

Artículo de investigación

Simulación de un plasma de hidrógeno en un reactor de microondas TM_{112} para la deposición de diamante

Simulation of a hydrogen plasma in a TM_{112} microwave reactor for diamond deposition

Alejandro Martínez-Amaríz¹, Petr Tsygankov², Yerson Barragán², Fredy Parada-Becerra², Carlos Páez² y Eduardo Orozco²

¹Instituto de Investigación Xerira, Facultad de Ingenierías y Tecnologías, Universidad de Santander, Colombia.

²Universidad Industrial de Santander, Colombia.

Recepción: 18-enero-2025 **Aceptado:** 2-abril-2025 **Publicado:** 20-julio-2025

Cómo citar: Martínez-Amaríz A., Orozco, E., Tsygankov, P., Barragan, Y., Parada, F., & Paez, C. (2025). Simulación de un plasma de hidrógeno en un reactor de microondas TM_{112} para la deposición de diamante. *Ciencia En Desarrollo*, 16(2). doi:10.19053/uptc.01217488.v16.n2.2025.18688

Resumen

El diamante presenta una combinación única de propiedades: alta dureza, elevada resistencia al desgaste, alta conductividad térmica, transparencia en el rango infrarrojo, inercia química y excelentes propiedades semiconductoras. Por esta razón, el interés en la producción de materiales basados en este mineral para diversas industrias se ha mantenido durante las últimas décadas. Las principales tecnologías para sintetizar estructuras de diamante se basan en métodos de deposición química en fase vapor (CVD), como el filamento caliente (Hot Filament) y los plasmas de microondas CVD. En este trabajo se presentan los resultados del estudio computacional sobre la generación de un plasma de hidrógeno en un reactor de microondas para deposición de diamante, a partir de la interacción del campo de microondas en el modo TM_{112} con gas H_2 , utilizando los módulos de plasma, radiofrecuencia y transferencia de calor del software COMSOL Multiphysics. En nuestro estudio se consideran dos puertos de inyección de microondas desfasados π rad; lo cual puede lograrse mediante el uso de dos generadores de estado sólido sincronizados. Esta configuración de excitación del campo de microondas genera dos zonas de activación del plasma, de igual tamaño y concentración, próximas al sustrato; características deseables para su implementación tecnológica, ya que incrementan tanto el área efectiva para el crecimiento de películas de diamante como la potencia total entregada en el volumen específico. Se obtuvieron datos sobre el comportamiento de parámetros físicos fundamentales, tales como las densidades y temperaturas electrónica y de hidrógeno atómico, así como la concentración y temperatura del gas, en función de los parámetros controlables experimentalmente, como la presión y la potencia de microondas.

Palabras Clave: reactor de plasma, microondas, simulación computacional, películas delgadas, deposición química en fase vapor.

Abstract

Diamond exhibits a unique combination of properties: high hardness, high wear resistance, high thermal conductivity, infrared transparency, chemical inertness, and excellent semiconducting behavior. For this reason, interest in the production of materials based on this mineral for various industries has been maintained in the last decades. The main technologies for synthesizing diamond structures rely on chemical vapor deposition (CVD) methods, such as Hot Filament and microwave plasma CVD. This work presents the results of a computational study on the generation of hydrogen plasma in a microwave plasma reactor for diamond deposition, based on the interaction between the TM_{112} microwave field with H_2 gas. The simulation was performed using the plasma, radio frequency, and heat transfer modules of the COMSOL Multiphysics software. In our study, two microwave injection ports, phase-shifted by π radians, are considered; this configuration can be implemented using two synchronized solid-state generators. This microwave field excitation scheme generates two plasma activation zones, of equal size and concentration, near the substrate - desirable characteristics for technological implementation, as they increase both the effective area for diamond film growth and the total power delivered to the specific volume. Data were obtained on the behavior of key physical parameters, such as electron and atomic hydrogen densities and temperatures, as well as gas concentration and temperature, as functions of experimentally controllable parameters, including pressure and microwave power. Understanding these variables is essential for optimizing the technological parameters required for the construction and operation of a microwave plasma reactor for diamond deposition.

Keywords: plasma reactor, microwave, simulation, thin films, chemical vapor deposition.

1. Introducción

En las últimas tres décadas, los recubrimientos de diamante han generado interés en la comunidad científica y en la industria por su excelente rendimiento y sus notables propiedades fisicoquímicas. Estos recubrimientos consisten esencialmente en una fase de carbono amorfo y han encontrado aplicaciones en herramientas de corte, componentes microelectrónicos, fotoelectrónicos, sensores, piezas biomédicas y dispositivos aeroespaciales [1]. Este interés ha impulsado el desarrollo de técnicas de preparación de bajo costo y accesibles para este material. El diamante es policristalino y su uso está limitado por los límites de grano, lo que afecta su aplicación como recubrimiento óptico y capa de baja fricción.

Técnicas avanzadas han permitido alcanzar tasas de crecimiento rápidas y obtener películas de diamante de alta calidad. No obstante, las aplicaciones de la deposición en fase gaseosa siguen estando restringidas por la complejidad del montaje experimental y las altas temperaturas requeridas en el sustrato.

La electrodeposición de películas de DLC (Diamond-Like Carbon) ha emergido como una alternativa con ventajas significativas, entre ellas la posibilidad de realizar la síntesis a temperatura ambiente y la facilidad para la deposición en superficies de geometría compleja [2, 3, 4].

En general, los métodos de deposición de carbono en forma de diamante o similares pueden agruparse en tres procesos principales: PVD, CVD y WET. El proceso PVD (Physical Vapor Deposition) implica el bombardeo de iones sobre un sustrato, provocando la expulsión de átomos del material objetivo. Esta técnica se emplea comúnmente para la deposición de películas delgadas, aunque presenta una baja tasa de deposición y un alto costo inicial [5]. Dentro del PVD, se han desarrollado técnicas como el *sputtering* y la deposición asistida por vapor de iones para mejorar las características de las películas de diamante [6].

El proceso CVD (Chemical Vapor Deposition) genera un arco de plasma a partir de una fuente de alimentación, y resulta adecuado para la deposición uniforme sobre superficies complejas. Si bien es un proceso costoso, es altamente efectivo para recubrir con películas delgadas y de alta calidad. Variantes como el plasma CVD y el CVD térmico han demostrado ser extremadamente valiosas para la síntesis de películas de diamante de alta calidad [7, 8].

Por último, el proceso WET (Wet Chemical Etching) se utiliza en la fabricación de dispositivos semiconductores, mediante el empleo de soluciones químicas líquidas para tareas de limpieza, grabado y deposición en la manufactura de circuitos integrados [9].

Las técnicas de deposición química en fase vapor, especialmente la MWCVD (Microwave Chemical Vapor Deposition), son fundamentales para la síntesis de materiales a base de carbono. Un reactor MWCVD consiste en una cámara cilíndrica conectada a un generador de microondas que generalmente opera a una frecuencia de 2.45 GHz y una potencia en el rango de 1 a 3 kW. El plasma se genera sobre un sustrato, permitiendo una sintonización precisa del circuito de microondas [10].

El proceso MWCVD se puede resumir de la siguiente manera: las microondas disocian las moléculas del gas precursor (95 % hidrógeno molecular y 5 % metano), generando hidrógeno atómico y radicales metilos (CH_x y C_2H_y), los cuales son los principales radicales involucrados en el crecimiento del diamante. El hidrógeno naciente favorece la formación de la fase diamante y suprime la aparición de otras formas de carbono [11]. Estos radicales se difunden y reaccionan (adsorción, desorción, entre otros) con el sustrato, que se encuentra a una temperatura entre 400 y 1100 °C, lo que conduce al crecimiento de la capa de diamante [12, 13]. Además, esta técnica presenta un gran potencial en el desarrollo de electrónica de alto nivel, como en la fabricación de chips de diamante que pueden ser utilizados en líneas de transmisión de microondas y radiofrecuencia [14].

Desde el punto de vista computacional, trabajos como el de Silva [15] han sido relevantes en el estudio de reactores de plasma de microondas para la deposición de películas de diamante. En un trabajo previo, los autores del presente artículo realizaron un estudio computacional de un reactor plásmico por descarga de microondas, empleando el modo cilíndrico TM_{112} , el cual presenta dos áreas de activación del plasma, y fue analizado mediante simulaciones en el software COMSOL Multiphysics [16]. En dicho estudio se encontró que el uso de un solo puerto de inyección de microondas genera dos regiones de plasma con diferente tamaño y concentración; características no deseables para este tipo de reactores.

En este trabajo se presentan los resultados de la simulación del plasma generado por la acción de un campo de microondas, empleando el modo cilíndrico TM_{112} y utilizando dos puertos de inyección de microondas con un desfase de π , con el objetivo de resolver el problema identificado en [16], previamente descrito. Los resultados confirman la excitación de dos regiones de plasma de igual tamaño y concentración; aspectos favorables para la implementación tecnológica de un reactor plásmico por descarga de microondas, basado en el modo TM_{112} , para la deposición de películas de diamante. Las simulaciones computacionales realizadas con COMSOL Multiphysics han permitido determinar los principales parámetros tecnológicos necesarios para la construcción de este tipo de reactores.

2. Sistema físico, formalismo teórico y esquema de simulación

Con el fin de analizar la distribución espacial del plasma y su interacción con el campo de microondas en condiciones controladas, se implementó un modelo tridimensional del reactor basado en una cavidad resonante cilíndrica. Esta cavidad fue diseñada para operar en el modo TM_{112} , el cual presenta una configuración espacial que favorece la generación de dos regiones de plasma de igual tamaño y concentración, localizadas cerca del sustrato.

En la Figura 1 se ilustra el sistema físico considerado. El campo eléctrico en la cavidad se excita mediante dos puertos de inyección de microondas desfasados π rad, acoplados a través de cables coaxiales. El gas precursor, H_2 , se confina en la parte inferior de la cavidad mediante una ventana de

cuarzo, la cual es transparente a las microondas. En esta región, el campo electromagnético genera el plasma.

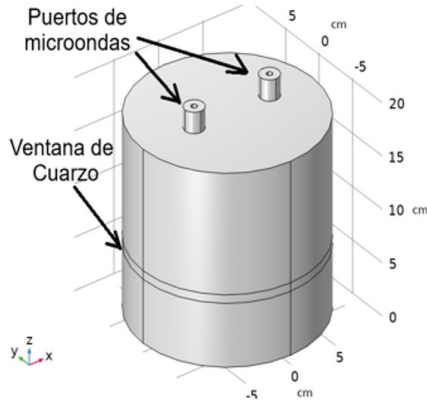


Figura 1: **Sistema Físico:** La cavidad resonante cilíndrica es excitada en el modo TM_{112} utilizando dos puertos de inyección de microondas desfasados π rad, mediante cables coaxiales. La ventana de cuarzo, transparente a las microondas, confina el gas H_2 en la parte inferior; donde se forma el plasma de hidrógeno por la acción del campo de microondas.

Para modelar el comportamiento del plasma generado en el reactor de microondas mostrado en la Figura 1, se utilizaron los módulos de Plasma, Radiofrecuencia (RF) y Transferencia de Calor del software COMSOL Multiphysics. Esta herramienta permite resolver de forma acoplada las ecuaciones que describen la interacción entre el campo electromagnético y las propiedades físicas del gas precursor. La metodología de simulación empleada se basa en el enfoque presentado en [15].

En la interfaz de Plasma de Microondas del software COMSOL, las ondas electromagnéticas se calculan en el dominio de la frecuencia, mientras que las variables dependientes del plasma, como la densidad electrónica y la energía, se calculan en el dominio temporal. Esta aproximación, en la cual el campo electromagnético se calcula en el dominio de la frecuencia y luego se acopla a las ecuaciones del plasma en el dominio temporal, permite reducir el costo computacional manteniendo una descripción físicamente consistente del sistema.

La distribución espacial del campo eléctrico inducido por los puertos de microondas se obtiene a partir de las ecuaciones de Maxwell en el dominio de la frecuencia. En particular, se resuelve la siguiente ecuación para la componente eléctrica del campo electromagnético:

$$\nabla \times \hat{\mu}(\omega)^{-1} \nabla \times \hat{\mathbf{E}}(\mathbf{r}, \omega) = (\omega^2 \epsilon_0 \hat{\epsilon}_r(\omega) - j\omega \hat{\sigma}(\omega)) \hat{\mathbf{E}}(\mathbf{r}, \omega), \quad (1)$$

donde el símbolo circunflejo, $\hat{\cdot}$, indica la transformada de Fourier de cada magnitud física. Aquí, $\hat{\mu}(\omega)$, $\hat{\epsilon}_r(\omega)$ y $\hat{\sigma}(\omega)$ representan la permeabilidad magnética, la permitividad eléctrica relativa y la conductividad eléctrica compleja del

plasma, respectivamente; ω es la frecuencia angular del campo electromagnético, y ϵ_0 es la permitividad eléctrica del vacío.

En las condiciones de operación del sistema considerado, se asume $\hat{\epsilon}_r(\omega) = 1$ y $\hat{\mu}(\omega) = \mu_0$. La conductividad compleja del plasma se modela como:

$$\hat{\sigma}(\omega) = \frac{\epsilon_0 \omega_p^2}{(\nu_m + j\omega)}, \quad (2)$$

donde ω_p es la frecuencia plasmática, y ν_m la frecuencia de colisiones electrón-neutrales, dada por:

$$\nu_m \approx a \frac{P_g}{T_g}, \quad (3)$$

siendo P_g y T_g la presión y la temperatura del gas, respectivamente, y $a = 1 \times 10^{10} \text{ K} \cdot \text{s}^{-1}/\text{Pa}$ [17].

La frecuencia plasmática ω_p se define como:

$$\omega_p^2 = \frac{n_e e^2}{\epsilon_0 m_e}, \quad (4)$$

donde n_e es la densidad de electrones, e la carga elemental y m_e la masa del electrón.

La solución de esta ecuación permite obtener la distribución espacial del campo eléctrico complejo en el interior de la cavidad, que posteriormente se usa para calcular la potencia de microondas absorbida por el plasma.

Una vez obtenida la distribución del campo eléctrico, se calcula la potencia de microondas absorbida por el plasma mediante la siguiente expresión:

$$Q_{m\omega} = \frac{1}{2} \text{Re}(\hat{\mathbf{J}}_p \cdot \hat{\mathbf{E}}^*), \quad (5)$$

donde $\hat{\mathbf{E}}^*$ es el complejo conjugado del campo eléctrico, y $\hat{\mathbf{J}}_p(\mathbf{r}, \omega) = \hat{\sigma}(\omega) \hat{\mathbf{E}}(\mathbf{r}, \omega)$ representa la densidad de corriente en el plasma. Esta potencia se acopla al modelo de transporte de carga y energía electrónica.

Dado que el plasma bajo estudio es débilmente ionizado ($n_e/n_g \ll 1$) y dominado por colisiones electrón-neutrales, se adopta una descripción de tipo fluido bajo la aproximación de deriva y difusión. La evolución de la densidad electrónica n_e y de la energía electrónica n_e se describe mediante las siguientes ecuaciones de conservación:

$$\frac{\partial n_e}{\partial t} + \nabla \cdot \Gamma_e = R_e, \quad (6)$$

$$\frac{\partial n_e}{\partial t} + \nabla \cdot \Gamma_e + \mathbf{E}_a \cdot \Gamma_e = S_{en} + \frac{Q_{mw}}{e}. \quad (7)$$

Aquí, $\Gamma_e = -\mu_e n_e \mathbf{E}_a - D_e \nabla n_e$ es el flujo electrónico, con μ_e la movilidad y D_e la difusividad electrónica. R_e representa la tasa neta de generación de electrones, calculada como:

$$R_e = \sum_{j=1}^M x_j k_j N_n n_e, \quad (8)$$

donde x_j es la fracción molar de las especies blanco, k_j el coeficiente de tasa para la reacción j , y N_n la concentración de neutrales.

La energía electrónica n_e evoluciona en función de su flujo Γ_e , de la energía transferida por el campo ambipolar $E_a \cdot \Gamma_e$, de la potencia de microondas Q_{mw} y del término de pérdida por colisiones inelásticas S_{en} , dado por:

$$S_{en} = \sum_{j=1}^P x_j k_j N_n n_e \Delta \varepsilon_j, \quad (9)$$

donde $\Delta \varepsilon_j$ es la energía promedio transferida en la reacción j .

Los coeficientes de tasa k_j se obtienen mediante:

$$k_j = \left(\frac{2e}{m_e} \right)^{1/2} \int_0^\infty \varepsilon \sigma_k(\varepsilon) f(\varepsilon) d\varepsilon, \quad (10)$$

donde ε es la energía electrónica, $\sigma_k(\varepsilon)$ la sección transversal de colisión, y $f(\varepsilon)$ la función de distribución de energía. En este trabajo se considera una distribución de tipo Maxwelliana, para la cual la temperatura electrónica se relaciona con la energía promedio mediante $T_e = \frac{2}{3} \bar{\varepsilon}$. Los valores de $\sigma_k(\varepsilon)$ fueron obtenidos de bases de datos disponibles en la literatura [18, 19].

Además de las partículas cargadas ligeras (electrones), el modelo considera el transporte y las reacciones químicas de especies neutras e iónicas derivadas del hidrógeno molecular. Aunque se trata de átomos y moléculas relativamente livianos, se les denomina especies pesadas por contraste con los electrones, debido a su mayor masa y dinámica desacoplada.

Las especies consideradas incluyen H , H_2 , H^+ , H_2^+ , H^* y H_2^* , cuyas fracciones de masa w_k evolucionan según la siguiente ecuación de conservación:

$$\rho_m \frac{\partial w_k}{\partial t} + \rho_m (\mathbf{u} \cdot \nabla) w_k = \nabla \cdot \mathbf{j}_k + R_k, \quad (11)$$

donde $\rho_m = pM_n/RT$ es la densidad de la mezcla gaseosa, p es la presión, M_n la masa molar promedio del gas, R la constante universal de los gases y T la temperatura. La velocidad de flujo de la mezcla se considera despreciable ($\mathbf{u} = 0$), y R_k representa la tasa de producción o destrucción de la especie k por reacciones químicas. El flujo difusivo es $\mathbf{j}_k = \rho_m \omega_k \mathbf{V}_k$, donde $\mathbf{V}_k$ es la velocidad difusiva de la especie k .

Con el fin de reducir el costo computacional, el conjunto de reacciones incluidas en el modelo fue optimizado mediante simulaciones cerodimensionales, que permitieron identificar los procesos químicos más relevantes en función del campo eléctrico reducido.

Aunque en el sistema bajo estudi pueden producirse fenómenos asociados a la interacción del plasma con las paredes -como emisión secundaria de electrones o fotoemisión-, dichos efectos fueron despreciados, debido a que su contribución al sostenimiento del plasma no es significativa en las condiciones de operación consideradas.

El campo eléctrico ambipolar, responsable del transporte de cargas, se obtiene resolviendo la ecuación de Poisson en régimen cuasi-electrostático:

$$-\nabla \cdot (\varepsilon_0 \varepsilon_r \nabla V) = \rho, \quad (12)$$

donde $\varepsilon_r = 1$ y la densidad de carga espacial ρ está dada por:

$$\rho = q \left(\sum_{k=1}^N Z_k n_k - n_e \right), \quad (13)$$

con Z_k la carga de la especie k y n_k su concentración, calculada mediante:

$$n_k = \left(\frac{p}{k_B T} \right) x_k, \quad (14)$$

donde $x_k = \omega_k/(M_k M_n)$ es la fracción molar de la especie k y k_B la constante de Boltzmann.

Finalmente, la temperatura del gas neutro T_g se calcula mediante un modelo de conducción térmica:

$$\rho_m C_p \frac{\partial T_g}{\partial t} - \nabla \cdot (k \nabla T_g) = Q_{HS}, \quad (15)$$

donde C_p es la capacidad calorífica a presión constante, k la conductividad térmica del gas, y Q_{HS} representa la densidad de potencia transferida desde los electrones hacia las especies neutras y cargadas por colisiones. Este término se obtiene directamente desde la interfaz de plasma de COMSOL Multiphysics, que acopla la energía electrónica al balance térmico del gas.

Cabe destacar que la generación del plasma altera la distribución del campo eléctrico en el interior de la cavidad, lo que puede afectar las condiciones de resonancia del sistema, especialmente cuando la densidad electrónica es elevada. Este acoplamiento plasma-campo puede modificar tanto la frecuencia efectiva de resonancia como la configuración espacial del modo excitado. Por esta razón, resulta fundamental emplear una simulación auto-consistente que permita predecir con precisión la geometría del plasma y ajustar el dimensionamiento de la cavidad mediante un barrido paramétrico.

Aunque en este estudio no se simula directamente el proceso de crecimiento de diamante, ya que no se incorpora el metano, los perfiles obtenidos de densidad y temperatura electrónica, así como la concentración de especies del hidrógeno, permiten evaluar si las condiciones físicas del plasma son compatibles con el desarrollo de dicho proceso. En particular, estos resultados permiten inferir si el ambiente generado sería favorable para la formación de radicales activos (como CH_x , C_2H_y y H atómico), que intervienen directamente en

la deposición de diamante, como se mencionó previamente. Por otro lado, la distribución espacial de la temperatura del gas es un parámetro clave que influye directamente en la calidad cristalina del material sintetizado.

3. Resultados y discusión

Siguiendo la metodología presentada en [15], se realizaron inicialmente simulaciones puramente electromagnéticas, considerando la cavidad cilíndrica vacía, es decir, sin plasma y sin la ventana de cuarzo. En este caso, las dimensiones de la cavidad se calcularon a partir de la expresión para la frecuencia de resonancia de los modos TM_{mnp} [16]:

$$\omega = c(k_c^2 + k_z^2)^{1/2}, \quad (16)$$

donde $c = (\mu_0 \epsilon_0)^{-1/2}$ es la velocidad de la luz en el vacío, $k_c = u_{mm}/R$ es el número de onda radial, siendo R el radio de la cavidad y u_{mm} la n -ésima raíz de la función de Bessel de orden m , de primera especie, $J_m(k_c r)$. El número de onda axial es $k_z = p\pi/L$, con L la longitud de la cavidad.

En este trabajo se consideró el modo TM_{112} , excitado mediante dos puertos de microondas de 2.45 GHz con un desfase temporal de π , acoplados por cables coaxiales (ver Figura 1). La Figura 2 muestra la distribución de la componente eléctrica del campo correspondiente a este modo, calculado con el módulo RF de COMSOL Multiphysics.

Como se observa, la configuración del campo eléctrico no presenta simetría axial. En particular, se identifican dos zonas intensas en la base de la cavidad, donde se espera que se genere el plasma al incorporar el gas. Estas regiones son relevantes, ya que definen las posiciones óptimas para la ubicación del sustrato durante el crecimiento de estructuras de diamante.

Posteriormente, se realizó la simulación auto-consistente del sistema acoplado, incorporando el gas precursor H_2 y la ventana de cuarzo. Dado que la presencia del plasma modifica tanto la distribución del campo eléctrico como la frecuencia de resonancia del modo excitado, se llevó a cabo un redimensionamiento fino de la cavidad, mediante un barrido paramétrico, con el fin de mantener la resonancia en 2.45 GHz. Esta etapa se desarrolló siguiendo la metodología establecida en [15].

La Figura 3 muestra la intensidad del campo eléctrico en el instante inicial de la simulación, antes de la formación del plasma. Se utilizó una presión de 20 kPa y una potencia de entrada de 2 kW. Se observa que la intensidad del campo en la base de la cavidad alcanza aproximadamente 1.2 kV/cm, valor suficiente para iniciar la disociación e ionización del hidrógeno molecular a la presión considerada.

La comparación entre las Figuras 2 y 3 indica que la presencia del gas y la ventana de cuarzo modifica ligeramente la distribución espacial del modo TM_{112} , aunque su estructura principal se conserva.

Después de aproximadamente 1 ms desde la aplicación de la potencia de microondas, el plasma alcanza un estado

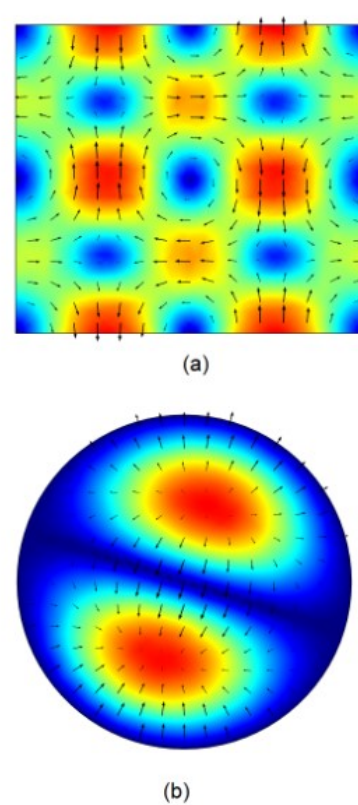


Figura 2: Distribución del campo eléctrico del modo TM_{112} en la cavidad sin plasma: (a) plano $y = 0$, (b) plano $z = 0$. La intensidad del campo se representa con un mapa de colores, y la dirección con flechas negras.

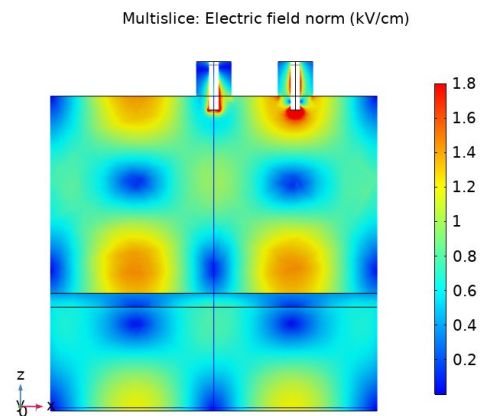


Figura 3: Intensidad del campo eléctrico del modo TM_{112} en la cavidad con gas, en el instante inicial de la simulación (plano xz).

estacionario. La Figura 4 muestra (a) la distribución espacial de la densidad electrónica y (b) la distribución de temperatura electrónica en dicho estado. Se observan claramente dos regiones de máxima intensidad localizadas en la base de la cavidad, cuyas posiciones coinciden con los máximos del campo eléctrico previamente obtenidos en ausencia de

plasma (ver Figura 3).

Como se anticipó, estas regiones tienen igual tamaño y concentración electrónica, resultado directo del uso de dos puertos de inyección desfasados π , lo cual genera una configuración de campo adecuada para una activación doble y equilibrada del plasma. Los electrones generados en estas zonas juegan un papel esencial en la disociación del gas precursor en hidrógeno atómico, así como en su posterior ionización, lo que permite sostener el plasma durante el proceso.

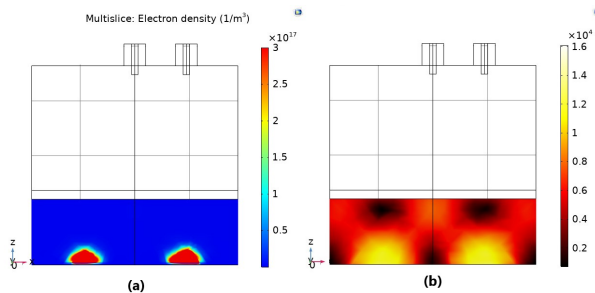


Figura 4: **Distribución espacial de:** (a) la densidad electrónica (m^{-3}), y (b) la temperatura electrónica (K).

La Figura 5 presenta la distribución espacial de la densidad de hidrógeno atómico. Se observa una correspondencia clara entre las zonas de mayor concentración de hidrógeno atómico y las regiones de alta densidad electrónica, lo cual es consistente con el mecanismo de disociación del H_2 inducido por colisiones electrónicas energéticas.

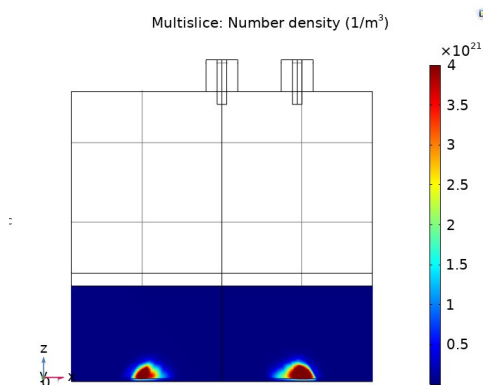


Figura 5: **Distribución espacial de la densidad de hidrógeno atómico** (m^{-3}).

Estos resultados confirman la generación de dos regiones activas de plasma de igual tamaño y concentración, lo cual constituye una condición favorable para procesos de deposición uniforme. Aunque en este estudio no se incluye el metano, el perfil de especies activas sugiere que las condiciones simuladas podrían resultar adecuadas para la posterior formación de radicales carbonados si se incorporara dicho precursor.

4. Conclusiones

Se realizó la simulación tridimensional de un reactor de microondas para la generación de plasma de hidrógeno, utilizando el modo resonante TM_{112} y dos puertos de inyección ubicados diametralmente opuestos (separados acimutalmente por π radianes), alimentados con señales desfasadas π radianes.

Los resultados muestran que esta configuración permite generar dos zonas de plasma de igual tamaño y concentración cerca del sustrato, lo cual representa una condición favorable para procesos de deposición uniforme. Esta propiedad hace que el diseño propuesto sea adecuado para su futura implementación tecnológica en reactores de deposición asistidos por microondas.

Asimismo, los perfiles obtenidos de densidad electrónica, temperatura del gas y concentración de especies del hidrógeno proporcionan información clave sobre el comportamiento físico del sistema y su dependencia con variables de control como la presión de operación y la potencia de entrada. Estos resultados constituyen una base fundamental para el diseño y optimización experimental de procesos de deposición de diamante basados en plasma.

En conjunto, los modelos acoplados de campo electromagnético, transporte de cargas, reacciones químicas y transferencia de calor permiten una descripción auto-consistente del comportamiento del plasma. Esta estrategia de simulación representa una herramienta valiosa para predecir y ajustar las condiciones de operación en sistemas de deposición por microondas.

Financiación y agradecimientos

Este trabajo se realizó con el apoyo del Departamento Administrativo de Ciencia, Tecnología e Innovación, Colombia, y Ministerio de Ciencia Tecnología e Innovación, Colombia, a través de la convocatoria N°852– 2019 (Código externo del proyecto: 1102-852-71985) y la Universidad Industrial de Santander (UIS), Colombia (Código interno del proyecto: 9482-2665).

Contribuciones a la autoría

Primer autor: revisión y edición. Segundo autor: metodología. Segundo autor: investigación, análisis de datos. Tercer autor: conceptualización. Cuarto autor: escritura, borrador original. Quinto autor: conceptualización, escritura, revisión y edición.

Declaración de conflicto de interés

Los autores manifiestan no tener conflictos de interés.

Referencias

- [1] K.K. Chattopadhyay, P. Mitra, S. Chaudhuri, A.K. Pal, "Grain boundary barrier height in polycrystalline dia-

- mond films produced by DC plasma deposition of CO₂ and hydrogen", *Materials Letters.*, vol. 18, pp. 313-317, 1994
- [2] Zhitomirsky. L. Gal-or, A. Khan, M.D. Spang, "Electrolytic PZT films", *J. Mater. Sci.*, vol. 32, pp. 803-807, 1997.
- [3] V Fleury, "Branched fractal patterns in nonequilibrium electrochemical deposition from oscillatory nucleation and growth", *Nature*, vol. 390, pp. 145-148, 1997.
- [4] Abdul Wasy Zia, Martin Birkett. "Deposition of diamond-like carbon coatings: Conventional to non-conventional approaches for emerging markets", *International Journal of Refractory Metals & Hards*, vol. 78, pp. 107-122, 2019.
- [5] Ankit Tyagi *et al* J. "A critical review of diamond like carbon coating for wear resistance Applications", *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research*, vol. 222, pp. 242-248, 2004.
- [6] Nicolas Martin. Jean-Marc Cote, Joseph Gavaille, Jean-Yves Rauch. "Titanium oxynitride thin films by the reactive sputtering process with an independent pulsing of O₂ and N₂ gases". *Thin Solid Films*, vol. 796, pp. 140340, 2024.
- [7] Nosheen Farooq *et al*, "Recent trends of titania (TiO₂) based materials: A review on synthetic approaches and potential applications." *Journal of King Saud University- Science*, vol. 36, pp. 103210, 2024.
- [8] Priscilla Brosler, Rui F. Silva, Joao Tedim, Filipe J. Oliveira, "Electroconductive silicon nitride-titanium nitride ceramic substrates for CVD diamond electrode deposition." *Ceramics International* vol. 49, pp. 36436-36445, 2024. 2023.
- [9] Duy Phong Pham *et al*, "In-situ PECVD-based stoichiometric SiO₂ layer for semiconductor devices." *Optical Materials*. vol. 137, pp. 113536. 2023.
- [10] J.J. *et al*, "A novel microwave plasma reactor with a unique structure for chemical vapor deposition of diamond films." *Diamond and Related Materials*. vol. 42, pp. 28-32, 2014.
- [11] E.E. Ashkinazi, *et al*, "Effect of Crystal Structure on the Tribological Properties of Diamond Coatings on Hard-Alloy Cutting Tools". *Journal of Friction and Wear*. vol. 38, pp. 252-258, 2017.
- [12] N Derkaoui *et al*, "Determining electron temperature and electron density in moderate pressure H₂/CH₄ microwave plasma." *Journal of Physics D: Applied Physics*. vol. 470, pp. 205201, 2014.
- [13] AV Khomich, *et al* "International Conference on Mechanical, System and Control Engineering (ICMSC)." *IEEE*. pp. 11-15, 2017.
- [14] M.Y. Chernykh, *et al* "GaN-based heterostructures with CVD diamond heat sinks: A new fabrication approach towards efficient electronic devices." *Appl. Mater. Today*. vol. 26, pp. 101338, 2022.
- [15] F Silva *et al*, "Microwave engineering of plasma-assisted CVD reactors for diamond deposition." *Condens. Matter* vol. 21, pp. 3642026, 2009.
- [16] E. A. Orozco, *et al* "Computational study of a microwave plasma reactor based on the TM₁₁₂ mode for diamond deposition." *Applied Physics A*. vol. 129, pp. 842, 2023.
- [17] M Fünner, C Wild, P Koidl, "Simulation and development of optimized microwave plasma reactors for diamond deposition." *Surface and Coatings Technology*. vol. 116, pp. 853-862, 1999.
- [18] J.-S. Yoon, *et al* "Cross Sections for Electron Collisions with Hydrogen Molecules." *J. Phys. Chem. Ref. Dat.* vol. 37, pp. 913-931, 2008.
- [19] Plasma Data Exchange Project, <https://nl.lxcat.net/home/>