

Estudos dos Fenômenos Físico-Químicos na produção de íons em um reator tipo HFCVD

**Viviane Ribeiro de Siqueira¹; Divani Carvalho Barbosa ¹;
Maurício Ribeiro Baldan¹; Jerônimo dos Santos Travelho²**

¹Laboratório Associado de Sensores e Materiais, INPE
²Laboratório Associado de Computação e Matemática Aplicada, INPE
Av. dos Astronautas, 1.758 - Jd. Granja
CEP 12227-010, São José dos Campos – SP
e-mail: viviane@las.inpe.br; divani@las.inpe.br
baldan@las.inpe.br; jeff@lac.inpe.br

A complexidade do entendimento do processo de deposição de diamantes CVD é causada pela interdependência de quatro estágios principais que são: formação de radicais perto do filamento, seu transporte, reações químicas na fase gasosa e reações químicas perto da superfície do substrato. Dentre esses fenômenos o menos estudado é a produção de radicais perto do filamento.

Para entender os fenômenos que ocorrem durante o processo de deposição na geometria complexa como a do reator tipo HFCVD e para otimizar o crescimento do filme de diamante, com espessura uniforme e de boa qualidade, optou-se pelo estudo dos fenômenos físico-químicos que ocorrem perto do filamento. Na superfície do filamento ocorrem reações heterogêneas. Devido à alta temperatura comparada com o ambiente do reator e as pequenas dimensões do filamento, existem grandes gradientes de temperatura e de concentração das espécies perto do mesmo. Devido a isto, se faz necessário investigar os diversos tipos de transporte tais como difusão de espécies devido a gradiente de temperatura e difusão de espécies devido a gradiente de concentração das mesmas. Do ponto de vista computacional, estes fenômenos serão estudados através de um modelo unidimensional, para uma malha não uniforme, sendo a mesma mais refinada nas regiões próximas ao filamento onde os fenômenos físico-químicos acontecem. O código computacional desenvolvido para este fim é baseado numa discretização onde o valor da grandeza é calculado no centro da célula.

Como resultado espera-se obter o perfil de temperatura e a taxa de crescimento do diamante. Com esses resultados poderemos comparar com dados experimentais. Esperamos também obter a distância ótima entre o filamento e o substrato e a distância ótima entre filamentos paralelos, para produzir diamantes de boa qualidade e com taxas de crescimento satisfatórias.

Referências

- [1] T. R. Anthony; “Cylindrically Symmetric Diamond Parts by Hot-filament CVD”, *Diamond and Related Materials* 6, 1707 (1997)
- [2] F. Behrendt.; O. Deutschmann; B. Ruf; J. Warnatz; “Numerical Study of Apparent Activation Energies of Diamond Growth Rates in Hot Filament Chemical Vapor Deposition Systems”, *JVST A – Vacuum, Surfaces and Films*, (Accepted 12-Feb-1996)
- [3] D. G. Goodwin; G. G. Gavillet; “Numerical Modeling of the filament-assisted diamond growth environment”, *J. Appl. Phys.* Vol:68(12) 6393 (1990)
- [4] K. Tankala; T. DebRoy; “Modeling of the role of atomic hydrogen in heat transfer during hot filament assisted deposition of diamond”, *J. Appl. Phys.* 72(2), 712 (1992)