



MINISTÉRIO DA CIÊNCIA E TECNOLOGIA
INSTITUTO NACIONAL DE PESQUISAS ESPACIAIS

INPE-14606-TDI/1186

SIMULAÇÃO DE TRANSIENTES ELÉTRICOS DURANTE PROCESSO DE SOLDA ANÓDICA

Fabiana Ferreira Paes

Dissertação de Mestrado do Curso de Pós-Graduação em Computação Aplicada,
orientada pelo Dr. Maurício Fabbri, aprovada em 19 de outubro de 2006.

INPE
São José dos Campos
2007

Publicado por:

esta página é responsabilidade do SID

Instituto Nacional de Pesquisas Espaciais (INPE)

Gabinete do Diretor – (GB)

Serviço de Informação e Documentação (SID)

Caixa Postal 515 – CEP 12.245-970

São José dos Campos – SP – Brasil

Tel.: (012) 3945-6911

Fax: (012) 3945-6919

E-mail: pubtc@sid.inpe.br

**Solicita-se intercâmbio
We ask for exchange**

Publicação Externa – É permitida sua reprodução para interessados.



MINISTÉRIO DA CIÊNCIA E TECNOLOGIA
INSTITUTO NACIONAL DE PESQUISAS ESPACIAIS

INPE-14606-TDI/1186

SIMULAÇÃO DE TRANSIENTES ELÉTRICOS DURANTE PROCESSO DE SOLDA ANÓDICA

Fabiana Ferreira Paes

Dissertação de Mestrado do Curso de Pós-Graduação em Computação Aplicada,
orientada pelo Dr. Maurício Fabbri, aprovada em 19 de outubro de 2006.

INPE
São José dos Campos
2007

519.872 : 621.791

Paes, F. F.

Simulação de transientes elétricos durante processos de solda anódica / Fabiana Ferreira Paes. – São José dos Campos: INPE, 2006.

95p. ; (INPE-14606-TDI/1186)

1.Solda anódica. 2.Solda eletrostática. 3.Camada de depleção. 4.Condições de contorno. 5.Método das diferenças finitas. I.Título.

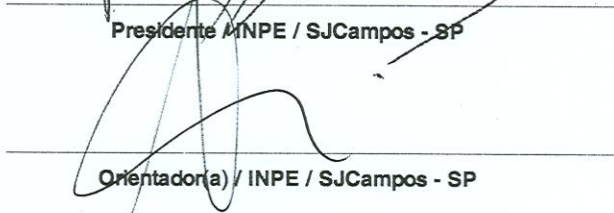
Aprovado (a) pela Banca Examinadora
em cumprimento ao requisito exigido para
obtenção do Título de **Mestre** em
Computação Aplicada

Dr. Fernando Manuel Ramos



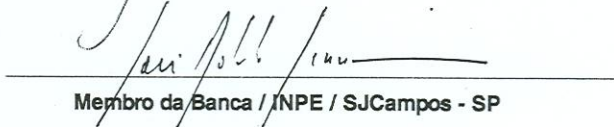
Presidente / INPE / SJCampos - SP

Dr. Maurício Fabbri



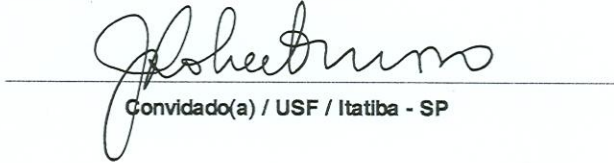
Orientador(a) / INPE / SJCampos - SP

Dr. José Roberto Sbragia Senna



Membro da Banca / INPE / SJCampos - SP

Dr. João Roberto Moro



Convidado(a) / USF / Itatiba - SP

Aluno (a): **Fabiana Ferreira Paes**

São José dos Campos, 19 de outubro de 2006

“O rio atinge seus objetivos porque aprendeu a contornar obstáculos.”

LAO-TSÉ (séc. 5 a.C.), filósofo chinês

*A meus pais,
SEBASTIÃO PEREIRA PAES e
ANA DIVINA FERREIRA PAES.*

AGRADECIMENTOS

Ao nosso maravilhoso Deus pela constante presença em minha vida, abençoando-me com momentos alegres e ensinando-me a tirar proveitos positivos dos momentos tristes.

À Fundação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior - CAPES, pelo auxílio financeiro de dois anos de bolsa de mestrado.

Ao Instituto Nacional de Pesquisas Espaciais – INPE, pela oportunidade de estudos e utilização de suas instalações.

Aos professores do curso de computação aplicada – CAP pelos conhecimentos compartilhados.

Ao meu orientador Prof. Dr. Maurício Fabbri, pelo conhecimento passado, e pela orientação, paciência e apoio na realização deste trabalho.

Aos meus amigos pelo apoio na realização deste trabalho: Andriana, Joice, Joelma, José, Kellen, Renata, Rodolfo, Sávio e Wantuir.

A minha família, que me deu todo o apoio e carinho para que eu pudesse completar mais esta etapa da minha vida.

Aos membros da banca examinadora pelas construtivas e valiosas sugestões, para o aprimoramento do trabalho.

Ao meu namorado e eterno amigo Júlio César pelo seu amor, amizade, paciência, carinho, afeto e compreensão de um homem de caráter admirável.

A todos que contribuíram direta e indiretamente para que este trabalho fosse concretizado.

RESUMO

Este presente trabalho descreve um processo de discretização numérica da equação não-linear do transporte iônico que rege a camada de depleção para o crescimento do óxido de silício durante a solda eletrostática (solda anódica) silício-vidro (Si-G) na ausência do transporte difusivo com evolução no tempo. A equação da continuidade é resolvida usando uma discretização em diferenças finitas com fronteira móvel, que toma espécies distintas de ânions e cátions no interior do vidro. O oxigênio que alimenta a matriz do silício, também é modelado por uma suposição conveniente sobre a continuidade da carga e sua mobilidade. A partir da suposição que o oxigênio necessário para a solda é suprido da camada de depleção no vidro, os resultados da espessura do óxido de silício aproximaram-se razoavelmente dos valores observados nos processos práticos de soldas. O esquema numérico emprega mobilidades independentes no interior do vidro e do óxido, e pode tratar modelos não-lineares para o campo elétrico.

NUMERICAL SIMULATION OF OXIDE LAYER GROWTH DURING ANODIC BONDING

ABSTRACT

The present work describes a stable numeric discretization of the ionic non-linear transport equations that governs the depletion layer dynamics for oxide growth during electrostatic bonding (anodic bonding) glass-silicon, in the absence of carrier diffusion. The continuity equation is solved by a moving-boundary stable finite-difference discretization, which takes into account distinct anion and cation species within the glass. Oxygen feeding into the silicon matrix is also modeled by suitable conditions on charge continuity and mobility drift. On the assumption that the oxygen required for bonding is supplied from the depleted glass layer, the resulting oxide thickness agrees to the values which are observed in practical bonding procedures. The numerical scheme allows for independent mobilities in the glass and oxide regions, and can handle high non-linear models for electric field.

SUMÁRIO

Pág.

LISTA DE FIGURAS

LISTA DE TABELAS

LISTA DE SIGLAS E ABREVIATURAS

LISTA DE SÍMBOLOS

CAPÍTULO 1 - INTRODUÇÃO	31
1.1 Conceitos Básicos.....	31
1.2 Contexto Histórico.....	33
1.3 Organização do Trabalho.....	37
CAPÍTULO 2 - MATERIAIS E METODOLOGIA	39
2.1 Materiais utilizados no processo de solda anódica.....	39
2.1.1 Vidro.....	39
2.1.2 Silício.....	40
2.2 Equações governantes para o processo de solda anódica.....	41
2.2.1 Equação da conservação de massa (ou da continuidade).....	41
2.2.2 Equação de Gauss-Poisson.....	42
2.2.3 Potencial elétrico.....	42
2.3 Modelo eletrostático da solda anódica.....	43
2.3.1 Transferência de carga iônica no interior do vidro.....	44
2.3.2 Transferência de carga iônica no interior da camada de óxido.....	48
CAPÍTULO 3 - MODELAGEM COMPUTACIONAL	49
3.1 Métodos Numéricos.....	49
3.2 Método das Diferenças Finitas.....	51
3.2.1 Fundamentos do Método das Diferenças Finitas.....	51
3.2.1.1 Propriedades das Fórmulas de Diferenças Finitas.....	52
3.3 Formulações Explícita e Totalmente Implícita.....	54
3.3.1 Formulação Explícita.....	54
3.3.2 Formulação Totalmente Implícita.....	56
3.3.2.1 Método de Thomas para Sistemas Tridiagonais.....	62
3.4 Forma Adimensional das Equações.....	63
3.5 Esquema Numérico no Procedimento da Solda Anódica.....	64
3.6 Renormalização da Malha Espacial.....	66
3.7 Consistência, Estabilidade e Convergência.....	67
3.7.1 Consistência.....	68
3.7.2 Estabilidade.....	69
3.7.3 Convergência.....	72
CAPÍTULO 4 - RESULTADOS	75
4.1 Fluxo de Corrente.....	76
4.2 Campo Elétrico.....	79
4.3 Densidade de Carga.....	81
4.4 Camada de Óxido.....	82

4.5 Camada de Depleção	83
CAPÍTULO 5 - CONCLUSÕES E COMENTÁRIOS.....	87
CAPÍTULO 6 - REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS.....	89
APÊNDICE A	93

LISTA DE FIGURAS

1.1: Esquema de um aparato para a solda anódica silício-vidro (Si-G).	32
1.2: Fluxo de corrente normalizado no tempo. Fonte:Albaugh, (1991).	34
1.3: Resultados experimentais do fluxo de corrente durante a solda anódica vidro-silício (círculos) Albaugh, (1991) e curvas calculadas no modelo de Rios et al., (2000). Fonte: Albaugh, (1991) e Rios et al., (2000).	35
1.4: Fluxo de corrente durante a solda anódica vidro-silício, pontos experimentais (círculos) Albaugh, (1991) e curvas calculadas no modelo de Fabbri & Senna, (2004). Fonte: Albaugh, (1991) e Fabbri & Senna, (2004).	36
2.1: Esquema ilustrativo do fluxo de massa através das fronteiras de um elemento de fluido. Fonte: Fortuna, (2000)	41
2.2: Esquema da disposição dos eletrodos durante a solda semiconductor-vidro (Si-G). 43	43
2.3: As equações do transporte eletrostático e iônico são resolvidas no domínio $[-x_0, \Gamma]$. O deslocamento da frente da camada de depleção $\Gamma(t)$ segue o fluxo local de Na^+ . A região do vidro é neutra para $x > \Gamma$	45
2.4: Esquema ilustrativo da equação (2.6).....	45
2.5: Esquema do campo elétrico apresentado na equação (2.8)	46
2.6: Esquema do potencial no interior do vidro.....	47
3.1: Análises teóricas e ensaios experimentais. Fonte: Fortuna, (2000).	50
3.2: Esquema da formulação explícita.....	54
3.3: Ilustração do esquema utilizado no processo de deslocamento dos íons de oxigênio durante a solda anódica silício-vidro (Si-G) nos primeiros intervalos de tempo, apenas no interior do vidro.	55
3.4: Esquema da formulação implícita.	58
3.5: Ilustração do esquema utilizado no processo de deslocamento dos íons de oxigênio durante a solda anódica silício-vidro (Si-G) no interior do vidro e da camada de óxido, nos primeiros intervalos de tempo.....	59
3.6: Ilustração da renormalização da malha espacial no n-passo de tempo.	67
4.1: Fluxo de corrente adimensional em função do tempo. Os círculos são os pontos medidos por Albaugh (1991). As curvas são os resultados das simulações numéricas. A mobilidade dos cátions é fixada no valor $\mu_+ = 1$	77
4.2: Detalhes do fluxo de corrente adimensional em função do tempo. Os círculos são os pontos medidos por Albaugh (1991).	78
4.3: Resultados numéricos do campo elétrico na interface vidro-óxido durante o transiente anódico, em função da mobilidade dos ânions de oxigênio μ_- e da densidade relativa do óxido n_{ox} , em unidades dimensionais. O campo de ruptura do vidro Pyrex é aproximadamente 1.0×10^7 V/cm.....	80
4.4: Detalhes dos resultados numéricos do campo elétrico na interface vidro-óxido durante o transiente anódico, em função da mobilidade dos ânions de oxigênio μ_- e da densidade relativa do óxido n_{ox} , em unidades dimensionais.....	81
4.5: Densidade de carga dos íons de oxigênio adimensional em função das camadas de óxido de silício, depleção e início da neutra no tempo 90s.	82

4.6: Crescimento prognóstico da camada de óxido de silício no tempo, em unidades dimensionais.	83
4.7: Largura da camada de depleção calculada em função do tempo, em unidades dimensionais.	84
4.8: Detalhes da largura da camada de depleção calculada em função do tempo, em unidades dimensionais.	85
A.1: Esquema ilustrativo do fluxo de massa através das fronteiras de um elemento unidimensional.	93

LISTA DE TABELAS

4.1: Valores dimensionais dos parâmetros usados nas simulações numéricas.....	65
---	----

LISTA DE SIGLAS E ABREVIATURAS

Si	- Silício.
Glass	- Vidro.
Na ⁺	- Íons de Sódio.
O ⁻	- Íons de Oxigênio.
Na ₂ O	- Óxido de Sódio.
SiO ₂	- Óxido de Silício.
Si-G	- Silício-Vidro.
Si-O	- Silício-Óxido.
G-O	- Vidro-Óxido
TEM	- Microscopia Eletrônica de Transmissão

LISTA DE SÍMBOLOS

- ε - Constante dielétrica.
- T - Temperatura.
- ρ - Densidade de carga total.
- ρ_+ - Densidade de carga dos íons de sódio.
- ρ_- - Densidade de carga dos íons de oxigênio.
- $\bar{\rho}_i^0$ - Valor da densidade de carga no tempo t no intervalo da malha (i, i + 1).
- $\bar{\rho}_i^{n+1}$ - Valor da densidade de carga no tempo t + Δt no intervalo da malha (i, i + 1).
- ρ^* - Valor da densidade de carga total adimensional em um nó qualquer da malha (i, i + 1).
- $\bar{\rho}_{+,-}^*$ - Valor da densidade de carga dos íons de Na⁺ e O⁻ adimensional, respectivamente, no intervalo da malha (i, i + 1).
- $\bar{\rho}_x$ - Derivada espacial da densidade de carga
- $\bar{\rho}_t$ - Derivada temporal da densidade de carga
- $n_{+,-}$ - Conteúdo de sódio ou oxigênio no vidro.
- n_{0+} - Conteúdo inicial de sódio no vidro.
- L - Espessura do vidro.
- L^* - Espessura do vidro adimensional.
- E - Campo elétrico.
- E^* - Campo elétrico adimensional.
- E_i^n - Campo elétrico no intervalo temporal n e espacial i.
- J_+ - Fluxo de corrente de íons de sódio.
- J - Fluxo de corrente de íons de oxigênio.

- V_0 - Potencial elétrico total.
- V_a - Potencial elétrico em um ponto a qualquer.
- V_b - Potencial elétrico em um ponto b qualquer.
- V_g - Potencial elétrico no vidro.
- V_{ox} - Potencial elétrico na camada de óxido.
- Ω - Superfície
- Q_Ω - Quantidade de carga elétrica em Ω .
- Q_{sai} - Quantidade de carga elétrica que sai de um intervalo espacial qualquer.
- Q_{fica} - Quantidade de carga elétrica que fica de um intervalo espacial qualquer.
- Q_{tinha} - Quantidade de carga elétrica que tinha de um intervalo espacial qualquer.
- q - Densidade de carga no ponto x .
- ϵ_0 - Permissibilidade no vácuo.
- μ - Mobilidade do íon.
- μ_+ - Mobilidade dos íons de sódio.
- μ_- - Mobilidade dos íons de oxigênio.
- μ_{ox} - Mobilidade dos íons de oxigênio no óxido.
- n_{ox} - Valor da relação entre a densidade de carga de oxigênio no crescimento do óxido neutro e a densidade de carga livre de oxigênio no vidro
- Γ - Interface da camada de depleção.
- r - Resistividade iônica dos íons de Na^+ .
- l_D - Comprimento característico.
- τ - Tempo característico.
- x - Extremidade da camada de depletada.

- x_0 - Extremidade da camada de óxido.
- x^* - Extremidade da camada de depletada adimensional.
- x_0^* - Extremidade da camada de óxido adimensional.
- t - Tempo.
- t^* - Tempo adimensional.
- Δx - Deslocamento espacial da camada depletada.
- dx_0 - Deslocamento espacial da camada de óxido.
- Δt - Intervalo de tempo.
- α - Variável encontrada na discretização.
- $U(x)$ - Função no ponto genérico x
- U_x - Derivada de $U(x)$.
- U_i - Função no ponto x_i .
- u - Velocidade média do fluido.
- Φ - Fluxo elétrico que passa em Ω .

CAPÍTULO 1

INTRODUÇÃO

1.1 Conceitos Básicos

A microfabricação abrange processos de adicionar e retirar material, além de processos para modificação dos mesmos. Em relação à adição de materiais, podemos citar a solda. Os métodos que se destacam na solda são aqueles que conseguem unir dois materiais sem fundi-los e sem a utilização de adesivo líquido intermediário; ou seja, é feita por contato mecânico, e os mais eficientes para alcançar este tipo de adesão são as soldas direta e anódica.

A solda direta (“fusion bonding”) é obtida a partir do simples contato entre duas superfícies extremamente limpas. A limpeza, a ausência de rugosidade, a planicidade das superfícies são fatores determinantes no início do processo de adesão direta. Além da preparação das superfícies a serem aderidas, freqüentemente é usado um recozimento em altas temperaturas (por exemplo: 1000 °C na adesão Si-Si), para a obtenção da união permanente entre os materiais (Rios, 1999), o que dificulta trabalhar com este processo.

A solda eletrostática ou solda anódica ocorre em temperaturas entre 200 e 500 °C, e é baseada na migração dos cátions de sódio (Na^+) provenientes da dissociação de Na_2O no interior do vidro em direção ao pólo negativo, formando assim uma camada de depleção de íons de sódio na vizinhança da interface metal-vidro. As superfícies são inicialmente atraídas devido ao campo eletrostático alto, e subsequentemente soldadas pela formação de uma camada de óxido de silício na interface silício-vidro (Si-G). Neste tipo de adesão os materiais mais utilizados são metais ou semicondutores, aderidos a vidros. A tensão total aplicada é alta e constante (~1000V).

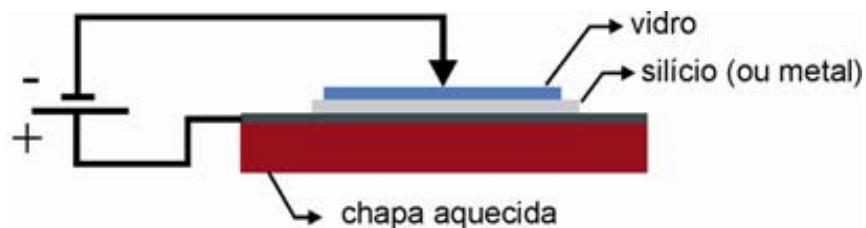


FIGURA 1.1: Esquema de um aparato para a solda anódica silício-vidro (Si-G).

O modelo numérico da solda anódica deve tratar do transporte de, pelo menos, duas espécies iônicas distintas no interior do vidro. Para o vidro comercial, que contém alta quantidade de sódio, os cátions Na^+ e os ânions O^{--} , migram em sentidos contrários no interior do vidro, e uma zona de depleção essencialmente neutra é formada perto da interface vidro-metal, onde os ânions de oxigênio que chegam constroem a solda através da oxidação do metal. Todo o processo leva menos do que um minuto.

O oxigênio necessário para a formação de óxido de silício na interface vidro-metal provém da umidade natural do vidro já existente antes da solda (Nitzsche et al., 1998) ou por ânions de oxigênio oriundos da região depletada do vidro (Carlson et al., 1972).

O trabalho de Helvoort et al., (2004) descreve a importância da oxidação do ânodo (por exemplo: silício), como etapa essencial da solda eletrostática, e proporciona uma ligação permanente e forte na junção silício-vidro. Esses autores ainda observam que apesar da grande importância de analisar a oxidação anódica, por meio de estudos e experimentos, há poucas pesquisas com este enfoque, pois é difícil detectar a camada de óxido de silício próxima ao vidro depletado de cátions. Além disso, modelos numéricos ainda não foram abordados.

O objetivo deste presente trabalho é desenvolver um modelo numérico detalhado para explicar o crescimento do óxido no processo da solda silício-vidro (Si-G), onde todas as espécies iônicas provêm exclusivamente da zona de depleção do vidro. Os resultados numéricos da espessura da camada de óxido de silício são comparados com as medidas recentes de Helvoort et al., (2004). E os resultados da corrente elétrica externa são comparados com os pontos experimentais de Albaugh, (1991).

1.2 Contexto Histórico

O processo de solda eletrostática também chamada solda anódica, teve início em 1969 com o trabalho pioneiro de G. Wallis e D. I. Pomerantz que propuseram a união de diferentes tipos de vidros em temperaturas abaixo do ponto de amolecimento (Vidro Pyrex: 812 °C), como por exemplo, sílica fundida e metais como titânio, ou semicondutores (tais como silício, germânio,...) impondo uma diferença de potencial entre os dois materiais a serem soldados. A junção aconteceu em 1 minuto aproximadamente, aplicando uma tensão total de 1000 V entre o vidro e o metal.

O processo proposto ganhou utilidade por ser desenvolvido em temperaturas inferiores aquelas utilizadas em solda por fusão térmica e também por não ser tão dependente do processo de limpeza e da planicidade das superfícies como o processo de solda direta (“fusion bonding”). É, portanto um processo que pode ser adicionado ao final de uma seqüência de microfabricação de dispositivos (Rios, 1999).

O trabalho de Albaugh, (1991) propôs um modelo teórico para o transiente de corrente durante a solda anódica silício-vidro (Si-G), e considerou a camada de vidro como um resistor e a camada de depleção anódica como um capacitor. A resistência do vidro foi determinada pela resistividade e pela geometria experimental e a capacitância da camada de depleção em função da área, da quantidade de carga transportada e da constante dielétrica do vidro.

Albaugh, (1991) também considerou os íons de sódio móveis e os de oxigênio fixos; com isso a camada de depleção que se formava com o tempo era negativamente carregada, e muito pequena comparada com as medidas experimentais. Nessas condições, o campo elétrico próximo à interface metal-vidro torna-se muito alto devido à alta densidade de cargas negativas, muito acima do campo de ruptura do vidro. Conseqüentemente, o fluxo de corrente decresce muito rápido comparado com os valores experimentais (Figura 1.2). Assim, o modelo em questão equivale às medidas experimentais para tempos pequenos, e sugere o transporte de muitos íons.

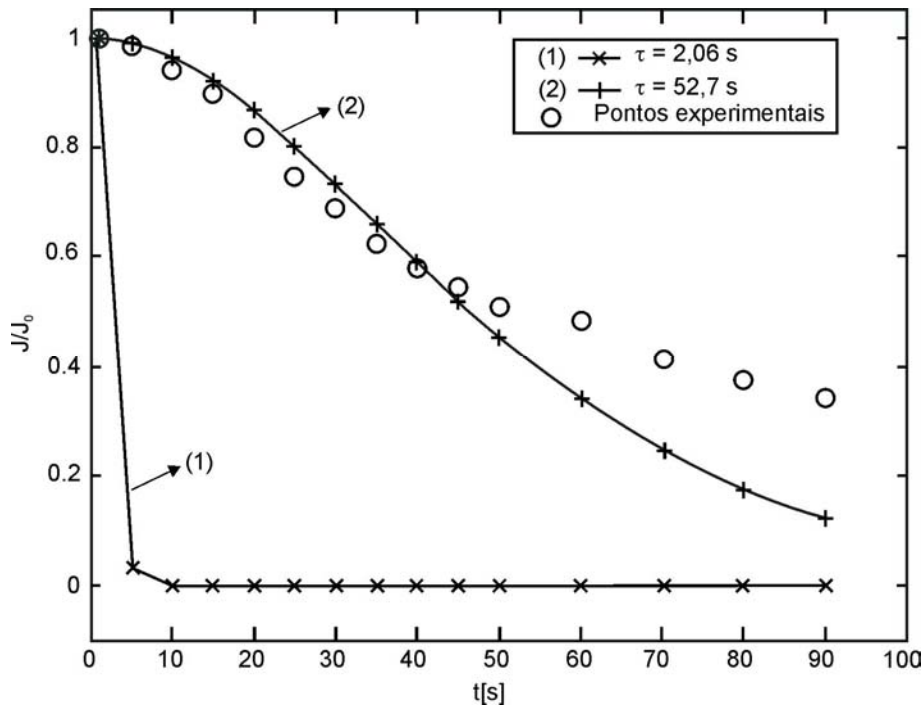


FIGURA 1.2: Fluxo de corrente normalizado no tempo.
 Fonte: Albaugh, (1991).

O trabalho de Rios et al, (2000) descreveu um modelo de evolução no tempo da camada de depleção e da corrente durante a solda anódica e introduziu um valor crítico para o campo elétrico, que causa o transporte de oxigênio no vidro. Esse trabalho permitiu a solução analítica das equações e considerou a distribuição total da tensão apenas dentro do vidro. Os resultados desse trabalho mostraram ser coerentes com o modelo proposto por Albaugh, (1991), ver Figura (1.3).

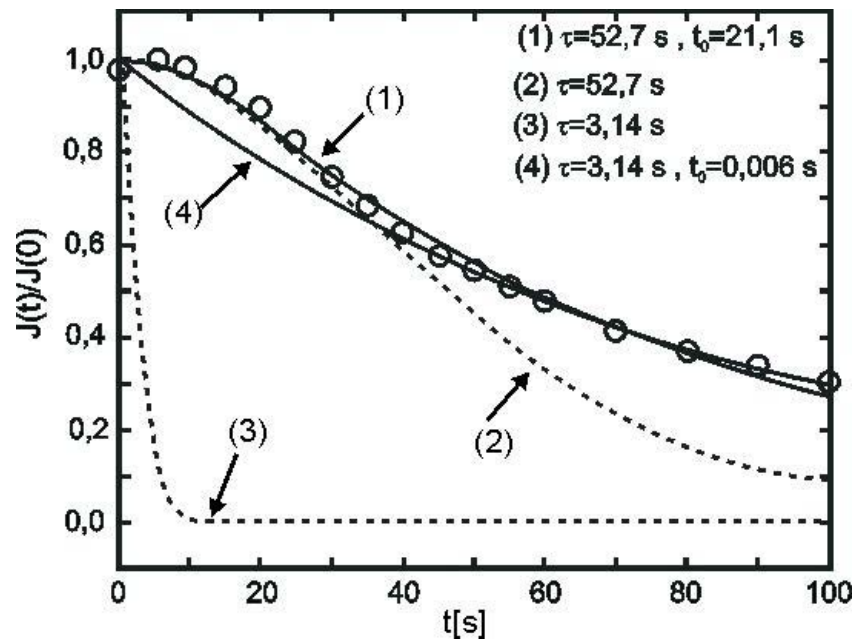


FIGURA 1.3: Resultados experimentais da solda anódica vidro-silício (círculos) Albaugh, (1991) e curvas calculadas no modelo de Rios et al., (2000).
 Fonte: Albaugh, (1991) e Rios et al., (2000).

Rios et al, (2000) englobaram o trabalho de Albaugh, (1991) para deslocar os íons de sódio e presumiram um valor crítico para o campo elétrico mover os íons de oxigênio. Entretanto, consideraram como infinita a mobilidade dos íons de oxigênio, a partir do campo crítico. Assim, obtiveram três regiões no vidro: neutra (perto do cátodo), apenas com íons de oxigênio e sem carga (perto do ânodo). Contudo, experimentalmente a camada de íons de oxigênio não foi encontrada. O valor crítico do campo elétrico foi considerado como um parâmetro ajustável que, no entanto, excedeu o campo de ruptura encontrado experimentalmente. Deste modo, o modelo de Rios et al, (2000) também não esteve de acordo com as medidas experimentais.

O trabalho de Fabbri & Senna, (2004) descreveu um modelo numérico e ôhmico para a solda anódica silício-vidro (Si-G) e considerou os íons de sódio e de oxigênio móveis. Valores finitos para a mobilidade dos íons de oxigênio foram usados para o cálculo do fluxo de corrente, densidade de carga e campo elétrico, utilizando um esquema de diferenças finitas com fronteira móvel não uniforme.

Fabbri & Senna, (2004) calcularam a densidade de oxigênio utilizando a equação da continuidade, que foi discretizada por um método numérico semi-implícito (Crank-Nicholson). A camada de óxido de silício uniforme foi considerada de maneira muito simplificada, ou seja, incorporando instantaneamente os átomos de oxigênio na matriz do semiconductor.

O modelo de Fabbri & Senna, (2004) aproximou-se dos dados experimentais com o aumento da mobilidade dos íons de oxigênio, ou seja, encontraram a concavidade correta na curva do fluxo de corrente, e os resultados indicaram que o transporte de ânions no interior do vidro ocorre no início da etapa do processo de solda (Figura 1.4). No entanto, o algoritmo implementado gastou tempo computacional excessivo à medida que as mobilidades dos ânions e dos cátions atingiam valores comparáveis.

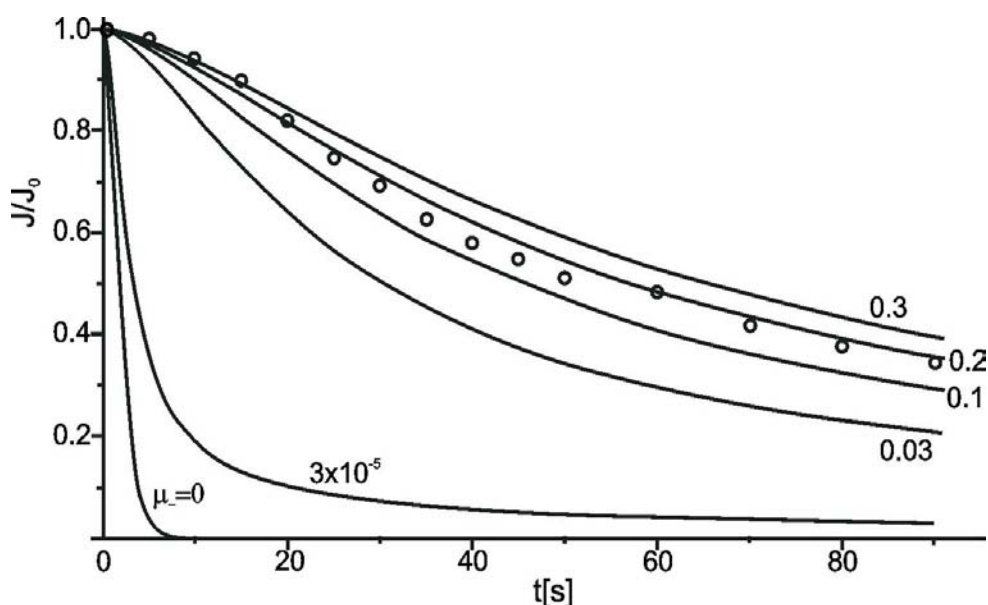


FIGURA 1.4: Fluxo de corrente durante a solda anódica vidro-silício, pontos experimentais (círculos) Albaugh, (1991) e curvas calculadas no modelo de Fabbri & Senna, (2004).

Fonte: Albaugh (1991) e Fabbri e Senna (2004).

O trabalho de Helvoort et al., (2004) apresentou estudos experimentais durante as soldas silício-vidro e alumínio-vidro para demonstrar a oxidação do respectivo ânodo. Temperaturas entre 300 – 500 °C e potencial em torno de 100 – 1000 V foram utilizados no intervalo de 5 – 10 minutos da solda silício-vidro e resultou em uma camada de óxido de 5 – 20nm.

1.3 Organização do Trabalho

Este projeto de mestrado pretende apresentar o modelo numérico para obter os transientes elétricos durante o processo de solda anódica silício-vidro (Si-G). A pesquisa está organizada da seguinte forma:

- Capítulo 2

Este capítulo apresenta os materiais e métodos que envolvem o processo da solda anódica, tais como: as equações governantes no processo de solda, a equação da continuidade, a equação de Gauss-Poisson e a condição para o potencial elétrico; além disso, relata o modelo eletrostático que engloba a transferência de íons no interior do vidro e em seguida na camada de óxido.

- Capítulo 3

Este capítulo apresenta a modelagem computacional que envolve os métodos numéricos utilizados neste trabalho, a discretização em diferenças finitas, a formulação explícita e totalmente implícita, a forma adimensional das equações governantes, o esquema numérico específico para a solda anódica, a renormalização da malha espacial e a consistência, estabilidade e convergência do sistema estudado neste trabalho.

- Capítulo 4

Com o código desenvolvido neste trabalho são apresentados neste capítulo os resultados, tais como: fluxo de corrente, campo elétrico, densidade de carga, camada de óxido e de depleção.

- Capítulo 5

A conclusão e os comentários deste trabalho de mestrado, bem como sugestões a trabalhos futuros, são apresentados neste capítulo.

- Capítulo 6

As referências bibliográficas são apresentadas.

CAPÍTULO 2

MATERIAIS E METODOLOGIA

2.1 Materiais utilizados no processo de solda anódica

2.1.1 Vidro

O vidro, do latim *vitrum*, refere-se a um material dos mais antigos conhecidos pela humanidade (Morey, 1954). No Brasil os primeiros artesãos imigrantes durante a “Invasão Holandesa”, em Olinda e Recife, produziram com perfeição vidros para janelas, copos e frascos. Após a expulsão dos holandeses, a vidraria entra em declínio, retornando somente com a chegada da Corte Portuguesa em 1808. Mas a industrialização do vidro no país agiganta-se apenas no século XX, com a fundação da Companhia Industrial São Paulo e Rio (Cisper) e da Vidraria Santa Marina. (Cebrace, 2006)

Devido às suas inúmeras propriedades, o termo vidro passou a ser genérico, e hoje se pode falar de vidros da mesma forma como comumente se fala sobre cristais, líquidos, gases... com tratamento similar a qualquer um dos estados da matéria.

Os vidros tradicionais são essencialmente à base de óxidos, sendo a sílica (SiO_2) o elemento mais comum. Desde o século XVIII, o conhecimento das propriedades dos vidros limitava-se à adição de compostos que forneciam maior durabilidade química, resistência mecânica, dilatação térmica, influência no índice de refração, facilidade de cristalização, cor... entre outras, empiricamente. (Wikipedia, 2006a)

Tradicionalmente os vidros são conhecidos e têm sido utilizados como isolantes elétricos, ao menos em temperatura ambiente. Mais recentemente tem sido possível aumentar enormemente a mobilidade dos cátions em vidros óxidos e em outros sistemas manipulando a estrutura aniônica, de forma a facilitar o transporte. Atualmente os resultados impressionam com as pesquisas de baterias e sensores de gás, além de

baterias menores e compactas para equipamentos eletrônicos portáteis, como marcapasso, telefones celulares, laptops, entre outros. (WIKIPEDIA, 2006a)

O transporte iônico em vidros tem seu primeiro registro publicado em 1884, quando Warburg demonstrou a condutividade de íons Na^+ através de um vidro alcalino (Malcolm, 1985).

2.1.2 Silício

O silício é um elemento químico pertencente ao grupo do carbono, de símbolo Si, descoberto pelo sueco Jöens Jacob Berzelius, em 1824, e não é normalmente encontrado em estado puro na natureza. Em combinação com outros elementos, constitui 27,7% da crosta terrestre, e é o elemento mais abundante depois do oxigênio. E em estado livre, ele é um sólido cinza-escuro, duro, de brilho metálico e estrutura cristalina semelhante a do diamante. (Wikipedia, 2006b)

O silício é utilizado no ramo da metalurgia como liga metálica no aço, latão e bronze; quando altamente purificado é usado em dispositivos fotoelétricos, transistores, chips e outros componentes eletrônicos. (WIKIPEDIA, 2006b)

O silício puro com adição de traços de outros elementos como boro, gálio,... tem propriedades semicondutoras e é amplamente aplicado em componentes eletrônicos. Também é usado em lasers. Aparece na argila, granito, quartzo e areia, normalmente na forma de dióxido de silício (SiO_2 , sílica) e vários silicatos (compostos contendo silício, oxigênio e metais). O silício é o principal componente do vidro, cimento, cerâmica, da maioria dos componentes semicondutores e dos silicones, que são substâncias plásticas (Wikipedia, 2006b). O silício é apresentado tanto na forma amorfa quanto na cristalina. (Ruska, 1987)

2.2 Equações governantes para o processo de solda anódica

2.2.1 Equação da conservação de massa (ou da continuidade)

O princípio da conservação de massa é de extrema importância para a física. Na ausência de fontes ou de locais pelo qual a massa possa desaparecer (sorveduras), toda a massa que entra em um sistema deve sair e/ou se acumular no sistema.

A equação da continuidade, que descreve a conservação de massa, pode ser obtida considerando-se uma região com extremidades x e $x + \delta x$, mostrada na Figura (2.1). Na ausência de fontes ou sorvedouros de massa, o balanço de massa dentro da região pode ser escrito como:

Varição temporal da quantidade de massa no elemento.	=	Descarga resultante através das fronteiras do elemento.
--	---	---

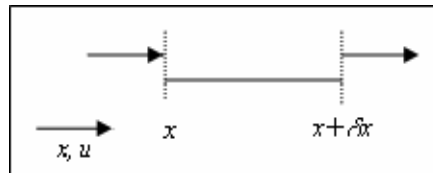


FIGURA 2.1: Esquema ilustrativo do fluxo de massa através das fronteiras de um elemento de fluido.
Fonte: Fortuna, (2000).

A Figura (2.1) utiliza o fato de que uma descarga positiva representa fluido entrando no elemento. Caso contrário, a descarga é negativa. A demonstração da equação da continuidade está no apêndice A e também pode ser encontrada em Jackson, (1975); Fortuna, (2000); Press et al, (1992) e Griffiths, (1999). Por fim, a equação da continuidade em uma dimensão é apresentada na equação (2.1):

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u)}{\partial x} = 0 \quad (2.1)$$

O primeiro termo representa a variação temporal da densidade de fluido, enquanto o segundo, descreve a taxa de variação da massa por unidade de comprimento na região mostrada na Figura (2.1).

2.2.2 Equação de Gauss-Poisson

Na física, a equação de Gauss-Poisson estabelece a relação entre o fluxo elétrico que passa através de uma superfície fechada e a quantidade de carga elétrica que existe dentro dessa superfície (Jackson, 1975). Matematicamente,

$$\Phi = \oint_{\Omega} E d\Omega = \frac{Q_{\Omega}}{\varepsilon} \quad (2.2)$$

Na forma diferencial, a equação de Gauss-Poisson é apresentada como:

$$\nabla \cdot E = \frac{q}{\varepsilon} \quad (2.3)$$

ou, em uma dimensão:

$$\frac{\partial E}{\partial x} = \frac{q}{\varepsilon} \quad (2.4)$$

2.2.3 Potencial elétrico

Potencial elétrico ou tensão é a diferença de potencial entre dois pontos, medida em volt (V) e pode ser definida matematicamente como a integral de linha do campo elétrico (Purcell, 1985):

$$V_a - V_b = \int_a^b E dx \quad (2.5)$$

Neste trabalho a equação (2.5) representa a diferença de potencial total aplicada aos dois materiais: silício e vidro.

2.3 Modelo eletrostático da solda anódica

O modelo eletrostático apresentado aqui considera um esquema em que o potencial total constante é imposto entre o par vidro-semicondutor, como é mostrado na Figura (2.2). A queda de potencial na camada de semicondutor é desprezada, pois possui uma resistividade bastante inferior ao vidro.

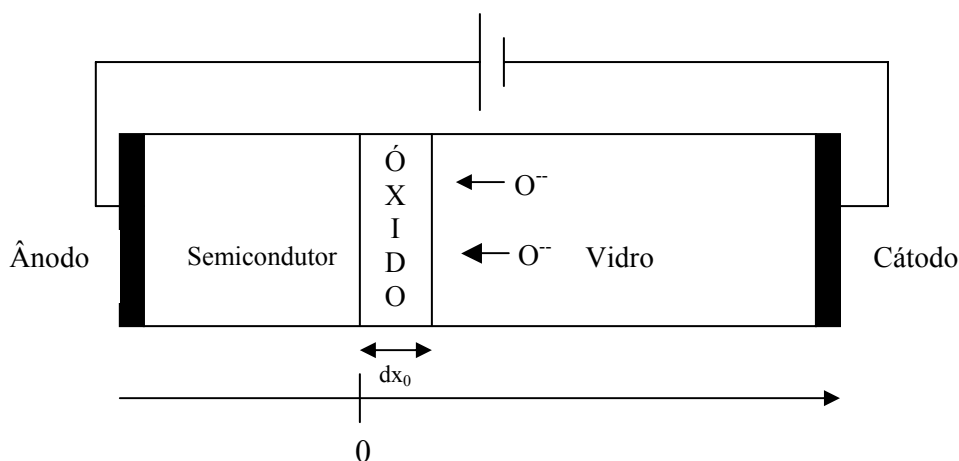


FIGURA 2.2: Esquema da disposição dos eletrodos durante a solda semicondutor-vidro (Si-G).

Em $t = 0$ (no momento que a tensão total é imposta sobre o par Si-G), o campo elétrico é uniforme ao longo do vidro $E = E_0$ e nulo no semicondutor e inicia-se o movimento dos portadores de carga (íons de sódio no vidro e elétrons no silício).

No próximo instante de tempo o campo elétrico tende a arrastar os íons de sódio (Na^+) para o pólo negativo. Contudo os íons de O^- ficam estacionários devido à pequena mobilidade, assim uma região crescente adjacente ao ânodo, que já estava depletada de

íons de Na^+ , torna-se negativamente carregada. Conseqüentemente o campo elétrico, nesta região terá um comportamento linear.

Denotamos no interior do vidro e da camada de óxido as densidades de carga adimensionais do sódio (cátion) e do oxigênio (ânion) por ρ_+ e ρ_- , respectivamente, satisfazendo, $0 \leq \rho_{+,-} \leq 1$ ($\rho_{+,-} = n_{+,-} / n_{0+}$, onde n_{0+} é o conteúdo inicial de sódio no vidro por m^3), conforme Fabbri & Senna, (2004).

Os deslocamentos dos íons no interior do vidro e da camada de óxido são detalhados nas próximas seções em cada material (vidro e silício) juntamente com as respectivas equações governantes.

2.3.1 Transferência de carga iônica no interior do vidro.

O modelo eletrostático e o deslocamento do campo para o transporte de espécies iônicas foram discutidos no trabalho Fabbri & Senna, (2004) e serão novamente esquematizados nesta seção.

Denotando por $\Gamma(t)$ a posição da frente da camada de depleção no interior do vidro, pode ser vista na Figura (2.3). E o fluxo de carga de cátions de sódio por J_+ , o deslocamento de Γ durante o intervalo de tempo dt , na ausência de difusão dos portadores, como representado na Figura (2.4), será:

$$dx = J_+ dt . \tag{2.6}$$

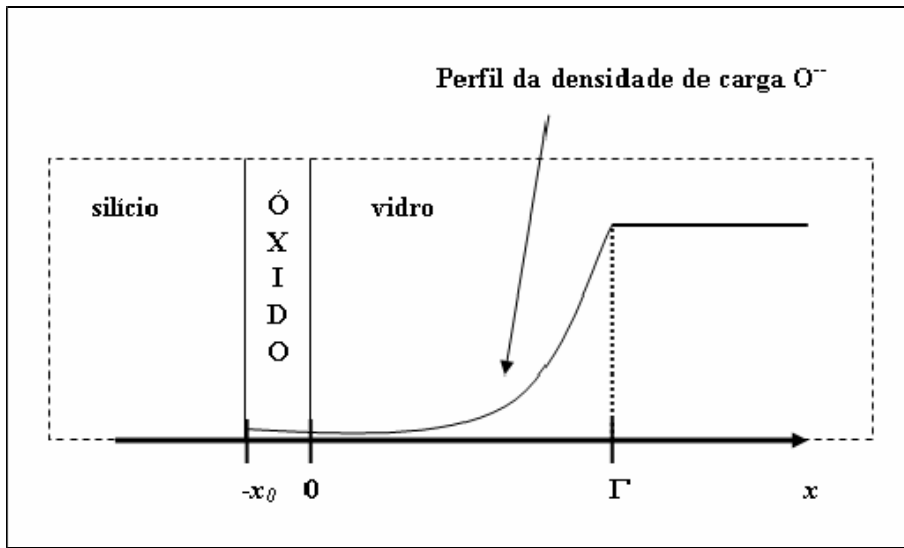


FIGURA 2.3: As equações do transporte eletrostático e iônico são resolvidas no domínio $[-x_0, \Gamma]$. O deslocamento da frente da camada de depleção $\Gamma(t)$ segue o fluxo local de Na^+ . A região do vidro é neutra para $x > \Gamma$.

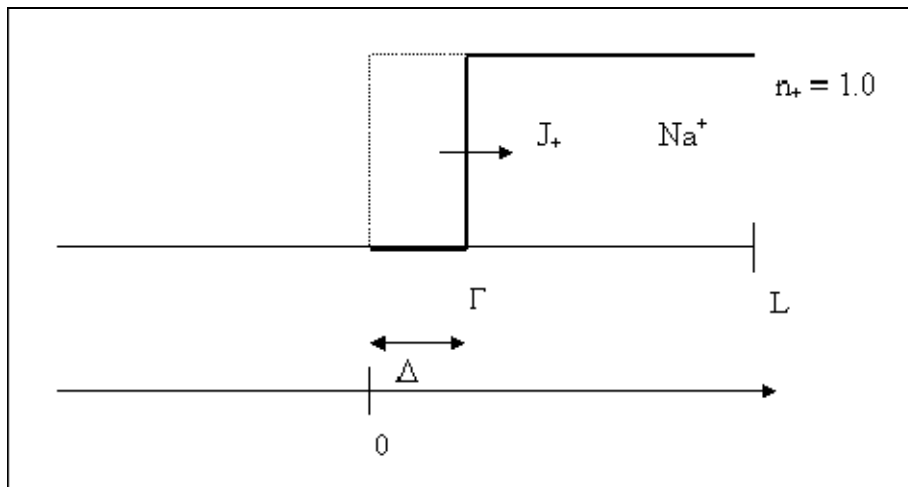


FIGURA 2.4: Esquema ilustrativo da equação (2.6).

O transporte dos ânions é governado pela equação da continuidade para densidade de carga do oxigênio ρ_- , que relaciona a densidade de íons de oxigênio no interior das camadas de depleção e de óxido com o fluxo representado na equação (2.11). Na

equação (2.7), o sinal negativo é anulado devido os íons de O^- se deslocarem em sentido contrário ao considerado:

$$\frac{\partial \bar{\rho}_-}{\partial t} = \frac{\partial J_-}{\partial x}. \quad (2.7)$$

O campo elétrico na camada de depleção segue a lei de Gauss-Poisson, que envolve a densidade de carga total, ou seja, a diferença entre ρ_+ e ρ_- é dada por:

$$\frac{\partial E}{\partial x} = \frac{\rho}{\epsilon} \quad (2.8)$$

onde ϵ é a constante dielétrica da camada de depleção, conforme Figura (2.5).

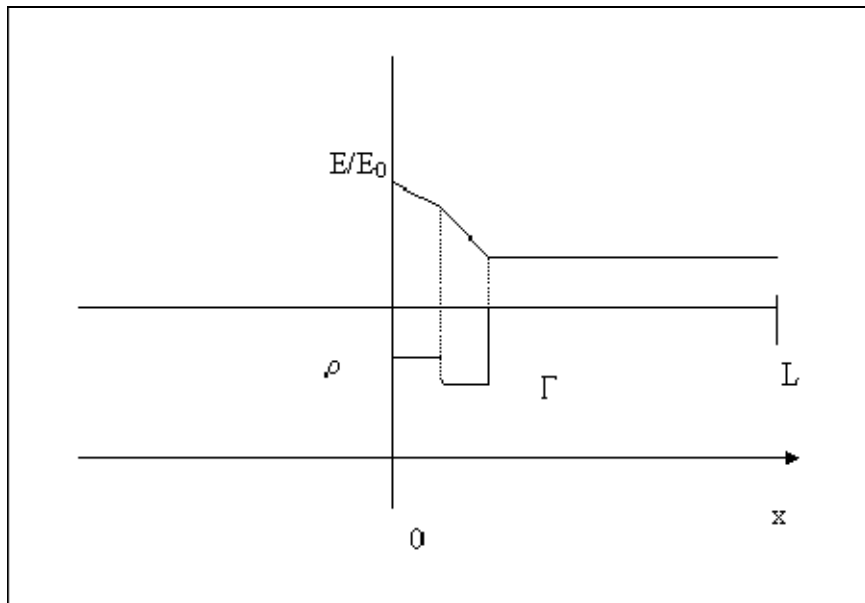


FIGURA 2.5: Esquema do campo elétrico apresentado na equação (2.8)

A queda do potencial total através do vidro de espessura L esta apresentado na equação (2.9) e ilustrado na Figura (2.6):

$$V_g = \int_0^L E dx . \quad (2.9)$$

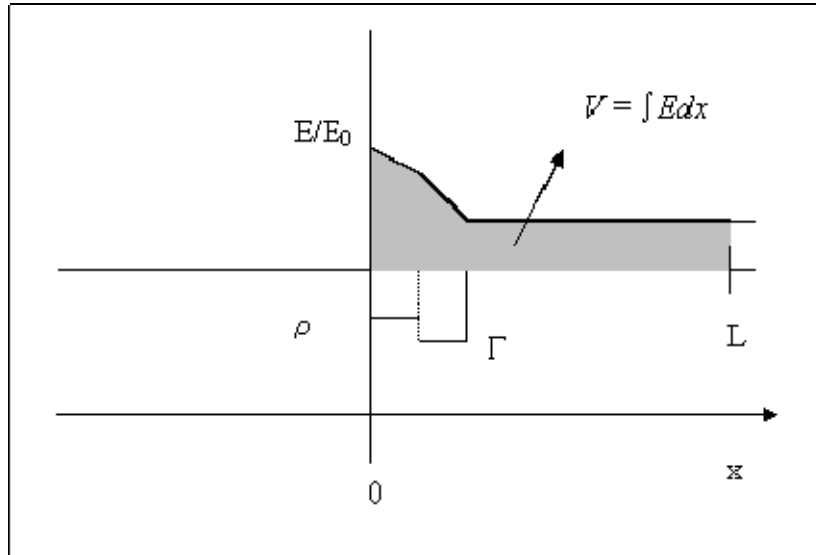


FIGURA 2.6: Esquema do potencial no interior do vidro.

O campo elétrico E é uniforme na região $\Gamma < x < L$ (assume-se que não há transporte de ânions no vidro fora da camada de depleção, onde o oxigênio livre ainda está preso aos cátions de sódio, e o campo elétrico é relativamente pequeno).

As equações (2.6) e (2.7) são suplementares para as relações adequadas dos fluxos J_+ e J_- . Este trabalho tratará apenas os modelos ôhmicos simples,

$$J_+ = \mu_+ \rho_+ f(E) \quad (2.10)$$

$$J_- = \mu_- \rho_- f(E) \quad (2.11)$$

onde μ_+ e μ_- são as mobilidades dos cátions e dos ânions, respectivamente.

2.3.2 Transferência de carga iônica no interior da camada de óxido

Durante a solda anódica forma-se uma camada de SiO_2 unicamente por oxigênio que é transportado da depleção do vidro, na interface silício-vidro (Si-G), também ilustrado na Figura (2.3).

As propriedades físicas da camada de solda são muito similares as do vidro SiO_2 (exceto, naturalmente, pela ausência de espécies iônicas adicionais). Como a camada de óxido é formada na região de campo alto, a difusão dos ânions de oxigênio é supostamente insignificante em comparação com o transporte elétrico (lembrando que a relação de Einstein que liga a constante de difusão com a mobilidade é válida apenas para campos elétricos baixos).

O crescimento da camada de óxido na interface vidro-silício (G-Si) introduz uma queda de potencial adicional

$$V_{ox} = \int_{-x_0}^0 E dx \quad (2.12)$$

onde x_0 é a espessura do óxido no tempo t e $x_0(0) = 0$. Os valores locais do campo elétrico devem satisfazer a equação (2.8) na região $-x_0 < x < \Gamma$.

Impõe-se o potencial externo fixo:

$$V_g + V_{ox} = V_0. \quad (2.13)$$

A dinâmica do crescimento de óxido é dada pelo fluxo de oxigênio na interface silício-óxido (Si-O)

$$dx_0 = \frac{dt}{n_{ox}} J_-(-x_0, t) \quad (2.14)$$

onde n_{ox} é o valor da relação entre a densidade de carga de oxigênio no óxido neutro e a densidade de carga de oxigênio livre no vidro.

CAPÍTULO 3

MODELAGEM COMPUTACIONAL

3.1 Métodos Numéricos

A classe dos métodos teóricos é formada pelos analíticos e os numéricos, pois ambos objetivam resolver equações diferenciais, mas cada método ataca a complexidade da equação de um modo diferente. Os métodos analíticos têm a desvantagem de serem, freqüentemente, aplicáveis à problemas cujas hipóteses simplificadas os desviam demasiadamente do fenômeno físico real. E normalmente, eles consideram geometrias e condições de contorno simples.

A experimentação em laboratório tem a grande vantagem de tratar a configuração do real. Ela é, entretanto, de altíssimo custo e muitas vezes não pode ser realizada, por questões de segurança; assim é comum a realização de medidas em apenas alguns pontos da região em que ocorrem os fenômenos de interesse.

Portanto, nem sempre os tratamentos teóricos e/ou experimentais são satisfatórios. Há essencialmente duas razões (Fortuna, 2000) para isso:

- a) o fenômeno em estudo nem sempre é passível de reprodução em laboratório, mesmo em escala reduzida;
- b) o custo e o tempo da montagem experimental podem ser proibitivos.

O uso de técnicas numéricas, por sua vez, praticamente não apresenta restrições, podendo resolver problemas arbitrários e apresentando resultados com uma rapidez fantástica (Maliska, 1995). No entanto, o uso dos métodos numéricos não implica que as técnicas experimentais e as análises teóricas estejam sido postas de lado. É comum às três técnicas se completarem durante algum trabalho, ou em estudos de modelos teóricos, conforme Figura (3.1):

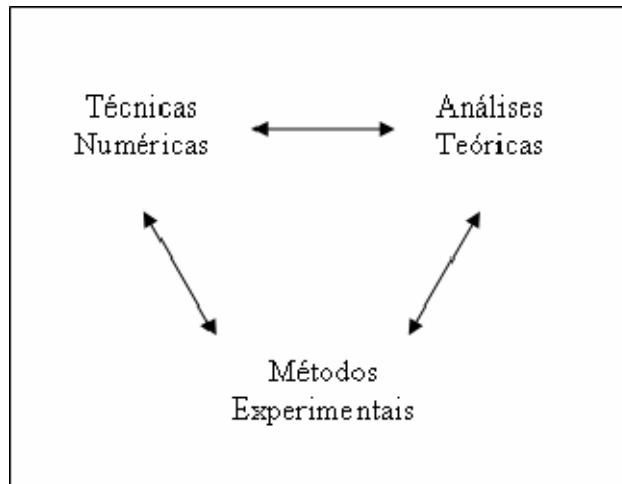


FIGURA 3.1: Análises teóricas e ensaios experimentais.
Fonte: Fortuna, (2000).

Nos métodos numéricos há o uso de condições iniciais e de contorno que devem combinar com as equações diferenciais parciais e também depender da forma da região de interesse (Lapidus & Pinder, 1982).

Neste presente trabalho, a contextualização física do processo de solda anódica proporciona o emprego da condição inicial e de contorno.

A condição inicial é devida o fato dos íons de sódio se deslocarem no interior do vidro, dissociando os íons de oxigênio, que ainda não se movem, pois sua mobilidade é menor em relação ao sódio, assim, a densidade de carga dos íons de oxigênio é $\bar{\rho}_1^1 = 1.0$.

A condição de contorno usada é a de Dirichlet, pois os valores das densidades de carga dos íons de oxigênio nos intervalos de tempo são conhecidos fisicamente, ou seja, $\bar{\rho}_1^n = 0.0$ e $\bar{\rho}_i^n = 1.0$.

3.2 Método das Diferenças Finitas

O método das diferenças finitas está baseado na equivalência de representações de funções por expansões em série de Taylor e na aplicação direta da definição de derivada. Apesar de não ser necessário, é comum este método usar discretização estruturada (construída usando um sistema coordenado) através de coordenadas ortogonais, como cartesianas, cilíndricas e esféricas. Em particular, a malha deve ser montada de um modo estruturado, de maneira que os nós da malha, em um espaço n -dimensional, fiquem localizados nas intersecções de uma família de linhas retílineas ou curvilíneas. Os nós, que devem situar-se apenas sobre cada uma dessas curvas, serão referenciados por coordenadas numéricas que melhor se adaptam à natureza da família de curvas.

3.2.1 Fundamentos do Método das Diferenças Finitas

A aproximação por diferenças finitas é um dos mais antigos métodos utilizados para obter soluções numéricas de equações diferenciais, e sua primeira aplicação é atribuída ao matemático Euler em 1768 (Hirsch, 1994). A idéia do método das diferenças finitas é realmente bastante simples, pois corresponde a uma estimativa da derivada com base na sua própria definição. O conteúdo a seguir segue a apresentação de Hirsch, (1994). E também pode ser encontrado em Lapidus & Pinder, (1982); Mitchell, (1969); Mitchell & Griffiths, (1980); Thomas, (1995); p.Ciarlet, (1992); Hildebrand, (1968) e Smith, (1978).

Para uma função $U(x)$, a sua derivada em um ponto genérico x , é definida por:

$$U_x \equiv \left(\frac{dU}{dx} \right) = \lim_{\Delta x \rightarrow 0} \frac{U(x + \Delta x) - U(x)}{\Delta x}. \quad (3.1)$$

Se Δx é pequeno, mas finito, a expressão no lado direito da equação (3.1) sem o limite torna-se uma aproximação do valor exato de U_x . A aproximação pode ser melhorada reduzindo-se Δx , mas para qualquer valor finito de Δx , um erro (o erro de truncamento) é introduzido, o qual tende a zero sempre que Δx tender a zero. A potência em Δx com a

qual este erro tende à zero é chamada de ordem de aproximação da diferença, e pode ser obtida a partir do desenvolvimento em série de Taylor para $U(x+\Delta x)$ em torno do ponto x . Na verdade, todo o conceito que rege as aproximações por diferenças finitas está baseado nas propriedades das expansões de Taylor. Desenvolvendo $U(x+\Delta x)$, temos:

$$U(x + \Delta x) = U(x) + \Delta x \frac{dU(x)}{dx} + \frac{(\Delta x)^2}{2!} \frac{d^2U(x)}{dx^2} + \dots \quad (3.2)$$

e então, para a menor ordem em Δx vem,

$$\frac{U(x + \Delta x) - U(x)}{\Delta x} = U_x(x) + \frac{\Delta x}{2!} \frac{d^2U(x)}{dx^2} + \dots \quad (3.3)$$

Esta aproximação para $U_x(x)$ é dita ser de primeira ordem em Δx , e pode ser escrita como:

$$\frac{U(x + \Delta x) - U(x)}{\Delta x} + \mathcal{O}(\Delta x) = U_x(x) \quad (3.4)$$

indicando que o erro de truncamento $\mathcal{O}(\Delta x)$ para valores pequenos de Δx vai a zero de acordo com a primeira potência em Δx .

Um número considerável de aproximações de diferenças finitas para as derivadas da variável básica (dependente) presente nas equações de transporte pode ser obtido. Um procedimento baseado em manipulações algébricas dos operadores de diferença será discutido a seguir:

3.2.1.1 Propriedades das Fórmulas de Diferenças Finitas

Seja um espaço unidimensional dado pelo eixo x , onde uma discretização espacial é executada de tal modo que o espaço contínuo unidimensional é substituído por uma malha com N pontos discretos dados por x_i , $i = 0, 1, 2, \dots, N$. Seja U_i o valor da função $U(x)$ no ponto x_i , isto é, $U_i = U(x_i)$, e considere que o espaçamento entre os pontos discretos é constante e igual a Δx . Sem perda de generalidade, pode-se fazer $x_i = i\Delta x$, e

este ponto também será designado por “ponto x_i ” ou “ponto i ”, onde i é um número inteiro.

As aproximações de diferenças finitas que se seguem podem ser definidas para a derivada primeira $(U_x)_i = (dU/dx)_{x=x_i}$.

$$(U_x)_i \equiv \left(\frac{dU}{dx} \right)_{x=x_i} = \frac{U_{i+1} - U_i}{\Delta x} + \mathcal{O}(\Delta x) \quad (3.5)$$

$$(U_x)_i \equiv \left(\frac{dU}{dx} \right)_{x=x_i} = \frac{U_i - U_{i-1}}{\Delta x} + \mathcal{O}(\Delta x). \quad (3.6)$$

Com respeito ao ponto $x = x_i$, a equação (3.5) é chamada de diferença progressiva, enquanto a equação (3.6) é uma diferença regressiva, sendo que ambas representam uma aproximação de primeira ordem para $(U_x)_i$ e também são consideradas como equações de diferenças unilaterais.

Uma aproximação de segunda ordem é obtida quando se usa diferença centrada:

$$(U_x)_i \equiv \left(\frac{dU}{dx} \right)_{x=x_i} = \frac{U_{i+1} - U_{i-1}}{2\Delta x} + \mathcal{O}(\Delta x^2). \quad (3.7)$$

Neste presente trabalho, utiliza-se no método implícito as formulações progressiva e regressiva, equações (3.5) e (3.6), respectivamente e posteriormente a formulação centrada, eq. (3.7), devido ao acoplamento das equações (2.7) e (2.11) e a media aritmética dos ρ_i em relação à $\bar{\rho}_i$. No entanto também foi tratado o método explícito para obter os transientes elétricos, como é apresentado a seguir e os resultados podem ser encontrados em Paes & Fabbri, (2005).

3.3 Formulações Explícita e Totalmente Implícita

3.3.1 Formulação Explícita

Na formulação explícita todos os valores vizinhos ao ponto considerado são avaliados no instante anterior e, portanto, já são conhecidos. É possível explicitar a incógnita da equação tratada em função dos valores vizinhos, todos conhecidos (Figura 3.2).

Como há uma equação para cada ponto discreto e, em cada uma destas equações, os valores vizinhos são sempre do instante anterior, a formulação explícita dá origem a um conjunto de equações algébricas que podem ser resolvidas uma a uma, obtendo-se o valor em cada ponto do espaço para o novo nível de tempo. (Maliska, 1995)

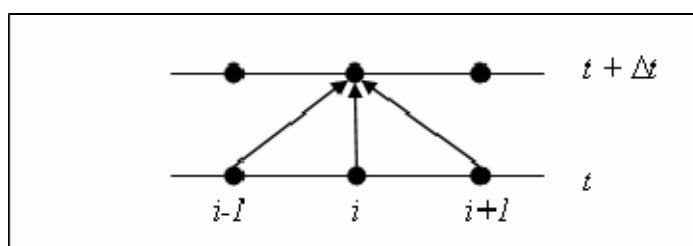


FIGURA 3.2: Esquema da formulação explícita.

O trabalho de Paes & Fabbri (2005) analisou o modelo eletrostático no interior do vidro utilizando a formulação explícita, ou seja, obteve os resultados dos transientes elétricos: campo elétrico, fluxo de corrente, densidade de carga dos íons de oxigênio e camada de depleção.

Como já foi comentada anteriormente, a formulação explícita é simples de se resolver e todas as variáveis são definidas no tempo anterior. No entanto apresenta problema de estabilidade, o que faz com que, na prática, o tempo computacional e o número de iterações sejam bem maiores quando comparado com a formulação implícita.

A Figura (3.3) apresenta a ilustração do esquema utilizado no processo de deslocamento dos íons de oxigênio apenas no interior do vidro, pois a camada de óxido foi tratada do

mesmo modo que no trabalho de Fabbri & Senna, (2004), ou seja, através da incorporação instantânea dos átomos de oxigênio na matriz do semiconductor. E a seguir os passos generalizados da formulação explícita no tempo n .

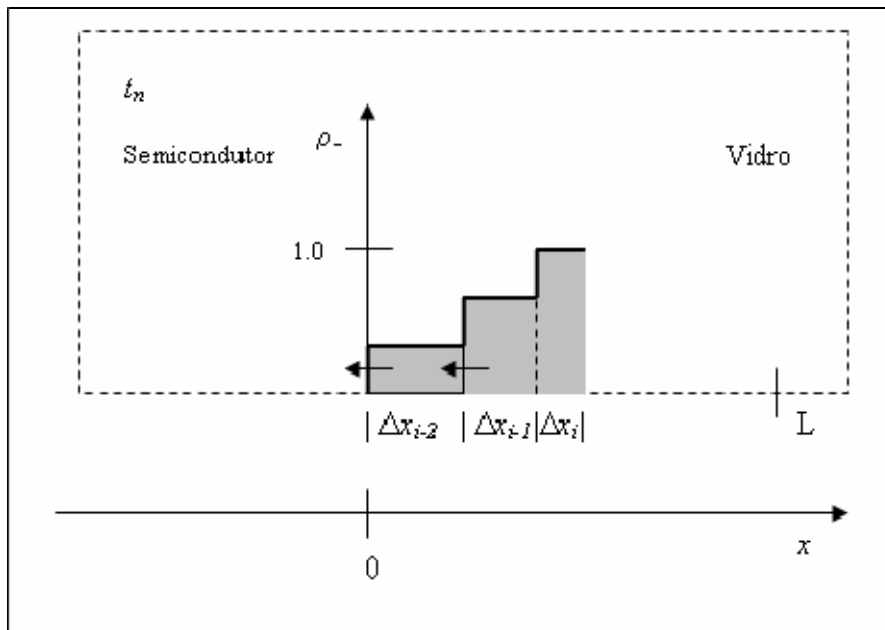


FIGURA 3.3: Ilustração do esquema utilizado no processo de deslocamento dos íons de oxigênio durante a solda anódica silício-vidro (Si-G) nos primeiros intervalos de tempo, apenas no interior do vidro.

Conforme a Figura (3.3), o procedimento geral do deslocamento dos íons de oxigênio, apenas no interior do vidro, utiliza a formulação explícita e será exemplificado a seguir no n -passo de tempo, ou seja, os $(n-1)$ - passos de tempo já foram calculados:

- 1) Ainda não há deslocamento da quantidade de carga em Δx_i , visto que os íons de oxigênio apenas foram dissociados dos íons de sódio, que se deslocaram para o

cátodo, pois a sua mobilidade é maior em relação à do oxigênio, ou seja, a condição de contorno de Dirichlet é $\bar{\rho}_i^n = 1.0$.

- 2) Com o fluxo de íons de oxigênio do passo de tempo anterior em Δx_{i-1} encontra-se a quantidade de carga que sai deste intervalo espacial (Q_{sai}) e se desloca para Δx_{i-2} , como segue:

$$Q_{sai} = J_{i-1} \Delta x_{i-1} \Delta t \quad (3.8)$$

Assim,

$$Q_{fica} = Q_{tinha} - Q_{sai} \quad (3.9)$$

- 3) A quantidade que sai de Δx_{i-1} entra no intervalo espacial Δx_{i-2} , assim:

$$Q_{fica} = Q_{tinha} + Q_{sai(\Delta x_{i-1})} \quad (3.10)$$

E do mesmo modo que em Δx_{i-1} , encontra-se a quantidade de carga que sai de Δx_{i-2} utilizando a equação (3.8) com os respectivos índices.

Por fim recalcula o campo elétrico e o fluxo de corrente em todos os nós neste intervalo temporal (t_n) e novamente recomeça o processo. Os resultados podem ser encontrados em Paes & Fabbri, (2005).

3.3.2 Formulação Totalmente Implícita

Os trabalhos numéricos que analisam os transientes elétricos durante o processo de solda anódica usando a formulação explícita e semi-implícita para a equação (2.7), apenas no interior do vidro foram Paes & Fabbri (2005) e Fabbri & Senna (2004), respectivamente. O presente trabalho utiliza-se a formulação totalmente implícita para essa mesma equação e trata o deslocamento dos íons de oxigênio no interior do vidro e da camada de óxido formada no silício do seguinte modo:

$$\frac{\bar{\rho}_i^{n+1} - \bar{\rho}_i^n}{\Delta t} = \frac{J_{i+1}^{n+1} - J_i^{n+1}}{\Delta x} \quad (3.11)$$

Na equação (3.11), o termo a esquerda do sinal de igualdade esta discretizado em diferenças finitas regressiva e o termo à direita, em diferenças finitas progressiva, que posteriormente a equação (2.11) será acoplada, devido à densidade de carga ser tratada nos intervalos de um nó e outro da malha.

A Figura (3.4) apresenta o esquema estudado. E a discretização em diferenças finitas da equação (2.7) é apresentado a seguir e o valor do campo elétrico em cada ponto espacial é tratado do tempo anterior, que caracteriza a forma linearizada da equação (2.7):

$$\bar{\rho}_i^{n+1} - \bar{\rho}_i^n = \frac{\Delta t}{\Delta x} \mu (\rho_{i+1}^{n+1} E_{i+1}^n - \rho_i^{n+1} E_i^n) \quad (3.12)$$

Utilizando a média aritmética dada por:

$$\rho_{i+1}^{n+1} = \frac{\bar{\rho}_{i+1}^{n+1} + \bar{\rho}_i^{n+1}}{2} \quad (3.13)$$

$$\rho_i^{n+1} = \frac{\bar{\rho}_i^{n+1} + \bar{\rho}_{i-1}^{n+1}}{2} \quad (3.14)$$

Substitui as equações (3.13) e (3.14) na equação (3.12), resulta:

$$\bar{\rho}_i^{n+1} - \bar{\rho}_i^n = \frac{\Delta t}{\Delta x} \mu \left[\left(\frac{\bar{\rho}_{i+1}^{n+1} + \bar{\rho}_i^{n+1}}{2} \right) E_{i+1}^n - \left(\frac{\bar{\rho}_i^{n+1} + \bar{\rho}_{i-1}^{n+1}}{2} \right) E_i^n \right] \quad (3.15)$$

Rearranjando a equação (3.15) em função apenas das densidades de carga dos íons de oxigênio no interior dos intervalos ($\bar{\rho}_i$), obtém-se a formulação geral:

$$-\frac{\alpha}{2} E_{i+1}^n \bar{\rho}_{i+1}^{n+1} + \left(1 + \frac{\alpha}{2} E_i^n - \frac{\alpha}{2} E_{i+1}^n \right) \bar{\rho}_i^{n+1} + \frac{\alpha}{2} E_{i-1}^n \bar{\rho}_{i-1}^{n+1} = \bar{\rho}_i^n \quad (3.16)$$

onde $\alpha = \mu \Delta t / \Delta x$.

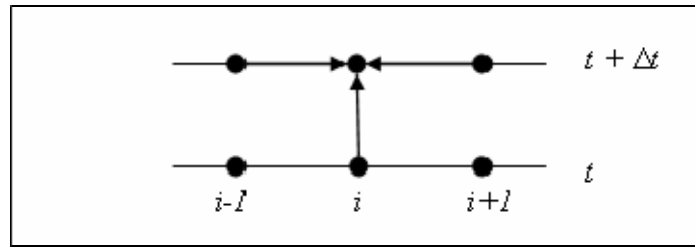


FIGURA 3.4: Esquema da formulação implícita.

A formulação apresentada na equação (3.16) dá origem a um sistema de equações, uma vez que as equações estão agora acopladas entre si. Nesta equação, as densidades de carga $\bar{\rho}_{i+1}^{n+1}$ e $\bar{\rho}_{i-1}^{n+1}$ estão sendo calculadas no mesmo nível de tempo de $\bar{\rho}_i^{n+1}$, o que caracteriza o acoplamento. Para essa equação, será visto mais adiante que tal formulação é incondicionalmente estável e o intervalo de tempo é limitado por precisão (Lapidus & Pinder, 1982), (Maliska, 1995), (Hirsch, 1994). Observe que esta formulação é chamada totalmente implícita porque os valores das densidades de carga são encontrados com o acoplamento das variáveis no mesmo intervalo de tempo.

Para detalhar o processo, a Figura (3.5) apresenta o deslocamento dos íons de oxigênio no interior do vidro e da camada de óxido de silício acoplados devido a suas composições idênticas (exceto por espécies iônicas adicionais), nos três primeiros intervalos de tempo, onde se atribui os índices correspondentes à equação (3.16).

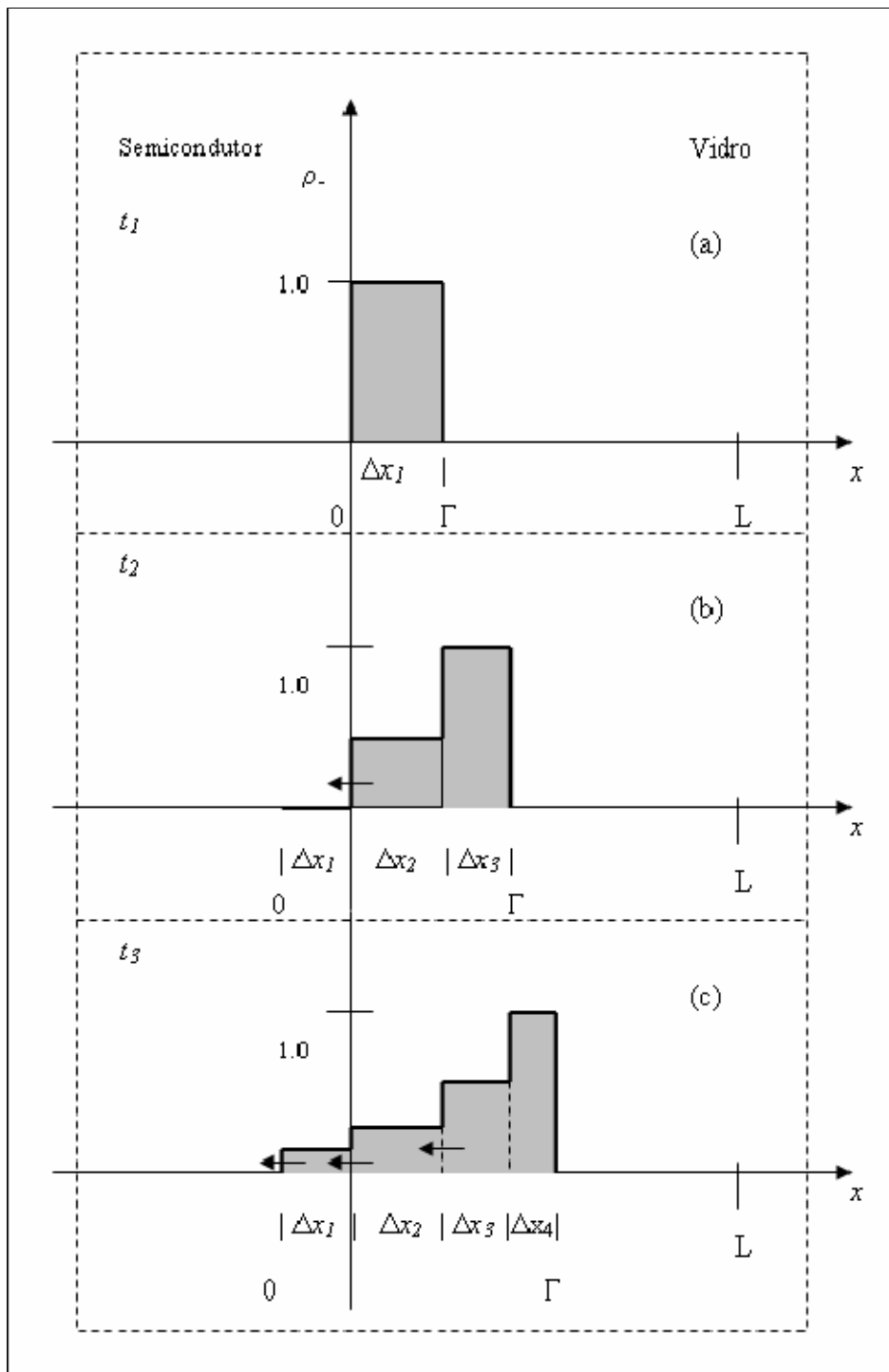


FIGURA 3.5: Ilustração do esquema utilizado no processo de deslocamento dos íons de oxigênio durante a solda anódica silício-vidro (Si-G) no interior do vidro e da camada de óxido, nos primeiros intervalos de tempo.

Na seqüência é exemplificado o tratamento da discretização no terceiro intervalo de tempo, com o intuito de apresentar o esquema utilizado.

1º intervalo de tempo, (ver Figura 3.5 - a):

- 1º intervalo espacial (Δx_1):

$\bar{\rho}_1^1 = 1.0$ representa a condição inicial, pois os íons de oxigênio apenas foram liberados pelos íons de sódio, eles ainda não se deslocam.

2º intervalo de tempo, (ver Figura 3.5 - b):

- 1º intervalo espacial (Δx_1):

$\bar{\rho}_1^2 = 0.0$ representa a condição de contorno de Dirichlet, pois os íons de oxigênio que se deslocam do vidro penetram na matriz do silício e reagem, assim não há acúmulo de carga;

- 2º intervalo espacial (Δx_2):

$\bar{\rho}_2^2 = \frac{1}{1 + \alpha E_1^1}$, índices atribuídos à equação (3.16) ao segundo intervalo espacial, onde as densidades já estão acopladas uma as outras;

- 3º intervalo espacial (Δx_3):

$\bar{\rho}_3^2 = 1.0$ representa a condição de contorno de Dirichlet, pois os íons de sódio apenas liberam os íons de oxigênio, eles ainda não se deslocam em direção ao silício.

3º intervalo de tempo, (ver Figura 3.5 - c):

- 1º intervalo espacial (Δx_1):

$$-\frac{\alpha E_2^2}{2} \bar{\rho}_2^3 + \left(1 + \alpha E_1^2 - \frac{\alpha E_2^2}{2}\right) \bar{\rho}_1^3 = \bar{\rho}_1^2, \text{ índices atribuídos à equação (3.16)}$$

ao primeiro intervalo espacial, pois as densidades já estão acopladas uma as outras e em função do intervalo de tempo anterior;

- 2º intervalo espacial (Δx_2):

$$-\frac{\alpha E_3^2}{2} \bar{\rho}_3^3 + \left(1 + \frac{\alpha E_2^2}{2} - \frac{\alpha E_3^2}{2}\right) \bar{\rho}_2^3 + \frac{\alpha E_2^2}{2} \bar{\rho}_1^3 = \bar{\rho}_2^2, \text{ índices atribuídos à}$$

equação (3.16) ao segundo intervalo espacial;

- 3º intervalo espacial (Δx_3):

$$\left(1 + \frac{\alpha E_3^2}{2}\right) \bar{\rho}_3^3 + \frac{\alpha E_3^2}{2} \bar{\rho}_2^3 = \bar{\rho}_3^2, \text{ índices atribuídos à equação (3.16) ao}$$

terceiro intervalo espacial;

- 4º intervalo espacial (Δx_4):

$\bar{\rho}_4^3 = 1.0$ representa a condição de contorno de Dirichlet, pois os íons de sódio apenas liberam os íons de oxigênio, assim eles ainda não se deslocam em direção ao silício.

O sistema apresentado em (3.17) é o resultado das equações discretizadas apresentadas acima, no terceiro intervalo temporal.

$$\begin{cases} \bar{\rho}_1^3 = \left(+ \frac{\alpha E_2^2}{2} \bar{\rho}_2^3 + \bar{\rho}_1^2 \right) / \left(1 - \frac{\alpha E_2^2}{2} + \alpha E_1^2 \right) \\ \bar{\rho}_2^3 = \left(+ \frac{\alpha E_3^2}{2} \bar{\rho}_3^3 - \frac{\alpha E_2^2}{2} \bar{\rho}_1^3 + \bar{\rho}_2^2 \right) / \left(1 + \frac{\alpha E_2^2}{2} - \frac{\alpha E_3^2}{2} \right) \\ \bar{\rho}_3^3 = \left(- \frac{\alpha E_3^2}{2} \bar{\rho}_2^3 + \bar{\rho}_3^2 \right) / \left(1 + \frac{\alpha E_3^2}{2} \right) \end{cases} \quad (3.17)$$

E assim por diante, os n -intervalos de tempo são construídos.

Deste modo, o sistema (3.17) pode ser representado na forma matricial como:

$$\begin{bmatrix} \left(1 - \frac{\alpha E_2^2}{2} + \alpha E_1^2\right) & -\frac{\alpha E_2^2}{2} & 0 \\ \frac{\alpha E_2^2}{2} & \left(1 - \frac{\alpha E_3^2}{2} + \frac{\alpha E_2^2}{2}\right) & -\frac{\alpha E_3^2}{2} \\ 0 & \frac{\alpha E_3^2}{2} & \left(1 + \frac{\alpha E_3^2}{2}\right) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \bar{\rho}_1^3 \\ \bar{\rho}_2^3 \\ \bar{\rho}_3^3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \bar{\rho}_1^2 \\ \bar{\rho}_2^2 \\ \bar{\rho}_3^2 \end{bmatrix} \quad (3.18)$$

Note que os zeros que aparecem na matriz de coeficientes não existem explicitamente no sistema de equações (3.17), pois a forma de escrever estas equações envolve apenas as densidades de carga de íons de oxigênio que estão ligadas ao intervalo em questão. Como $\bar{\rho}_3^3$ não tem ligação com $\bar{\rho}_1^3$, o coeficiente é, logicamente, zero. O mesmo acontece com $\bar{\rho}_1^3$ em relação à $\bar{\rho}_3^3$.

Neste presente trabalho, o método usado para resolver a matriz tridiagonal apresentada em (3.18), é denominado Thomas (Lapidus & Pinder, 1982), que será descrito na próxima seção.

3.3.2.1 Método de Thomas para Sistemas Tridiagonais

O método de Thomas é um método de eliminação dos elementos das colunas (vetores) desenvolvido para a solução de sistemas de equações algébricas lineares que apresentam matrizes de coeficientes tridiagonais. No caso de problemas não-lineares, a aproximação numérica da equação diferencial parcial, em particular, equação (2.7), dá origem a um sistema linear de equações, mas a matriz conterá coeficientes dependentes da variável e assim deverá ser atualizada ao longo das iterações (Maliska, 1995). O conteúdo a seguir segue a apresentação de Lapidus & Pinder, (1982) e também pode ser encontrado em Cunha, (2000).

O algoritmo de Thomas tira partido da estrutura matricial apresentada, simplificando significativamente os cálculos no passo de eliminação de cada elemento da coluna. Este

método não inclui o passo de pivotagem, o qual destruiria a estrutura tridiagonal. O algoritmo é apresentado no apêndice A.

Por fim, uma das vantagens deste método, é a minimização do custo de memória necessária, compactando os dados numa matriz de dimensão $(N \times 4)$, em que a 4ª coluna corresponde ao vetor dos termos independentes.

3.4 Forma Adimensional das Equações

Na física, os problemas, em geral, podem ser caracterizados por grandezas específicas, como a densidade carga no processo de solda. Essas grandezas dimensionais podem ser agrupadas em parâmetros adimensionais, que passam a caracterizar o fenômeno em questão.

A adimensionalização das equações que governam o processo de solda anódica pode ser feita a partir das grandezas:

$$\bar{\rho}_{+,-}^* = \frac{\bar{\rho}_{+,-}}{\bar{\rho}_{0+}}, L^* = \frac{L}{l_d}, x^* = \frac{x}{l_d}, E^* = \frac{E}{E_0}, t^* = \frac{t}{\tau} \quad (3.19)$$

em que $\bar{\rho}_{0+}$ é a densidade de carga de sódio inicial no vidro, l_d , E_0 , τ , são respectivamente, valores de referência de comprimento (Albaugh, 1991), campo elétrico inicial e tempo (Albaugh, 1991), que serão detalhadas nos resultados apresentados no capítulo 4. Substituindo-se os valores com índice (*) nas equações que governam o processo de solda anódica silício-vidro (Si-G), equações (2.7), (2.8), (2.9) e (2.12), obtém-se respectivamente:

- Equação da continuidade:

$$\frac{\partial \bar{\rho}_-^*}{\partial t^*} = \frac{\partial J^*}{\partial x^*} \quad (3.20)$$

- Equação de Gauss-Poisson:

$$\frac{\partial E^*}{\partial x^*} = \frac{\rho^*}{\varepsilon} \quad (3.21)$$

- Potencial elétrico:

$$\int_0^{L^*} E^* dx^* = L^* \quad (3.22)$$

Note-se que outros parâmetros podem ser utilizados para adimensionalizar as equações acima; a escolha depende das grandezas envolvidas no problema tratado.

No entanto, essa simbologia não será usada no decorrer de todo trabalho, para não interferir na notação das variáveis presentes. A obtenção de todos os resultados durante o processo de solda anódica foram tratados como adimensionais e posteriormente, transformados em dimensionais para análise.

3.5 Esquema Numérico no Procedimento da Solda Anódica

As equações (2.6) a (2.14) formam um problema de contorno móvel não-linear, que se resolve numericamente por um procedimento auto-consistente apresentado na seção (3.3.2), denominado de formulação totalmente implícita.

E^0 e E^Γ são os valores locais do campo elétrico na interface vidro-silício (Si-G) e na frente da camada de depleção, respectivamente. Inicialmente, E^0 aumenta e E^Γ decresce no tempo, devido a presença de carga negativa não compensada que começa a ser liberada na camada de depleção; por isso, a velocidade de avanço $v(t) = d\Gamma / dt$ decresce no tempo.

Neste presente trabalho é usado a discretização em diferenças-finitas sobre uma grade não-uniforme Δx , que é gerada por deslocamento da frente Γ e x_0 durante os intervalos de tempo fixo Δt , devido à lenta condição da velocidade de avanço.

A equação da continuidade para a densidade de carga de ânion, equação (2.7) e a equação de Gauss-Poisson sob o potencial externo fixo, equações (2.8) e (2.13), são resolvidas em cada passo de tempo.

A integração no tempo é dada abaixo. Inicialmente ($t = 0$), o campo elétrico é uniforme no intervalo $[0, L]$, onde a densidade de carga livre é zero, e não há óxido na interface silício-vidro (Si-G). Deste modo, a seqüência do esquema numérico é apresentada a seguir:

- 1) Do valor do campo elétrico em Γ , obtém-se o fluxo local de cátions de Na^+ da relação constituinte, equação (2.10): $J_+ = \mu_+ \rho_+ f(E)$;
- 2) Calcula o deslocamento Δx da frente da camada de depleção durante o intervalo de tempo Δt , de acordo com a equação (2.6): $dx = J_+ dt$;
- 3) A equação da continuidade (2.7): $\left(\frac{\partial \bar{\rho}_-}{\partial t} = \frac{\partial J_-}{\partial x} \right)$ para a densidade de carga de ânion é resolvida no domínio $[0, \Gamma]$, com o seguinte esquema: para o fluxo local de ânions, a equação constituinte (2.11) é empregada ($J_- = \mu_- \rho_- f(E)$); os valores locais do campo elétrico no interior da camada de depleção satisfaz as equações (2.8): $\left(\frac{\partial E}{\partial x} = \frac{\rho}{\varepsilon} \right)$ e (2.13): $(V_g + V_{ox} = V_0)$;
- 4) Do fluxo de ânion local calculado na interface silício-óxido (Si-O), obtém-se a quantidade de óxido que é formado durante o intervalo de tempo Δt através da equação (2.14): $\left(dx_0 = \frac{dt}{n_{ox}} J_-(-x_0, t) \right)$. Esta nova região de óxido de silício é de carga neutra e a atualização nos valores locais do campo elétrico em $[-x_0, L]$ é feita de acordo com as equações (2.12): $\left(V_{ox} = \int_{-x_0}^0 E dx \right)$ e (2.13): $(V_g + V_{ox} = V_0)$;

5) A integração prossegue fazendo os passos de 1 a 4 sob o próximo intervalo de tempo Δt . Quando a quantidade total de óxido neutro carregado é criada e ultrapassa a espessura máxima especificada, um novo intervalo espacial na malha é incluído na integração da equação (2.7): $\left(\frac{\partial \bar{\rho}_-}{\partial t} = \frac{\partial J_-}{\partial x}\right)$. Agora os passos de 1 a 4 são resolvidos para densidade de carga de ânion na região $[-x_0, \Gamma]$.

Com o tempo, uma malha espacial não-uniforme com aumento no tamanho cobre o domínio $-x_0 \leq x \leq \Gamma$. Os valores do campo elétrico e dos fluxos de carga são especificados nos nós da malha, enquanto as densidades de carga são dadas nos intervalos, que segue a equação (2.7) atualmente resolvida para quantidades $\bar{\rho}_i$, que representa as densidades de carga dos ânions no intervalo $(i, i+1)$.

3.6 Renormalização da Malha Espacial

Com o tempo, o tamanho da malha aumenta e o intervalo da malha Δx em Γ decresce, assim uma renormalização da malha espacial é feita periodicamente a cada número fixo de passos no tempo, preservando o tempo da CPU e evitando também uma resolução espacial muito grande longe do avanço da frente da camada de depleção (onde o campo da carga elétrica é aproximadamente uniforme).

A estratégia de renormalização é agregar dois intervalos adjacentes da malha quando a diferença percentual relativa entre eles for menor que um limiar dado (por exemplo: 10%). Isto é feito comparando-se a dispersão numérica entre os dois valores dos intervalos adjacentes das densidades de carga com um mínimo pré-estabelecido. (Fabbri & Senna, 2004)

A Figura (3.6) exemplifica a renormalização utilizada na malha espacial e a equação (3.23) apresenta a média ponderada aplicada aos intervalos adjacentes, que se agregam conforme a condição pré-estabelecida.

$$\bar{\rho}_i = \frac{(x_{i+1} - x_i)\bar{\rho}_i + (x_{i+2} - x_{i+1})\bar{\rho}_{i+1}}{(x_{i+2} - x_i)} \quad (3.23)$$

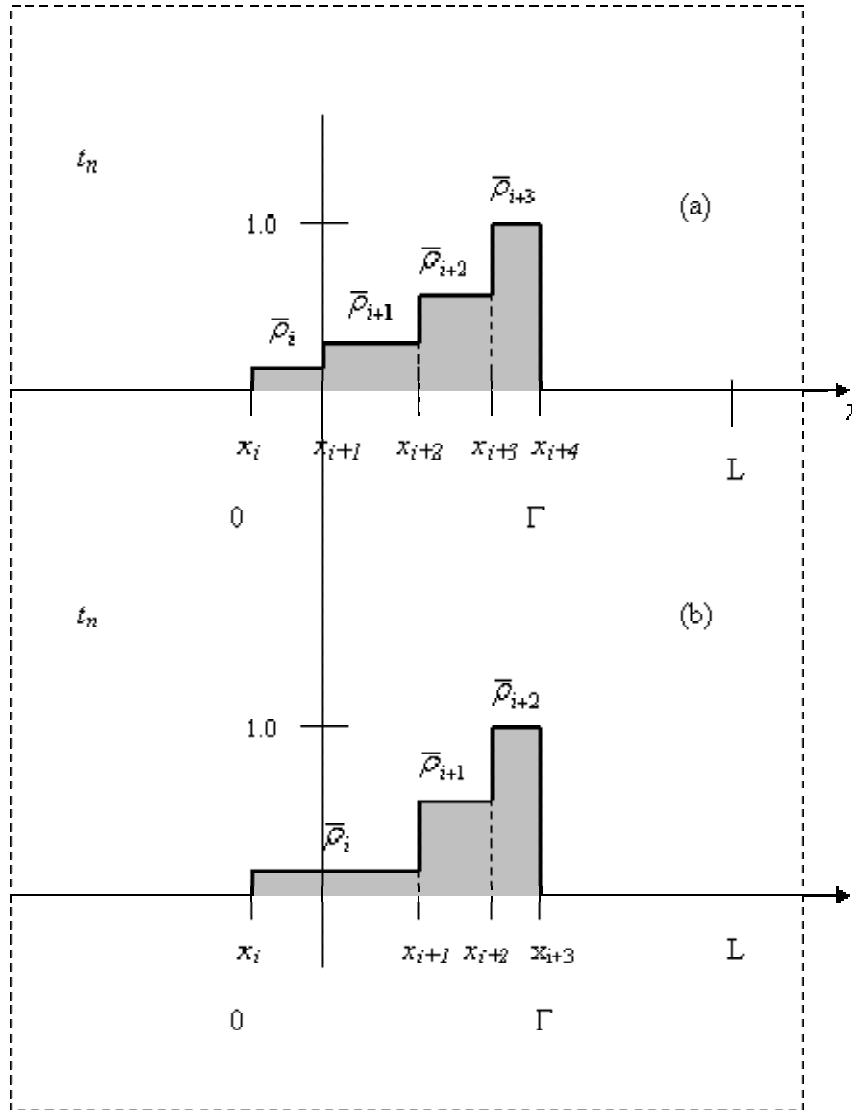


FIGURA 3.6: Ilustração da renormalização da malha espacial no n-passo de tempo.

3.7 Consistência, Estabilidade e Convergência

Os conceitos de consistência, estabilidade e convergência sempre devem ser considerados quando se resolve uma equação diferencial parcial pelos métodos de

diferenças finitas. A consistência e a ordem são determinadas pela equação diferencial modificada. A estabilidade é investigada ao aplicar o método de Von Neumann. E a convergência é garantida pelo teorema da equivalência de Lax. (Hoffman, 1992)

O teorema de Lax é aplicado a problemas lineares de valor inicial bem-posto, mas no ramo da engenharia e da ciência há não-lineares, e não existe teorema equivalente para analisar estes problemas. Assim, as equações diferenciais parciais não-lineares são linearizadas localmente, e a equação de diferenças finitas resultante é analisada para verificar a estabilidade. (Hoffman, 1992)

Segundo Hoffman, (1992) existem experiências mostrando que o critério de estabilidade obtido para a equação de diferenças finitas linearizada também é aplicado à não-linear, e se a equação de diferenças finitas for consistente e a equivalente linearização for estável, geralmente é convergente.

Neste presente trabalho a equação (2.7) é não-linear, denominada equação da continuidade, e posteriormente a equação (2.11) será acoplada, tornando a análise numérica ainda mais complicada. Deste modo, será necessário ter um perfeito conhecimento da física do problema para encontrar os parâmetros que levem o processo iterativo à convergência.

Uma maneira de linearizar a equação (3.16) é simplificar alguns parâmetros físicos, com o intuito de apresentar o principal e mais importante enfoque deste problema e também devido ao fato da complexidade das equações tratadas. A seguir apresenta-se a consistência, estabilidade e convergência, com suas respectivas análises.

3.7.1 Consistência

Em uma aproximação numérica o requisito fundamental é que ela reproduza a equação diferencial quando os tamanhos da malha espacial e temporal tendam a zero. Isto é, os erros de truncamento devem tender a zero quando a malha tender a um infinito número de pontos. A aproximação numérica que possui essa característica é denominada

consistente. Resumidamente, as equações discretizadas devem tender as equações diferenciais, quando a malha tender a zero. (Maliska, 1995)

Considere a equação (3.16) com os parâmetros α e E simplificados, ou seja, constantes. Utilizam-se a expansão em série de Taylor para os termos presentes nesta equação em torno dos pontos convenientes do domínio discretizado.

A equação (3.24) representa o domínio espacial desenvolvido em série de Taylor, enquanto o domínio temporal é apresentado na equação (3.25), como segue:

$$\bar{\rho}_{i\pm 1}^{n+1} = \bar{\rho}_i^{n+1} \pm \bar{\rho}_x \Delta x + \frac{1}{2} \bar{\rho}_{xx} \Delta x^2 \pm \frac{1}{6} \bar{\rho}_{xxx} \Delta x^3 + \dots \quad (3.24)$$

$$\bar{\rho}_i^{n+1} = \bar{\rho}_i^n + \bar{\rho}_t \Delta t + \frac{1}{2} \bar{\rho}_{tt} \Delta t^2 + \frac{1}{6} \bar{\rho}_{ttt} \Delta t^3 + \dots \quad (3.25)$$

Substituindo os termos da equação (3.12) pelas séries de Taylor apresentadas nas equações (3.24) e (3.25), encontra-se a equação diferencial modificada:

$$\bar{\rho}_t = \mu E \bar{\rho}_x - \frac{1}{2} \bar{\rho}_{tt} \Delta t + \frac{1}{6} \mu E \bar{\rho}_{xxx} \Delta x^2 + \dots \quad (3.26)$$

Da equação (3.26) conclui-se que o problema aproximado (3.11) é consistente, quando Δt e Δx tendem a zero.

A ordem de precisão de um esquema é definida a partir do erro de truncamento. Assim neste problema a ordem é $\mathcal{O}(\Delta t + \Delta x^2)$.

3.7.2 Estabilidade

A estabilidade, como a consistência, também é um requisito fundamental, pois se uma equação diferencial parcial possuir uma solução limitada, a equação de diferenças finitas será estável se também produzir uma solução limitada. (Hoffman, 1992)

O esquema de diferenças não deve permitir que o erro cresça indefinidamente, isto é, que seja amplificado sem limite a cada passo de tempo. Há pelo menos três métodos de

análise de estabilidade: método da matriz, método da equação diferencial equivalente e método de Von Neumann. Neste trabalho, será utilizado o método de Von Neumann.

O método de Von Neumann para a análise da estabilidade foi desenvolvido em Los Alamos durante a II Guerra Mundial por Von Neumann e foi considerado secreto (confidencial) até sua descrição resumida em Cranck & Nicholson, (1946). Atualmente esta é uma técnica amplamente aplicada na análise de estabilidade.

A essência do método consiste em representar tanto o erro quanto a solução já que ambos satisfazem à equação de diferença, como uma expansão em série de Fourier observando então o princípio da superposição, ou seja, de que o erro global é o somatório de erros mais simples também chamados harmônicos. (Hirsch, 1994)

Os detalhes da análise de estabilidade para a equação (3.16) serão apresentados na seqüência, através do método de Von Neumann.

A equação (3.16) apresenta o problema aproximado consistente, que será analisado neste capítulo para provar sua estabilidade.

A análise inicia-se com os termos $\bar{\rho}_{i\pm 1}^n$ e $\bar{\rho}_{i\pm 1}^{n+1}$ desenvolvidos em série de Fourier, apresentados aqui e detalhados em Hoffman, (1992):

$$\bar{\rho}_{i\pm 1}^n = \bar{\rho}_i^n e^{\pm j\theta} \quad (3.27)$$

$$\bar{\rho}_{i\pm 1}^{n+1} = \bar{\rho}_i^{n+1} e^{\pm j\theta} \quad (3.28)$$

onde $\bar{\rho}_i^n$ e $\bar{\rho}_i^{n+1}$ são as amplitudes do i -ésimo harmônico de $\bar{\rho}_{i\pm 1}^n$ e $\bar{\rho}_{i\pm 1}^{n+1}$, respectivamente e j é uma das raízes da equação $x^2 = -1$.

Substituindo as equações (3.27) e (3.28) na equação (3.16), fica reescrita como:

$$-\frac{\alpha E}{2} \bar{\rho}_i^{n+1} e^{+j\theta} + \left(1 + \frac{\alpha E}{2} - \frac{\alpha E}{2}\right) \bar{\rho}_i^{n+1} + \frac{\alpha E}{2} \bar{\rho}_i^{n+1} e^{-j\theta} - \bar{\rho}_i^n = 0 \quad (3.29)$$

Usando a identidade de Euler (Hoffman, 1992) dada por:

$$e^{\pm j\theta} = \cos \theta \pm j \sin \theta \quad (3.30)$$

Substituindo a equação (3.30) na equação (3.29), reescrita assim:

$$-\frac{\alpha E}{2} \bar{\rho}_i^{n+1} (\cos \theta + j \sin \theta) + \bar{\rho}_i^{n+1} + \frac{\alpha E}{2} \bar{\rho}_i^{n+1} (\cos \theta - j \sin \theta) - \bar{\rho}_i^n = 0 \quad (3.31)$$

Conclui-se que:

$$\bar{\rho}_i^{n+1} = \frac{1}{1 - \alpha E j \sin \theta} \bar{\rho}_i^n \quad (3.32)$$

E com a definição do fator de amplificação da solução apresentada a seguir e detalhada em Hoffman, (1992):

$$G = \frac{\bar{\rho}_i^{n+1}}{\bar{\rho}_i^n} = G(\theta, \Delta t, \Delta x) \quad (3.33)$$

Permite-se obter:

$$G = \frac{1}{1 - \alpha E j \sin \theta} \quad (3.34)$$

A condição de estabilidade é satisfeita se a amplitude de qualquer harmônico $\bar{\rho}_i^n$ não aumentar com o tempo, isto é, sempre que valer a relação (3.35) (Hoffman, 1992); (Hirsch, 1994):

$$|G| = \left| \frac{\bar{\rho}_i^{n+1}}{\bar{\rho}_i^n} \right| \leq 1 \quad (3.35)$$

Assim, ao aplicar a norma quadrática na equação (3.30), resulta:

$$|G| = \sqrt{\frac{1}{1 + (\alpha E)^2 \sin^2 \theta}} \quad (3.36)$$

Portanto, ao analisar o fator de amplificação da solução apresentada pela equação (3.36) conclui-se que o esquema (3.16) é incondicionalmente estável para qualquer θ .

3.7.3 Convergência

Evidenciando que as condições de consistência, estabilidade e convergência estão relacionadas entre si, e que a relação mais precisa está contida no fundamental Teorema da Equivalência de Lax, cuja prova pode ser encontrada em Richtmyer & Morton, (1967), apresenta-se nesta seção a abordagem da convergência do problema apresentado pelo esquema (3.16).

Entretanto, é bastante pertinente expor de forma breve o conceito de um problema bem-posto antes de passar ao enunciado do teorema da equivalência de Lax. O conteúdo a seguir segue a apresentação de Hirsch, (1994) e também pode ser encontrado em Hoffman, (1992).

A noção de problemas bem-postos foi formalizada pelo matemático Hadamard (Richtmyer & Morton, 1967); (Hirsch, 1994) no início do século XX. Segundo esta noção, se um problema tem uma única solução e se pequenas perturbações nos dados de entrada provocam pequenas perturbações nos resultados, então este problema é bem-posto. Esta última condição é chamada estabilidade do problema com relação aos dados. Eis então o enunciado do teorema da equivalência de Lax:

Para um problema de valor inicial bem-posto e um esquema de discretização consistente, a estabilidade é a condição necessária e suficiente para a convergência.

Este teorema fundamental mostra que para analisar um problema de valor inicial ou dependente do tempo, duas tarefas têm que ser executadas:

- 1) A análise da condição da consistência que conduz à determinação da ordem de precisão do esquema e de seu erro de truncamento;

- 2) A análise das propriedades da estabilidade que conduz à informação detalhada da distribuição de frequência do erro, ou seja, o erro global é a somatória de erros simples.

A partir destes dois passos, assegura-se a convergência sem análise adicional.

Portanto a solução numérica da equação (3.16) é convergente quando é estável e tende para a solução das equações diferenciais quando a malha é refinada.

CAPÍTULO 4

RESULTADOS

Os valores característicos do comprimento l_d e do tempo τ para a dinâmica da zona de depleção são definidos como:

$$l_d = \sqrt{2\varepsilon V_0/n_{0+}} \quad (4.1)$$

$$\tau = 2\varepsilon r L/l_d \quad (4.2)$$

As simulações numéricas foram realizadas usando as constantes físicas comuns na literatura (Tabela 4.1) e inicialmente apresentadas no trabalho de Albaugh, (1991), que obteve $l_d = 2.12 \times 10^{-8}$ m e $\tau = 2.06$ s. O significado físico destes valores é que, na ausência de medidas de oxigênio no vidro, o comprimento máximo da zona de depleção é aproximadamente $20\eta m$ e a corrente elétrica externa decai exponencialmente para zero com o tempo constante ao redor de $4\tau = 8$ segundos (Albaugh, (1991) e Fabbri & Senna, (2004)). Estas ordens de magnitude são menores que as encontradas experimentalmente (Albaugh, (1991); Wallis, (1970) e Schmidt et al., (1998)). Neste trabalho, os valores observados são corretamente prognosticados pelas simulações numéricas somente para a mobilidade dos íons de oxigênio alta no interior do vidro depletado.

O valor comparativo entre a densidade de carga de oxigênio no crescimento do óxido de silício neutro e a densidade de carga de oxigênio livre no vidro, n_{ox} , é estimado como se segue. Cada molécula de silício oxidado carrega dois ânions de oxigênio, que correspondem a quatro cargas elementares. Da densidade molecular conhecida de SiO_2 , 2.3×10^{22} moléculas/cm³ (Ruska, 1987), têm-se o valor de 1.5×10^{10} C/m³ da densidade de carga de oxigênio na camada de óxido de silício neutra. Na suposição que, no vidro, há somente fonte de átomos de oxigênio da dissociação de Na_2O e usando os dados

conhecidos para o vidro Pyrex contendo sódio (Albaugh, 1991), obtém-se uma estimativa grosseira:

$$n_{ox} \leq 60 \quad (4.3)$$

De fato, medidas experimentais recentes sugerem que a densidade de carga de oxigênio do crescimento do óxido de silício durante estágios da solda assemelha-se com a densidade do oxigênio livre no vidro (Helvoort et al., 2004), isto é, n_{ox} é provavelmente decrescente e contínuo durante o processo de solda, aproximando-se do valor 1.

TABELA 4.1: Valores dimensionais dos parâmetros usados nas simulações numéricas.

	<i>Parâmetro</i>	<i>Símbolo</i>	<i>Valor</i>
<i>Quadro experimental</i>	Potencial aplicado	V_0	1000V
	Espessura do Vidro	L	3,2mm
<i>Propriedades Físicas</i>	Constante Dielétrica	ϵ	$7\epsilon_0$
	Permissibilidade	ϵ_0	8.85×10^{-12} F/m
	Carga do sódio	n_{0+}	2.77×10^8 C/m ³
	Resistividade iônica do Na ⁺	r	1.1×10^5 Ω .m

Os resultados dos transientes elétricos obtidos com a simulação numérica apresentados na seqüência são: fluxo de corrente, campo elétrico, densidade de carga, camada de óxido e de depleção.

4.1 Fluxo de Corrente

Os valores observados do fluxo de corrente são obtidos pelo fluxo de cátions de sódio na posição da interface Γ , apresentada na equação (2.10). No modelo linear (ôhmico) simples, J_+ tem o mesmo comportamento do campo elétrico local em Γ . Os resultados

comparativos com os pontos experimentais de Albaugh, (1991) são mostrados na Figura (4.1).

Naturalmente, o detalhe do declínio do fluxo de corrente, ou seja, a concavidade, durante o transiente inicial da solda provavelmente acontece por ser muito sensível ao contato mecânico e a aspereza microscópica da interface silício-vidro (Si-G), pois para tempos grandes o decaimento é suave. O detalhe do declínio da curva de corrente elétrica é apresentado na Figura (4.2), juntamente com os pontos experimentais de Albaugh, (1991), que foram utilizados neste trabalho a partir de análise visual dos resultados publicados.

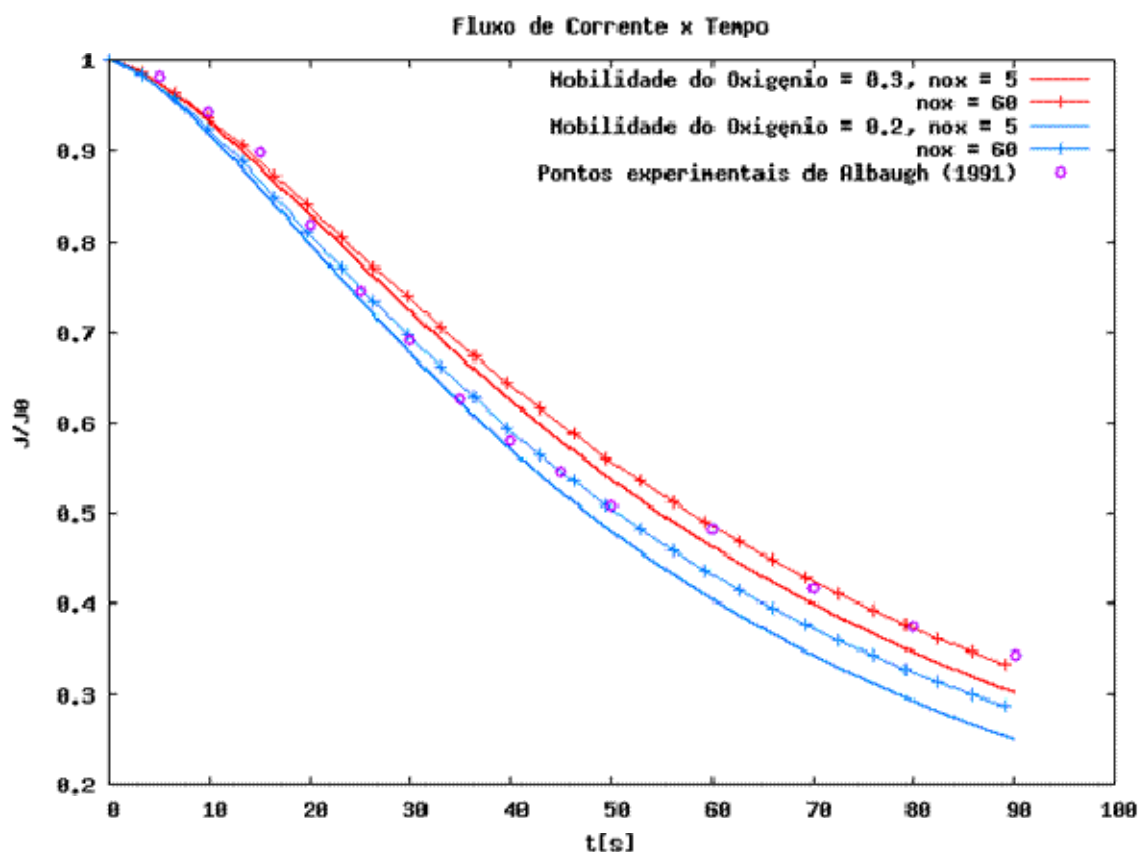


FIGURA 4.1: Fluxo de corrente adimensional em função do tempo. Os círculos são os pontos medidos por Albaugh (1991). As curvas são os resultados das simulações numéricas. A mobilidade dos cátions é fixada no valor $\mu_+ = 1$.

Ao analisar os resultados do fluxo de corrente (Figura 4.1), compreende-se que as curvas obtidas com a mobilidade dos ânions O^- igual a 30% da mobilidade dos cátions Na^+ , aproximam-se bem dos pontos experimentais de Albaugh, (1991) no início e no fim do processo da solda, ou seja, nos intervalos de tempo 0 a 20 segundos e 60 a 90 segundos, respectivamente. Já a mobilidade igual a 20% em relação a dos cátions Na^+ resulta em curvas próximas aos pontos experimentais de Albaugh, (1991) no intervalo de tempo de 20 a 60 segundos. Mas do ponto de vista puramente de transporte de carga, a Figura (4.1) sugere um decrescimento na densidade de carga de oxigênio na camada de óxido de silício com seu desenvolvimento; isto foi também observado nas medidas da TEM feita por Helvoort et al., (2004), ou seja, n_{ox} decrescente.

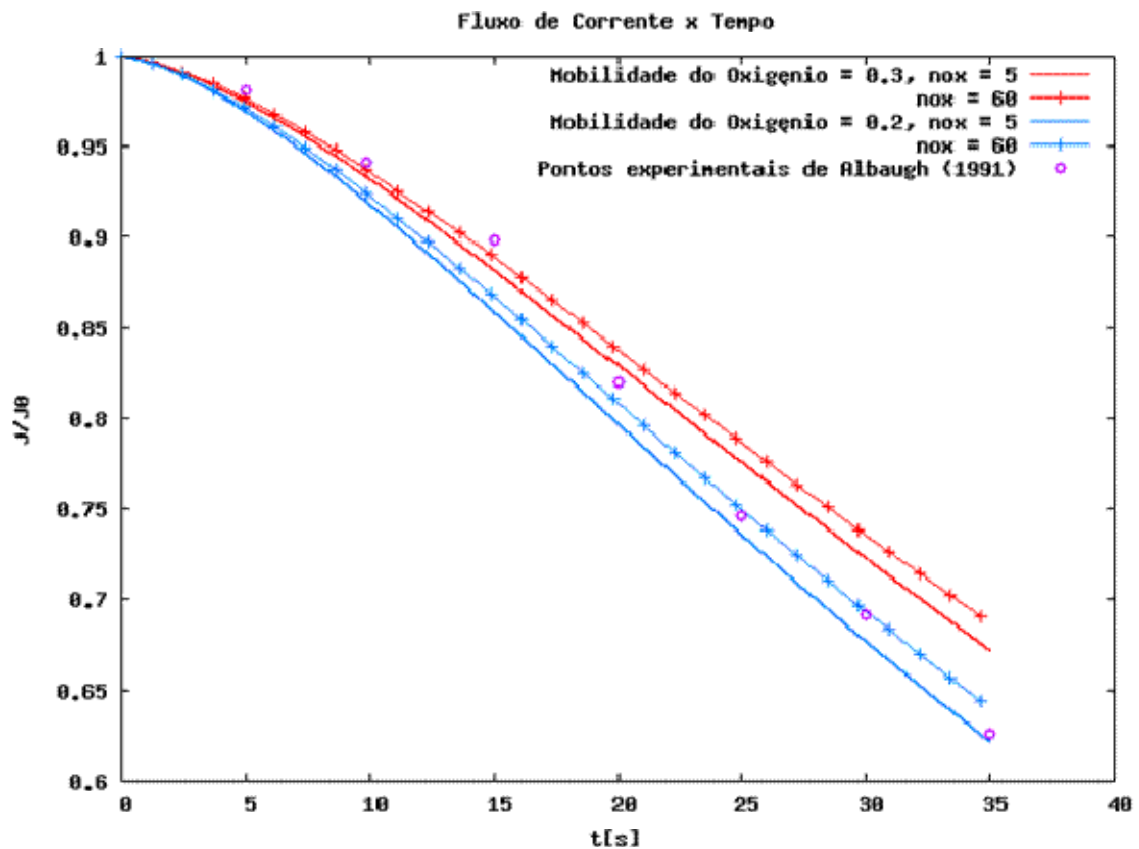


FIGURA 4.2: Detalhes do fluxo de corrente externa adimensional em função do tempo. Os círculos são os pontos medidos por Albaugh (1991).

4.2 Campo Elétrico

O campo elétrico no interior do vidro atinge o seu valor máximo na interface do óxido. Este valor é compatível com o campo de ruptura do vidro, desde que a solda ocorra sem pane elétrica; com as estimativas reais das densidades de carga presente no vidro neutro (Tabela 4.1), que é possível somente se a zona de depleção tornar-se quase livre de ânions durante a solda, e isso ocorre quando a mobilidade do ânion O^- atinge pelo menos 30% da mobilidade do cátion Na^+ .

A Figura (4.3) mostra que a camada de óxido de silício tem um pequeno efeito sobre os valores atingidos pelo campo elétrico na interface vidro-óxido (G-O) e que os melhores valores são representados pela mobilidade dos ânions O^- igual a 30% da mobilidade dos cátions Na^+ , além de reforçar que a densidade de carga de oxigênio na camada de óxido de silício decresce com o decorrer do processo da solda anódica.

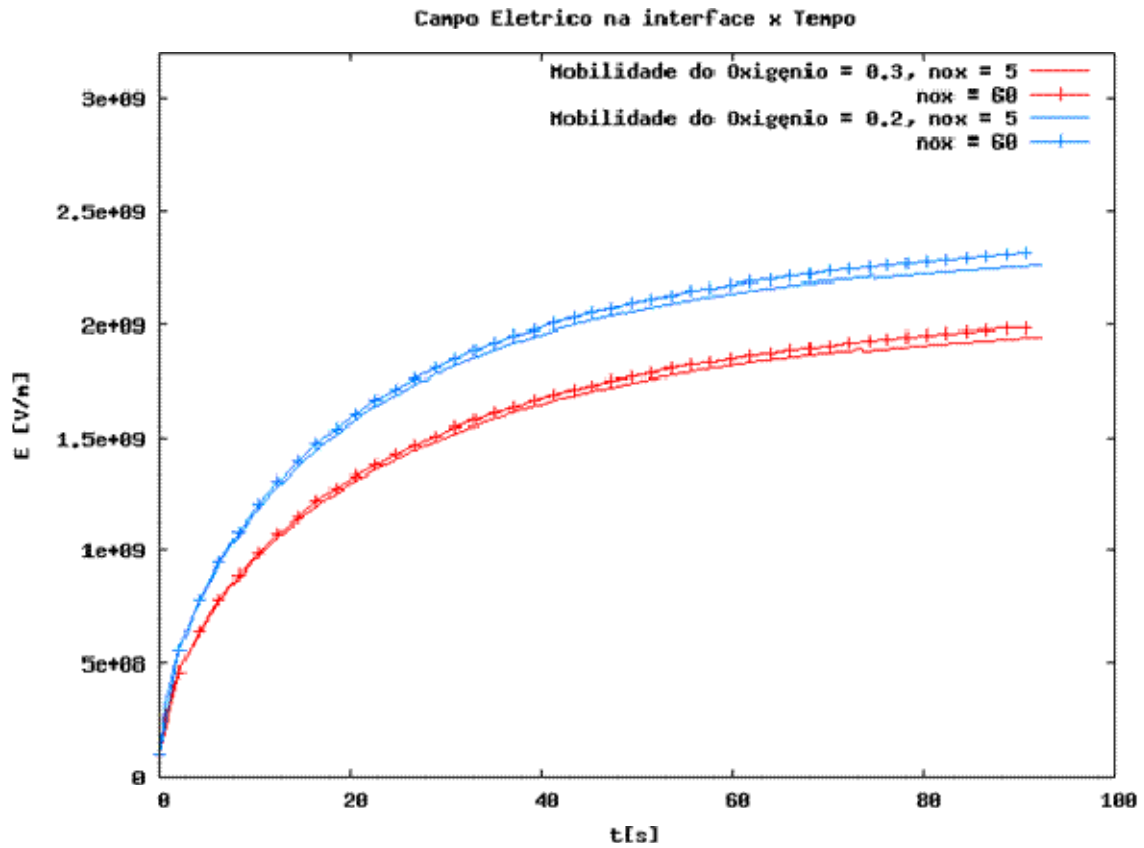


FIGURA 4.3: Resultados numéricos do campo elétrico na interface vidro-óxido durante o transiente anódico, em função da mobilidade dos ânions de oxigênio μ_{ox} e da densidade relativa do óxido n_{ox} , em unidades dimensionais. O campo de ruptura do vidro Pyrex é aproximadamente 1.0×10^7 V/cm.

A Figura (4.4) exibe os detalhes do campo elétrico apresentado na Figura (4.3), ou seja, no intervalo de 10 a 90 segundos.

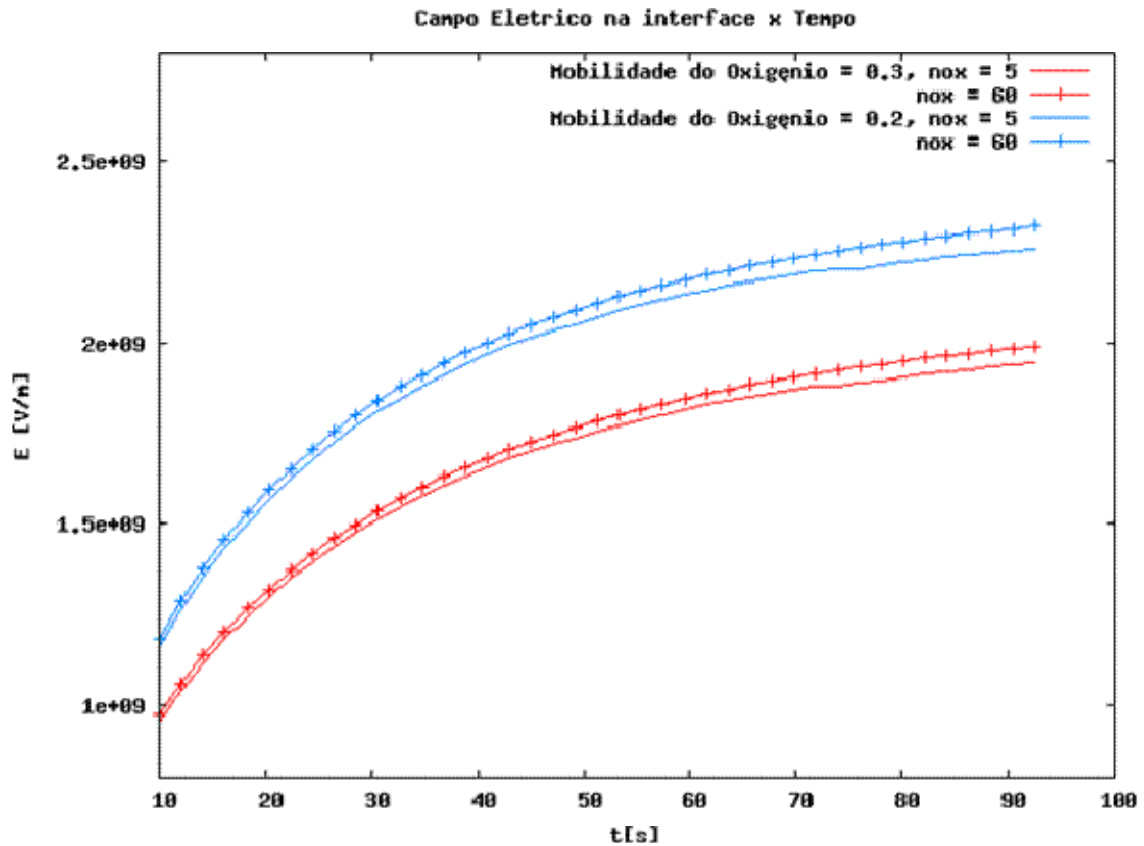


FIGURA 4.4: Detalhes dos resultados numéricos do campo elétrico na interface vidro-óxido durante o transiente anódico, em função da mobilidade dos ânions de oxigênio μ e da densidade relativa do óxido n_{ox} , em unidades dimensionais.

4.3 Densidade de Carga

A Figura (4.5) mostra a densidade de carga dos íons de oxigênio nas camadas de óxido de silício, depleção e início da neutra, no final do processo da solda anódica. Os resultados evidenciam o deslocamento dos íons de oxigênio do interior da camada de depleção, em direção ao silício, formando a camada de óxido.

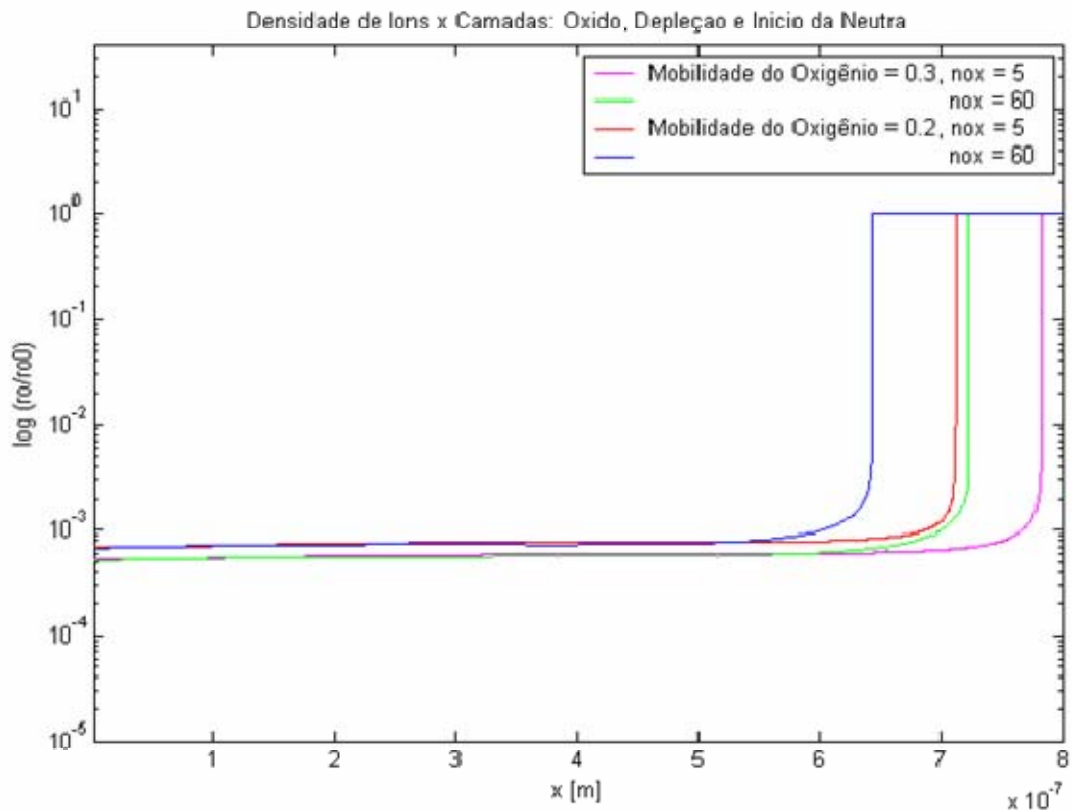


FIGURA 4.5: Densidade de carga dos íons de oxigênio adimensional em função das camadas de óxido de silício, depleção e início da neutra no tempo 90s.

4.4 Camada de Óxido

A espessura da camada de óxido de silício é representada na Figura (4.6) em função do tempo em unidades dimensionais.

Para $\mu = 0.3$ e $n_{ox} = 5$, quase $30\eta\text{m}$ de óxido é esperado para o crescimento durante o primeiro minuto da solda. Se admitirmos que a densidade de carga de oxigênio na camada de óxido de silício possa decrescer durante a solda, uma camada entre $10\text{-}40\eta\text{m}$ é prognosticada, que é consistente com as medidas da TEM de Helvoort et al., (2004).

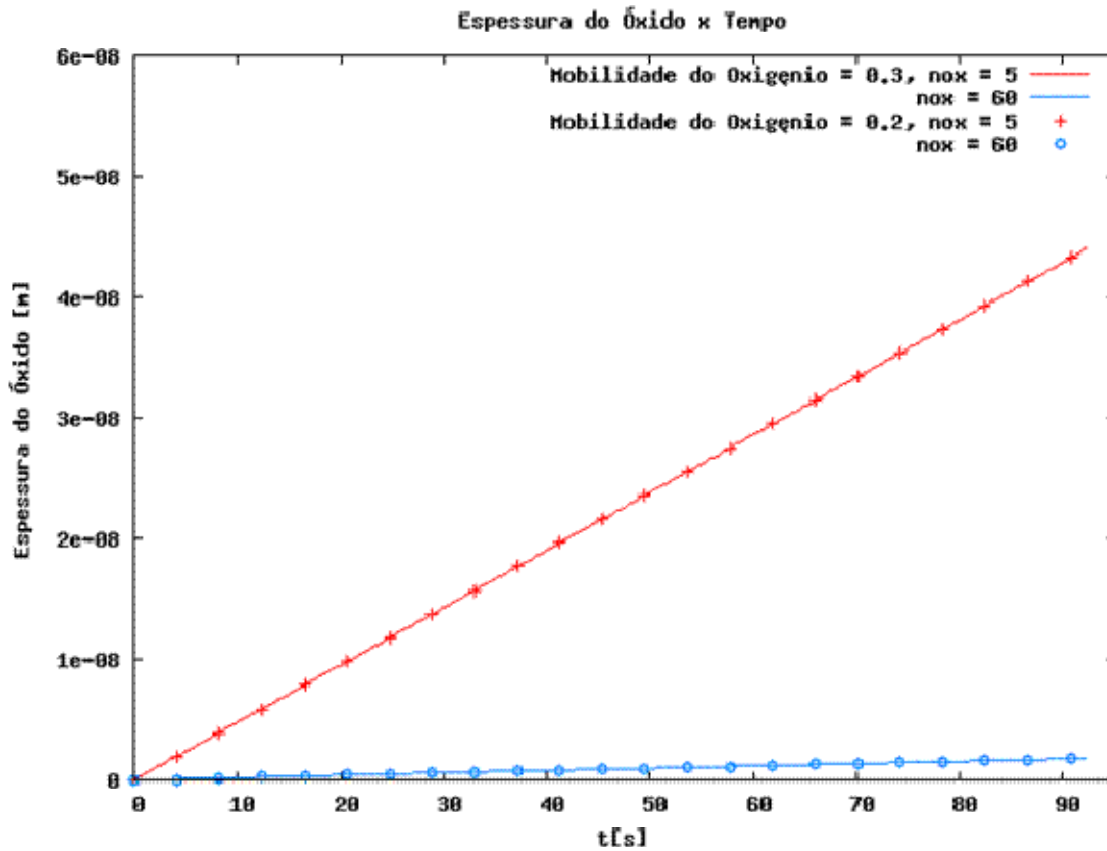


FIGURA 4.6: Crescimento prognóstico da camada de óxido de silício no tempo, em unidades dimensionais.

4.5 Camada de Depleção

Finalmente, a Figura (4.7) descreve a largura da camada de depleção Γ , que é de uma a duas ordens de magnitude maior que a camada de óxido de silício. Os valores previstos estão de acordo com os resultados experimentais de Wallis (1970) e não interferem no ponto de vista puramente de transporte de carga, ou seja, no decréscimo da densidade de carga de oxigênio na camada de óxido de silício durante o processo da solda, pois a diferença entre os resultados é muito pequena.

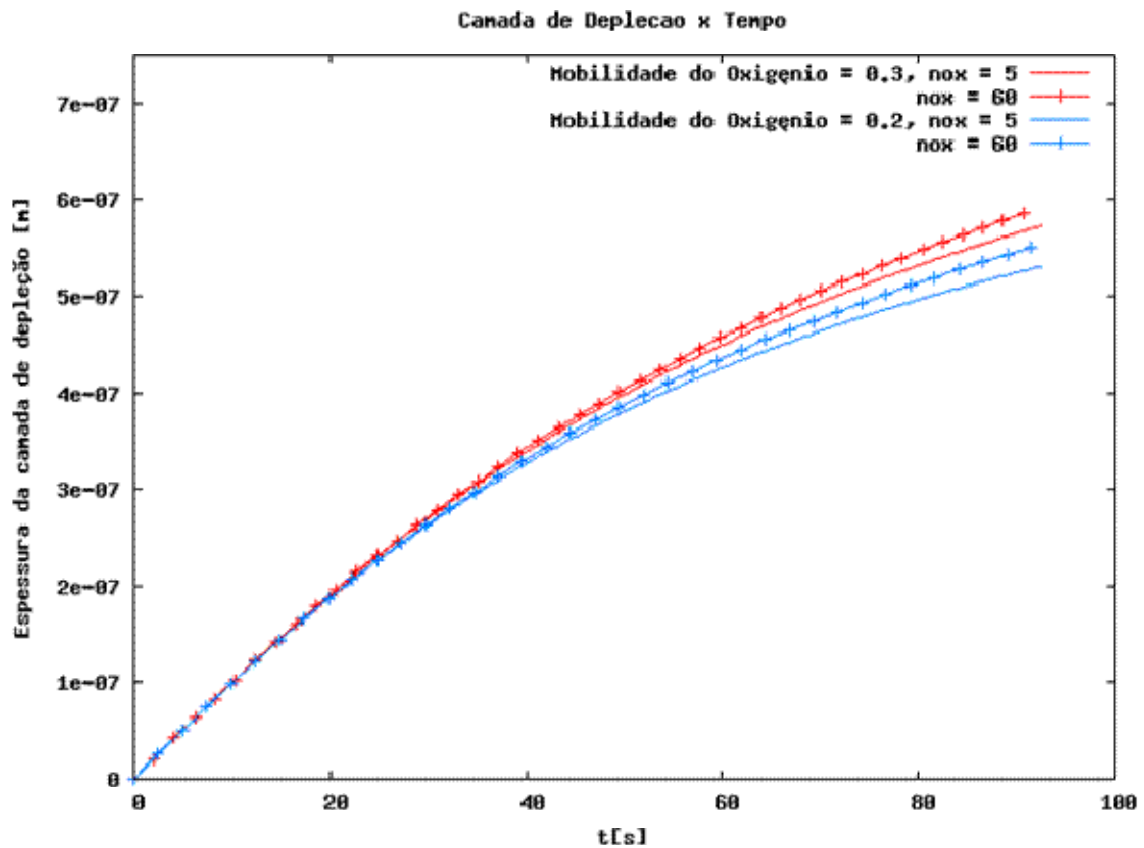


FIGURA 4.7: Largura da camada de depleção calculada em função do tempo, em unidades dimensionais.

O detalhe do crescimento da camada de depleção no intervalo de 30 a 90 segundos é apresentado na Figura (4.8).

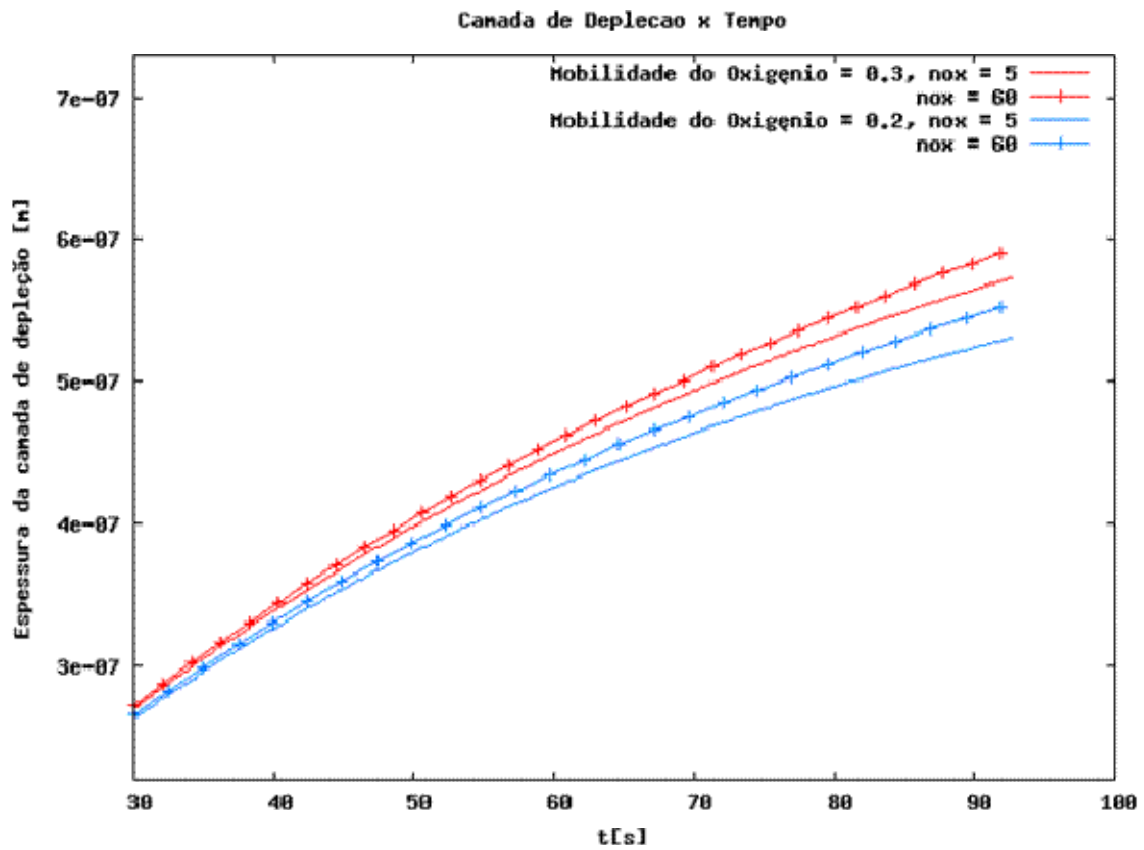


FIGURA 4.8: Detalhes da largura da camada de depleção calculada em função do tempo, em unidades dimensionais.

CAPÍTULO 5

CONCLUSÕES E COMENTÁRIOS

O objetivo deste trabalho consistiu na análise dos transientes elétricos durante o processo de solda anódica. Os resultados encontrados permitiram chegar às conclusões descritas na seqüência.

Os resultados das simulações numéricas mostraram que o crescimento do óxido durante a solda anódica pode ser considerado quantitativamente pelo oxigênio disponível na região de depleção no interior do vidro.

Valores calculados cuidadosamente para o transiente do fluxo de corrente e a espessura do óxido de silício sugerem que a densidade dos íons de oxigênio na camada de óxido decresça continuamente de uma fase cristalina de SiO₂ para uma amorfa, onde o óxido é fixado na matriz do silício com a densidade comparável a densidade do oxigênio livre no vidro neutro.

O modelo e os cálculos apresentados aqui são melhores que o trabalho publicado anteriormente por Fabbri e Senna, (2004), porque eles consideraram a incorporação instantânea dos íons de oxigênio na matriz do silício. E reforça a importância do transporte de ânions no vidro com valores altos apropriados para a mobilidade do oxigênio na camada de depleção. Todas as quantidades prognosticadas das simulações são consistentes se comparadas com as medidas experimentais de Albaugh, (1991) e de Helvoort et al., (2004). Experimentos adicionais estão sendo desenvolvidos nos laboratórios do INPE.

Os cálculos foram feitos em um computador Pentium HT com 3.2 GHz usando o compilador gcc, onde uma típica simulação de um transiente de 90 segundos leva menos de um minuto do tempo da CPU para os valores relativos da mobilidade dos ânions (μ_{o^-} / μ_{Na^+}) em torno de 30 %.

Finalmente, a fim de complementar este trabalho, sugere-se a realização de outras pesquisas que levem em consideração os seguintes assuntos:

- 1) Estudar os transientes elétricos obtidos no processo de solda anódica para tempos grandes.
- 2) Simular numericamente os transientes elétricos da solda anódica para outros materiais semicondutores (por exemplo: germânio) em contato com o vidro.

É importante ressaltar que o entendimento adquirido sobre os transientes elétricos, neste trabalho, pode ajudar os pesquisadores a otimizar o processo da solda anódica silício-vidro.

CAPÍTULO 6

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- Albaugh, K. B. Electrode phenomena during anodic bonding of silicon to sodium borosilicate glass. **Journal Electrochem Society**, v. 138, n. 10, p. 3089-3094, Oct. 1991.
- Carlson, D. E.; Hang, K. W.; Stockdale F. Electrode polarization in alkali-containing glasses. **J. Am. Cer. Soc.**, v. 55, n. 7, p. 337-341, July. 1972.
- Cebrace.vidro. **O vidro**. [s.l]. 2006. Disponível em: <www.cebrace.com.br/telas/vidro/default.asp>. Acesso em: 09 set. 2006.
- Ciarlet P. G. **Handbook of numerical analysis**. Vol. 1: Finite difference methods (part 1) - Solutions of equations in R^n (part 1). Amsterdam: N. H., Elsevier Science B. V., 1992, 928 p.
- Cranck, J.; Nicholson, P. A practical method for numerical evaluation of solutions of partial differential equations of the heat conduction type. **Proceedings of the Cambridge Philosophical Society**, v. 43, p. 50-67, Mar. 1946.
- Cunha M. C. C. **Métodos numéricos**. São Paulo: Ed. Unicamp, 2000, 265 p.
- Fabbri, M.; Senna, J. R. Numerical Simulation of Ion Transport During Anodic Bonding. In: Congresso Íbero-Latino Americano de Métodos Computacionais em Engenharia, 25., 2004, Recife-PE. Proceedings... . Recife-PE, UFPE, 2004.
- Fortuna, A. O. **Técnicas computacionais para dinâmica dos fluidos: conceitos básicos e aplicações**. São Paulo: Ed. Universidade de São Paulo, 2000, 343 p.
- Griffiths D. J. **Introduction to electrodynamics**. New York: Prentice-Hall, Inc, 1999, 576 p.
- Helvoort A. T. J. Van; Knowles K. M.; Holmestad R.; Fernie J. A. Anodic oxidation during electrostatic bonding. **Philosophical Magazine**, v. 84, n. 6, p. 505-519, Fev. 2004.
- Hildebrand F. B. **Finite - difference equations and simulations**. New Jersey: Englewood Cliffs, 1968. 338 p.
- Hirsch, C. **Numerical computation of internal and external flows**. New York: John Wiley & Sons, 1994. 515 p.
- Hoffman, J. D. **Numerical methods for engineers and scientists** . New York: McGraw - Hill, 1992. 823 p.
- Jackson, J. D. **Classical electrodynamics**. New York: John Wiley & Sons, Inc, 1975. 640 p.

- Lapidus L.; Pinder G. F. **Numerical solution of partial differential equations in science and engineering**. New York: John Wiley & Sons, 1982. 677 p.
- Malcolm D. I. The impact of recent developments on the theory of and prospects for ionic conduction in glass. **J. Non-Crystalline Solids**, v. 73, p. 247-253, Oct 1985.
- Maliska C. R. **Transfêrencia de calor e mecânica dos fluidos computacional: fundamentos e coordenadas generalizadas**. Rio de Janeiro: LTC - Livros Técnicos e Científicos Editora S. A., 1995, 424 p.
- Morey G. W. **The properties of glass**. New York: Reinhold Publishing Corporation, 1954, 591 p.
- Mitchell A. R. **Computational methods in partial differential equations**. New York: John Wiley & Sons, 1969, 255 p.
- Mitchell A. R., Griffiths D. F. **The finite difference method in partial differential equations**. New York: John Wiley & Sons, 1980, 272 p.
- Nitzsche P.; Lange K.; Schmidt B.; Grigull, S. and Kreissing U. Ions Drift Processes in Pyrex-type Alkali-borosilicate Glass During Anodic Bonding. **J. Electroch. Soc.**, v. 145, n. 5, p. 1755-1762, 1998.
- Paes F. F.; Fabbri M. Simulação de transientes elétricos durante o processo de solda anódica. In: WORCAP - Workshop dos cursos de computação aplicada do INPE, 5., 2005, São José dos Campos. **Anais...** . São José dos Campos: INPE, 2005.
- Press, W. H.; Teukolky, S. A.; Vetterling, W. T.; Flannery, B. P. Numerical recipes in C: the art of scientific computing. New York: Cambridge University Press, 1992, 965 p.
- Purcell E. M. **Electricity and magnetism**. New York: McGraw-Hill, 1985, 484 p.
- Richtmyer, R. D.; Morton, K. W. **Difference methods for initial value problems**. London: John Wiley & Sons, 1967, 405 p.
- Rios A. N.; Gracias A. C.; Maia I. A.; Senna J. R. Modeling the anodic current in silicon-glass bonding. **Revista Brasileira de Aplicação de Vácuo**, v. 19, p. 31-34, Set. 2000.
- Rios, A. N. **Solda eletrostática vidro-semicondutor e semicondutor-semicondutor por camada intermediária de vidro**. 1999. 124p. Dissertação (Mestrado em Ciência no Curso de Física na Área de Física Atômica e Molecular) - Instituto Tecnológico de Aeronáutica, São José dos Campos. 1999.
- Ruska, W. S. **Microelectronic processing**. New York: McGraw - Hill, Jan. 1987. 430 p.
- Schmidt, B.; Nitzsche, P.; Lange, K.; Grigull, S.; Kreissig, U; Thomas, B. and Herzog, K. In situ investigation of ion drift processes in glass during anodic bonding. **J. Appl. Phys.**, v. A, n. 67, p. 191-198, Oct. 1998.
- Smith, G. D. **Numerical solution of partial differential equations: finite difference methods**. New York: Oxford University Press, 1978, 304 p.
- Thomas J. W. **Numerical partial differential equations: finite difference methods**. New York: Springer-Verlag, 1995, 437 p.

Wallis G.; Pomerantz D. I. Field assisted glass-metal sealing. **Journal of Applied Physics**, v. 40, p. 3946-3949, Set. 1969.

Wallis, G. Direct-current polarization during field-assisted glass-metal sealing. **J. Am. Cer. Soc.**, v. 53, n. 10, p. 563-567, Out. 1970.

Wikipedia, a enciclopédia on-line. **Vidro**. [s.l.], 2006a. Disponível em: <<http:pt.wikipedia.org/wiki/vidro>>. Acesso em: 09 set. 2006.

Wikipedia, a enciclopédia on-line. **Silício**. [s.l.], 2006b. Disponível em: <<http:pt.wikipedia.org/wiki/Sil%C3%ADcio>>. Acesso em: 09 set. 2006.

APÊNDICE A

EQUAÇÃO DA CONTINUIDADE

A.1 Demonstração unidimensional

Em problemas unidimensionais a equação da continuidade resume-se a:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u)}{\partial x} = 0 \quad (\text{A.1})$$

E pode-se obter esta equação considerando um líquido com densidade ρ e velocidade u , ambos variando com o espaço e o tempo, dentro de uma região com posições x e $x + \delta x$. Conforme é apresentado na Figura (A.1):

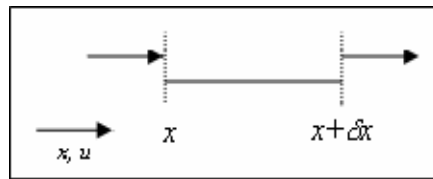


FIGURA A.1: Esquema ilustrativo do fluxo de massa através das fronteiras de um elemento unidimensional.

A massa nesta região no tempo t é:

$$\int_x^{x+\delta x} \rho(x, t) dx \approx \rho(x, t) \delta x \quad (\text{A.2})$$

Similarmente, a massa nesta região no tempo posterior $t + \delta t$ é:

$$\int_x^{x+\delta x} \rho(x, t + \delta t) dx \approx \rho(x, t + \delta t) \delta x \quad (\text{A.3})$$

Agora considere o fluxo apenas do lado esquerdo do elemento, no intervalo de tempo δt , representado por:

$$\rho(x, t)u(x, t)\delta t \quad (\text{A.4})$$

Do mesmo modo, o fluxo de massa do lado direito, no intervalo de tempo δt fica:

$$\rho(x + \delta x, t)u(x + \delta x, t)\delta t \quad (\text{A.5})$$

A diferença de massa na região deste elemento, no intervalo de tempo $(t, t + \delta t)$ é dada por:

$$\rho(x, t + \delta t)\delta x - \rho(x, t)\delta x \quad (\text{A.6})$$

O fluxo de massa do lado esquerdo menos o do direito do elemento resulta:

$$\rho(x, t)u(x, t)\delta t - \rho(x + \delta x, t)u(x + \delta x, t)\delta t \quad (\text{A.7})$$

Igualando as equações (A.6) e (A.7) e dividindo por $\delta x \delta t$ resulta:

$$\frac{\rho(x, t + \delta t) - \rho(x, t)}{\delta t} = - \left[\frac{\rho(x + \delta x, t)u(x + \delta x, t) - \rho(x, t)u(x, t)}{\delta x} \right] \quad (\text{A.8})$$

Fazendo o limite de $\delta x \rightarrow 0$ e $\delta t \rightarrow 0$ obtém:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = - \frac{\partial(\rho u)}{\partial x} \quad (\text{A.9})$$

que é a equação da continuidade.

A.2 Algoritmo de Thomas

Dados os vetores a , b , c , d e o tamanho n dos vetores:

1: Para $k = 1$: $n-1$ faça

2: $d_{k+1} = d_{k+1} - (a_{k+1} / d_k) c_k$

3: $b_{k+1} = b_{k+1} - (a_{k+1} / d_k) b_k$

4: $x_n = b_n / d_n$

5: Para $k = n-1$: 1 faça

6: $x_k = (b_k - c_k x_{k+1}) / d_k$

PUBLICAÇÕES TÉCNICO-CIENTÍFICAS EDITADAS PELO INPE

Teses e Dissertações (TDI)

Teses e Dissertações apresentadas nos Cursos de Pós-Graduação do INPE.

Manuais Técnicos (MAN)

São publicações de caráter técnico que incluem normas, procedimentos, instruções e orientações.

Notas Técnico-Científicas (NTC)

Incluem resultados preliminares de pesquisa, descrição de equipamentos, descrição e ou documentação de programa de computador, descrição de sistemas e experimentos, apresentação de testes, dados, atlas, e documentação de projetos de engenharia.

Relatórios de Pesquisa (RPQ)

Reportam resultados ou progressos de pesquisas tanto de natureza técnica quanto científica, cujo nível seja compatível com o de uma publicação em periódico nacional ou internacional.

Propostas e Relatórios de Projetos (PRP)

São propostas de projetos técnico-científicos e relatórios de acompanhamento de projetos, atividades e convênios.

Publicações Didáticas (PUD)

Incluem apostilas, notas de aula e manuais didáticos.

Publicações Seriadas

São os seriados técnico-científicos: boletins, periódicos, anuários e anais de eventos (simpósios e congressos). Constam destas publicações o Internacional Standard Serial Number (ISSN), que é um código único e definitivo para identificação de títulos de seriados.

Programas de Computador (PDC)

São a seqüência de instruções ou códigos, expressos em uma linguagem de programação compilada ou interpretada, a ser executada por um computador para alcançar um determinado objetivo. São aceitos tanto programas fonte quanto executáveis.

Pré-publicações (PRE)

Todos os artigos publicados em periódicos, anais e como capítulos de livros.