

2

Modelos de crescimento, propriedades estruturais e mecânicas do InP

Dois aspectos importantes serão tratados neste capítulo: na seção 2.1 serão apresentados os modelos de crescimento epitaxial, que são úteis no entendimento da nucleação de nanoestruturas e da formação de monocamadas. Na seção 2.2 são apresentados os possíveis defeitos que pode haver em um cristal. A seção 2.3 trata das possíveis deformações que podem ocorrer em um material quando submetido a pressões externas. Por último, as seções 2.4 e 2.5 ilustram a estrutura e as propriedades mecânicas do InP além de uma discussão a respeito da deformação plástica através da nucleação de discordâncias e a propagação de trincas sob indentação.

2.1.

Noções de crescimento epitaxial

O termo *epitaxia* descreve o crescimento ordenado de um material cristalino, camada a camada, sobre algum substrato monocristalino. De fato, epitaxia vem do grego (*epi* significa "em cima" e *taxis* "de modo ordenado") e relaciona um tipo de interface entre um substrato e um filme fino que é depositado sobre a superfície desse substrato. No caso de um crescimento epitaxial, o substrato atua como uma semente onde o filme que está sendo depositado segue a mesma rede e orientação do substrato. Quando um filme fino é depositado em um substrato de mesmo material, temos o processo conhecido como homoepitaxia; por outro lado, se os materiais são diferentes (substrato e depósito) temos o caso da heteroepitaxia. O primeiro caso é usado amplamente quando se necessita de materiais que contenham menos imperfeições e impurezas que o substrato montando sobre o mesmo uma fina camada de filme, ou mesmo camadas com diferentes níveis de dopagens. O segundo caso é em geral aplicado para crescer filmes cristalinos em que monocristais não podem ser obtidos, além de fabricar camadas cristalinas integradas de diferentes materiais. Isto inclui a formação de nanoestruturas.

Nos dias atuais, é relativamente fácil obter nanoestruturas com diversas combinações de materiais dos grupos III-V ou II-VI, além de compostos ternários ou mesmo quaternários. No caso de em um sistema heteroepitaxial como o InAs/GaAs a diferença no parâmetro de rede entre a camada que está sendo crescida epitaxialmente e o substrato, provoca a formação espontânea de ilhas em 3D. A formação dos QDs é uma reação do material para aliviar a tensão à qual está sendo submetido, devido a diferença entre os parâmetros de rede do *bulk* ou substrato e das camadas epitaxiais. O tamanho e a densidade dos pontos quânticos dependem essencialmente dos seguintes parâmetros de crescimento: temperatura do substrato, tempo de crescimento e a razão dos fluxos dos elementos dos grupos II-VI ou III-V³⁹. No entanto, a formação espontânea destas ilhas em 3D não acontece em todos os sistemas heteroepitaxiais. Em geral, quando os parâmetros de rede do material a ser depositado e do substrato possuem valores próximos o filme depositado tende a crescer de modo uniforme camada a camada. No entanto, apesar da diferença entre os parâmetros de rede do InAs e do InP ser de apenas 3,2%, pontos quânticos de InAs são obtidos.

Existem três principais modos de crescimento epitaxial, mostrados na figura 5: nucleado, monocamada e nucleação seguido de monocamada. No primeiro deles, os átomos depositados formam ilhas na superfície do substrato que vão crescendo enquanto o processo de deposição é mantido, até que coalescem e formem uma monocamada. Aqui os átomos depositados possuem forças de atração entre eles maior do que entre eles e o substrato. Este modo de crescimento é conhecido como Volmer Weber. No crescimento em monocamada, também conhecido como Frank-van der Merve, o cristal cresce camada a camada bi-dimensionalmente, onde os átomos depositados são mais fortemente ligados ao substrato do que entre eles mesmos. Este modelo pode ser usado para fabricar estruturas bi-dimensionais tais como poços quânticos. O último modo é o Stranski-Krastanov que começa com o crescimento de uma camada bidimensional, conhecida como camada de molhamento (*wetting layer*). Após a deposição de algumas poucas monocamadas, uma espessura crítica é alcançada iniciando a formação de ilhas¹.

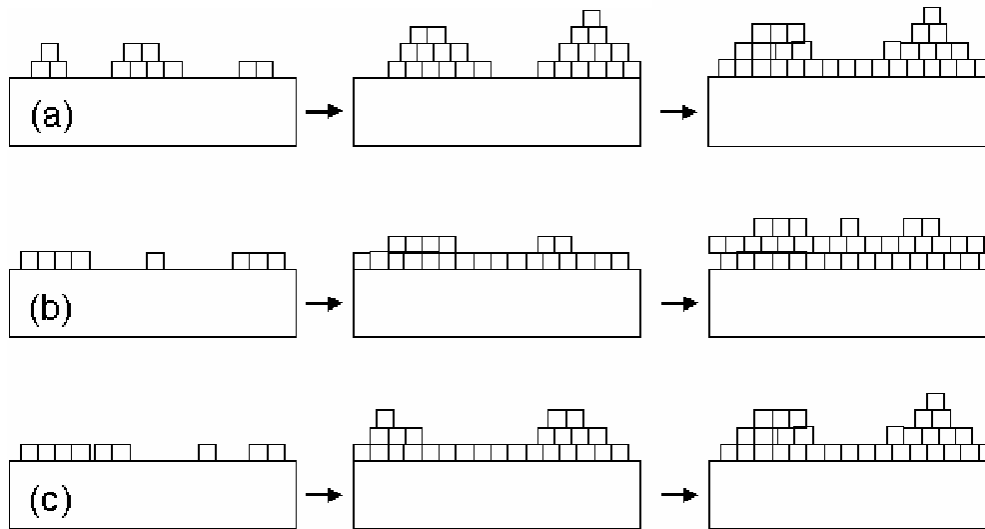


Figura 5 – Diagrama esquemático dos três modelos de crescimento de filmes: (a) ilhas (Volmer Weber), (b) camadas (Frank-van der Merve) e (c) ilhas + camadas (Stranski-Krastanow).

Cada um destes cenários depende das variáveis termodinâmicas envolvidas, tais como a temperatura da amostra, difusão dos átomos envolvidos na superfície, entre outros, e dão origem aos três modos de epitaxia. Em um sistema em que os substratos e os materiais a serem depositados possuem os mesmos parâmetros de rede, os modos de crescimento são governados pelas energias superficiais por unidade de volume γ : a energia livre superficial do substrato (γ_s), a energia livre do filme fino depositado (γ_f) e a energia de interface filme-substrato (γ_{fs}).

Considerando um sistema em equilíbrio mecânico, o balanço das forças que atuam nesse sistema é dado pela Equação de Young:

$$\gamma_s = \gamma_f + \gamma_{fs} \cos(\theta)$$

onde θ é o ângulo de contato entre o material depositado e a superfície do substrato e depende das propriedades dos materiais envolvidos. Se $\theta = 0$, $\gamma_s = \gamma_f + \gamma_{fs}$ e o material depositado molha a superfície crescendo de acordo com o modelo de Frank-van der Merve; no entanto se $\theta > 0$, $\gamma_s < \gamma_f + \gamma_{fs}$ o material se deposita em forma de ilhas de acordo com o modelo de Volmer Weber.

Para o caso de um sistema onde os parâmetros de rede dos materiais são diferentes, efeitos de tensão devem ser levados em conta. Para uma espessura

crítica, γ_{fs} alcança um valor limite que favorece o crescimento em 3D. O modelo de Stranski-Krastanov ocorre porque é mais favorável ao sistema relaxar a tensão através da formação de ilhas do que em uma camada 2D perfeita¹.

2.2. Defeitos em cristais

Pode-se considerar uma imperfeição ou um defeito em um cristal, qualquer desvio na estrutura de sua rede periódica de átomos. Todos os materiais cristalinos possuem algum tipo de desvio em sua rede. Esses desvios são conhecidos como defeitos cristalinos e são classificados de acordo com a sua dimensionalidade em pontuais, lineares, planares e volumétricos. Podem ser citados, respectivamente, como exemplos destes defeitos cristalinos, as vacâncias, defeitos em linha, falhas de empilhamento e regiões amorfas em um cristal.

Os cristais podem apresentar defeitos alinhados e contínuos em sua estrutura, dando origem às imperfeições de linha. Os defeitos em linha, também chamados de discordâncias, causam a distorção da rede cristalina em torno de uma linha e são representados pelo símbolo $\perp$. Estes defeitos podem ser produzidos quando o cristal está sendo crescido, durante a sua solidificação, na sua deformação plástica ou ainda como resultado da concentração de vacâncias.

Estas discordâncias podem ser interpretadas como sendo descontinuidades de planos atômicos no interior de um cristal. Existem três tipos básicos de discordâncias: de borda ou cunha (*edge*), em hélice, espiral ou parafuso (*screw*) e mistas (*mixed*). Elas acontecem devido à influência de forças externas que provocam tensões em um cristal, e a melhor maneira de descrever uma discordância é através de uma análise da sua formação na rede cristalina.

Como exemplo, uma rede cúbica possui uma discordância de borda se ocorrer à interrupção de um plano atômico como mostra a figura 6. Esse é um tipo de defeito linear centralizado ao redor da linha que é definida ao longo da extremidade do plano extra de átomos. Essa linha é chamada de linha de discordância. Fornecendo energia térmica ao cristal, elas podem mover-se no interior do mesmo podendo até chegar à superfície, dando origem ao nome discordância de borda.

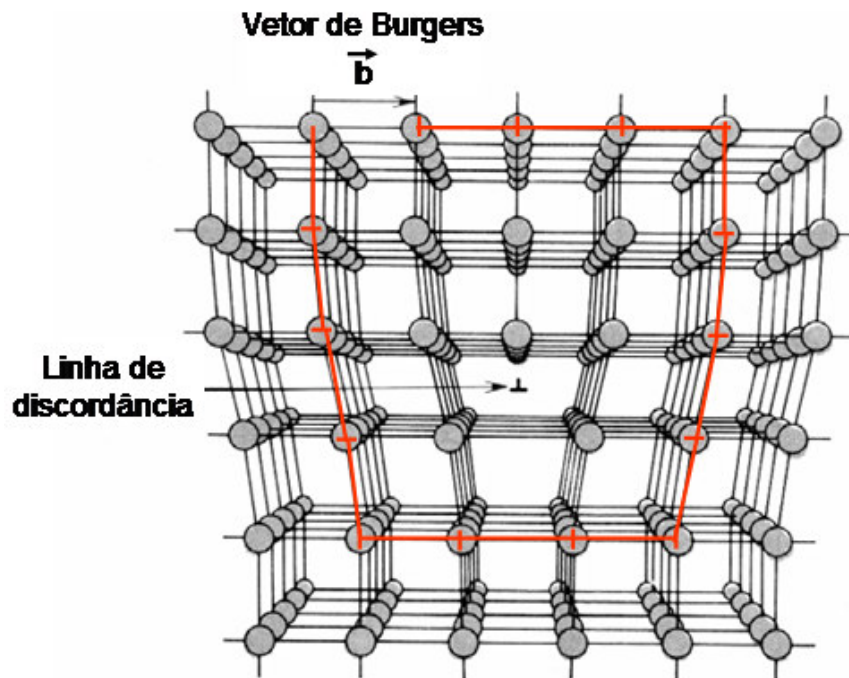


Figura 6 - Ilustração de uma discordância em cunha. A deformação pode ser imaginada como sendo produzida pela inserção ou interrupção de um plano atômico na metade superior. Os átomos da metade superior do cristal são comprimidos por este plano extra, enquanto os da metade inferior se estendem. O vetor de Burgers é representado pela seta e é perpendicular a linha de discordância.

Para descrever cada segmento de linha na rede, representado em vermelho na figura 6, é usado o conceito do vetor de Burgers $\vec{b}$ que dá a magnitude e a direção de distorção da rede. Ao montar um circuito fechado entre os átomos da rede, todos os segmentos têm o mesmo módulo. Porém se o circuito englobar uma discordância de borda como na figura 6, o circuito não fecha, configurando uma falha. O vetor de Burgers é definido como sendo o comprimento desta falha na rede cristalina. No caso da discordância de borda, a direção da linha da discordância é perpendicular ao vetor de Burgers.

Na discordância em parafuso mostrada na figura 7, os planos atômicos perpendiculares à linha de discordância são girados de forma semelhante a uma espiral. Parte do cristal é deslocada em relação ao resto torcendo as ligações químicas.

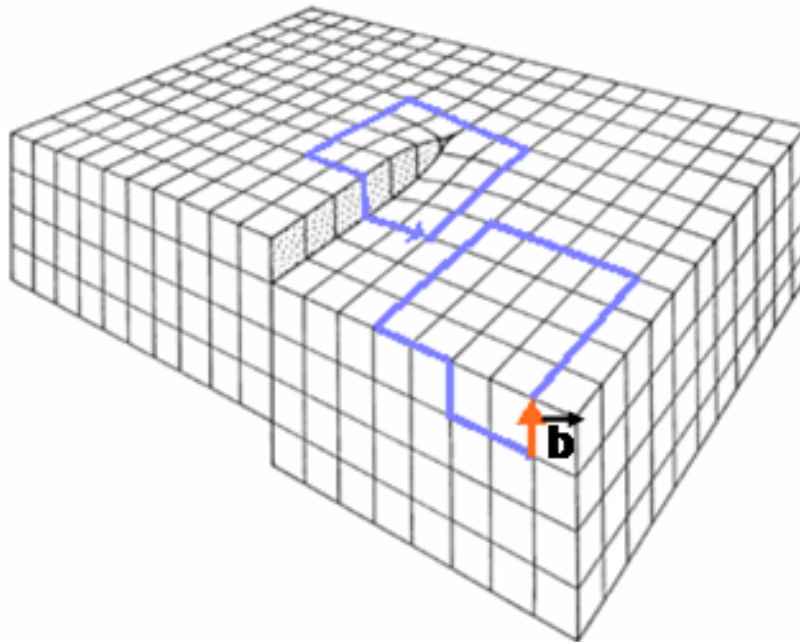


Figura 7 – Ilustração de uma discordância em hélice. Ela marca o contorno entre a parte do cristal que sofreu o escorregamento e a região que não sofreu. O vetor de Burgers mostrado é paralelo à linha de discordância.

Ela recebeu essa denominação devido à inclinação em espiral ou helicoidal que é traçada ao redor da linha de discordância pelos planos atômicos. Neste caso, o vetor de Burgers é paralelo à linha de discordância, que é a linha central da hélice.

A maioria das discordâncias encontradas em materiais cristalinos não é provavelmente nem puramente em cunha nem puramente espiral, mas exibe componentes de ambas. Essas são denominadas de discordâncias mistas. A figura 8 ilustra uma discordância deste tipo com componentes em cunha e espiral.

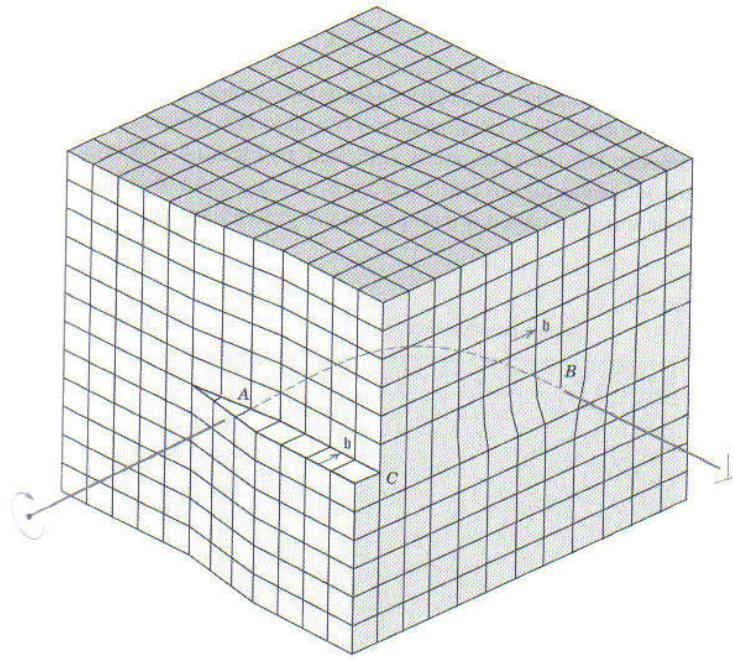


Figura 8 – Representação esquemática de uma discordância que tem características mistas. Em A, a discordância é puramente espiral, enquanto em B é puramente em cunha. Para regiões intermediárias, onde existe uma curvatura na linha de discordância, a natureza é de uma discordância mista⁴⁰.

Em discordâncias mistas, as linhas de discordância não são nem paralelas nem perpendiculares. Embora uma discordância possa mudar de direção e natureza dentro do cristal, o seu vetor de Burgers será o mesmo em todos os pontos ao longo da linha. Na figura 8, todas as posições de discordância em curva terão o vetor de Burgers mostrado na figura.

2.3. Deformações em cristais

Uma das características mais importantes dos materiais é a capacidade dos mesmos em resistir ou transmitir tensões. A resposta desses materiais sob tensão está diretamente relacionada com a propriedade do material em se deformar elasticamente ou plasticamente.

Um material sofre uma deformação elástica, quando o mesmo, ao ser submetido a esforços mecânicos, apresenta deformações não-permanentes, ou seja, ao se remover tais tensões, o material retorna as suas dimensões originais. A nível atômico, a deformação elástica é observada quando as células unitárias

alteram suas dimensões, alongando, se o esforço for de tração ou comprimindo, se o esforço for de compressão. Quando os esforços de tração ou compressão cessam, as células cristalinas voltam às formas e dimensões originais. Se um material apresenta comportamento elástico, o mesmo segue a lei de Hook, que estabelece que sua deformação varia linearmente com a tensão aplicada. A relação entre tensão aplicada (σ) e a deformação resultante (ϵ) é constante e denominada de Módulo de Elasticidade (E), ou:

$$E = \frac{\sigma}{\epsilon}$$

No caso do comportamento plástico, quando o mesmo material é submetido a tensões mais elevadas, suas dimensões são alteradas permanentemente. Cessados os esforços, o material não retorna as suas dimensões originais. A nível atômico, a deformação plástica é principalmente observada quando planos atômicos escorregam uns sobre os outros, de tal maneira que ao se remover os esforços mecânicos, o material não exibe suas dimensões originais.

A deformação plástica corresponde ao movimento de um grande número de discordâncias. Uma discordância em cunha se move em resposta à aplicação de uma força externa perpendicular a sua linha. O mecanismo do movimento está representado na figura 9.

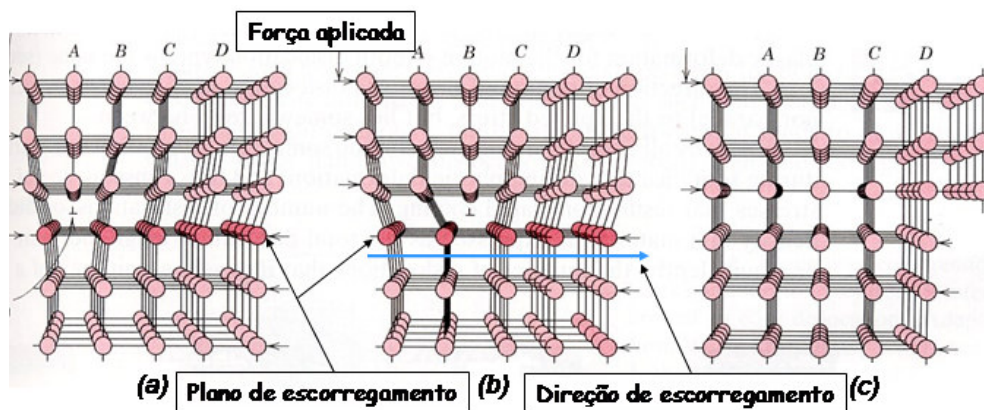


Figura 9 – Arranjos atômicos que acompanham o movimento de uma discordância em cunha devido ao seu movimento provocado por uma força externa. (a) O plano extra é designado por A. (b) A discordância se move a uma distância atômica na medida em que A se liga ao plano B. (c) Um degrau se forma na superfície do cristal ⁴⁰.

As discordâncias não se movem com a mesma facilidade em todas as direções de um cristal. Normalmente, existe um plano preferencial e nesse plano existem direções específicas onde as discordâncias se movimentam. Esse plano é chamado de plano de escorregamento, ao longo do qual a linha de discordância passa como mostrado na figura 9. Analogamente, a direção em que o movimento acontece se chama direção de escorregamento. Essa combinação de plano e direção de escorregamento é denominada sistema de escorregamento. O principal mecanismo de deformação plástica é produzido pelo movimento de uma discordância. Nas estruturas cristalinas, estes escorregamentos acontecem em torno de planos atômicos que possuem alta densidade de átomos. Dessa maneira, a formação e movimento das discordâncias têm papel fundamental para o aumento da resistência mecânica em muitos materiais. A resistência mecânica pode ser aumentada restringindo-se o movimento das discordâncias.

Os átomos de um cristal definem uma série de planos, e o conhecimento destes é de suma importância, uma vez que muitas das propriedades dos materiais variam de acordo com o plano analisado. Eles são identificados por um conjunto de três números constituindo os índices de Miller do plano. Quando dois planos paralelos entre si são equivalentes e possuem os mesmo índices, estes números são encontrados da seguinte forma: se o plano passa pela origem, um outro plano paralelo deve ser construído mediante uma translação. O plano cristalográfico ou interceptará cada um dos três eixos ou será paralelo a algum dos eixos; o comprimento da interseção do plano com cada eixo é determinado em termos dos parâmetros de rede a , b e c . Depois, calcula-se o inverso desses valores e se necessário, esses números são modificados para o conjunto de menores inteiros possíveis pela multiplicação ou divisão por um fator comum. Um plano que é paralelo a um eixo pode ser considerado como tendo sua interseção no infinito e, portanto um índice igual a zero. O resultado é colocado entre parênteses $(h \ k \ l)$ e no caso de um conjunto de planos simetricamente equivalentes representa-se entre chaves $\{h \ k \ l\}$. Analogamente, podem-se definir direções cristalográficas. Elas também são expressas por três números inteiros que mantêm a mesma relação que as componentes de um vetor na direção considerada e colocada entre colchetes $[h \ k \ l]$. No caso de direções equivalentes, o resultado fica expresso da forma seguinte: $\langle h \ k \ l \rangle$.

Uma discordância perfeita é aquela que, ao se mover ao longo de seu plano de escorregamento, deixa os átomos em posições equivalentes às aquelas ocupadas originalmente. Se a é o parâmetro de rede de um cristal cúbico de

faces centradas, o comprimento do menor vetor de Burgers possível para uma discordância perfeita nesta estrutura cristalina é $a/\sqrt{2}$. Este vetor de Burgers pode ser escrito como $\mathbf{b} = a[110]/2$. Discordâncias do tipo $a\langle 110 \rangle/2$ que estão em planos $\{111\}$ podem diminuir suas energias, que é proporcional ao quadrado do vetor de Burgers, fazendo combinações entre si ou se dividindo em novas discordâncias. Mas para isto, estas combinações devem obedecer à regra de Frank que afirma que uma discordância com um vetor $\mathbf{b}_3$ só pode se dividir se $\mathbf{b}_3^2 > \mathbf{b}_1^2 + \mathbf{b}_2^2$. Estas podem estar em um mesmo plano $\{111\}$ ou não.

Se duas discordâncias se encontram em planos paralelos (111), seus vetores de Burgers têm as seguintes possibilidades: $\pm \mathbf{b}_1, \pm \mathbf{b}_2, \pm \mathbf{b}_3$. Entre as várias combinações, existem dois tipos distintos como mostram as reações:

$$\mathbf{b}_1 + \mathbf{b}_2 = \frac{a}{2}[01\bar{1}] + \frac{a}{2}[\bar{1}01] = \frac{a}{2}[\bar{1}10] = \mathbf{b}_3$$

$$\mathbf{b}_1 - \mathbf{b}_2 = \frac{a}{2}[01\bar{1}] - \frac{a}{2}[\bar{1}01] = \frac{a}{2}[11\bar{2}]$$

Segundo a regra de Frank, apenas a primeira reação é energeticamente favorável. Se agora as duas discordâncias estão em planos (111) quaisquer, elas podem combinar-se apenas na interseção dos dois planos. Tomando os planos (111) e (11-1) como exemplos, os vetores de Burgers de uma discordância no plano (111) estão nas reações acima. Discordâncias móveis no plano (11-1) podem ter os seguintes vetores: $\mathbf{b}_4 = a[-110]/2$, $\mathbf{b}_5 = a[101]/2$ e $\mathbf{b}_6 = a[011]/2$. Para determinar quais dos grupos $a\langle 110 \rangle/2$ são possíveis vetores de Burgers de discordâncias móveis em um particular plano escorregado, faz-se o uso do fato de que o produto escalar entre $\mathbf{b}$ e o vetor normal ao plano escorregado de sua discordância deve ser nulo.

Se dois planos (111) e (11-1) se movem de acordo com o mesmo vetor de Burgers, no ponto de interseção dos planos as discordâncias devem ser do tipo parafuso. Porém, se os planos tiverem a configuração mostrada na figura 10, eles se encontram em um ângulo de $70^\circ 32'$.

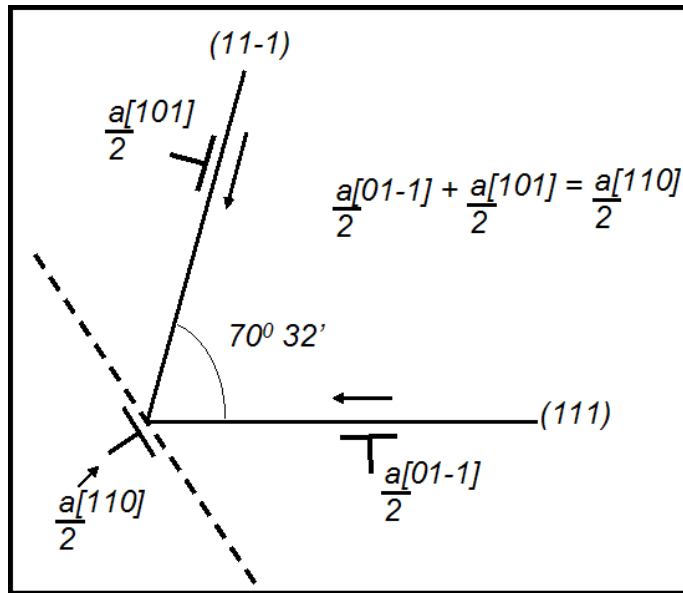


Figura 10 – Trava de Lomer ⁴¹.

Na figura 10, as setas indicam a direção de movimento e a discordância resultante é do tipo em cunha. Sua direção, $[-110]$, é perpendicular ao seu vetor de Burgers, $a[110]/2$. O plano de escorregamento da nova discordância é o (001). Como este não é um plano de escorregamento, a nova discordância não se move. Ela serve como uma barreira para outras discordâncias e é conhecida como trava de Lomer. Cottrell mostrou que as estas discordâncias imóveis podem se dividir em discordâncias imperfeitas⁴¹. Esta nova barreira é chamada de trava de Cottrell-Lomer. Estas reações que criam estas travas são importantes por causa as suas aplicações no endurecimento de cristais⁴¹.

Quando um substrato de InP ou de um outro material qualquer é submetido a uma pressão em sua superfície devido a uma indentação ele sofre deformações. Assim, define-se dureza como sendo a tensão máxima que o material pode suportar sem sofrer uma deformação plástica⁴⁰.

A dureza é calculada como sendo a razão entre a força normal aplicada F por um indetador e a sua área de contato projetada na superfície. A figura 11(a) mostra um esquema de uma ponta semi-esférica de raio R indentando uma superfície até uma profundidade h . Durante a indentação, uma curva de força versus profundidade de indentação é gerada.

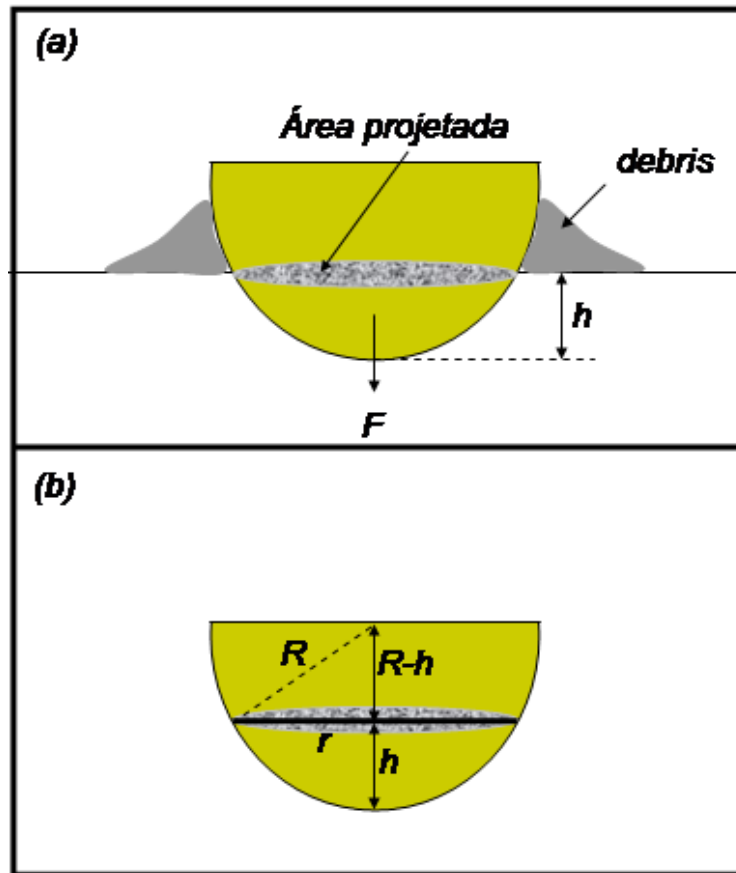


Figura 11 – Esquema ilustrando como é obtido o raio da ponta através de uma indentação na superfície através do cálculo da área projetada.

A região da curva que corresponde a etapa de descarga, ou seja, quando a ponta começa a ser afastada da amostra após a indentação, pode ser dividida em três partes. Fazendo o ajuste da primeira porção da curva por uma reta, o ponto em que ocorre a interseção desta reta com o eixo de profundidade de penetração é definido como a profundidade de contato.

De acordo com a figura 11(b), o raio r da área circular projetada pela ponta na superfície é dado por:

$$r = (2Rh - h^2)^{1/2},$$

e dessa forma, a área é dada por:

$$A = \pi(2Rh - h^2)^{1/2}$$

Com este valor de área e a carga do indentador, o valor de dureza do material em questão pode ser encontrado.

A dureza de sólidos depende do teste de indentação usado. Dependendo da geometria da ponta, para um mesmo valor de força aplicada a profundidade de indentação pode ser diferente em um mesmo material. Este fenômeno, conhecido como efeito de tamanho de indentação, *ISE*, geralmente envolve um decréscimo no valor de dureza com o aumento da força aplicada, isto é, com o aumento do tamanho da indentação. Este efeito foi atribuído a diversos fenômenos incluindo o endurecimento de materiais durante a indentação, deformações elásticas, o tamanho das discordâncias geradas, entre outros⁴².

2.4.

Estrutura do InP

A estrutura cristalina do diamante é muito importante pois semicondutores tais como o silício, germânio e outros compostos do grupo III-V, como o InAs e o InP, possuem a mesma estrutura. Esta estrutura pode ser descrita usando planos e direções cristalográficas. Basicamente apenas uma célula unitária é suficiente para descrever o arranjo de átomos e o cristal pode ser reconstruído através de translações e rotações desta célula, usando propriedades de simetria. A célula unitária do InP no espaço real é mostrada na figura 12 onde os átomos de *In* são representados pelas esferas azuis e os átomos de *P* pelas vermelhas com um parâmetro de rede igual a 5,87 Å. Pode-se notar que ela é composta de duas redes cúbicas de faces centradas e entrelaçadas com uma distância de $\frac{1}{4}$ da dimensão da diagonal do cubo, uma em relação a outra. No caso dos semicondutores compostos, a rede recebe o nome de *zincblende*.

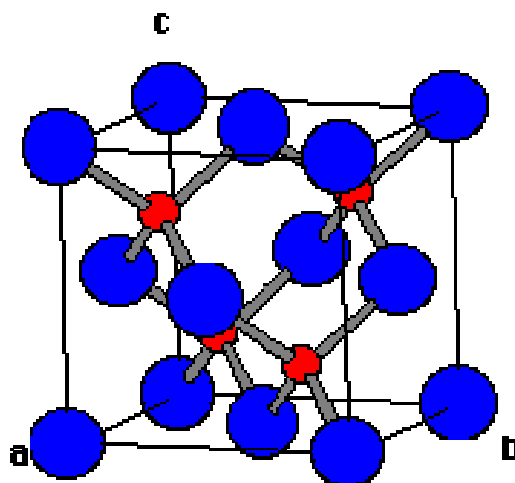


Figura 12 – Ilustração de uma estrutura do tipo *zinblende*. Os átomos de In são representados pelas esferas azuis e os átomos de P pelas vermelhas⁴³.

O material usado neste trabalho são substratos cristalinos de InP dopados com ferro e com 2" de diâmetro. Estas bolachas possuem uma espessura média de 350 μm e um de seus lados é polido eletroquimicamente. Elas são fornecidas pelo fabricante Inpact⁴⁴ e orientados com $0,2^\circ \text{ off } (100)$, isto é, o vetor normal a superfície de cada bolacha de InP faz um ângulo de $0,2^\circ$ em relação a direção [100]. O corte feito com este ângulo propicia o aparecimento de terraços ou degraus atômicos que ajudam a controlar um posterior crescimento sobre o substrato. A figura 13 mostra uma foto dos substratos utilizados além de um esquema contendo as orientações cristalográficas adotadas nesta tese, que seguem o padrão europeu/japonês, e os planos compostos pelos elementos *In* e *P*.

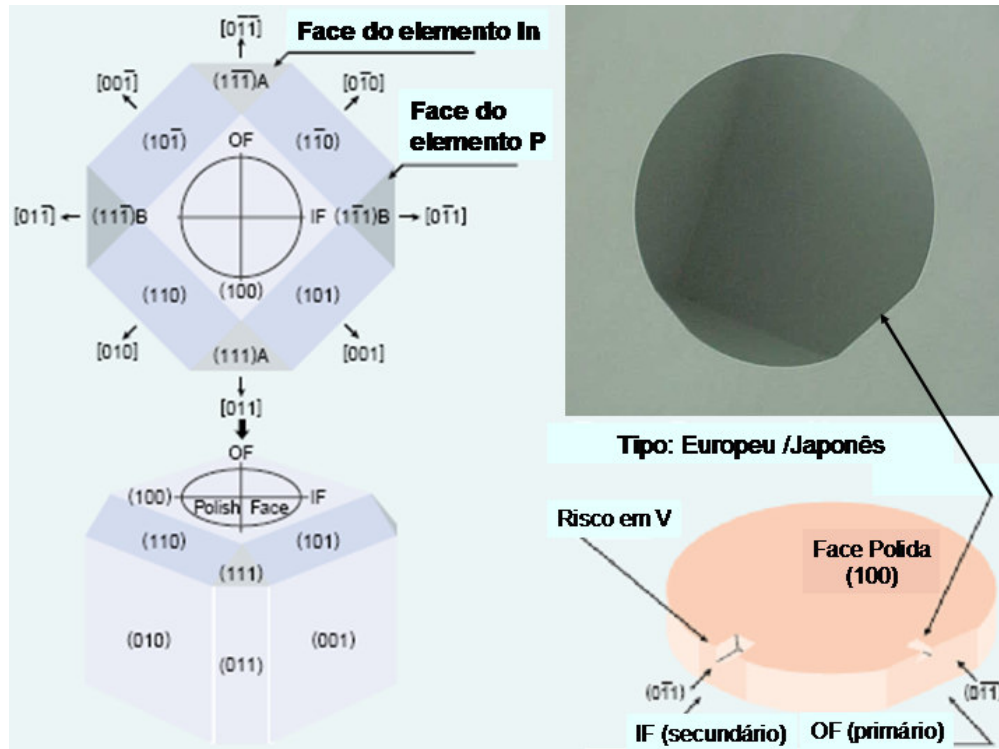


Figura 13 – Imagem típica de um substrato de InP e uma visão esquemática das direções cristalográficas representadas entre colchetes e dos planos cristalográficos representados entre parênteses. As faces que possuem alta densidade de átomos de índio são representadas pela letra A e os planos ricos em fósforo pela letra B.

Devido à simetria do cristal de InP apresentado na figura 13, famílias de planos equivalentes podem ser definidas. A família é um grupo de planos que tem as mesmas propriedades. A figura 14 ilustra um cristal de InP observado de diversos pontos de vista.

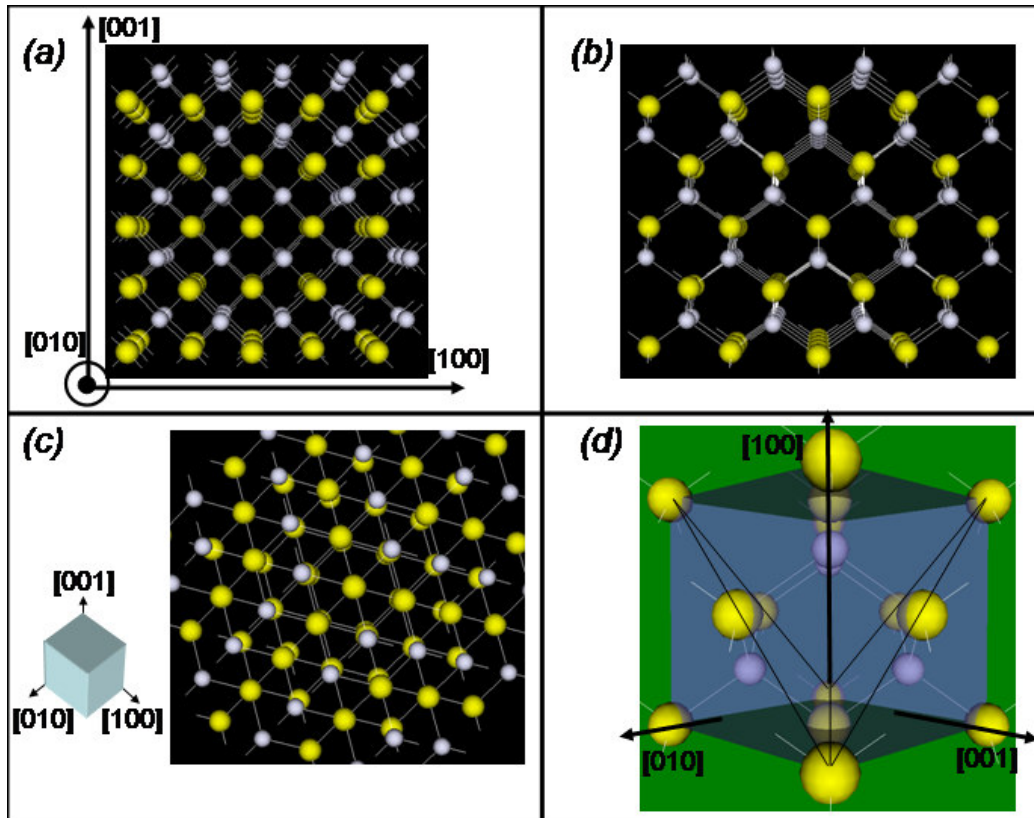


Figura 14 – Visão de vários planos do InP. (a) Vista frontal da família $\{100\}$, (b) $\{110\}$ e (c) $\{111\}$. A figura (d) representa o mesmo que a figura (c) com menos átomos. As esferas amarelas representam átomos de índio e as cinzas átomos de fósforo⁴⁵.

A figura 14(a) representa os planos $\{100\}$ das faces da estrutura *zincblende* do InP. Supondo que o cubo da estrutura do InP seja cortado na diagonal, a face que é exposta é a (110) , apresentada na figura 14(b). As figuras 14(c) e (d) representam a mesma família de planos $\{111\}$. Estas podem ser imaginadas ao cortar o cubo pela sua diagonal principal, expondo planos contendo apenas átomos de índio ou de fósforo. Quando a família de planos exposta contém apenas átomos de índio ela é representada por $\{111\}A$. Caso sejam expostos átomos de fósforo, representa-se por $\{111\}B$. Entre outros, a família de planos $\{110\}$ e $\{111\}$ serão freqüentemente citadas nesta tese uma vez que os planos preferenciais de clivagem que pertencem à família $\{111\}$ e as discordâncias se movem preferencialmente na família de direções $\langle 110 \rangle$.

O mecanismo de deformação mecânica no InP está associado ao escorregamento de planos cristalinos $\{111\}$ nas direções $\langle 110 \rangle$. Observando atentamente a seqüência de planos $\{111\}$ mostrados na figura 15, pode-se notar que devido ao arranjo da estrutura atômica as discordâncias podem pertencer a

planos com pouco espaçamento entre os átomos vizinhos ou a planos em que os átomos estão bem afastados.

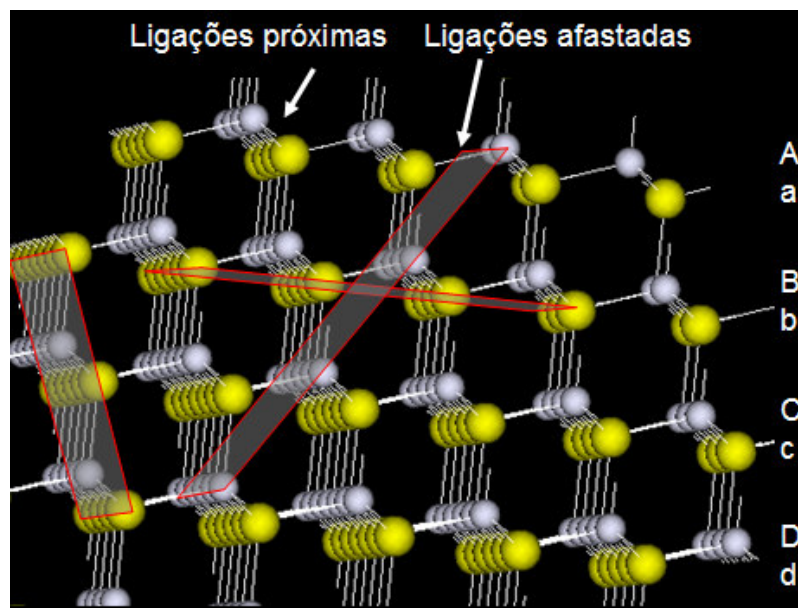


Figura 15 – Sequência de alguns planos {111} no cristal de InP. As bolinhas amarelas representam os átomos de In e as cinzas os átomos de P. As linhas vermelhas ajudam a identificar os planos que tem maiores probabilidades de escorregarem se o cristal for submetido a algum esforço mecânico⁴⁵.

Olhando com mais atenção a sequência de empilhamento de planos {111}, mostrada na figura 15, é possível notar que existe um arranjo estrutural dos átomos fazendo com que as discordâncias possam pertencer a um conjunto onde os planos que escorregam são mais próximos (configuração A-a) e mais afastados (configuração a-B).

A decomposição de uma discordância perfeita em discordâncias parciais ocorre preferencialmente em na configuração A-a. Historicamente, acreditava-se que os planos na configuração a-B eram favorecidos para escorregar. Isto porque apenas uma ligação precisava ser cortada quando uma discordância se move através desses planos, contrastando com a necessidade de quebrar três ligações na configuração A-a. No entanto, a microscopia eletrônica de transmissão revelou que amostras deformadas em altas temperaturas contêm muitas discordâncias parciais, que poderiam apenas existir na configuração A-a⁴⁶. Um plano extra de átomos de uma discordância pode terminar em coluna de átomos de índio ou de fósforo. Dependendo da espécie atômica elas são

definidas como discordâncias tipo α quando terminadas em In e β quando terminadas em P .

2.5.

Propriedades mecânicas do InP

As propriedades mecânicas de semicondutores são analisadas há muito tempo e esses dados têm sido muito úteis para melhorar o manuseio de materiais como, por exemplo, o crescimento de cristais e tratamentos térmicos durante o processamento de um dispositivo. Testes de indentação são usados extensivamente para estudar o comportamento elasto-plástico em materiais como o GaAs e InP. Estes testes são usados para determinar o módulo de elasticidade, a dureza e o ponto de fratura, entre outras propriedades mecânicas. O principal resultado desses testes é a curva de indentação como mostra o gráfico apresentado na figura 16, medido no InP com um AFM⁴⁷.

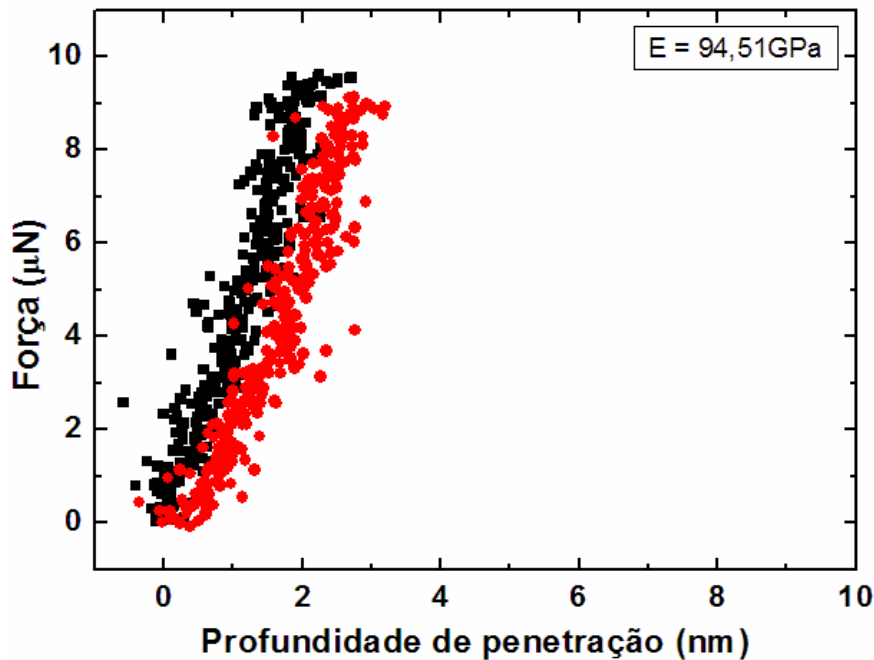


Figura 16 – Curva de deformação mecânica medida por AFM, mostrando a relação entre a força aplicada e a profundidade de penetração da ponta de diamante ou deformação de um material.

No gráfico da figura 16, medido no regime de deformação elástica do InP e analisado pelo método de Oliver e Pharr⁴⁸, a elasticidade observada por uma

ponta de diamante do AFM devido ao processo de indentação foi de $96,2 \pm 12,7$ GPa.

Os processos de deformação plástica gerada em semicondutores III-V têm sido medidos por indentação. Os trabalhos têm se concentrado principalmente em superfícies (100) e (111), pois são comumente usados como substratos para micro e opto-eletrônica⁴⁹.

Ao se realizar pressão sobre o InP, o mesmo deforma elasticamente até que a energia acumulada em sua rede cristalina seja suficiente para promover o escorregamento dos planos. Indentações realizadas com o AFM, utilizando uma ponta de diamante, mostraram que a pressão realizada pela ponta do AFM necessária para produzir deformação plástica é de $11,8 \pm 2,6$ GPa. Normalmente, quando o InP está sob o efeito de carga e este valor de pressão é atingido, ocorre a ruptura abrupta da superfície do InP. Este representa o momento em que elasticamente deformado, o cristal rompe ligações entre os átomos gerando a nucleação e propagação de discordâncias. Este fenômeno é conhecido como *pop in*. Em seguida ocorre uma relaxação do material e incrementando o valor de pressão novos eventos de *pop in* podem acontecer.

Na região do substrato em torno do local aonde a ponta o indenta, laços de discordância são gerados e se arranjam em uma configuração específica chamada de braços de roseta (*rosette arm*). Este é definido por dois planos {111} em formato de V e geralmente alinhados com as direções $\langle 110 \rangle$ ⁵⁰. A figura 17 apresenta uma imagem de alta resolução de microscopia de transmissão de um substrato de InP submetido a uma força aplicada de 25 mN pela ponta de diamante de um indentador⁵¹.

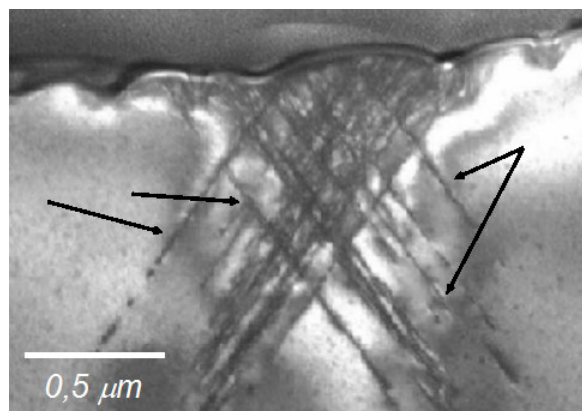


Figura 17 – Visão transversal da amostra de InP, através de um microscópio de transmissão, deformada a temperatura ambiente sob 25 mN. As setas pretas mostram os planos que deslizaram.

Na imagem da figura 17, podem-se observar planos de clivagem $\{111\}$ que deslizaram nas direções $\langle 110 \rangle$, indicados pelas setas pretas.

Foi mostrado que diferentes discordâncias podem ocorrer ao longo das diversas direções $\langle 110 \rangle$. Elas são do tipo α que ocorrem ao longo da direção $[110]$ com átomos do grupo III (fósforo), enquanto discordâncias β acontecem ao longo da direção $[-110]$ com átomos do grupo V (índio). Cada tipo de discordância possui diferentes velocidades e mobilidades resultando em padrões assimétricos nos braços das rosetas⁴⁹.

Este conhecimento básico das discordâncias no InP é necessário para um melhor entendimento dos mecanismos de deformação sob indentação, assim como da forma como estes mecanismos atuam como pontos de nucleação para um futuro crescimento de nanoestruturas de InAs.