

Título do Projeto: Estudo de SrTiO₃ dopado com Tântalo (SrTiO₃:Ta) para aplicações em optoeletrônica

Pesquisador Responsável: Pedro Schio de Noronha Muniz

Unidade CNPEM: LNNano

1. Introdução

Óxidos complexos do tipo perovskita, como o SrTiO₃ (STO), têm sido amplamente estudados devido às suas interessantes propriedades elétricas, ópticas e estruturais, que os tornam promissores para diversas aplicações tecnológicas. O SrTiO₃ é um semicondutor de gap largo (≈ 3.2 eV), com alta estabilidade térmica e química, sendo utilizado como substrato padrão para crescimento epitaxial de outros óxidos. Porém, seu potencial como material funcional próprio tem crescido nos últimos anos, especialmente com o avanço de técnicas que permitem sua dopagem controlada.

A dopagem de SrTiO₃ com elementos como Tântalo (Ta) em substituição ao Ti⁴⁺ introduz portadores do tipo n, aumentando significativamente sua condutividade elétrica. Isso permite a exploração de SrTiO₃:Ta como óxido condutor transparente (TCO), bem como em dispositivos optoeletrônicos como fotodetectores, células solares e memórias resistivas. Além disso, dopagens adequadas podem influenciar a constante dielétrica e a resposta óptica do material, possibilitando novas arquiteturas de dispositivos baseados em materiais totalmente óxidos, com vantagens de estabilidade, compatibilidade com processos de microfabricação e integração com outras funcionalidades.

2. Estado da Arte

A dopagem de SrTiO₃ com Ta resulta em transição progressiva de comportamento isolante para metálico, conforme aumenta a concentração de dopantes. Estudos indicam que a substituição de Ti⁴⁺ por Ta⁵⁺ (com diâmetro iônico semelhante) permite solubilidade do dopante sem grandes perturbações na rede cristalina, o que favorece a manutenção da estrutura perovskita e facilita o controle das propriedades do filme.

Filmes finos de SrTiO₃:Ta têm sido produzidos com sucesso por técnicas como PLD (Pulsed Laser Deposition), MBE (Molecular Beam Epitaxy) e sputtering, apresentando boas propriedades ópticas (alta transmitância no visível) combinadas com condutividade elétrica satisfatória. Estudos recentes mostram que a mobilidade eletrônica e a concentração de portadores podem ser ajustadas pela concentração de dopante e condições de crescimento, influenciando diretamente a resposta óptica e a eficácia em dispositivos optoeletrônicos.

Além disso, a utilização de técnicas de caracterização avançadas como espectroscopia de fotoelétrons (XPS), elipsometria, DRX e medidas de Hall tem sido crucial para compreender a influência da dopagem na estrutura eletrônica, níveis de defeitos e transporte de carga. O desenvolvimento de novos TCOs baseados em óxidos do tipo perovskita, como o SrTiO₃:Ta, busca não apenas substituir materiais comerciais como o ITO (In₂O₃:Sn), mas também permitir integração com dispositivos que exigem maior estabilidade e multifuncionalidade.

3. Objetivos

Objetivo geral: Investigar as propriedades estruturais, ópticas e elétricas de filmes finos de SrTiO₃:Ta produzidos por PLD, visando aplicações em dispositivos optoeletrônicos baseados em óxidos.

Objetivos específicos:

- Crescer filmes de SrTiO₃ dopados com diferentes concentrações de Ta e avaliar sua qualidade cristalina e morfologia superficial.
- Determinar a relação entre parâmetros de crescimento (temperatura, pressão de oxigênio, energia do laser) e dopagem efetiva.
- Medir propriedades ópticas (transmitância, banda proibida) e elétricas (resistividade, tipo e densidade de portadores).
- Avaliar a estabilidade térmica e química dos filmes dopados e sua compatibilidade com processos de fabricação de dispositivos.
- Comparar os resultados experimentais com dados da literatura e modelos teóricos disponíveis.

4. Metodologia

O trabalho será realizado nos laboratórios do LNNano/CNPEM, com uso da técnica de Deposição por Laser Pulsado (PLD) para o crescimento dos filmes. Os alvos cerâmicos de SrTiO₃:Ta com diferentes níveis de dopagem (por exemplo, 1%, 3% e 5% atômico) serão utilizados para a deposição sobre substratos de SiO₂/Si, safira ou vidro.

Etapas principais:

1. **Deposição por PLD:** Crescimento epitaxial ou texturizado com controle dos parâmetros (temperatura entre 650–800 °C, pressão de O₂ entre 10⁻⁴ e 10⁻¹ Torr). A espessura será monitorada por número de pulsos (filmes entre 30 e 100 nm).
2. **Caracterizações estruturais:**
 - Difração de Raios X (DRX) para analisar a estrutura cristalina e detectar eventuais fases secundárias.
 - Microscopia de força atômica (AFM) para análise morfológica e rugosidade superficial.
3. **Caracterizações ópticas e elétricas:**
 - Espectroscopia UV-Vis para determinar a transmitância óptica e calcular o bandgap por método de Tauc.
 - Medidas de resistividade e Hall para determinar mobilidade e concentração de portadores.
4. **Análises complementares:**
 - XPS para verificar dopagem efetiva e estados de oxidação.
 - Testes de estabilidade térmica e compatibilidade com outros processos.
5. **Organização de resultados:** Documentação em caderno de laboratório, geração de gráficos e tabelas, seminários internos e apresentação final.

5. Cronograma de Atividades

Atividades	1º trim.	2º trim.	3º trim.	4º trim.
Integração ao laboratório e estudo da bibliografia	✓			
Deposição de filmes SrTiO ₃ :Ta com diferentes concentrações de dopante	✓	✓		
Caracterizações estruturais e morfológicas		✓	✓	
Medidas ópticas (UV-Vis) e elétricas (resistividade, Hall)			✓	✓
Análise de dados, comparação com literatura e revisão dos protocolos			✓	✓
Redação do relatório final e apresentação do projeto				✓

6. Referências Bibliográficas

1. J. Son et al., "High-mobility SrTiO₃ thin films grown by pulsed laser deposition," *Nature Materials*, vol. 9, pp. 482–484 (2010).
2. C. W. Liang et al., "Tunable optical properties of SrTiO₃ by Ta doping," *Applied Physics Letters*, vol. 95, 112107 (2009).
3. Y. Chen et al., "Transparent conducting oxide SrTiO₃:Ta thin films," *Thin Solid Films*, vol. 518, pp. 3091–3094 (2010).
4. K. Van Benthem et al., "Electronic structure of SrTiO₃: Doping and defects," *Journal of Applied Physics*, vol. 90, no. 12, pp. 6156–6164 (2001).
5. Zhang, L. et al. Correlated metals as transparent conductors. *Nature Materials* 15, 204–210 (2016). <https://doi.org/10.1038/nmat4481>
6. J. Sun et al. Engineering the electronic structure of SrTiO₃-based transparent conductors. *Journal of Materials Chemistry C* 11, 2877–2885 (2023). <https://doi.org/10.1039/D2TC05025H>
7. A. S. Disa et al. Functional oxide heterostructures for next-generation electronics. *Nature Reviews Materials* 7, 823–839 (2022). <https://doi.org/10.1038/s41578-022-00433-1>