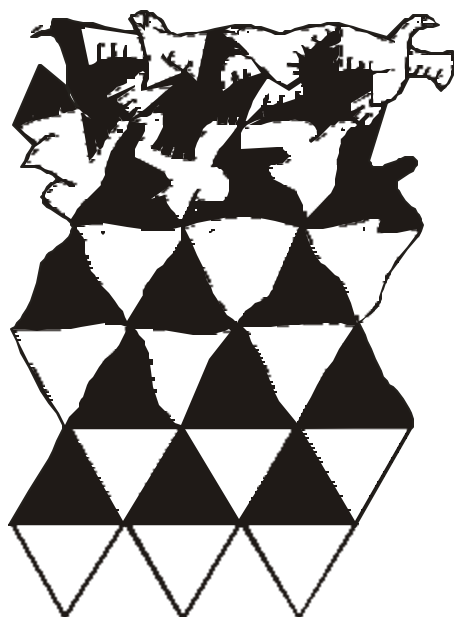


**XXVIII ENCONTRO NACIONAL DE FÍSICA
DA MATÉRIA CONDENSADA**



**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 cristaltitos 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 Frequência) 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.

ras, respectivamente. Foi observado que existe uma relação entre a tensão interna dos filmes de DLC, assim como um significativo incremento da aderência, com os parâmetros de crescimento da intercamada de silício. Também foi observado que a tensão interna dos filmes, obtida utilizando a técnica de perfilometria, foi baixa, inclusive para altas tensões de autopolarização e espessuras dos filmes de DLC da ordem de 2 micrometros. A contribuição da espessura da intercamada de silício na aderência entre os filmes de DLC e o substrato de Ti6Al4V foi testado usando a técnica de riscamento. A dureza dos filmes foi determinada mediante a microindentação e se obtiveram valores característicos para este tipo de filmes. As propriedades estruturais dos filmes de DLC foram investigadas com o uso da espectroscopia de espalhamento Raman.

[12/05/05 - P373]

Comparison of Raman spectroscopy on amorphous carbon nitride prepared from graphitic-like and diamond-like carbon matrices, A. CHAMPI, FC. MARQUES, IFGW/UNICAMP

• Raman spectroscopy of amorphous carbon nitride, prepared under the condition graphitic-like and diamond-like carbon are obtained, is reported. The films were deposited by glow discharge in methane (CH₄) plus nitrogen (N₂) atmosphere, under low bias, -200 V (for diamond-like matrix) and high bias, -800 V (for graphitic-like matrix). XPS and nuclear reaction analysis were performed for determining the nitrogen concentration. Carbon-hydrogen, carbon-nitrogen and nitrogen-hydrogen bonds were investigated through FTIR spectroscopy. Raman measurements were performed using two excitation energy named: visible (514nm) and ultra-violet, UV (244nm). These study focused on the investigation of the vibration energy and energy shifts associated with the G (1580 cm⁻¹) and D (1350 cm⁻¹) bands. It was observed that the intensity, the energy position and the shift of these two bands depend on the excitation energy. The difference in energy between the visible and UV, the so called dispersion parameter, was investigated for both set of films. This parameter brings additional information concerning the structure of the films regarding size and concentration of graphitic clusters, and qualitative information on the sp²/sp³ concentration. These results were also correlated with other mechanical properties, such as hardness, stress and elastics constants, and optical properties. In addition to the G and D bands, UV Raman presents an additional band at 2200nm associated with sp bonds (CN), which increases with nitrogen concentrations to both matrixes.

[12/05/05 - P374]

Efeitos da focalização do feixe de laser em processamentos superficiais, JONATHAS ANTUNES CAMPOS, AUGUSTO M. ALCALDE, OMAR DE OLIVEIRA DINIZ NETO, Universidade Federal de Uberlândia • "Laser Cladding", "Laser Alloying" e "Laser Free-Forming" são técnicas de processamentos de superfícies que recentemente utilizam-se feixes de laser e partículas coaxiais, os quais incidem simultâneos sobre as superfícies das amostras. Neste trabalho utilizou-se um modelo físico computacional,

para simular situações experimentais com o objetivo de encontrar as condições ideais para o processamento superficial a laser. Calculando-se a distribuição de temperatura das partículas do jato de pó e a potência transmitida do feixe de laser em função do posicionamento da lente, que focaliza o feixe de laser, com relação à origem do jato de pó e a espessura da zona de interação entre os feixes de laser e de jato de pó. Encontrando assim, a energia que chega na amostra para realizar o processamento. Realizou-se uma série de simulações, em que duas formas para descrever a densidade do jato de pó foram utilizadas (uma variando com o quadrado da distância e a outra de forma gaussiana) e a distribuição espacial de intensidade do laser escolhida foi a gaussiana. Determinou-se como a espessura da zona de interação e o posicionamento da lente com a relação à origem do pó, influencia a eficiência dos processamentos superficiais a Laser. Quando são utilizados sistemas coaxiais em "laser cladding" ou "free-form laser", deve-se ajustar corretamente os parâmetros do jato de pó e do feixe de laser, para que o jato de pó não atenua em demasia o feixe de laser, de modo a ter uma eficiência satisfatória no processamento.

[12/05/05 - P375]

Study of the S Phase by X-ray Diffraction and Mössbauer Spectroscopy, LEONARDO C. GONTIJO, CEFETES - Vitória - ES, ROGÉRIO MACHADO, PEDRO A. P. NASCENTE, UFSCar - DEMa - São Carlos - SP, EDUARDO J. MIOLA, UFSCar - DF - São Carlos - SP, LUIZ C. CASTELLETI, USP - EESC - São Carlos - SP

• The plasma-nitriding technology has been employed in the industry with the objective of improving the surface properties of metals and alloys. By using the plasma nitriding process at low temperature, some of the properties of the austenitic stainless steels are enhanced by the formation of the S phase, also called expanded austenite. This phase is formed on the surfaces of the austenitic stainless steels nitrided under certain conditions. In the past years, an extensive research has been carried out for the understanding of the S phase, but some questions remain with no answer or with contradictory explanations. In this work, the AISI 316L steel was plasma-nitrided at 350, 400, 450, and 500°C, and the samples were characterized by X-ray diffraction (XRD), conversion electron Mössbauer spectroscopy (CEMS), and wavelength dispersive spectroscopy (WDS) in order to investigate the S phase. XRD analysis identified the presence of a distorted cubic structure phase. The compound layer consists of a distribution of nitrogen austenite with different content of nitrogen, ranging from approximately 10 to 40%, and also γ' -Fe₄N and ϵ -Fe₂₋₃N phases. Mössbauer spectroscopy corroborates these results, and shows a decrease in nitrogen austenite with the increase in nitriding temperature. This decrease is related to the transformation of the nitrogen austenite to the γ' -Fe₄N phase.

[12/05/05 - P376]

Structure and Properties of TiB₂ coatings deposited by d.c. magnetron sputtering, C.M.T. SANCHEZ, F.L. FREIRE JR., Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro • TiB₂ coatings