

# Modelado Numérico de las Propiedades Termoeléctricas del Carburo de Silicio (SiC) Variables con la Temperatura

John Fernando Gómez Cárdenas; Carlos Rodrigo Correa Cely

Escuela de Ingenierías Eléctrica, Electrónica y Telecomunicaciones, Universidad Industrial de Santander, Ciudad Universitaria Calle 9 Cra 27, Teléfono: 57-7-6342085, Bucaramanga-Colombia, jgomezcar@hotmail.com; crcorrea@uis.edu.co

**RESUMEN:** En éste artículo se presenta un modelo numérico de las propiedades del Carburo de Silicio, (SiC), variables con la temperatura. La permitividad eléctrica compleja,  $\epsilon^*$ , y la conductividad térmica,  $k(T)$ , se consideran variables dependientes de la temperatura, en el rango de 298 a 1673 K. El proceso de modelado y simulación se desarrolla con la técnica conocida como el Método de Línea de Transmisión (TLM). El modelo propuesto sirve para simular el proceso de calentamiento del SiC, en una guía de ondas rectangular WR284, operando en el modo TE<sub>10</sub> a 2.45 GHz.

**ABSTRACT:** This paper presents a numerical model of silicon carbide, (SiC), properties variable with temperature. The electric permittivity complex,  $\epsilon^*(T)$ , and thermal conductivity,  $K(T)$ , are considered as variable functions temperature dependent, at 298 to 1673 K range. The modeling and simulation process was developed with technique know as Transmission Line Matrix Method, TLM. The model proposed will be used to simulate heating process of SiC in a WR284 waveguide operating in TE<sub>10</sub> mode to 2.45 GHz.

**Palabras Clave:** Carburo de Silicio, guía de ondas rectangular, modelado numérico, TLM.

**Key words:** Silicon Carbide, rectangular waveguide, numerical modeling, TLM.

## 1. INTRODUCCIÓN

Es importante abordar el análisis y la experimentación a partir de la simulación de los procesos. Es más económico y minimiza los riesgos inherentes a la intervención y manipulación directa de los sistemas que se quieren analizar. Por otra parte, al observar fenómenos físicos que se pueden describir mediante un conjunto de ecuaciones diferenciales en derivadas parciales, se hace necesario un componente matemático avanzado, que puede estar cada vez más lejos de las posibilidades del Ingeniero. Fenómenos como el electromagnético (EM), descritos por la ecuación de onda, o el de transferencia de calor multidimensional no estacionario, descritos por la ecuación de Fourier, son ejemplos comunes de este tipo de procesos. En la literatura se pueden encontrar soluciones analíticas para estos procesos, donde la geometría y disposición de los elementos que conforman el sistema, guardan apariencias geoméricamente reconocibles. Sin embargo, cuando la geometría es compleja, o concurren varios de estos fenómenos en un mismo sistema, su complejidad se incrementa y las posibilidades de desarrollar soluciones analíticas se minimizan drásticamente. Por ello, es muy frecuente encontrar reportes en la literatura de soluciones numéricas para este tipo de problemas.

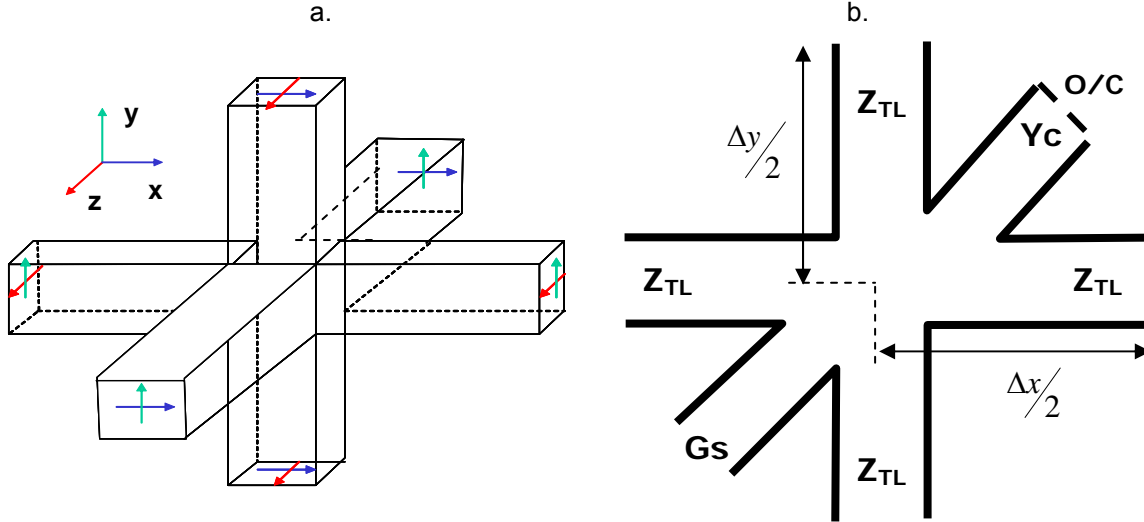
La técnica de modelado presentada en éste artículo, es más que un método numérico, y se conoce como el Método de Línea de Transmisión (TLM) [1]. La técnica emplea las analogías existentes entre las ecuaciones que describen un circuito RLC y las ecuaciones de Onda y de Fourier. Esta es la característica que la hace atractiva, desde el punto de vista del ingeniero electricista o electrónico, quien ya conoce y domina el mundo del circuito RLC. Los modelos y la técnica presentados aquí hacen parte del estudio de un proceso de calentamiento de un bloque de SiC, con algunas propiedades, EM y térmicas, variables con la temperatura. El material se encuentra ubicado al interior de una guía de ondas WR284, operando en el modo TE<sub>10</sub> a una frecuencia de 2.45 GHz. Este campo EM constituye la fuente de calor a partir del cual se eleva la temperatura del material al punto deseado.

## 2. MODELO ELECTROMAGNÉTICO

### 2.1 Nodo Simétrico Condensado (SCN)

Para modelar las propiedades EM del material se ha empleado el Nodo Simétrico Condensado (SCN)<sup>1</sup> [1], figura 1.a. Los excesos de la permitividad real del SiC frente a la del espacio libre se modelan mediante colas capacitivas de admitancia  $Y_c$ , mientras que las pérdidas dieléctricas se modelan con colas resistivas de admitancia  $G_s$ , como se observa en la figura 1.b. El comportamiento de cada segmento de línea de transmisión se describe mediante la ecuación del telégrafo (1):

**Figura 1.** Nodo Simétrico Condensado. a. Convencional. b. Cargado con colas capacitivas y resistivas.



$$\frac{\partial^2 i}{\partial x^2} = LC \frac{\partial^2 i}{\partial t^2} + LG \frac{\partial i}{\partial t} \quad (1)$$

donde:

- i: Corriente por la línea. A.
- L: Autoinductancia de la línea. H/m.
- C: Capacitancia de la línea. F/m.
- G: Coeficiente de disipación de la línea. S/m.
- X: Variable espacial. m.
- t: Variable temporal. s.

Además, a partir de la ley de Ampere y Faraday, en las ecuaciones de Maxwell, se puede derivar la expresión para la densidad de corriente (una ecuación de onda unidimensional), como se presenta en la ecuación (2):

$$\frac{\partial^2 J}{\partial x^2} = \mu\epsilon \frac{\partial^2 J}{\partial t^2} + \mu\sigma \frac{\partial J}{\partial t} \quad (2)$$

donde:

- J: Densidad de corriente. A/m<sup>2</sup>.
- $\mu$ : Permeabilidad del medio. H/m.
- $\epsilon$ : Permitividad del medio. F/m.
- $\sigma$ : Conductividad del medio. S/m.

El isomorfismo entre las ecuaciones (1) y (2) es la característica aprovechada por TLM para manejar un problema EM a través del uso del circuito eléctrico. Para el SCN, las equivalencias entre los elementos del circuito RLC que conforman las líneas de transmisión, las colas del nodo y las propiedades del material pueden ser extraídas a partir de la analogía existente entre las ecuaciones (1) y (2), teniendo en cuenta el espacio

<sup>1</sup> El SCN cuenta con 12 tramos de líneas de transmisión cuyos extremos se conocen como puertos del nodo. Cada dimensión espacial está conformada por cuatro líneas de transmisión y sus respectivos puertos.

tridimensional que modela el SCN, en el cual, cada dimensión está conformada por 4 segmentos de línea de transmisión [1]:

$$C_{xs} = \varepsilon'(T) \frac{\Delta y \Delta z}{\Delta x} - 4C; \quad C_{ys} = \varepsilon'(T) \frac{\Delta x \Delta z}{\Delta y} - 4C; \quad C_{zs} = \varepsilon'(T) \frac{\Delta x \Delta y}{\Delta z} - 4C; \quad (3)$$

$$C = \frac{\Delta t}{2\eta_0} = \frac{\Delta t}{2 * 120\pi} \text{ F} \quad (4)$$

La impedancia de cada tramo de línea de transmisión,  $Z_{TL}$ , es igual a  $377 \Omega$ , la misma impedancia del espacio libre ( $\eta_0$ ). La admitancia de la cola capacitiva,  $Y_{cs}$ , es de la forma [1]:

$$Y_{xs} = 2\varepsilon'(T) \frac{\Delta y \Delta z}{\Delta x \Delta t} - \frac{4}{\eta_0}; \quad Y_{ys} = 2\varepsilon'(T) \frac{\Delta x \Delta z}{\Delta y \Delta t} - \frac{4}{\eta_0}; \quad Y_{zs} = \varepsilon'(T) \frac{\Delta x \Delta y}{\Delta z \Delta t} - \frac{4}{\eta_0}; \quad (5)$$

Los elementos conductivos,  $G_s$ , son de la siguiente forma:

$$G_{xs} = \varepsilon''(T)\omega \frac{\Delta y \Delta z}{\Delta x}; \quad G_{ys} = \varepsilon''(T)\omega \frac{\Delta x \Delta z}{\Delta y}; \quad G_{zs} = \varepsilon''(T)\omega \frac{\Delta x \Delta y}{\Delta z}; \quad (6)$$

donde  $\varepsilon'$  y  $\varepsilon''$  son la parte real e imaginaria de la permitividad del material, respectivamente.  $\Delta x$ ,  $\Delta y$ ,  $\Delta z$ , son las dimensiones del nodo en las direcciones x, y, z, es decir, la discretización espacial.  $\Delta t$  es el intervalo de tiempo correspondiente a un ciclo de cálculo TLM, es decir, la discretización temporal.  $\omega$  es la frecuencia de operación, en  $\text{rad*s}^{-1}$ .

## 2.2 Propiedades EM del SiC

Normalmente las propiedades EM de los materiales varían con la temperatura. Dependiendo del rango de temperatura de operación o del nivel de variación, es posible considerar algunas de ellas como propiedades constantes, frente a las variaciones de la temperatura. Para este trabajo se ha considerado la permitividad compleja del SiC, variable con la temperatura, en el rango de 298 a 1673 K, en la forma de ley de Arrhenius:

$$\varepsilon'(T) = \left( -1.0366 + 1.0454e^{-1/T} \right) * 10^{-8} \text{ F/m} \quad (7)$$

$$\varepsilon''(T) = \left( -5.4179 + 5.4362e^{-1/T} \right) * 10^{-9} \text{ F/m} \quad (8)$$

Las demás propiedades EM del SiC se han considerado constantes. La permeabilidad relativa,  $\mu_r$  es igual 1 y la conductividad es igual a  $10^{-5} \text{ Sm}^{-1}$  [2].

## 3. MODELO TERMICO

La ecuación de Fourier describe el comportamiento térmico del SiC a través del tiempo:

$$\frac{\partial T}{\partial t} = (\nabla^2 T)\alpha(T) + \frac{Q_{gen} - (Q_{conv} + Q_{rad})}{S}; \quad S = \rho c_p; \quad \alpha(T) = \frac{k(T)}{S} \quad (9)$$

donde:

- $k(T)$ : Conductividad térmica del SiC,  $\text{Wm}^{-1}\text{K}^{-1}$ .
- $\rho$ : Densidad del SiC,  $\text{kgm}^{-3}$ .
- $c_p$ : Calor específico del SiC,  $\text{Jkg}^{-1}\text{K}^{-1}$ .
- $\alpha(T)$ : Difusividad termica,  $\text{m}^2\text{s}^{-1}$ .
- $Q_{gen}$ : Calor generado al interior del material,  $\text{Wm}^{-3}$ .
- $Q_{conv}$ : Pérdidas de calor por convección,  $\text{Wm}^{-3}$ .
- $Q_{rad}$ : Pérdidas de calor por radiación,  $\text{Wm}^{-3}$ .

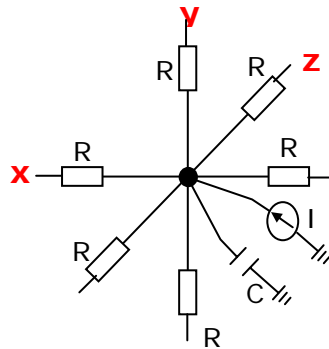
La fuente de calor,  $Q_{gen}$ , es el aporte energético proveniente de la potencia EM absorbida por el material. Las pérdidas de calor pueden ser del tipo convectivas,  $Q_{conv}$ , o radiativas  $Q_{rad}$ .  $\alpha(T)$  representa la difusividad térmica del material. La ecuación (9) es análoga con la ecuación que describe el comportamiento del circuito RLC de la figura 2:

$$\nabla^2 v = 3L_d C_d \frac{\partial^2 v}{\partial t^2} + 6R_d C_d \frac{\partial v}{\partial t} - 2R_d \frac{I}{\Delta l}; \quad C = 3C_d \Delta l \text{ F}; \quad R = R_d \Delta l \text{ } \Omega \quad (10)$$

si se cumple que  $6R_d C_d \gg 3L_d C_d$ , de manera que se pueda despreciar el término de la segunda derivada temporal.  $L_d$ ,  $C_d$  y  $R_d$  son la inductancia, la capacitancia y la resistencia distribuidas en el circuito.  $v$  es la tensión del nodo e  $I$  es la fuente de corriente conectada al nodo.  $\Delta l$  es la longitud de discretización espacial. La analogía

de las ecuaciones (9) y (10) es la característica aprovechada por TLM para modelar numéricamente el comportamiento térmico de los materiales. Lo anterior se aclara al observar que las ecuaciones (9) y (10) son de tipo parabólico,  $v$  corresponde a  $T$ ,  $R_d$  corresponde al inverso de  $k(T)$ ,  $C_d$  corresponde a la capacidad calorífica,  $S$ , e  $I$  corresponde al calor generado en el interior del material,  $Q_{gen}$ . Las pérdidas de calor por convección o radiación en las fronteras, pueden ser modeladas mediante resistores de valor equivalente a los coeficientes de transferencia de calor por convección o radiación [3].

**Figura 2.** Modelo de parámetros concentrados del nodo tridimensional, 3D, TLM para problemas térmicos.



### 3.1 Nodo TLM de línea de enlace

Existen dos posibilidades de representar el nodo TLM 3D para problemas térmicos, dependiendo de la ubicación de C en la figura 2. Si C se halla adelante de R se tendrá un nodo de línea de enlace. Si C se encuentra en el centro (atrás de R) se tendrá un nodo de resistor de enlace. De Cogan [3] expone las ventajas y desventajas de usar una u otra configuración.

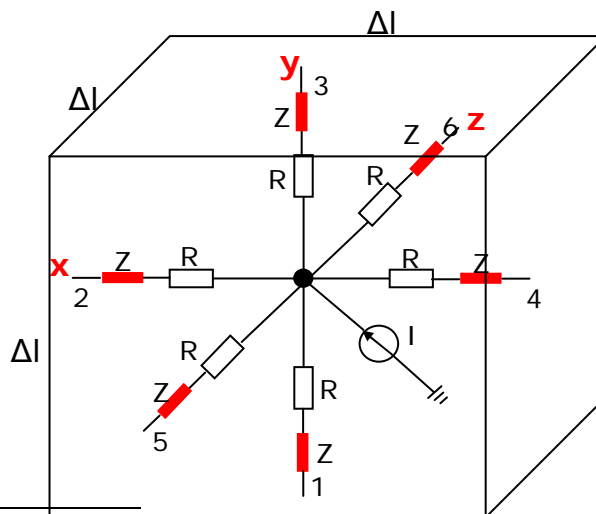
En este trabajo se emplea el nodo de línea de enlace<sup>2</sup>, como se observa en la figura 3. Las equivalencias entre los parámetros físicos de la ecuación (9), los eléctricos de la ecuación (10) y las figuras 2 y 3, son de la forma:

$$v = TU_{vT}; \quad I = Q_{gen}(\Delta l)^3 U_{IQ}; \quad R_d \Delta l = \frac{U_{Rk}}{2k\Delta l}; \quad 3C_d \Delta l = S(\Delta l)^3 U_{sc} \quad (11)$$

donde  $U_{vT}$ ,  $U_{IQ}$ ,  $U_{sc}$ , son constantes unitarias dimensionales. La impedancia de cada segmento de línea de transmisión, en la figura 3, tiene la forma:

$$Z = \frac{3\Delta t}{C} \quad (\Omega) \quad (12)$$

**Figura 3.** Nodo 3D TLM de línea de enlace para problemas térmicos.



<sup>2</sup> Cada dimensión está compuesta por 2 tramos de línea de transmisión con sus respectivos puertos en los extremos. La fuente de corriente en el centro nodal representa la potencia EM disipada por el material.

### 3.2 Propiedades térmicas del SiC

El SiC se encuentra en más de 200 estructuras cristalinas distintas. Cada una tiene propiedades térmicas diferentes. En este trabajo se han adoptado estas propiedades de acuerdo con intereses didácticos, más que relacionadas con alguna estructura particular [2]. Las propiedades asumidas como constantes dentro del rango de 298 a 1673 K se presentan en la tabla 1.

**Tabla 1.** Propiedades térmicas constantes del SiC.

Propiedad	Valor	Unidades
Densidad	3203,6	Kgm <sup>-3</sup>
Punto de fusión	2673	K
Calor específico	1130,463	Jkg <sup>-1</sup> K <sup>-1</sup>
Emisividad	0.89	-----

La conductividad térmica se ha considerado variable con la temperatura, en el rango de 298 a 1673 K, y se expresa mediante un polinomio de grado 2, de acuerdo con datos tomados de [2]:

$$k(T) = 1,0235 * 10^{-8} T^2 - 3,2312 * 10^{-5} T + 0,0271 \text{ Wm}^{-1}\text{K}^{-1} \quad (13)$$

### 4. ACOPLAMIENTO DE MODELOS

Para el proceso de calentamiento en el que se utilizan los dos modelos presentados anteriormente, el fenómeno electromagnético se encuentra acoplado con el fenómeno térmico por dos razones:

La fuente de calor,  $Q_{gen}$ , en la ecuación (9) proviene de la potencia EM disipada por el material al interior de la guía de ondas. Para conocer la potencia local disipada por el material es necesario conocer la distribución de campo eléctrico en cada nodo en que se ha discretizado el bloque de SiC. Luego, la potencia se puede calcular de la siguiente manera:

$$Q_{gen} = \omega \epsilon'' |E|_{rms}^2 \text{ Wm}^{-3} \quad (14)$$

Una vez calculada la potencia disipada se puede iniciar el cálculo de la evolución térmica hasta que la temperatura haya incrementado un valor considerable.

Cuando la temperatura ha variado lo suficiente, la conductividad térmica y la permitividad eléctrica compleja,  $\epsilon^*$ , del SiC deben ser recalculadas. Por esto, un nuevo ciclo de cálculo EM debe ser iniciado para establecer los nuevos valores de campo eléctrico y potencia disipada por el material. Finalmente, se debe iniciar un nuevo ciclo de cálculo térmico hasta un nuevo valor de temperatura y el esquema se vuelve a repetir.

### 5. RESULTADOS

Se han realizado pruebas de simulación implementando una herramienta de software basada en nodos TLM-3D. Los modelos, EM y térmico, se han simulado separadamente. Para validar los resultados del modelo EM se han utilizado algunos criterios analíticos como la profundidad de penetración [4], donde  $\alpha_a$  es la constante de atenuación:

$$\frac{1}{\alpha_a} = \frac{\lambda_0}{2\pi} \left[ \frac{2}{k'(\sqrt{1 + \tan^2 \delta} - 1)} \right]^{\frac{1}{2}} \text{ (m)}; \quad k' = \frac{\epsilon'}{\epsilon_0}; \quad \tan \delta = \frac{\epsilon''}{\epsilon'} \quad (15)$$

y la relación de frecuencias [4]:

$$\frac{\lambda_0}{\lambda_m} \equiv \sqrt{\epsilon'_r} \quad (16)$$

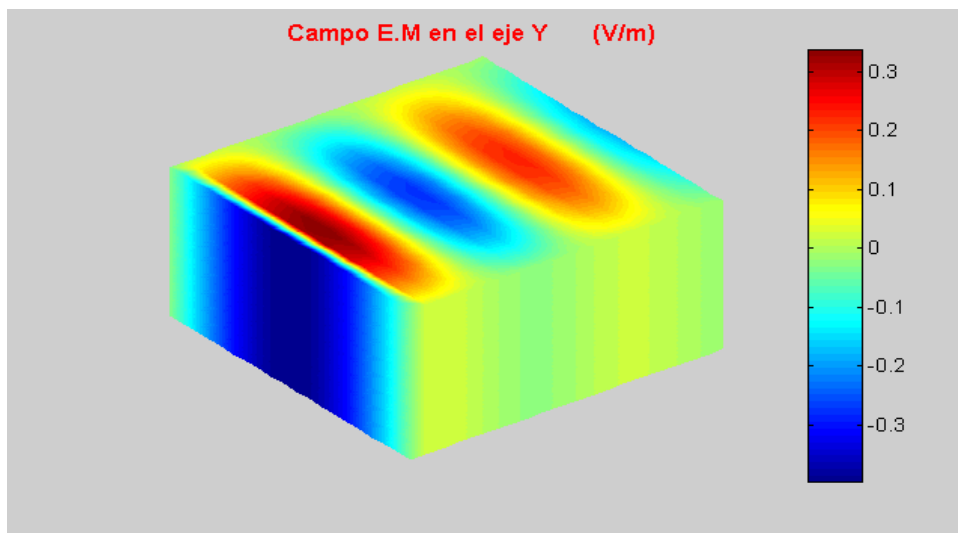
donde  $\lambda_0$  es la longitud de onda del campo EM en el espacio libre y  $\lambda_m$  es la longitud de onda del campo EM en el interior del material. Además, se han corrido algunas simulaciones del sistema guía de ondas-material en un programa basado en el Método de Elementos Finitos (FEM), para efectos de comparación. Se ha visto que la configuración del campo al interior del material, simulada con TLM, se aproxima bastante a los resultados obtenidos con FEM. En la tabla 2 se presentan los parámetros con los que se realizaron las simulaciones cuyos resultados se pueden ver en las gráficas 4 a 7. En la figura 4 se presenta la configuración final para el campo eléctrico en el eje Y, después de 810 ciclos de cálculo EM. Se puede observar, aproximadamente, 1 ½ longitudes de onda al interior del material y valores máximos del campo

alrededor de  $0.3 \text{ Vm}^{-1}$ . La figura 5 muestra la evolución transitoria del campo en tres puntos diferentes del bloque, sobre un plano que se encuentra en el centro de los ejes Y, Z, y el retardo de tiempo existente entre los tres puntos. Se puede analizar, además, que después de 200 ciclos, aproximadamente, el sistema alcanza el estado senoidalmente estable. En la figura 6 se visualiza el cálculo de la distribución de potencia nodal disipada por el material, cuando se excita con una magnitud de campo eléctrico igual a  $1 \text{ Vm}^{-1}$ . En la figura 7 se presenta la temperatura alcanzada por el bloque de SiC, al final de los 6000 ciclos de cálculo (3.43 horas). El plano en azul corresponde a una condición de frontera de sumidero de calor. Las demás fronteras se consideraron como superficies adiabáticas.

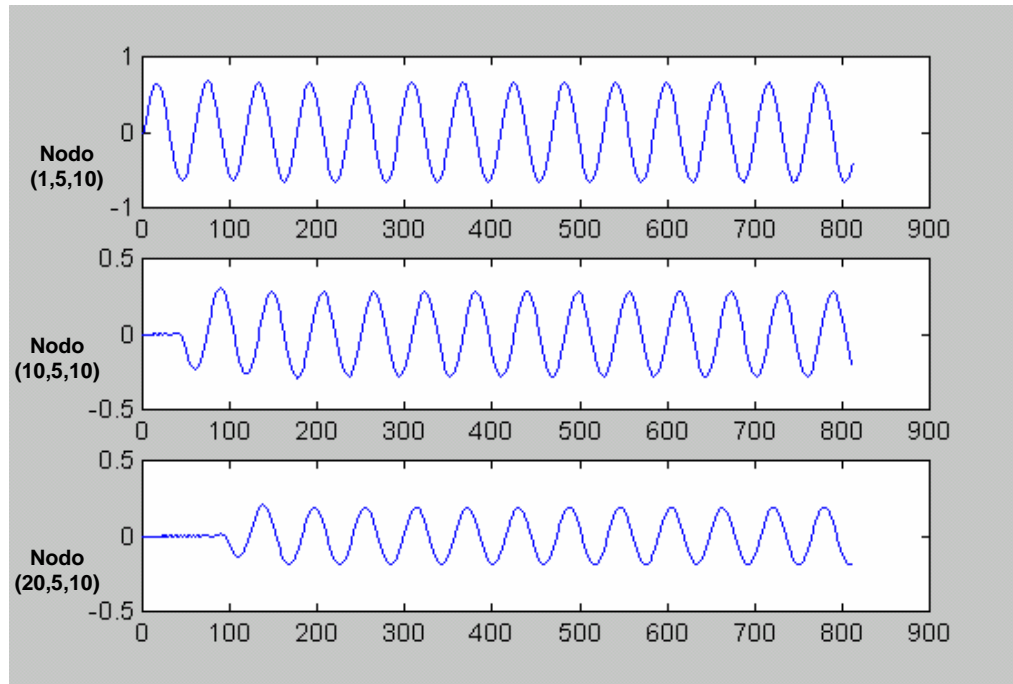
**Tabla 2.** Parámetros de simulaciones.

Parámetro	Valor	Unidades
Simulación EM		
Permitividad Real $\epsilon'$	$6.7 \cdot 10^{-11}$	$\text{F m}^{-1}$
Permitividad Imaginaria $\epsilon''$	$7.4 \cdot 10^{-12}$	$\text{F m}^{-1}$
Conductividad eléctrica $\sigma$	$10^{-5}$	$\text{Siemens m}^{-1}$
Permeabilidad relativa	1	
$\Delta x = \Delta y = \Delta z$	0.0036	m
Nodos en x	20	
Nodos en y	10	
Nodos en z	20	
$\Delta t$	7	ps
Ciclos	810	
constante de atenuación $\alpha_a$	0.6284	Np/m
Longitud de onda en el espacio libre $\lambda_0$	0.1225	m
Longitud de onda en el material $\lambda_m$	0.0486	m
Simulación Térmica		
Temperatura Inicial $T_i$	298	K
Densidad	3203.6	$\text{Kgm}^{-3}$
Calor específico	1130.5	$\text{Jkg}^{-1}\text{K}^{-1}$
Conductividad térmica inicial	0,0184	$\text{Wm}^{-1}\text{K}^{-1}$
Emisividad	0.89	
$\Delta x = \Delta y = \Delta z$	0.0036	m
Nodos en x	20	
Nodos en y	10	
Nodos en z	20	
$\Delta t$	2.06	s
Ciclos	6000	

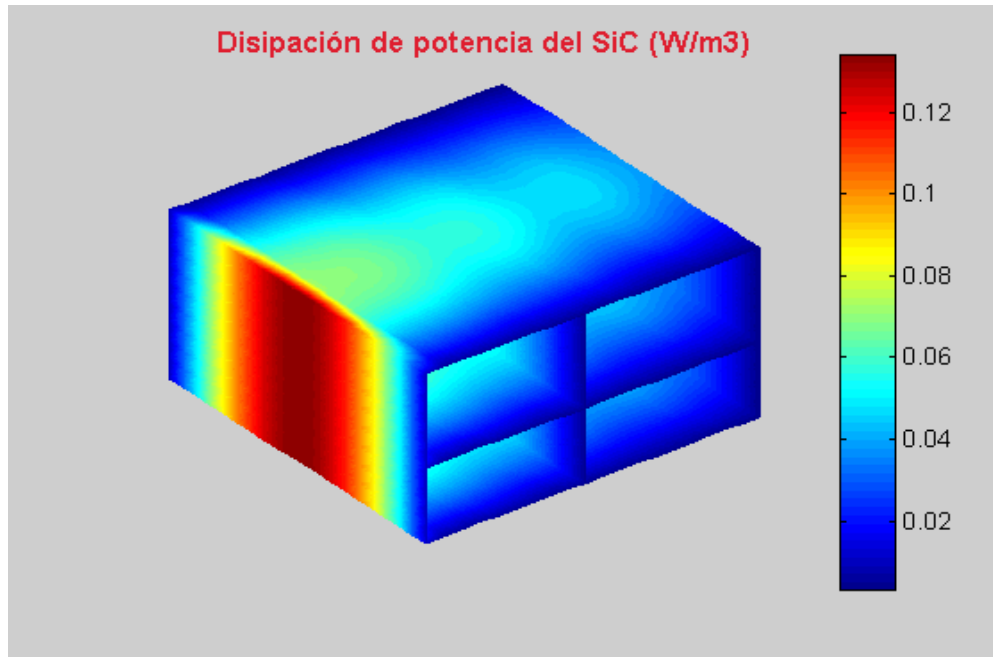
**Figura 4.** Componente de campo eléctrico en el eje Y.



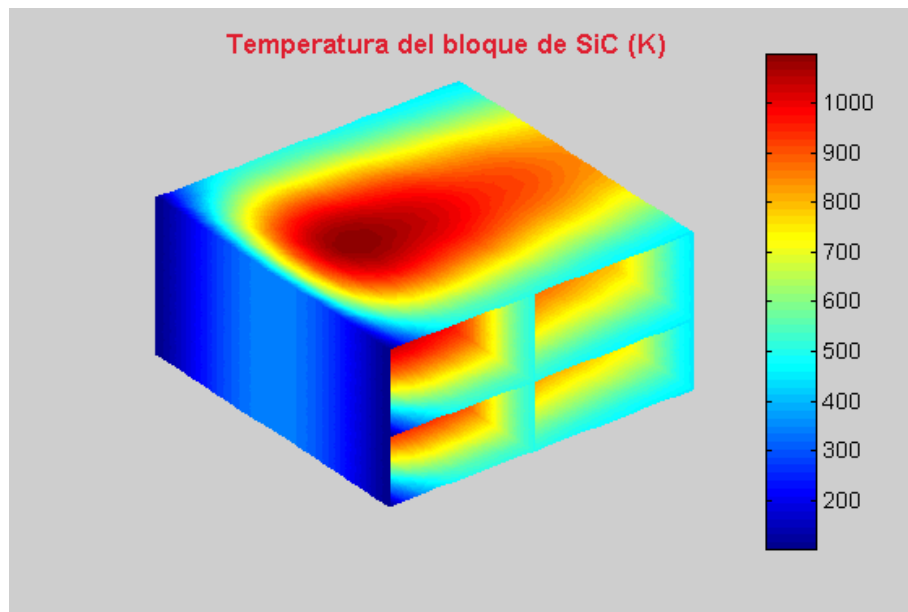
**Figura 5.** Campo eléctrico en el eje Y. Evolución en el tiempo ( $810 \cdot \text{deltat}$ ).



**Figura 6.** Potencia disipada por el bloque de SiC para una excitación con  $|E_y| = 1 \text{Vm}^{-1}$



**Figura 7.** Temperatura del bloque de SiC.  $|E_y| = 2 \text{ kVm}^{-1}$



## 6. CONCLUSIONES

Con los modelos propuestos se han logrado simular algunas condiciones de operación del sistema físico, mediante el cual una guía de ondas contiene un bloque de SiC para ser calentado por efecto de las pérdidas dieléctricas del material. El método TLM ha probado ser una herramienta de modelado numérico útil para propósitos de ingeniería.

Se ha mostrado como se pueden modelar propiedades eléctricas y térmicas variables con la temperatura, para correr simulaciones de procesos termo-electromagnéticos acoplados empleando nodos TLM 3D.

Aunque en la guía de ondas WR284 se está excitando con el modo TE<sub>10</sub>, que implica un problema EM en sólo dos dimensiones, éste se ha resuelto utilizando un nodo tridimensional dado el interés académico por manejar problemas en tres dimensiones espaciales.

Es importante resaltar que esta propuesta introduce un elemento nuevo en razón de que emplea nodos TLM 3D para resolver procesos acoplados. En la literatura se han encontrado reportes de trabajos en los que se resuelven problemas acoplados en dos dimensiones [5] con nodos TLM 2D y propuestas híbridas, utilizando nodos TLM 2D para el problema EM y FDTD para resolver el problema térmico [6].

## 7. REFERENCIAS

1. Christopoulos, Christos. The Transmission-Line Modeling Method TLM. IEEE Press. U.K 2001.
2. Thermophysical properties of high temperature solid material. Purdue University. Y.S Touloukian. New York. 1967.
3. De Cogan, Donard. Transmission Line Matrix (TLM) Techniques for Diffusion Applications. Gordon and Breach Science Publisher. U.K. 1998.
4. Hippel, Arthur R. Von. Dielectrics and waves. John Wiley & Sons. Second edition. E.U, 1959.
5. Desai, R. Lowery, A. Christopoulos, C. Naylor, P. Blanshard, J. Gregson, K. Computer modelling of microwave cooking using the transmission-line model. **IEEE Proceedings-A**, 139, 1, 1992.
6. Liu, W. So, P. Hoefer, W. Coupled TLM-thermal analysis in the time domain. IEEE MTT-s Digest. 2001.