

SIMULAÇÃO NUMÉRICA APLICADA A REATORES DE DEPOSIÇÃO QUÍMICA A PARTIR DA FASE VAPOR VISANDO O CRESCIMENTO DE DIAMANTE

Fabiano Aizawa¹ (INPE, Bolsista PIBIC/CNPQ)
Prof. Dr. Maurício Ribeiro Baldan² (LAS/INPE, Orientador)

RESUMO

Este trabalho, iniciado em agosto de 2008, tem como objetivo o estudo do crescimento do diamante através de um código computacional que simula a deposição química a partir da fase vapor. O código desenvolvido enfatiza as chamadas soluções baseadas nos métodos de Monte Carlo e é conhecido como DSMC (Direct Simulation Monte Carlo). O entendimento do programa, seu funcionamento na teoria bem como o processo de produção de filmes através da técnica CVD (Deposição Química a Partir da Fase Vapor), foram estudados. Para um melhor entendimento dos parâmetros utilizados no programa bem como do modelo cinético utilizado no crescimento de filmes foi necessário o acompanhamento de um crescimento do filme de diamante bem como suas etapas de caracterização. No estudo do programa DSMC é necessário o conhecimento da linguagem de programação FORTRAN. Um bom tempo foi dedicado ao estudo desta linguagem. No estudo do código foi dado início as deduções das fórmulas para um melhor entendimento dos futuros resultados obtidos. Com essas deduções é possível alterar os dados de entrada do programa, como no caso dos gases introduzidos no reator, que geralmente são compostos normalmente de hidrogênio molecular “H₂” e metano “CH₄”, este último em pequenas concentrações que podem variar de 0,3 a 5,0 %. Alguns gases nobres podem ser usados como gases de arraste, como por exemplo, o argônio, oxigênio e compostos halogenados e com isso inferir o papel de cada molécula no crescimento de diamante.

¹ Aluno do Curso de Engenharia da Computação, ETEP Faculdades. E-mail: fabianoaizawa@gmail.com

² Pesquisador do grupo Diamantes e Materiais Relacionados. E-mail: baldan@las.inpe.br