

## APLICAÇÃO DA TEORIA DE ESCALA DINÂMICA GENÉRICA EM SUPERFÍCIES EPITAXIAIS OBTIDAS POR MODELOS COMPUTACIONAIS

*Wilson José de Sá Marques, Fábio Fagundes Leal*

Os filmes finos semicondutores crescidos por processos epitaxiais são vastamente utilizados na fabricação de dispositivos eletrônicos atualmente. É sabido que a eficiência de muitos desses dispositivos, dentre outros fatores, é influenciada por aspectos morfológicos da superfície desses filmes. Uma das técnicas experimentais mais difundidas para o crescimento de filmes é a chamada MBE (do inglês *Molecular Beam Epitaxy*), pois permite o controle fino de vários parâmetros e minimiza defeitos nas redes cristalinas. No entanto um crescimento por MBE ocorre longe do equilíbrio termodinâmico e os processos cinéticos envolvidos são dominantes, tornando a termodinâmica convencional insatisfatória para o tratamento desses sistemas. Por estes serem sistemas complexos, métodos analíticos são limitados e, portanto, pouco apropriados para modelagem matemática deles. Por outro lado a simulação computacional desempenha um papel-chave nesses sistemas, revelando-se o caminho mais viável para o estudo teórico de crescimento de filmes. Os modelos computacionais criados reproduzem um sistema real, nos quais são implementados diversos processos cinéticos, de forma que se possa observar a influência de cada um deles durante o crescimento dos filmes. Nesse trabalho foram reproduzidos modelos cinéticos discretos clássicos, a saber, Deposição Aleatória (DA), Deposição Aleatória com Relaxação (DAR) e Deposição Balística (DB), para análise dos efeitos morfológicos dos diversos processos cinéticos envolvidos em cada um deles. Em seguida aplicamos a teoria de escala dinâmica genérica (TEDG) para caracterizar as superfícies geradas. Para classificação das superfícies obtidas, foram utilizados métodos de mecânica estatística de sistemas fora do equilíbrio. Os expoentes críticos de crescimento  $\beta$ , rugosidade  $\alpha$ , dinâmico  $z$  e de Hurst  $H$ , e outros resultados encontrados correspondem aos da literatura. Espera-se que com o desenvolvimento desse trabalho seja possível entender processos cinéticos básicos e seus efeitos na morfologia das superfícies dos filmes obtidos por simulação computacional, para compará-los s resultados experimentais.

Palavras-chave: Simulação computacional, Crescimento epitaxial, Filmes finos.

Instituição de fomento: CNPq