

DESARROLLO DE UN MODELO MATEMÁTICO  
PARA EL MÉTODO DE CRECIMIENTO DE  
CRISTALES DE BRIDGMAN-STOCKBARGER

Tesis de Maestría en Ciencias  
(Física)  
que presenta

Fis. Selina R. del C. Ponce Castañeda

FACULTAD DE CIENCIAS  
UNIVERSIDAD AUTONOMA DE SAN LUIS POTOSI

Febrero de 1994

---

# INDICE

	Pag.
RESUMEN . . . . .	i
I. INTRODUCCION . . . . .	1
II. ANALISIS MATEMATICO . . . . .	11
II.1 SISTEMA SIN AISLANTE	
II.2 SISTEMA CON AISLANTE	
III. RESULTADOS . . . . .	42
IV. CONCLUSIONES . . . . .	74
REFERENCIAS . . . . .	76
APENDICE . . . . .	78

---

# RESUMEN

Hasta hace pocos años, los métodos experimentales para el crecimiento de cristales eran técnicas empíricas para las que no se disponía de apoyo por parte de la teoría. Una teoría, tendría como propósito, proporcionar al físico experimental curvas de perfiles de temperatura, de velocidad de transferencia de la interfase, de calores latentes, etc. que le permitan, en lo posible, la alternativa de poder predecir el experimento o establecer las condiciones experimentales óptimas para realizar un buen crecimiento y aumentar la probabilidad de obtener cristales de buena calidad.

El propósito de esta tesis, es el estudio teórico del método de Bridgman-Stockbarger para crecimiento de cristales, en una aproximación unidimensional, con el objetivo de proponer un modelo matemático que describa la posición de la interfase sólido-líquido en función de los diferentes parámetros experimentales que están directamente relacionados con la velocidad de crecimiento cristalino, el acoplamiento térmico entre la carga y el horno, etc.

En el modelo se supone que la temperatura en un cilindro sólo es función de la coordenada axial.

La solución de la ecuación de la distribución de la temperatura, en un cilindro infinito, permitirá obtener curvas de perfil de temperatura, en función de la posición de la interfase sólido-líquido, y curvas con diversos parámetros del sistema que serán de utilidad para tratar de predecir un buen experimento.

# CAPITULO I

## INTRODUCCION

La gran aplicación tecnológica de materiales semiconductores (Ge, Si, CdTe, GaAs, etc.) demanda que dichos materiales sean de la más alta calidad para que cumplan adecuadamente sus funciones al aplicarse en la fabricación de dispositivos electrónicos. Se han desarrollado varios métodos de crecimiento para formar cristales que pueden satisfacer estas condiciones [7].

Dentro de los diversos métodos que existen para el crecimiento de cristales están los que se crecen a partir de un sólido, de un líquido o de un gas. Los métodos que parten de la fase líquida son favorables para obtener cristales grandes y de muy buenas características, pues el crecimiento se lleva a cabo mediante el enfriamiento controlado de la muestra. Dentro de estos métodos de crecimiento están las técnicas de solidificación direccional o de Bridgman-Stockbarger (**BS**) y la de Tiramiento o de Czochralski [1,2,3].

El crecimiento de cristales por el método de Czochralski se lleva a cabo a partir de una semilla que se sumerge en un fundido y se saca girándola y jalándola hacia arriba, trayéndose consigo el fundido

---

que se va cristalizando. Una de las principales desventajas de esta técnica es que el fundido se contamina con facilidad. El uso de esta técnica, para la producción de cristales simples, está basada en su simplicidad y su aplicación a un amplio rango de materiales como son metales puros, aleaciones metálicas, compuestos orgánicos e inorgánicos y principalmente materiales semiconductores.

El método **BS** es el proceso más favorable para el crecimiento de cristales, ya que se puede ajustar el gradiente de temperatura independientemente de la posición de la interfase. De aquí, que sea este método, el más adecuado para el crecimiento de cristales de CdTe, en comparación con el método de Czochralski [1,4,5].

La técnica **BS** consiste en colocar el material que se desea cristalizar en un ámpula dentro de un horno [2,6] (fig.1). Este horno proporciona el control del gradiente de temperatura, cuya variación va de  $T_h$  (superior al punto de fusión de la muestra) a  $T_c$  (menor que el punto de fusión de la muestra). El ámpula, que contiene la muestra en forma policristalina, es transportada entre las regiones de calentamiento y enfriamiento, para lo cual debe existir acoplamiento entre la velocidad de transporte del ámpula y el transporte de la interfase sólido-líquido. Debe tenerse control sobre la velocidad de descenso de la muestra para evitar la formación de granos que den al cristal crecido una mala calidad.

En esencia, esta técnica produce la nucleación en una interfase sólido-líquido por medio de una cristalización en un gradiente de temperatura.

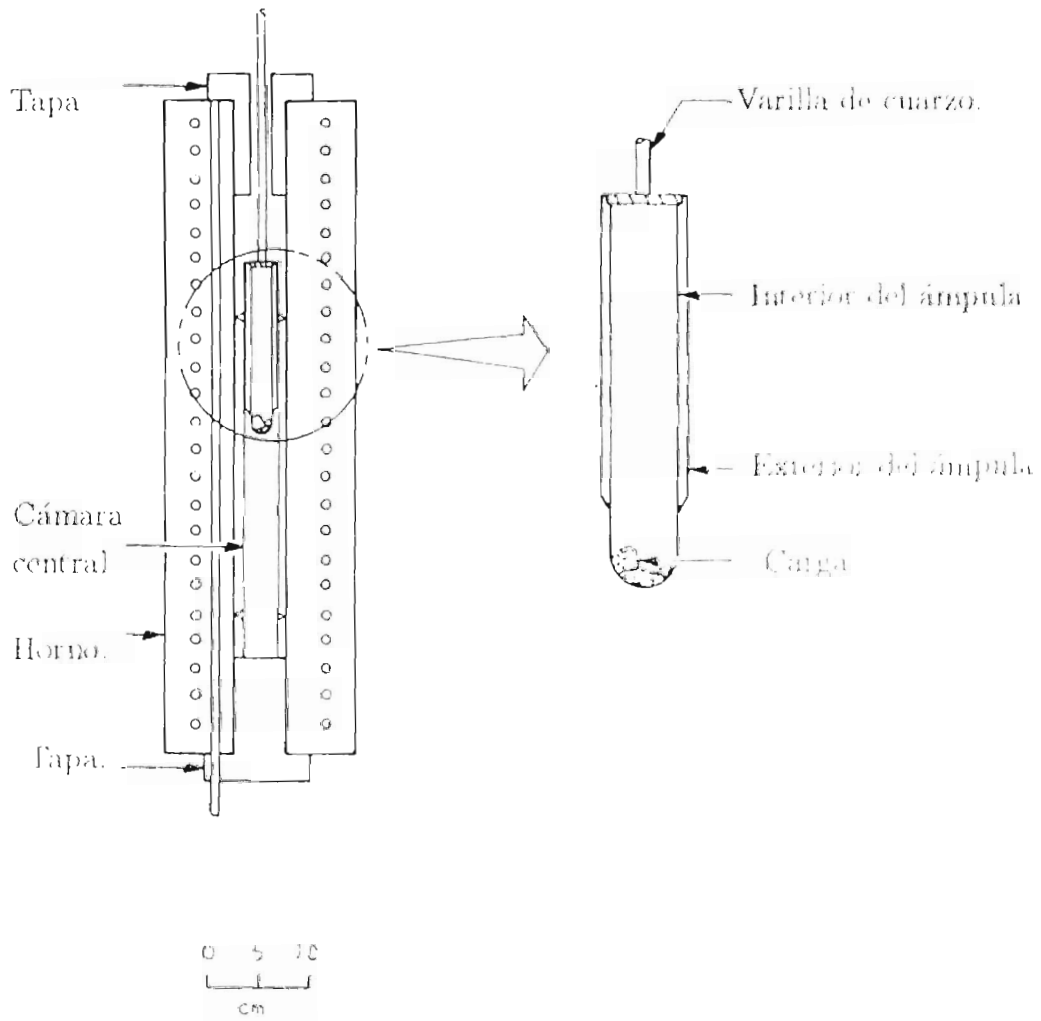


Fig. 1 Horno de Bridgman

En el método **BS**, el perfil de la interfase sólido líquido y la posición de ésta se determinan por la transferencia de calor y, especialmente, por la dirección del flujo de calor cercano a la interfase [7]. En cualquier arreglo experimental el gradiente térmico radial inducido experimentalmente, es producido por los siguientes efectos en el crecimiento cristalino [8]:

- a) Por el flujo de calor hacia dentro de la zona de calentamiento; esto es, hacia el interior del fluido sobre la parte superior de la muestra, produciendo una curvatura convexa en la interfase.
- b) Por el flujo de calor entre la muestra y el crisol, al nivel de la interfase, debido a la diferencia entre las concavidades térmicas de las fases sólido- líquido.

El gradiente de temperatura, en la vecindad de la interfase, es un factor importante en el análisis experimental, y es determinado por los efectos anteriores, donde la posición y forma de la interfase pueden ser ajustadas mediante cambios de temperatura, que debe tener una distribución simétrica a lo largo del horno [8,9,10]; además, se tiene que el perfil de la isoterma es cóncavo cuando la evacuación del calor radial se produce al nivel de la interfase [11], determinando así la sensibilidad de la posición de la interfase en sistemas donde el número de Biot es pequeño. Este número es una medida directa entre el acoplamiento de la carga y el horno.

La optimización del gradiente de la temperatura juega un papel determinante en la perfección cristalina, produciendo una baja densidad de dislocación y de defectos estructurales en el cristal

Para materiales semiconductores, como es el caso del CdTe, se tiene que la conductividad térmica del fundido ( $k_l = 2.0 \frac{W}{cmK}$ ) es

mayor que la del sólido ( $k_s = 1.0 \frac{W}{cm^{\circ}K}$ ), produciendo un desplazamiento de la interfase hacia la zona de enfriamiento, generando un perfil cóncavo, y convexo, cuando el desplazamiento es hacia la zona de calentamiento [1].

Experimentalmente se presentan factores que influyen en la cristalinidad y que determinan la calidad de los cristales de CdTe [1,9], estos son:

- Gradientes térmicos bajos ( $< 10^{\circ}K/cm$ ) para obtener muestras con regiones monocristalinas grandes.

- Las regiones de calentamiento y de enfriamiento están caracterizadas por un incremento en el número de granos con fronteras de fase concavas y/o convexas debidas a efectos de frontera del cristal.

Generalmente se prefiere un perfil de la interfase plano. Si esto no es posible experimentalmente, se considera que un perfil convexo es preferible a uno cóncavo, pues éste está asociado con una alta incidencia de policristalinidad [3].

Los perfiles de la interfase, observados experimentalmente, revelan un alto grado de convexidad o concavidad, dependiendo de su posición axial [1]. Las condiciones de crecimiento del CdTe son mejores en las regiones intermedias; es decir, regiones cercanas a la frontera entre la región del calentador y del enfriador. En esta región el perfil de la interfase se caracteriza por tener una curvatura muy pequeña.

Para el crecimiento cristalino del CdTe, mediante el método de BS, se propone que el ampulla que contiene al cristal sea lo más largo posible para reducir efectos de terminación del cristal [1].



Para hacer el análisis teórico y determinar la influencia que ejercen los diferentes parámetros térmicos del sistema de crecimiento BS, sobre el crecimiento del CdTe, se tiene lo siguiente:

Influencia de la variación del número de Weber,  $Wb$ .

El número de Weber es la razón entre el calor latente de fusión y el calor requerido para aumentar la temperatura de  $T_c$  a  $T_h$ :  $Wb = \frac{\Delta H_f}{C_p(T_h - T_c)}$ . En un arreglo experimental raramente se cambia este número pues  $T_c$  y  $T_h$  están fijos de antemano.

Influencia de la variación del número de Péclet,  $Pe$ .

El número  $Pe$  expresa la razón de transferencia de calor axial en la carga debida a la velocidad de descenso del ánupula. Un incremento de  $Pe$  (velocidad de crecimiento cristalino), trae como consecuencia un descenso del gradiente de temperatura, ie. la interfase se mueve a través de la región de enfriamiento:  $Pe = \frac{V_p C_p}{k}$ . A este número se le ha asignado un valor discreto, asociado con las características del CdTe, a fin de determinar, en forma cualitativa, la posición que ha de tomar la interfase. El valor de la velocidad es pequeño a fin de generar una mayor estabilidad en la posición de la interfase.

Influencia en la variación del número de Biot,  $Bi$ .

El número de Biot es una medida directa del acoplamiento térmico entre la carga y el horno:  $Bi = \frac{hR}{k}$ . El intercambio de

calor entre la carga y el horno, para las diferentes zonas del sistema, es descrito por el número de Biot a través de los coeficientes de transferencia de calor,  $h$ .

Influencia de la variación de la razón de conductividades térmicas para el líquido y sólido,  $K$ .

La razón  $K$  expresa la razón de conductividades térmicas del líquido y del sólido:  $K = \frac{k_L}{k_s}$ .  $K$  es mayor que la unidad para materiales semiconductores, mientras que para metales es menor que uno. Para el CdTe, la razón de las conductividades térmicas es 2 [1]. Las diferencias en la razón de conductividades tienen una gran influencia en la curvatura de la interfase.

El control de los parámetros involucrados en el crecimiento de cristales, en este caso CdTe, contribuye a revelar la posición de la interfase y por lo tanto su perfil en el proceso de crecimiento cristalino mediante el método **BS** [1, 5].

Recientemente se han hecho varios esfuerzos para modelar el sistema de crecimiento cristalino **BS**. Entre los trabajos notables está la serie publicada por Wilcox et al, en los que se analizan los efectos de varios parámetros adimensionales sobre la distribución radial y axial de la temperatura en la carga [9, 13]. En el modelo se desprecia la convención en el fundido y se supone que sus propiedades físicas son las mismas que las del cristal. El modelo empleado es bidimensional y no produce resultados analíticos simples. La contribución más importante de esta serie es la sugrencia de introducir una región de control de gradiente (o región del aislante) que proporcione el control del flujo del calor, cerca de la interfase, requerido para el establecimiento de gradientes de temperatura.

Anteriormente, Tien [14] había desarrollado un programa de computadora que calculaba la forma y posición de la interfase de naftaleno usando mediciones de la temperatura en las paredes de la carga. La desventaja de este método es que es difícil de generalizar y de obtener penetración física del experimento.

En 1981 C. L. Jones et al [15] usó un método desarrollado en el Centro de Tecnología Philips. En este método se usaron analogos eléctricos para modelar el comportamiento térmico de un sistema de crecimiento **BS**. Los análogos eléctricos eran la corriente eléctrica, que simulaba el flujo de calor, y el voltaje, que simulaba la temperatura. La conducción de calor era descrita por una red de resistencias, la radiación por un voltaje controlado por resistencias y la capacidad calorífica por capacitores. Con este modelo se obtuvo una distribución de temperaturas en un, horno vacío, similar a las calculadas o medidas. Se obtuvieron resultados de la distribución de temperaturas en el horno para diferentes condiciones de crecimiento cristalino. En 1984, el mismo autor [16], usando el mismo modelo, calculó perfiles de isotermas dentro de un horno de crecimiento cristalino **BS**.

Fu y Wilcox [17], en 1980, realizaron un análisis bidimensional de transferencia de calor en el método **BS**. Este análisis se hizo para determinar la influencia del espesor del aislante en la estabilidad de la forma y posición de la interfase y del gradiente de temperatura.

En 1984, C. F. Huang et al, usando el método de análisis finito [3], calculó la distribución de tensiones en un cristal inducidas por la distribución de temperaturas y por los cambios en el gradiente de temperatura. Se asoció una interfase cóncava al hecho de tener tensiones muy altas en una región de gradiente de temperatura uniforme.

El objetivo de este trabajo es el de desarrollar un modelo matemático de un sistema de crecimiento cristalino, en una aproximación unidimensional, con el objeto de proporcionar curvas de la posición de la interfase, con respecto a los diferentes parámetros térmicos del sistema de crecimiento **BS**, a fin de obtener información que será de utilidad para predecir un experimento que permita obtener un buen crecimiento del cristal. Como se mencionó, éste será mejor si la interfase se encuentra cercana a la frontera entre la región del enfriador y del calentador [1].

En el capítulo II, se describe el análisis matemático de la técnica **BS** para el crecimiento de cristales, usando un modelo unidimensional. Este modelo es capaz de predecir las variaciones axiales de temperatura, debidas al movimiento de la carga, la cual se determina por la posición de la interfase, como función de los diferentes parámetros que intervienen en el crecimiento del cristal.

En el modelo se emplea la ecuación de transferencia de calor para un cilindro recto e infinito con propiedades isotrópicas constantes. Se resuelven los casos de un sistema simple, i.e. sin aislante y el sistema al que se le ha incorporado un aislante.

En el sistema sin aislante se considera el caso más simple, el cual sólo consiste de el fundido y el cristal. Este sistema es el más sencillo de analizar matemáticamente.

En el caso en el cual se considera el sistema con un aislante, se tiene un modelo que se acerca más al real: aunque se siguen considerando las mismas aproximaciones que para el caso sin aislante.

En el capítulo III, presentamos las gráficas obtenidas de los

cálculos realizados, así como de los resultados y su análisis.

Y finalmente, en el capítulo IV, se dan las conclusiones correspondientes a los sistemas sin aislante y con aislante.

# CAPITULO II

## ANALISIS MATEMATICO

En este capítulo describiremos el análisis matemático requerido para el crecimiento de cristales mediante el método **BS**. Se resuelve el caso de un sistema simple y el de un sistema al cual se le incorpora un aislante, con lo que se estará en condiciones de decidir cuál de los dos genera las mejores condiciones de crecimiento, dependiendo de la posición en la que se encuentra la interfase.

El estudio cuantitativo del crecimiento vertical se consigue usando la ecuación de transferencia de calor para un cilindro recto e infinito con propiedades isotrópicas constantes y calor latente de fusión despreciable. La ecuación diferencial para la distribución de temperatura, en estado estacionario, en coordenadas cilíndricas es [9]

$$\frac{k}{\rho C_p} \left( \frac{\partial^2 T}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial T}{\partial r} + \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} \right) - V \frac{\partial T}{\partial z} = 0 \quad (11)$$

donde:

$k$  es la conductividad térmica

$\rho$  es la densidad

$C_p$  es la capacidad calorífica

$r$  es la posición radial

$z$  es la posición axial

y  $V$  corresponde a la velocidad de crecimiento.

En el caso más sencillo, consideramos una región del cilindro mantenida a temperatura constante  $T_h$  y otra a temperatura  $T_c$ , que llamamos a la temperatura del calentador y del enfriador respectivamente. Ubicamos el origen,  $z = 0$ , en la interfase calentador enfriador.

Las condiciones a la frontera para este sistema son:

Si  $z \rightarrow \infty$  la temperatura del cilindro tiende a la temperatura de enfriamiento:  $T \rightarrow T_c$

Si  $z \rightarrow -\infty$  la temperatura del cilindro tiende a la temperatura de calentamiento:  $T \rightarrow T_h$

Además, en  $r=0$  existe simetría axial; esto es,  $\frac{\partial T}{\partial r}=0$

Para  $z > 0$  en  $r = R$  se toma en cuenta la transferencia radial de calor, por unidad de área, a la superficie del cilindro; esto es,  $-k\frac{\partial T}{\partial r} = h_c(T - T_c)$

Para  $z < 0$  en  $r = R$  tenemos  $-k\frac{\partial T}{\partial r} = h_h(T - T_h)$ .

Los  $h_j$  son los coeficientes de transferencia de calor, que se consideran constantes dentro de cada una de las zonas del sistema.

En la interfase líquido sólido, la temperatura y la derivada son continuas; o sea,  $T_+ = T_-$  y  $(\frac{\partial T}{\partial z})_+ = (\frac{\partial T}{\partial z})_-$

La diferencia de temperatura entre la carga y el crisol ocasiona que el perfil de la curvatura de la interfase no sea plano. Para materiales semiconductores cuya conductividad térmica del fundido es mayor que la del sólido, la carga es enfriada por el crisol y por consiguiente la curvatura del perfil de la interfase es cóncava. Este fenómeno es observado al resolver la ecuación (1), cuya solución son las funciones de Bessel [9].

Para simplificar nuestro modelo es necesario hacer una aproximación unidimensional de la ecuación (1), dado que esta aproximación describe de manera adecuada las variaciones experimentales de la temperatura axial [12]. El modelo unidimensional considera sólo transferencia de calor axial de la carga; esto significa que la temperatura, dentro de la carga, no es una función del radio del cilindro.

Considerando los efectos que producen los diferentes parámetros térmicos al crecer un cristal, mediante el uso de la técnica BS se



presentan las aproximaciones del modelo, en el cual sólo se considera la distribución axial de la temperatura.

Estos efectos son:

a) La transferencia entre la carga y el horno es descrita por medio de los coeficientes de transferencia de calor  $h_j$ , que son considerados constantes dentro de cada una de las regiones en las que se divide el sistema. La región del aislante se considera adiabática: esto es,  $h_G = 0$ .

b) Las conductividades térmicas en el sólido y en el líquido se suponen diferentes y constantes.

c) La longitud de la carga es suficientemente grande para ser considerada térmicamente infinita.

La aproximación unidimensional de la ecuación (1), en forma general, en la que se desprecian las variaciones radiales de temperatura de la carga, es

$$\frac{d^2 T}{dz^2} - \frac{V\rho C_p}{k} \frac{dT}{dz} - \frac{2h}{Rk}(T - T_{am}) = 0 \quad (2)$$

que puede escribirse en forma adimensional como:

$$\frac{d^2\phi}{d\zeta^2} - Pe \frac{d\phi}{d\zeta} - 2Bi(\phi - \phi_{am}) = 0 \quad (3)$$

donde  $\phi$  es la temperatura generalizada y  $\zeta = \frac{z}{R}$ . En la ecuación (2)  $T_{am}$  es la temperatura ambiente y es igual a  $T_c$  para la región fría,  $T_a$  para la región del aislante y a  $T_h$  para la región caliente;  $Pe$  es el número de Péclet ( $Pe = \frac{V\rho C_p R}{k}$ );  $Pe_l$  corresponde al número de Péclet para el caso en que la muestra se encuentra en estado líquido y  $Pe_s$  cuando la muestra está en estado sólido;  $Bi$  es el número de Biot:  $Bi_h$  si el ámpula se encuentra en la región del calentador y  $Bi_c$  si está en la región del enfriador [1,6]. Se consideró que la difusión térmica ( $\frac{k}{\rho C_p}$ ) es la misma en el crisol para el sólido y el fundido.

El primer término de la ecuación (3) representa la conducción axial de calor dentro de la carga, el segundo término es la convección axial de calor debida al movimiento de la carga con una velocidad  $V$  y el tercer término explica el intercambio de calor entre el horno y la carga [6].

La solución general de esta ecuación está dada por:

$$T = C_1 e^{m_1 z} + C_2 e^{m_2 z} + T_{am} \quad (4)$$

con

$$m_{1,2} = \frac{1}{2}[Pe \pm (Pe^2 + 8Bi)^{\frac{1}{2}}] \quad (5)$$

donde  $C_1$  y  $C_2$  son constantes.

Tomando un sistema sin aislante y considerando que el ámpula viaja a través del horno, se distinguen dos casos que dependen de la localización de la interfase. Esta puede estar o en la región de calentamiento, o bien, en la zona de enfriamiento.

Existen tres soluciones diferentes de la ecuación (3) para cada uno de los casos mencionados. Consideramos el caso en que hay una discontinuidad en la frontera formada por la región fría y la región caliente. Esta frontera ( $z = 0$ ) será el punto de referencia para tomar la posición de la interfase; tal como se muestra en la figura 2a.

Para el caso en el cual se incorpora un aislante al sistema entre la región fría y la región caliente (anchura  $2b$ ), la interfase puede localizarse en la región caliente, en la del aislante o en la región fría. Cada una de estas regiones se describe por la forma apropiada de la ecuación (3), con los número de Biot, Peclet, etc. adecuados a cada región.

Para este caso hay doce soluciones a la ecuación (3), que corresponden a las tres localizaciones de la interfase y a las cuatro soluciones por cada localización. El punto de referencia ( $z=0$ ) para tomar la posición de la interfase ( $\frac{S}{R}$ ) es la frontera entre la región caliente y la del aislante, figura 2b.

El ámpula tiene un radio  $R$  y la posición de la interfase se considera positiva hacia abajo y negativa hacia arriba del punto de referencia.

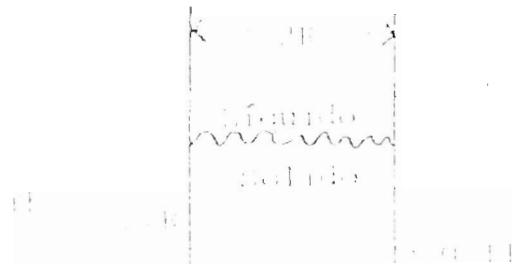


Figura 2. Diagrama de las posiciones de la interfase en el sistema.  
a) región fría, b) región caliente.

## II.1 SISTEMA SIN AISLANTE

El considerar un sistema sin aislante es debido a la conveniencia de tratar el problema de la manera más sencilla a fin de poder estudiar el comportamiento de la posición de la interfase con respecto a los diferentes parámetros del sistema.

Para el caso de un sistema sin aislante, en el cual la interfase esta en la región de calentamiento, hacemos las siguientes definiciones:

- La región I está localizada entre la interfase  $z = \frac{S}{R}$  y  $z = \infty$ .
- La región II entre la interfase  $z = \frac{S}{R}$  y  $z = 0$ .
- La región III se encuentra entre  $z = 0$  y  $z = -\infty$ .

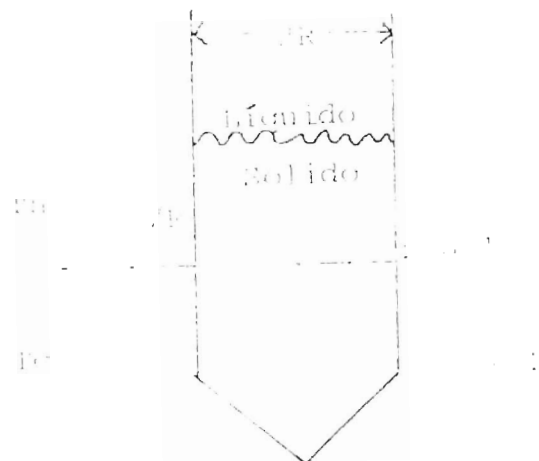


Figura 3. Posición de la interfase en la zona de calentamiento.

Para el segundo caso, cuando el ánupula ha sido transportada a través del horno, la interfase se localiza en la zona de enfriamiento; entonces

- a) La región **I** se encuentra sobre  $z = 0$
- b) La región **II** entre  $z = 0$  y la interfase  $z = \frac{S}{R}$
- c) La región **III** debajo de la interfase.

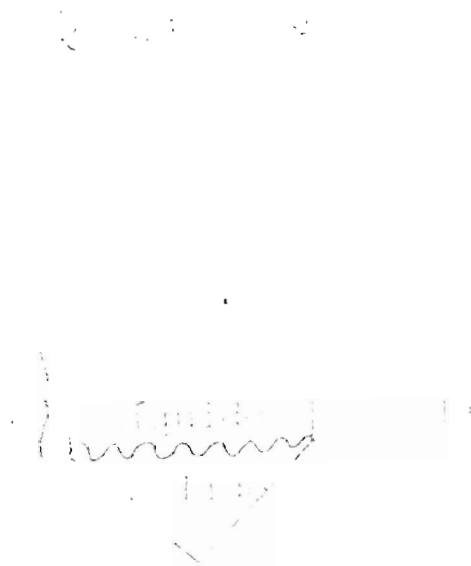


Figura 4. Posición de la interfase en la zona de enfriamiento.

Por simplicidad se hacen las siguientes suposiciones:

Las temperaturas de calentamiento ( $T_h$ ) y de enfriamiento ( $T_c$ ) son constantes; el sistema está en estado cuasi-estacionario; el intercambio de calor entre el horno y el ámpula está descrito por el número de Biot ( $Bi = \frac{hR}{k}$ ):  $Bi_h$  para la región caliente y  $Bi_c$  para la región fría. Las conductividades térmicas son constantes pero diferentes en cada región. El número de Peclet es igual a  $Pe_l$  para la parte líquida de la carga y a  $Pe_s$  para la parte sólida.

Consideremos entonces el primer caso, en el cual la interfase se localiza en la región caliente.

Con las suposiciones antes mencionadas, las condiciones a la frontera para la ecuación (3) son:

- i) La temperatura es continua entre todas las regiones, i.e.,

$$T_l(-\frac{S}{R}) = T_{ll}(-\frac{S}{R})$$

$$T_{ll}(0) = T_{lll}(0)$$

- ii) El gradiente de temperatura es continuo entre las diferentes regiones del sistema; esto es,

$$\left(\frac{dT_{ll}}{dz}\right)_{z=-\frac{S}{R}} = \left(\frac{dT_{lll}}{dz}\right)_{z=-\frac{S}{R}}$$

iii) El balance de calor en la interfase está dado por [7]:

$$-k_s \left( \frac{dT_{III}}{dz} \right)_{-\frac{s}{R}} = -k_l \left( \frac{dT_I}{dz} \right)_{-\frac{s}{R}} + V\rho\Delta H_f R \quad (6)$$

donde  $\Delta H_f$  es el calor latente de fusión por unidad de masa.

Usando las condiciones a la frontera se resuelve la ecuación (3), para cada una de las regiones, y obtenemos.

$$T_I = c_1 e^{m_{1l} z} + T_h \quad -\infty < z < -\frac{s}{R} \quad (7a)$$

$$T_{II} = c'_1 e^{m_{1s} z} + c'_2 e^{m_{2s} z} + T_h \quad -\frac{s}{R} < z < 0 \quad (7b)$$

$$T_{III} = c''_2 e^{m'_{2s} z} + T_c \quad 0 < z < \infty \quad (7c)$$

donde:

$$m_{1l} = \frac{1}{2} [Pc_l + (Pc_l^2 + 8Bi_h)]^{\frac{1}{2}}$$

$$m_{1s} = \frac{1}{2} [Pc_s + (Pc_s^2 + 8Bi_h)]^{\frac{1}{2}}$$

$$m_{2s} = \frac{1}{2} [Pc_s - (Pc_s^2 + 8Bi_h)]^{\frac{1}{2}}$$

$$m'_{2s} = \frac{1}{2} [Pc_s - (Pc_s^2 + 8Bi_c)]^{\frac{1}{2}}$$

La solución de la ecuación (3), para la región caliente está dada por la ecuación (7a).



Con esta expresión de la temperatura podemos calcular el valor de la temperatura de la interfase  $T_i$ ; esto es,  $T_l(-\frac{s}{R}) = T_i$ .

Usando las condiciones a la frontera se obtiene el siguiente sistema de ecuaciones

$$c_1 e^{-m_1 \frac{s}{R}} - c_1' e^{-m_1 s \frac{s}{R}} - c_2' e^{-m_2 s \frac{s}{R}} = 0 \quad (8)$$

$$c_1 k_l m_{1l} e^{-m_1 \frac{s}{R}} - c_1' k_s m_{1s} e^{-m_1 s \frac{s}{R}}$$

$$- c_2' k_s m_{2s} e^{-m_2 s \frac{s}{R}} = V \rho \Delta H_f R$$

$$c_1 + c_2 - c_2'' = T_c - T_h$$

$$c_1' m_{1s} + c_2' m_{2s} - c_2'' m_{2s}' = 0$$

Definimos la temperatura, de manera adimensional, como:

$$\Phi = \frac{T - T_c}{T_h - T_c} \quad (9a)$$

El número de Weber [3] define al calor latente

$$Wb = \frac{\Delta H_f}{C_p (T_h - T_c)} \quad (9b)$$

Resolvemos el sistema de ecuaciones (8) y obtenemos, para  $c_1$ , la expresión:

$$c_1 = \left( e^{-(m_{1s} + m_{2s}) \frac{s}{R}} m_{2s}' (T_c - T_h) (m_{1s} - m_{2s}) \right) \quad (10)$$

$$\begin{aligned}
& + [e^{-m_{2s} \frac{S}{R}} (m'_{2s} - m_{1s}) \\
& - e^{-m_{1s} \frac{S}{R}} (m'_{2s} - m_{2s})] V \rho \Delta H_f R) / \\
& \left( (m'_{2s} - m_{2s}) (m_{1s} - K m_{1l}) e^{-m_{1s} \frac{S}{R}} - \right. \\
& \left. (m'_{2s} - m_{1s}) (m_{2s} - K m_{1l}) e^{-m_{2s} \frac{S}{R}} \right) e^{-m_{1l} \frac{S}{R}}
\end{aligned}$$

Usando las definiciones (9a) y (9b) se obtiene la expresión para la posición de la interfase  $-\frac{S}{R}$  en función de los parámetros del sistema.

$$(1 - \Phi_i) = \left( e^{-(m_{1s} + m_{2s}) \frac{S}{R}} m'_{2s} (m_{1s} - m_{2s}) \right) \quad (11)$$

$$\begin{aligned}
& - [e^{-m_{2s} \frac{S}{R}} (m'_{2s} - m_{1s}) - e^{-m_{1s} \frac{S}{R}} (m'_{2s} - m_{2s})] P c_s W b) / \\
& \left( (m'_{2s} - m_{2s}) (m_{1s} - K m_{1l}) e^{-m_{1s} \frac{S}{R}} - \right. \\
& \left. (m'_{2s} - m_{1s}) (m_{2s} - K m_{1l}) e^{-m_{2s} \frac{S}{R}} \right)
\end{aligned}$$

Para el otro caso, en el cual la interfase se encuentra en la región fría, las condiciones a la frontera para las soluciones de la ecuación (3) son:

a).-  $T_l(0) = T_{ll}(0)$

$$T_{ll}\left(\frac{s}{R}\right) = T_{lll}\left(\frac{s}{R}\right)$$

b).-  $\left(\frac{dT_l}{dz}\right)_{z=0} = \left(\frac{dT_{ll}}{dz}\right)_{z=0}$

c).- El balance de calor en la interfase está dado por

$$-k_s \left( \frac{dT_{lll}}{dz} \right)_{\frac{s}{R}} = -k_l \left( \frac{dT_{ll}}{dz} \right)_{\frac{s}{R}} + V\rho\Delta H_f R \quad (12)$$

La solución de la ecuación (3) para cada región, cuando la interfase se encuentra en la región fría, está dada por

$$T_l = c_1 e^{m_1' z} + T_h \quad -\infty < z < 0 \quad (13a)$$

$$T_{ll} = c_1' e^{m_{1l} z} + c_2' e^{m_{2l} z} + T_c \quad 0 < z < \frac{s}{R} \quad (13b)$$

$$T_{lll} = c_2'' e^{m_{2s} z} + T_c \quad \frac{s}{R} < z < \infty \quad (13c)$$

Usando las condiciones a la frontera correspondientes a este caso, se obtiene el siguiente sistema de ecuaciones

$$c_1 = c_1' = c_2' = T_c - T_h \quad (14)$$

$$c_1' k_l m_{1l} e^{m_{1l} \frac{s}{R}} + c_2' k_l m_{2l} e^{m_{2l} \frac{s}{R}}$$

$$- c_2'' k_s m_{2s} e^{m_{2s} \frac{s}{R}} = V\rho\Delta H_f R$$

$$c_1' e^{m_{1l} \frac{s}{R}} + c_2' e^{m_{2l} \frac{s}{R}} - c_2'' e^{m_{2s} \frac{s}{R}} = 0$$

$$c_1' m_{1l}' - c_1' m_{1l} - c_2' m_{2l} = 0$$

Resolvemos el sistema para  $c_1$ ,  $c'_1$ ,  $c_2$  y  $c'_2$ . Usando  $c''_2$  y las definiciones (9a) y (9b) y haciendo  $T_{l1l}(s/R) = T_i$  se obtiene

$$\Phi_i = \left( -e^{(m_{1l}+m_{2l})\frac{s}{R}} K m'_{1l}(m_{1l}-m_{2l}) + \right. \quad (15)$$

$$\left. [e^{m_{2l}\frac{s}{R}}(m_{2l}-m'_{1l}) - e^{m_{1l}\frac{s}{R}}(m_{1l}-m'_{1l})] P e_s W b \right) /$$

$$\left( e^{m_{1l}\frac{s}{R}}(m_{2l}-m'_{1l})(K m_{1l} - m_{2s}) \right.$$

$$\left. - e^{m_{2l}\frac{s}{R}}(m_{1l}-m'_{1l})(K m_{2l} - m_{2s}'' ) \right)$$

Las ecuaciones (11) y (15) se resuelven usando el método de Newton-Raphson para encontrar la posición de la interfase en función de los diferentes parámetros del sistema.

## II.2 SISTEMA CON AISLANTE

En este caso se ha introducido un aislante entre las regiones caliente y fría. El espesor del aislante es  $2b$ . El propósito de esta región es controlar el flujo de calor cerca de la interfase y establecer los gradientes térmicos deseados [6]. La estructura del sistema queda determinada por una región caliente con temperatura  $T_h$ , una región con aislante a temperatura  $T_a$  y una región fría con temperatura  $T_c$ . La descripción del sistema se hace por medio del modelo unidimensional, en donde la frontera entre la región caliente y el aislante ( $z = 0$ ) será el punto de referencia para medir la posición de la interfase ( $\frac{S}{H}$ ), figura (5). No existe intercambio de calor entre el horno y la carga en la región del aislante; esto es,  $B_{T_1} = 0$ . El análisis se hace para las tres regiones en las que se puede encontrar la interfase. Estas son la región caliente, la del aislante y la fría. El sistema es dividido en cuatro regiones, en donde existe una solución para cada una de ellas, provenientes de la solución general de la ecuación (3).

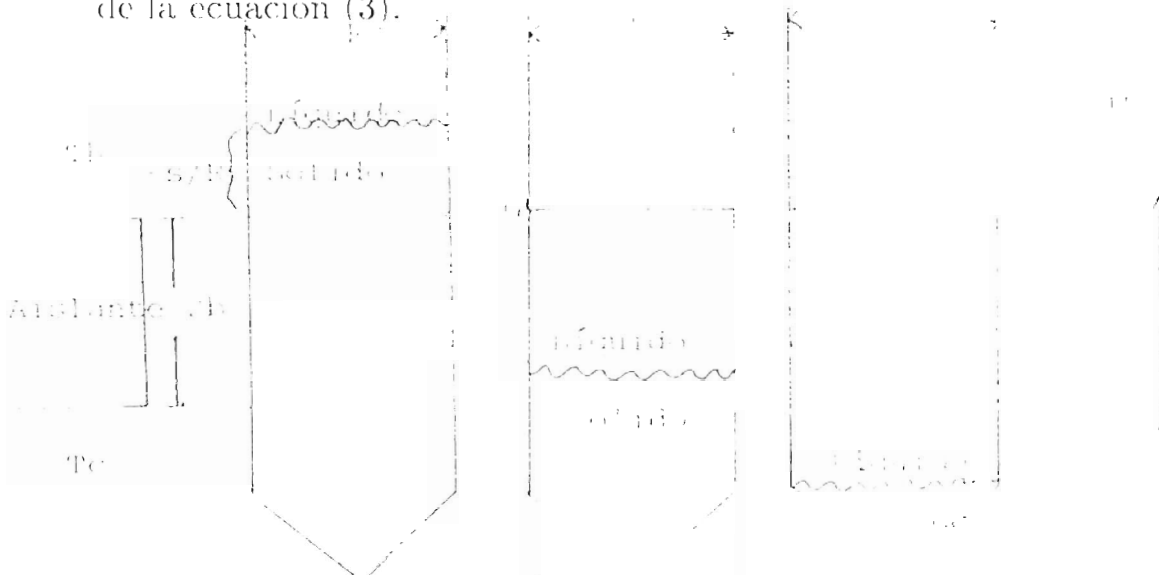


Figura 5. Geometría y coordenadas usadas en el modelo matemático, de un sistema con aislante.

## i) Interfase en la región caliente.

En este caso la interfase líquido sólido se encuentra dentro de la región caliente.

La región **I** se localiza sobre la interfase  $z < -\frac{s}{R}$ , la **II** entre la posición de la interfase  $z = -\frac{s}{R}$  y  $z = 0$ , la **III** dentro de la zona del aislante  $0 < z < \frac{2b}{R}$  y la **IV** en la región fría  $z > \frac{2b}{R}$ , figura (6).

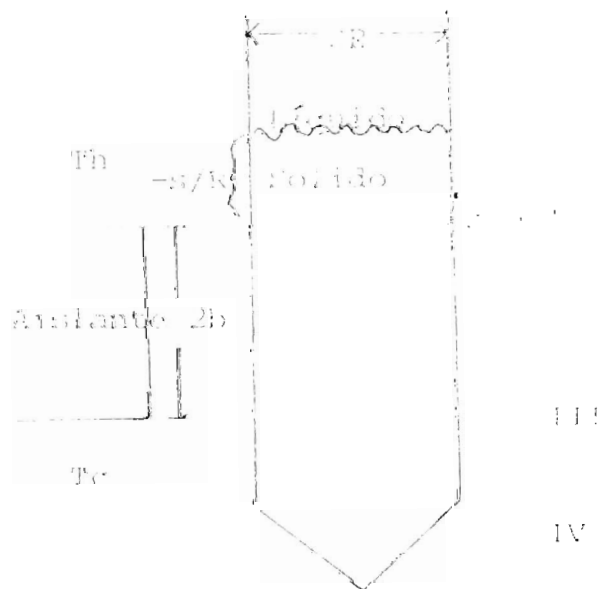


Figura 6. Posición de la interfase en la zona de calentamiento para un sistema con aislante.

Las condiciones a la frontera, para este caso, se pueden expresar como sigue:

$$(a) \quad T_I\left(-\frac{S}{R}\right) = T_{III}\left(-\frac{S}{R}\right)$$

$$T_{II}(0) = T_{III}(0)$$

$$T_{III}\left(\frac{2b}{R}\right) = T_{IV}\left(\frac{2b}{R}\right)$$

$$(b) \quad \left(\frac{dT_I}{dz}\right)_{z=0} = \left(\frac{dT_{III}}{dz}\right)_{z=0}$$

$$\left(\frac{dT_{III}}{dz}\right)_{z=\frac{2b}{R}} = \left(\frac{dT_{IV}}{dz}\right)_{z=\frac{2b}{R}}$$

(c) El balance de calor en la interfase está dado nuevamente por la ecuación (6).

La solución a la ecuación (3), para cada una de las regiones es

$$T_I = c_1 e^{m_{11}z} + T_h \quad -\infty < z < -\frac{S}{R} \quad (16a)$$

$$T_{II} = c'_1 e^{m_{1s}z} + c'_2 e^{m_{2s}z} + T_h \quad -\frac{S}{R} < z < 0 \quad (16b)$$

$$T_{III} = c''_1 e^{m_{Gz}} + c''_2 z e^{m_{Gz}} + T_a \quad 0 < z < \frac{2b}{R} \quad (16c)$$

$$T_{IV} = c'''_2 e^{m'_{2s}z} + T_c \quad \frac{2b}{R} < z < \infty \quad (16d)$$

donde:

$$m_{11} = \frac{1}{2} [Pc_l + (Pc_l^2 + 8Bi_h)]^{\frac{1}{2}}$$

$$m_{1s} = \frac{1}{2} [Pc_s + (Pc_s^2 + 8Bi_h)]^{\frac{1}{2}}$$

$$m_{2s} = \frac{1}{2}[Pe_s - (Pe_s^2 + 8Bi_h)]^{\frac{1}{2}}$$

$$m_G = Pe_s$$

$$m'_{2s} = \frac{1}{2}[Pe_s - (Pe_s^2 + 8Bi_c)]^{\frac{1}{2}}$$

Usamos las condiciones a la frontera que corresponden a este sistema, se obtiene el siguiente sistema de ecuaciones

$$c_1 e^{-m_{1s} \frac{s}{R}} - c'_1 e^{-m_{1s} \frac{s}{R}} - c'_2 e^{-m_{2s} \frac{s}{R}} = 0 \quad (17)$$

$$c_1 + c_2 - c'_1 = T_u - T_h$$

$$c''_1 e^{m_G \frac{2b}{R}} + \frac{2b}{R} c''_2 e^{m_G \frac{2b}{R}} - c''_2 e^{m'_{2s} \frac{2b}{R}} = T_c - T_a$$

$$c_1 k_l m_{1s} e^{-m_{1s} \frac{s}{R}} - c'_1 k_s m_{1s} e^{-m_{1s} \frac{s}{R}} -$$

$$c'_2 k_s m_{2s} e^{-m_{2s} \frac{s}{R}} = V\rho\Delta H_f R$$

$$c_1 m_{1s} + c_2 m_{2s} - c'_1 m_G - c'_2 = 0$$

$$c''_1 m_G e^{m_G \frac{2b}{R}} + c''_2 \left( e^{m_G \frac{2b}{R}} + \frac{2b}{R} m_G e^{m_G \frac{2b}{R}} \right) -$$

$$c''_2 m'_{2s} e^{m'_{2s} \frac{2b}{R}} = 0$$

Resolvemos el sistema de ecuaciones (17) para encontrar las constantes. Tomamos el valor de  $T_u$  como



$$T_a = \frac{1}{2}(T_h + T_c) \quad (18)$$

Puesto que la interfase se encuentra en la región caliente, tomamos la expresión para la temperatura que corresponde a la región  $I$  y hacemos  $T_I(-\frac{S}{R}) = T_i$ .

$$T_i = c_1 e^{-m_1 \frac{S}{R}} = T_h \quad (19)$$

Sustituyendo el valor calculado de  $c_1$  llegamos a la expresión

$$2(1 - \Phi) = \left( -e^{-(m_{1s} + m_{2s}) \frac{S}{R}} (m_{1s} - m_{2s}) \right) \quad (20)$$

$$\begin{aligned} & \left[ (m'_{2s} (1 + e^{m_G \frac{2b}{R}}) + e^{m_G \frac{2b}{R}} m_G \frac{2b}{R} (m_G - m'_{2s})) \right. \\ & \left. + 2e^{\frac{(2bm_G - m_{1s})}{R}} P c_s Wb [(m_{2s} - m'_{2s}) + (m_{2s} - m_G)(m_G - m'_{2s}) \frac{2b}{R}] \right. \\ & \left. - 2e^{\frac{(2bm_G - m_{2s})}{R}} P c_s Wb [(m_{1s} - m'_{2s}) + (m_{1s} - m_G)(m_G - m'_{2s}) \frac{2b}{R}] \right) / \\ & \left( K m_{1l} [e^{-m_{2s} \frac{S}{R}} (m'_{2s} - m_{1s}) + e^{-m_{2s} \frac{S}{R}} (m_G - m'_{2s})(m_G - m_{1s}) \frac{2b}{R}] \right. \\ & \left. - e^{-m_{1s} \frac{S}{R}} (m'_{2s} - m_{2s}) - e^{-m_{1s} \frac{S}{R}} (m_G - m'_{2s})(m_G - m_{2s}) \frac{2b}{R} \right) \\ & m_{1s} [e^{-m_{1s} \frac{S}{R}} (m'_{2s} - m_{2s}) + (m'_{2s} - m_G)(e^{-m_{1s} \frac{S}{R}} m_{2s} \\ & - e^{-m_{2s} \frac{S}{R}} m_{2s} - e^{-m_{1s} \frac{S}{R}} m_G) \frac{2b}{R}] + \end{aligned}$$

$$m_{2s} e^{-m_{2s} \frac{s}{R}} \left[ m_G (m_G - m_{2s}) \frac{2b}{R} + (m_{1s} - m_{2s}) \right] e^{m_G \frac{2b}{R}}$$

La manera en que se resuelven las ecuaciones (14) y (20) es en forma iterativa usando el método de Newton Raphson. Se encuentra la posición de la interfase cambiando uno de los parametros del sistema a la vez manteniendo los demás constantes.

## i) Interfase en la región del aislante.

En este caso, la interfase está localizada dentro de la región del aislante ( $0 < \frac{S}{R} < \frac{2b}{R}$ ). El ancho de la región es  $2b$  y la posición de la interfase está referida a la frontera entre la región del aislante y al región caliente ( $z = 0$ ).

Las regiones del sistema se definen de la siguiente manera: La región **I** en la zona de calentamiento; la **II** entre  $z = 0$  y la posición de la interfase  $z = \frac{S}{R}$ ; la **III** se encuentra entre la interfase  $z = \frac{S}{R}$  y  $z = \frac{2b}{R}$  y la **IV** en la región fría  $z = \frac{2b}{R}$ .

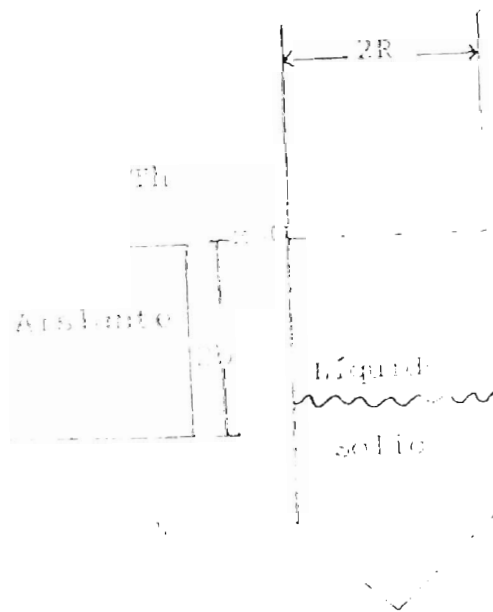


Figura 7. Posición de la interfase en la zona del aislante.

Se resuelve nuevamente la ecuación (3) para cada una de las regiones del sistema y el sistema de ecuaciones resultante es

$$T_I = c_1 e^{m_{1l} z} + T_h \quad -\infty < z < 0 \quad (21a)$$

$$T_{II} = c'_1 e^{m_{1G} z} + c'_2 z e^{m_{1G} z} + T_a \quad 0 < z < \frac{S}{R} \quad (21b)$$

$$T_{III} = c''_1 e^{m_{2G} z} + c''_2 z e^{m_{2G} z} + T_a \quad \frac{S}{R} < z < \frac{2b}{R} \quad (21c)$$

$$T_{IV} = c'''_2 e^{m'_{2s} z} + T_c \quad \frac{2b}{R} < z < \infty \quad (21d)$$

donde:

$$m_{1l} = \frac{1}{2} [P c_l + (P c_l^2 + 8B i_h)]^{\frac{1}{2}}$$

$$m_{1G} = P c_l$$

$$m_{2G} = P c_s$$

$$m'_{2s} = \frac{1}{2} [P c_s - (P c_s^2 + 8B i_c)]^{\frac{1}{2}}$$

Las condiciones a la frontera para este sistema son

$$(a) \quad T_I(0) = T_{II}(0)$$

$$T_{II}\left(\frac{S}{R}\right) = T_{III}\left(\frac{S}{R}\right)$$

$$T_{III}\left(\frac{2b}{R}\right) = T_{IV}\left(\frac{2b}{R}\right)$$

$$(b) \quad \left(\frac{dT_{II}}{dz}\right)_{z=0} = \left(\frac{dT_{III}}{dz}\right)_{z=0}$$

$$\left(\frac{dT_{III}}{dz}\right)_{z=\frac{2b}{R}} = \left(\frac{dT_{IV}}{dz}\right)_{z=\frac{2b}{R}}$$

(c) El balance de calor en la interfase está dado por

$$-k_s \left( \frac{dT_{ll}}{dz} \right)_{\frac{s}{R}} = -k_l \left( \frac{dT_{ll}}{dz} \right)_{\frac{s}{R}} + V\rho\Delta H_f R \quad (22)$$

Usando las soluciones (21) y las condiciones a la frontera se obtiene el siguiente sistema de ecuaciones

$$c_1 - c_1' = T_a - T_h \quad (23)$$

$$c_1' e^{m_1 G \frac{s}{R}} + \frac{s}{R} c_2' e^{m_1 G \frac{s}{R}} - c_1'' e^{m_2 G \frac{s}{R}} - \frac{s}{R} c_2'' e^{m_2 G \frac{s}{R}} = 0$$

$$c_1'' e^{m_2 G \frac{2b}{R}} + \frac{2b}{R} c_2'' e^{m_2 G \frac{2b}{R}} - c_2''' e^{m_2 s \frac{2b}{R}} = T_c - T_a$$

$$c_1 m_{1l} - c_1' m_{1G} - c_2' = 0$$

$$+ k_l c_1' m_{1G} e^{m_1 G \frac{s}{R}} + k_l c_2' (c^{m_1 G \frac{s}{R}} + \frac{s}{R} m_{1G} e^{m_1 G \frac{s}{R}})$$

$$- k_s c_1'' m_{2G} e^{m_2 G \frac{s}{R}} - k_s c_2'' (e^{m_2 G \frac{s}{R}} + m_{2G} \frac{s}{R} e^{m_2 G \frac{s}{R}}) = V\rho\Delta H_f R$$

$$c_1'' m_{2G} e^{m_2 G \frac{2b}{R}} + c_2'' (e^{m_2 G \frac{2b}{R}} + m_{2G} \frac{2b}{R} e^{m_2 G \frac{2b}{R}}) - c_2''' m_{2s} e^{m_2 s \frac{2b}{R}} = 0$$

Después de evaluar las constantes, encontramos la temperatura de la interfase usando la expresión (21b), evaluada en  $z = \frac{s}{R}$ . Llegamos entonces a la expresión

$$(1 - 2\Phi) = - \left( e^{\frac{(m_1 G \cdot s + 2b m_2 G)}{R}} K m_{1l} [m_{2s} (\frac{2b}{R} - \frac{s}{R}) - m_{2G} \frac{2b}{R} - 1] \right) \quad (24)$$

$$+ e^{\frac{(m_1 G \cdot s - 2b m_2 G)}{R}} K m_{1l} m_{2G} \frac{s}{R}$$

$$\begin{aligned}
& e^{m_{2G} \frac{S}{R}} m_{2s} \left[ \frac{S}{R} (m_{1G} - m_{1I}) - 1 \right] - 2e^{m_{2G} \frac{2b}{R}} P c_s W b \\
& \left[ 1 + (m_{2G} - m_{2s}) \left( 1 + m_{1I} \frac{S}{R} - m_{1G} \frac{S}{R} \right) \frac{2b}{R} \right. \\
& \left. + (m_{1I} - m_{1G} + m_{2s}) \frac{S}{R} + m_{2s} (m_{1I} - m_{1G}) \frac{S^2}{R^2} \right] + \\
& \left. 2e^{m_{2G} \frac{2b}{R}} m_{2G} P c_s W b \frac{S}{R} \left[ 1 + (m_{1I} - m_{1G}) \frac{S}{R} \right] \right) / \\
& \left( e^{m_{2G} \frac{2b}{R}} K \left[ m_{1I} + (m_{2G} - m_{2s}) m_{1I} \frac{2b}{R} + \right. \right. \\
& \left. (m_{2G} - m_{2s}) (m_{1I} m_{1G} - m_{1G}^2) \frac{2b}{R} \frac{S}{R} \right. \\
& \left. m_{1G} (m_{1I} - m_{1G}) \left( 1 + m_{2s} \frac{S}{R} \right) \frac{S}{R} + m_{1I} m_{2s} \frac{S}{R} \right] \\
& \left. + e^{m_{2G} \frac{2b}{R}} \left[ -m_{2G} (m_{2s} - m_{2G}) \frac{2b}{R} - m_{2G} - m_{2s} \right. \right. \\
& \left. - (m_{1I} - m_{1G}) \left[ (m_{2G} + m_{2s}) + m_{2G} m_{2s} \frac{S}{R} \right] \frac{S}{R} + \right. \\
& \left. (m_{2G} - m_{2s}) \left( m_{1G} m_{2G} - m_{1I} m_{2G} \frac{2b}{R} \frac{S}{R} \right) - m_{2G} m_{2s} \frac{S}{R} \right] + e^{m_{2G} \frac{2b}{R}} K m_{2G} \\
& \left. \left[ m_{2G} (m_{1G} - m_{1I}) \frac{S}{R} - m_{1I} \right] \frac{S}{R} + e^{m_{2G} \frac{2b}{R}} m_{2G} \left[ 1 + m_{2G} \left( \frac{S}{R} \right)^2 \right. \right. \\
& \left. \left. + (m_{1I} - m_{1G}) \left( 1 + m_{2G} \frac{S}{R} \right) \frac{S}{R} \right] \right)
\end{aligned}$$

Obtenemos una relación entre la posición de la interfase y los demás parámetros del sistema. El valor de  $\frac{S}{R}$  no puede despejarse directamente, por lo que es necesario utilizar el método de Newton Raphson.

## i) Interfase en la región fría.

La interfase se encuentra ahora en la región fría. Definimos las siguientes regiones: La región **I** se encuentra localizada en la región caliente, es decir en  $-\infty < z < 0$ ; la región **II** en la zona del aislante  $0 < z < \frac{2b}{R}$ , la región **III** en  $\frac{2b}{R} < z < \frac{S}{R}$  y la región **IV** justo debajo de la interfase  $\frac{S}{R} < z < \infty$ .

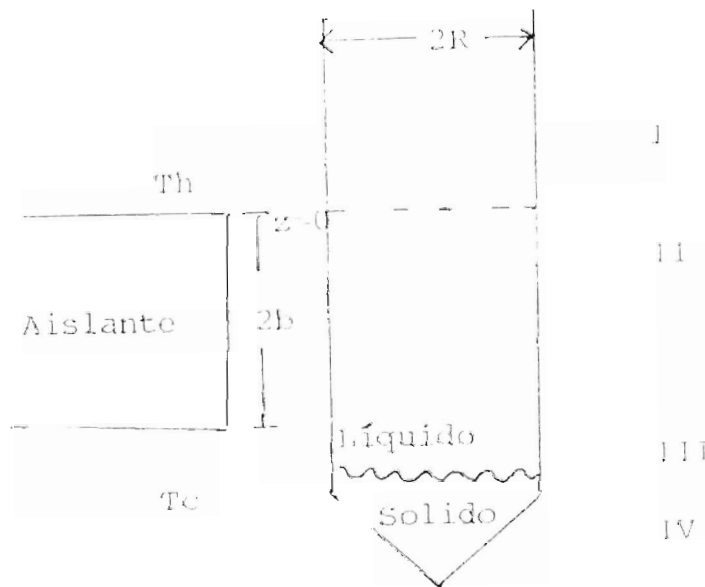


Figura 8. Posición de la interfase en la zona de enfriamiento para un sistema con aislante.



Al igual que para los casos anteriores, se deben de cumplir las siguientes condiciones a la frontera:

$$(a) \quad T_I(0) = T_{II}(0)$$

$$T_{II}\left(\frac{2b}{R}\right) = T_{III}\left(\frac{2b}{R}\right)$$

$$T_{III}\left(\frac{S}{R}\right) = T_{IV}\left(\frac{S}{R}\right)$$

$$(b) \quad \left(\frac{dT_I}{dz}\right)_{z=0} = \left(\frac{dT_{II}}{dz}\right)_{z=0}$$

$$\left(\frac{dT_{II}}{dz}\right)_{z=\frac{2b}{R}} = \left(\frac{dT_{III}}{dz}\right)_{z=\frac{2b}{R}}$$

(c) El balance de calor en la interfase está dado por la ecuación

$$k_s \left(\frac{dT_{IV}}{dz}\right)_{\frac{S}{R}} = -k_l \left(\frac{dT_{III}}{dz}\right)_{\frac{S}{R}} + V\rho\Delta H_f R \quad (25)$$

Con las condiciones a la frontera, para este caso, la solución a la ecuación (3), está dada para la región fría por

$$T_I = c_1 e^{m_1 z} + T_h \quad -\infty < z < 0 \quad (26a)$$

$$T_{II} = c_1' e^{m_1 z} + c_2' z e^{m_1 z} + T_a \quad 0 < z < \frac{2b}{R} \quad (26b)$$

$$T_{III} = c_1'' e^{m_2 z} + c_2'' z e^{m_2 z} + T_c \quad \frac{2b}{R} < z < \frac{S}{R} \quad (26c)$$

$$T_{IV} = c_2''' e^{m_2' z} + T_c \quad \frac{S}{R} < z < \infty \quad (26d)$$

Donde:

$$m'_{1l} = \frac{1}{2} [Pc_l + (Pc_l^2 + 8Bi_h)]^{\frac{1}{2}}$$

$$m_G = Pc_l$$

$$m_{1l} = \frac{1}{2} [Pc_l + (Pc_l^2 + 8Bi_c)]^{\frac{1}{2}}$$

$$m_{2l} = \frac{1}{2} [Pc_l - (Pc_s^2 + 8Bi_c)]^{\frac{1}{2}}$$

$$m'_{2s} = \frac{1}{2} [Pc_s - (Pc_s^2 + 8Bi_c)]^{\frac{1}{2}}$$

Dadas las condiciones a la frontera establecidas en esta región, se calcula el siguiente sistema de ecuaciones para calcular el valor de las constantes:

$$c_1 - c'_1 = T_a - T_h \quad (27)$$

$$c'_1 e^{m_G \frac{2b}{R}} + \frac{2b}{R} c'_2 e^{m_G \frac{2b}{R}} - c''_1 e^{m_{1l} \frac{2b}{R}} - c''_2 e^{m_{2l} \frac{2b}{R}} = T_c - T_a$$

$$c''_1 e^{m_{1l} \frac{s}{R}} + c''_2 e^{m_{2l} \frac{s}{R}} - c'''_2 e^{m_{2s} \frac{s}{R}} = 0$$

$$c_1 m'_{1l} - c'_1 m_G - c'_2 = 0$$

$$c'_1 m_G e^{m_G \frac{2b}{R}} + c'_2 \left( e^{m_G \frac{2b}{R}} + \frac{2b}{R} m_G e^{m_G \frac{2b}{R}} \right) - c''_1 m_{1l} e^{m_{1l} \frac{2b}{R}} - c''_2 m_{2l} e^{m_{2l} \frac{2b}{R}} = 0$$

$$c''_1 k_l m_{1l} e^{m_{1l} \frac{s}{R}} + c''_2 k_l m_{2l} e^{m_{2l} \frac{s}{R}} - c'''_2 k_s m'_{2s} e^{m_{2s} \frac{s}{R}} = 0$$

Resolviendo el sistema de ecuaciones encontramos la expresión para  $c_2'''$ . Con esta constante podemos calcular el valor de la temperatura de la interfase  $T_{IV}(S/R) = T_i$ .

Llegamos a la expresión que nos relaciona la posición de la interfase  $\frac{S}{R}$  y los parámetros termodinámicos del sistema, esta expresión es

$$\begin{aligned}
 2\Phi = & \left( e^{m_{2l} \frac{S}{R}} e^{m_{1l} \frac{2b}{R}} P c_s Wb [(m'_{1l} - m_{1l}) \right. & (28) \\
 & + (m_G - m_{1l})(m'_{1l} - m_G)(\frac{2b}{R})] + \\
 & e^{m_{1l} \frac{S}{R}} e^{m_{2l} \frac{2b}{R}} P c_s Wb [(m_{2l} - m'_{1l}) \\
 & - (m_G - m_{2l})(m'_{1l} - m_G)(\frac{2b}{R})] - e^{m_{1l} \frac{S}{R}} e^{m_{2l} \frac{S}{R}} K (m_{1l} - m_{2l}) \\
 & \left. [m'_{1l}(1 + e^{m_G \frac{2b}{R}}) - m_G(m_G - m'_{1l})(\frac{2b}{R})] \right) / \\
 & \left( e^{m_{2l} \frac{S}{R}} e^{m_{1l} \frac{2b}{R}} (K m_{2l} - m'_{2s}) [(m'_{1l} - m_{1l}) + \right. \\
 & (m'_{1l} - m_G)(m_G - m_{1l})(\frac{2b}{R})] + \\
 & e^{m_{1l} \frac{S}{R}} e^{m_{2l} \frac{2b}{R}} (K m_{1l} - m'_{2s}) [(m_{2l} - m'_{1l}) \\
 & \left. - (m'_{1l} - m_G)(m_{2l} - m_G)(\frac{2b}{R})] \right)
 \end{aligned}$$

Para calcular la posición de la interfase en función de los parámetros del sistema es necesario resolver las ecuaciones (27)

y (28) usando un método numérico. En este caso empleamos el método de Newton-Raphson.

En el siguiente capítulo se hará una discusión de los resultados obtenidos en cada una de las regiones descritas.

# CAPITULO III

## RESULTADOS

El análisis matemático desarrollado en el capítulo anterior y los parámetros termodinámicos correspondientes al CdTe generan una serie de gráficas, en las que se analiza el comportamiento de la posición de la interfase con respecto a la variación de dichos parámetros.

En principio, se quisiera estudiar la influencia de cada uno de los parámetros sobre la posición de la interfase. En este trabajo cambiamos únicamente un parámetro a la vez, manteniendo los demás constantes. Este tratamiento no es exhaustivo, pero indica la influencia de cada parámetro sobre la posición de la interfase.

Escogemos un conjunto de valores que son característicos de una gran variedad de sistemas, Estos son:  $0.0 \leq Bi_h \leq 2.0$ ,  $0.0 < Bi_c \leq 2.0$ ,  $0 \leq W_b \leq 2.0$  y  $0 \leq Pe_{l,s} \leq 0.2$ . Se tomó la relación  $k_l/k_s = 2.0$  de tal forma que la conductividad térmica para el sólido es  $k_s = 1.0 \text{ W/cm}^2\text{K}$  y conductividad térmica para el líquido  $k_l = 2.0 \text{ W/cm}^2\text{K}$ , que es característica del CdTe [1.7.12].

La temperatura adimensional  $\Phi_i$  toma valores entre 0.65 y 0.81.

De acuerdo al modelo descrito en el capítulo anterior, se grafica la posición de la interfase para los casos en los que el sistema está sin aislante y para el sistema al cual se le ha incorporado un aislante, que separa las regiones fría y caliente, cuyo espesor está dado por  $2b/R = 1.5$  [7].

Se presentan todos los resultados en función de las cantidades adimensionales mencionadas anteriormente:  $Bi$ ,  $Pe$ ,  $K$ , etc; por lo tanto, se hará solamente una interpretación cualitativa de ellos. La relación entre las variables físicas, dadas en forma dimensional, es mucho más compleja que la relación entre los parámetros adimensionales; por lo tanto, sólo se discutirá el efecto de cada uno de estos parámetros sobre la posición de la interfase.

## III.1 Sistema sin Aislante

Para el caso sin aislante, se grafica la posición de la interfase cuando ésta se encuentra o en la región caliente o en la región fría. Se muestra la influencia, sobre la posición de la interfase, de la variación de cada uno de los parámetros manteniendo los demás fijos. Estos parámetros son los que proporcionan mayor información para determinar la posición de la interfase, haciendo que sea la más adecuada para un crecimiento cristalino, cuando ésta se encuentra cerca de la frontera entre la región fría y la caliente.

### a).- Interfase en la Región Caliente.

En la figura 9 se grafica la dependencia de la posición de la interfase en función del número de Péclet correspondiente a la región sólida  $Pe_s$ . Los valores de los parámetros empleados en esta gráfica son:  $\Phi = 0.70$ ,  $Pe_l = 0.01$ ,  $Bi_c = 1.2$   $K = 2.0$ . Cada grupo de gráficas corresponde a los diferentes valores del número de Weber,  $Wb = 2.0, 0.4$  y  $0.0$  y de  $Bi_h = 2.0, 1.8$  y  $1.65$ .

La posición de la interfase es desplazada hacia la región caliente a medida que  $Pe_s$  aumenta. Este efecto se observa también al aumentar el número de Weber. El número de Biot para la región del calentador influye decisivamente en el desplazamiento del punto del cual parten las curvas de posición de la interfase ( $Pe_s = 0.0$ ): para valores grandes de  $Bi_h$ , las curvas comienzan más adentro de la región caliente.

El desplazamiento de la posición de la interfase se ve menos afectado, al variar  $Bi_h$ , si el número de Weber es grande ( $Wb$

2.0) pues las curvas casi se superponen. Se observa que la influencia de Weber es mayor para valores pequeños de  $Bi_h$ ; sin embargo, el desplazamiento hacia la región caliente no es tan pronunciado.

En la figura 10 se grafica la posición de la interfase  $-S/R$  contra el número de Péclet correspondiente a la región líquida  $Pe_l$ . Los valores de los parámetros utilizados en este caso son:  $\Phi = 0.70$ ,  $Pe_s = 0.1$ ,  $Bi_c = 1.2$ ,  $K = 2.0$ . Se hace variar el número de Weber  $Wb$  y el número de Biot para la región caliente  $Bi_h$ . El rango de valores del acoplamiento térmico en la región caliente va desde 1.65 a 2.0. Los valores de los otros parámetros permanecen constantes. Para  $Wb = 2.0$  el desplazamiento de la interfase es muy pequeño para los diferentes valores de  $Bi_h$ . Esto significa que el acoplamiento térmico entre el horno y el ámpula, para la región caliente no tiene casi influencia en la posición de la interfase si consideramos números de Weber grandes ( $Wb = 2.0$ ). La influencia de  $Bi_h$  es mayor si tenemos  $Wb = 0.0$ , pues en este caso las curvas se separan en mayor grado que en el caso en que consideramos  $Wb = 0.4$  y  $2.0$ . El número de Péclet para la fase líquida  $Pe_l$  influye muy poco en el desplazamiento de la interfase cuando  $Wb = 0.0$ . El efecto de  $Pe_l$  y de  $Bi_h$ , sobre la posición de la interfase, es mayor para números de Weber más pequeños.

En la gráfica de la posición de la interfase  $-S/R$  contra el número relacionado con el calor latente  $Wb$ , figura 11, donde también se hacen variar  $Pe_l$  y  $Bi_h$ , se observa el desplazamiento hacia la región caliente para números de Weber grandes. Los valores de los parámetros que permanecen constantes son:  $\Phi = 0.70$ ,  $Pe_s = 0.1$ ,  $Bi_c = 1.2$ ,  $K = 2.0$ . Se varía  $Bi_h$  y  $Pe_l$ .



A medida que  $Bi_h$  disminuye se observa un desplazamiento hacia la región fría del sistema. Para valores grandes de Weber, el desplazamiento de las curvas para diferentes valores de  $Pc_l$  y  $Bi_h$ , es prácticamente el mismo. Si queremos mantener la interfase cercana a la frontera calentador enfriador debemos escojer valores de  $Wb$  pequeños y números de Biot  $Bi_h$  y de Peclet  $Pc_l$  pequeños.

Se puede concluir que si se tienen valores pequeños del número de Biot y del número de Weber el crecimiento del cristal es bueno, pues la posición de la interfase se mantiene muy cercana a la frontera entre la región fría y la caliente, tal como se observa en las figuras 9 y 10.

#### b).- Interfase en la Región Fría

La dependencia de la posición de la interfase  $S/R$  vs.  $Pc_s$  es mostrada en la figura 13, los parámetros que también se hacen variar son  $Bi_h$  y  $Wb$ . Todos los demás parámetros permanecieron constantes con los valores  $\Phi = 0.81$ ,  $K = 2.0$ ,  $Bi_c = 1.2$  y  $Pc_l = 0.1$ .

El comportamiento de las curvas de la posición de la interfase para los diferentes valores de  $Bi_h$  es muy similar. La diferencia radica en los diferentes puntos de partida de las curvas. Para  $Bi_h$  pequeños ( $Bi_h = 0.4$ ) las curvas empiezan más adentro de la región fría que para valores grandes ( $Bi_h = 2.0$ ). Al aumentar el valor de  $Pc_s$ , las curvas son desviadas hacia la región caliente. Esta desviación es mayor a medida que el número de Weber aumenta, para el mismo valor de  $Bi_h$ . Para números de Biot grandes la interfase se desplaza hacia la región caliente. La mayor desviación de las curvas, con números  $Bi_h$  iguales, se obtiene para este caso, con  $Wb = 2.0$ .

Cuando se grafica  $S/R$  contra  $Wb$ , figura 11, se aprecia que el comportamiento de la posición de la interfase es simi-

lar al de la figura anterior. Los parámetros que se emplearon en esta gráfica fueron:  $\Phi = 0.81$ ,  $K = 2.0$ ,  $Pe_l = 0.1$ ,  $Bi_c = 0.4$ . Aquí se hacen variar los parámetros  $Bi_h$  y  $Pe_s$ .

Para el conjunto de curvas con números de  $Bi_h$  diferentes, pero iguales  $Pe_s$ , las curvas presentan el mismo comportamiento. El desplazamiento de la curva de la interfase hacia la región caliente aumenta con el número de  $Bi_h$ . Las curvas no comienzan en un solo punto ( $Wb = 0$ ). Este efecto es debido a la variación del número  $Pe_s$  y cada curva es desplazada hacia la región caliente a medida que  $Pe_s$  aumenta. Para  $Pe_s = 0.05$  y  $0.1$  este desplazamiento no es tan grande como cuando  $Pe_s = 0.2$ .

En la figura 15, donde se grafica la posición de la interfase en función del número de Biot  $Bi_h$ , se hace variar también  $Wb$  y  $Pe_s$ . Los valores usados para esta gráfica fueron los mismos que para las gráficas anteriores. Se observa que la interfase se desplace hacia la región caliente a medida que aumenta  $Bi_h$ . Este desplazamiento es más notorio a medida que aumenta el número de Weber. Las curvas convergen a un solo punto a medida que  $Bi_h$  tiende a cero. Existe una superposición de curvas para los valores de  $Wb = 0.0$  y  $0.4$  con  $Pe_s = 0.1$  y  $0.2$ .

En la figura 16 se grafica  $S/R$  en función de  $Pe_l$ . Los parámetros que se hacen variar en este caso son  $Pe_s$  y  $Wb$ . El desplazamiento que sufre la curva hacia la región caliente es más notorio para valores de Weber y de Péclet grandes ( $Wb = 2$ ,  $Pe_s = 0.2$ ). Para todos los demás casos el desplazamiento es mínimo e incluso algunas curvas se superponen.

En general, para que la interfase se encuentre más cercana a la frontera entre la región fría y caliente se necesita que  $Wb$ ,  $Pe_s$  y  $Pe_l$  sean pequeños, para el caso en el cual la interfase se encuentra

localizada en la región caliente.

Cuando la interfase esta en la región fría es necesario tener valores de  $Bi_h$ ,  $Wb$ ,  $P_{cl}$  y  $P_{cs}$  grandes para que la interfase esté más cercana a la frontera entre la región fría y la región caliente.

## III.2 Sistema con Aislante

En esta sección se estudia el sistema al que se le ha introducido un aislante entre la región fría y la caliente. Se analizan los tres casos por separado: Cuando la interfase se encuentra en la región caliente, en la región fría y en la región del aislante.

### a).- Interfase en la Región Caliente.

En la gráfica de la figura 17, en la que se grafica la posición de la interfase  $-S/R$  contra el número de Péclet  $Pe_l$ , se observa que la influencia de la variación de  $Pe_l$  sobre la posición de la interfase es mínima, para valores grandes de  $Bi_h$ . Cuando  $Bi_h$  es más pequeño ( $Bi_h = 0.4$ ) la interfase se desplaza hacia la región caliente y el número de Weber influye más fuertemente sobre este desplazamiento. Para  $Bi_h$  grandes, la interfase se encuentra más cercana a la región del aislante y las curvas, para los diferentes valores del número de Weber ( $Wb = 2.0, 0.4$  y  $0.0$ ), casi tienen el mismo valor en todo el rango de valores de  $Pe_l$  ( $0 \leq Pe_l \leq 0.20$ ). Esto indica que la influencia de  $Pe_l$  sobre la posición de la interfase, para  $Bi_h$  grandes, es mínima cuando la interfase se encuentra localizada en la región caliente.

La posición de la interfase  $-S/R$  contra  $Pe_s$  se muestra en la figura 18. Los parámetros que se hacen variar son  $Bi_h$  y  $Wb$ . Cada conjunto de gráficas tiene  $Bi_h$  constante. A medida que aumenta el valor de  $Bi_h$ , la posición de la interfase es desplazada hacia la región del aislante; mientras que al aumentar  $Pe_s$ , ésta se desplaza más adentro de la región caliente. La influencia del número de Weber es pequeña cuando se consideran

valores de  $Bi_h$  grandes ( $Bi_h = 2.0$  y  $1.2$ ); mientras que para  $Bi_h = 0.4$ , un aumento en el valor de  $Wb$  provoca que las curvas estén más desplazadas hacia la región caliente.

En la gráfica de la figura 19, en la que se grafica la posición de la interfase  $-S/R$  contra el número de Weber  $Wb$ , se observa también la influencia, sobre la posición de la interfase, de  $Bi_h$  y  $Pe_l$ . La variación que experimenta la posición de la interfase, al variar el número de Weber, es mínima para valores de  $Bi_h = 2.0$  y  $1.2$ . Estos dos grupos de curvas se encuentran más cercanos a la región del aislante que el grupo con  $Bi_h = 0.4$ . Las curvas de este grupo están más separadas, pero esto es debido a los diferentes valores del número de Péclet  $Pe_l$ . Al aumentar el número de Weber, las curvas se desplazan hacia la región caliente, pero sólo para  $Bi_h$  pequeño.

En la figura 20 se grafica  $-S/R$  contra  $Bi_c$ . En este caso existen también tres grupos de curvas, cada una con un valor de  $Pe_s$  y diferentes valores de  $Wb$ .

A medida que el valor de  $Pe_s$  disminuye, las curvas son desplazadas hacia la región del aislante. El crecimiento de las curvas, para  $Bi_c$  pequeños es muy rápido, pero se estabiliza a medida que  $Bi_c$  crece. El número de Weber tiene mayor influencia sobre la curva de la posición de la interfase si  $Pe_s$  es grande; esto es, el conjunto de curvas con  $Pe_s = 0.20$  presenta mayor separación que los conjuntos con  $Pe_s = 0.5$  y  $0.10$ . En todos los casos, para  $Wb = 2.0$ , la curva está más desplazada hacia la región caliente.

#### b).- Interfase en la Región del Aislante.

En las figuras de la 21 a la 24 se grafica la posición de la interfase en función de los diferentes parámetros, cuando ésta se encuentra en la región del aislante.

Se gráfica ahora la posición de la interfase en función del número de Weber, figura 21. Los parámetros que se hicieron variar son  $Bi_c$  y  $Pe_l$ . Como puede observarse, la variación de cualesquiera de los parámetros,  $Wb$ ,  $Bi_c$  o  $Pe_l$ , provoca desplazamientos muy grandes de la posición de la interfase.

Un cambio muy pequeño en el número de Weber, para el caso en que  $Bi_c = 0.4$ , provoca un desplazamiento de la interfase desde el límite cercano a la región fría hasta el de la región caliente, pero sin alcanzarlo. Números pequeños de  $Bi_c$  desplazan las curvas hacia números pequeños de Weber.

En la figura 22 se gráfica  $S/R$  contra  $Pe_l$ . Los parámetros que también se hacen variar son  $Bi_h$  y  $Wb$ .

El comportamiento de las curvas es similar al de la figura anterior. Como puede verse en la figura, el rango de valores de  $Bi_h$  es muy pequeño:  $Bi_h = 0.15, 0.17$  y  $0.19$ ; sin embargo, estas variaciones son suficientes para producir desplazamientos grandes en la posición de la interfase. Las curvas comienzan en la frontera entre la región fría y la del aislante, pero no alcanza la frontera de la región caliente. La curva con  $Bi_h = 0.19$  y  $Wb = 2.0$  comienza en un punto cercano a la región media del aislante y termina dentro de esta misma región.

La figura 23 es similar a la figura anterior. Se hace variar  $Bi_h$  en forma continua y  $Wb$  y  $Pe_l$  en forma discreta. La diferencia radica esencialmente en el valor de  $Pe_s$ : 0.01 para la gráfica de la figura 21 y 0.2 en la gráfica de la figura 22. Números grandes de  $Pe_s$  ( $=0.2$ ) desplazan a las curvas hacia valores pequeños de  $Bi_h$  y de  $Wb$ . Para valores pequeños de  $Bi_h$ , las curvas alcanzan sólo valores de  $Wb = 0.8$ ; a diferencia de las curvas de la figura 21, en las que el valor del número de Weber llega a 2.0.

En la figura 24 se grafica  $S/R$  contra  $Bi_c$ . En este caso, los valores de  $Pe_s$  están muy restringidos, pues el modelo no acepta otros valores fuera del rango entre  $Pe_s = 0.01$  y  $Pe_s = 0.05$ . Además, los valores para  $Bi_h$  sólo son aceptados si son mayores de 0.3, para  $Wb$  y  $Pe_s$  pequeños.

Existe un desplazamiento suave de la curva, hacia la región fría, a medida que aumenta el número de Biot  $Bi_c$ . Este desplazamiento es mayor si el número de Weber es pequeño.

### c).- Interfase en la Región Fría.

En la figura 25 graficamos la posición de la interfase  $S/R$  contra el número de Péclet  $Pe_s$ . Se usaron los siguientes parámetros:  $Pe_l = 0.1$ ,  $Bi_c = 0.4$ ,  $K = 2.0$ ,  $\Phi = 0.65$  y  $2b/R = 1.5$ . Se observa que las curvas de la posición de la interfase para  $Bi_h = 0.4$  están más cercanas a la región del aislante.

Los puntos desde los cuales parten las curvas de la posición de la interfase son iguales para cada valor de  $Bi_h$ . Se observa también que un aumento en el valor de  $Pe_s$ , para números de Weber pequeños, casi no influye en el desplazamiento de la interfase hacia la región del aislante; en cambio, para números de Weber grandes, este desplazamiento es mayor e inclusive hay traslapamiento entre las curvas con los valores de  $Wb = 0.0$  y  $0.4$ .

En la figura 26 se grafica la posición de la interfase  $S/R$  contra el número de Weber, mientras los demás parámetros permanecen constantes. Es de notarse que para valores de  $Bi_h$  pequeños la curva de  $S/R$  se desplaza hacia la región del aislante; en cambio, para valores grandes de  $Bi_h$ , ésta se encuentra más adentro de la región fría. El comportamiento de las curvas de la posición de la interfase para los diferentes valores de  $Bi_h$  es exactamente el mismo, excepto por el

desplazamiento del punto de partida ( $Wb = 0$ ), que no es el mismo para los diferentes valores de  $Bi_h$ . En este caso existe también el traslape entre las curvas con  $Bi_h = 2$  y  $Pe_s$  grandes y para  $Bi_h = 1.2$  y  $Pe_s$  pequeños.

En la figura 27 se grafica la posición de la interfase contra  $Bi_h$ . Un aumento de  $Bi_h$  tiene el mismo efecto que un aumento de  $T_h$ . Para números de  $Bi_h$  grandes la posición de la interfase es desplazada hacia la región fría. Este desplazamiento ocurre también cuando se tienen números de  $Pe_s$  pequeños. Puede observarse que las variaciones de  $Bi_h$  provocan un desplazamiento muy grande sobre las curvas de posición de la interfase.

En la figura 28 se graficaron las curvas  $S/R$  contra  $Pe_l$  para diferentes valores de  $Wb$  y  $Pe_s$ . Los demás parámetros se mantuvieron constantes. Todas las curvas sufren un desplazamiento hacia la región fría a medida que aumenta  $Pe_l$  y presentan el mismo comportamiento. Las curvas parten de puntos muy cercanos a la frontera entre la región fría y la región del aislante. En este caso la variación del número de Péclet influye de manera notoria.



SISTEMA SIN AISIANTE  
INTERFASE EN LA REGION CALIENTE

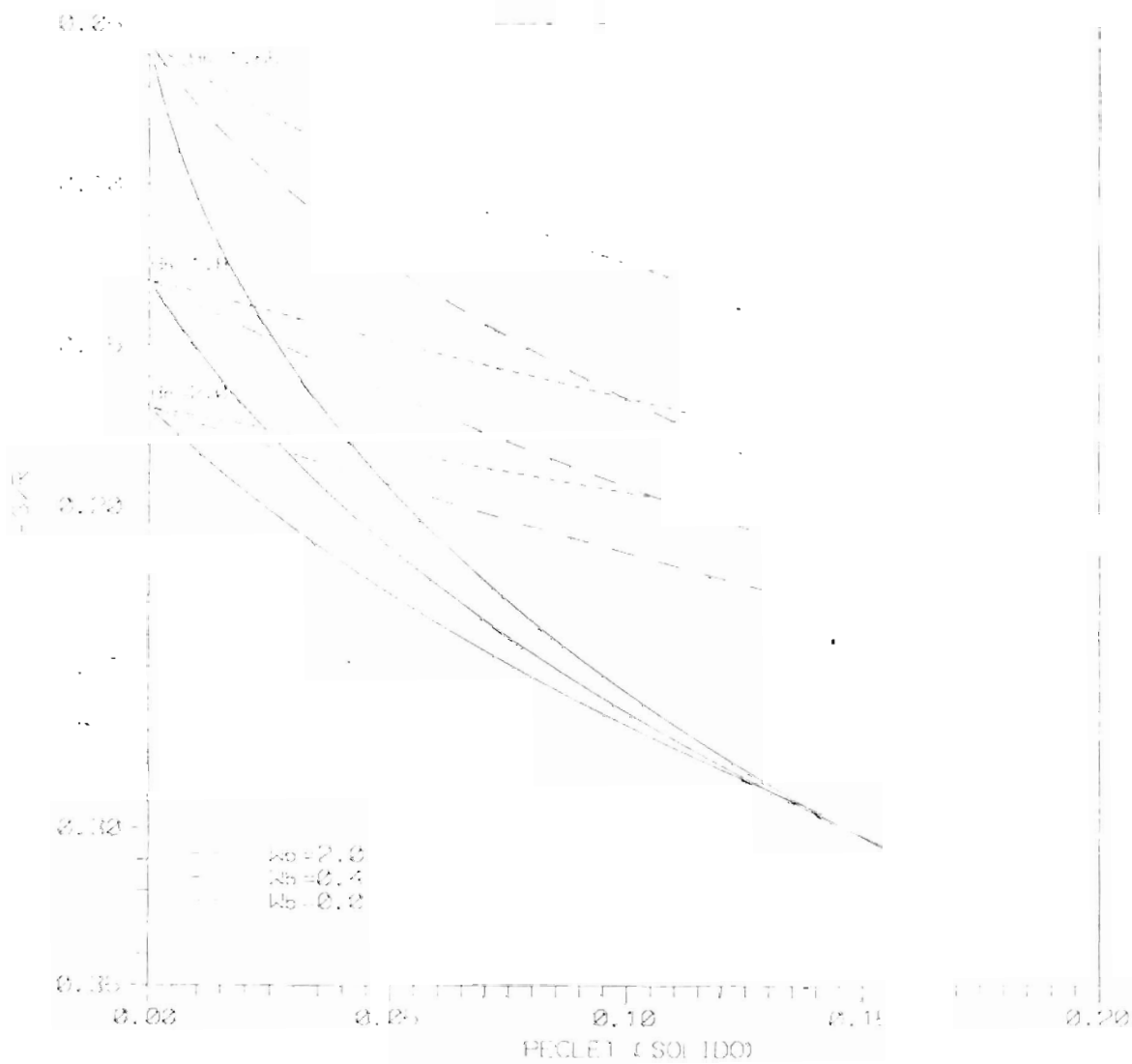


Figura 9. Gráfica de  $-S/R$  vs  $Pec_s$ .  
para valores de  $Pec_l = 0.01$ ,  $Bi_c = 1.2$ ,  
 $K = 2.0$  y  $\Phi = 0.7$ .

SISTEMA SIN AISLANTE  
INTERFASE EN LA REGION CALIENTE

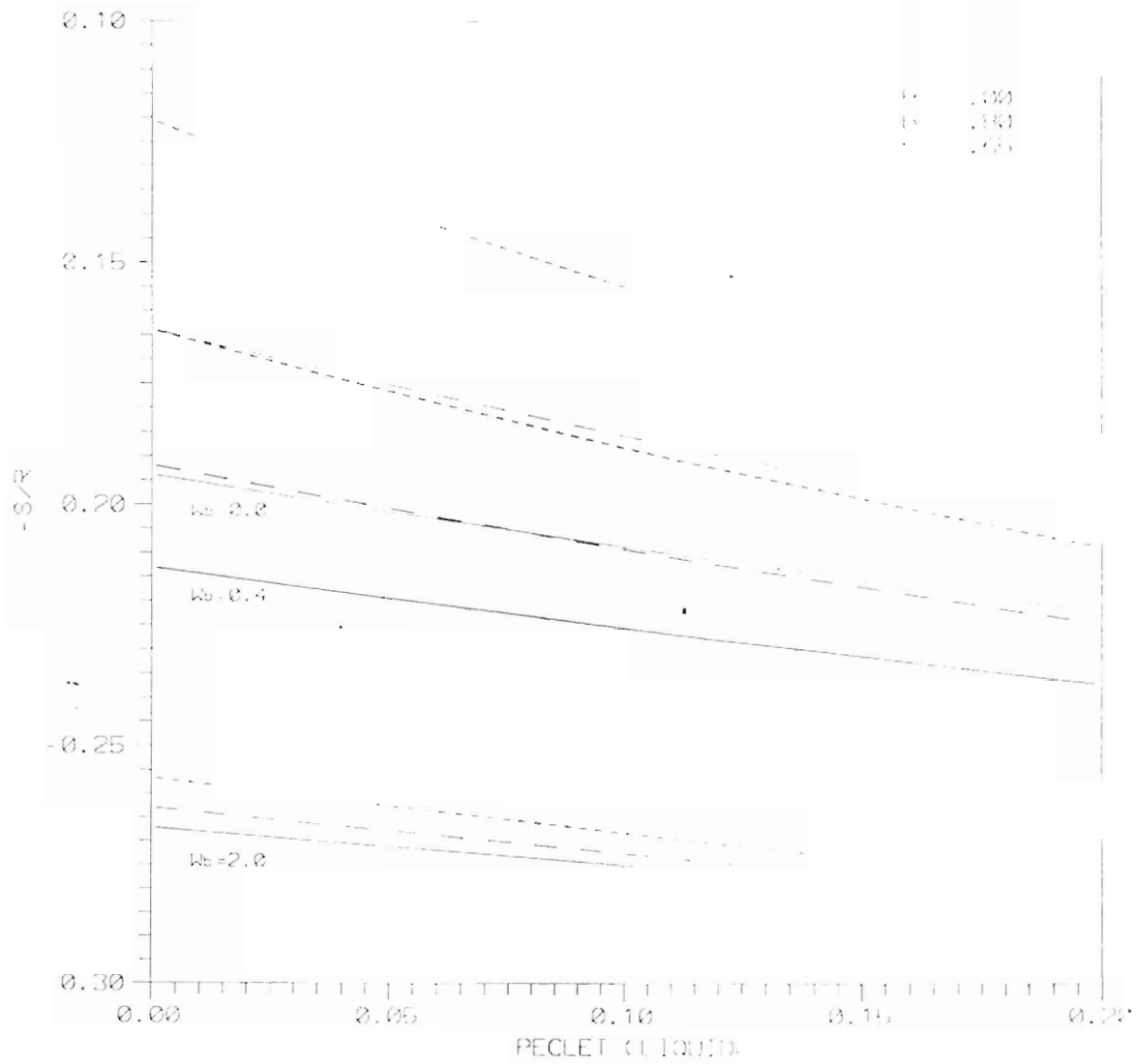


Figura 10. Gráfica de  $-S/R$  vs  $Pe_t$ .  
para valores de  $Pe_s = 0.1$ ,  $Bi_c = 1.2$ ,  
 $K = 2.0$  y  $\Phi = 0.7$ .

SISTEMA SIN AISLANTE  
INTERFASE EN LA REGION CALIENTE

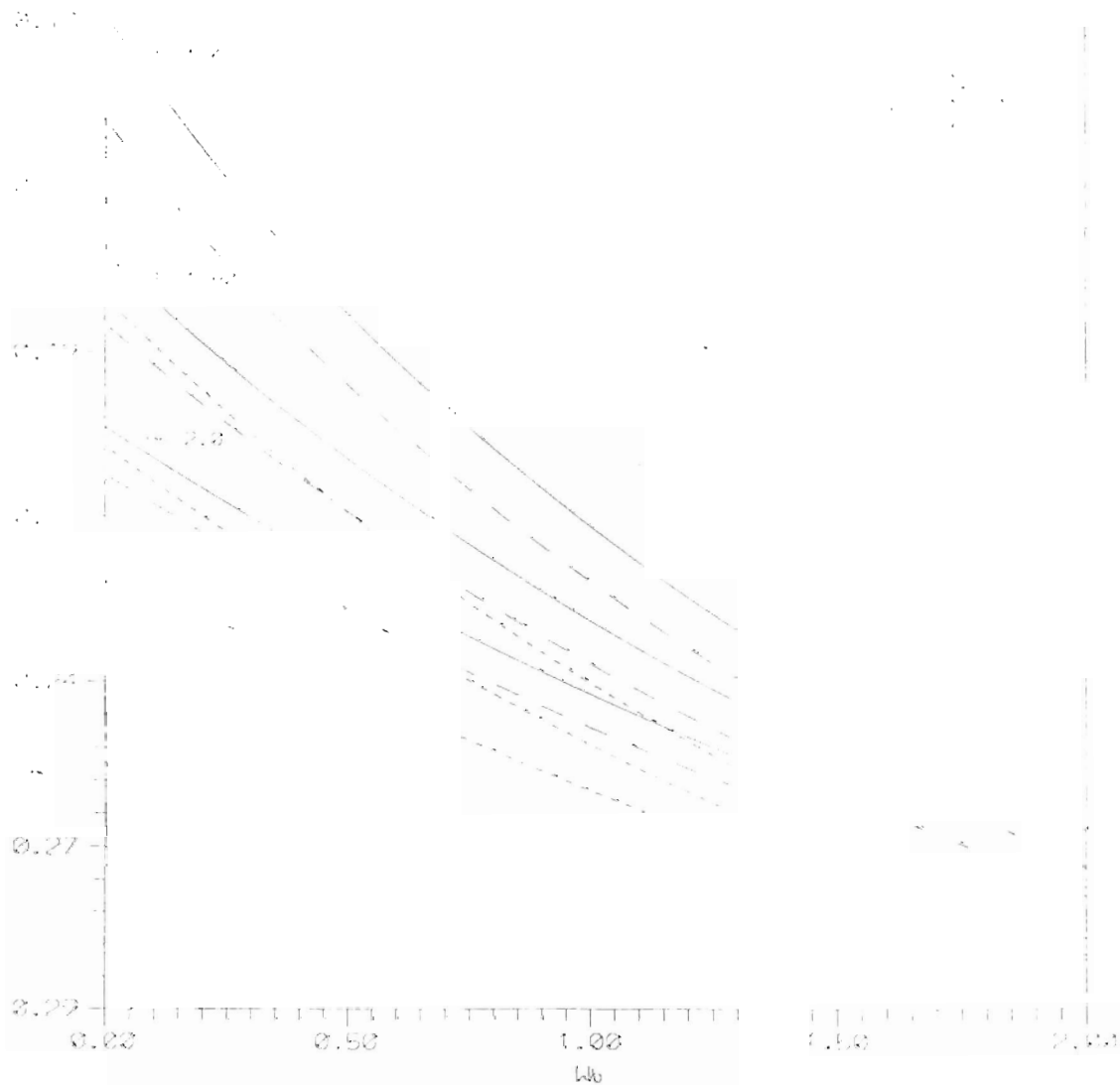


Figura 11. Gráfica de  $-S/R$  vs  $Wb$ .  
para valores de  $Pe_s = 0.1$ ,  $Bi_r = 1.2$ ,  
 $K = 2.0$  y  $\Phi = 0.7$ .

SISTEMA SIN AISLANTE  
INTERFASE EN LA REGION CALIENTE

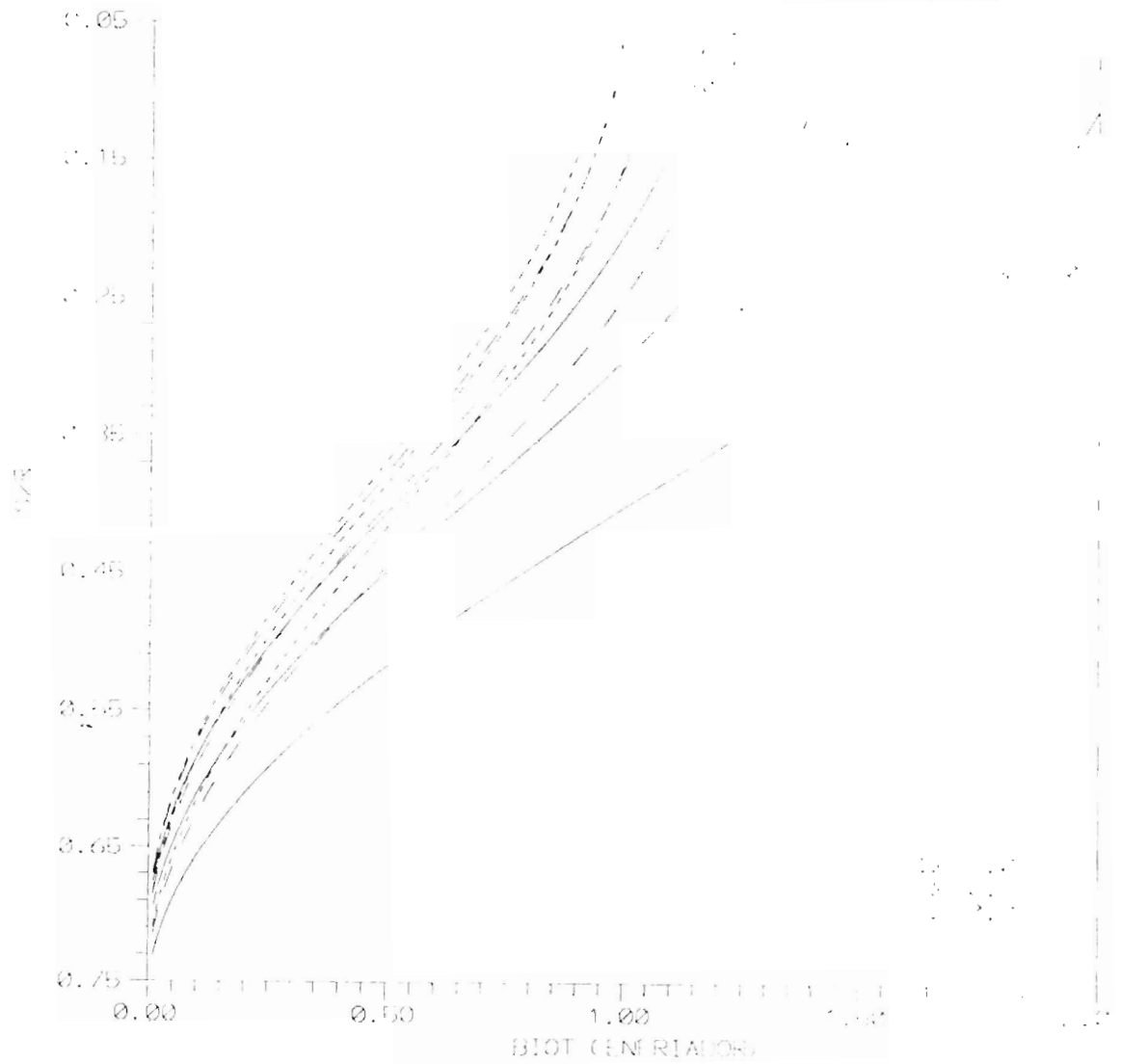


Figura 12. Gráfica de  $-S/R$  vs  $Bi_t$ ,  
para valores de  $Pe_l = 0.1$ ,  $Bi_h = 1.2$ .  
 $K = 2.0$  y  $\Phi = 0.7$ .

SISTEMA SIN AISLANTE  
INTERFASE EN LA REGION FRIA

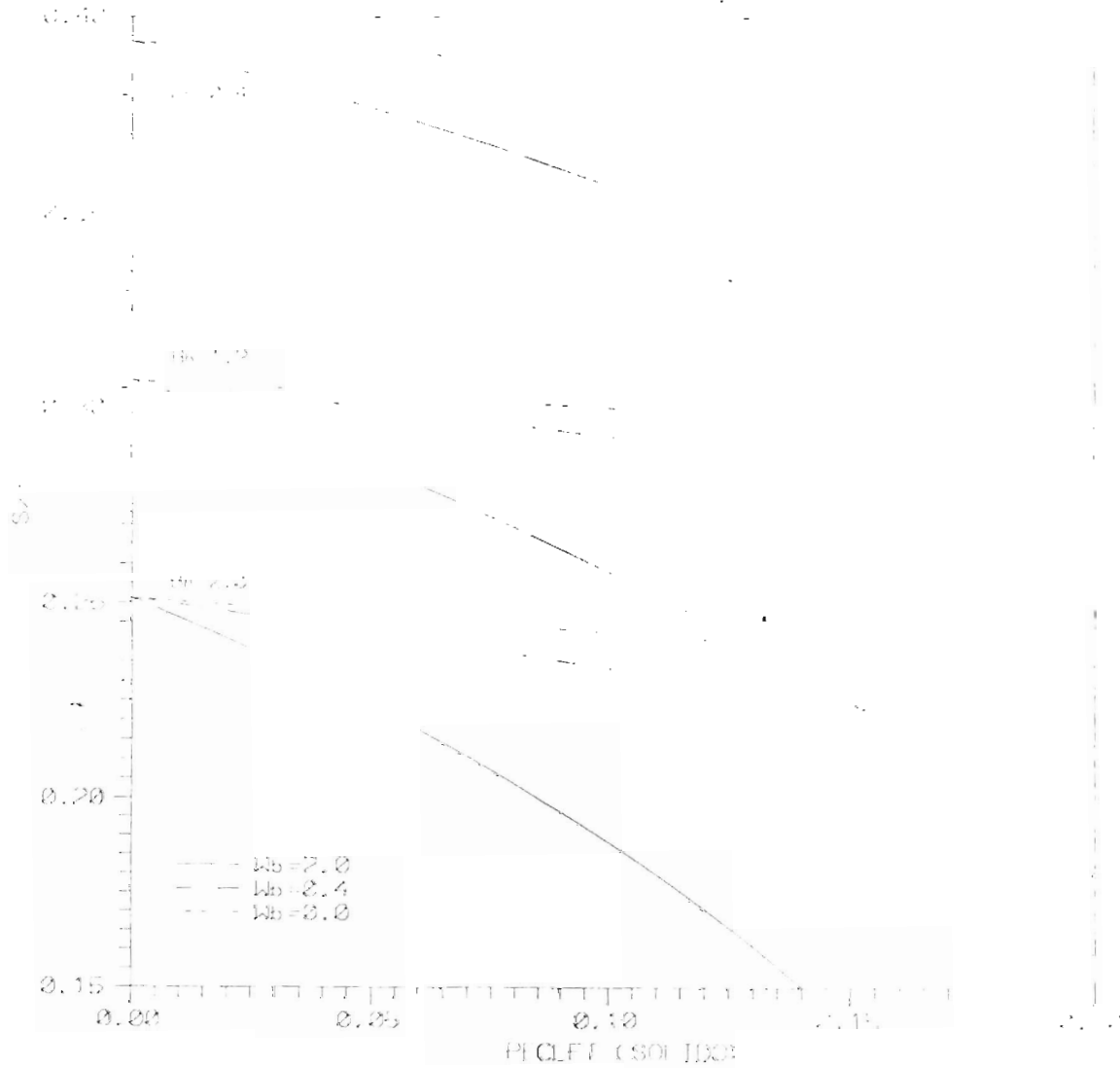


Figura 13. Gráfica de  $S/R$  vs  $Pe_s$ .  
para valores de  $Pe_l = 0.1$ ,  $Bi_c = 1.2$ ,  
 $K = 2.0$  y  $\Phi = 0.81$ .

SISTEMA SIN AISLANTE  
INTERFASE EN LA REGION FRIA

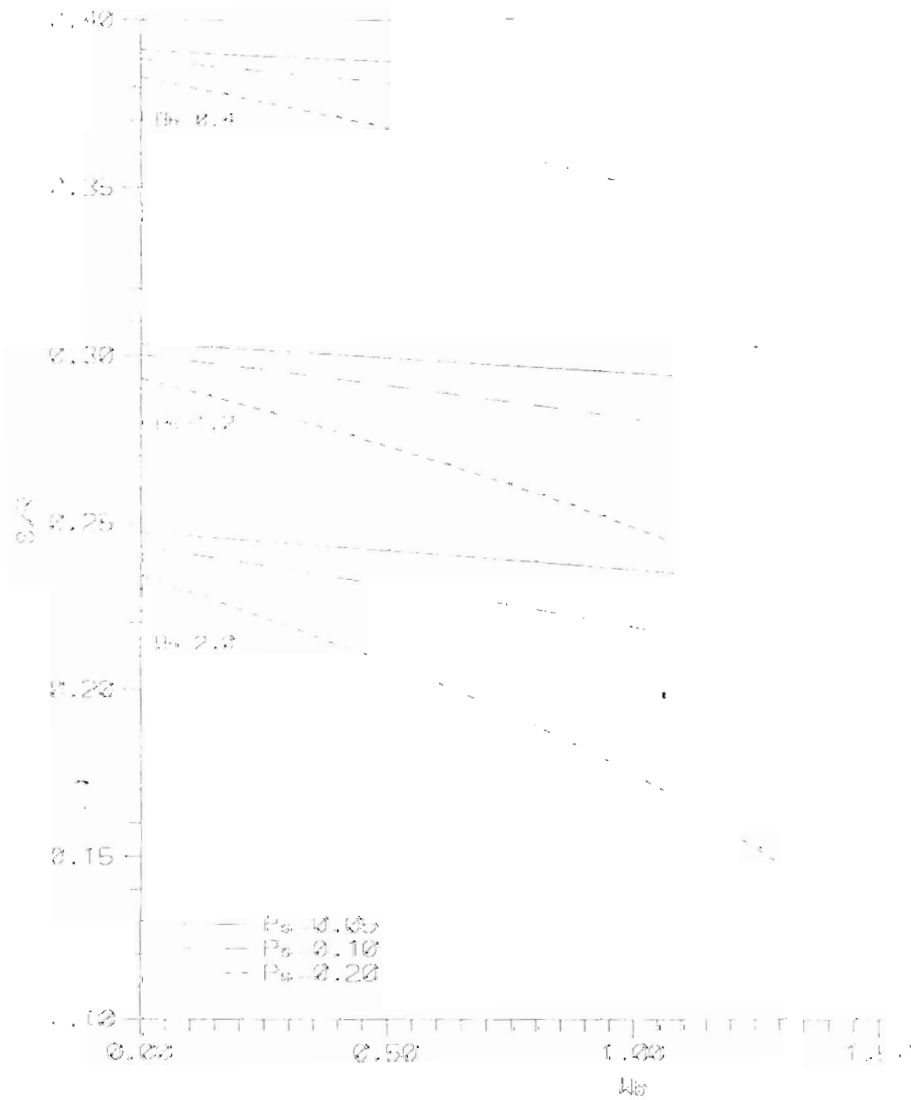


Figura 14. Gráfica de  $S/R$  vs  $Wb$ .  
para valores de  $Pe_l = 0.1$ ,  $Bi_c = 0.4$ ,  
 $K = 2.0$  y  $\Phi = 0.81$ .

SISTEMA SIN AISLANTE  
INTERFASE EN LA REGION FRIA

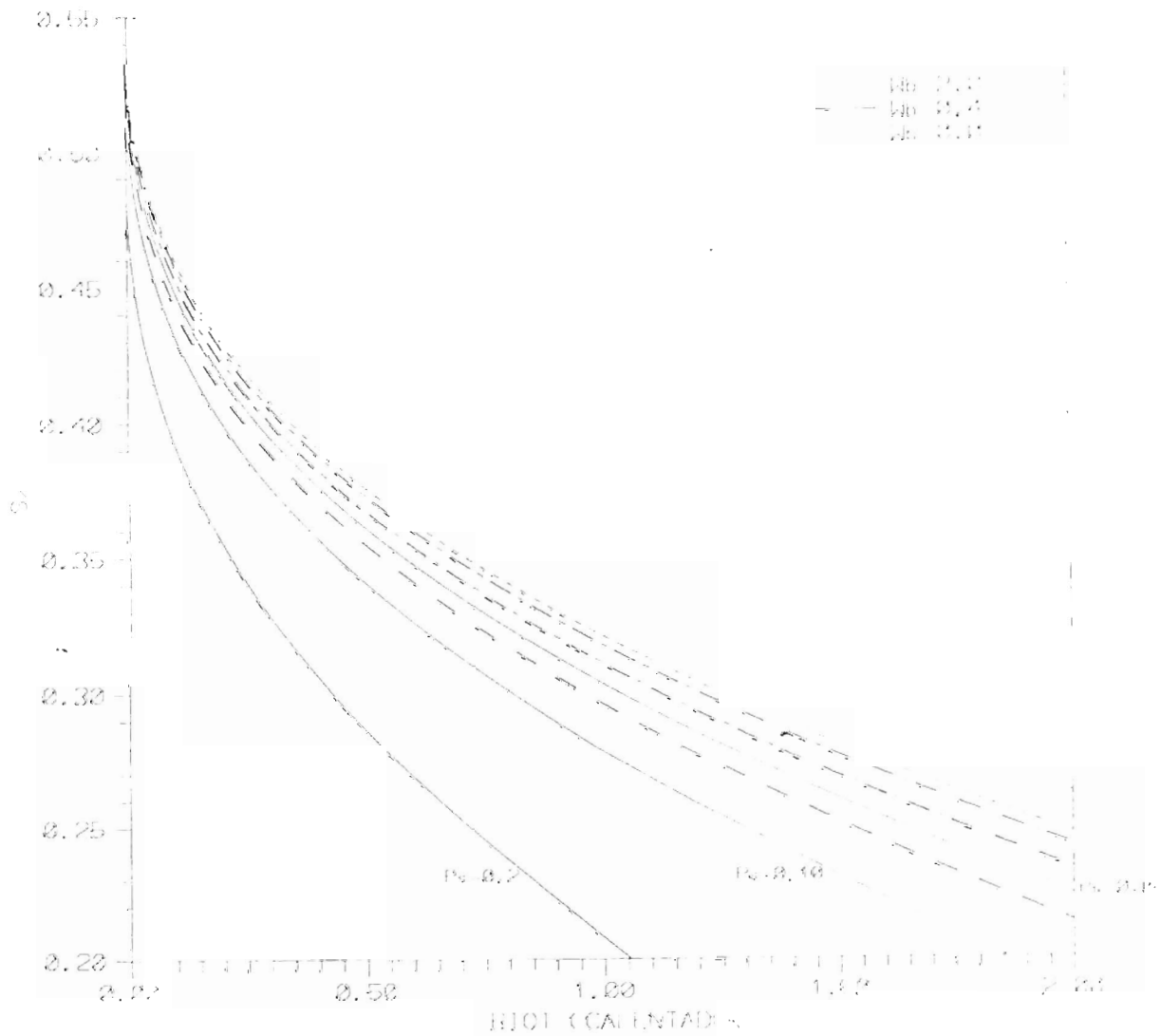


Figura 15. Gráfica de  $S/R$  vs  $Bi_h$   
para valores de  $Pec_l = 0.1$ ,  $Bi_c = 0.4$ ,  
 $K = 2.0$  y  $\Phi = 0.81$ .

SISTEMA SIN AISLANTE  
INTERFASE EN LA REGION FRIA

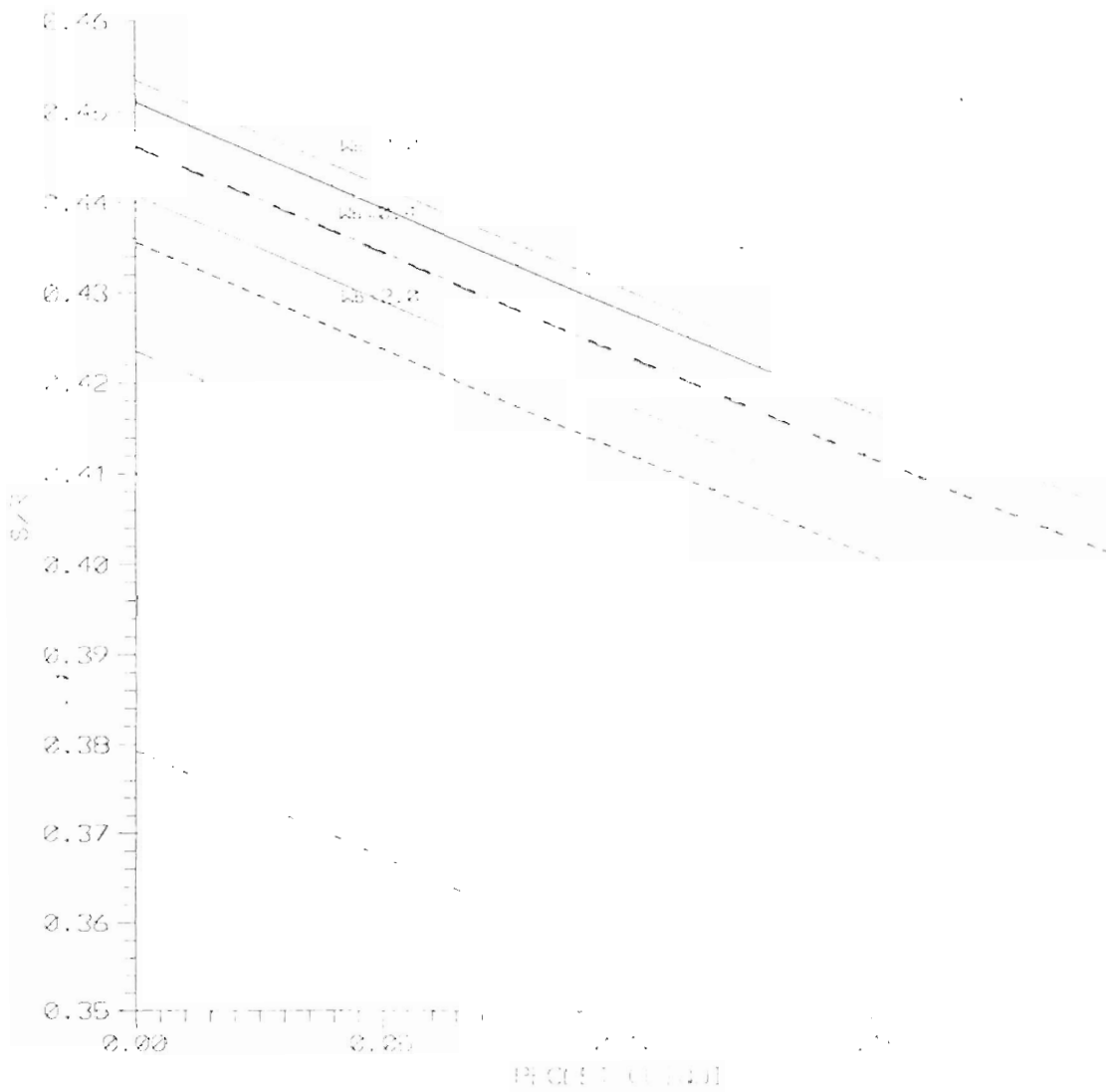


Figura 16. Gráfica de  $S/R$  vs  $Pe$   
para valores de  $Bi_h = 0.2$ ,  $Bi_c = 1.2$ ,  
 $K = 2.0$  y  $\Phi = 0.81$ .



SISTEMA CON AISLANTE  
INTERFASE EN LA REGION CALIENTE

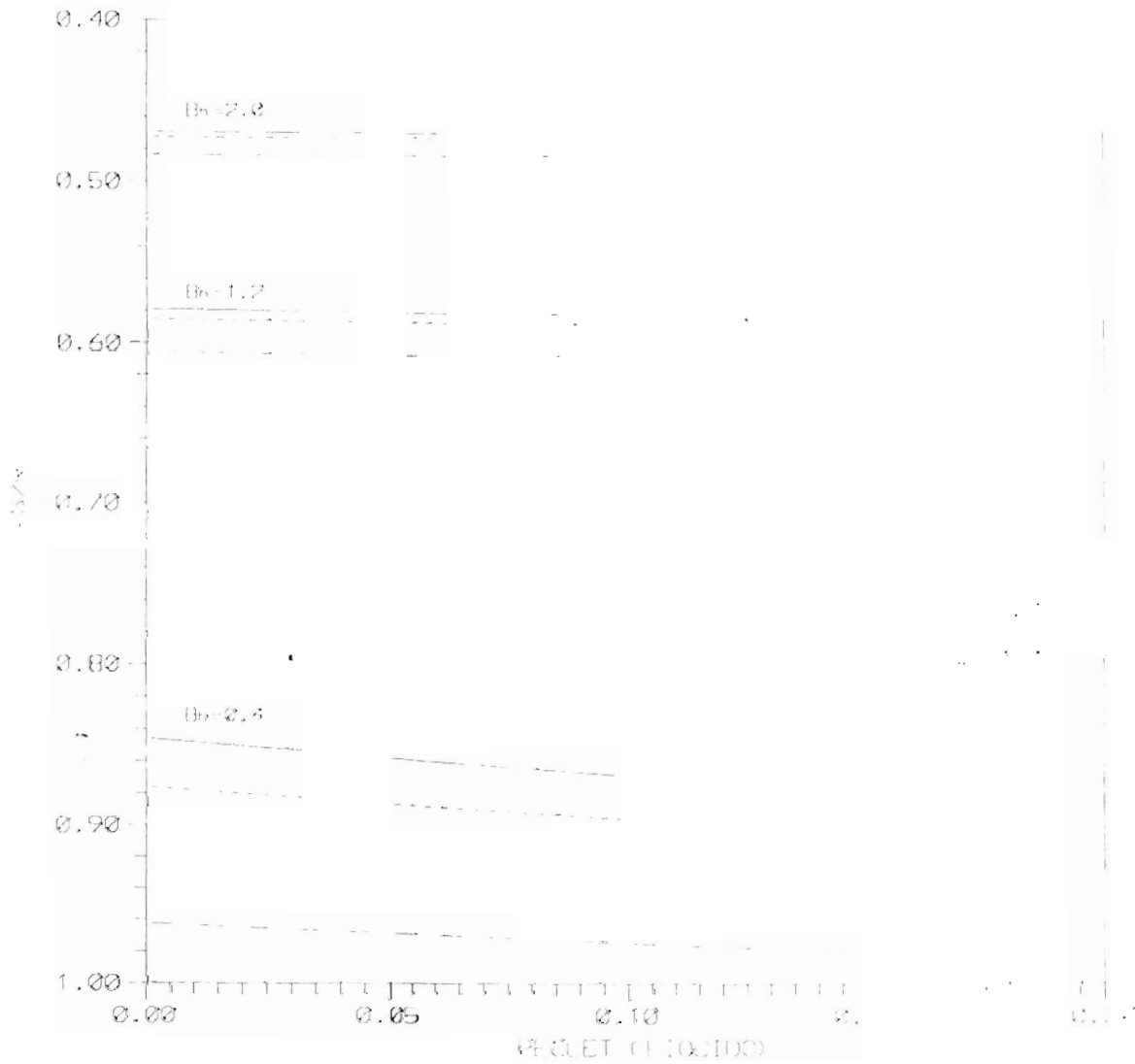


Figura 17. Gráfica de  $-S/R$  vs  $Pe_i$ .  
para valores de  $Pe_s = 0.1$ ,  $Bi_i = 2.0$ .  
 $K = 2.0$ ,  $\Phi = 0.7$  y  $2b/R = 1.5$ .

SISTEMA CON AISLANTE  
INTERFASE EN LA REGION CALIENTE

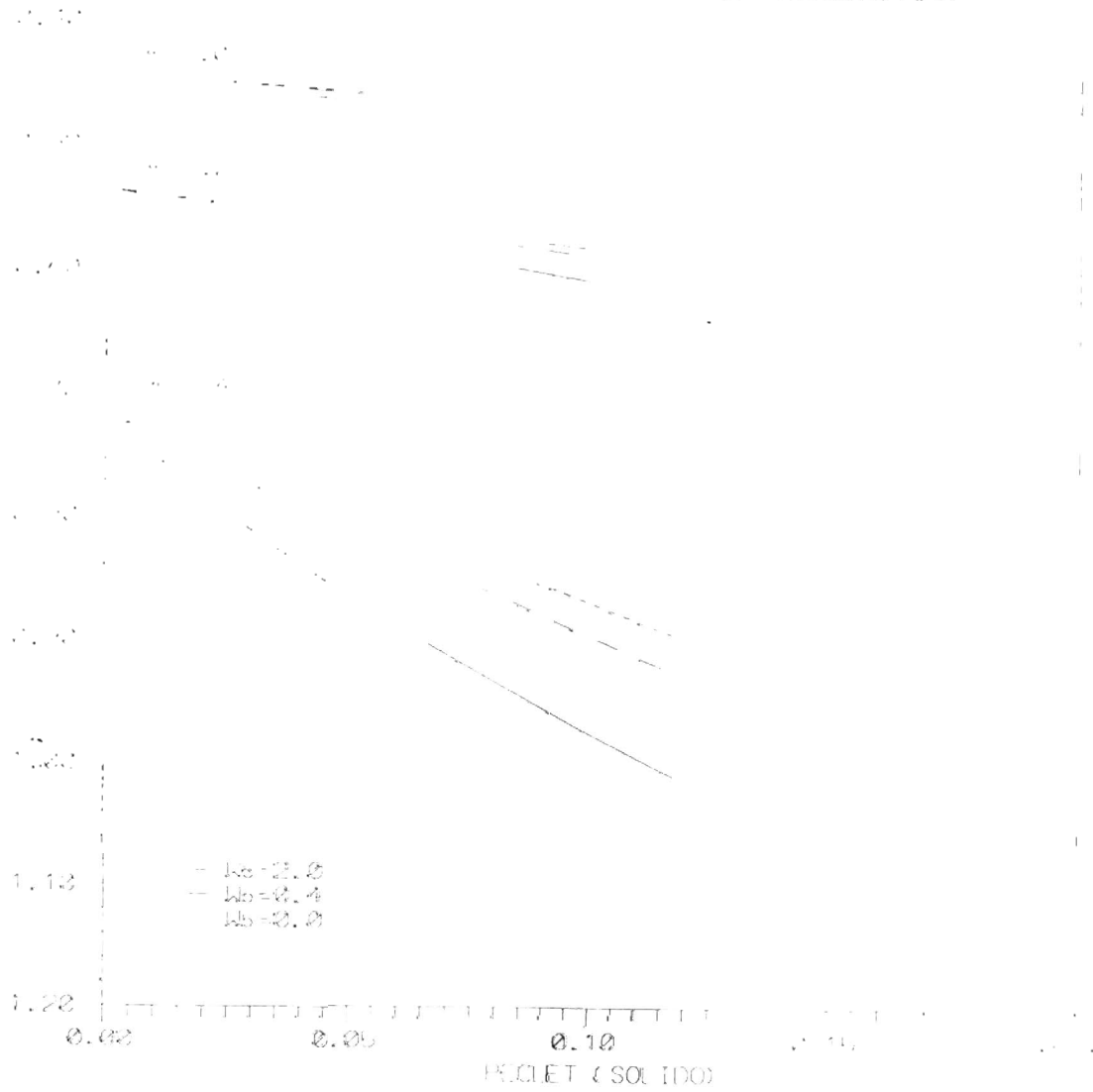


Figura 18. Gráfica de  $-S/R$  vs  $P_{ct}$ ,  
para valores de  $P_{ct} = 0.1$ ,  $Bi_c = 2.0$ ,  
 $K = 2.0$ ,  $\phi = 0.7$  y  $2b/R = 1.5$ .

SISTEMA CON AISLANTE  
INTERFASE EN LA REGION CALIENTE

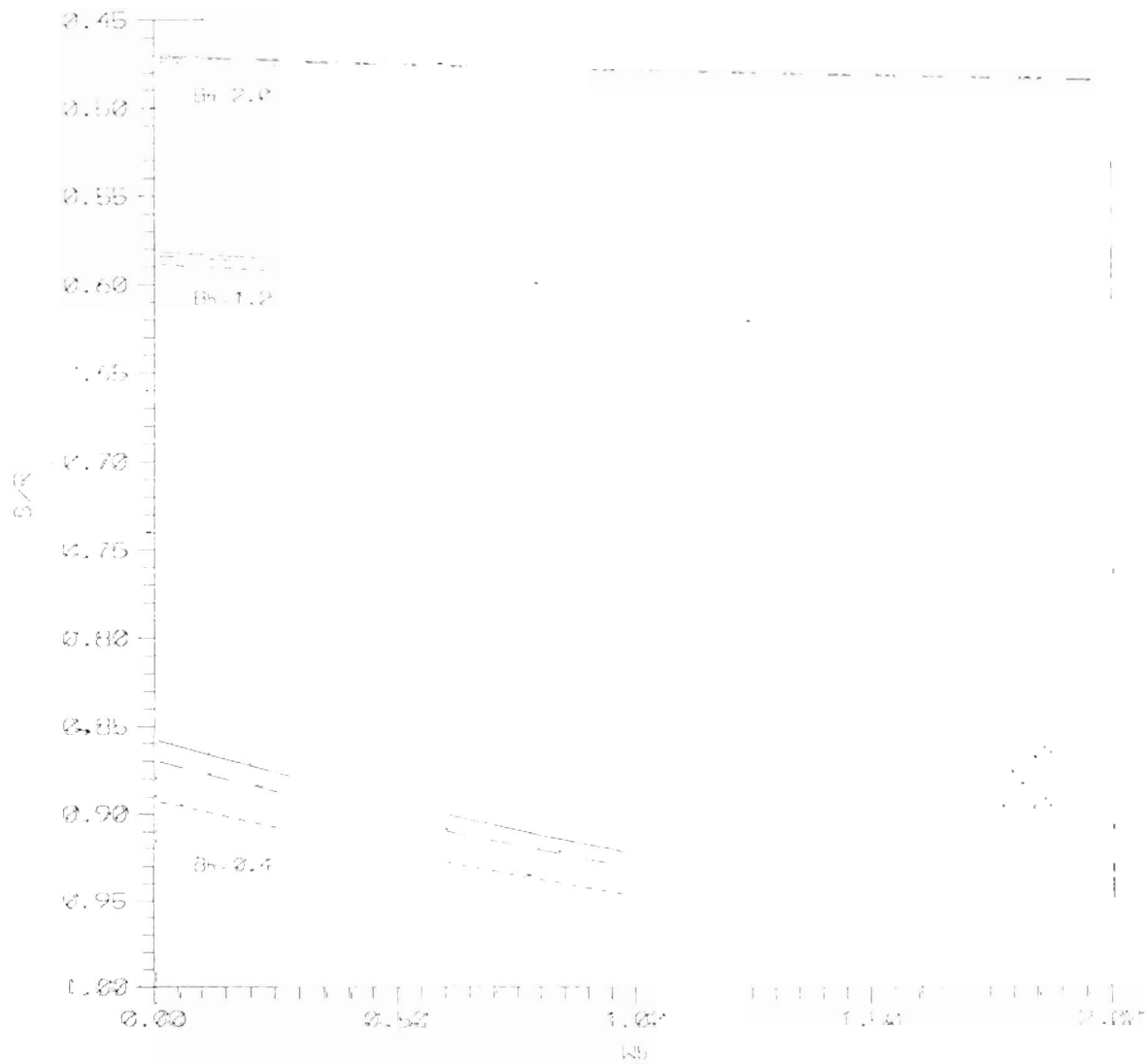


Figura 19. Gráfica de  $-S/R$  vs  $Wb$ .  
para valores de  $Pe_s = 0.1$ ,  $Bi_c = 2.0$ ,  
 $K = 2.0$ ,  $\Phi = 0.7$  y  $2b/R = 1.5$ .

SISTEMA CON AISLANTE  
 INTERFASE EN LA REGION CALIFNTE

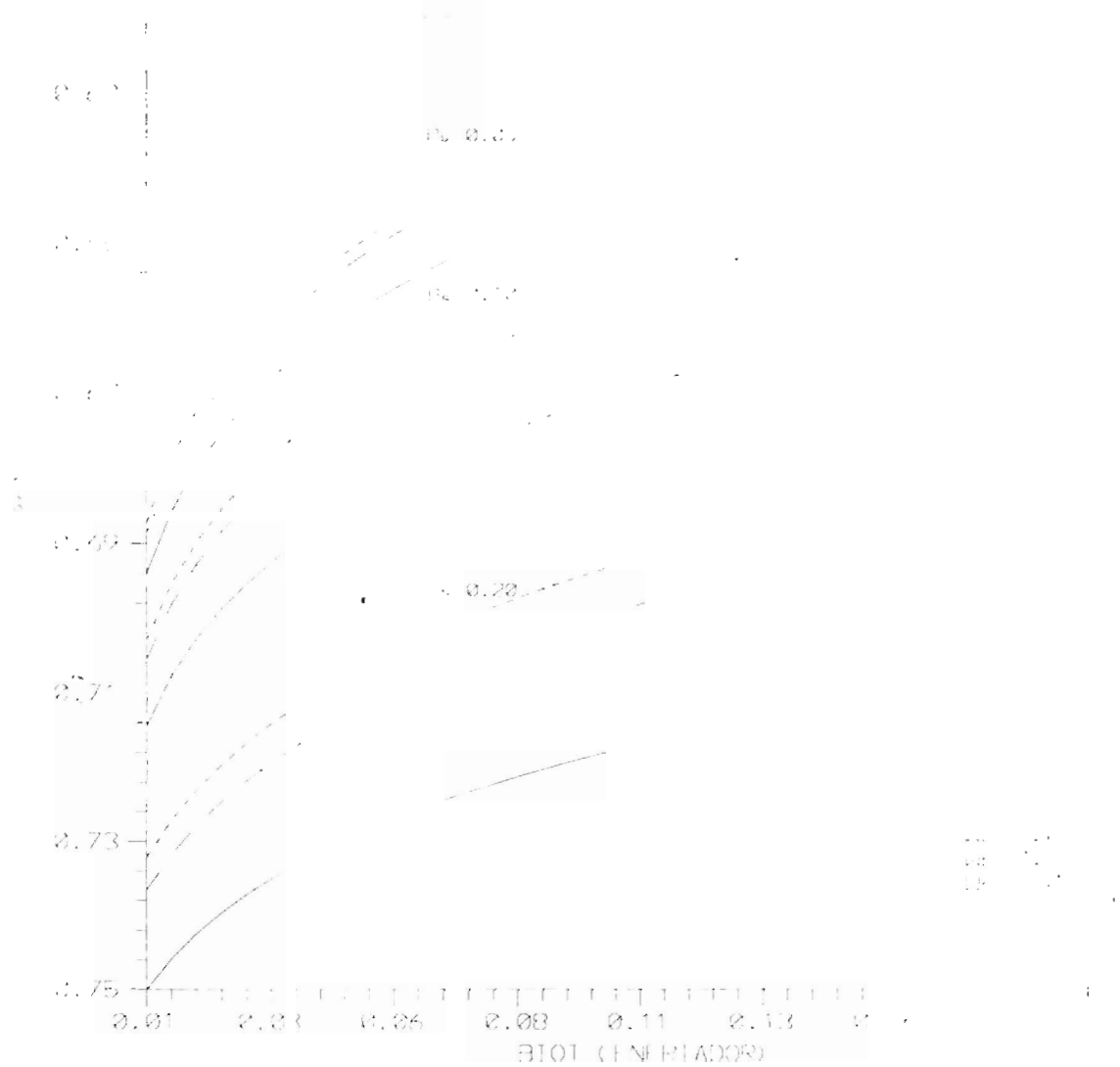


Figura 20. Gráfica de  $-S/R$  vs  $Bi_i$ .  
 para valores de  $Pe_l = 0.1$ ,  $Bi_h = 1.2$ ,  
 $K = 2.0$ ,  $\Phi = 0.7$  y  $2b/R = 1.5$ .

INTERFASE EN LA REGION DEL AISLANTE

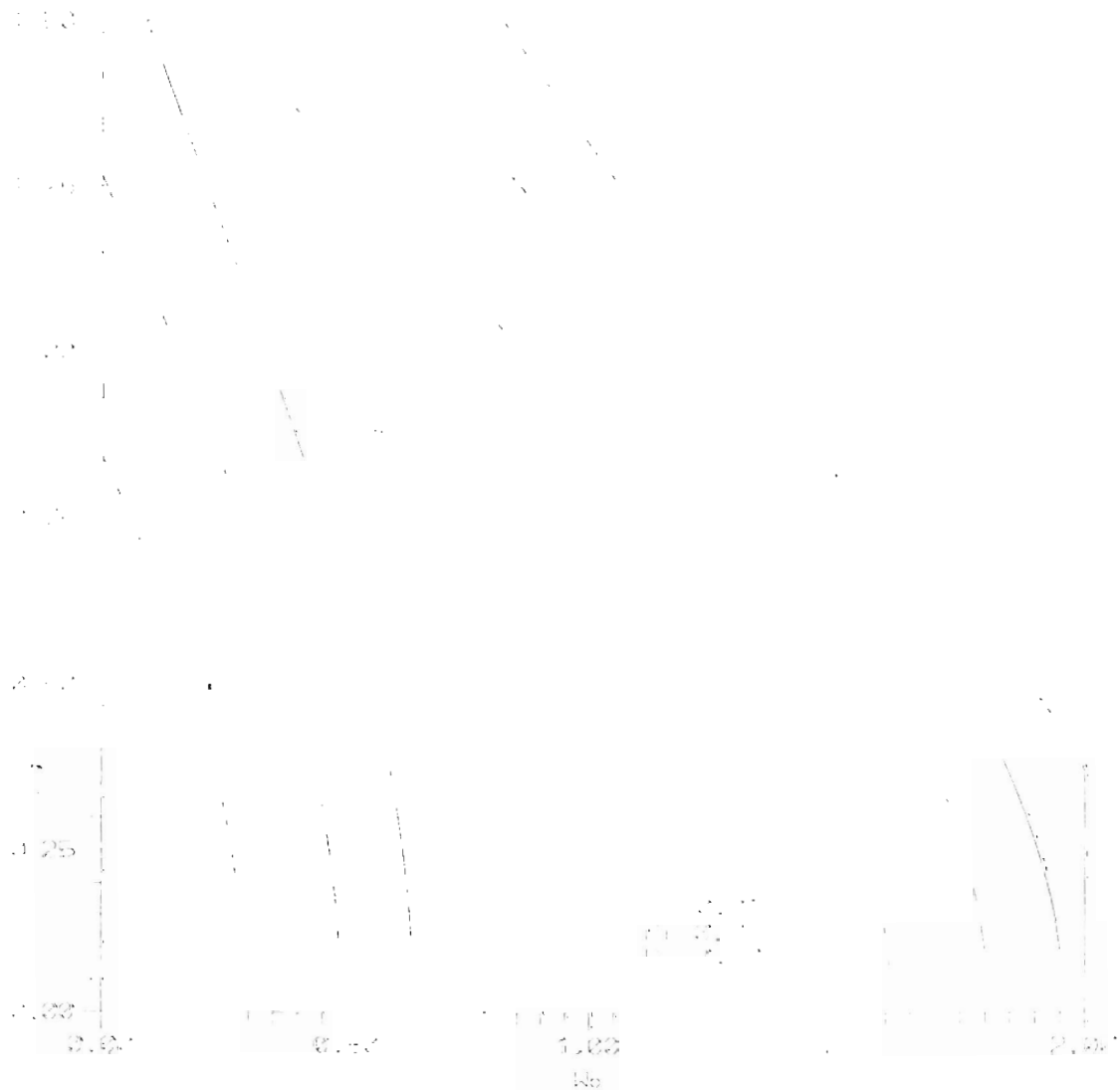


Figura 21. Gráfica de  $S/R$  vs  $Wb$ .  
 para valores de  $Pe_s = 0.05$ ,  $B_{lh} = 0.2$ .  
 $K = 2.0$ ,  $\Phi = 0.81$  y  $2b/R = 1.5$ .

## INTERFASE EN LA REGION DEL AISLANTE

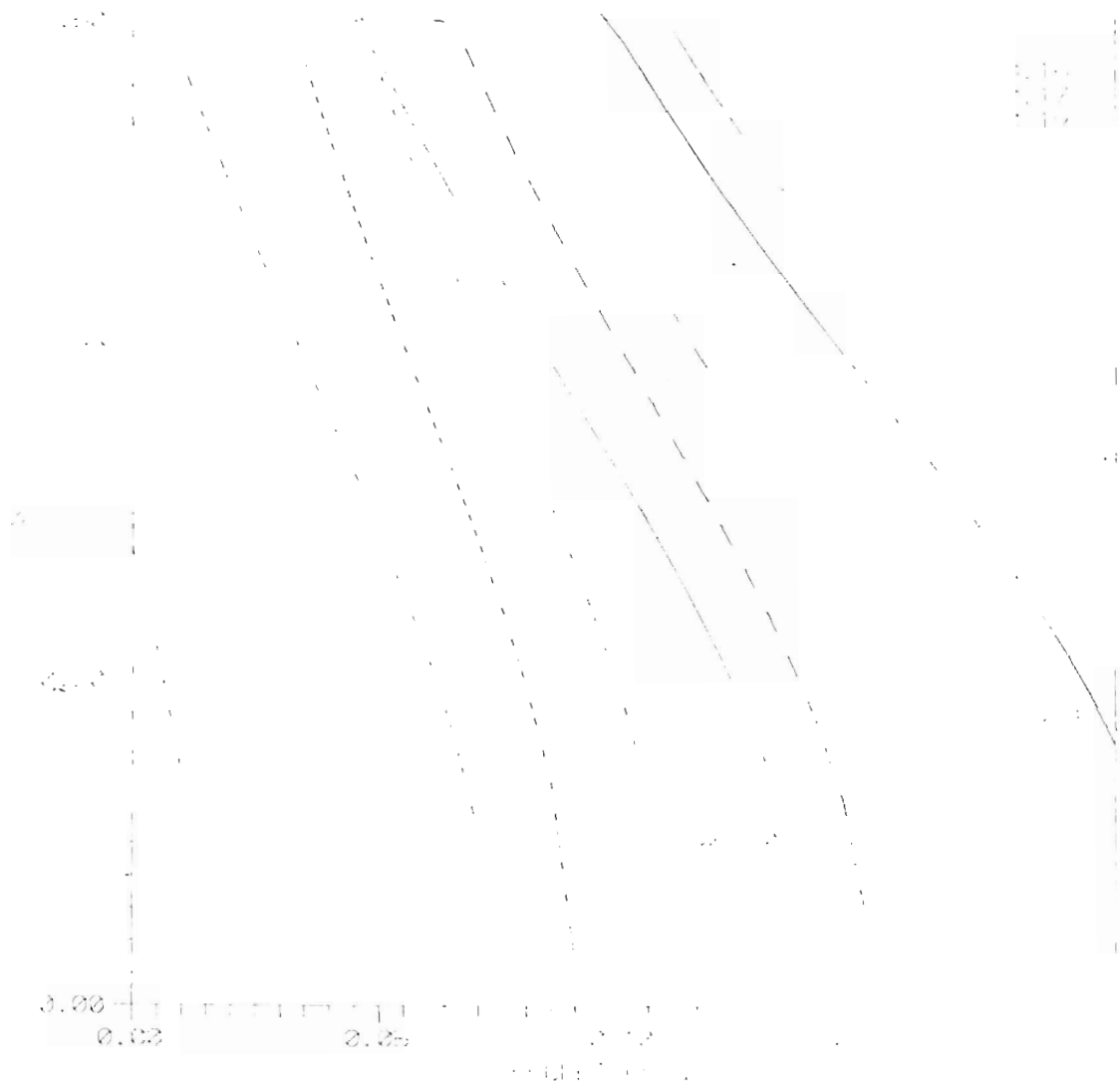


Figura 22. Gráfica de  $S/R$  vs  $P_{cl}$ .  
 para valores de  $Pe_s = 0.01$ ,  $Bi = 0.2$ .  
 $K = 2.0$ ,  $\Phi = 0.81$  y  $2b/R = 1.5$

## INTERFASE EN LA REGION DEL AISLANTE

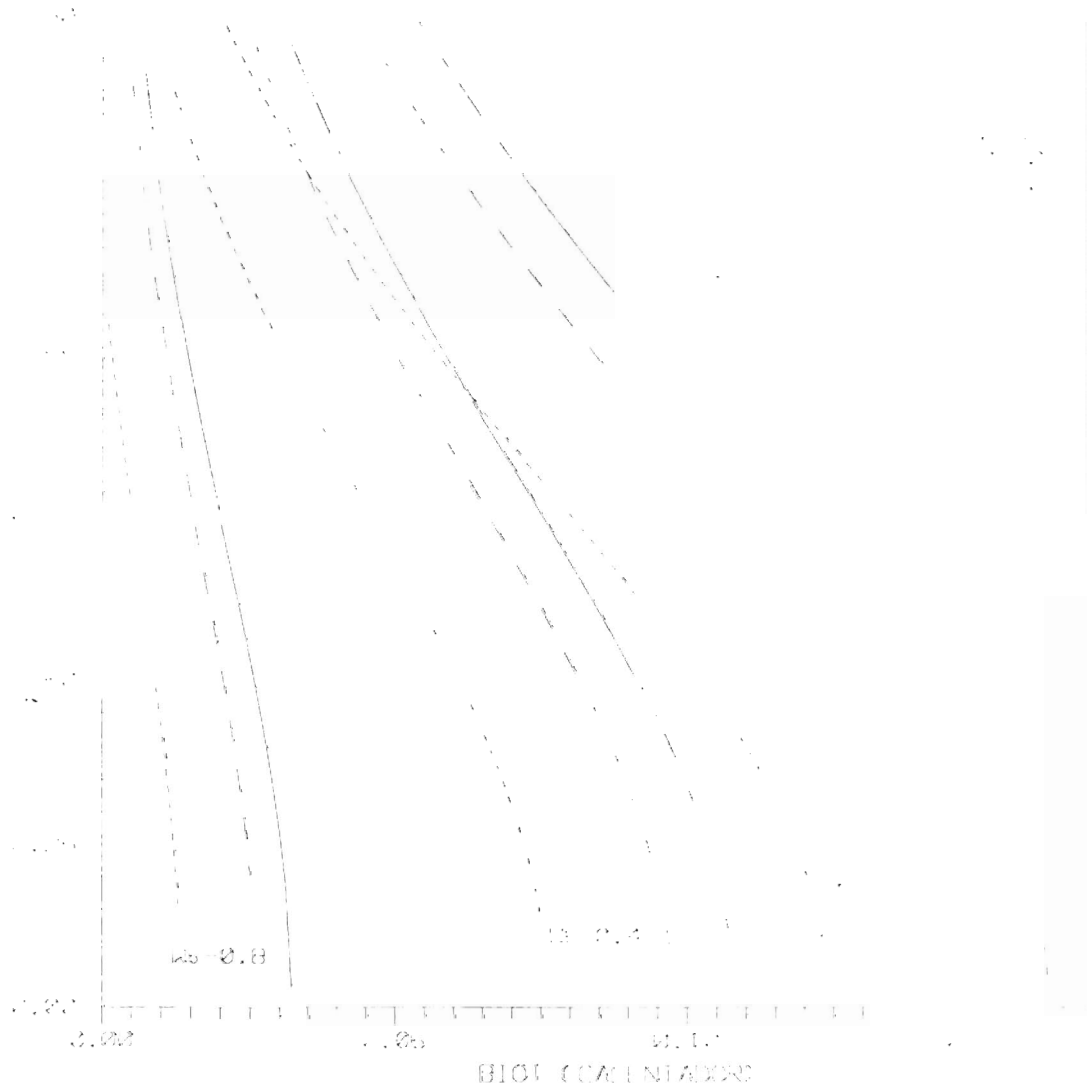


Figura 23. Gráfica de  $S/R$  vs  $Bi_h$ .  
 para valores de  $Pe_s = 0.2$ ,  $Bi_r = 2.0$ ,  
 $K = 2.0$ ,  $\Phi = 0.81$  y  $2b/R = 1.5$ .

## INTERFASE EN LA REGION DEL AISLANTE

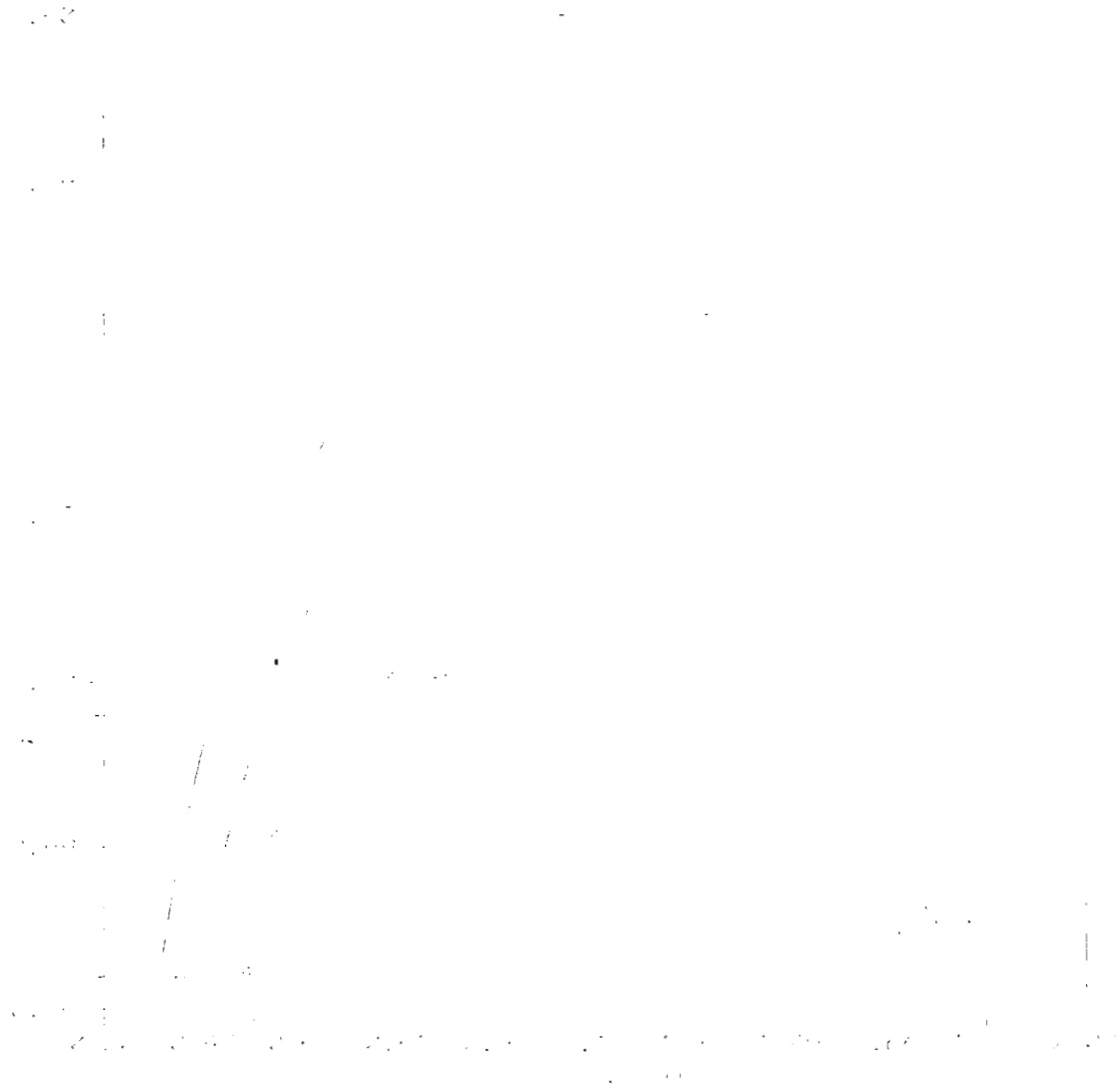


Figura 24. Gráfica de  $S/R$  vs  $Bi_i$ .  
 para valores de  $Pr_s = 0.01$ ,  $Bi_h = 0.2$ .  
 $K = 2.0$ ,  $\Phi = 0.81$  y  $2b/R = 1.5$ .



SISTEMA CON AISLANTE  
INTERFASE EN LA REGION FRIA

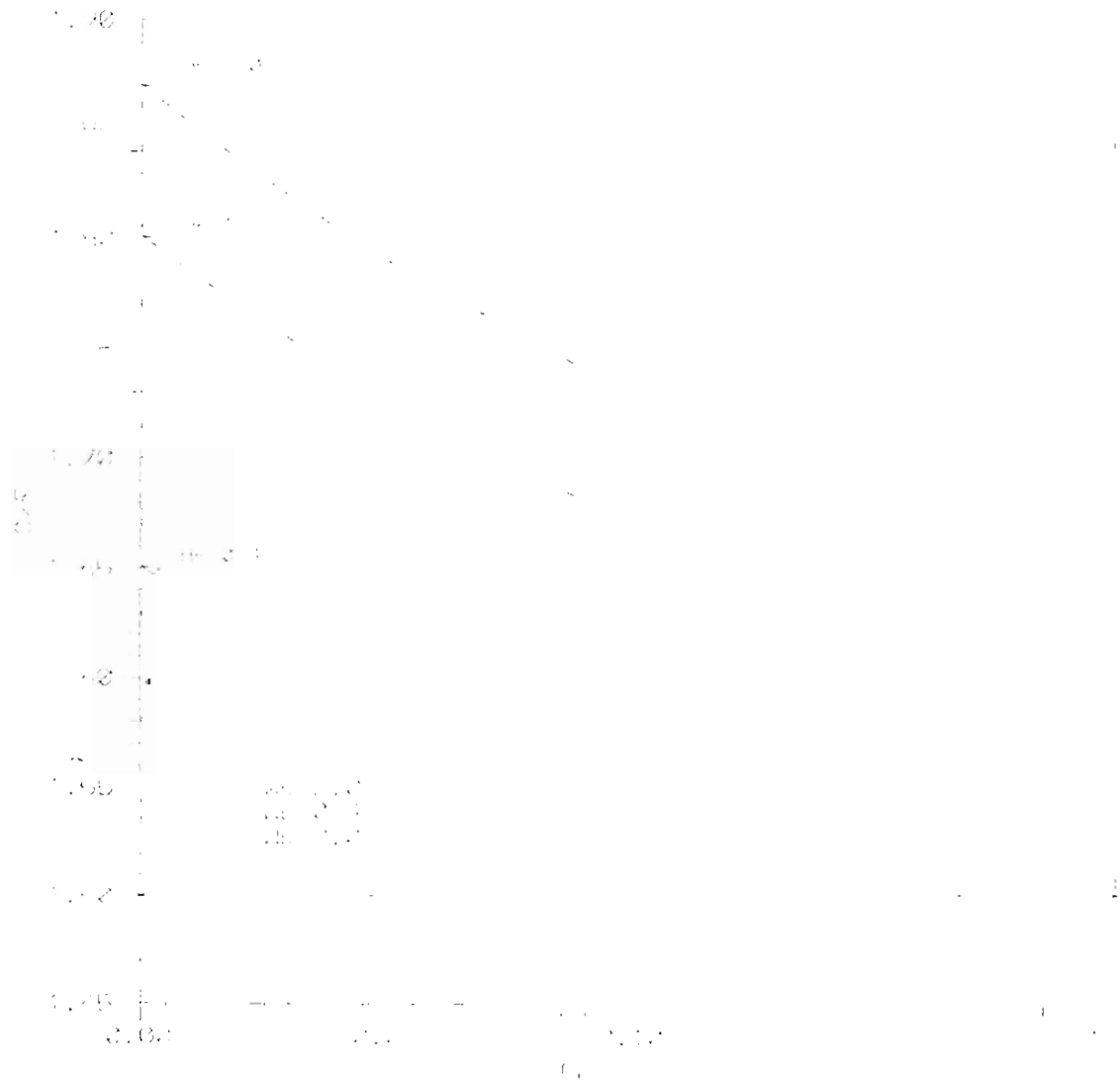


Figura 25. Gráfica de  $S/R$  vs  $Pec$ ,  
para valores de  $Pec = 0.1$ ,  $Bi_c = 0.1$ ,  
 $K = 2.0$ ,  $\Phi = 0.65$  y  $2b/R = 1.5$ .

SISTEMA CON AISLANTE  
INTERFASE EN LA REGION FRIA



Figura 26. Gráfica de  $S/R$  vs  $Wb$ .  
para valores de  $Pe_1 = 0.1$ ,  $Bi_c = -0.4$ ,  
 $K = 2.0$ ,  $\Phi = 0.65$  y  $2b/R = 1.5$

SISTEMA CON AISLANTE  
INTERFASE EN LA REGION FRIA

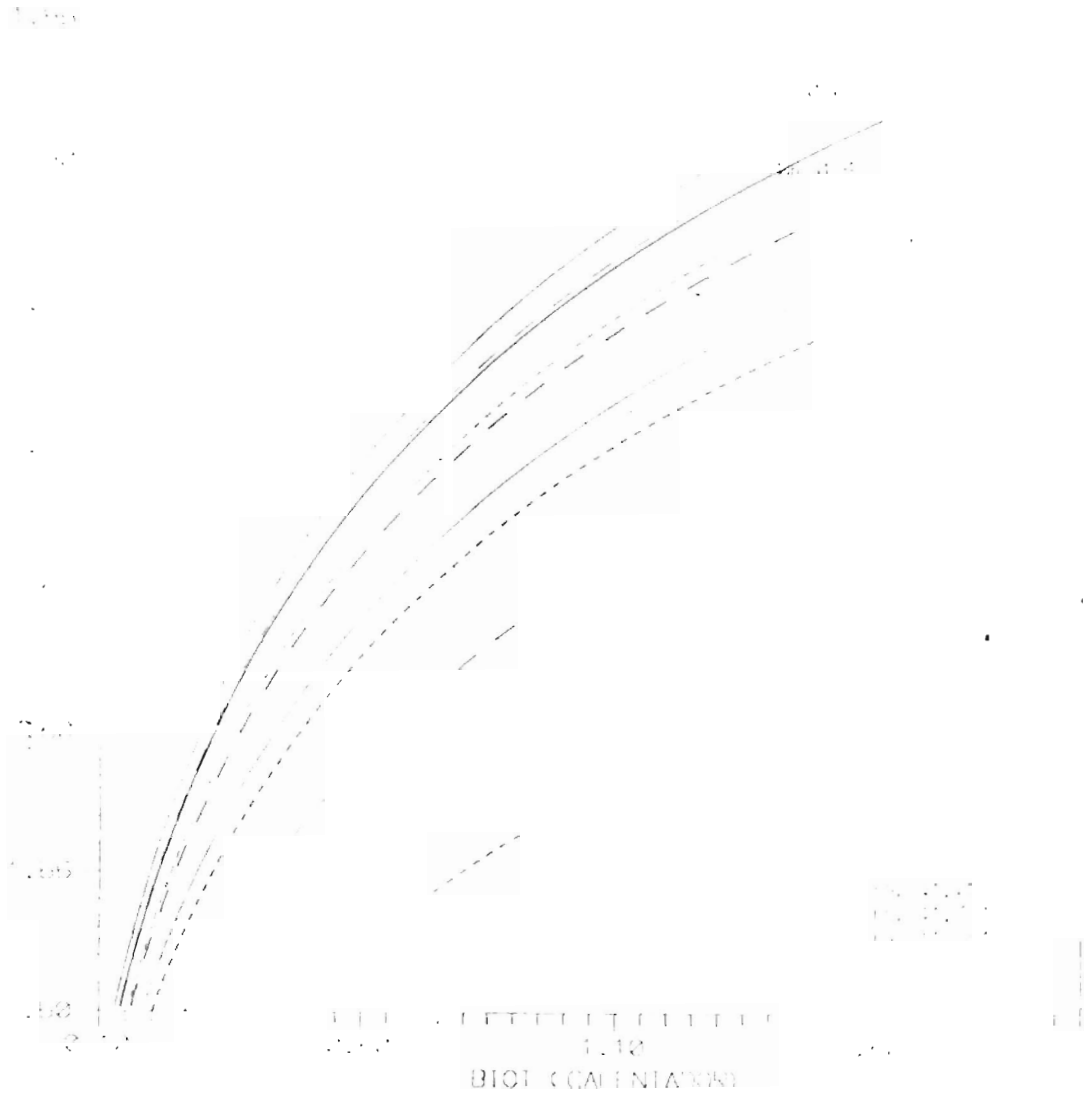


Figura 27. Gráfica de  $S/R$  vs  $Bi_h$ .  
para valores de  $Pe_l = 0.1$ ,  $Bi_c = 0.4$ .  
 $K = 2.0$ ,  $\Phi = 0.65$  y  $2b/R = 1.5$ .

SISTEMA CON AISLANTE  
INTERFASE EN LA REGION FRIA

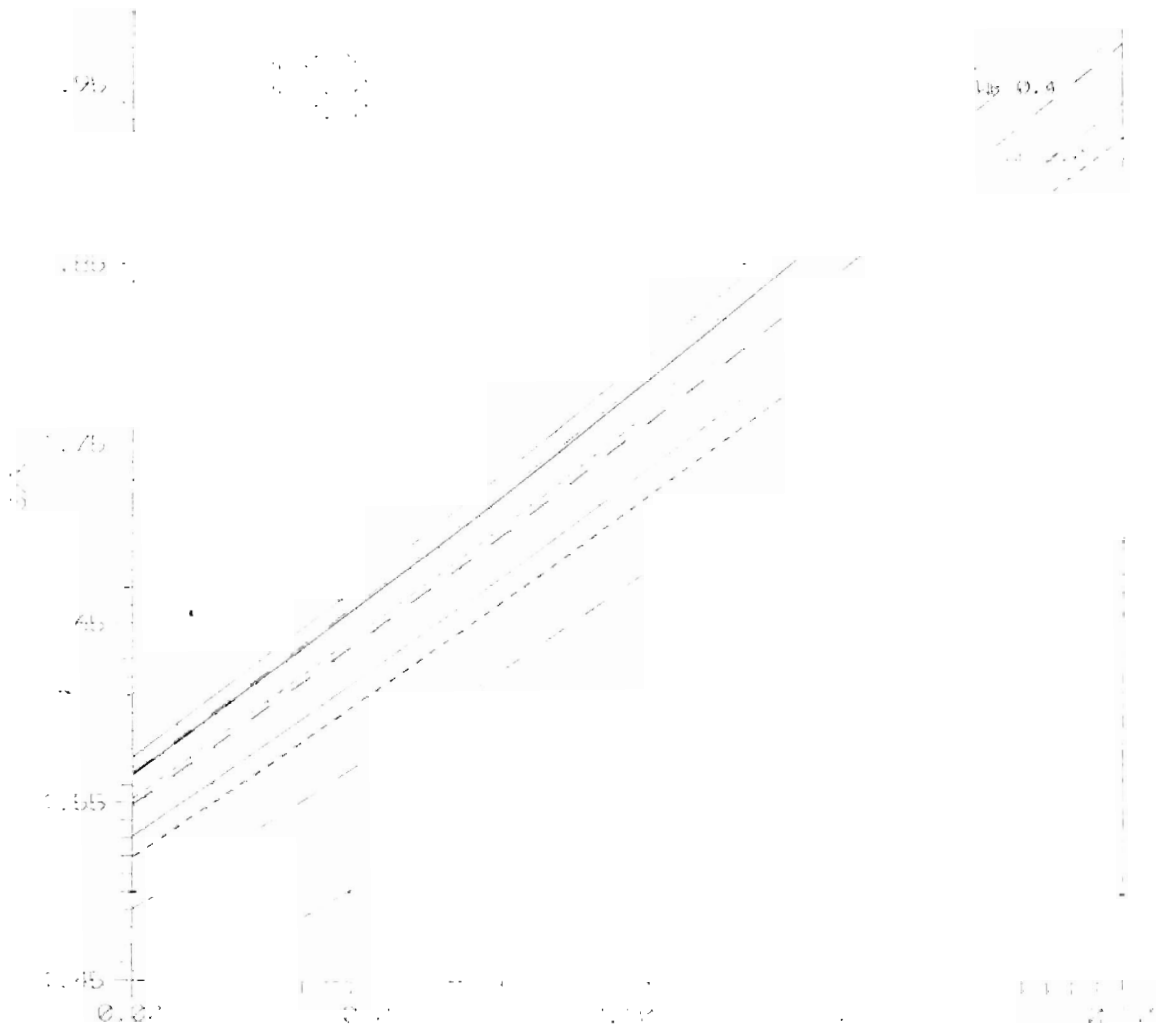


Figura 28. Gráfica de  $S/R$  vs  $Pe$ .  
para valores de  $Bi_h = 1.2$ ,  $Bi_c = 0.4$ .  
 $K = 2.0$ ,  $\phi = 0.65$  y  $2b/R = 1.5$ .

# CAPITULO IV

## CONCLUSIONES

Se ha desarrollado un modelo matemático unidimensional para el crecimiento de cristales por el método de Bridgman Stockbarger. Se hizo un estudio de la influencia de los diferentes parámetros experimentales sobre la posición de la interfase líquido sólido del cristal. Del modelo se obtienen relaciones analíticas muy simples que permiten determinar cómo se deben ajustar los diferentes parámetros para obtener la posición deseada de la interfase. Se hizo el estudio usando la relación de conductividades térmicas,  $K = 2.0$ , correspondiente al CdTe. Este material se intentará crecer en un futuro próximo en el IF UASLP.

El estudio completo de la influencia de cada parámetro sobre la posición de la interfase sería bastante arduo, pues es posible hacer la variación de cada parámetro manteniendo los demás constantes; sin embargo, los resultados mostrados permiten determinar como se deben ajustar estos parámetros para obtener la localización de la interfase deseada.

Los resultados muestran que el mejor sistema de crecimiento es cuando se ha colocado un aislante, alrededor del horno donde se ha de crecer el cristal, entre las zonas de calentamiento y enfriamiento. De acuerdo al modelo, se logra crecer un buen cristal cuando se toman números de Weber y de Peclet pequeños, cuando la interfase se encuentra localizada en la región caliente, para el sistema sin aislante. Cuando la interfase se encuentra en la región fría, deben escogerse valores grandes del número de Weber y de Peclet, así como de  $Bi_h$ .

Para el caso del sistema al que se le ha agregado un aislante, y la posición de la interfase se encuentra en la región caliente, la interfase se encuentra muy alejada de la frontera entre la región caliente y la del aislante, lo que no produciría un buen crecimiento cristalino.

Si la posición de la interfase se encuentra en la región fría, se pueden obtener posiciones de la interfase muy cercanas a la frontera entre la región fría y la del aislante. Para números de Weber grandes, los cambios de posición de la interfase son muy suaves, lo que indica que variaciones pequeñas de los otros parámetros no la afectan sensiblemente.

Cuando la interfase se encuentra en la región del aislante, se obtiene que las variaciones de los parámetros afectan muy drásticamente la posición de la interfase. Esto es consecuencia del modelo, que sólo permite calcular la posición de la interfase dentro de un rango muy pequeño de valores de los parámetros.

Posteriormente se hará el estudio del sistema en el cual se analizarán perfiles de la interfase y gradientes de temperatura.

# REFERENCIAS

- [1] M. Pfeiffer and M. Muhlberg, *J. Crystal Growth*, **118** (1992), 269-276.
- [2] Preparation and Properties of Solid State Materials, Vol. VI. Edited by William R. Wilcox. Ed. Marcel Dekker Inc., N.Y. and Basel. 13-20, (1981).
- [3] C.E. Huang, D. Elwell and R.S. Feigelson, *J. Crystal Growth*, **69**, (1984), 275-280.
- [4] H.M. Modgood, B.W. Swanson and R.M. Thomas, *J. Crystal Growth*, **85** (1987) 510
- [5] R.K. Route, M. Wolf and R.S. Feigelson, *J. Crystal Growth*, **70**, (1984) 379-385
- [6] T. Jasinski and W.M. Rohsenow, *J. Crystal Growth*, **61**, (1983), 339-354.
- [7] P.S. Ravishankar and Ta-Wei Fu, *J. Crystal Growth*, **62** (1983), 425-432.
- [8] A. Rouzaud, D. Camel and J.J. Favier, *J. Crystal Growth*, **73**, (1985), 149-166.
- [9] Chong E. Chang and William R. Wilcox, *J. Crystal Growth*, **21**, (1974), 135-140.
- [10] Preparation and Properties of Solid State Materials. Vol. VI. Edited by William R. Wilcox. Ed. Marcel Dekker Inc., N.Y. and Basel. 135-142, (1981).
- [11] T.W. Clyne, *J. Crystal Growth*, **50**, (1980), 684.

- [12] C.A. Wang, A.F. Witt and J.R. Carruthers *J. Crystal Growth*, **66**, (1984), 299–308.
- [13] S. Sen and W. R. Wilcox, *J. Crystal Growth*, **28**, (1975), 36.
- [14] L. C. Tien, Ph. D. Dissertation, Univ. of Michigan, (Ann Arbor, 1968).
- [15] C. L. Jones, P. Capper and J. J. Gosney, *J. Crystal Growth*, **56**, (1982), 581.
- [16] C. L. Jones, P. Capper, J. J. Gosney and I. Kenworthy *J. Crystal Growth*, **69**, (1984), 281.
- [17] T.-W. Fu and W. R. Wilcox, *J. Crystal Growth*, **48**, (1980), 416.



# APENDICE NOMENCLATURA

$Bi$	Número de Biot. $Bi = \frac{hR}{k}$
$Bi_h$	Número de Biot en la región del calentador.
$Bi_c$	Número de Biot en la región del enfriador.
$Pe$	Número de Péclet. $Pe = \frac{V\rho C_p}{k}$
$Pe_l$	Número de Péclet para la fase líquida.
$Pe_s$	Número de Péclet para la fase sólida.
$Wb$	Número de Weber. $Wb = \frac{\Delta H_f}{C_p(T_h - T_c)}$
$\Delta H_f$	Calor latente de solidificación.
$\Phi$	Temperatura adimensional. $\Phi = \frac{T - T_c}{T_h - T_c}$

$\rho$	Densidad.
K	Conductividad térmica.
$k_l$	Conductividad térmica del líquido.
$k_s$	Conductividad térmica del sólido.
$C_p$	Capacidad calorífica.
r	Posición radial.
2b	Espesor del aislante.
z	Posición axial de la interfase sólido líquido.
V	Velocidad del ámpula.
R	Radio del ámpula.
h	Coefficiente de transferencia del calor.
T	Temperatura.
$T_i$	Temperatura de la interfase.
$T_c$	Temperatura de enfriamiento.
$T_h$	Temperatura de calentamiento.
$T_{am}$	Temperatura ambiente.

---

$T_a$       Temperatura del aislante.

$m_{\pm}$       Raíces características de la ec.(2).

$$m_{1,2} = \frac{1}{2}[P_e \pm (P_e + 8B_i)^{\frac{1}{2}}]$$

EX LIBRIS



SISTEMA DE  
BIBLIOTECAS  
U.A.S.L.P.

No. DE REG.