



# PRODUÇÃO DE h-BN EPITAXIAL E TRANSFERÍVEL SOBRE Cu(111)/Safira e Cu(111)/SiC(0001)

**Palavras-Chave:** MATERIAIS 2D, h-BN, FILME FINO

**Autores(as):**

**Leonardo Ribeiro de Souza, DFA – IFGW**

**Prof. Dr. ABNER DE SIERVO, DFA - IFGW**

---

## INTRODUÇÃO:

Nas últimas décadas materiais semicondutores que apresentam formato bidimensional (2D) tais como os dicalcogenetos de metais de transição (TMDs) apresentam-se como uma alternativa ao silício para novas aplicações industriais em dispositivos eletrônicos, optoeletrônicos e fotovoltaicos devidos suas características físicas, tais como leveza, flexibilidade, e maior eficiência quântica. Neste sentido, substratos isolantes 2D são importantes para a integração de dispositivos totalmente 2D. Um excelente candidato é o nitreto de boro hexagonal (h-BN). Nesta IC desejamos crescer monocamada de h-BN epitaxialmente sobre Cu(111) por método CVD (chemical vapor deposition), posteriormente iremos preparar filmes finos e ordenados de Cu(111) sobre um monocristal de safira e crescer h-BN sobre o mesmo. Utilizando técnicas de corrosão e reação eletrolítica pretendemos isolar/depositar/transferir uma monocamada de h-BN monocristalino e de única orientação para outros substratos.

## METODOLOGIA:

O crescimento de h-BN é realizado por método CVD [3] admitindo na câmara de vácuo um precursor como amônia borane sobre um substrato metálico monocristalino, como Cu(111) aquecido a altas temperaturas. Os monocristais de alta pureza de Cu são extremamente caros. Por exemplo, um disco monocristalino de 10mm de diâmetro por 2mm de espessura cortado, orientado e polido com alta precisão chega a custar cerca de 1200,00 Euros. Portanto, para crescer grandes áreas de h-BN sobre uma superfície de Cu(111) monocristalino é economicamente inviável, visto que o pós processamento para isolar a monocamada destrói no substrato. No entanto, conforme mostrado na literatura [6] é possível induzir a formação de um filme ultrafino (algumas dezenas de nanômetros) e monocristalino de Cu(111) sobre um cristal de safira na direção (0001). A safira é a forma monocristalina de óxido de alumínio ( $Al_2O_3$ ). Esta é relativamente barata e pode ser obtida na forma de waffer de grandes tamanhos (2 a 4 polegadas de diâmetro) custando em torno de US\$ 50,00 cada.

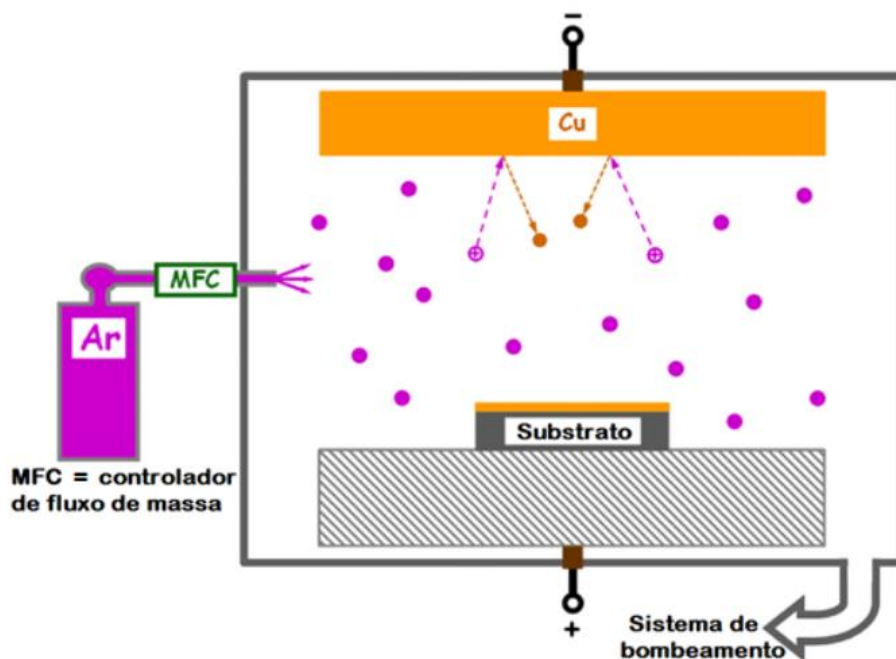


Figura 1 – Sistema de Deposição por Sputtering [7]

Inicialmente realizamos a deposição de filmes de Cu sobre substratos de Si e safira com ~700 nm de espessura (figura 1). A calibração da taxa de deposição é feita durante o processo usando uma medida de espectroscopia óptica do plasma de Cu.

Após obter os filmes de Cu realizamos uma caracterização por espectroscopia de fotoelétrons excitados por raios X (XPS) para determinar a pureza dos filmes depositados. Conforme mostrado na figura 2, fica evidente que o filme é composto por Cu metálico com pureza superior a 99.9% (limite da técnica).

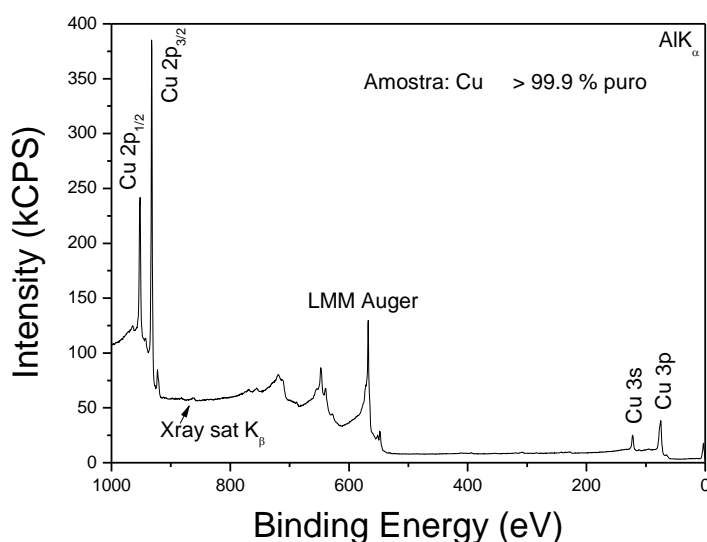


Figura 2 – Espectro de XPS do filme de Cu sobre Safira(0001).



Figura 3 – Tratamento em alta temperatura dos filmes de Cu/Safira(0001). a) Forno de aquecimento tubular à vácuo (e atmosfera de  $H_2$ ) b) Filme de cobre evaporado nas paredes do tubo de quartzo a partir das amostras. c) amostras de safira(0001) parcialmente recoberta com Cu após tratamento térmico.

## RESULTADOS E DISCUSSÃO:

A etapa seguinte foi realizar o tratamento térmico em atmosfera de  $H_2$ . Conforme reportado no trabalho de Tse-An Chen et al., [6] o filme fino depositado por sputtering é policristalino. Para obter um filme epitaxial induzido pelo arranjo atômico do substrato de Safira(0001) faz-se necessário um tratamento a altas temperaturas. No entanto, nestas condições tipicamente ocorrem oxidações nas bordas dos domínios policristalinos que impedem a formação de um único domínio. Para remover o oxigênio é necessário realizar o tratamento térmico em atmosfera rica de  $H_2$ . Realizamos este tratamento no laboratório de filmes finos do Professor Francisco Chagas Marques (DFA) em colaboração com o Dr. Rafael Merlo. O forno a vácuo (vide figura 3) foi rampado a uma taxa de  $10\text{ }^\circ\text{C}/\text{min}$  até  $950\text{ }^\circ\text{C}$  (temperatura próxima ao ponto de fusão do Cu) conforme reportado na referência [6] e mantido por 5 minutos com posterior resfriamento, sempre em atmosfera rica de  $H_2$  (10 mbar).

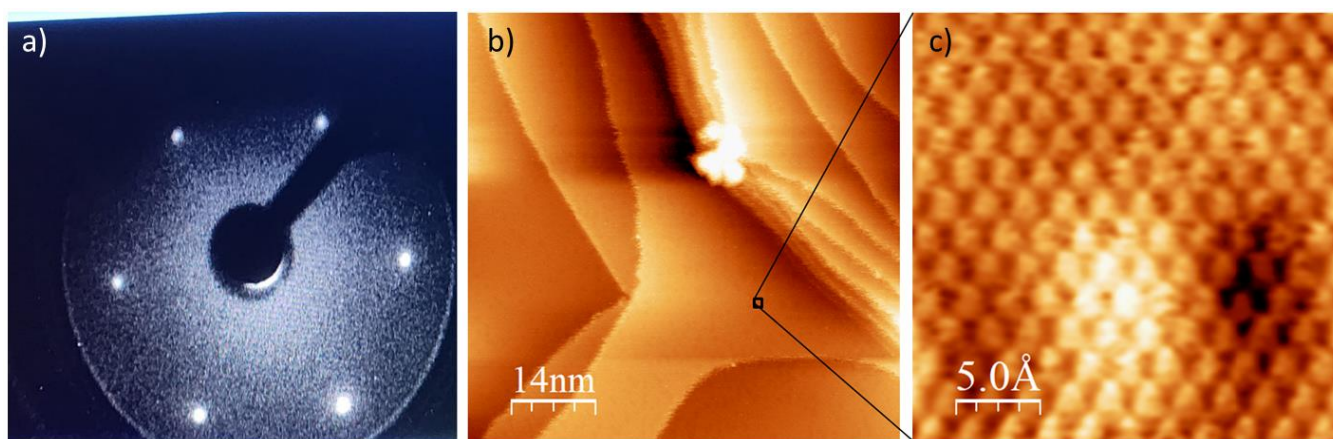


Figura 4 – a) LEED 60 eV. b) Imagem STM da topografia da superfície mostrando platôs e degraus atomicamente planos ( $V_t=969\text{ mV}$  ;  $I_t=270\text{ pA}$ ) c) Resolução atômica ( $V_t=215\text{ mV}$  ;  $I_t=1.45\text{ nA}$ )

Durante o processo de tratamento térmico, parte do filme de cobre é evaporado e o restante gera um filme monocristalino epitaxial com o substrato de safira. Este resultado foi confirmado após uma análise de XPS

(similar ao da figura 2), difração de elétrons de baixa energia (LEED) e microscopia de tunelamento de elétrons (STM) (vide figura 4).

## CONCLUSÕES:

Foi possível o crescimento de um filme monocristalino de Cu(111) conforme demonstrado no padrão de difração LEED e imagens STM (figura 4). As próximas etapas envolveram o crescimento de várias amostras e subsequente deposição por CVD do h-BN. Após sua caracterização eletrônica e estrutural, faremos o processo de transferência do mesmo para outro substrato qualquer, por exemplo, SiO<sub>2</sub>, conforme indicado por Tse-An CHEN et al. [6].

## BIBLIOGRAFIA

- [1] Ming-Yang LI, Sheng-Kai SU, H-S Philip WONG e Lain-Jong LI. **How 2D semiconductors could extend Moore's law**. Nature, p. 169–170, 2019.
- [2] Ricardo Javier Peña ROMÁN, Fábio J R Costa COSTA, Alberto ZOBELLI, Christine ELIAS, Pierre VALVIN, Guillaume CASSABOIS, Bernard GIL, Alex SUMMERFIELD, Tin S CHENG, Christopher J MELLOR, Peter H BETON, Sergei V NOVIKOV e Luiz F ZAGONEL. **Band gap measurements of monolayer h-BN and insights into carbon-related point defects**. 2D Materials 8, 044001, 2021. doi: 10.1088/2053-1583/ac0d9c.
- [3] Nataly HERRERA-REINOZA, Alisson Ceccatto dos SANTOS, Luis Henrique de LIMA, Richard LANDERS e Abner de SIERVO. **Atomically Precise Bottom-Up Synthesis of h-BNC: Graphene Doped with h-BN Nanoclusters**. Chemistry of Materials, v. 33, p. 2871–2882, 2021. doi: 10.1021/acs.chemmater.1c00081.
- [4] KS Novoselov, A Mishchenko, A Carvalho e AH Castro Neto. **2D materials and van der Waals heterostructures**. Science, v. 353, aac9439, 2016.
- [5] Joo Song Lee, Soo Ho Choi, Seok Joon Yun, Yong In Kim, Stephen Boandoh, Ji-Hoon Park, Bong Gyu Shin, Hayoung Ko, Seung Hee Lee, Young-Min Kim et al. **Waferscale single-crystal hexagonal boron nitride film via self-collimated grain formation**. Science, v. 362, p. 817–821, 2018.
- [6] Tse-An CHEN, Chih-Piao CHUU, Chien-Chih TSENG, Chao-Kai WEN, H-S Philip WONG, Shuangyuan PAN, Rongtan LI, Tzu-Ang CHAO, Wei-Chen CHUEH, Yanfeng ZHANG et al. **Wafer-scale single-crystal hexagonal boron nitride monolayers on Cu (111)**. Nature, v. 579, p. 219–223, 2020.
- [7] GREENE, J. E., «**Review Article: Tracing the recorded history of thin-film sputter deposition: From the 1800s to 2017**». Journal of Vacuum Science & Technology, v. 35, pp. 61, 2017.
- [8] SMITH, Donald L. **Thin-Film Deposition - Principles and Practice**. [S.l.]: McGraw-Hill Education. pp. 616, 22 de março de 1995.