

Método de la correlación en un cristal de ZnO.

Correlation Method in a ZnO Crystal.

Oslen Dilayder Jaimes ^{a*}
Isabel Cristina Rincón ^a
Heriberto Peña-Pedraza ^a

Fecha de Recepción: 16 - oct. - 2017.

Fecha de Aceptación: 17 - abr. - 2018.

Resumen

La predicción de los modos de vibración de las moléculas o estructuras cristalinas basados en sus propiedades de simetría, nos permiten utilizar un poderoso método para caracterizar nuevos materiales. En el siguiente trabajo, se realizó el análisis modal teórico por medio del método de correlación, y se obtuvo los modos de vibración Raman ópticamente activos para un sistema cristalino con estructura de tipo Hexagonal Wurzita. Utilizando la técnica de espectroscopia Raman, se registró el espectro de vibración Raman Stokes para un cristal de ZnO. A partir del análisis teórico y del espectro Raman registrado experimentalmente para el ZnO, se pudo observar y comparar el método teórico (método de correlación) con el experimental (técnica de espectroscopia Raman). Este análisis, sugiere que el método de correlación es preciso en la predicción de los modos de vibración de cualquier red cristalina, sin embargo, su poder se puede extender al usarse conjuntamente con los datos experimentales Raman en la caracterización de la calidad cristalina y estructural de nuevos materiales de interés tecnológico.

Palabras Clave: Modos Normales, Espectroscopia Raman, Wurzita, Correlación.

Abstract

The prediction of vibrational modes of the crystalline molecules or structures based on their properties of symmetry, allow us to use a powerful method to characterize new materials. In this work, the theoretical modal analysis was performed by the correlation method, and the optically active Raman vibration modes were obtained for a crystalline system with hexagonal Wurzite type structure. Using the Raman spectroscopy technique, the Raman Stokes vibration spectrum was obtained for a ZnO crystal. From the theoretical analysis and the experimentally recorded Raman spectrum for ZnO, it was possible to observe and compare the theoretical method (correlation method) with the experimental method (Raman spectroscopy technique). This analysis suggests that the correlation method is accurate in predicting the modes of vibration of any crystal lattice, which can be used in conjunction with the Raman experimental data in characterizing the crystalline and structural quality of new materials of technological interest.

Keywords: Normal Modes, Raman Spectroscopy, Wurzita, Correlation.

^a Grupo de Óptica Moderna, Departamento de Física y Geología, Universidad de Pamplona, Colombia.

* Correo electrónico: oslendjs@unipamplona.edu.co

INTRODUCCIÓN

El óxido de Zinc ZnO es un semiconductor del grupo II-VI, con brecha directa de 3,37 eV a temperatura ambiente y una alta movilidad de electrones. El dopaje natural con oxígeno lo convierte en un semiconductor de tipo n. Posee una gran transparencia, alta movilidad de electrones, brecha ancha y fuerte luminiscencia a temperatura ambiente [1].

Los semiconductores ZnO han sido ampliamente investigados en muchas complejidades estructurales [2], [3], [5], [6], [7], [8]. Por sus propiedades químicas y físicas sintonizables, potencialmente útiles con aplicaciones en electrónica, optoelectrónica, catálisis, celdas solares, películas delgadas [3],[5],[8]. Se utiliza ampliamente como: electrodo transparente, sensor de gas, ventanas que ahorran energía o que protegen del calor, transistores de película delgada, diodo emisor de luz.

El ZnO es muy versátil ya que puede prepararse en volumen, en películas delgadas o formando nanoestructuras (nanoesferas, nanohilos, nanotiras, nanopartículas, etc.) con diferentes métodos de crecimiento [3],[4],[6],[8], [13].

Este material es un candidato para la fabricación de los dispositivos emisores de luz azul o ultravioleta altamente eficientes, debido a la amplia brecha de energía directa y a la gran energía de enlace del exciton. Sin embargo, se ha reconocido que el ZnO sin dopar muestra una conductividad de tipo n, debido a defectos nativos tales como: los intersticiales de Zn, la emisión verde debida a las vacancias de oxígeno, que se introducen por el crecimiento a altas temperaturas y/o la pobre reactividad del oxígeno suministrado en el crecimiento. Normalmente el ZnO se encuentra en estructuras cúbicas zincblenda y hexagonal wurzita [9]. La estructura hexagonal tiene un grupo puntual de 6mm (en notación de Hermann-Mauguin) o C_{6v} (notación de Schoenflies), y un grupo espacial $P6_3mc$ o C_{6v}^4 . Las constantes de red son: $a = 3,25 \text{ \AA}$ y $c = 5,2 \text{ \AA}$; su relación $c/a \sim 1,60$ aproxima al valor ideal para una celda hexagonal 1,633. La ciencia de los materiales necesita investigar la relación entre la estructura y las propiedades de los materiales,

el procesamiento y funcionamiento, y proyecta la estructura de un material para conseguir un conjunto predeterminado de propiedades.

Por otro lado, la Espectroscopia Raman, es una herramienta de análisis e investigación importante de los materiales semiconductores. Es una técnica de dispersión de la luz, en la que un fotón incidente interactúa inelásticamente con la red cristalina, y crea o destruye un fotón, el fotón dispersado porta la información acerca de la energía o frecuencia del fonon creado o aniquilado, lo que permite sondear las vibraciones fundamentales de los cristales, modos normales de vibración o fonones, dando información útil para la identificación química, la caracterización de las estructuras cristalinas, de los enlaces entre los átomos, el medio, los defectos y el estrés de la muestra sólida.

Al combinar la técnica Raman con las características de simetría de la estructura cristalina, la teoría de grupos y el método de correlación, se tiene una herramienta poderosa para el análisis de las propiedades de los materiales cristalinos.

Algunos de los estudios y proyecciones de este material se citaran como sigue:

Nanovarillas de ZnO dopado con litio, es un buen candidato para la creación de dispositivos nanogeneradores, debido a que dan una respuesta piezoeléctrica mucho más alta que las nanovarillas de ZnO puras [11].

El ZnO es un semiconductor que tiene muchas aplicaciones, como transductores piezoeléctricos, varistores, fósforos luminiscentes, y películas conductoras transparentes [12]. Como emisor de luz el ZnO posee una energía de exciton de 60 meV. En electrónica el ZnO es muy atractivo debido a su alta rigidez dieléctrica y alta velocidad de saturación [2].

Debido a sus propiedades, el ZnO es un material que promete ser usado en diferentes aplicaciones; como en el desarrollo de sensores de gas en forma de películas delgadas, varistores, láseres ultravioleta y visible, y componentes de celdas solares [14].