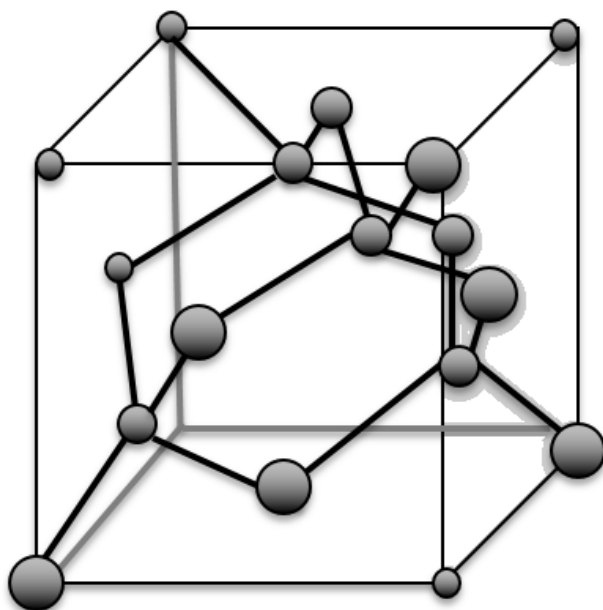




CHALMERS



Inventering av livscykeldata för syntetisk diamanproduktion

Examensarbete inom högskoleingenjörprogrammet Kemiteknik

ELMA ALCEVSKA
EMIR TRGO

Institutionen för Teknikens Ekonomi och Organisation
Avdelningen för Miljösystemanalys
CHALMERS TEKNISKA HÖGSKOLA
Göteborg, Sverige
Rapport nummer E2018:030

Rapport nr. E2018:030

Inventering av livscykeldata för syntetisk diamantproduktion

Elma Alcevska

Emir Trgo

Handledare: Anna Furberg

Examinator: Rickard Arvidsson

Institutionen för Teknikens Ekonomi och Organisation
Avdelningen för Miljösystemanalys
Chalmers Tekniska Högskola
Göteborg, Sverige 2018

Inventering av livscykeldata för syntetisk diamanproduktion
Elma Alcevska
Emir Trgo

© Elma Alcevska, Emir Trgo, Sverige, 2018

Examensarbete E2018:030

Institutionen för Teknikens Ekonomi och Organisation
Avdelningen för Miljösystemsanalys

Chalmers Tekniska Högskola
SE-412 96 Göteborg
Sverige
Telefon: + 46 (0)31-772 1000

Omslag: Bilden visar strukturen för en diamanmolekyl.

Chalmers Reproservice
Göteborg, Sverige 2018

Förord

Examensarbetet genomfördes på Chalmers Tekniska Högskola och är den del som avslutar kemiingenjörsutbildningen. Projektet innefattar 15 högskolepoäng och har utförts under tio veckor under vårterminen 2018. Arbetet omfattar de två första stegen i en livscykelanalys av syntetisk diamanproduktion.

Vi vill tacka vår examinator Rickard Arvidsson, som gav oss idén och möjligheten att kunna göra det här arbetet. Vi vill även tacka vår handledare, Anna Furberg, för hennes kloka tankar, råd och tips.

Göteborg, juni 2018

Elma Alcevska
Emir Trgo

Sammanfattning

Hårda och slitstarka verktyg har en stor betydelse för tillverkningsindustrin. Dessa verktyg används exempelvis inom gruvindustrin och som skärverktyg. En stor del av verktygen som används består av knappa metaller. Detta leder fram till frågan om det finns ett mer vanligt förekommande material som kan uppfylla samma funktion och som kan ersätta verktyg baserade på knappa metaller utan att det uppstår förskjutningar av problemet från resurs- till miljöproblematik. Syftet i denna studie är att beskriva produktionen av syntetisk diamant och ta fram livscykelinventeringsdata för de två vanligaste processerna: Hot Filament Chemical Vapour Deposition (HF-CVD) och Microwave Chemical Vapor Deposition (MW-CVD). Därför genomfördes de två första delarna av en livscykelanalys (LCA), det vill säga mål och omfattning samt inventeringsanalys. Som funktionell enhet valdes $1 \mu\text{m}\cdot\text{cm}^2$ baserat på hur produktionen är utformad samt tillgängliga data inom litteraturen. Enheten innebär att produktionen av ett $1\text{-}\mu\text{m}$ -yttskikt på 1 cm^2 yta. Resultaterande inventeringsdata visar att för MW-CVD behövs omkring tre gånger mer elektricitet än vad som krävs för HF-CVD per $\mu\text{m}\cdot\text{cm}^2$ av syntetisk diamant. Däremot för MW-CVD går mindre vätgas in än för HF-CVD, dock förbrukas märkbart lite för båda dessa. Inventeringsdata kan användas för vidare studier, såsom fullständiga LCA-studier av syntetisk diamant och för jämförande studier mellan de verktyg som främst används idag och diamant-verktyg. Angående resursproblematiken kopplat till de verktyg som främst används idag så skulle utökad användning av diamant inte riktigt minska användningen av knappa metaller, då det utgör själva verktyget. HF-CVD och MW-CVD processen använder sig av substratet SiAlON, vilket inte är knappa metaller, men då man fortfarande använder sig av hårdmetaller i verktyget försvinner inte helt problemet. En utökad inventeringsanalys för hur den tjocka och den tunna filmen appliceras på ett verktyg rekommenderas för att få en större överblick och genomföra en hel LCA-studie.

Abstract

Hard and durable tools are of major importance to the manufacturing industry. These tools are used, for example, in the mining industry and as cutting tools. A large share of the tools used consist of scarce metals. This leads to the question of whether there is a more common material that can fulfil the same function and replace tools based on scarce metals without shifting the problem from resource to environmental issues. The purpose of this study is to describe the production of synthetic diamond and to provide life cycle inventory data for the two most common processes: Hot Filament Chemical Vapor Deposition (HF-CVD) and Microwave Chemical Vapor Deposition (MW-CVD). Therefore, the first two parts of a life cycle analysis (LCA), i.e. the goal and scope definition as well as the inventory analysis, were conducted. As a functional unit, $1 \mu\text{m}\cdot\text{cm}^2$ was chosen based on the production and available data in the literature. The unit means the production of 1- μm surface layer of 1 cm^2 surface. The resulting inventory data shows that for the MW-CVD, about three times more energy is required than for the HF-CVD per $\mu\text{m}\cdot\text{cm}^2$ of synthetic diamond. MW-CVD has less hydrogen as input compared to HF-CVD, however a small amount is being consumed for both processes. The inventory data can be used for further studies, such as complete LCA studies of synthetic diamond and for comparative studies between the tools used today and diamond tools. Regarding resource problems related to the tools used today, increased use of diamonds would not really reduce the use of scarce metals, as it is the tool itself. The HF-CVD and MW-CVD processes use the SiAlON substrate, which is not scarce metals, but still using hard-metal in the tool does not completely solve the problem. An extended life cycle inventory analysis for how the thick and thin film is applied to a tool is recommended to get a better overview and also to complete an entire LCA study.

Innehållsförteckning

1. Inledning.....	1
1.1 Syfte.....	2
1.2 Avgränsningar.....	2
1.3 Precisering av frågeställningen	2
2. Metod	3
2.1 Funktionell enhet.....	4
3. Produktionsprocesser för syntetisk diamant	5
3.1 High-Pressure High-Temperature	6
3.2 Chemical Vapor Deposition.....	6
3.2.1 Hot Filament Chemical Vapor Deposition.....	10
3.2.2 Microwave Plasma Chemical Vapor Deposition.....	12
3.2.3 Combustion Flame Assisted Chemical Vapor Deposition.....	13
3.2.4 Arc Jet Chemical Vapor Deposition	14
4.Resultat.....	15
5. Diskussion	16
6. Slutsats	17
7.Referenser.....	18

1. Inledning

Hårda och slitstarka verktyg har en stor betydelse för tillverkningsindustrin. Det som utgör grunden för dessa verktyg är hårdmetaller. Den vanligaste typen av hårdmetall består av volframkarbidpartiklar som är cementerade med ett bindemedel av kobolt (WC-Co). Idag utgör detta slitstarka material grunden för de verktyg som används inom tillverkningsindustrin och det har många tillämpningar inom exempelvis gruvdrift och som skärverktyg. Det förekommer även i medicinska verktyg såsom exempelvis tandläkarborrar [1]. I dagsläget är 85% av alla skärande verktyg täckta av något sorts material som gör det mer slitstarkt och ytbelagda skärverktyg har använts i över 50 år [2].

Både volfram och kobolt är knappa metaller baserat på deras låga koncentration i jordskorpan [3]. De är även inkluderade på den Europeiska unionens lista över kritiska råmaterial, baserat på deras knappa tillgång och ekonomiska betydelse [4]. Behovet av metaller och mineraler är ständigt aktuellt, men då tillgången av kritiska metaller är begränsad kan det leda till resursbrist. Det här leder till frågan om det är möjligt att ersätta dessa knappa metaller med andra mer förekommande material som fortfarande uppfyller samma funktion. I detta sammanhang har kolbaserade material föreslagits [5].

Diamant är, tack vare dess unika kristallstruktur, ett av de hårdaste material som människan känner till. När det gäller hårdhet är diamant ca fyra gånger hårdare än WC-Co enligt Vickersskalan, som är den vanligaste sättet att mäta hårdhet på slitstarka material [1]. Det finns flera andra egenskaper som gör diamant till ett unikt material. Exempelvis har diamant den högsta kritiska dragspänningen (den punkt då materialet bryts upp) och en väldigt hög värmeledningsförmåga [6]. Diamant har länge uppfattats som ett dyrt material, men då man lyckats framställa diamant på syntetisk väg har det blivit allt mer tillgängligt och kostnadseffektivt [7]. Diamant förknippas ofta med en ädelsten, men tack vare dess unika egenskaper är den också lämplig för många forsknings- och industriella applikationer [7].

De framsteg som har gjorts inom diamantproduktion gör att det nu är möjligt att använda diamant som ett avancerat tekniskt material. Det finns två traditionella processer för att tillverka syntetisk diamant: *High Pressure High Temperature* (HPHT), på svenska högtrycks-högtemperaturprocessen, och *Chemical Vapour Deposition* (CVD), på svenska kemisk ångdeponering. Tillverkning av diamantverktyg har dock genomgått en markant utveckling sedan uppfinningen av den syntetiska diamanten i mitten av 1950-talet med HPHT [7]. CVD-diamant är accepterad som ett slitstarkt material tack vare dess hållbarhet, höga värmeledningsförmåga, styrka samt styvhet. På 1990-talet gjordes det stora genombrott med CVD, som använder sig av relativt sett lägre tryck, exempelvis 3-4 kPa jämfört med HPHT som använder 5-6 GPa. Detta ledde till en kommersialisering av CVD-diamantbelagda skärverktyg [6]. HPHT används idag fortfarande i stor utsträckning, men ger inte diamanter med lika hög kvalitet som CVD [8]. Studiens fokus ligger på CVD-processen, och mer specifikt två varianter av CVD: *Hot Filament Chemical Vapor Deposition* (HF-CVD) och *Microwave Chemical Vapor Deposition* (MW-CVD), då dessa är vanligast inom industrin idag [9].

Diamantverktyg används inom flera olika industriella områden och möjliggör ett snabbare och mer precist arbete. Diamant har även längre hållbarhet än andra verktyg vilket leder till en längre livslängd [7]. Om diamantverktygen jämförs med exempelvis hårdmetallverktyg har diamantverktygen så mycket som 10 till 20 gånger längre livslängd [10]. Efterfrågan på effektivare verktyg är ständigt aktuell och tack vare framgångsrik forskning inom

diamansyntes har man kunnat applicera diamantbeläggningar på verktyg. Möjligtvis skulle diamant kunna vara ett alternativ till WC-Co och ett steg på vägen mot att minska resursproblematiken. För att analysera denna möjlighet behöver miljöpåverkan från tillverkning av syntetisk diamant utredas, vilket ännu inte har gjorts. En utredning av miljöpåverkan krävs för att undvika en potentiell problemförskjutning från resursproblematik till olika typer av miljöproblematik.

1.1 Syfte

Syftet med denna studie är att beskriva typisk produktion av syntetisk diamant samt genomföra de två första stegen i en livscykelanalys (LCA):

- i) formulering av mål och omfattning, och
- ii) inventeringsanalys

för att ta fram livscykelinventeringsdata som möjliggör vidare LCA-studier av syntetisk diamant. Arbetet inkluderar en noggrann beskrivning av tillverkningsprocessen samt information om olika kemitekniska parametrar såsom tryck och temperaturer.

1.2 Avgränsningar

Arbetet är begränsat till en inventering av de två CVD-processerna (HF-CVD och MW-CVD) då dessa är vanligast inom industrin för att producera syntetisk diamant för användning som verktyg. Det förekommer även andra CVD-processer, men eftersom de ännu inte uppnått samma kostnadseffektivitet i stor skala kommer de endast att beskrivas kort. Arbetet är vidare begränsat till en typisk produktion av en tunn syntetisk diamantfilm på ett substrat (se avsnitt 3.2) för tillämpning som exempelvis skärnings- och borrarings-industrin. Kapitalvaror har inte inkluderats i inventeringsanalysen. Data i denna rapport kommer främst från vetenskaplig litteratur men i vissa fall även från rapporter och hemsidor.

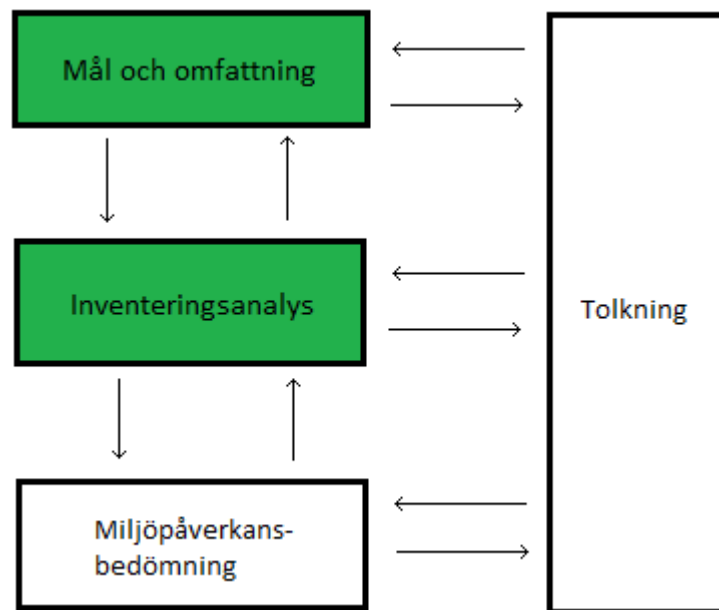
1.3 Precisering av frågeställningen

De specifika frågor som denna studie främst ämnar besvara är:

- Hur går produktionen av syntetisk diamant till?
- Vilka är de typiska produktionsprocesserna?
- Vad behövs för dessa i form av material- och energianvändning?
- Hur ser typiska livscykelinventeringsdata ut för produktion av syntetisk diamant relaterad till en funktionell enhet?

2. Metod

LCA är en miljösystemanalytisk bedömningsmetod som används för att beräkna produkters och tjänsters miljöpåverkan, från utvinning av råvarumaterial, produktion och användning till avfallshandling (så kallad vagg till grav). Studier kan även begränsas till delar av livscykeln; från råvaruutvinning till produktionen (så kallad vagg till port). En LCA följer en procedur som är standardiserad enligt ISO 14040 [11]. Det finns fyra steg inom LCA (Figur 1). I den här studien genomförs endast de två första stegen (markerade med grönt i Figur 1) varför dessa kommer att beskrivas mer detaljerat i detta avsnitt.



Figur 1. De fyra stegen i en livscykelanalys [11]. De grönmärkerade stegen är de som appliceras i denna studie.

I det första steget formuleras målet med studien, vilket innebär en beskrivning av vad syftet med studien är och vem som är studiens mottagare. Det första steget innefattar även en beskrivning av hur resultaten ska användas och definition av den funktionella enheten, som beskriver produktens funktion. Exempel på funktionella enheter är 1 kg stål, 1 liter bensin och 1 person-kilometer. En systemgräns beskriver vilka processer som inkluderas i det studerade systemet och definieras med avseende på tid, rum och exempelvis huruvida kapitalvaror inkluderas eller inte. Kapitalvaror kan vara byggnader eller fordon som använts för att producera den produkt som studeras.

Det andra steget i LCA är inventeringsanalysen. Detta innebär att produktionssystemet beskrivs, att ett flödesschema skapas för att visualisera systemet samt att data samlas in för exempelvis material- och energianvändning samt för eventuella biprodukter. Den data som insamlas består av de inputs (det som går in i systemet) och outputs (det som går ut ur systemet) vilka korsar den definierade systemgränsen. All data relateras till den funktionella enheten som definierats i det första steget och resultatet utgör livscykelinventeringsdata.

I det tredje steget kvantifieras miljöpåverkan baserat på resultatet från inventeringsanalysen. Detta kan sedan knytas an till hur stor påverkan blir på miljön, resurser samt människans

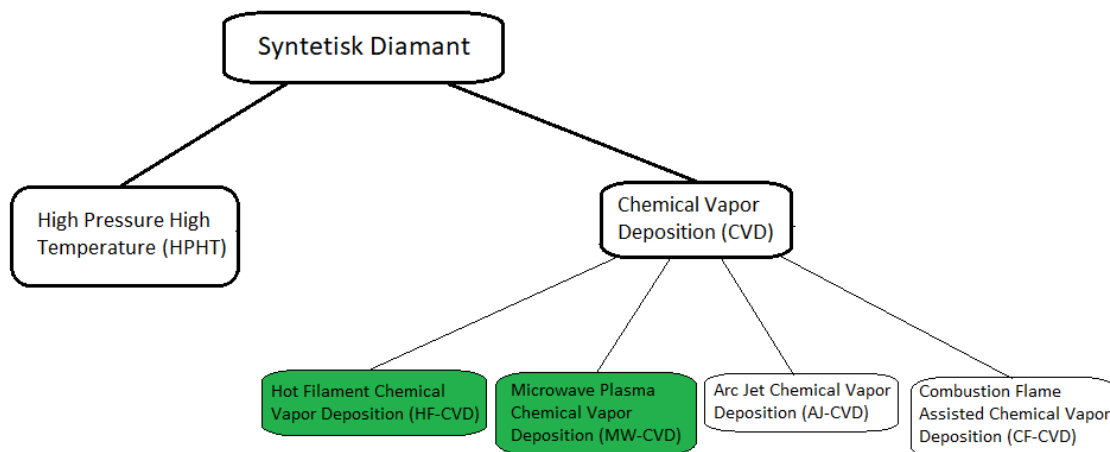
hälsa. I det fjärde steget tolkas resultatet och bearbetas för att redovisas på ett tydligt sätt och då uppfylla det syfte som definierats i det första steget.

2.1 Funktionell enhet

Valet av den funktionella enheten i just denna studie baseras på funktionen hos produkten och vad som kan bli en bra referensenhet till vilken man kan relatera input- och outputdata. Produktion av syntetisk diamant med CVD-processen sker på ett substrat med en viss area, där ett diamantlager växer till en viss tjocklek. Baserat på hur produktionen är utformad samt tillgängliga data inom litteraturen valdes den funktionella enheten till $1 \mu\text{m}\cdot\text{cm}^2$. Enheten innebär alltså produktionen av ett $1\text{-}\mu\text{m}$ -ytskikt på 1 cm^2 yta. Inventeringsdata i form av exempelvis energi som baseras på denna enhet anger alltså hur mycket energi som krävs för att skapa ett $1 \mu\text{m}$ tjockt ytskikt på en yta av 1 cm^2 . Värt att notera är att inputs och outputs är linjärt relaterade till denna funktionella enhet. Det krävs alltså dubbelt så mycket energi för att tillverka $2 \mu\text{m}\cdot\text{cm}^2$ än vad som krävs för $1 \mu\text{m}\cdot\text{cm}^2$.

3. Produktionsprocesser för syntetisk diamant

Det finns två olika huvudtyper av processer för att tillverka syntetisk diamant (Figur 2). HPHT-processen uppfanns på 1950-talet då de första syntetiska bitarna av diamant tillverkades av diamantkorn med hjälp av höga tryck och temperaturer [7]. Detta är en vanlig metod i världen för att producera syntetiska diamanter, främst till smycken, men har även stor industriell användning. Den andra processen för framställning av syntetisk diamant är CVD, där låga tryck används så att kol blir till plasma som sedan fälls ut i form av syntetisk diamant på ett substrat. CVD-tekniken ger väldigt rena och enkla diamantkristaller, vilket är viktigt för diamantens struktur och styrka i verktyget. Detta gör att CVD-diamant passar väldigt bra för verktyg för borrar, skärning, med mera.



Figur 2. En översiktlig bild av olika diamanter. De grönmarkerade processerna är de som denna studie fokuserar på.

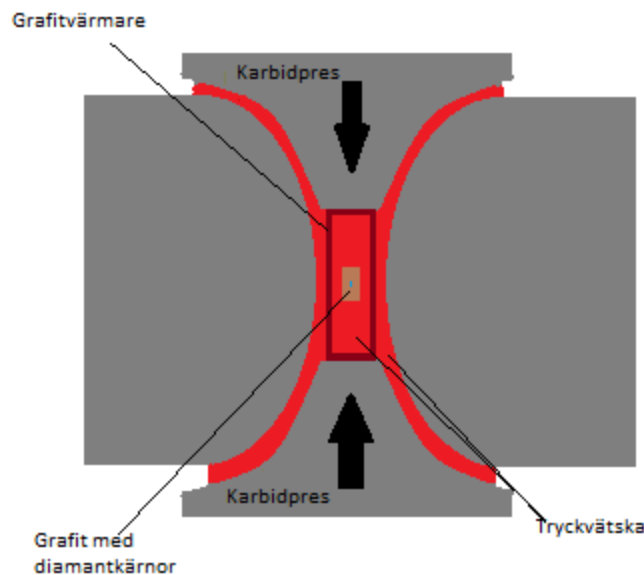
Både HPHT- och CVD-processen används för att tillverka syntetiska diamanter för användning som verktyg men kvaliteten hos den producerade syntetiska diamanter skiljer sig åt [7]. Svårigheten med diamanter är att kolatomerna har en allotropisk karaktär, det vill säga den kan ha olika former såsom grafit och diamant. Detta gör att vid rumstemperatur och atmosfärstryck är diamant inte en stabil form, utan vanligtvis är grafit den stabila fasen av kol.

HPHT producerar en syntetisk diamant som senare mals ned till diamantpulver. Detta diamantpulver blandas sedan med bindemedlet kobolt vilket skapar komposit materialet polykristallin diamant (PCD), vilket innehåller 90% diamant och 10% kobolt. CVD producerar en diamantfilm som består av 99% diamant [12]. Fördelen med CVD-diamant, jämfört med PCD-diamant, är dess högre slitstyrka och hårdhet på grund av diamantskiktets höga renhet då den innehåller 99% diamant mot PCD:s 90%. Vidare har CVD-diamant tre gånger skarpare skärkanter samt tre gånger så hög livslängd jämfört med PCD [12]. Kostnaden för PCD-verktyg är samtidigt ganska hög jämfört med CVD-verktyg. Eftersom PCD-diamant tillverkas med hjälp av kobolt blir PCD-verktygen mindre termiskt stabila och mindre slitstarka. HPHT-processen beskrivs vidare i avsnitt 3.1, medan CVD-processen och dess fyra olika varianter, med fokus på HF-CVD och MW-CVD, beskrivs i avsnitt 3.2.

3.1 High-Pressure High-Temperature

Inom HPHT-processen använder man sig av en kolkälla såsom grafit- eller diamantkorn i en reaktorkammare tillsammans med en metallkatalysator (Figur 3) [13]. Det här betyder alltså att man använder små korn av diamant för att kunna göra en större diamant. Metallkatalysatorn tillsätts i smält form och är vanligtvis en blandning av järn, nickel eller kobolt, vilka är nödvändiga för att sänka processtemperaturen och även öka tillväxthastigheten. Detta minskar den tekniska komplexiteten som annars skulle krävas vid höga temperaturer, vilket underlättar själva processen.

Diamanttillväxten sker vid ett tryck på 5-6 GPa och inom temperaturområdet 1300-1600°C [13]. Det är då diamant är som stabilast, vilket innebär att endast diamant, och inte andra former såsom grafit, bildas. Inom HPHT, precis som för CVD, har kolkällan en högre temperatur än substratet, där diamanttillväxten ska äga rum. Detta medför att kolatomerna diffunderar mot substratet, det vill säga mot kammarens kallare del. En kristallisationsprocess påbörjas där kol binds till diamantkorn och växer till en syntetisk diamant. HPHT-processen innebär alltså inga kemiska reaktioner utan endast en fysikalisk fasövergång.

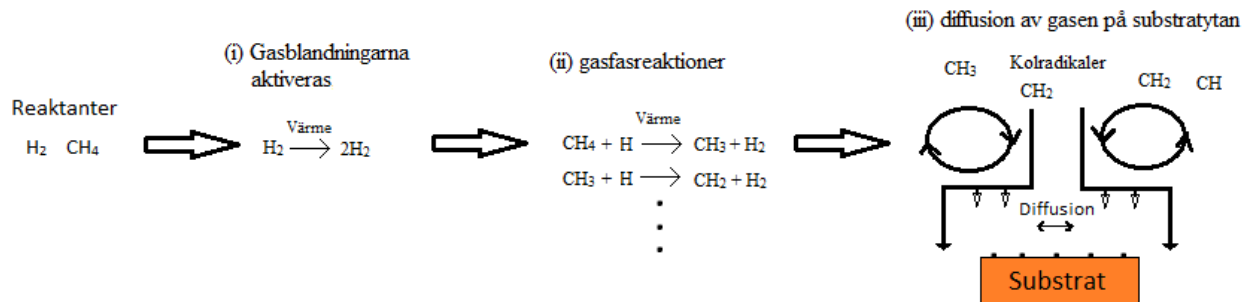


Figur 3. En schematisk beskrivning av HPHT-processen [14].

3.2 Chemical Vapor Deposition

CVD är en kemisk process där man låter en gasformig substans deponeras på en behandlad yta, ett så kallat substrat. Processen kan beskrivas i tre steg: (i) Gasblandningarna aktiveras, (ii) gasfasreaktioner sker och slutligen (iii) diffusion av gasen på substratyten (Figur 4) [15]. Inom diamantproduktion används vanligtvis en gasblandning av vätgas (H_2) och metan (CH_4) med molförhållandet 99:1, men även andra förhållanden kan förekomma. Vätgasen är det mest kritiska ämnet för att processen ska ske medan metanet, eller andra kolväten som används, endast fungerar som kolkälla.

Vätgasens huvudsakliga funktion är att bryta upp kolbindningarna på diamantkärnan. Först bryts vätgasen själv upp till atomärt väte (H_1) vilket i sin bryter upp metan till CH -radikaler. Vätet förhindrar uppkomsten av grafit, vilket gör att diamantstrukturen blir väldigt ren (grafitfri). En allmän reaktionsformel för hela CVD-processen kan beskrivas som:

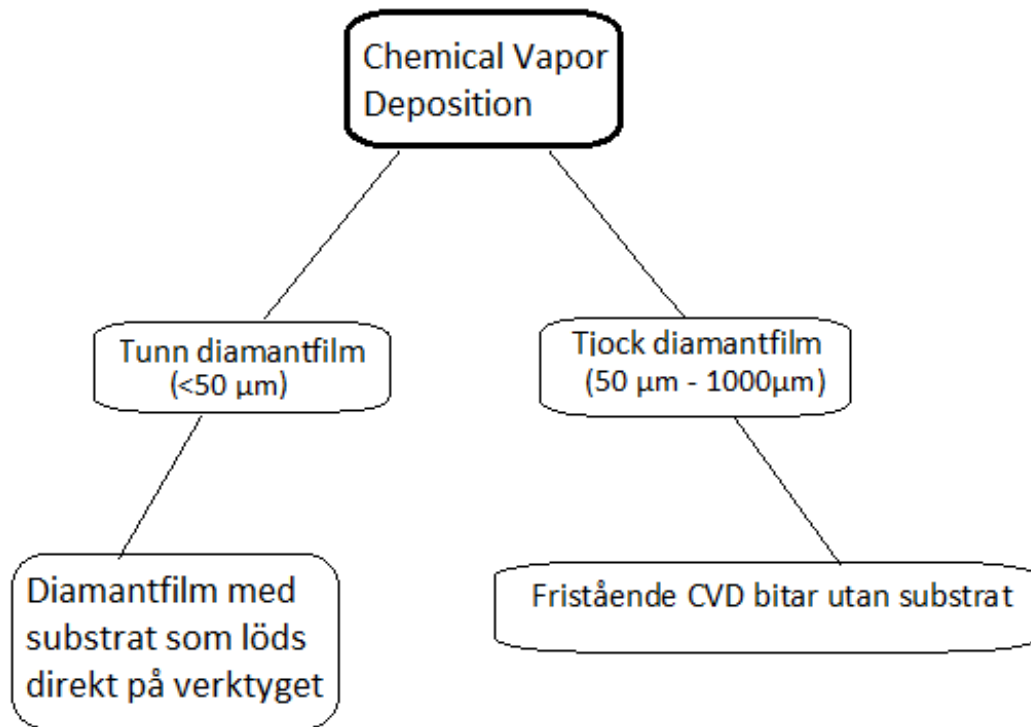


Figur 4. En översiktlig bild över de olika reaktionsförlopp som sker inom CVD processen [16].

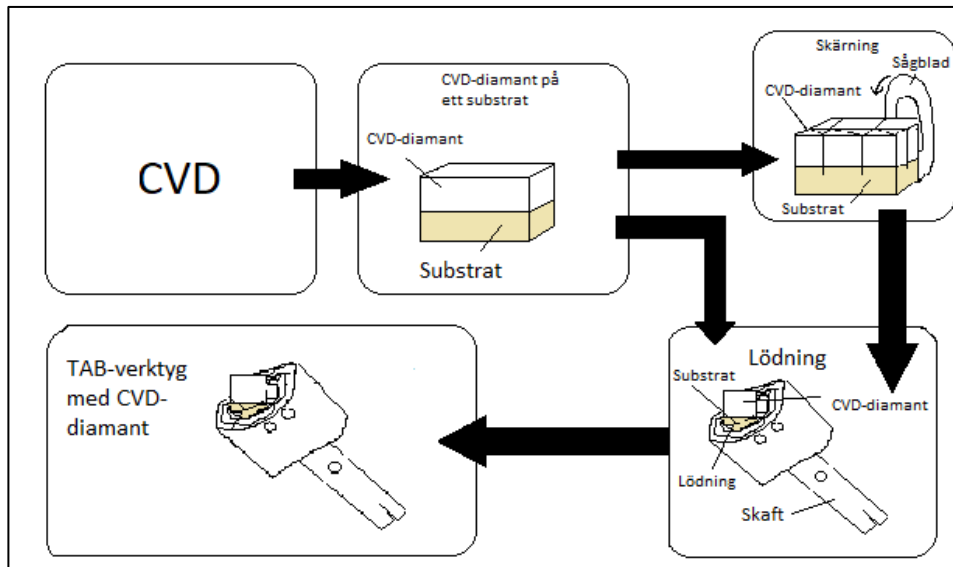
Utöver en viss gassammansättning och gastemperatur finns det även krav på substratet för att en bra diamanttillväxt ska ske [17]. Dessa krav involverar valet av substrat, substratets förbehandling och substratets temperatur. De mest lämpliga substraten är kiselaluminiumnitrid (SiAlON), molybden och WC-Co eftersom substratet måste tåla höga temperaturer. SiAlON är mycket vanlig som substrat inom både HF-CVD och MW-CVD eftersom den lämpar sig för så väl diamantdeponering. Anledningen till detta är att SiAlON inte reagerar med de omgivande gaserna under själva processen. Substraten har ett temperatursintervall på 700-1100°C [17]. Detta temperaturområde är det mest optimala eftersom deponeringshastigheten minskar vid lägre temperatur och uppbyggnaden av grafit ökar vid högre temperatur. Substratets temperatur kan vara svår att kontrollera då reaktorns temperatur, vilken i sin tur bestämmer substratets temperatur, beror på energitillförsel, tryck och gasernas temperatur.

Det finns två olika typer av diamantfilmer som kan appliceras på ett verktyg med CVD: antingen en tjock eller en tunn diamantfilm [18] (Figur 5). Diamantfilmer kan vara fristående (tjocka) skikt som då har frigjorts från substratet. De kan också vara tunna diamantskikt och dessa sitter då kvar på sina substrat. Vad som definieras som en tunn eller tjock film kan variera men vanligtvis har tunna skikt en tjocklek på <50 µm medan tjocka skikt är 50-1000 µm. Diamantfilmen kan sedan sammansvetsas på ett verktyg [19].

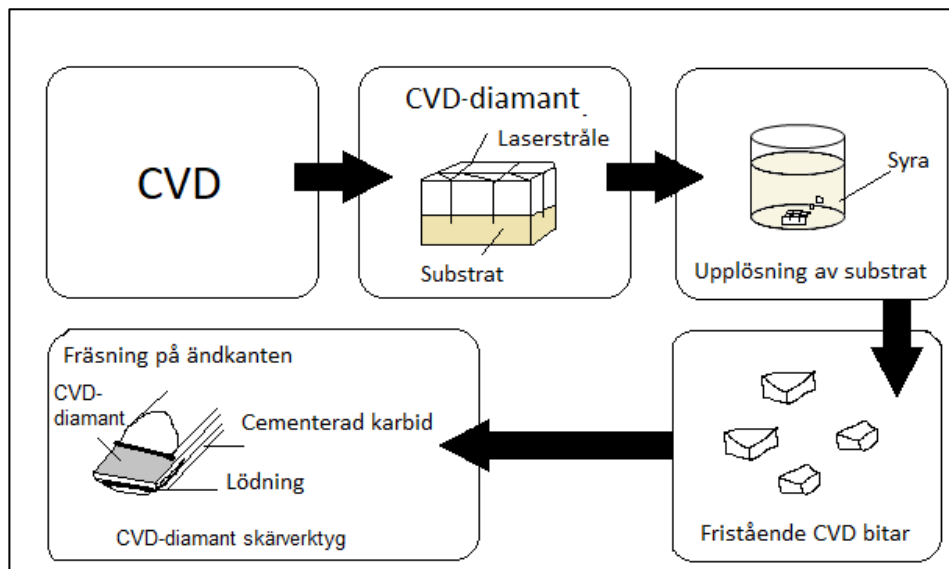
Både tjocka och tunna filmer tillverkas med HF-CVD-processen, men även med MW-CVD processen. I Figur 6 och 7 illustreras dessa två sätt för att tillverka tunna och tjocka diamantfilmer. Tjocka diamantfilmer har använts för att förbättra bland annat PCD-verktyg som exempelvis i industriella borrar. Tunna filmer kan vara mer användbara för mindre verktyg och arbete fortgår för att förbättra deras kvalitet [10]. Tunna filmer är väldigt anpassningsbara till verktyg som har oregelbundna former. Det är svårt att säga vilken som är den mest använda diamantfilmen inom verktygsindustrin då detta till stor del beror på verktygets geometri.



Figur 5. De två olika typerna av diamantfilmer som kan tillverkas med CVD och de två olika sätten de kan appliceras på en verktygskropp. Det som är blåmarkerat är det som fokuseras på i denna studie [6].



Figur 6. En översiktlig bild över hur den tunna diamantfilmen skärs i bitar och sedan löds fast på verktyget [20].



Figur 7. En översiktlig bild över hur den tjocka diamantfilmen separeras från substratet, skärs till mindre bitar och sedan löds fast på verktyget [20].

Inom CVD-processen beror löslighet, temperatur och den interna energin mest på den excitationemetod som appliceras, det vill säga, vilken metod för uppvärmning som används för processen. Det är främst valet av uppvärmningsmetod som skiljer de olika CVD-processerna åt. Det finns många olika tekniker inom CVD och de fyra vanligaste CVD-teknikerna kommer beskrivas här, vilka är följande: HF-CVD, MW-CVD, Combustion flame CVD (CF-CVD) och Arc jet CVD (AJ-CVD) [21].

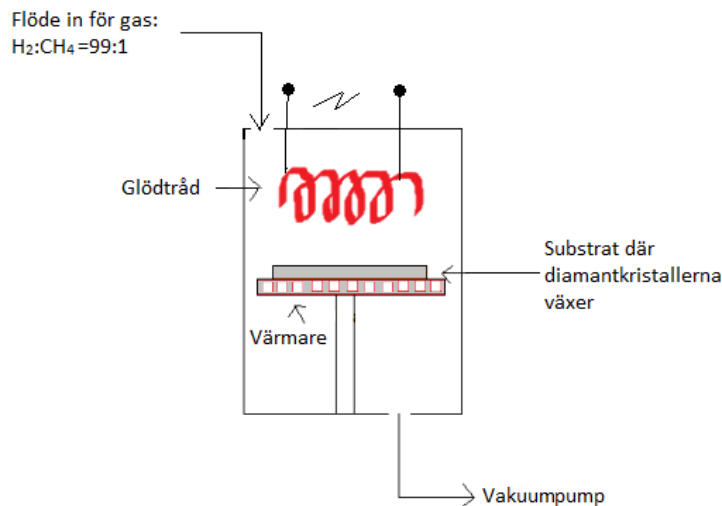
Vilken av dessa fyra processer som tillämpas beror på vilken applikation som eftersträvas. Enligt Tabell 1 är de fyra vanligaste applikationsområdena skärande verktyg samt elektroniska, optiska och termiska tillämpningar. Termiska applikationer återfinns inom värmeledning, optiska applikationer utgörs av spektroskopi och IR-sensorer medan elektroniska applikationer har sin användning inom exempelvis mikrovågsförstärkare [17]. Alla processerna kan tillverka diamantfilmer för skärverktyg, däremot är HF-CVD den som är mest lämplig (Tabell 1), då den är väldigt kostnadseffektiv. Eftersom MW-CVD är så vanlig inom industrin och kan användas för skärverktyg så har även den inkluderats i studien.

Tabell 1. De fyra olika CVD-processerna och deras applikationer. Ett stort markerat X visar den tillämpning processen är mest lämpad för baserat på dess egenskaper. Ett litet x visar att processen fungerar för den applikationen, men är inte så lämplig [17]. *CF-CVD-processen är generellt mest lämpad på laboratorieskala och inte industriellt då den är väldigt dyr.

Applikation	Hot Filament Chemical Vapor Deposition	Microwave Plasma Chemical Vapor Deposition	Combustion Flame Assisted Chemical Vapor Deposition*	Arc Jet Chemical Vapor Deposition
Skärverktyg	X	x	x	x
Elektronisk	-	X	x	-
Optisk	-	X	x	x
Termisk	x	X	x	X

3.2.1 Hot Filament Chemical Vapor Deposition

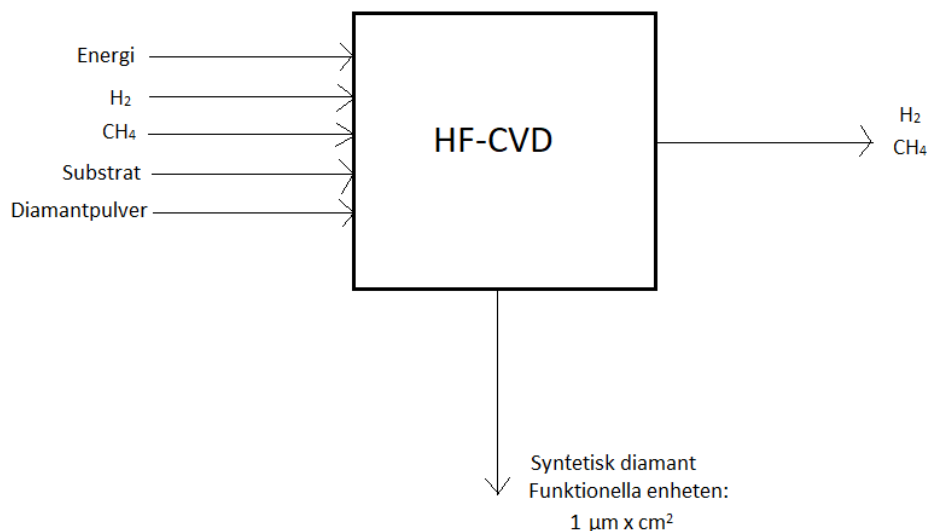
HF-CVD går ut på att kolvätena är nära en uppvärmd glödtråd (eng. *filament*) intill ett substrat (Figur 8). Den varma glödtråden gör att kolvätena bildar ett plasma som behövs för att bilda kolväte- och atomväteradikaler. Sönderfallet sker vid trycket 3-4 kPa och när temperaturen hos glödtråden är >2000°C. Det uppvärmda substratet har då en temperatur på 700-1000°C. Substratet befinner sig väldigt nära glödtråden med ca 5-20 mm avstånd. Substratet förbehandlas genom exempelvis slipning med en diamantpulversuspension genom ultraljudsbad [22]. Detta kontaminerar substratyten med små diamantpartiklar, vilket ökar tillväxthastigheten i den tidiga tillväxtfasen. Glödtråden är gjord av antingen wolfram, tantal eller rhenium [17].



Figur 8. En schematisk beskrivning av HF-CVD processen [17].

Den största fördelen med HF-CVD-processen är att den enkelt kan skalas upp [17]. Utrustningen är även ganska billig jämfört med de andra processerna, vilken gör den passande för industriell skala. Diamanttillväxten sker på stor yta och diamantfilmerna som produceras blir väldigt jämna. Den största nackdelen med denna process är dess förhållandevis låga tillväxthastighet som ligger på ca 1 $\mu\text{m}/\text{h}$.

Typiska värden för en HF-CVD är ett inflöde av H_2 0.478 l/min och 0.00464 l/min för CH_4 vid en tillväxthastighet på 1.3 $\mu\text{m}/\text{h}$ och tillväxtarea på 8 cm^2 [20]. Effekten hos reaktorn är 0.3 kW. Andelen kol som omvandlas till diamant anges som Carbon Conversion Efficiency (kolkonverteringseffektivitet), vilket förkortas CCE och är 2.5% för HF-CVD. Nedan visas ett flödesschema för HF-CVD processen (Figur 9). De beräkningar som genomfördes för att relatera denna data till den funktionella enheten redovisas i Appendix.

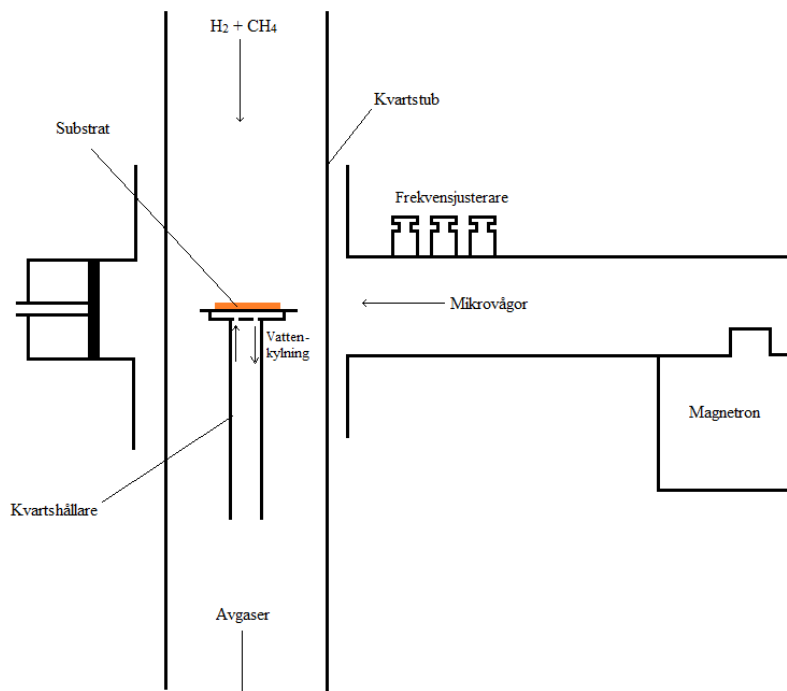


Figur 9. Flödesschema för HF-CVD-processen.

3.2.2 Microwave Plasma Chemical Vapor Deposition

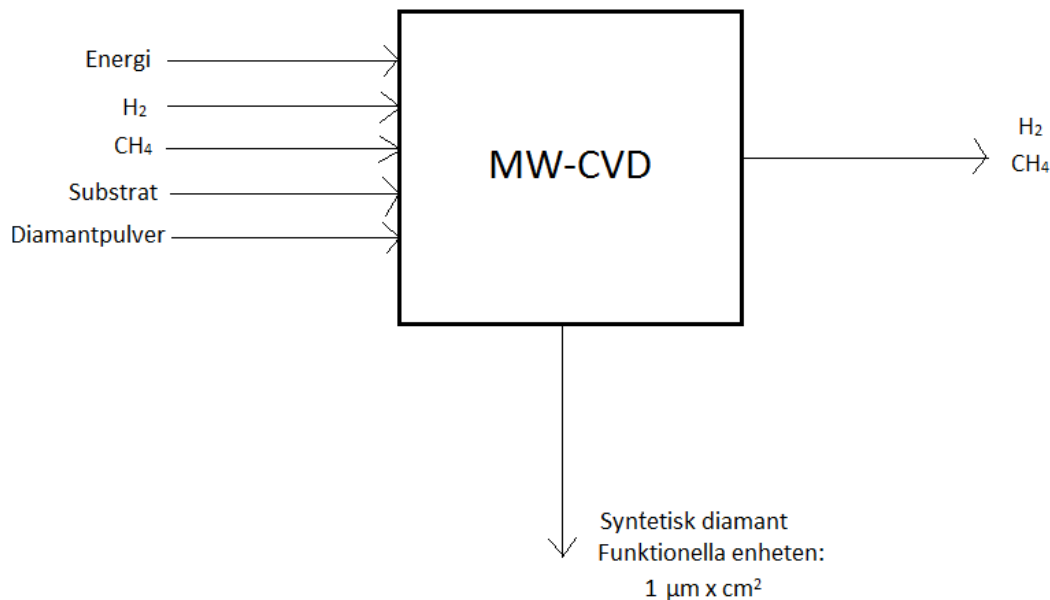
En annan vanlig teknik för att framställa syntetisk diamant är MW-CVD. Inom denna process förs H_2 och CH_4 , precis som i HF-CVD processen, in i en kvartstub där det kommer i kontakt med ett substrat, vilket hålls upp av en kvartshållare. Den största fördelen med MW-CVD är att väldigt rena diamantfilmer produceras, dock så har denna process en ganska komplex och dyr utrustning vilket gör att den är problematisk att skala upp. Tillväxthastigheten är något högre än för HF-CVD. Då MW-CVD framställer väldigt rena diamantfilmer är den främst användbar för att tillverka elektroniska, optiska och termiska applikationer. MW-CVD använder sig av blandningen $H_2:CH_4$ [17]. En magnetron används för att generera mikrovågor, vilka justeras med frekvensjusterare som sedan värmer upp processgaserna i reaktorkammaren (Figur 10) [17].

MW-CVD-reaktorn har vanligtvis en frekvens på 2.45 GHz [17]. Kammaren är invävd i ett vilket gör att den elektriska urladdningen enklare kan kontrolleras. Mikrovågorna för över energin genom kollisioner, vilket värmer upp reaktionsgaserna i kammaren och när gastemperaturerna når $1700-2700^\circ C$ omvandlas H_2 till H_1 . Precis som för HF-CVD genomgår substratet en förbehandling genom ultraljudsslipning med en diamantpulversuspension [9]. När reaktionsgaserna hettas upp leder detta till kemiska reaktioner, vilket i sin tur påbörjar diamanttillväxten. Om ytförhållandet är rätt byggs diamanten upp på substratet. Deponeringsprocessen sker ovanpå det vattenkylda kylningssystemet, vilket ligger på ett ringformat kvartsfönster. Detta motverkar överhettningsskador som kan uppstå inom systemet.



Figur 10. En schematisk beskrivning av MW-CVD-processen [23].

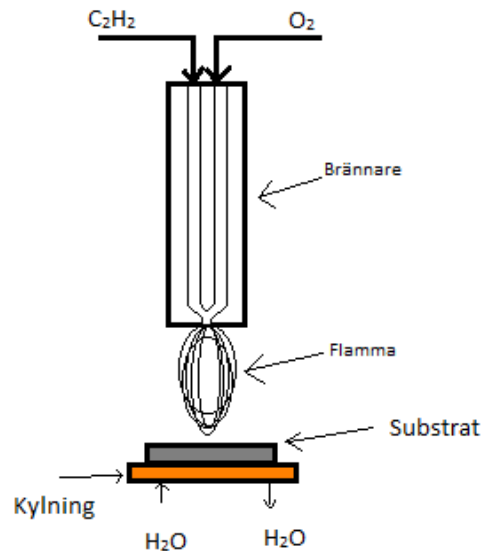
I en typisk MW-CVD-process går flödet av H₂ in med 0.8 l/min och flödet för CH₄ är 0.020 l/min. Tillväxthastigheten är 2.2 μm/h och arean den växer på är 15 cm² [20]. Andelen kol som omvandlas till diamant, alltså CCE, ligger på 2%. Den totala effekten hos reaktorn är typiskt 3.2 kW. Nedan visas ett flödesschema för MW-CVD-processen (Figur 11). De beräkningar som genomfördes för att relatera denna data till den funktionella enheten redovisas i Appendix.



Figur 11. Flödesschema för MW-CVD-processen.

3.2.3 Combustion Flame Assisted Chemical Vapor Deposition

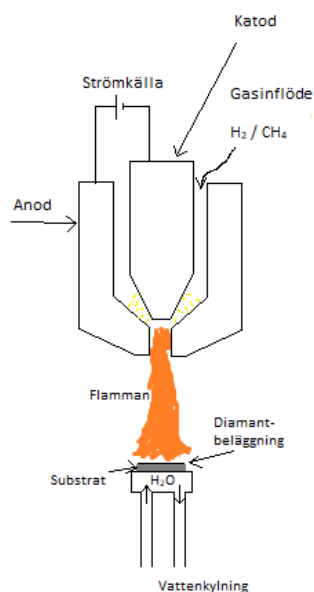
Inom CF-CVD, även kallad *oxyacetylen combustion flame*, använder man sig av en lödningsbrännare för att skapa en het flamma där diamantsyntesen sker (Figur 12) [17]. Istället för metan används dessutom eten (C₂H₂) som kolkälla. Ett diamantlager deponeras på den del av substratets yta som är i kontakt med syrgas-eten-flamman. Substratets temperatur ligger mellan 800-1050°C vid atmosfärstryck. Anordningen är styrd av ett vattenkyldt substrat och ett kontrollerat gasflödessystem [24]. Temperaturen på substratet ställs in genom att man växlar substratets ytposition mot det vattenkylda kopparfästet. Reaktionsgaserna som går in är C₂H₂:O₂ och har 1:1 förhållande. Syrgas-eten brännaren kräver ett litet överskott av syre för fullständig förbränning av eten till koldioxid (CO₂) och vatten (H₂O).



Figur 12. En schematisk beskrivning över CF-CVD-processen [24].

3.2.4 Arc Jet Chemical Vapor Deposition

En plasmastråle, även kallad *arc jet* eller *DC plasma jet*, är en högtrycksströmsplasma som skapas av elektriska urladdningar (Figur 13). Den här tekniken använder sig av konvektion som värmetransport. Den elektriska urladdningen sker mellan en katodstav och en närliggande cylindrisk anod [17]. På samma sätt som i flera andra CVD-processer är de primära beståndsdelarna i gasblandningen H_2 och CH_4 , vilka införs i plasmastrålen. CH_4 fungerar enbart som en kolkälla. Plasmas temperatur ligger i genomsnitt på 700-4700 °C där reaktionerna mellan väte och metan sker [25]. Plasmastrålen som innehåller reaktanterna deponeras sedan på en substratyta som har en temperatur mellan 700-1200 °C. Substrattemperaturen kontrolleras av ett vattenkylsystem.



Figur 13. En schematisk beskrivning över AJ-CVD-processen [24].

4.Resultat

Resultaterande inventeringsdata för produktion av syntetisk diamant med HF-CVD- och MW-CVD-processerna presenteras i Tabell 2. När man jämför HF-CVD och MW-CVD kan man se att det krävs omkring tre gånger så mycket electricitet för MW-CVD som för HF-CVD. Däremot gick det in två gånger mer H₂ i HF-CVD än MW-CVD, dock förbrukades det märkbart lite. Mängden metan som krävs skiljer inte så mycket mellan processerna. Det går alltså inte utifrån dessa inventeringsdata att säga vilken av processerna som är miljömässigt fördelaktig, utan det krävs en fullständig LCA, inklusive det tredje steget miljöpåverkansbedömning, för att kunna avgöra.

Det som skiljer processerna åt är att i HF-CVD används en varm glödtråd för processen medan MW-CVD använder mikrovågor, vilket skapas av en magnetisk vågsgenerator (magnetron) som gör att det krävs mer electricitet för MW-CVD-processen än för HF-CVD-processen. Skillnaden i gasflöden för processerna beror främst på att de hade olika gasförhållanden mellan vätgas och metan samt olika totalinflöde. HF-CVD har ett totalflöde på ungefär 0,48 liter/min med kompositionen 1% metan och 99% vätgas till skillnad från MW-CVD som har totalflödet 0,82 liter/min med kompositionen 2,5% metan och 97,5% vätgas.

Tabell 2. Inventeringsdata för HF-CVD och MW-CVD per $\mu\text{m}\cdot\text{cm}^2$. *Diamantpulver tillsätts på substratet. Information om mängder var inte tillgänglig men antas vara mycket små då det fungerar som en uppstart av processen. ** Substratet är SiAlON.

	Enhet	HF-CVD	MWCVD
Input			
H ₂	$\text{g}/\mu\text{m}\cdot\text{cm}^2$	1.8	0.96
CH ₄	$\text{g}/\mu\text{m}\cdot\text{cm}^2$	0.0024	0.0033
Elektricitet	$\text{kWh}/\mu\text{m}\cdot\text{cm}^2$	0.029	0.097
Substrat**	$\text{st}/\mu\text{m}\cdot\text{cm}^2$	1.0	1.0
Diamantpulver	$\text{g}/\mu\text{m}\cdot\text{cm}^2$	~0*	~0*
Output			
CH ₄	$\text{g}/\mu\text{m}\cdot\text{cm}^2$	0.0023	0.0032
H ₂	$\text{g}/\mu\text{m}\cdot\text{cm}^2$	1.8	0.96
Syntetisk diamant	$\mu\text{m}\cdot\text{cm}^2$	1.0	1.0

5. Diskussion

Denna studie är avgränsad till produktion av syntetisk diamant för de två CVD-processerna HF-CVD och MW-CVD, då dessa är vanligast inom industrin idag. Behovet av metaller till verktyg är viktigt och då man använder sig av många knappa metaller föreslogs det i rapporten att diamant kunde vara ett alternativ till WC-Co. Osäkerheter i denna studie är exempelvis kopplad till den data som används för framtagande av inventeringsdata, vilken är från år 1992 [20]. Under detta år var CVD en relativt ny teknik vilket skapar en osäkerhet i beräkningarna eftersom tekniken kan ha förändrats sedan dess. Det är exempelvis inte ovanligt att miljöpåverkan från ny teknik minskar ju mer tekniken används och vidareutvecklas, vilket visats för exempelvis produktion av kolnanorör med olika processer [26]. Möjligtvis skulle bättre data kunna ha insamlats vid kontakt med företag som producerar syntetisk diamant för att få relevant data för idag.

När det gäller resursproblematiken och användningen av knappa metaller i verktyg så betyder nödvändigtvis inte användningen av diamant en minskning av dessa problem eftersom att man lägger en diamantfilm över ett substrat som i sig är tillverkat av exempelvis WC-Co, alltså just det ämne som skulle substitueras. Även molybden är relativt ovanligt i jordskorpan [3]. Mängden substrat som används för en viss mängd syntetisk diamant behöver beräknas i framtida studier för att kunna göra en relevant jämförelse med den nuvarande WC-Co-baserade tekniken. Det ska dock nämnas att det vanliga substratet SiAlON inte innehåller några knappa metaller. Det som är bra med fristående diamantbitarna utan substrat, alltså den tjocka diamantfilmen, är att man då endast använder sig av diamanten och inte av substratet som alltså kan innehålla knappa metaller. Men huruvida det är bättre miljö- och resursmässigt beror på om substratet återanvänds eller inte, vilket gäller både för diamant från tjocka och tunna filmer. Om man fortfarande använder sig av ett substrat som innehåller knappa metaller, såsom exempelvis är fallet med WC-Co och molybden, så undviks inte resursproblemet helt vid en substitution av hårdmetall.

Inventeringsdata har beräknats för tillverkning av syntetisk diamant med HF-CVD och MW-CVD för en diamantfilm som är på ett substrat. Det som är intressant i fortsättningen är om man skulle kunna ta fram mer inventeringsdata för hur diamantbitarna med tunn diamantfilm och diamantbitarna med tjock diamantfilm appliceras på ett verktyg för att senare kunna jämföra vilket som är bättre ur miljösynpunkt. Det vill säga, utföra en fullständig LCA för ett diamantbeklätt verktyg. Vidare skulle en jämförande LCA med ett hårdmetallverktyg sedan kunna utföras.

6. Slutsats

Livscykelinventeringsdata har tagits fram för syntetisk diamanproduktion med HF-CVD- och MW-CVD-processerna som är de två vanligaste processerna vid tillverkning av syntetisk diaman för användning i verktyg. Detta baseras på genomförandet av de två första stegen av en LCA och en detaljerad beskrivning av syntetisk diamanproduktion med dessa två processer. Den här studien visade att HF-CVD processen kräver mindre elektricitet än MW-CVD, även hur både HF-CVD och MW-CVD förbrukade märkbart lite H₂ och metan.

Inventeringsdata från denna studie kan användas för vidare studier av syntetisk diamanproduktion och vid genomförandet av fullständiga LCA:er av produkter som innehåller syntetisk diaman. Då man vid diamanproduktion använder sig av ett substrat som kan innehålla knappa metaller innebär användning av syntetisk diaman i verktyg inte nödvändigtvis att man blir helt kvitt resursproblematiken vid en substitution av hårdmetall. Detta behöver studeras vidare i framtida studier.

7.Referenser

- 1.Prakash, L., Fundamentals and General Applications of Hardmetals. *Comprehensive Hard Materials*, Sarin, V. K.; Mari, D.; Llanes, L., Eds. Elsevier: Oxford, 2014; p 29.
- 2.Bobzin, Kirsten. High-performance coatings for cutting tools. *CIRP Journal of Manufacturing Science and Technology*. 2017; 18:1-9.
3. Wedepohl KH. (1995) The composition of the continental crust. *Geochim. Cosmochim. Acta*.59: 1217-1232.
4. EC. (2017) (European Commission) Study on the review of the list of Critical Raw Materials. *Critical Raw Materials Factsheets*. June 2017.
5. Arvidsson, R.; Sandén, B. A., Carbon nanomaterials as potential substitutes for scarce metals. *J. Clean. Prod.* 2017, 156, p 253-255.
6. Konstany, Janusz. *Powder Metallurgy Diamond Tools*. Polen: Elsevier: 2005.
7. Donald W Olson. 2013 Minerals Yearbook. Diamond. U.S. Geological Survey. 2015;21.1-21.11.
8. Munn, Nathan. Rise of the Synthetic Stone: A Polygon Industry Report. [broshyr]. Polygon. 2015.
9. Weng, J. Liu, F. Xiong, L.W. Wang, J.H. Sun, Q. Deposition of large area uniform diamond films by microwave plasma CVD. *Vacuum*. 2018; 147: 134-136.
10. Brennan, Joe. Five facts about Diamond-Coated Tools. [Internet]. *MoldMaking Technology*; 2007. Hämtad från: <https://www.moldmakingtechnology.com/articles/five-facts-about-diamond-coated-tools>
11. Baumann, H.; Tillman, A.-M., *The Hitchhiker's Guide to LCA: An Orientation in Life Cycle Assessment Methodology and Application*. Studentlitteratur: Lund, Sweden, 2004.
12. JBO. General informations. [Internet]. Johs. Boss GmbH & Co. KG; Hämtad från: <http://www.johs-boss.de/en/products/pcd-cvd-and-cbn-tools/general-informations/>
13. Eaton-Magaña Sally, Shigley James E, Breeding Christopher M. Observations on HPHT-Grown Synthetic Diamonds: A Review. *Gems & Gemology*. 2017; 53.
14. Kopeliovich D. Synthetic diamonds [Internet]: Substech; 2013 [citerad datum 06/22]. Hämtad från: http://www.substech.com/dokuwiki/doku.php?id=synthetic_diamonds
15. E Brillas, C Alberto Martinez-Huitle. *Synthetic Diamond Films: Preparation, Chemistry, Characterization and Applications*. New Jersey. John Wiley & Sons, Inc; 2011.
16. Ashfold Michael N.R, May Paul W, Petherbridge James R, Roser Keith N, Smith James A, Mankelevich Yuri A, et al. Unravelling aspects of the gas phase chemistry involved in diamond chemical vapour deposition. *Physical Chemistry Chemical Physics*. 2001; 3, 3471-3485.
17. B Dischler, C Wild. *Low-Pressure Synthetic Diamond: Manufacturing and Applications*. Freiburg: Springer; 1998.
18. Davis R Joseph. *ASM Specialty Handbook: Tool Materials*. University of Michigan. ASM International; 1995.
19. Hintermann, H. E. Chattopadhyay, A.K. Low Pressure Synthesis of Diamond Coatings. *Annals of the CIRP*. 1993; 42: 769-783.
20. Haubner R, Lux, B. Diamond growth by hot-filament chemical vapor deposition: state of the art. *Diamond and Related Materials*. 1993; 2: 1277-1294.
21. Schwander, Michael. Partes, Knut. A review of diamond synthesis by CVD processes. *Diamond & Related Materials*. 2011; 20: 1287-1301.

22. Mehlmann A K, Fayer A, Dirnfeld S F. Nucleation and growth of diamond on cemented carbides by hot filament chemical vapor deposition. *Diamond and Related Materials*. 1993; 2: 317-322.
23. Spear E Karl. Dismukes P John. *Synthetic diamond: Emerging CVD science and technology*. Pennington, New Jersey: John Wiley & Sons. 1994.
24. Richley C James. *Fundamental studies of diamond chemical vapour deposition: Plasma diagnostics and computer modelling*. [examensarbete på Internet]. Bristol; University of Bristol.
25. J J Gracio, Q H Fan, J C Madaleno. Diamond growth by chemical vapour deposition. *Journal of Physics D: Applied Physics*, IOP Publishing, 2010, 43 (37), pp.374017.
26. Gavankar S, Suh S, Keller AA (2014) The Role of Scale and Technology Maturity in Life Cycle Assessment of Emerging Technologies - A Case Study on Carbon Nanotubes. *Journal of Industrial Ecology* 19(1): 51-60
27. Atkins, Peter. Jones, Loretta. Laverman, Leroy. *Chemical Principles The Quest for Insight*. W.H.Freeman & Co Lt: 2016.

Appendix

I detta appendix räknas processdata om till livscykelinventeringsdata för HF-CVD och MF-CVD. Tabell 3 anger värden på ingående ämnens egenskaper som använts i beräkningarna.

Tabell 3. Densitet och molmassa för metangas och vätgas [27].

Ämne	Densitet (g/liter)	Molmassa (g/mol)
CH ₄	0.657	16.0
H ₂	0.0899	2.02

Beräkningar för HF-CVD baserat på referens [20]

$$\text{Elektricitet (in)} = \frac{0.3 \text{ kW} \times 1 \text{ h}}{1.3 \mu\text{m/h} \times 8 \text{ cm}^2} = 0.0288 \approx \mathbf{0.029} \text{ kWh}/\mu\text{m} \times \text{cm}^2$$

$$\text{H}_2(\text{in}) = \frac{0.478 \text{ liter/min} \times 60 \text{ min}}{1.3 \mu\text{m/h} \times 8 \text{ cm}^2} = \frac{28,68}{10.4 \mu\text{m} \times \text{cm}^2} = 2.7577 \frac{\text{liter}}{\mu\text{m} \times \text{cm}^2} \times 0.657 \frac{\text{g}}{\text{liter}} \\ \approx \mathbf{1.8} \text{ g}/\mu\text{m} \times \text{cm}^2$$

$$\text{CH}_4(\text{in}) = \frac{0.00464 \frac{\text{liter}}{\text{min}} \times 60}{1.3 \frac{\mu\text{m}}{\text{h}} \times 8 \text{ cm}^2} = \frac{0.2784}{10.4 \mu\text{m} \times \text{cm}^2} = 0.027 \frac{\text{liter}}{\mu\text{m} \times \text{cm}^2} \times 0.08988 \frac{\text{g}}{\text{liter}} \approx \mathbf{0.0024} \text{ g}/\mu\text{m} \times \text{cm}^2$$

$$\text{CH}_4(\text{ut}) = \text{CH}_4(\text{in}) \times (1 - \text{CCE}) = \frac{0.00464 \text{ liter/min} \times 60 \text{ min}}{1.3 \mu\text{m/h} \times 8 \text{ cm}^2} \times 0.08988 \frac{\text{g}}{\text{liter}} \times (1 - 0.025) \approx \\ \mathbf{0.0023} \text{ g}/\mu\text{m} \times \text{cm}^2$$

$$\text{CH}_4(\text{in}) - \text{CH}_4(\text{ut}) = \text{CH}_4 \text{ konverterat till diamant} = \frac{0.00241 \text{ g}/\mu\text{m} \times \text{cm}^2 - 0.002346 \text{ g}/\mu\text{m} \times \text{cm}^2}{16.043 \text{ g/mol}} = \mathbf{3.99 \times 10^{-6}} \\ \text{mol}/\mu\text{m} \times \text{cm}^2$$

$$1 \text{ CH}_4 \text{ bildar } 2 \text{ H}_2, \text{ som innebär } 2 \times \mathbf{3.99 \times 10^{-6}} \text{ mol}/\mu\text{m} \times \text{cm}^2 \times 2.016 \text{ g/mol} = \mathbf{1.609 \times 10^{-5}} \\ \text{g}/\mu\text{m} \times \text{cm}^2 \text{ H}_2 \text{ bildas}$$

$$\text{H}_2(\text{ut}) = \text{H}_2(\text{in}) + \text{H}_2(\text{bildas}) = 1.812 + \mathbf{1.609 \times 10^{-5}} \approx \mathbf{1.8} \text{ g}/\mu\text{m} \times \text{cm}^2$$

Beräkningar för MW-CVD baserat på referens [20]

$$\text{Elektricitet (in)} = \frac{1.5 \text{ kW} + 1.7 \text{ kW}}{2.2 \mu\text{m/h} \times 15 \text{ cm}^2} = \frac{3.2 \text{ kW}}{33 \mu\text{m} \times \text{cm}^2} = 0.0969 \approx \mathbf{0.097} \text{ kWh}/\mu\text{m} \times \text{cm}^2$$

$$\text{H}_2(\text{in}) = \frac{0.8 \text{ liter/min} \times 60 \text{ min}}{2.2 \mu\text{m/h} \times 15 \text{ cm}^2} = \frac{48}{33 \mu\text{m} \times \text{cm}^2} = 1.45 \frac{\text{liter}}{\mu\text{m} \times \text{cm}^2} \times 0.657 \frac{\text{g}}{\text{liter}} \approx \mathbf{0.96} \text{ g}/\mu\text{m} \times \text{cm}^2$$

$$\text{CH}_4(\text{in}) = \frac{0.02 \text{ liter/min} \times 60 \text{ min}}{2.2 \text{ } \mu\text{m/h} \times 15 \text{ cm}^2} = \frac{1.2}{33 \text{ } \mu\text{m} \times \text{cm}^2} = 0.036 \frac{\text{liter}}{\mu\text{m} \times \text{cm}^2} \times 0.08988 \frac{\text{g}}{\text{liter}} \approx \mathbf{0.003 \text{ g/} \mu\text{m} \times \text{cm}^2}$$

$$\text{CH}_4(\text{ut}) = \text{CH}_4(\text{in}) \times (1 - \text{CCE}) = \frac{0.02 \text{ liter/min} \times 60 \text{ min}}{2.2 \text{ } \mu\text{m/h} \times 15 \text{ cm}^2} \times 0.08988 \frac{\text{g}}{\text{liter}} \times (1 - 0.02) = \mathbf{0.003 \text{ g/} \mu\text{m} \times \text{cm}^2}$$

$$\text{CH}_4(\text{in}) - \text{CH}_4(\text{ut}) = \text{CH}_4 \text{ konverterat till diamant} = \frac{0.00327 \text{ g/} \mu\text{m} \times \text{cm}^2 - 0.0032 \text{ g/} \mu\text{m} \times \text{cm}^2}{16.043 \text{ g/mol}} = \mathbf{4.363 \times 10^{-6} \text{ mol/} \mu\text{m} \times \text{cm}^2}$$

1 CH₄ bildar 2 H₂, som innebär $2 \times 4.363 \times 10^{-6} \text{ mol/} \mu\text{m} \times \text{cm}^2 \times 2.016 \text{ g/mol} = \mathbf{1.759 \times 10^{-5} \text{ g/} \mu\text{m} \times \text{cm}^2}$ H₂ bildas

$$\text{H}_2(\text{ut}) = \text{H}_2(\text{in}) + \text{H}_2(\text{bildas}) = 0.9556 + \mathbf{1.759 \times 10^{-5}} \approx \mathbf{0.96 \text{ g/} \mu\text{m} \times \text{cm}^2}$$