



Caracterização de superfícies epitaxiais obtidas a partir de modelos computacionais por meio de Teoria de Escala Anômala

Débora Rezende Jalles¹, Fábio Fagundes Leal²

Filmes finos estão presentes em uma variedade de dispositivos eletrônicos, como lasers, transistores, diodos, etc. A eficiência destes dispositivos depende, entre outros fatores, do aspecto morfológico da superfície do filme fino semiconductor componente. Atualmente, existem várias técnicas experimentais para o crescimento desses filmes, das quais destacam-se: HWE (*Hot Wall epitaxy*), CSS (*Closed Space Sublimation*), LPE (*Liquid Phase Epitaxy*), VPE (*Vapour Phase Epitaxy*); porém, devido suas características de deposição e alta qualidade dos filmes crescidos, uma das mais empregadas é a MBE (*Molecular Beam Epitaxy*). No MBE, o crescimento epitaxial ocorre longe do equilíbrio termodinâmico e é dominado por processos cinéticos (STEINER, 2004). Diante da complexidade da dinâmica de crescimento, uma boa alternativa têm sido o uso de modelos computacionais, que apresentam além da facilidade de controle dos parâmetros, uma maior viabilidade de execução. Este trabalho busca criar modelos que possibilitem analisar a dinâmica de crescimento epitaxial de sistemas que exibem comportamento anômalo de escala. Para isso, estão sendo usados os *softwares* *Gfortran* (compilador Fortran) e *Grace* (para plotagem de gráficos), ambos instalados no sistema operacional *Ubuntu* (a princípio em computadores pessoais). Os modelos iniciais reproduzidos neste trabalho incorporam processos de deposição, difusão, incorporação a rede e evaporação. Dentre eles, estão: DA (deposição aleatória), DAR (deposição aleatória com relaxação), DB (deposição balística), RSOS (Deposição Sólido sobre Sólido Restrito) WV (Modelo de *Wolf-Villan*) e de DT (*Das Sarma e Tamborenea*). Nesses modelos os processos são implementados satisfazendo as regras de mobilidade atômica e as condições cinéticas para cada caso. Após a criação dos modelos é feita a caracterização das interfaces obtidas. Para isso são usados métodos de mecânica estatística para obtenção de expoentes como: (α) rugosidade global e local, (β) crescimento, (z) dinâmico e função correlação (BARABÁSI, 1995). Até o momento estamos na etapa de programação dos modelos fundamentais de crescimento via MBE. Espera-se até o final do projeto caracterizar os modelos citados.

Palavras-chave: filmes finos, crescimento epitaxial, modelagem.

Instituição de fomento: CNPq e IFFluminense.