

## 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 tanto de isolantes e quanto de 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 filme fino semicondutor pode influenciar diretamente no comportamento de optoeletrônicos. Essas características morfológicas dependem da técnica que foi usada para a sua produção. Uma das técnicas experimentais para obtenção desses filmes semicondutores é a Epitaxia por Feixe Molecular (*MBE*). Devido às condições de temperatura e vácuo dessa técnica, o crescimento do filme ocorre fora do equilíbrio termodinâmico. Assim, processos cinéticos passam a dominar a dinâmica de crescimento, 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 (AT) 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 amorfs. Após a elaboração do modelo de AT e de alguns testes, conseguiu-se estudar os efeitos de substratos amorfs no modelo de crescimento. Também foram verificados os efeitos das variações de parâmetros como temperatura e a energia de ativação com o substrato amorfo, para o análise do crescimento do filme. Com isso foram obtidos resultados sobre o tipo de superfície que é formada (perfil do filme) e o comportamento da sua rugosidade em função do tempo. Através dos resultados dos perfis foi verificado que ao contrário do modelo puro de AT, no qual com o aumento da temperatura o perfil torna-se mais “lisa”, quando é empregado o substrato amorfo, a superfície tende a ficar mais rugosa. E os resultados da rugosidade em relação ao tempo mostrou que a rugosidade não satura. Portanto espera-se que com mais experimentos e resultados possam ser encontrados resultados que ajudem a explicar tais fenômenos.

Palavras-chave: Modelagem computacional, Epitaxia, Substratos amorfs

Instituição de fomento: CNPq