

**XXVIII ENCONTRO NACIONAL DE FÍSICA
DA MATÉRIA CONDENSADA**



**10 a 14 de Maio de 2005
Santos, SP**

banda composta foi separada e a razão da intensidade da banda D relativa à da banda G, $I(D)/I(G)$ foi calculada. A razão de $I(D)/I(G)$ cresce gradualmente com o aumento da $ARR(C/N)$; porém, ainda não se sabe se há dependência da energia de íons na razão de $I(D)/I(G)$. O incremento na razão de $I(D)/I(G)$ com o aumento de $ARR(C/N)$ é usualmente interpretado como sendo devido ao aumento no número ou nos tamanhos de cristalinicos de grafite acoplados ao feixe de laser incidente. Vale salientar que a razão de $I(D)/I(G)$ para um filme de carbono formado com irradiação de Ar^+ foi menor do que os valores encontrados para os filmes de nitreto de carbono. Serão discutidos os resultados de análise composicional obtidos com a técnica de ERDA (*Elastic Recoil Detection Analysis*).

[12/05/05 - P370]

Ge adsorption on SiC(0001): an ab initio study, JULIANA MARIA ABREU DA SILVA MORBEC, ROBERTO HIROKI MIWA, *UFU-MG-Brasil* • The role played by Ge adatoms on the SiC (0001) surface has been subject of contradictory discussions/conclusions. While some experimental reports [1] suggest that the Ge adatoms act as a surfactant element, segregating toward the growth surface, recent SIMS results [2] indicate a constant incorporation of Ge throughout SiC layers. Very recently, Diani et al. [3] performed a detailed investigation of Ge adsorption on SiC(0001), by using XPS and XPD techniques. The authors find conciliatory results concerning the surface segregation [1] versus bulk incorporation [2] of Ge adatoms. Based upon those experimental findings [1-3], we have performed first-principles total energy investigation of adsorption processes and energetic stability of Ge adatoms on the SiC(0001) surface. The calculations were performed within the density functional theory, by using norm-conserving pseudopotentials to describe the electron-ion interactions.

We have considered numerous substitutional and interstitial adsorption sites (or atomic configurations) for Ge adatoms on the SiC(0001)-(3x3) surface. For low coverage of Ge (1/9 ML) we find that the Ge adatom occupies the site 13, substituting the topmost Si atoms on the Si-trimer (sites 10-11-12). Increasing the Ge coverage (2/9 ML), we verify the formation of Ge-dimers, with Ge adatoms occupying the topmost Si site and a trimer site, 13-10 (13-11 or 13-12). We have also considered a Ge coverage of 1/3 ML, 2/3 ML, and the segregation of Ge adatoms to the SiC bulk region, forming Ge-C bonds. In this latter study, we have also included a biaxial strain on the SiC layer, in order to simulate the effect of the Si(111) substrate on the SiC layers.

[1] S. Mitchell et al., *Mater. Sci. Forum* 264-268, 231 (1998).

[2] W.L. Sarney et al., *J. Appl. Phys.* 91, 668 (2002).

[3] M. Diani et al., *Phys. Rev. B* 67, 125316 (2003).

[12/05/05 - P371]

Desenvolvimento e caracterização de um sistema de descarga de RF para a deposição de filmes finos de DLC com altos índices de dureza e aderência em diversos substratos., LUÍS FRANCISCO BONETTI, *INPE e ITA*, GIL CA-

POTE, VLADIMIR JESUS TRAVA AIROLDI, EVALDO JOSÉ CORAT, LEONIDAS LOPES DE MELO, LÚCIA VIEIRA SANTOS, *INPE* • O DLC (diamond like carbon) assim como o diamante tem uma grande importância não somente para aplicações científicas mas também para aplicações industriais.

Por apresentar características semelhantes ao diamante, embora com uma estrutura amorfa, ele possui uma elevada dureza, um baixo coeficiente de atrito, a biocompatibilidade, etc.. Estas características o tornam objeto de diversos estudos, daí o nosso interesse em desenvolver um sistema de descarga de RF (Radio Freqüência) para a deposição de filmes finos de DLC bastante duros e aderentes em diversos tipos de substratos, tais como ligas de Titânio, como a Ti6Al4V, aço inox, e outros metais, ressaltando também a sua real possibilidade de deposição em superfícies das mais variadas formas. Neste trabalho buscou-se otimizar um sistema de descarga em RF (12-15 MHz), onde fez-se o melhor aproveitamento da razão de áreas entre catodo e anodo, com uma descarga bastante uniforme em um volume relativamente grande. Otimizou-se o uso do silano para deposição contínua de um interface entre o filme de DLC e o substrato metálico, e também, otimizou-se os parâmetros de deposição dos filmes de DLC tendo o metano como gás precursor do carbono. Obteve-se filmes de excelente qualidade, muito duros, com altas taxas de deposição e stress relativamente baixo. As medidas de dureza foram feitas via micro-durômetro vickers, as qualidades dos filmes foram observadas via espectroscopia de espalhamento Raman, o stress foi medido via variação da curvatura do substrato com e sem filme de DLC e a espessura foi feita via perfilometria.

[12/05/05 - P372]

Estudo do comportamento da tensão interna de filmes de DLC depositados em substratos de Ti6Al4V com intercamada de silício, GIL CAPOTE, LÚCIA VIEIRA SANTOS, EVALDO JOSÉ CORAT, VLADIMIR JESUS TRAVA AIROLDI, LEONIDAS LOPES DE MELO, *INPE*, LUIS FRANCISCO BONETTI, *INPE - ITA* • A pesquisa e o desenvolvimento de materiais nanoestruturados com propriedades avançadas é uma necessidade fundamental para o crescimento e o avanço de diversos ramos da economia. Por ter um baixo coeficiente de atrito, elevada dureza, serem quimicamente inertes e isolantes, e mais recentemente, ter obtido alta aderência em diferentes materiais, permite que os filmes conhecidos como carbonos tipo-diamante (DLC - Diamond-like Carbon) estejam sendo muito utilizados em aplicações tribológicas. Em várias aplicações onde os DLC são utilizados como revestimentos protetores, são requeridas espessuras dos filmes de vários micrometros, o qual cria uma alta tensão interna nos mesmos. Com o objetivo de aliviar as tensões internas e aumentar a aderência dos filmes de DLC sob substratos de Ti6Al4V com espessuras na ordem de 2 micrometros, uma intercamada de silício amorfo foi depositada entre o DLC e o substrato. Os filmes de silício e de DLC foram crescidos utilizando um sistema de Deposição Química na Fase Vapor Assistida por Plasma (r.f.-PECVD) com 13.56 MHz, empregando silano e metano como atmosferas precursoras.