



INSTITUTO
TECNOLÓGICO
DE AERONÁUTICA



www.lpp.ita.br

www.ita.br

MT-203

Ciência e Tecnologia de Filmes Finos

Prof. Douglas M G Leite

leite@ita.br

Sala LPP-203

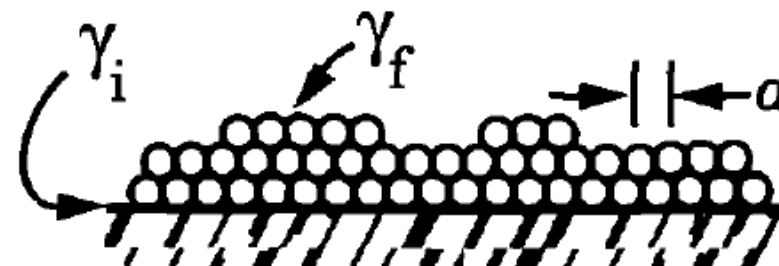
www.lpp.ita.br/leite

Aula 06 - Epitaxia

- Definição de Epitaxia
- Lattice Mismatch (descasamento de redes)
- Simetrias para Epitaxia
- Defeitos
- Camada Buffer

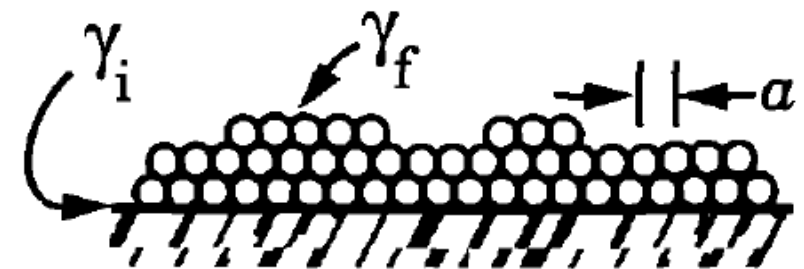
Definição Epitaxia

- A forma cristalina representa o estado de menor energia do sólido
- Qualquer defeito, região amorfa, distorção de ligações, etc... Representam acréscimo de energia
- Qualquer superfície (=descontinuidade) do cristal apresenta densidade de energia muito maior que qualquer outra região do interior cristal
- Tanto que a tensão superficial (γ) é definida como a diferença de energia entre os átomos na superfície e os átomos no interior (bulk) do cristal



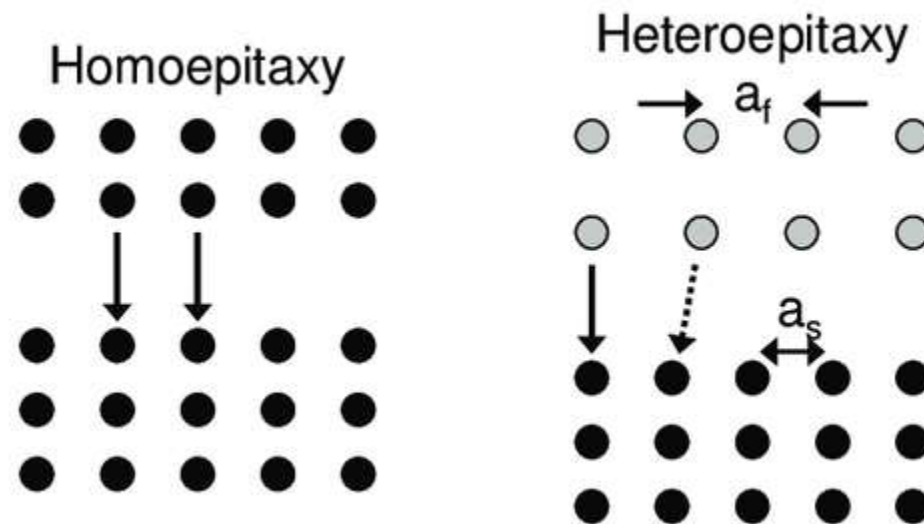
Definição Epitaxia

- A minimização da energia de interface ($\gamma_i < \gamma_s$) entre dois monocristais ocorre quando é maximizada a densidade de ligações com comprimento e ângulos próximos daqueles que satisfazem as simetrias dos dois cristais
- Portanto, em processo de deposição, há uma tendência de os átomos do filme se alinhar à estrutura cristalina da superfície do substrato para minimizar γ_i (considerando alta difusão superficial)
- Isso somente pode ocorrer quando há uma COMPATIBILIDADE MÍNIMA entre os planos cristalinos de contato entre filme e substrato
- Quando isso ocorre, temos EPITAXIA (EPI = acima; TAXIA = de maneira ordenada)



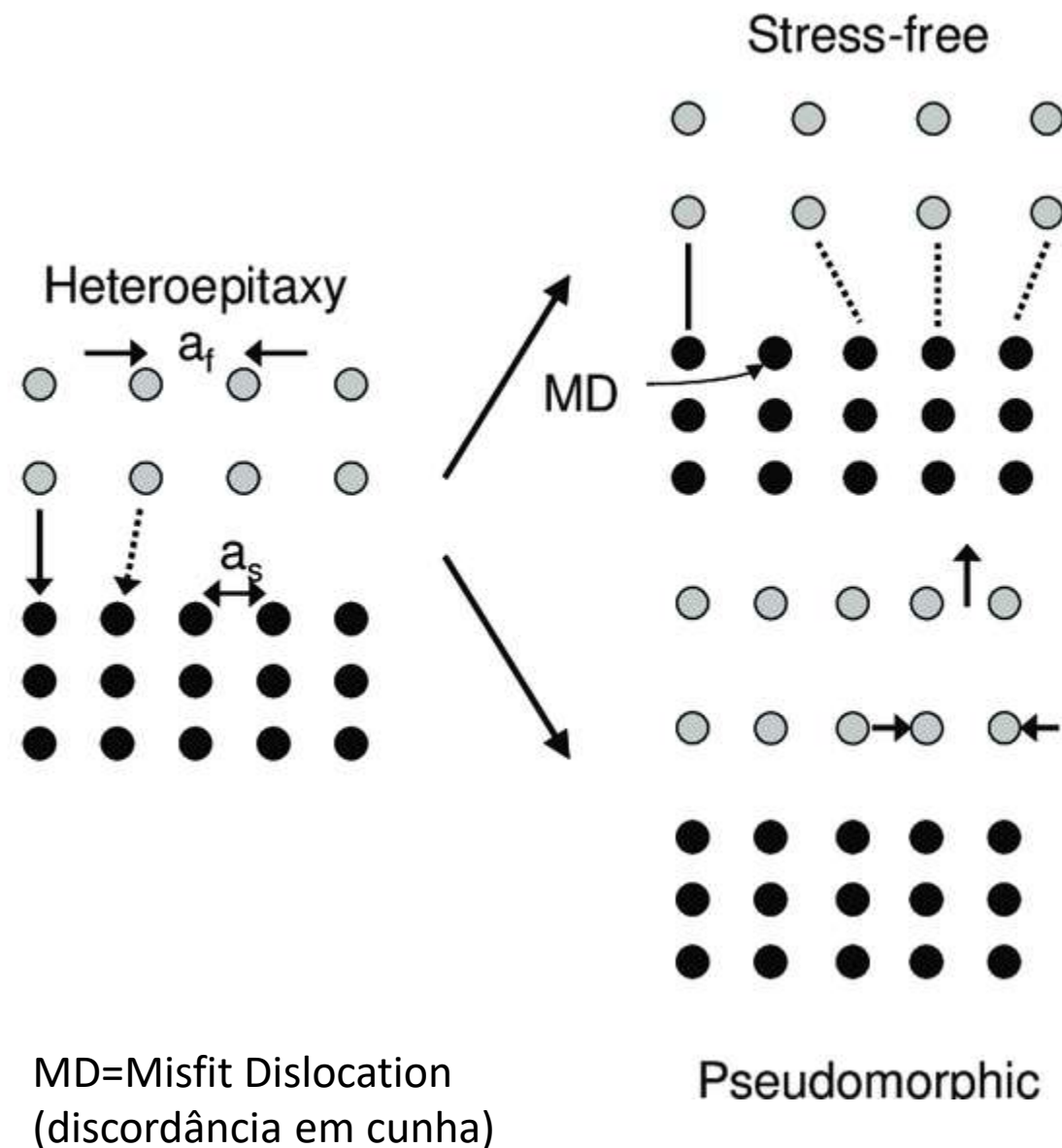
Definição Epitaxia

- A forma mais fácil de se obter epitaxia é quando o filme e o substrato são o mesmo material → HOMOEPITAXIA → $\gamma_i = 0$
- Por outro lado, quando filme e substrato são de materiais/fases diferentes, sempre temos $\gamma_i > 0$



Definição Epitaxia

- $\gamma_l > 0$ é traduzido pela formação de uma tensão entre filme e substrato
- Tensão sempre leva a uma deformação e a consequentemente à criação de defeitos, principalmente DISCORDÂNCIAS
- Se a γ_l for baixo o suficiente para que o filme comporte a tensão e desenvolva sua estrutura influenciada pela estrutura do substrato, temos então a HETEROEPITAXIA



Definição Epitaxia

- O que podemos definir como “ γ_i for baixo o suficiente”?
- Ou seja, quando a Epitaxia é possível?
- Dado o grande número de possibilidades de planos e de redes cristalinas, como podemos estabelecer um critério?
- Definição de DESCASAMENTO DE REDE (**Lattice Mismatch - f**)

Lattice Mismatch

- De forma geral, a EPITAXIA só ocorre para casos em que o DESCASAMENTO entre as redes é uma fração bem pequena
- O DESCASAMENTO (f) pode ser medido como:

$$f = \frac{(a_e - a_s)}{(a_e + a_s) / 2} \approx (a_e - a_s) / a_s$$

- Onde a_e e a_s representam as distâncias atômicas em uma direção do cristal do filme e da superfície do substrato, respectivamente
- Lembrando de que para HEROEPITAXIA, $f = f(T)$ pois, diferentes materiais/fases apresentam diferentes **coeficientes de dilatação térmica!!!**

Lattice Mismatch

➤ De forma geral, o LIMITE para que a **EPITAXIA OCORRA** é:

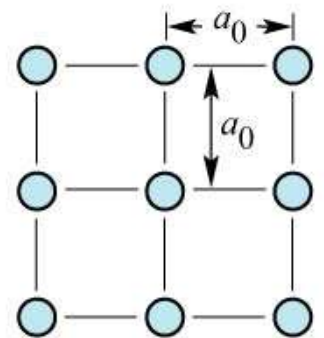
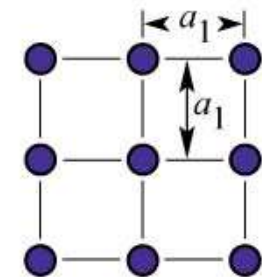
$$f = \frac{(a_e - a_s)}{(a_e + a_s) / 2} \approx (a_e - a_s) / a_s$$

$$f < 0,1$$

Lattice Mismatch

- Os casos mais simples para o cálculo do f são aqueles que envolvem planos e estruturas da mesma família (cúbica, ortorrômbica, etc...)
- Por exemplo, deposição de material de estrutura cúbica na direção $\langle 100 \rangle$ sobre plano (100) de um substrato também de estrutura cúbica
- Nesses casos, utiliza-se o parâmetro de rede (a_0) como valores diretos de a_e e a_s

$$f = \frac{(a_e - a_s)}{(a_e + a_s)/2} \approx (a_e - a_s) / a_s$$



Lattice Mismatch

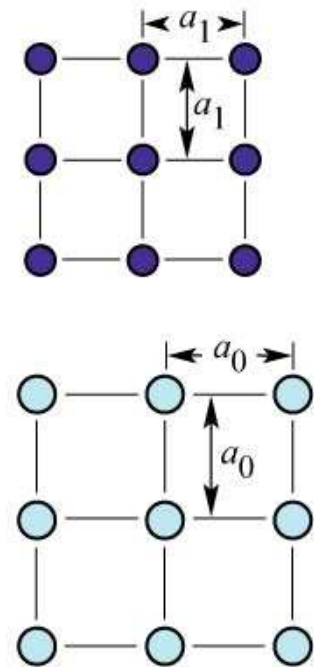
Exemplos simples:

- AlAs sobre GaAs → AlAs/GaAs
- GaAs sobre Si → GaAs/Si

Parâmetro de rede do AlAs (zinco-blenda), $a_0 = 0,562\text{nm}$

Parâmetro de rede do GaAs (zinco-blenda), $a_0 = 0,565\text{nm}$

Parâmetro de rede do Si (diamante), $a_0 = 0,543\text{nm}$



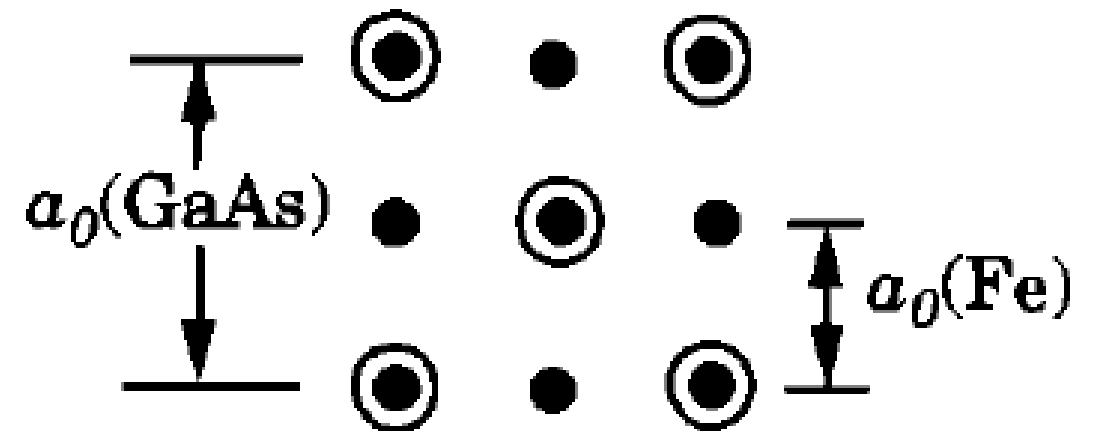
Simetrias

- Na maioria das vezes as redes e os planos envolvidos no processo de epitaxia são de famílias diferentes
- Entender e explorar diferentes simetrias para casamento de redes de diferentes famílias de estruturas e planos cristalinos

Simetrias

Exemplo 1

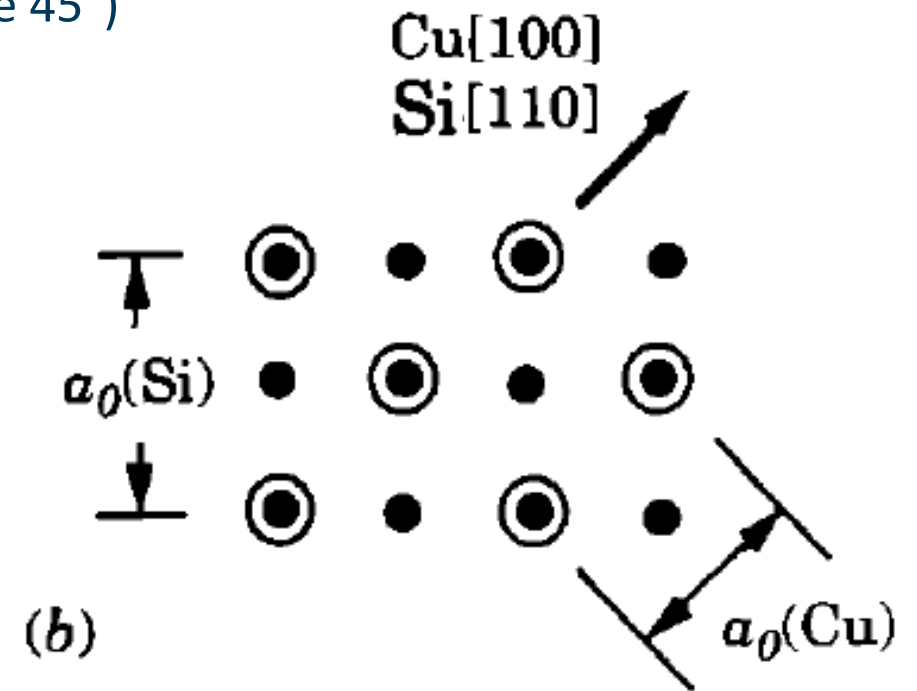
- Fe (BCC) sobre GaAs (zinco blenda)
- Ambos dividem interface em seu plano basal (001) → Fe(001)/GaAs(001)
- Direção a se considerar o casamento é a [100] ou [010]
- $a_0(\text{GaAs}) = 0,565\text{nm}$
- $2a_0(\text{Fe}) = 0,573\text{nm}$
- $f \sim 0,02$



Simetrias

Exemplo 2

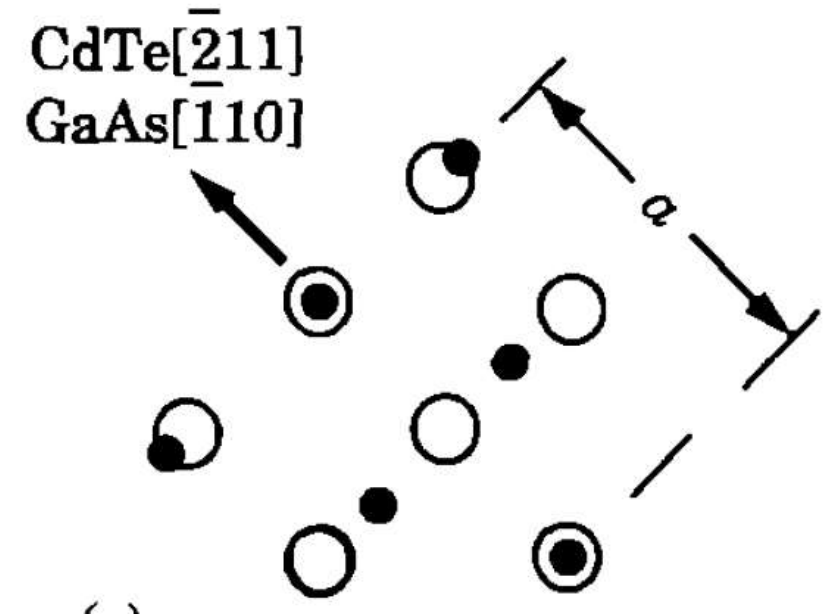
- Cu (FCC) sobre Si (diamante)
- Ambos dividem interface em seu plano basal (001) $\rightarrow$ Cu(001)/Si(001)
- Direção de casamento é a [100] do Cu // a [110] do Si (rotação de 45°)
- a_0 (Si) = 0,543nm
- $\sqrt{2}a_0$ (Cu) = 0,512nm
- $f \sim 0,07$



Simetrias

Exemplo 3

- CdTe (zinco-blenda) sobre GaAs (zinco-blenda)
- Plano interface $\rightarrow$ CdTe(111)/GaAs(001)
- Direção de casamento é a $[-211]$ do CdTe // a $[-110]$ do GaAs
- $f \sim 0,07$



- Esse exemplo mostra que, mesmo que poucos átomos estejam alinhados, pode-se “obter” uma boa EPITAXIA ao se **garantir $f < 0,1$**

Simetrias

EPITAXIA permitida por inclinação:

$$\cos \alpha = a_e / a_s = (f + 1)$$

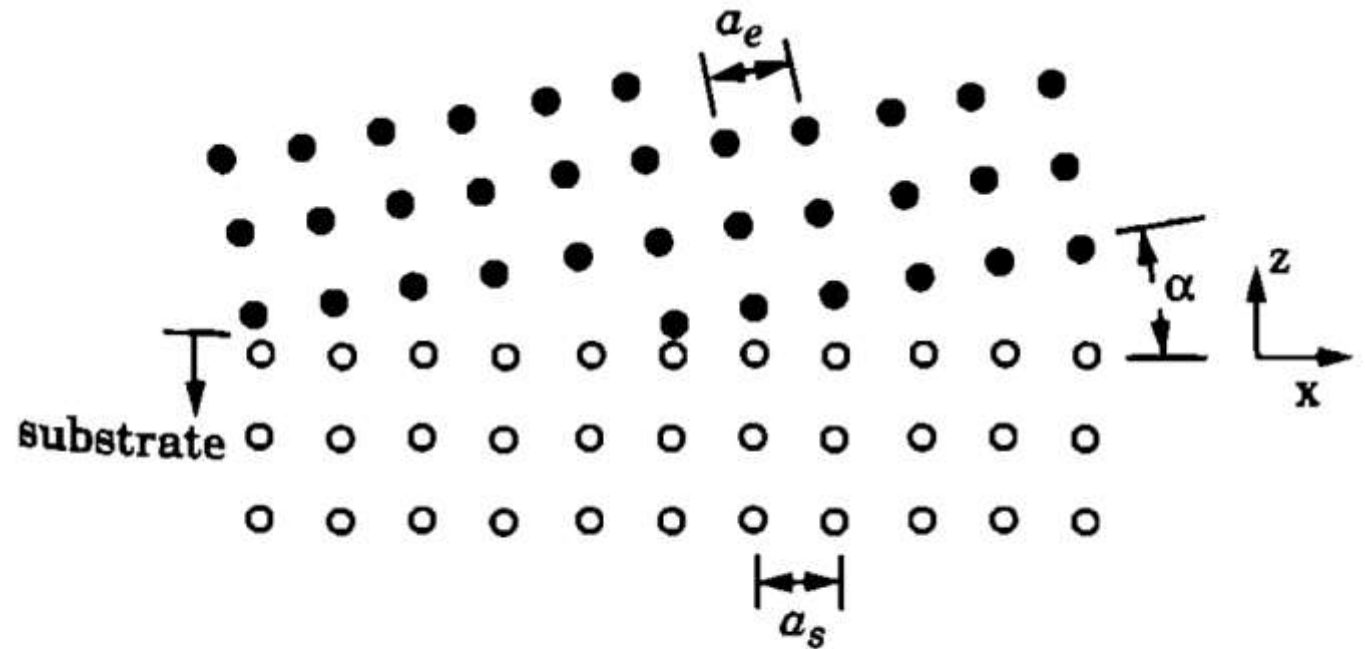


Figure 6.2 Cross-sectional view of misfit accommodation by epilayer tilt.

Descasamento

O que acontece quando a EPITAXIA não vai tão bem?

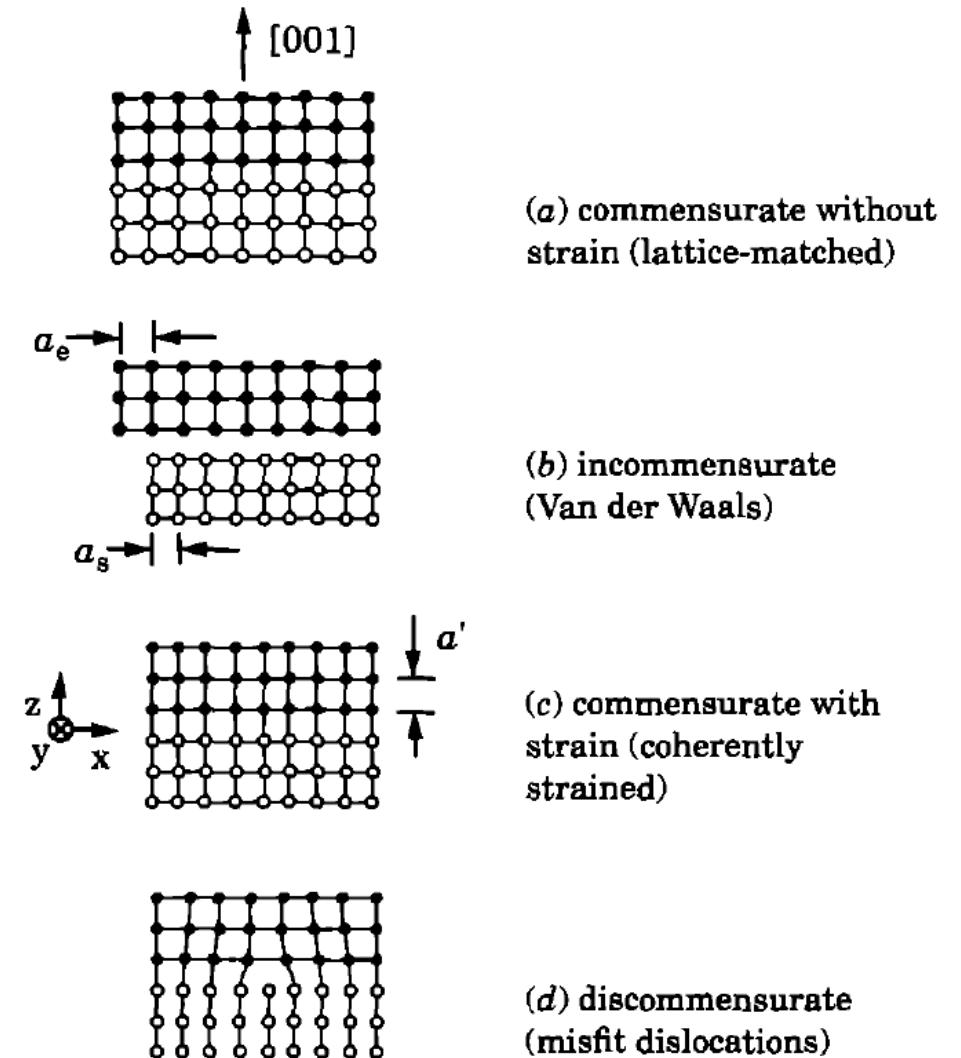
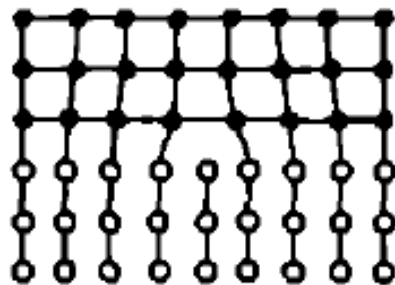


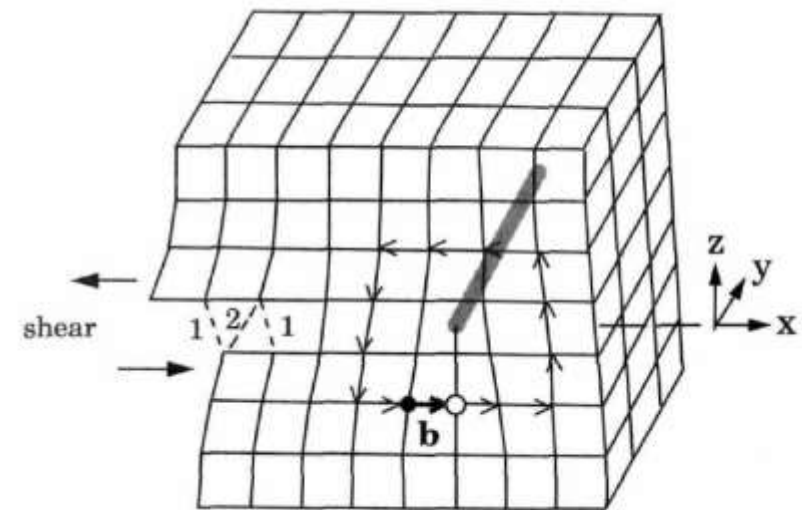
Figure 6.22 Modes of accommodating epilayer lattice (solid circles) to substrate lattice (white circles).

Descasamento

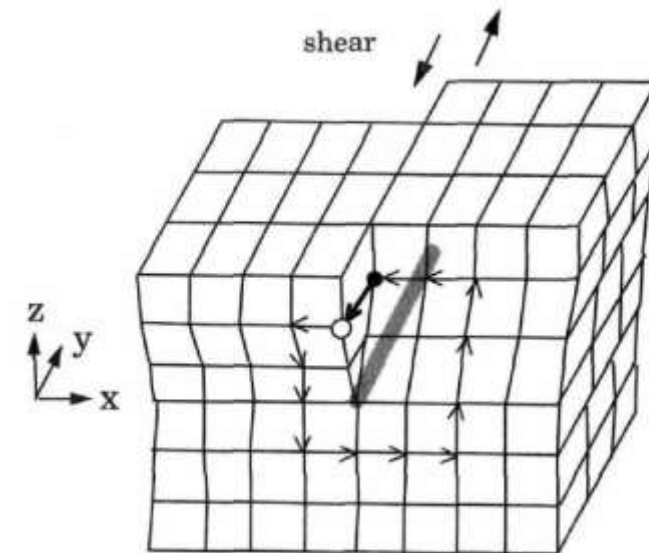
O que acontece quando a EPITAXIA não vai tão bem?



**(d) discommensurate
(misfit dislocations)**



(a) edge-type

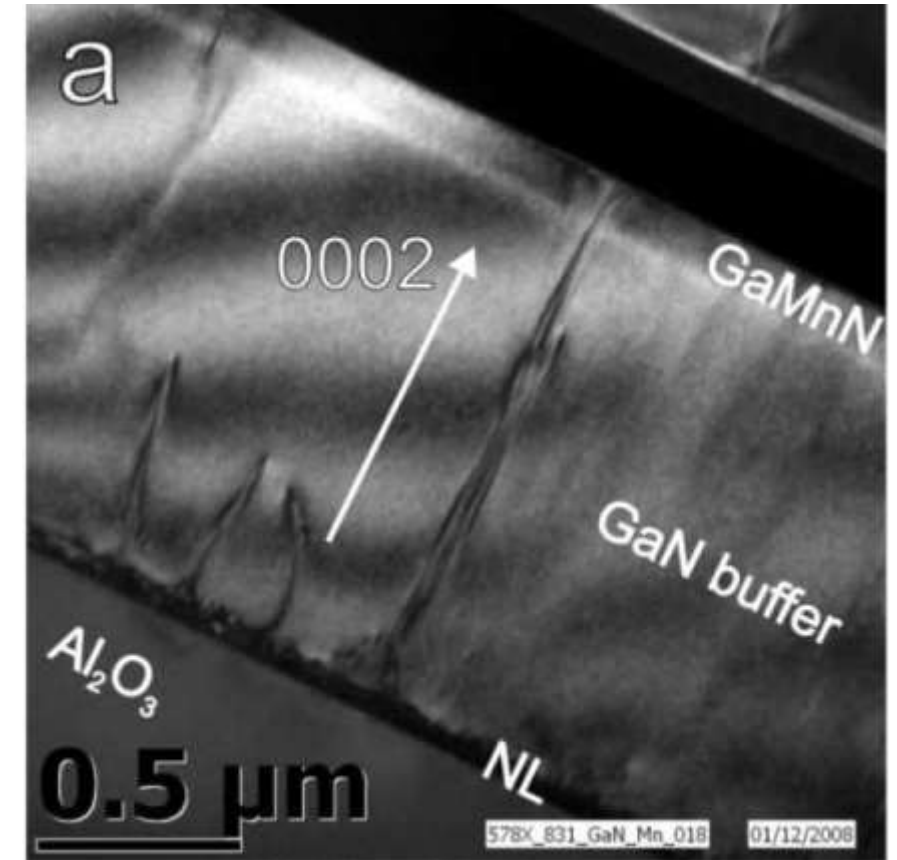


(b) screw-type

Descasamento

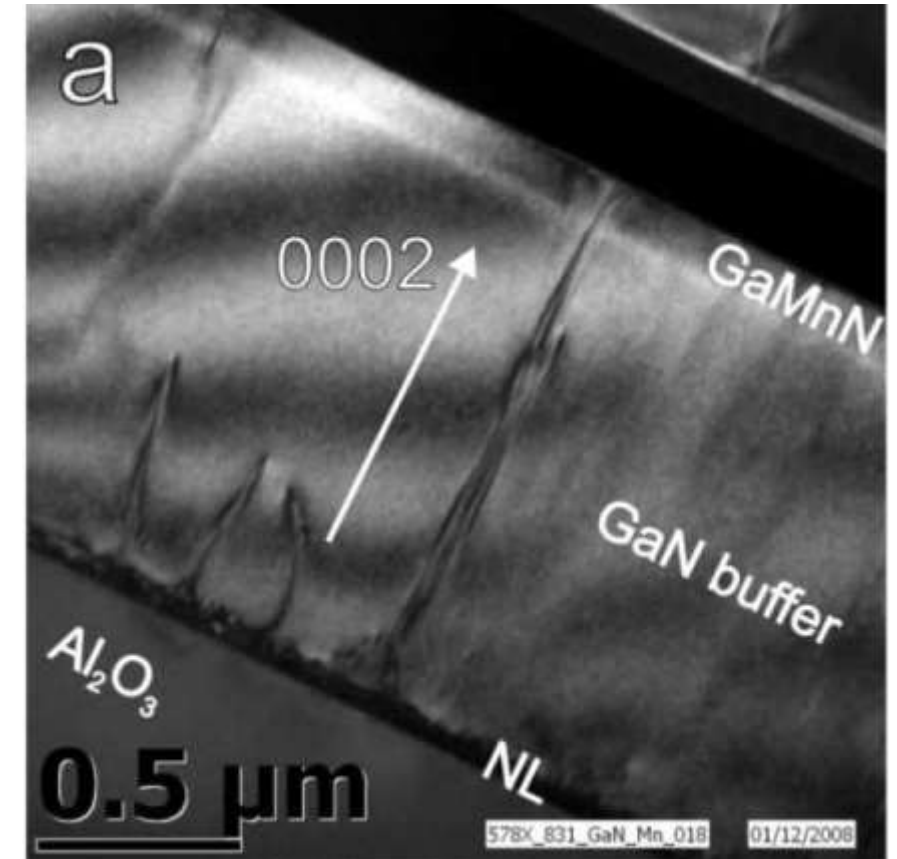
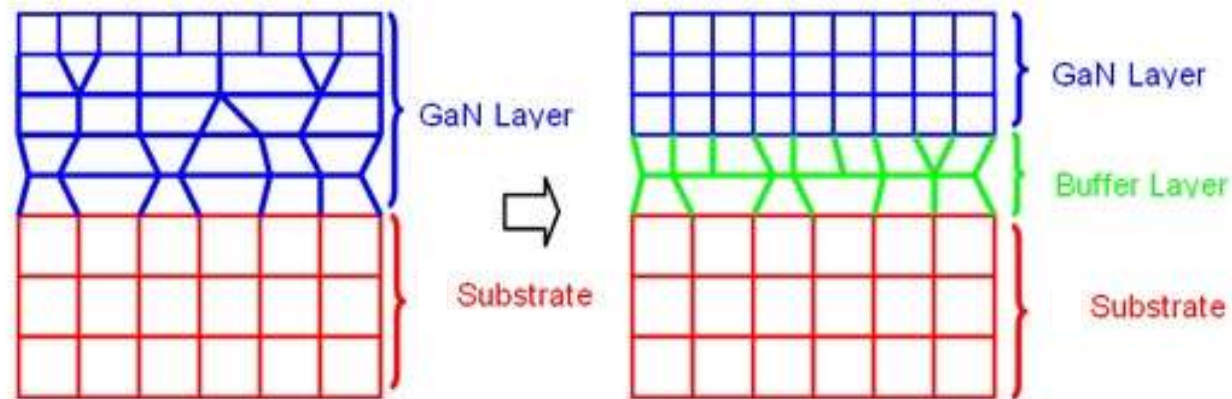
Exemplo – Discordância – buffer layer

- GaN – MOVPE - Leite DMG – 2011 (tese Dr)



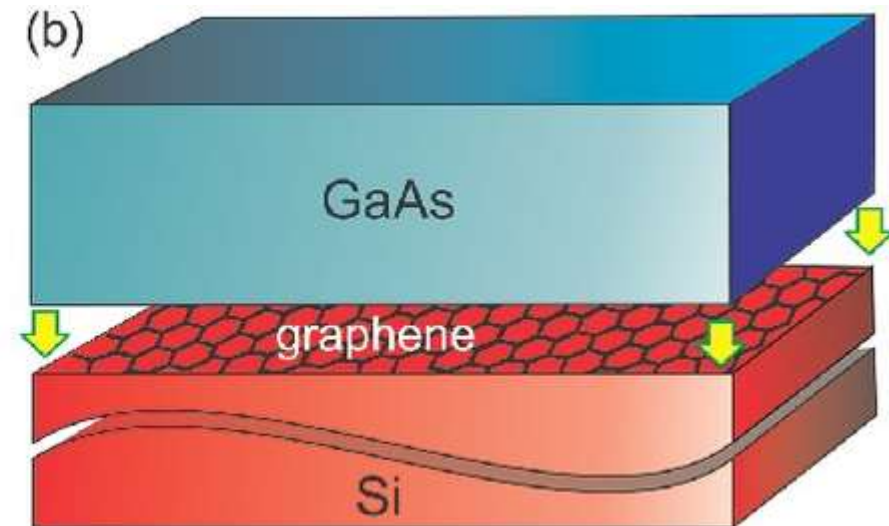
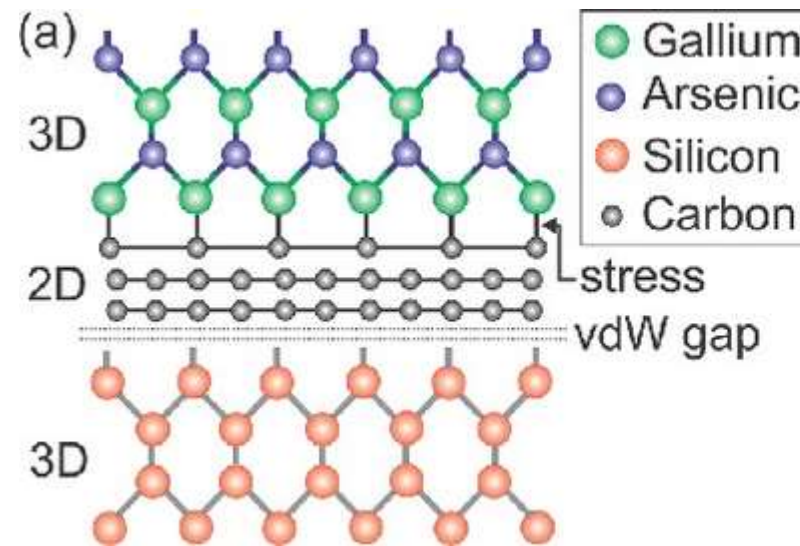
Buffer Layer

- Camada intermediária de alívio de tensões
- Deve manter boa adesão
- Barrar discordâncias
- Diminuir efeito de temperatura



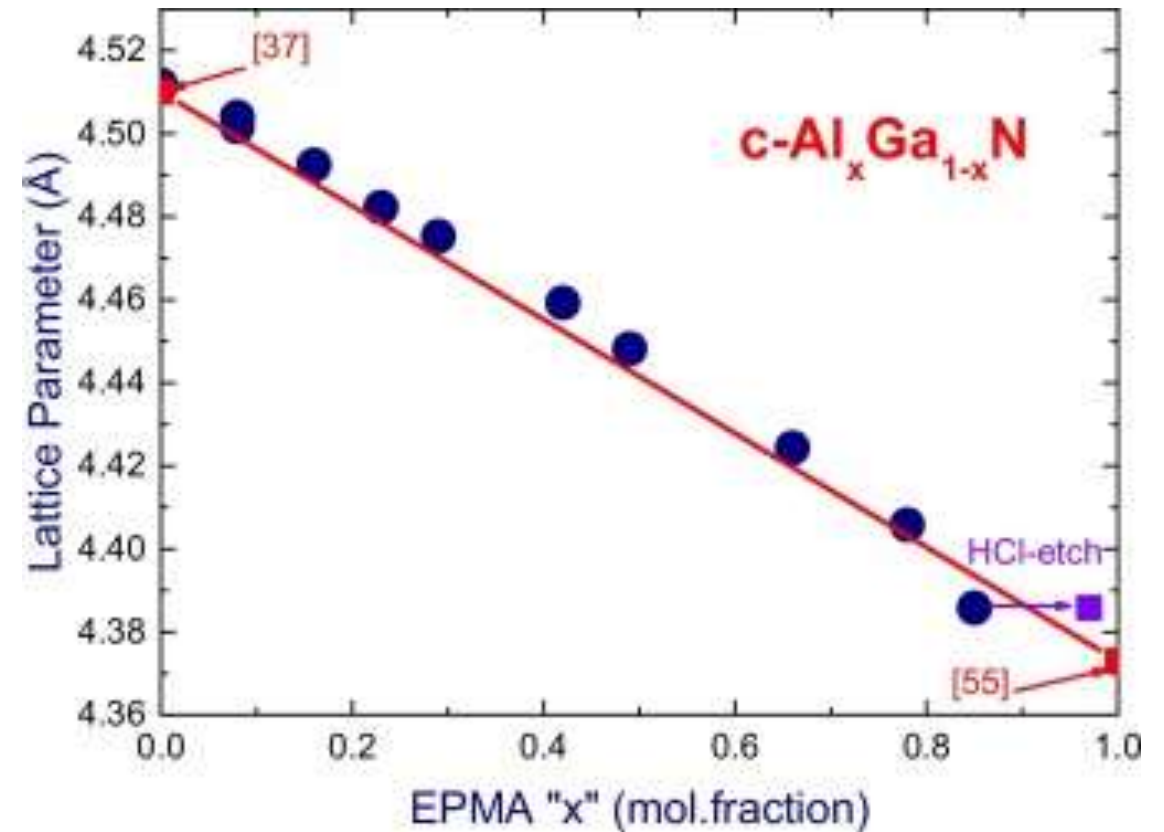
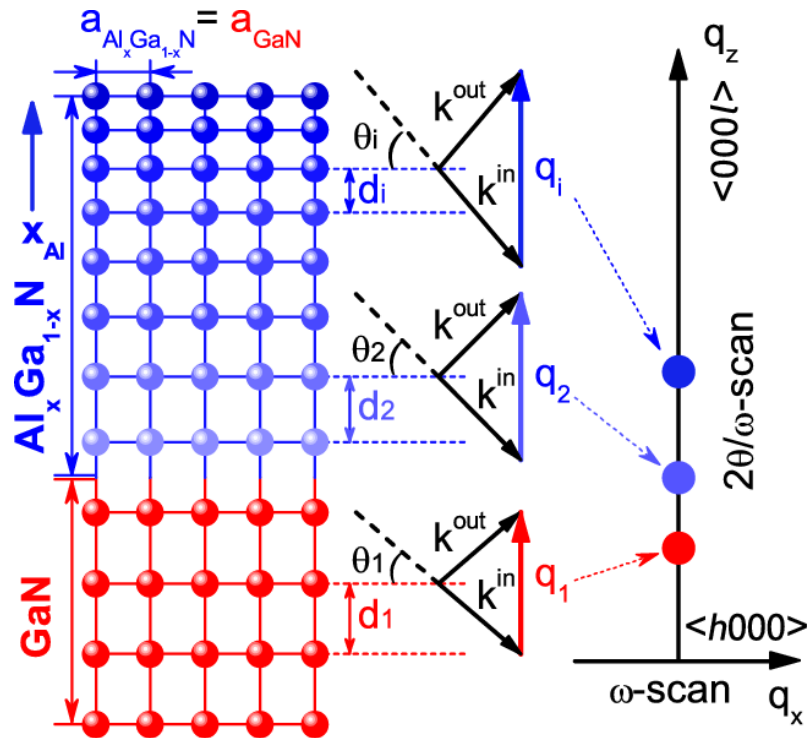
Buffer Layer

- Camada intermediária de alívio de tensões
- Deve manter boa adesão
- Barrar discordâncias
- Diminuir efeito de temperatura



Buffer Layer

- Uso da Lei de Vegard para soluções sólidas



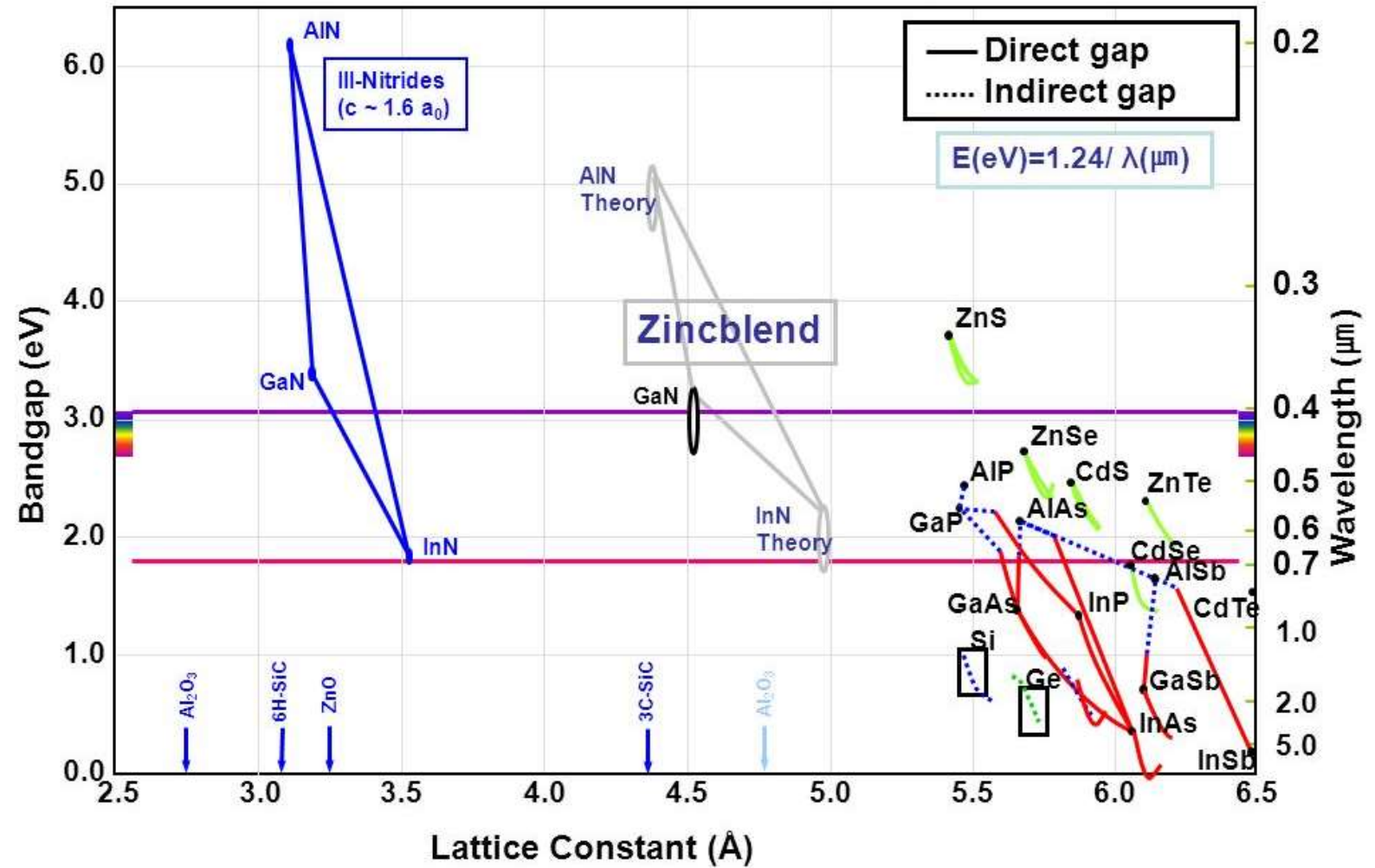
Lei de Vegard

- Uma lei empírica que diz que o parâmetro de rede (a_{SS}) de uma **solução sólida** de dois componentes varia LINEARMENTE com a proporção (x) da mistura
- Seja a solução sólida $A_{1-x}B_x$ (dois componentes com mesma estrutura cristalina), seu parâmetro de rede pode ser aproximado por:

$$a_{SS} = (1-x) a_A + x a_B$$

Lei de Vegard

- Lei de Vegard em Semicondutores
- Relação com gap óptico



Exercícios

1) calcule f para:

- AlAs sobre GaAs $\rightarrow$ AlAs/GaAs
- GaAs sobre Si $\rightarrow$ GaAs/Si
- Fe sobre GaAs $\rightarrow$ Fe/GaAs

$$f = \frac{(a_e - a_s)}{(a_e + a_s)/2} \approx (a_e - a_s) / a_s$$

Parâmetro de rede do AlAs (zinco-blenda), $a_0 = 0,562\text{nm}$

Parâmetro de rede do GaAs (zinco-blenda), $a_0 = 0,565\text{nm}$

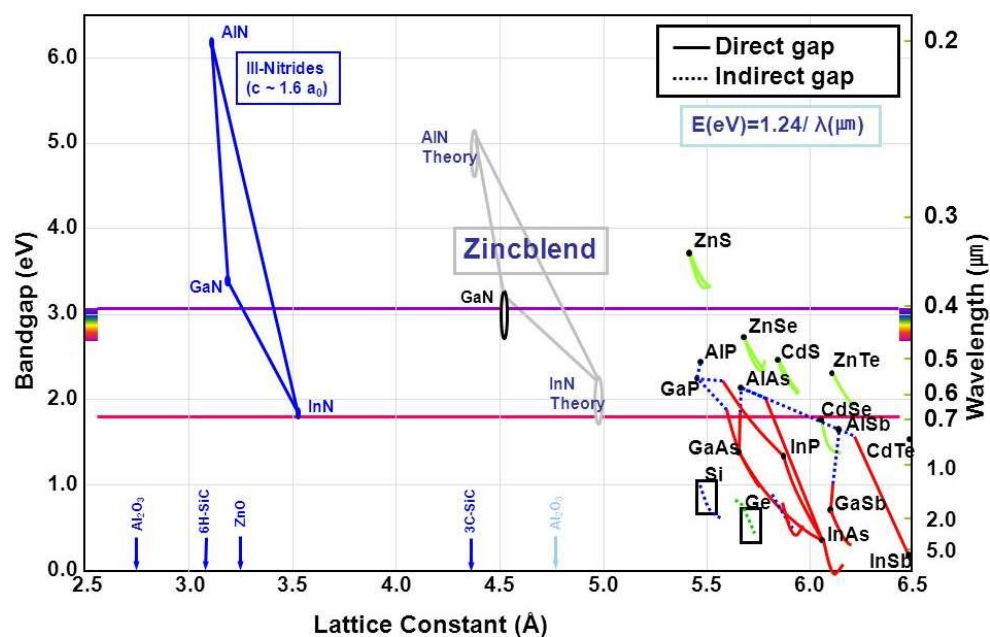
Parâmetro de rede do Si (diamante), $a_0 = 0,543\text{nm}$

Parâmetro de rede do Fe (BCC), $a_0 = 0,286\text{nm}$

Exercícios

2) Considere o filme de $\text{In}(x)\text{Ga}(1-x)\text{N}$, com $x = 0.5$

- a) Qual o valor da energia do gap deste filme em eV?
- b) Qual seria um bom substrato para este filme? Determine f para sua escolha
- c) Se puder escolher um material para camada buffer deste material, qual escolheria? Explique



Exercícios

Do Livro Smith (cap 6): 1, 3, 14