

ESTUDO TEORICO COMPUTACIONAL DA INFLUENCIA DA FASE GASOSA E SUPERICIAL NO CRESCIMENTO DE FILMES FINOS DE DIAMANTE MICRO E NANOCRISTALINO

Julio Fábio Gurgel do Amaral Neto¹ (FATEC/Taubaté, Bolsista PIBIC/CNPq)

Divani Carvalho Barbosa² (CTE/LAS/INPE)

Patricia Regina Pereira Barreto³ (CTE/LAP/INPE)

Evaldo Jose Corat⁴ (CTE/LAS/INPE, Orientador)

RESUMO

O estudo do crescimento de filmes de diamante nano-estruturados é atualmente de grande interesse científico. O interesse pela obtenção destes filmes com menores tamanho de grão, chamados de nanodiamante (NCD) e ultrananodiamante (UNCD), provêm da constatação de várias propriedades superlativas, em comparação com o diamante microcristalino (MCD), como por exemplo: estes filmes possuem menor valor de coeficiente de atrito, o que é altamente desejável para aplicações tribológicas; possuem maior área superficial o que é desejável em aplicações eletroquímicas, pois, melhora a atividade catalítica; possuem maior adesão ao substrato, ideal para aplicações na indústria de ferramentas e possui transparência no espectro do visível, podendo ser usado como janela óptica. Este potencial de aplicações revela o quão decisiva vem sendo atualmente a investigação minuciosa das etapas de formação destes filmes. No processo de crescimento é de vital importância que se conheça, ou pelo menos que se tente esclarecer, o mecanismo através do qual ocorre a deposição do diamante. A proposta desse trabalho é o desenvolvimento de mecanismos cinéticos que simulem as reações químicas envolvidas no processo de crescimento de filmes finos micro e nanocristalino de diamante desenvolvidos no laboratório DIMARE do CTE/LAS. O desenvolvimento de uma plataforma computacional desses mecanismos para ser usada como referência para os demais membros do grupo DIMARE. Deposição de filmes finos de diamante micro e nanocristalino no laboratório DIMARE, cujos parâmetros de deposição serão usados como referência para simulação computacional a ser desenvolvida. E finalmente, estabelecer as correlações entre a simulação computacional desenvolvida com as propriedades dos filmes obtidos.

¹ Aluno do Curso de Análise e Desenvolvimento de Sistema – E-mail: jfgurgel@yahoo.com.br

² Pos-Doutorado do Laboratório Associado de Sensores e Materiais - E-mail: divani.barbosa@inpe.br

³ Pesquisador do Laboratório Associado de Plasma - E-mail: patricia@lap.inpe.br

⁴ Pesquisador do Laboratório Associado de Sensores e Materiais- E-mail: corat@las.inpe.br