



MODELAGEM COMPUTACIONAL DE FILMES FINOS EPITAXIAIS CRESCIDOS SOBRE SUBSTRATOS AMORFOS

Clébio Marques de Oliveira Júnior, Fábio Fagundes Leal

Os Semicondutores são materiais que possuem características de isolantes e condutores. Assim, são muito usados na fabricação de dispositivos eletrônicos em geral. Porém não são apenas as propriedades elétricas que os tornam atrativos. Sabe-se que as características da superfície de um semicondutor sólido influencia diretamente no comportamento de optoeletrônicos. Essas características morfológicas dependem da técnica que foi usada para produção desse sólido. Uma das técnicas experimentais para obtenção de filmes finos desses materiais é a Epitaxia por Feixe Molecular (*MBE*). Devido as condições de temperatura e vácuo, dessa técnica, o processo ocorre fora do equilíbrio termodinâmico. Assim, processos cinéticos passam a dominar o crescimento desses filmes, o que torna a termodinâmica convencional limitada para compreensão desses sistemas. Uma das ferramentas usadas para tais estudos é a simulação feita por computador. Por meio desta ferramenta, nosso trabalho tem o objetivo de elucidar os principais mecanismos cinéticos dominantes em crescimentos de filmes finos. Por isso apresentaremos modelos atomísticos de ativação térmica utilizando o método de Monte Carlo, para entender melhor sobre os aspectos morfológicos e a dinâmica de crescimento de filmes crescidos por epitaxia sobre substratos amorfos. Inicialmente, desenvolvemos modelos cinéticos discretos (MCD) aplicados à dinâmica de interfaces em crescimento de *MBE*. Os MCD criados são: Deposição Aleatória (DA), DA com relaxação (DAR), Deposição Balística (DB), Sólido sobre Sólido restrito, Wolf-Villain e Das Sarma e Tamborenea. Também serão levados em consideração alguns parâmetros termodinâmicos e interações locais entre as partículas. Após essa etapa expandiremos o modelo proposto para o trabalho levando-se em conta substratos amorfos. Para a classificação das superfícies obtidas pelos modelos serão utilizados alguns métodos da mecânica estatística – de expoentes críticos: de crescimento β , rugosidade α , dinâmica z , Hurst H , função correlação e expoentes espectrais. Os resultados preliminares obtidos para DA, DAR e DB são os expoentes β , α e z que estão de acordo com a bibliografia. Os valores de β encontrados são: DA $0,51 \pm 0,01$; DAR $0,22 \pm 0,02$ e DB $0,33 \pm 0,01$. Com este trabalho espera-se obter parâmetros que sirvam de suporte teórico para guiar experimentos, para obtenção de resultados morfológicos específicos, por vezes imprevisíveis atualmente.

Palavras-chave: Modelagem computacional, filmes finos, epitaxia, substratos amorfos.

Instituição de fomento: CNPq.