

SUMÁRIO

1. Proposta do Tema	2
2. Justificativa e Relevância do Tema	3
3. Objetivos	4
4. Modelo Computacional	5
4.1. Malha Estruturada	5
4.2. Equações	6
4.3. O Método dos Volumes Finitos	8
5. Conclusão e Resultados Esperados	9
6. Referências Bibliográficas	10
7. ANEXO 1 Dimensões Reator CVD	11
8. ANEXO 2 Cronograma de Atividades	12

1. Proposta do Tema

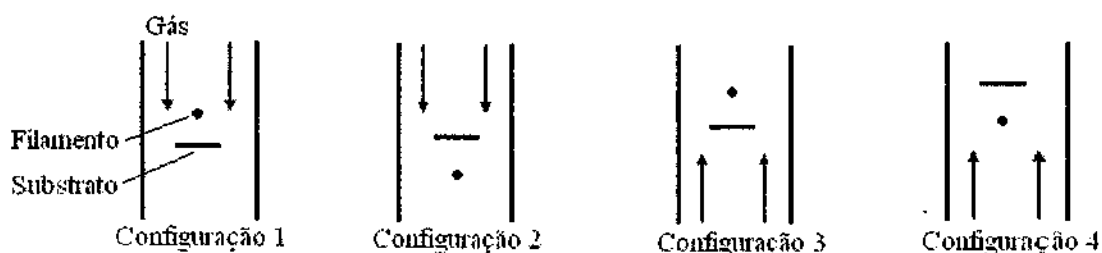
Este trabalho esta sendo proposto dentro da linha de pesquisa e desenvolvimento na área de crescimento por deposição química a partir da fase vapor (CVD) de filmes finos e auto sustentados de diamante em desenvolvimento no INPE.

O tema proposto neste trabalho visa à modelagem e a simulação numérica do escoamento gasoso, existente durante o processo de deposição do filme, aplicado à geometria do reator tipo CVD existente no laboratório do LAS. O método numérico a ser utilizado é baseado na discretização por volumes finitos das equações, que representam os fenômenos que ocorrem durante o processo de deposição do diamante, utilizando uma malha bidimensional estruturada.

A proposta deste trabalho é contribuir para o desenvolvimento da simulação numérica e para um maior entendimento dos fenômenos de difusão e convecção que ocorrem dentro da cavidade do reator CVD. Certamente este projeto dará um bom começo nesta linha de trabalho o que abrirá uma gama de trabalhos futuros. Este trabalho está sendo realizado em parceria com LAC (Laboratório Associado de Computação e Matemática Aplicada) e o LAS.

2. Justificativa e Relevância do Tema

Desde 1991 o INPE vem desenvolvendo a área de crescimento de diamantes-CVD, sendo que o grupo foi iniciado pelos Drs. Vladimir Jesus Trava-Airoldi e Evaldo José Corat. O objetivo inicial do grupo foi o de introduzir a pesquisa em crescimento de diamantes CVD para os fins de tecnologia de satélites do INPE. Esta pesquisa tem sido calcada na busca de princípios básicos do processo, mas com o objetivo final de obter produtos aplicáveis. O grupo obteve sucesso, tanto em contribuições fundamentais, quanto no desenvolvimento de aplicações. Contribuições estas que são traduzidas nos inúmeros trabalhos de mestrado e doutorado como também de iniciação científica. Esta dissertação é o início dos trabalhos visando à criação de um código computacional capaz de simular o comportamento do reator para geometrias alternativas. Os reatores CVD utilizados no crescimento de filmes de diamante apresentam uma única configuração e não há nenhum estudo de configurações alternativas. Uma vez que a mudança na configuração é relativamente cara além de demorada. A seguir são apresentadas algumas configurações que poderemos estudar, dependendo da implementação do código e das dificuldades a serem verificadas.



A configuração 1 apresenta a geometria do reator existente em nosso laboratório. Inicialmente pretendemos simular esta geometria e se houver tempo disponível, poderemos também simular as outras.

É importante salientar que o estudo do ambiente gasoso presente no reator CVD é de grande interesse, pois, o comportamento do gás no substrato pode fornecer uma maior compreensão dos mecanismos de formação do filme. Com ajuda de um modelo numérico que simule este meio gasoso, poderemos obter informações difíceis de se obter com os experimentos. Esta característica faz da simulação computacional do processo de crescimento de diamante um importante complemento as pesquisas experimentais.

Além de todos os aspectos computacionais envolvidos no desenvolvimento deste trabalho, existe a preocupação de se fazer um estudo aplicado no reator CVD. Não existe, ainda, um estudo detalhado da influência do fluxo dos gases com altos gradientes de temperatura dos fenômenos que acontecem dentro do reator, nossa proposta é que possamos abordar este problema neste trabalho havendo tempo para isto. O que seria uma contribuição significativa para o entendimento dos fenômenos que ocorrem na região entre o filamento e o substrato.

3. Objetivos

O objetivo principal deste trabalho é a elaboração de um protótipo para a simulação numérica computacional dos fenômenos que ocorrem durante o processo de deposição do diamante no reator CVD existente no laboratório do LAS/INPE. Este reator consta basicamente de um tubo de Pyrex com duas tampas de alumínio nas extremidades por onde são introduzidos os gases reagentes que entram na proporção de aproximadamente 99% H_2 e 1% CH_4 . As dimensões deste reator encontram-se descritas em detalhes no Anexo 1. A temperatura do filamento é da ordem de 2000 K e do substrato da ordem de 1000 K [3]. A pressão interna é de 30 Torr e a vazão é de 100 mililitros por minuto.

O primeiro passo é criar uma malha bidimensional estruturada que cubra a região em que vai ser estudado o escoamento. O segundo passo é definir quais são os fenômenos predominantes durante o processo de deposição. Como o fluxo dos gases no reator CVD é bastante baixo e a distância entre o substrato e filamento é bem pequena (aproximadamente sete milímetros), os fenômenos serão considerados principalmente na região que engloba o substrato e filamento. Segundo DebRoy [1], o fenômeno de difusão, devido concentração de espécies e devido o gradiente de temperatura, é muito significativo no transporte das espécies reagentes, que são formadas próximo ao filamento, para a superfície do substrato. Inicialmente iremos estudar o fenômeno de difusão, depois, se houver tempo disponível estudaremos a convecção.

O modelo computacional usado nesta simulação será desenvolvido em duas dimensões para uma malha estruturada. O método numérico a ser utilizado é baseado em uma discretização por volumes finitos das equações, que expressam o fenômeno estudado, onde os valores das grandezas estudadas serão calculados no centro das células.

Com os resultados gerados por estes programas esperamos estar contribuindo para o melhor entendimento dos fenômenos simulados e como estes afetam o processo de crescimento do filme de diamante.

4. Modelo Computacional

O reator CVD será modelado bidimensionalmente, considerando um corte lateral. O perfil adotado encontra-se apresentado na Figura 1, as distâncias entre substrato, filamento e parede serão baseadas nas dimensões obtidas do reator CVD existente no laboratório do LAS/INPE, estas medidas encontram-se em detalhes no Anexo 1.

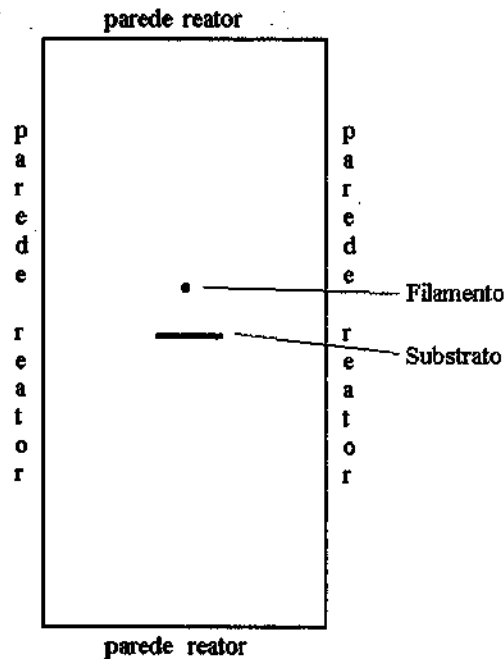


Figura 1 - Perfil Reator CVD – corte lateral.

O método numérico utilizado será baseado na discretização por volumes finitos das equações, que representam o fenômeno estudado, utilizando uma malha estruturada. Essas equações estão descritas em detalhes no item 4.2 desta proposta. No método dos volumes finitos divide-se a região de estudo em um conjunto de células para discretização das equações de balanço.

Os programas serão desenvolvidos utilizando a linguagem C, em ambiente Linux. O compilador será o gcc [6], de domínio público, disponibilizado pela GNU Free Software Foundation.

4.1. Malha Estruturada

Ao se tratar um modelo envolvendo fluidos computacionalmente, inicialmente deve-se discretizar, ou seja dividir a região de estudo (domínio) que será estudada, sendo assim, a divisão do domínio de estudo em elementos, células ou volumes representa o primeiro passo para a aplicação

dos métodos numéricos na solução das equações do escoamento. O conjunto discreto de pontos ou subdomínios constitui a malha. A dimensão espacial é dividida em um conjunto discreto de pontos ou células (malha) [2].

Uma malha estruturada é uma malha que apresenta uma regularidade na distribuição espacial dos pontos. Numa malha estruturada cada volume interno tem sempre o mesmo número de vizinhos e a numeração dos mesmos tem uma seqüência natural [4]. Este tipo de discretização apresenta vantagens na implementação do programa, pois a regra de ordenação dos elementos simplifica as rotinas.

As malhas estruturadas têm como característica principal, a relação de vizinhança bem definida a partir de um conjunto de índices. Se for definido um vértice a partir de um par de índices, no caso bidimensional, os vértices vizinhos podem ser acessados a partir dos índices $i+1$, $i-1$, $j+1$ e $j-1$. Tal relação também é válida para os volumes de controle. Daí surge a característica mais importante das malhas estruturadas, a qual pode ser descrita com uma quantidade fixa de vizinhos. A Figura 2 mostra a relação de vizinhança, considerando uma analogia entre os vértices e as direções cardeais, conforme utilizado por Patankar [5].

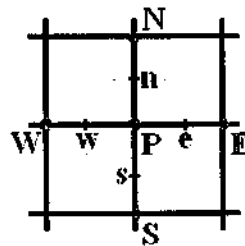


Figura 2 - Relação da vizinhança entre um vértice (P) e seus vizinhos (N,S,E,W) no caso bidimensional.

Neste trabalho optou-se pelo uso da malha estruturada devido a sua característica de regularidade na distribuição dos pontos.

4.2. Equações

As equações, usadas neste trabalho, expressam o princípio da conservação da propriedade física de um fluido, definindo um balanço entre os modos de transporte de uma variável de interesse como, por exemplo, velocidade, energia ou espécies químicas. A partir de uma equação diferencial geral que é dada por:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho\phi) + \nabla \cdot (\rho\vec{V}\phi) = \nabla \cdot (\Gamma\nabla\phi) + S \quad (1)$$

Onde ϕ é a grandeza em estudo, ρ representa a densidade do fluido, \vec{V} é o vetor das velocidades, Γ é o fluxo difusivo da grandeza e S é o termo fonte [2]. Nesta equação, o primeiro termo representa a variação da variável dependente em relação ao tempo. O segundo termo representa a contribuição do transporte convectivo. O terceiro termo representa o transporte difusivo. O último termo representa a geração ou destruição de ϕ .

A equação da continuidade, que descreve a conservação de massa, é obtida da equação (1) fazendo-se $\phi = 1$ e $\Gamma = 0$, portanto a equação fica:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho\vec{V}) = 0 \quad (2)$$

A equação de momento, que é derivada da segunda lei de Newton, é obtida fazendo-se $\phi = \vec{V}$ e $\Gamma = \mu$, onde μ é o coeficiente de viscosidade do fluido. Para esta equação é preciso levar em conta a influência do gradiente de pressão, ∇P , e a força gravitacional por unidade de massa, $\rho\vec{g}$. Obtemos, então:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho\vec{V}) + \nabla \cdot (\rho\vec{V}\vec{V}) = \nabla \cdot (\mu\nabla\vec{V}) + \rho\vec{g} - \nabla P \quad (3)$$

A terceira equação a ser obtida representa a conservação de energia. Para isso faz-se $\phi = C_p T$ e $\Gamma = k\nabla T$, obtendo:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho C_p T) + \nabla \cdot (\rho\vec{V}C_p T) = \nabla \cdot (k\nabla T) \quad (4)$$

Onde T representa a temperatura do fluido, k é a condutibilidade térmica e C_p é o calor específico à pressão constante.

Na solução de problemas em que a distribuição de velocidade não é conhecida e deve ser encontrada no processo de solução do problema, o acoplamento entre pressão e velocidade exige grande parte do esforço computacional. Em escoamentos incompressíveis costuma-se definir uma equação para a pressão a partir da equação da continuidade. Tratando-se de escoamento gasoso compressível o acoplamento entre pressão e velocidade é obtido pela equação de estado de gases perfeitos dada por:

$$P = \rho RT \quad (5)$$

Onde R é a constante do gás. Isto irá permitir o acoplamento da equação da energia com as demais equações.

4.3. O Método dos Volumes Finitos

No método dos volumes finitos divide-se a região de estudo em um conjunto de células para a discretização das equações do escoamento. As equações são utilizadas na forma integral, e sobre uma malha as equações são integradas para cada volume de controle, permitindo que as variáveis sejam calculadas no centro do volume a partir do valor das propriedades e fluxos nas faces do volume de controle. Tais valores nas faces são obtidos a partir de diferentes esquemas de interpolação o que leva a surgirem diferentes metodologias baseadas no método dos volumes finitos.

A idéia principal da formulação por volumes finitos é de fácil entendimento e apresenta uma interpretação física direta [5]. A escolha pelo método dos volumes finitos neste trabalho se deu pelo fato do método obedecer aos princípios de conservação das equações do escoamento, bem como permitir a utilização de malhas não estruturadas, caso um estudo complementar seja necessário, na discretização de domínios com geometrias complexas.

5. Conclusão e Resultados Esperados

Este trabalho tem o caráter inovador pois o grupo de diamantes ainda que consolidado na formação de recursos humanos na área experimental, não tem nenhum trabalho na área de modelagem e simulação. Isto faz deste trabalho o início de uma área de modelagem e simulação numérica em nosso grupo com o objetivo de dar suporte ao grupo experimental e auxiliar no entendimento compreensão dos fenômenos físicos e químicos que ocorrem no reator.

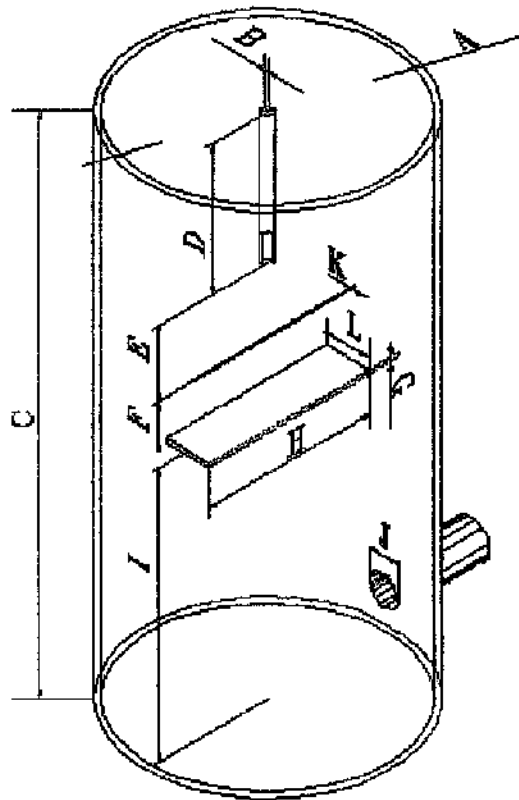
Como resultado esperamos demonstrar como está distribuída a temperatura e a concentração de espécies no reator em função das coordenadas xy , bem como obter o perfil do campo de velocidades do escoamento.

Com estes resultados esperamos estar contribuindo para o melhor entendimento dos termos difusivo e convectivo e como estes afetam a distribuição da temperatura no reator.

6. Referências Bibliográficas

1. DebRoy, T.; Tankala, K.; Yarbrough W. A.; Messier, R.; “Role of heat transfer and fluid flow in the chemical vapor deposition of diamond”, J. Appl. Phys., 68 (1990) 2428.
2. Fazenda, A. L.; “Modelagem Bidimensional com Malhas não Estruturadas de Escoamentos Incompressíveis Utilizando a Abordagem do Circuncentro”, Tese de Doutorado a ser apresentada, INPE, 2001
3. Goodwin, D. G.; “Numerical Modelling of the Filament-Assisted Diamond Growth Environment”, J. Appl. Phys., 68 (12), 15 de dezembro 1990.
4. Maliska, S. R.; “Transferência de Calor e Mecânica dos Fluidos Computacional – Fundamentos e Coordenadas Generalizadas”, LTC - Livros Técnicos e Científicos, Rio de Janeiro.
5. Patankar, S. V.; “Numerical Heat and Fluid Flow”, Hemisphere Publishing Corporation, McGraw-Hill Book Company.
6. Projeto GNU; www.gnu.org; Free Software Foundation

7. Anexo 1 - Dimensões Reator CVD



- A) Diâmetro do reator: 57 mm interior e 61 mm exterior;
- B) Diâmetro do tubo de entrada de gases: 1,8 mm interior e 3,1 mm exterior;
- C) Altura do reator: aproximadamente 210 mm;
- D) Altura do tubo de entrada de gases: aproximadamente 97 mm;
- E) Altura entre filamento e tubo de entrada de gases: aproximadamente 36 mm;
- F) Altura entre o substrato e filamento: entre 5 mm e 7 mm, sendo a mais usada 7 mm;
- G) Espessura do porta substrato: 2 mm;
- H) Largura do porta substrato: 47 mm;
- I) Altura entre o porta substrato e o fundo do reator: aproximadamente 70 mm;
- J) Diâmetro do cano de saída de gases: 4,8 mm interior e 6,3 mm exterior;
- K) Diâmetro do filamento: entre 60 μm e 300 μm , sendo o mais usado: 250 μm (ou 0,25 mm) com um fio de 30 mm;
- L) Profundidade do porta substrato: 10 mm.

Essas medidas foram tiradas diretamente do reator CVD filamento quente utilizado para crescimento de diamante no laboratório do LAS/INPE.

8. Anexo 2 - Cronograma de Atividades

Segue abaixo as etapas concluídas identificadas por linhas vermelhas e as etapas ainda a concluir são identificadas com linhas pretas. Os períodos estão divididos em trimestres.

- 1) Crédito em disciplinas;
- 2) Revisão bibliográfica;
- 3) Estudo dos fenômenos, das equações e geração da malha;
- 4) Primeiro relatório de atividades para FAPESP;
- 5) Simulação da difusão devido gradiente de temperatura na malha estruturada;
- 6) Exame de proposta de dissertação – INPE;
- 7) Simulação da difusão devido concentração de espécies na malha estruturada;
- 8) Segundo relatório de atividades para FAPESP;
- 9) Simulação do perfil do campo de velocidades na malha estruturada;
- 10) Se houver tempo disponível, estudo de configurações alternativas;
- 11) Terceiro relatório de atividades para FAPESP com a dissertação finalizada.

METAS	1° TRIM	2° TRIM	3° TRIM	4° TRIM	5° TRIM	6° TRIM	7° TRIM	8° TRIM
1	—	—	—					
2	—	—	—	—	—	—	—	—
3				—				
4				—	—			
5					—			
6						—		
7						—		
8							—	
9							—	
10								—
11								—