

3

Revisão da literatura

Propriedades mecânicas medidas do InP

Desde os anos 70 já eram observadas as curiosas propriedades mecânicas dos compostos III-V. A assimetria das discordâncias existentes nos cristais com estrutura zinblende devido às diferentes discordâncias α e β foi observada por Abrahams, que atribuiu essa assimetria a diferença entre as velocidades de deslocação dos átomos das colunas III e V²³. Em 1976, Brasen²⁴ mediu a anisotropia nas propriedades mecânicas do InP nas diferentes direções e planos utilizando uma ponta Knoop. Seus dados indicaram que a dureza Knoop medida através de testes de indentação no plano {111} é independente da orientação da ponta. Entretanto, os valores medidos na superfície {001} do InP apresentam uma anisotropia dependendo da orientação da ponta em relação aos planos da superfície. O maior valor de dureza encontrado para indentações no plano {001} foi orientando a ponta na direção $\langle 100 \rangle$. A anisotropia da dureza medida com uma ponta Knoop foi confirmada em trabalho posterior em 1984²⁵.

Trabalhos de estudos da dinâmica das discordâncias em semicondutores III-V aparecem em meados dos anos 1980. Warren e colaboradores²² observaram rachaduras radiais além de assimetria no padrão de discordâncias, similares a braços de roseta, geradas a partir de indentações na superfície do GaAs (001). É proposto um modelo para o escorregamento dos planos ao redor de uma indentação que explica a assimetria dos braços de roseta como sendo função das diferentes velocidades dos dois tipos de discordâncias existentes nos compostos III-V, discordância tipo α e β . A velocidade das diferentes discordâncias que podem acontecer nessas estruturas cristalinas foram medidas e estudadas por diferentes grupos, especialmente em altas temperaturas provenientes de riscos e indentações. Sua dependência em função da temperatura e tensão, assim como o efeito de dopantes, foram investigados através de riscos na superfície do InP a altas temperaturas^{26,27}. Foi observado que impurezas que agem como aceitadores de elétrons, como o Zn, retarda o movimento de todos os tipos de discordâncias, enquanto impurezas de doadores de elétrons, como o S, reduzem a mobilidade de discordâncias β e espiral e ao mesmo tempo melhoram a mobilidade de discordâncias tipo α . A mobilidade das discordâncias a temperaturas abaixo de 150° C foi modelada por J. Rabier et al. como função do limite de escoamento (*'Yield stress'*) e dopantes²⁸.

As propriedades mecânicas de cristais de InP (100) puro e dopado (Fe, Zn e Sn) foram investigadas em diferentes temperaturas²⁹. O aumento da dureza devido a presença das impurezas foi maior para altas temperaturas do que à temperatura ambiente, onde o efeito foi fracamente observado. Riscos foram feitos na superfície (100) do InP nas direções $\langle 110 \rangle$ e

$\langle 100 \rangle$ onde foi observada uma grande anisotropia no comportamento mecânico dessas duas direções, sugerindo que o processo de deformação mecânica neste caso é dependente da direção do risco. Observações de riscos na direção $\langle 100 \rangle$ sugerem um processo de deformação dominado pelo escorregamento de planos atômicos, enquanto que na direção $\langle 110 \rangle$ o processo de deformação seria de formação de macla (*twinning*).

O mecanismo de deformação dos compostos semicondutores III-V foi explorado por E. Le Bourhis e colaboradores. Foi estudado o fluxo de material na superfície indentada de InP utilizando uma ponta Vickers com forças de 1N^{30} . Eles observaram dois tipos de discordâncias: uma com vetor de Burgers orientado paralelo à superfície e outra com $\mathbf{b}$ inclinado em relação à superfície. As primeiras discordâncias seguiam alinhadas com os braços de roseta vistos da superfície. Já as discordâncias com $\mathbf{b}$ inclinado em relação à superfície são responsáveis pelo fluxo de material verticalmente à superfície, gerando acúmulo de material ao redor das indentações. Em trabalhos posteriores³¹, ao olhar as seções transversais das indentações, planos escorregados convergindo e divergindo da região indentada foram observados na zona deformada abaixo do indentador, como mostrado na figura 3.1. Formação de maclas e discordâncias perfeitas foram os principais mecanismos de deformação observados.

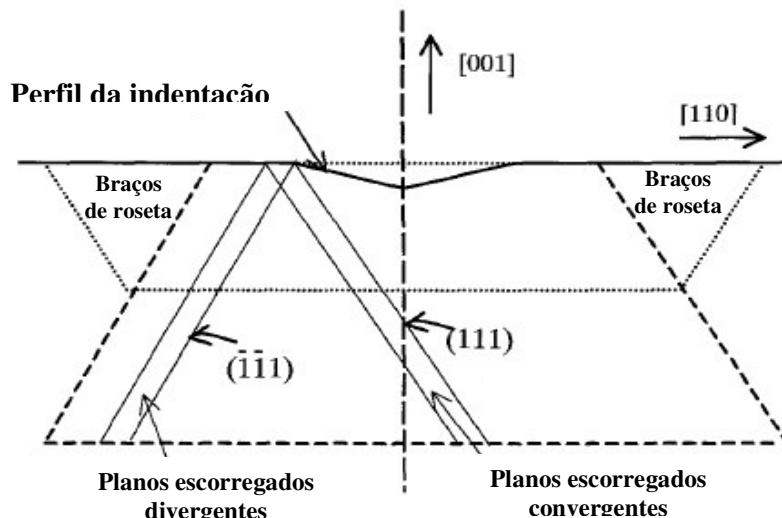


Figura 3.1. Representação esquemática da deformada plasticamente devido a uma indentação.

Catodoluminescência foi utilizada para observar os braços de roseta produzidos por indentação no InP (001) à 400°C^{32} . Os planos escorregados no processo de deformação foram aqueles que a tensão elástica aplicada pelo indentador calculada foi máxima. A assimetria nos braços de roseta foi observada através de um conjunto de fissuras ao longo da direção [110] causadas por discordâncias α e um conjunto ao longo da direção $[-110]$ formada por discordâncias β . Rachaduras são observadas ao longo das direções $\langle 100 \rangle$.

Indentações e riscos foram realizados na superfície do InP (100) e (111) por Grabco e colaboradores³³. O ataque químico realizado à temperatura ambiente não revelou discordâncias nas áreas indentadas. Esse fato indicou uma baixa mobilidade das discordâncias, que estão concentradas somente abaixo da região indentada e riscada. A temperatura crítica para o movimento das discordâncias no InP puro foi determinada em 600K. O mecanismo responsável pela deformação plástica do material sob ação de uma força é função da mobilidade das discordâncias. Quando a mobilidade das discordâncias é baixa e não é capaz de acompanhar a velocidade necessária para deformação, outros mecanismos são incluídos no processo de deformação. A formação de maclas possui uma grande, e em alguns casos predominante, contribuição no processo de deformação plástica do InP.

Um bom resumo do conhecimento adquirido até 2003 sobre deformação plástica dos semicondutores III-V sob ação de força é encontrado na referência 34.

Indentações utilizando uma ponta esférica foram realizadas por Bradby e colaboradores^{35,36}. As curvas de nanoindentação do InP apresentaram uma descontinuidade durante a curva de carga chamada de *pop-in*, que é atribuída ao escorregamento dos planos {111}, representando o início do processo de deformação plástica. Planos {111} escorregados foram visualizados nas micrografias de TEM e nenhum sinal de transformação de fase foi observado nos processos de nanoindentação. Rachaduras abaixo da região deformada foram observados para força de 35 mN no InP, enquanto que para força de 25 mN não foi encontrada nenhuma rachadura. Em ambas as forças os valores de dureza e módulo de elasticidade se mostraram inalterados, sendo 3.9 GPa e 83 GPa respectivamente. Essas rachaduras subsuperficiais são nucleadas a partir de alta concentração de tensão causada pela intersecção dos planos escorregados¹⁷.

A deformação mecânica produzida por nanoindentação e riscos em GaAs (100) foi investigada por K.Wasmer et al.³⁷ a partir de imagens de secções transversais observadas por TEM. A formação de maclas foi identificada como o principal processo de deformação ocorrido durante a indentação, enquanto nos riscos somente planos escorregados e discordâncias perfeitas foram observados. Esse comportamento foi atribuído à diferença na taxa temporal de deformação que durante o risco é centenas de vezes maior do que na indentação. A baixa velocidade da indentação permite a nucleação e propagação de maclas a partir de inomogeneidades na superfície; enquanto no risco a deformação ocorre primeiro na frente do indentador, e a velocidade deste durante o risco permite somente a propagação de deslocamentos perfeitos do tipo α .

Recentemente foi realizada uma comparação de indentações produzidas no InP utilizando uma ponta Vickers e uma esférica, com forças variando de 10 a 1000mN³⁸. Foram observadas rachaduras na superfície ao redor das indentações; seu comportamento e força necessária para sua formação se mostraram dependentes da geometria do indentador. Os

resultados mostraram que o mecanismo de deformação dominante é a criação de discordâncias, nenhum sinal de transformação de fase foi observado. O contato da ponta com o material causa imediatamente uma região com alta densidade de discordâncias que, abaixo desta, se estendem em planos escorregados.