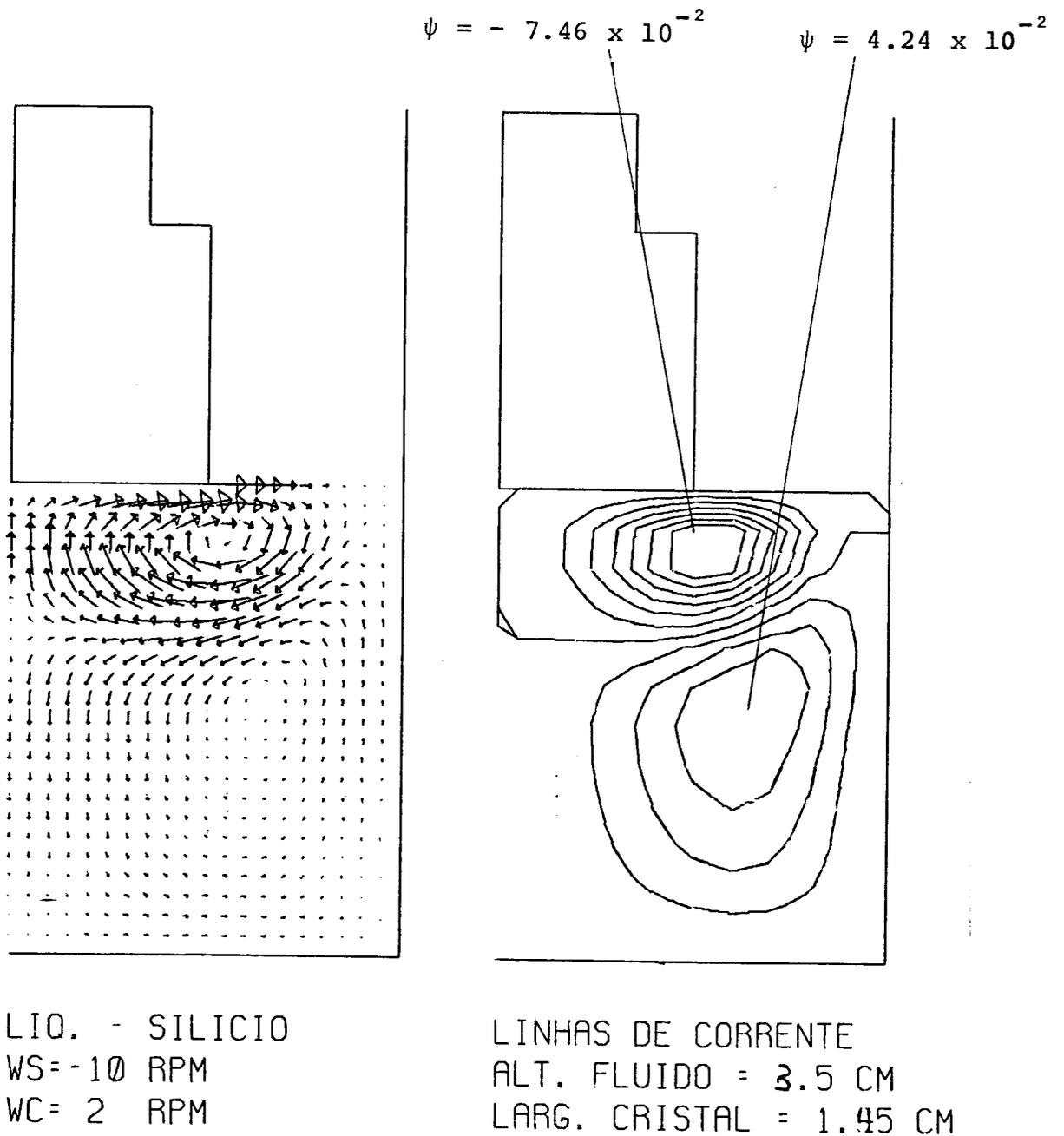
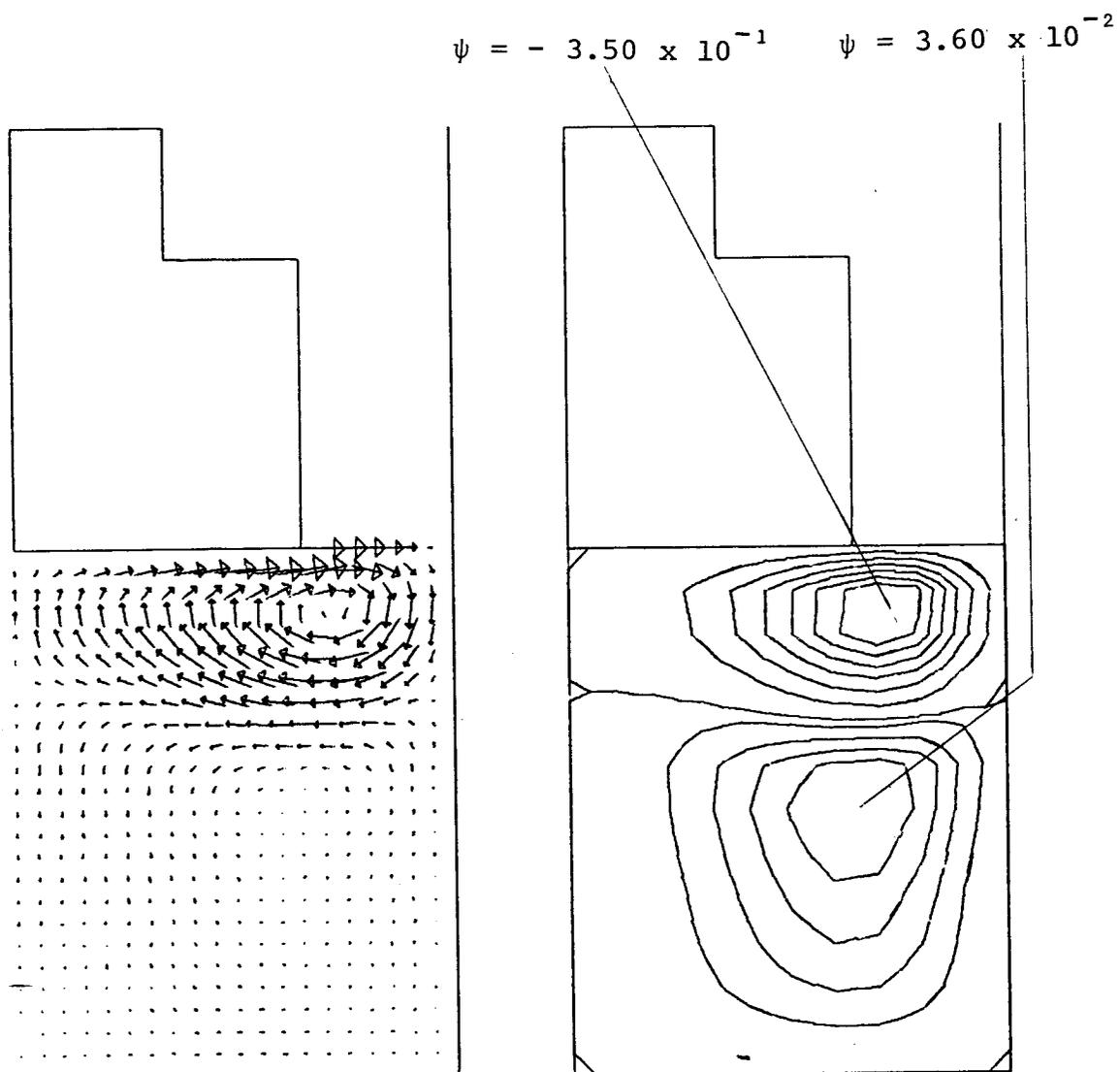


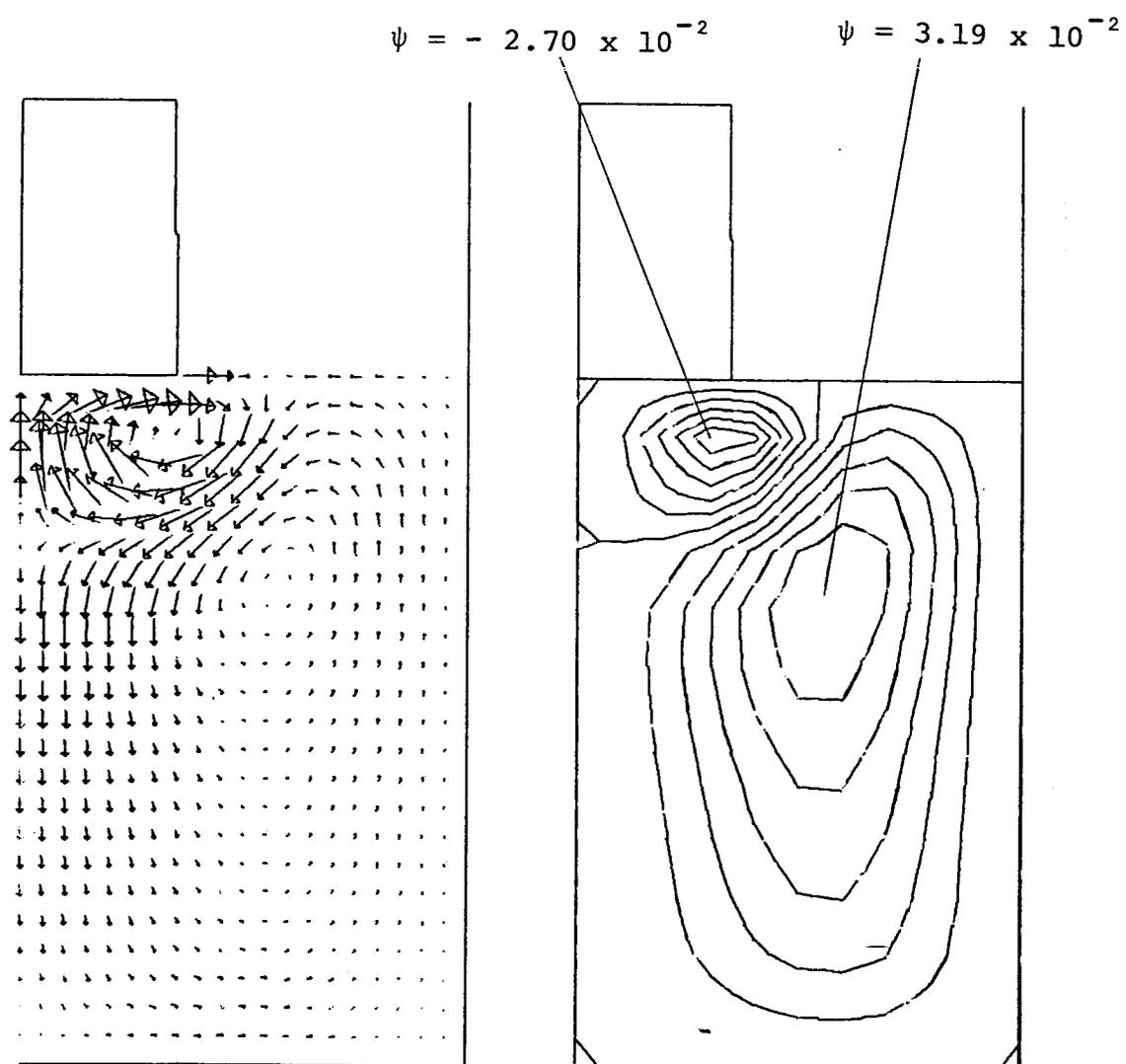
Figura 6.14 - Simulação Numérica para Silício



LIQ. - SILICIO
 WS = -10 RPM
 WC = 2 RPM

LINHAS DE CORRENTE
 ALT. FLUIDO = 3.5 CM
 LARG. CRISTAL = 1.885 CM

Figura 6.15 - Simulação Numérica para Silício



LIQ. - SILICIO
WS= 10 RPM
WC=-2 RPM

LINHAS DE CORRENTE
ALT. FLUIDO = 4.5 CM

Figura 6.16 - Simulação Numérica para Silício

Tabela VI.2 - Parâmetros Obtidos da Simulação Numérica para Silício

FIGURA	ω_C (RPM)	ω_S (RPM)	Re _C	Re _S	Re	V _{max} (cm/s)	ψ_{max} cm ³ /s	ψ_{min} cm ³ /s
6.1	5	45	175	1585	1410	3.678	0.459	- 0.821
6.2	4	30	141	1057	916	0.605	3.5×10^{-3}	- 0.175
6.3	4	-30	141	-1057	1198	13.076	2.016	- 0.911
6.4	4	-22	141	-774	915	0.346	6.26×10^{-2}	- 8.09×10^{-2}
6.5	2	-11	71	-387	458	0.151	3.42×10^{-2}	- 3.27×10^{-2}
6.6	2	10	71	353	282	0.164	0.0	- 5.56×10^{-2}
6.7	2	10	71	353	282	0.163	0.0	- 5.48×10^{-2}
6.8	2	10	71	353	282	0.246	0.0	- 0.124
6.9	2	10	71	353	282	0.143	0.0	- 5.04×10^{-2}
6.10	10	2	353	71	282	0.144	2.69×10^{-2}	- 1.31×10^{-3}
6.11	2	-10	71	-353	424	0.126	3.19×10^{-2}	- 2.69×10^{-2}
6.12	2	-10	71	-353	424	0.134	3.03×10^{-2}	- 2.45×10^{-2}
6.13	2	-10	71	-353	424	0.130	2.25×10^{-2}	- 2.93×10^{-2}
6.14	2	-10	71	-353	424	0.236	4.24×10^{-2}	- 7.46×10^{-2}
6.15	2	-10	71	-353	424	0.336	3.60×10^{-2}	- 3.50×10^{-1}
6.16	-2	10	-71	353	424	0.126	3.19×10^{-2}	- 2.70×10^{-2}
6.17	10	-2	353	- 71	424	0.234	3.69×10^{-2}	- 1.81×10^{-3}
6.18	10	-10	353	-353	706	0.297	5.23×10^{-2}	- 2.65×10^{-3}

cutida para a Figura 6.10. Na Figura 6.18, a igualdade nos módulos das velocidades angulares (porém a velocidade relativa é bem maior que nos casos anteriores) não é suficiente para a criação da célula de estagnação em torno do cristal e a mesma situação da Figura 6.17 é observada. Com relação à incorporação de dopantes e impurezas, a discussão para as Figuras 6.17 e 6.18 é análoga à feita para as Figuras anteriores.

Tabela VI.3 - Resumo das Discussões em Relação à Qualidade do Silício obtidos da Simulação Numérica.

Legenda ^{*(1)} + → melhoria de propriedade no cristal (distribuição radial mais homogênea ou concentração de oxigênio (ou impurezas em geral) mais baixa).

— → cristal com tendência à pior qualidade.

0 → difícil previsão à partir dos dados disponíveis.

Continuação... Tabela VI.3

FIGURA	ω_c (RPM)	ω_s (RPM)	MODIFICAÇÃO DIMENSÕES ^{*(2)}	EFEITOS	
				DISTRIBUIÇÃO RADIAL DOPANTES	CONCENTRAÇÃO OXIGÊNIO
6.6	2	10	—	boa	ruim
6.7	2	10	h = 3.5 cm	0	0
6.8	2	10	h = 3.5 cm a = 1.45 cm	0	—
6.9	2	10	h = 2.0 cm	—	0
6.10	10	2	—	ruim	boa
6.11	2	-10	—	boa	boa
6.12	2	-10	h = 3.5 cm	0	0
6.13	2	-10	h = 2.0 cm	0	—
6.14	2	-10	h = 3.5 cm a = 1.45 cm	+	—
6.15	2	-10	h = 3.5 cm a = 1.885 cm	0	—
6.17	10	-2	—	ruim	boa
6.18	10	-10	—	ruim	boa

*(1) → a legenda é referente à coluna de efeitos onde os símbolos são colocados sempre em relação à Figura imediatamente acima, que possui a lacuna preenchida com palavras.

*(2) → dimensões originais: raio cristal (a) = 1.015 cm

radio cadinho (b) = 2.9 cm

altura fluido (h) = 4.5 cm

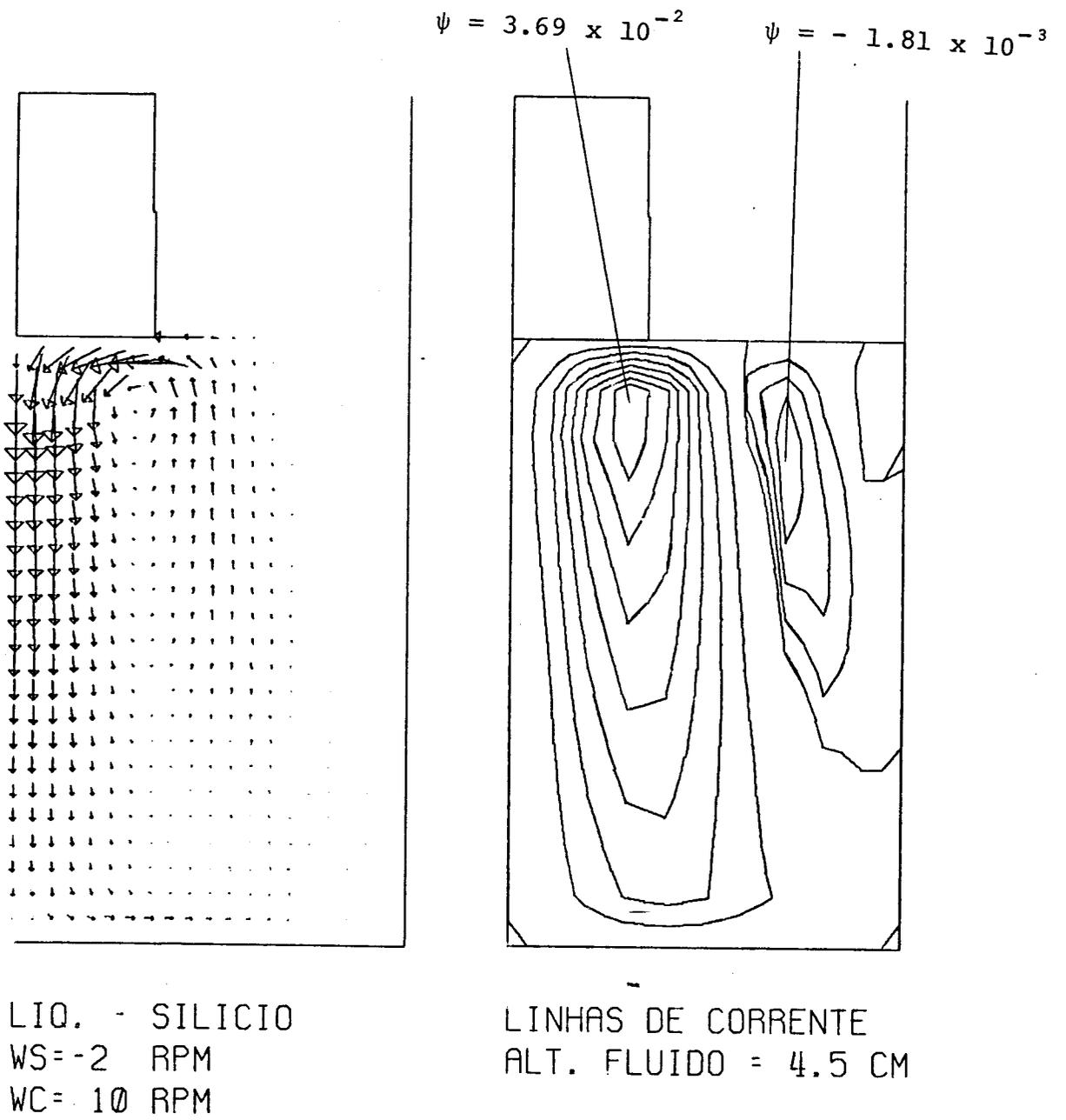


Figura 6.17 - Simulação Numérica para Silício

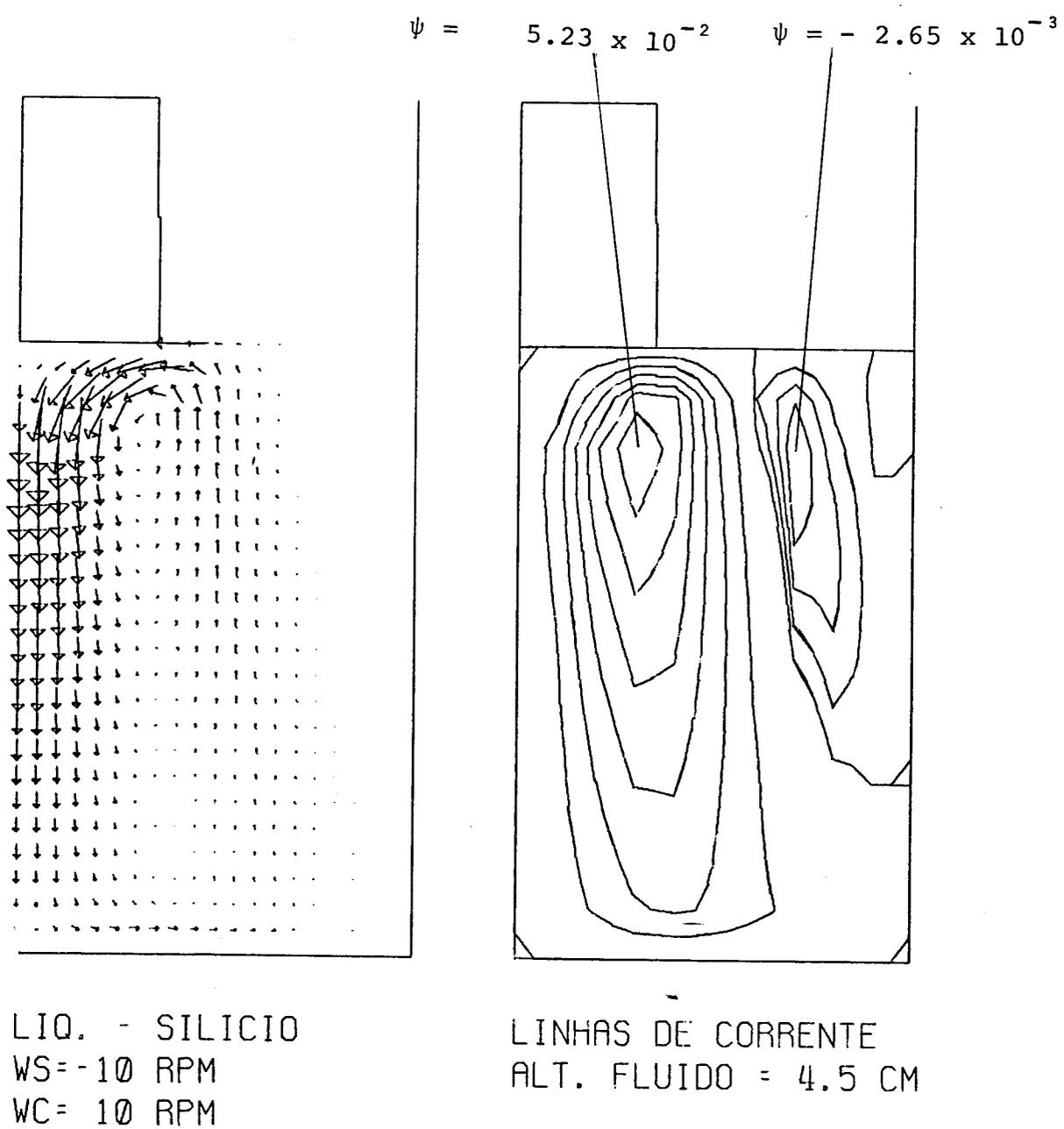


Figura 6.18 - Simulação Numérica para Silício

CONCLUSÃO

Os resultados obtidos fornecem um modelo do escoamento na fase líquida. A partir deste modelo pode-se, a princípio, partir para a obtenção de Silício com uma melhor qualidade nos laboratórios de Crescimento de Cristais do Instituto de Física e Química de São Carlos (I.F.Q.S.C.). É claro que isto só pode ser afirmado com certeza, quando, a partir de nossos dados, o Silício for crescido e caracterizado. Além disso, este trabalho pretende contribuir para o desenvolvimento de alta tecnologia de Silício no país.

Discutir o quão eficiente é o método empregado ou quão confiáveis são os resultados obtidos não é simplesmente uma questão de suporte matemático da Teoria de Elementos Finitos, mas também de comprovação experimental. Paralelo à Simulação Numérica, desenvolve-se atualmente no I.F.Q.S.C. um programa de simulação experimental para o estudo da convecção forçada. Esperamos que, em breve, com os resultados desta simulação, seja possível a comparação de dados numéricos e experimentais e a criação de um modelo com um grau ainda maior de confiabilidade.

Assim, esta seria uma etapa em direção a um conhecimento aprofundado da fase líquida do crescimento de Silício pelo método Czochralski. É claro que este trabalho pode ser melhorado. Um próximo passo seria a incorporação do balanço de energia que deveria ser resolvido simultaneamente aos balanços de massa e quantidade de movimento, e a etapa posterior seria a incorporação da variável tempo. A partir de que passemos a estudar o estado transiente, podem ser previstas as instabilidades que alteram os perfis de velocidade e temperatura, mesmo

com um regime praticamente estabelecido.

A desconsideração da hipótese de axissimetria, que poderia ser uma nova etapa, já tem sido feita por alguns pesquisadores^{35,36}, porém, passar a estudar o fluido tridimensionalmente exigiria o uso de computadores de maior capacidade e mais velozes. Esperamos que com o crescente desenvolvimento da indústria eletrônica, torne-se possível para a universidade, adquirir novos equipamentos a custos cada vez mais baixos, e com isso este trabalho seja possível em São Carlos.

APÊNDICE ITEOREMA DE TAYLOR-PROUDMAN - O FLUIDO EM ROTACÃO

Escrevendo-se os balanços de massa e quantidade de movimento numa forma vetorial, usando adimensionais³⁷, em relação a um sistema de coordenadas rodando com velocidade angular constante:

$$\frac{\partial}{\partial t^*} \vec{V}^* + \epsilon \vec{V}^* \cdot \nabla \vec{V}^* + 2 \hat{k} \times \vec{V}^* = -\nabla p^* - E \nabla \times \nabla \times \vec{V}^* \quad (\text{I.1})$$

$$\nabla \cdot \vec{V}^* = 0 \quad (\text{I.2})$$

onde: \vec{V}^* - vetor velocidade adimensional ($= \vec{V}/U$, U - velocidade de relativa)

\hat{k} - vetor unitário na direção z

p^* - pressão adimensional ($p/\Omega UL \rho$, Ω - velocidade angular, L - dimensão característica, ρ - densidade)

t^* - tempo adimensional ($t \Omega$)

∇ - operador $L \cdot \left(\frac{\partial}{\partial x} \hat{i} + \frac{\partial}{\partial y} \hat{j} + \frac{\partial}{\partial z} \hat{k} \right)$ (em coordenadas cartesianas)

E - número de Ekman ($= \nu/\Omega L^2$)

ϵ - número de Rossby ($= U/\Omega L$)

O número de Ekman é uma estimativa grosseira de como as forças viscosas se comparam as forças de Coriolis, e é o inverso do número de Reynolds. O número de Rossby, uma relação da aceleração convectiva para as forças de Coriolis, fornece uma estimativa da importância dos termos não-lineares.

O número de Ekman que multiplica os termos mais altamente diferenciados em (I.1), quando muito pequeno, torna-se um critério formal para a existência de camadas-limite em algum lugar no domínio físico. É bem conhecido que finas camadas-limite são localizadas em torno das superfícies de contorno e são regiões onde a velocidade tangencial é ajustada para seu valor na parede pela viscosidade. Porém, camadas viscosas podem ocorrer também no seio do fluido para balancear qualquer efeito que tenda a produzir qualquer descontinuidade no perfil de velocidades. Uma concentração da ação viscosa em estreitas camadas significa que em algum lugar o fluido comporta-se de uma maneira inviscida, i. é, $E = 0$. Existem também camadas-limite "inerciais". O critério matemático presente é quando $E = 0$, ϵ multiplica os mais altamente diferenciados termos. Para $0 < E \ll \epsilon \ll 1$ duas camadas limite se desenvolverão com uma larga camada inercial contendo uma sub-camada viscosa mais fina.

Considerando o caso simples da redução da teoria geral para o caso em que o movimento é lento $\epsilon \rightarrow 0$, estacionário $\frac{\partial \vec{V}}{\partial t} = 0$ e inviscido, $E = 0$, a equação (I.1) torna-se:

$$2 \hat{k} \times \vec{V} = - \nabla p \quad (I.3)$$

É consequência imediata de (I.3) que:

$$\frac{\partial p}{\partial z} = 0 \quad (I.4)$$

O rotacional aplicado a equação (I.3) fornece:

$$\nabla \times (\hat{k} \times \vec{V}) = - \nabla \times \nabla p = 0 \quad (I.5)$$

após algumas passagens:

$$\nabla \times (\hat{k} \times \vec{V}) = (\hat{k} \cdot \nabla) \vec{V} - (\nabla \cdot \vec{V}) \hat{k} = 0 \quad (\text{I.6})$$

Usando (I.2), temos o resultado conhecido como Teorema de Taylor Proudman:

$$(\hat{k} \cdot \nabla) \vec{V} = 0 \quad (\text{I.7})$$

Portanto, a velocidade de uma partícula deve ser independente da coordenada medida no eixo de rotação Z , tal que:

$$\vec{V} = \vec{V}(x, y)$$

Desta forma, desde que toda partícula em uma coluna vertical de fluido têm a mesma velocidade, o pilar inteiro move-se como um elemento de fluido simples alongado verticalmente. Uma coluna de um dado comprimento, estendendo-se aos contornos sólidos de ambos os lados, e restringida a manter o mesmo comprimento conforme ela roda.

APÊNDICE IIO MÉTODO VARIACIONAL E O ESPAÇO DE HILBERT

Espaço de Funções - série de funções onde certas propriedades são definidas. Cada função depende de uma série de variáveis cujos intervalos são definidos. No caso de espaço-função de Hilbert (H), as propriedades são:

1. Linear - u e $v \in H \rightarrow (u + v)$ e au , $a = \text{cte}$ também pertencem.

2. A operação produto escalar ou produto interno ($\langle u, v \rangle$) é definida e aplicável sobre a série:

$$\text{- para funções reais: } \langle u, v \rangle = \int_D u \cdot v \, dD$$

3. O produto escalar, pode ser mostrado, ter as seguintes propriedades:

$$\text{a) } \langle u, v \rangle = \langle v, u \rangle$$

$$\text{b) } \langle (a_1 u_1 + a_2 u_2), v \rangle = a_1 \langle u_1, v \rangle + a_2 \langle u_2, v \rangle$$

$$\text{c) } \langle u, u \rangle \geq 0 ; \langle u, u \rangle = 0 \iff u = 0$$

- A equação de campo a ser resolvida (problema de equilíbrio - independente do tempo)

$$Au = f \quad (\text{II.1})$$

u - sujeita às condições de contorno impostas no problema.

u e f - pertencem a H

u pertence a M - um subespaço de Hilbert, que satisfaz:

- a) é suficientemente diferenciável para que Au tenha sentido, isto é, u pertence ao campo de definição de A ($u \in D_A$)
- b) satisfaz as condições de contorno do problema.

Nem todos os problemas da forma (II.1) podem ser considerados pelo método variacional. Três restrições são impostas ao operador A :

a) A é auto-adjunto: $\langle Au, v \rangle = \langle u, Av \rangle \quad u, v \in D_A$

b) A é definida-positiva: $\langle Au, u \rangle \geq 0$;
 $\langle Au, u \rangle = 0 \iff u = 0$

c) A é um operador linear:

$$A(au_1 + bu_2 + \dots + nu_n) = a Au_1 + b Au_2 + \dots + n Au_n$$

- Se A é limitada inferiormente: $\langle Au, u \rangle \geq \gamma^2 \langle u, u \rangle$, γ - real, então a solução de (II.1) existe para f arbitrário. Se é positivo-definido então só se pode garantir que se a solução existe, ela é única. Porém isto é suficiente, já que a existência é esperada por argumentos físicos e o que importa é se ela é ou não solução única. A prova da unicidade

- da solução é consequência de A ser definido-positivo.

Um funcional é definido para a série M, se cada $u \in M$, quando operado pelo funcional gera um número. Para o caso presente:

$$F(u) = \frac{1}{2} \langle Au, u \rangle - \langle u, f \rangle \quad (\text{II.2})$$

minimizado para u_0 (solução de II.1):

$$A u_0 = f \quad (\text{II.3})$$

então:

$$F(u) = \frac{1}{2} \langle Au, u \rangle - \langle u, A u_0 \rangle \quad (\text{II.4})$$

fazendo-se o seguinte procedimento:

$$F(u) = \frac{1}{2} \langle Au, u \rangle - \langle u, A u_0 \rangle + \frac{1}{2} \langle A u_0, u_0 \rangle - \frac{1}{2} \langle A u_0, u_0 \rangle \quad (\text{II.5})$$

e utilizando as propriedades acima definidas, chega-se a:

$$F(u) = \frac{1}{2} \langle A(u - u_0), (u - u_0) \rangle - \langle A u_0, u_0 \rangle \quad (\text{II.6})$$

existe um mínimo para $u = u_0$ (A é definido-positivo):

$$F_{\min} = - \langle A u_0, u_0 \rangle \quad (\text{II.7})$$

Portanto a minimização de (II.2) leva a solução u_0 de (II.1) se tal solução (única) existe.

Se uma função admissível u_0 pode ser determinada que faz (II.2) estacionária, a questão que aparece é se esta é a mesma função que minimiza (II.2), isto é, a solução de (II.1).

Considerando a função:

$$u = u_0 + \varepsilon \eta \quad (\text{II.8})$$

onde: u - função admissível que faz F estacionário

η - função arbitrária da classe de funções admissíveis.

ε - número real arbitrário.

Substituindo no funcional:

$$F(u) \Rightarrow F(u_0 + \varepsilon \eta) \Rightarrow F(\varepsilon) \quad (\text{II.9})$$

Derivando:

$$F'(\varepsilon) = \frac{dF}{d\varepsilon} = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{F(u_0 + \varepsilon \eta) - F(u_0)}{\varepsilon} \quad (\text{II.10})$$

utilizando a propriedade de A auto-adjunta:

$$F'(\varepsilon) = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{2 \varepsilon \langle (Au_0 - f), \eta \rangle + \varepsilon^2 \langle A\eta, \eta \rangle}{\varepsilon} \quad (\text{II.11})$$

no limite:

$$F'(\varepsilon) = 2 \langle (Au_0 - f), \eta \rangle \quad (\text{II.12})$$

Para F ser estacionária a $\varepsilon = 0$:

$$F'(\varepsilon) \Big|_{\varepsilon = 0} = F'(0) = 0 \quad (\text{II.13})$$

$$\langle (Au_0 - f), \eta \rangle = 0 \quad (\text{II.14})$$

Para η arbitrário:

$$A u_0 - f = 0 \quad (\text{II.15})$$

que mostra que u_0 é uma solução de (II.1). Então a função que corresponde ao valor estacionário de (II.2) é a solução (única) de (II.1) se tal solução existe. Além disso, o valor estacionário do funcional é também um mínimo.

BIBLIOGRAFIA

- 01 - ZULEHNER, W. - J. Crystal Growth, 65, 189 (1983).
- 02 - ZULEHNER, W.; HUBER, D. - "Czochralski - Grown Silicon"
in: Silicon Chemical Etching, ed. J. Grabmaier,
Springer-Verlag, Berlin-Heidelberg, 1982.
- 03 - CARRUTHERS, J.R. - "Thermal Convection Instabilities Re-
levant to Crystal Growth from Liquids" in: Preparation
and Properties of Solid State Materials, vol. 3. ed.
W. R. Wilcox e R.A. Lefever, Marcel Dekker, Inc. New
York, 1977.
- 04 - SCHLICHTING, H. - Boundary Layer Theory, Pergamon Press,
London - 1955.
- 05 - BENNET, C.O.; MYERS, J.E. - Fenômenos de Transporte, trad.
E.W. Leser, McGraw-Hill, São Paulo, 1978.
- 06 - JAKOB, M. - Heat Transfer, vol. 1, pag. 444, John Wiley &
Sons, Inc., New York, 1979.
- 07 - MIHELICIC, M.; SCHROECK-PAULI, C.; WINGERATH, K.; WENZL,
W.; UELHOFF, W.; VAN DER HART, A. - J. Crystal Growth,
53, 337 (1981).
- 08 - MIHELICIC, M.; SCHROECK-PAULI, C.; WINGERATH, K.; WENZL,
W.; UELHOFF, W.; VAN DER HART, A. - J. Crystal Growth,
57, 300 (1982).

- 09 - CARRUTHERS, J.R.; NASSAU, K. - J. Appl. Phys. 39 (11),
5205 (1968).
- 10 - HIDE, R.; TITMAN, C.W. - J. Fluid Mech. 29, 39 (1967).
- 11 - JONES, A.D.W. - J. Crystal Growth 61, 235 (1983).
- 12 - CARRUTHERS, J.R. - J. Electrochem. Soc. 114, 959 (1967).
- 13 - PFANN, W.G. - Metallurg. Rev. 2 (5), 297 (1957).
- 14 - BURTON, J.A.; PRIM, R.C.; SLICHTER, W.P. - J. Chem. Phys.
21, 187 (1953).
- 15 - FULLER, C.S.; DITZENBERGER, J.A.; HANNAY, N.B.; BUENLER,
C.S. - Phys.Rev. 96, 833 (1954).
- 16 - FULLER, C.S.; LOGAN, R.A. - J. Appl. Phys. 28, 1427 (1957).
- 17 - KAISER, W.; FRISH, H.L.; REISS, H. - Phys. Rev. 112 (5),
1546 (1958).
- 18 - KANAMORI, A.; KANAMORI, M. - J. Appl. Phys. 50, 8095 (1979).
- 19 - KIMERLING, L.C.; LEAMY, H.J.; PATEL, J.R. - Appl. Phys.
Lett., 30 (5), 217 (1977).
- 20 - SCHULZ, M.; WEISS, H. ed. - "Technology of Si, Ge and SiC"
in: Crystal and Solid State Physics, vol.17C, Springer
- Verlag Berlin 1984.

- 21 - STRANG, G.; FIX, G.J. - An Analysis of the Finite Element Method, Prentice Hall, Englewood Cliff, 1973.
- 22 - NORRIE, D.H.; DE VRIES, G. - The Finite Element Method, Academic Press, New York, 1973.
- 23 - WHITEMAN, J.R. ed. - The Mathematics of Finite Elements and Applications II, Academic Press, New York, 1976.
- 24 - ZINKIEWICZ, O.C. - The Finite Element Method in Engineering Science, Mc Graw-Hill, London, 1971.
- 25 - BUTKOV, E. - Física Matemática, trad. J. Pitombeira e F. Carvalho, Guanabara Dois, 1978.
- 26 - COIMBRA, A.L. - Lições de Mecânica do Contínuo, Edgard Blücher - USP, São Paulo, 1978.
- 27 - SÉDOV, L. - Mécanique des Milieux Continus, Editions Mir, Moscou, 1975.
- 28 - ZAGO, J.V. - Tese de Livre-Docência, I.C.M.S.C. - U.S.P., 1982.
- 29 - CROCHET, M.J.; WOUTERS, P.J.; GEYLING, F.T.; JORDAN, A. S. - J. Crystal Growth 65, 153, (1983).
- 30 - KOBAYASHI, N. - J. Crystal Growth, 43, 357 (1978).
- 31 - HARLOW, F.H.; WELCH, J.E. - Phys. Fluids 8, 2182 (1965).

- 32 - PERRY, R.; CHILTON, C. - Chemical Engineer's Handbook, 5th ed., McGraw - Hill, London, 1973.
- 33 - KODERA, H. - Jpn. J. Appl. Phys. 2, 212 (1963).
- 34 - GLASOV, V.M.; CHIZHEVSKAYA, S.N.; GLAGOLEVA, N.N.- Liquid Semiconductors, Plenum Press, New York, 1969.
- 35 - MIHELICIC, M.; WINGERATH, K.; PIRRON, C. - J. Crystal Growth 69, 473 (1984).
- 36 - MIHELICIC, M.; WINGERATH, K. - Three-Dimensional Simulations of the Czochralski Bulk Flow in a Stationary Transverse - and a Vertical Magnetic Field: Effects on the Asymmetry of the Flow and Temperature Distribution in the Si-Melt, a ser publicado (J. Crystal Growth).
- 37 - GREENSPAN, H.P. - The Theory of Rotating Fluids, Cambridge University Press, Cambridge, (1968).
- 38 - MIHELICIC, M.; WINGERATH, K. - J. Crystal Growth, 71 , 163 (1985).