

Variación de la estructura electrónica del óxido de estaño dopado con zinc

Felipe Carlos Vásquez¹, Gallegos–Orozco V.², Ornelas–Gutiérrez C.¹, Ochoa–Gamboa R.¹, Antúnez–Flores W.¹, Santos–Beltrán A.¹, *Paraguay–Delgado F.¹

¹Laboratorio Nacional de Nanotecnología–CIMAV, México; ²Instituto de Ingeniería y Tecnología, Departamento de Ciencias Básicas–UACJ, México. ²Laboratorio Nacional de Nanotecnología, Centro de Investigación en Materiales Avanzados, S.C., Miguel de Cervantes 120, Complejo Industrial Chihuahua, 31109, Chihuahua, Chih., México.

*francisco.paraguay@cimav.edu.mx

El estudio de la estructura electrónica de materiales es de importancia para diferentes aplicaciones tecnológicas. En particular el óxido de estaño (SnO_2), es un semiconductor tipo n con un amplio Band Gap ($E_g = 3.60\text{eV}$ a 300K), con estructura cristalina tipo casiterita, posee una excelente estabilidad en sus propiedades ópticas y electrónicas. Es bien conocido que las características físicas y químicas del SnO_2 están relacionadas con el tamaño de partícula, forma geométrica y planos cristalográficos expuestos. Se han hecho muchos esfuerzos para sintetizar el SnO_2 con diversidad de morfologías, y estudiar sus correspondientes propiedades químicas o físicas así como sus aplicaciones potenciales. Estos métodos involucran la evaporación térmica ^[1], ablación láser ^[2], método hidrotérmico ^[3] entre otras. Esta última técnica es un método sencillo para sintetizar SnO_2 con diversas morfologías.

Los materiales estudiados en este trabajo fueron obtenidos por el método hidrotérmico, el cual consiste en transferirle energía térmica a una solución líquida hasta una temperatura y presión determinada, para que el material crezca. Después de un tiempo de tratamiento térmico el material se recupera por centrifugación o filtrado.

El estudio de los materiales se llevó a cabo usando los microscopios electrónicos de transmisión CM–200 y JEM–2200FS+CS para la obtención de espectros EELS e imágenes en modo STEM respectivamente, el estudio de la morfología fue realizado por microscopio electrónico de barrido JSM–7401F.

En la Figura 1 y 2 vemos los cambios morfológicos de estructuras tipo barras (rods) de SnO_2 sin dopar y dopado con zinc al 5 % atómico respectivamente. Vemos que los rods sin dopar tienen una morfología prismática con lados y aristas bien definidas con longitudes de 1.2 micras, y en el caso de los rods dopados con Zn, la morfología elongada permanece, sin embargo los rods adquieren una terminación en forma de punta, cuya longitud es del orden de 1 micra. En el trabajo se discute estos cambios morfológicos generados para distintos porcentajes de dopante.

En la Figura 3a se presenta los espectros de Pérdida de Energía de Electrones, del borde O K de los materiales estudiados para dopajes de 0, 5 y 15% atómico. Los efectos de cambios en el entorno químico pueden ser visualizados por los cambios en la estructura fina cerca del borde (ELNES). Esta estructura para el oxígeno muestra 5 picos distintivos en 533, 539.4, 544.5, 547 y 554 eV, como reportó H.P Albicht et al. 1998. Conforme aumenta el dopante, el pico correspondiente a la energía de 539.4eV va desapareciendo sistemáticamente. ELNES no siempre puede ser interpretado como la huella digital de la densidad de estados electrónicos, sin embargo puede dar información de las hibridaciones que puedan ocurrir con los orbitales 2p del oxígeno. En la Figura 3b se muestra los resultados experimentales y calculados del borde de O K en el SnO_2 sin dopante, estos dos espectros tienen una gran similitud. Los cambios en la estructura fina cerca del borde se están estudiando por cálculos ab initio usando la teoría de funcionales de densidad bajo la

aproximación de gradiente generalizado (GGA) con el código CASTEP. Los espectros de EELS fueron adquiridos en modo difracción, con 0.1eV/Canal de dispersión, una abertura de 3mm y un semi-ángulo de colección de 2.7mrad. Se comparan los resultados numéricos y experimentales, de donde se observa una buena coincidencia entre los resultados, para los cambios en la noblación electrónica del material donado y sin dopar.

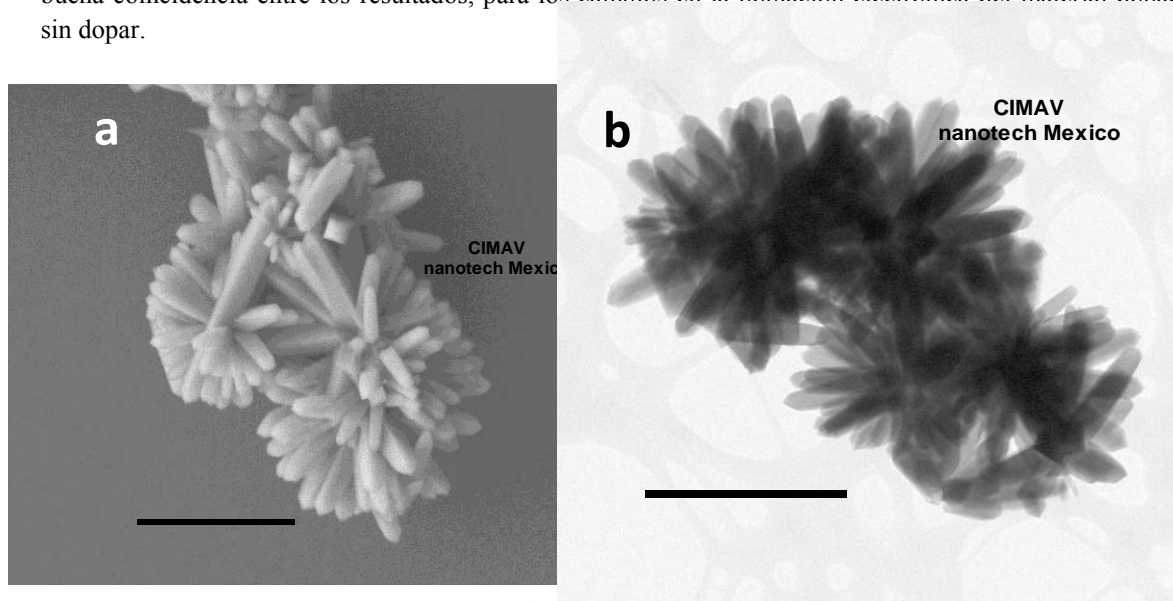


Figura 1. Imagen típica de SnO₂ puro a) SEM y b) TEM (Campo Claro).

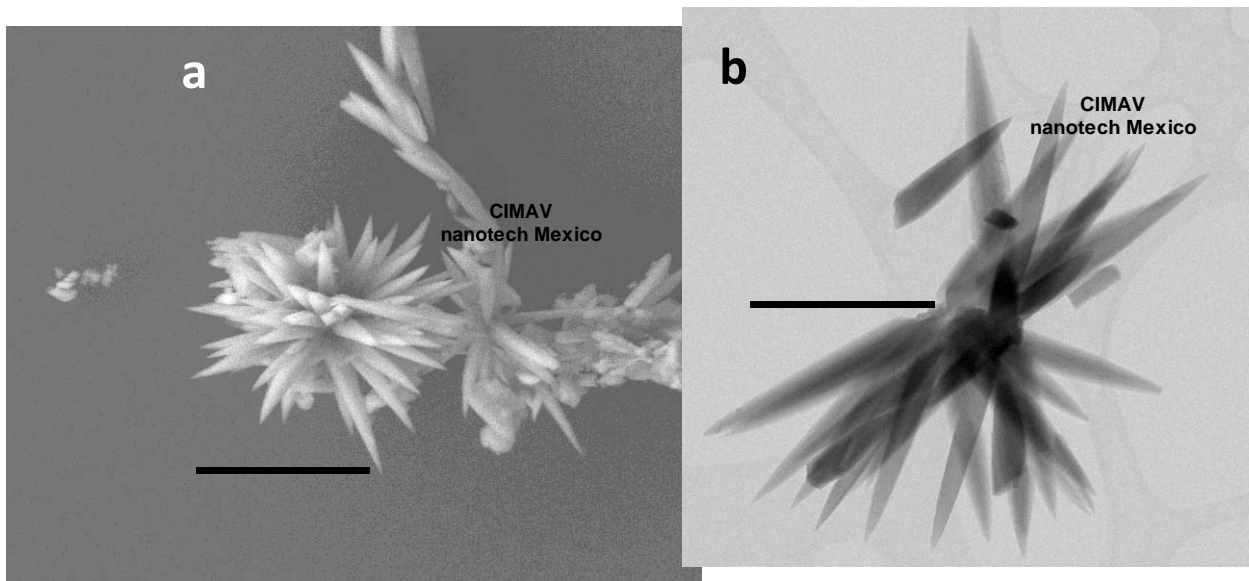


Figura 2. Imagen típica de SnO₂, con 5 % de dopaje atómico de Zn a) SEM y b) TEM (Campo Claro).