



**UNIVERSIDAD AUTÓNOMA
DEL ESTADO DE MÉXICO**



FACULTAD DE CIENCIAS
LICENCIATURA EN FÍSICA

**“ANÁLISIS Y CARACTERIZACIÓN DEL
CdSe NANOESTRUCTURADO POR
MICROSCOPIA DE TUNELAMIENTO”**

TESIS

PARA OBTENER EL TÍTULO DE

FÍSICO

PRESENTA:

SALVADOR HERNÁNDEZ COLIN

ASESOR:

DR. PORFIRIO DOMINGO ROSENDO FRANCISCO

Toluca, México. Julio 2017

Índice general

Dedicatoria.....	I
Agradecimientos.....	II
Justificación.....	III
Introducción.....	IV
Objetivos.....	VII
Objetivo general	VII
Objetivos particulares	VII
CAPÍTULO I. MARCO TEÓRICO.....	1
1.1. Estructuras y redes cristalinas	1
1.2 Principio físico fundamental del funcionamiento del microscopio de tunelamiento (Scanning Tunneling Microscope - STM).....	4
1.3. Barrera de potencial.....	8
CAPÍTULO II. CARACTERÍSTICAS FÍSICAS Y QUÍMICAS DEL SELENIO Y DEL CADMIO	11
2.1. Red cristalina y configuración electrónica	11
2.2. Representación espacial de la estructura del <i>CdSe</i>	13
2.3. Volumen del sistema.....	14
2.4. Factor de Empaquetamiento Atómico (FEA)	19
2.4.1. FEA hexagonal.....	20
2.4.2. FEA cúbica.....	21
2.5. Estructura del Seleniuro de Cadmio (<i>CdSe</i>).....	22
CAPÍTULO III. DESARROLLO EXPERIMENTAL.....	24
3.1. Sobre el STM	24
3.2. Preparación de la muestra condiciones de operación y parámetros de escaneo	25
CAPÍTULO IV. RESULTADOS Y ANÁLISIS	28
4.1. Micrografías y FFT del <i>CdSe</i>	28
4.2. Electronegatividad del sistema físico	38
CAPÍTULO V. CONCLUSIONES	40
Anexos	42
Bibliografía	43

Justificación

La caracterización permite conocer los parámetros que definen a determinados materiales, en los cuales, la forma molecular o estructura depende estrictamente de las propiedades intrínsecas de los elementos y también del tipo de proceso y/o técnica empleada para lograr esta unión.

Al conocer también la estructura cristalina que mantiene unidos a los átomos; se puede determinar qué tipo de arreglo periódico o aperiódico define al material en estudio y determinar gran cantidad de información de sus propiedades, tanto físicas como químicas; por ejemplo, si se trata de un conductor, semiconductor o aislante, incluso conocer su banda de conductividad o en su defecto su “band gap” para calcular el tipo de electronegatividad contenida en el material.

Por ello, es muy importante utilizar la técnica de caracterización adecuada para obtener la información del Seleniuro de Cadmio; para este caso se utilizó la microscopia de tunelamiento, porque con ella se puede determinar los parámetros de red que conforman dicha estructura, así como la nube electrónica que provoca sobre la superficie de la muestra y el arreglo cristalino del material.

Al obtener las micrografías, se analizaran con el software para obtener el parámetro de red de las diferentes fases que aparecen, así como el tipo de celda unitaria y con ello poder caracterizar su morfología con la ayuda de la nube electrónica de cada punto reticular de la red cristalina. Una vez realizado esto, se puede determinar el arreglo cristalino del semiconductor en estudio: CdSe, y se continua su análisis electrónico con la ayuda de la red recíproca del sistema cristalino y se complementa su interpretación con la espectroscopía y análisis de Fourier.

Introducción

A través de los últimos años, la ciencia de nuevos materiales ha encontrado diversos aspectos físico-químicos que permiten obtener y determinar las propiedades de ciertos materiales tanto en bulto como en su tipo de red cristalina; es decir, esto se debe a dos posibilidades: que se presentan como una propiedad intrínseca, o que se le inducen al material. Estas características han mantenido y generado un interés científico para el avance y la innovación de dispositivos electrónicos, optoelectrónicos y microelectrónicos.

Gracias al uso de diferentes técnicas experimentales (RX, microscopía de fuerza atómica y/o de tunelamiento, optoelectrónicas, entre otras) aplicadas a estos materiales; se ha podido observar, estudiar y caracterizar sus diferentes propiedades físicas para determinar si se trata de un conductor, semiconductor o aislante; e incluso comprender sus características magnéticas, ópticas, mecánicas, por mencionar solo algunas.

El uso de dichas técnicas también ha permitido determinar, identificar y calcular el parámetro de red, el cual nos ayuda a comprender como se comporta el potencial de interacción que mantiene conectados los puntos reticulares, los cuales se asumen unidos mediante osciladores armónicos.

Por ejemplo, con la ayuda del microscopio de efecto túnel o STM (Scanning Tunneling Microscope) se han caracterizado diferentes materiales a escala nanométrica como son: el grafito (*C*), oro (*Au*), plata (*Ag*), cobre (*Cu*), aluminio (*Al*), hierro (*Fe*), en específico. Con el STM no solo se puede identificar elementos de forma individual, sino que también ayuda a la observación de los compuestos binarios e incluso ternarios en su forma molecular. Estos compuestos resultan, por ejemplo, de la combinación de algunos metales con hidróxidos y/o bases, los cuales crean enlaces que permiten aceptar o recibir electrones, convirtiéndolos en buenos conductores de electricidad [1].

El tipo de enlace por el cual se da la unión entre dos o más materiales de diferente configuración electrónica permite determinar la manera y la técnica

experimental que deberá ser aplicada para ser estudiado el elemento o compuesto y poder ser analizado y caracterizado, según su composición. Por ejemplo, para materiales con propiedades semiconductoras, se analizan y caracterizan con la técnica de microscopio de barrido o efecto túnel, entre otras. Con la ayuda de estos diferentes dispositivos, se pueden estudiar sistemas físicos a escalas nanométricas ($10^{-9} m$) [2].

Al caracterizar a estos materiales como es el caso del grafito, se puede obtener mucha información desde diferentes puntos de vista, por ejemplo; que es un semimetal con estructura laminar formada por átomos de carbono, en el cual su alta anisotropía (su propiedad depende de la dirección intrínseca en el cristal) está asociada con la hibridación de los orbitales atómicos lo cual conduce a la generación de un enlace iónico; además se ha determinado su parámetro de red, y como se encuentra su estructura de capas de átomos, lo cual define el tipo de arreglo y el retículo espacial al que pertenece (arreglo del tipo hexagonal, donde la periodicidad de las celdas al unirse lo asemeja a un panal) [3].

Otro de los elementos, y también el semiconductor más usado, es el Silicio (Si); un metaloide amorfo y cristalizado por una red estructurada del tipo “diamante” con la propiedad de transmitir el 95% de longitud de onda de radiación infrarroja; esto lo convierte en un excelente semiconductor y a la vez en un buen medio elástico capaz de transmitir el sonido a una velocidad de 8,433 m/s; por ello es que su mayor aplicación es en transistores. Por otro lado, el segundo semiconductor más usado es el Germanio (Ge), el cual tiene la característica de transmitir el sonido a una velocidad de 5,400 m/s, este elemento es un semimetal, el cual presenta la misma estructura de red cristalina que el diamante, y responde a una eficaz conducción de radiación infrarroja, con una gran aplicación en foto-detectores [3].

Se considera que los semiconductores son de gran importancia debido a que dependiendo del material del cual estén elaborados se puede controlar el flujo de electrones y de esa manera se obtienen las características deseadas. Sin embargo, a pesar de que se ha trabajado y conoce mucha información de sus propiedades físicas, se desconocen otras tantas por efecto del tamaño y cambio de fase.

En el presente trabajo, se reportan de manera individual los primeros análisis y resultados obtenidos en muestras de Seleniuro de Cadmio (CdSe) mediante el empleo de la técnica experimental por microscopía de tunelamiento. Esta técnica permitió encontrar el cambio de fase a partir del tipo de red que lo define y por la cual está estructurado el material, así como los parámetros que definen la red.

De manera particular, se realizaron los estudios en muestras de Seleniuro de Cadmio ($CdSe$), debido a que es un tipo de compuesto perteneciente a las sales neutras; el cual es una combinación de dos elementos distintos del hidrógeno (H) y del oxígeno (O), los cuales se utilizan normalmente para la hibridación o creación de electronegatividad en estos tipos de compuestos para poder producir una buena conducción eléctrica.

La unión de los átomos del Selenio y del Cadmio, mediante la fuerza de atracción entre las cargas positivas y negativas que se forman a partir del intercambio de los electrones (enlace tipo iónico), forman al material semiconductor conocido como Seleniuro de Cadmio ($CdSe$). El cual presenta una estructura cristalina que lo hace idóneo para diferentes aplicaciones. Por ejemplo, una de ellas puede estar enfocada en dispositivos optoelectrónicos, donde la longitud de onda producida por el $CdSe$ es capaz de transmitirse en un rango de entre $\frac{\lambda}{4}$ y $\frac{\lambda}{2}$ de radiación infrarroja.

También se puede utilizar su información en la creación de múltiples dispositivos microelectrónicos, ya que con este tipo de material en su composición o en conjunto con alguna otra aleación determinada, sirve para la aplicación de nanotecnología, entre otras.

Objetivos

Objetivo general

Obtención de parámetros físicos del CdSe (Seleniuro de Cadmio) nanoestructurado con ayuda del microscopio de tunelamiento.

Objetivos particulares

- Determinar el tipo de red cristalina del CdSe (Seleniuro de Cadmio).
- Obtener el parámetro de red.
- Análisis y discusión de los espectros de Fourier del sistema físico.

CAPÍTULO I

MARCO TEÓRICO

La técnica de crecimiento para obtener diferentes materiales determina su estructura, ya sea para sistemas monoatómicos o en general para poliatómicos, lo cual permite de forma indirecta determinar el tipo de arreglo cristalino al que pertenece, según el ordenamiento y empaquetamiento atómico que presentan.

1.1. Estructuras y redes cristalinas

El ordenamiento atómico en sólidos cristalinos puede representarse asumiendo que los átomos se localizan en los puntos de intersección de la red los cuales se encuentran unidos mediante osciladores armónicos, estos puntos son llamados puntos reticulares de la red.

La celda unitaria primitiva, representada por los vectores unitarios $\hat{h}, \hat{k}, \hat{l}$ que definen el volumen más pequeño posible, es considerada la porción más simple de la estructura cristalina que al aplicarle los criterios de simetría reproducen de forma periódica la estructura del cristal. Este tipo de reproducción puede ser representada mediante un paralelogramo definido por $(\hat{i}, \hat{j}, \hat{k})$ o mediante un paralelepípedo, como se muestra en la figura 1.

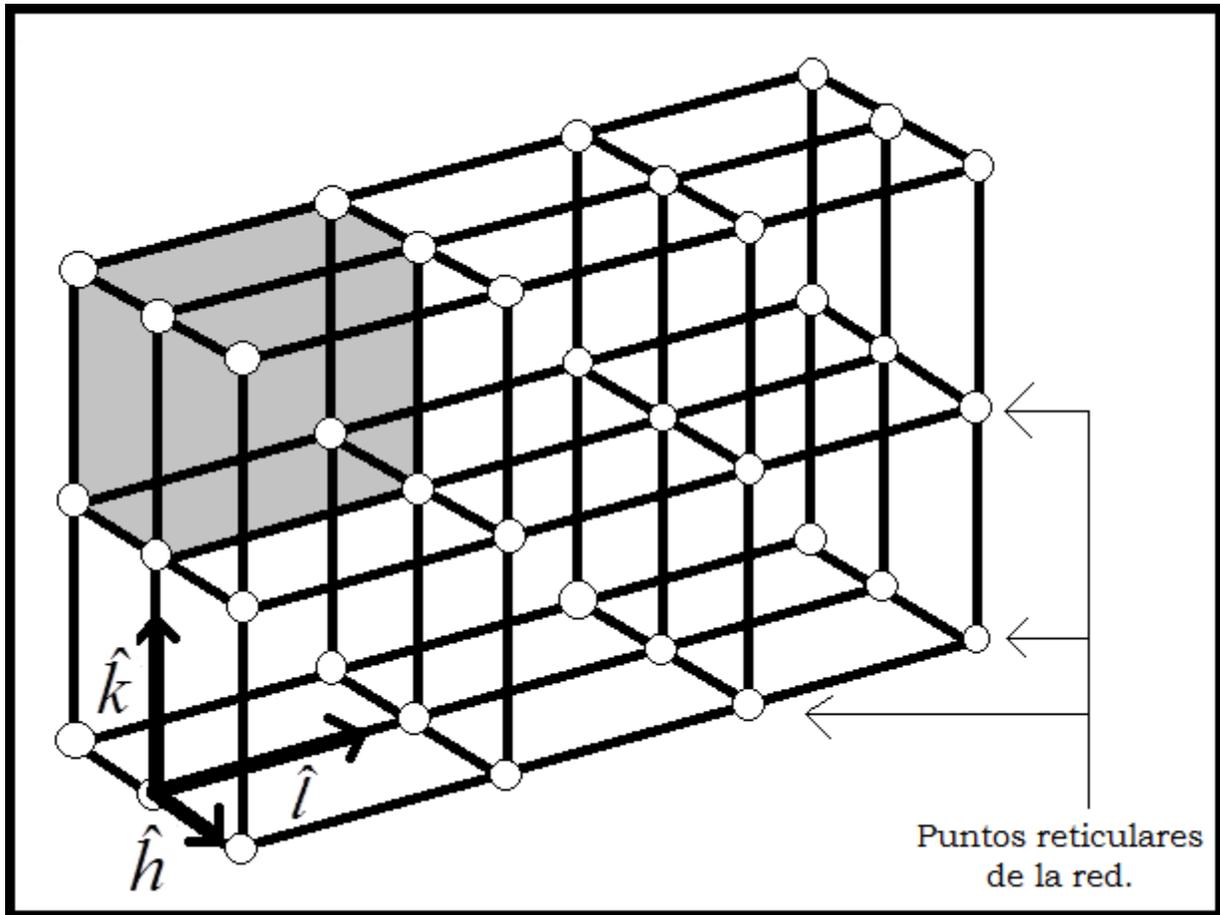


Figura 1. Representación de una red cristalina.

En la figura 1 se muestra el esquema de una red típica con una estructura simple mostrando la dirección de los vectores $\hat{h}, \hat{k}, \hat{l}$; los puntos reticulares del sistema representan la unión de los átomos en la estructura mediante líneas rectas, las cuales definen la red.

No debe confundirse el término estructura del cristal con el de red espacial; mientras que la primera es una realidad física, la segunda es una representación de la construcción geométrica, según el tipo de material que se analice. Por ello, en un arreglo o una estructura, lo más común es elegir una celda no primitiva, esto es, una de volumen grande, para poder identificar los elementos más fácilmente; como son direcciones de los vectores, posición del retículo, tipo de estructura en la red y los parámetros de los vértices así como sus ángulos (ver figura 2). Esto se debe a que el paralelepípedo primitivo puede ser oblicuo, y por comodidad, los cálculos para determinar la estructura del cristal formado se obtienen más fácilmente.

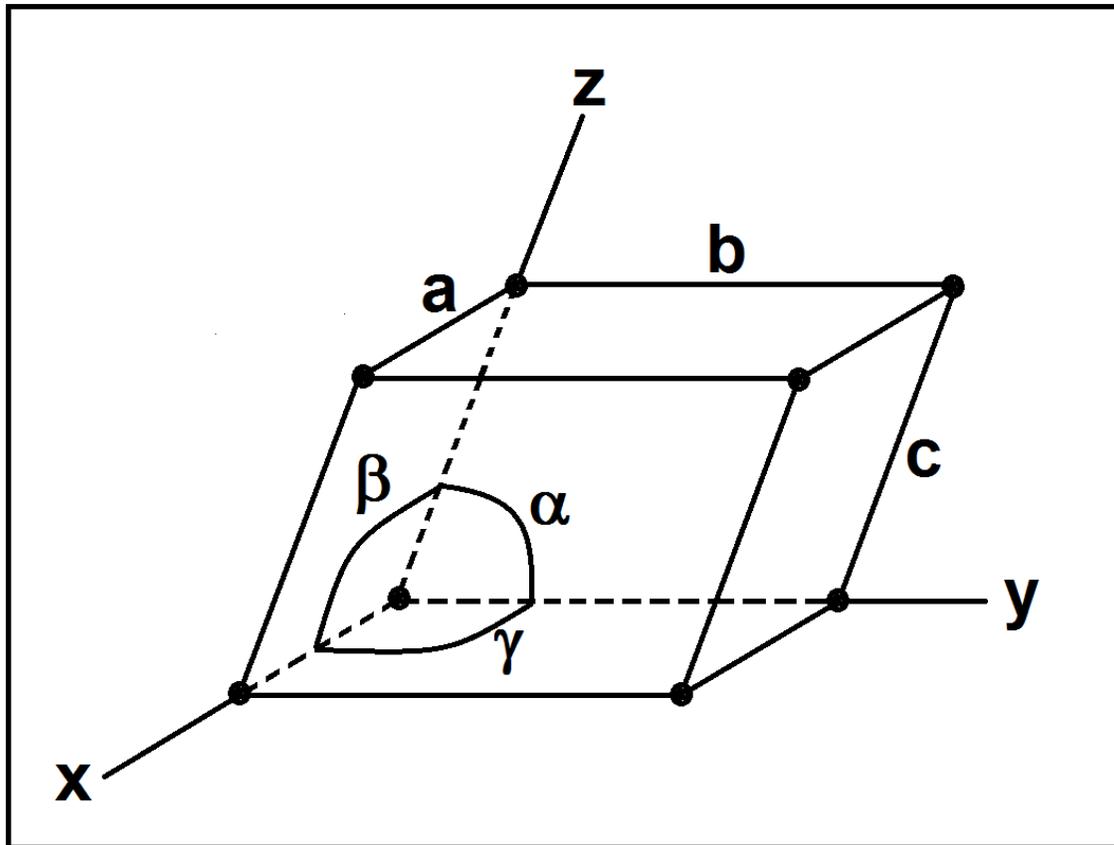


Figura 2. Representación de una celda unitaria.

En la figura 2, se pueden identificar a los vectores \mathbf{a} , \mathbf{b} , \mathbf{c} de la celda; y las pendientes a las cuales se encuentran cada uno de los vectores están representadas por los ángulos α , β , γ . Con ello tenemos que cualquier vector \mathbf{r} que localice algún punto reticular de la red estará definido como $\mathbf{r} = (h\mathbf{a}, k\mathbf{b}, l\mathbf{c})$, donde h , k y l representan los índices de Miller de la celda primitiva. Estas celdas, no solo definen la estructura del material sino que también representa la interacción y conexión de los átomos entre sí mediante el oscilador armónico (representante de la energía potencial que los une) y al considerar la periodicidad de la celda se recrea la superficie o una de las bases (arista) de la red quedando definida la estructura del material.

Dicha estructura depende del tipo de elementos o el compuesto que lo conforman. Para poder analizarla se utilizan diferentes técnicas teóricas y/o experimentales como por ejemplo la de barrido o de tunelamiento. De forma particular, la de tunelamiento se emplea normalmente en materiales con propiedades conductoras y semiconductoras.

1.2 Principio físico fundamental del funcionamiento del microscopio de tunelamiento (Scanning Tunneling Microscope - STM).

Debido a la naturaleza semiconductor del material en estudio, se utilizó la técnica de caracterización por STM para poder comprender algunas de sus propiedades electrónicas.

El sistema STM funciona bajo el principio fundamental del efecto túnel el cual desde un punto de vista simple se trata de lo siguiente: clásicamente, una partícula lanzada desde un extremo; siempre rebotará en un muro, o caerá en un pozo (potencial); cuánticamente la situación es muy distinta, y hay una probabilidad de que la partícula atraviese la barrera o salga del pozo, por lo que antes de trasladarse de un extremo a otro la energía será mayor que cuando llegue al otro extremo después de su desplazamiento; esta energía será menor [4].

En base a ello, en dicho sistema se cuenta con una punta conductora la cual esta aproximada a la superficie del material a ser examinado, y una corriente de polarización (diferencia de potencial) aplicada entre los dos permite a los electrones crear un túnel a través del gap, y así poder llegar hasta el material, como se verá más adelante en la sección experimental de este trabajo.

La corriente resultante de efecto túnel es una función de la posición de la punta, la tensión aplicada y la densidad local de estados de la muestra, tal corriente puede ser negativa o positiva; según el tipo de material al cual se aplica. La información es adquirida por monitoreo del potencial a medida que la posición de la punta actúa mediante la técnica de barrido (escaneo) sobre la superficie, y después de ser procesada es mostrada en forma de imagen (micrografía).

Desde un punto de vista físico concreto, la mecánica cuántica nos proporciona los conceptos adecuados para comprender la fenomenología de la técnica utilizada; esto es, si consideramos que los electrones se comportan como haces de energía y en la presencia de un potencial $U(z)$, los niveles $\psi_n(z)$ de los electrones estarán dados por las soluciones a la ecuación de Schrödinger:

$$\frac{-\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi_n(z)}{\partial z^2} + U(z)\psi(z) = E\psi_n(z) \quad (1)$$

dónde \hbar : es la constante de Planck reducida,
 z : es la posición de la punta,
 m : es la masa de un electrón,

entonces, la función de onda del electrón tiene la siguiente forma:

$$\psi_n(z) = \psi_n(0)e^{\pm ikz} \quad (2)$$

para:

$$k = \frac{\sqrt{2m(U - E(z))}}{\hbar} . \quad (3)$$

Sí $E > U(z)$ cumple con la condición para una función de onda dentro de la punta o dentro de la muestra. Sin embargo, sí se encuentra dentro de la barrera (gap), $E < U(z)$, y la función de onda será:

$$\psi_n(z) = \psi_n(0)e^{\pm kz} \quad (4)$$

Con la cual se puede cuantificar el decaimiento de la onda dentro de la barrera en la dirección positiva de z para $-k$. Esto quiere decir que entre más se desplace el electrón en dirección de z , k será mayormente negativo.

Conocer la función de onda permite calcular la densidad de probabilidad para encontrar al electrón en una determinada posición. En el caso del efecto túnel, la función de onda asignada a los electrones que son emitidos de la punta a la muestra se vuelve transversal cuando, bajo el efecto de un potencial, hay alguna probabilidad finita de encontrar al electrón en la región de barrera e incluso al otro lado (superficie de la muestra del Seleniuro de Cadmio).

Sí asumimos que el potencial es V y el ancho de la barrera es W ; la probabilidad P , de que un electrón en $z=0$ (borde izquierdo de la barrera) puede ser encontrado en $z=W$ (borde derecho de la barrera) como se observa en la figura 3, es proporcional a la función de onda elevada al cuadrado; es decir:

$$P \propto |\psi_n(0)|^2 e^{-2kW}. \quad (5)$$

Sí la corriente de polarización es pequeña, podemos aproximar $U - E \approx \phi M$ en la expresión de k ; donde ϕM se conoce como la función de trabajo, la cual nos ayuda para obtener la energía mínima necesaria para atraer un electrón desde un nivel ocupado a un nivel vacío, cuyo más alto nivel posible es el nivel de Fermi (para metales a una temperatura $T = 0$ Kelvin).

En este caso ϕM es el trabajo mínimo empleado para poder ceder los electrones de los niveles de energía del Selenio a los niveles del Cadmio, esto debido a la existencia de diferencia de electronegatividad entre ambos elementos.

Cuando se aplica una baja corriente de polarización a un sistema, solamente los estados electrónicos más cercanos al nivel de Fermi son excitados. Estos electrones pueden formar el túnel a través de la barrera. La función que describe tal nivel de Fermi ésta dada por

$$f(E) = \frac{1}{e^{(E-E_F)/kT} + 1} \quad (6)$$

donde E : es la energía total del sistema,
 E_F : es la energía de Fermi de la partícula,
 T : es la temperatura del sistema,
 k : potencial de Coulomb.

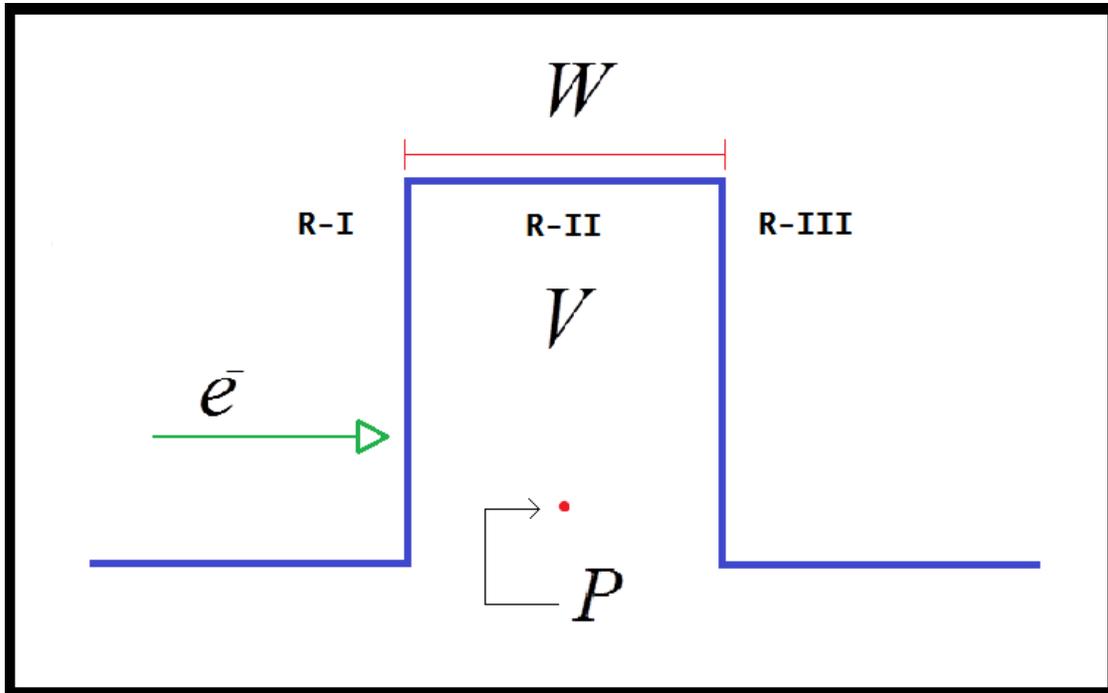


Figura 3. Esquema típico de un electrón dentro de una barrera de potencial; donde: V es el potencial, W el trabajo necesario para atravesar la barrera de potencial, P es la probabilidad finita de hallar la partícula, R-I región izquierda de la barrera, R-II pozo o potencial, R-III región derecha de la barrera.

Por ejemplo; para el caso de cristales conductores o semiconductores, como el CdSe (ver figura 1) dopados de tipo p y tipo n , el nivel de Fermi se desplaza por las impurezas [5], lo que implica que dicho nivel juega un papel importante en la teoría de bandas electrónicas para sólidos.

Sin embargo, dicho fenómeno de tunelamiento requiere que exista un nivel vacío de la misma energía para que el electrón viaje al otro lado de la barrera. Esto es por la restricción de que la corriente de tunelaje puede ser relacionada con la densidad parcial de estados de la muestra. La corriente debida a la tensión aplicada V (asumiendo que la corriente de efecto túnel ocurre entre la muestra y la punta) depende de dos factores: el número de electrones entre el nivel de energía de Fermi (E_F) y la corriente en la punta conductora (eV) en la muestra; entre los cuales corresponde a los estados libres para formar el túnel al otro lado de la barrera en la punta. Mientras más grande sea la densidad de estados disponibles, mayor será la corriente de efecto túnel.

1.3. Barrera de potencial

Cuando el potencial V es positivo, los electrones en la punta viajan a los estados vacíos en la muestra; para una corriente de polarización negativa, los electrones salen de los estados ocupados en la muestra y van hacia la punta generando un túnel [4].

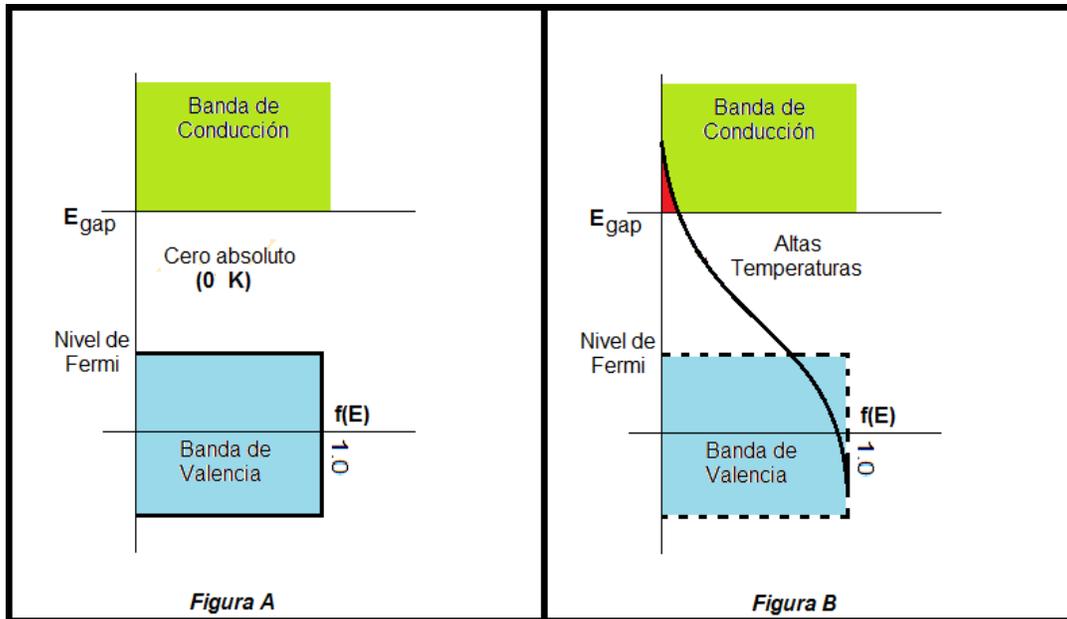


Figura 4. Comparación de los niveles de Fermi a diferente temperatura (0 K).

En la figura 4, se pueden comparar los niveles de energía de la siguiente manera; para la *figura A*, no hay electrones por encima de la banda de valencia a 0 K, ya que ninguno tiene energía por encima del nivel de Fermi y no hay estados de energía disponibles en el intervalo de la banda del gap. Mientras que para la *figura B*, a altas temperaturas, algunos electrones pueden alcanzar la banda de conducción y contribuir a la corriente eléctrica, es decir poder atravesar la barrera o band gap, y así poder generar la corriente del efecto túnel.

Matemáticamente, esta corriente de tunelamiento está dada por la expresión:

$$I \propto \sum_{E_F - eV}^{E_F} |\varphi_n(0)|^2 e^{-2kW} \quad (7)$$

Uno puede sumar la probabilidad de encontrar a la partícula cargada sobre las energías entre $E_F - eV$ y E_F para obtener el número de estados disponibles en este rango de energía por unidad de volumen, en consecuencia se encuentra la densidad local de estados (Density Local State - DLS) cerca del nivel de Fermi. La DLS cerca de alguna energía E dentro de un intervalo ε está dada por:

$$\rho_s(z, E) = \frac{1}{\varepsilon} \sum_{E-E-\varepsilon}^E |\varphi_n(z)|^2 \quad (8)$$

y la corriente eV de efecto túnel a una pequeña corriente de polarización V es proporcional a la DLS cerca del nivel de Fermi. Es deseable utilizar la DLS para expresar la corriente porque este valor no cambia con los cambios de volumen, mientras que la densidad de probabilidad si lo hace. Por lo tanto la corriente de efecto túnel está dada por [4]

$$I \propto V \rho_s(0, E_F) e^{-2kW} \quad (9)$$

dónde $\rho_s(0, E_F)$ es la DLS cerca del nivel de Fermi de la muestra en su superficie. Utilizando la ecuación (4), esta corriente puede ser expresada en términos de la DLS cerca del nivel de Fermi de la muestra en la superficie de la punta,

$$I \propto V \rho_s(W, E_F). \quad (10)$$

El término exponencial en la ecuación (9) es muy significativo puesto que pequeños cambios en W tienen una gran influencia en la corriente de tunelaje. Si la separación decrece por 1 Å, la corriente se incrementa en orden de magnitud, y viceversa. [6]

Ahora, la regla de oro de Fermi da la tasa para la transferencia de electrones a través de la barrera; esta regla se escribe de la siguiente manera [7]

$$w = \frac{2\pi}{\hbar} |M|^2 \delta(E_\psi - E_\chi) \quad (11)$$

dónde $\delta(E_\psi - E_\chi)$ restringe que el efecto túnel ocurra solo entre niveles de electrones con la misma energía. El elemento de matriz de túnel, está dado por

$$M = \frac{\hbar^2}{2m} \int_{z=z_0} (x^* \frac{\partial \psi}{\partial z} - \psi \frac{\partial x^*}{\partial z}) dS \quad (12)$$

la cual es una descripción de la menor energía asociada con la interacción de funciones de onda en el traslape, llamada también energía de resonancia.

Sumando sobre todos los estados se obtiene la corriente de tunelamiento:

$$I = \frac{4\pi e}{\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} [f(E_F - eV + \varepsilon) - f(E_F + \varepsilon)] \rho_s(E_F - eV + \varepsilon) \rho_T(E_F + \varepsilon) |M|^2 d\varepsilon \quad (13)$$

dónde f es la función de Fermi, ρ_s y ρ_T son la densidad de estados en la muestra y la punta, respectivamente. La función de distribución de Fermi describe el llenado de niveles de electrones a una temperatura T .

CAPÍTULO II

CARACTERÍSTICAS FÍSICAS Y QUÍMICAS DEL SELENIO Y DEL CADMIO

El STM puede ser una técnica de alto desafío, ya que requiere una superficie extremadamente limpia y lisa, puntas precisas, y un control de vibración excelente. Tradicionalmente, en el análisis del efecto de arreglos atómicos en el desempeño de un material, las sondas de difracción han sido el pilar de este tipo de investigaciones. Pero estas técnicas solo funcionan cuando el orden cristalino se extiende por cientos de espaciamentos atómicos [8].

2.1. Red cristalina y configuración electrónica

La red cristalina y el tipo de enlace dependen de las propiedades de cada elemento. Estas características se describen en el cuadro 1.

CARACTERÍSTICAS	ELEMENTO	
	Selenio (^{34}Se)	Cadmio (^{48}Cd)
Conductividad	$\frac{1}{R} = 1.0 \times 10^{-04} \frac{1}{\Omega m}$	$\frac{1}{R} = 13.8 \times 10^6 \frac{1}{\Omega m}$
Radio medio	115 pm	155 pm
Estructura	<i>Red Hexagonal</i>	<i>Red Hexagonal</i>
Tipo	No Metal	Metal
Configuración electrónica	$1s^2$ $2s^2, 2p^6$ $3s^2, 3p^6, 3d^{10}$ $4s^2, 4p^4$	$1s^2$ $2s^2, 2p^6$ $3s^2, 3p^6, 3d^{10}$ $4s^2, 4p^6, 4d^{10}, 4f^2$

Cuadro1. Características del Selenio y del Cadmio.

De acuerdo a la configuración electrónica de cada elemento podemos identificar gráficamente la distribución de los electrones, los cuales permiten definir la estructura del spin en las direcciones (x, y, z) y poder conocer la densidad de este giro de electrones, ya sea doble y triple capa.

En el Selenio se define su estructura molecular sobre el eje “x” y el eje “y” con doble densidad. Mientras que para el Cadmio tiene triple densidad en el eje “x” pero doble densidad en el eje “y”.

Un aspecto importante que describe la estructura electrónica de un material, es la estructura de bandas electrónicas; las cuales también son llamadas a veces, estructura de bandas de energía. Esto quiere decir que el número de orbitales de valencia es tan grande y la diferencia de energía entre cada uno de ellos es tan pequeño que se puede considerar como si los niveles de energía conjunta formarían bandas continuas.

Cuando los intervalos de energía no contienen orbitales, independiente del número de átomos agregados, se crean ciertas brechas energéticas entre las diferentes bandas.

Se ha mencionado anteriormente que al realizarse el enlace iónico entre el cadmio y el selenio, el primero realiza una cesión de electrones mediante la existencia de una banda prohibida (band gap) entre la banda de valencia en los orbitales del cadmio y la banda de conducción en los orbitales del selenio; permitiendo que los electrones pasen por este band gap en una temperatura promedio de aproximadamente 26 °C, la cual tiene un valor de 1.73 eV [9].

2.2. Representación espacial de la estructura del CdSe

Se conoce de la literatura especializada que el CdSe tiene un arreglo estructural como se muestra en la figura 5.

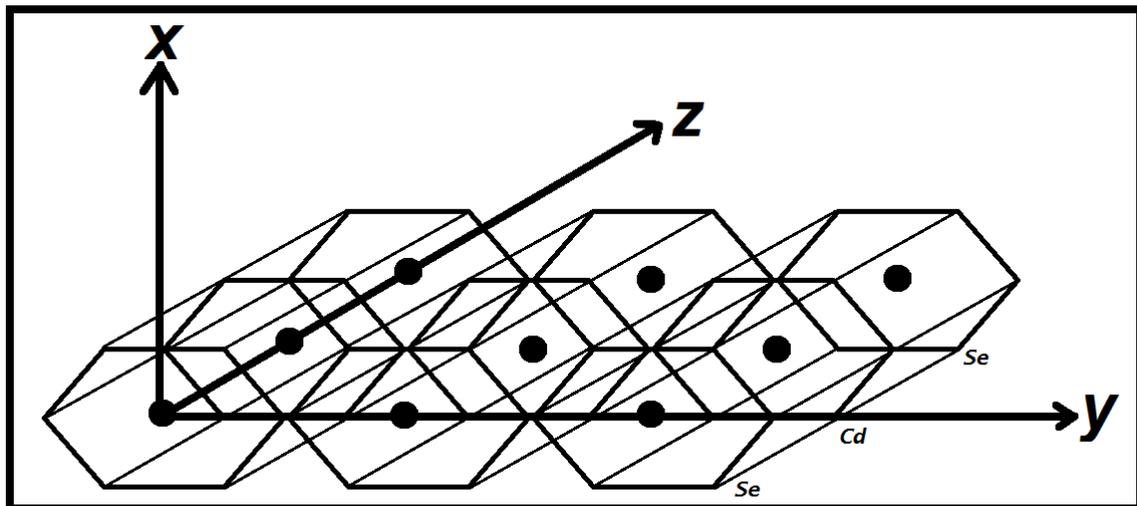


Figura 5. Representación espacial del CdSe.

La representación de la red espacial en la figura 3 tiene la forma de una red hexagonal centrada en las bases con repetición periódica de estas en dirección del eje "z", donde el ordenamiento de las bases que se dirige en el sentido del eje "y" permite que estas se reproduzca de la misma manera y proporcionalmente en la dirección de "x". Análogamente se forma un intersticio cúbico entre celda y celda de la red hexagonal a partir de la celda unitaria; lo que aparentemente predetermina la imagen espacial de una red cúbica intrínseca en la red hexagonal [10].

2.3. Volumen del sistema

Como la estructura del $CdSe$ está definida por una red hexagonal; procederemos a encontrar el número de átomos por celda tomando como referencia la celda unitaria. Para hallar este valor utilizaremos la expresión

$$N_{atom} = n_I + \frac{n_c}{2} + \frac{n_v}{6} \quad (14)$$

dónde N_{atom} : número de átomos,

n_I : número de átomos en el interior de la celdilla,

n_c : número de átomos en las caras,

n_v : número de átomos en los vértices.

Al sustituir los valores $n_I = 1$, $n_c = 0$, $n_v = 12$, correspondientes a nuestro sistema físico en la ecuación (14); podemos obtener el número de átomos por celda; el cual es:

$$N_{atom} = 1 + \frac{0}{2} + \frac{12}{6}$$

$$N_{ato} = 1 + 0 + 2$$

$$N_{atom} = 3$$

Pero como este dato solo hace referencia al número de átomos que hay en una celda, al repetir a la celda siguiente la cual se ubica de manera periódica, entonces es el doble de átomos contenidos en un volumen formado por estas 2 celdas; el cual es un total de $N_{atom} = 6$.

Por otro lado, el volumen contenido en la estructura espacial será el de un prisma hexagonal; el cual se obtiene mediante la expresión:

$$V_c = \frac{3\sqrt{3}}{2} a^2 c \quad (15)$$

dónde a representa el valor de la longitud de un lado del hexágono y c está representando la altura; es decir:

$$a = 2r \quad (16)$$

y

$$c = \sqrt{\frac{2}{3}}(4r) \quad (17)$$

Para poder calcular el volumen contenido en la red espacial, se obtiene el área de la sección formada por la red hexagonal. Donde el área de un prisma hexagonal regular esta dado por:

$$A_{Hexágono} = \frac{P(ap + x)}{2} \quad (18)$$

dónde el apotema está definido como la distancia entre dos retículos de cada vértice, o también como la distancia entre el retículo central de la celda y el retículo ubicado en un vértice cualquiera de la celda en la red que define al material, las cuales se repiten periódicamente en la dirección del eje " x ". Ésta medida se determina por la expresión:

$$ap = \sqrt{4y^2 - y^2} \quad (19)$$

Mientras que para la longitud de cada lado del hexágono, se considera la distancia entre cualquiera de los 6 retículos espaciales contenidos en la intersección de cada vértice y el retículo central de la red. Esta longitud entre cada retículo espacial se encuentra definida por la distancia interatómica compuesta por el Seleniuro de Cadmio; la cual tiene un valor promedio de $y \approx 2.29 \times 10^{-10} m$. El perímetro está definido por:

$$P_{Hexágono} = 6 \cdot y \quad (20)$$

sustituyendo el valor de la longitud “**y**” en la ecuación (20), el perímetro tiene una magnitud de

$$P = (6)(2.29 \times 10^{-10} m) \Rightarrow P \approx 1.38 \times 10^{-09} m$$

nuevamente al sustituir el valor de “**y**” en la ecuación (19), el apotema tiene una magnitud de

$$ap = \sqrt{4(2.29 \times 10^{-10} m)^2 - (2.29 \times 10^{-10} m)^2}$$

$$ap = \sqrt{4(5.25 \times 10^{-20} m^2) - 5.25 \times 10^{-20} m^2}$$

$$ap = \sqrt{21.35 \times 10^{-20} m^2 - 5.25 \times 10^{-20} m^2}$$

$$ap = \sqrt{16.1 \times 10^{-20} m^2}$$

$$ap \approx 4.55 \times 10^{-20} m$$

Conociendo los valores del perímetro, el apotema y conociendo el valor para $x \approx 2.55 \times 10^{-10} m$, al sustituir estos valores en la ecuación (18), obtenemos el área hexagonal de la celda unitaria; la cual es:

$$A_{Hexágono} = (1.38 \times 10^{-09} m)(2.65 \times 10^{-10} m + 2.55 \times 10^{-10} m)$$

$$A_{Hexágono} = (1.38 \times 10^{-09} m)(1.30 \times 10^{-10} m)$$

$$A_{Hexágono} \approx 4.96 \times 10^{-21} m^2$$

Para determinar el volumen de un prisma hexagonal, se utiliza la expresión:

$$V_{Hexágono} = A_{Hexágono} \cdot x \tag{21}$$

al sustituir el valor de la ecuación (18) y el valor de “**x**”, tenemos que

$$V_{Hexágono} = (4.96 \times 10^{-21} m^2)(2.55 \times 10^{-10} m)$$

$$V_{Hexágono} \approx 1.27 \times 10^{-30} m^3$$

Además de la ecuación (16), se tiene

$$a = 2r$$

$$a = 2(2.29 \times 10^{-10} m)$$

$$a \approx 4.58 \times 10^{-10} m$$

y junto con el valor de la ecuación (17) se sustituyen en la ecuación (15), obteniéndose el volumen del cristal con red hexagonal

$$V_c = \frac{3\sqrt{3}}{2} (4.58 \times 10^{-10} m)^2 (2.55 \times 10^{-10} m)$$

$$V_c = \frac{3\sqrt{3}}{2} (2.10 \times 10^{-19} m^2) (2.55 \times 10^{-10} m)$$

$$V_c \approx 1.39 \times 10^{-29} m^3$$

De esta manera podemos observar que los valores de los volúmenes obtenidos del prisma hexagonal por el método $V_{Hexágono}$ y V_c tienen una variación mínima; la cual está determinada por la expresión

$$\Delta V_{Hex} = V_{Hexágono} - V_c \quad (22)$$

Aplicando estos valores la variación del volumen obtenida por ambos métodos es

$$\Delta V_{Hex} \approx 2 \times 10^{-32} m^3 .$$

Este valor de variación entre ambos volúmenes le llamamos la incertidumbre existente entre las ecuaciones (15) y (21).

El valor total del volumen, también llamado volumen promedio a partir de los volúmenes $V_{Hexágono}$ y V_c utilizando la expresión

$$V_T = \frac{V_{Hexágono} + V_c}{2} \quad (23)$$

Sustituyendo los valores de las ecuaciones (15) y (21) en la ecuación (23) se determina el valor del volumen total; es decir:

$$V_T = \frac{1.27 \times 10^{-30} m^3 + 1.39 \times 10^{-29} m^3}{2}$$

$$V_T = \frac{2.56 \times 10^{-30} m^3}{2}$$

$$V_T \approx 1.28 \times 10^{-30} m^3$$

Para tener un valor más aproximado del volumen total del sistema; al valor de la ecuación (23) le agregaremos la incertidumbre de la ecuación (22); esto es

$$V_{TT} = V_T \pm \Delta V_{Hex} \quad (24)$$

Finalmente el volumen total del sistema con la incertidumbre agregada es:

$$V_{TT} \approx 1.28 \times 10^{-30} \pm 2 \times 10^{-32} m^3 .$$

2.4. Factor de Empaquetamiento Atómico (FEA)

Se entiende como factor de empaquetamiento atómico (FEA), a la fracción de espacio que los átomos ocupan en una celda [11].

Es importante conocer que un enlace formado entre dos o más elementos iguales o diferentes, define el empaquetamiento compacto en ellos, ya sea que al unirse lo hagan mediante un enlace covalente lo cual definiría una molécula, pues la densidad contenida por estos, abarca el volumen 100% total que formaron al unirse, por lo cual su espacio lo asemeja a una esfera [12]. Pero, sí la unión de estos elementos es del tipo iónico o metálico; como se ha dicho anteriormente en la literatura, se obtiene una estructura o arreglo cristalino, lo cual se define por el arreglo y la periodicidad en la que se mantiene unidos a los átomos.

Entonces, al considerar el tipo de cristal permite conocer la cantidad o que tan denso de átomos contiene el arreglo en sus celdas y los espacios o huecos entre estas estructuras.

Por lo tanto, al conocer el empaquetamiento compacto de los retículos identificamos la disposición de un número infinito de celdas, de forma que las mismas ocupen la mayor fracción posible de un espacio infinito espacialmente debido a la disposición periódica o aperiódica [13].

Por ejemplo, sí las ecuaciones (16) y (17) se sustituyen en la ecuación (15), el factor de empaquetamiento atómico obtenido en una estructura hexagonal regular común, es de $FEA \approx 0.7004$; donde este valor proporcionalmente equivale al 70.04%.

Como el Seleniuro de Cadmio es una estructura hexagonal no regular, geoméricamente hablando, su FEA se determina empleando la expresión

$$FEA \approx \frac{N_{atom} \cdot V_{atom}}{V_T} \quad (25)$$

dónde N_{atom} : número de átomos dentro de la celda,

V_{atom} : volumen del átomo,

V_T : volumen total del cristal.

Cabe señalar que para el volumen atómico; se considera al átomo como un cuerpo que tiene una forma esférica. Mientras que para el volumen del cristal, solo se está considerando la forma espacial formada por la periodicidad de los hexágonos centrados en las bases, en el cual cada base es una celda unitaria. Por lo tanto consideramos a esta región espacial como el volumen del cristal en la estructura del CdSe.

2.4.1. FEA hexagonal

Para obtener el volumen del átomo considerando el párrafo anterior; el volumen esta dado por la expresión

$$V_{atom} = \frac{4\pi}{3} r^3 \quad (26)$$

Dado que el radio atómico promedio esta dado por $r_p = 1.35 \times 10^{-10} m$, al sustituir este valor en la ecuación (26), el volumen atómico tiene un valor de

$$V_{atom} = \frac{4\pi}{3} (1.35 \times 10^{-10} m)^3$$

$$V_{atom} = \frac{4\pi}{3} (2.46 \times 10^{-30} m^3)$$

$$V_{atom} = \frac{3.1 \times 10^{-29} m^3}{3}$$

$$V_{atom} \approx 1.03 \times 10^{-29} m^3$$

Al sustituir el valor de las expresiones (14), (23) y (26) en la ecuación (25), determinamos el valor del FEA del CdSe, el cual tiene un valor de

$$FEA \approx \frac{(6)(1.03 \times 10^{-29} m^3)}{1.28 \times 10^{-30} m^3}$$

$$FEA \approx \frac{6.18 \times 10^{-29} m^3}{1.28 \times 10^{-30} m^3}$$

$$FEA \approx 0.4140 .$$

Ya que el FEA es el volumen que ocupan los átomos dentro de una celda, este valor es proporcional al porcentaje de la concentración atómica; la cual tiene un valor de

$$FEA \approx 41.40\% .$$

2.4.2. FEA cúbica

Para el caso del factor de empaquetamiento atómico en una estructura cúbica regular CS (Cubica Simple), el $FEA \approx 74.04$; este valor equivale al 74.04%, además el número de átomos contenido en la celda se determina por la ecuación

$$N_{atom} = n_l + \frac{n_c}{2} + \frac{n_v}{8} . \quad (27)$$

para el arreglo del CdSe, el intersticio que tiene la forma cubica tiene un átomo ubicado en cada esto indica que $n_l = 0$, $n_c = 0$ y $n_v = 8$ al ser sustituidos en la ecuación (27), se tiene que

$$N_{atom} = 0 + \frac{0}{2} + \frac{8}{8}$$

$$N_{atom} = 1 .$$

Para obtener el volumen total del cristal V_T del prisma cúbico, empleamos la expresión

$$V_T = a^2 \cdot b \quad (28)$$

Sabiendo que $a = x \approx 2.55 \times 10^{-10} \text{ m}$ y $b = y \approx 2.29 \times 10^{-10} \text{ m}$ (valores obtenidos por el software del STM), sustituimos los valores en la ecuación (28); el volumen total del cristal cubico es:

$$V_T = (2.55 \times 10^{-10} \text{ m})^2 \cdot (2.29 \times 10^{-10} \text{ m})$$

$$V_T = (6.50 \times 10^{-20} \text{ m}^2) \cdot (2.29 \times 10^{-10} \text{ m})$$

$$V_T \approx 1.48 \times 10^{-29} \text{ m}^3.$$

Sí sustituimos los valores de la ecuación (26), (27) y (28) en la ecuación (25), se obtiene el factor de empaquetamiento atómico en el arreglo del cristal cubico. Este valor está dado por:

$$FEA = \frac{(1) \cdot (1.03 \times 10^{-29} \text{ m}^3)}{1.49 \times 10^{-29} \text{ m}^3}$$

$$FEA \approx 0.6912.$$

Sí la estructura del intersticio del cristal estuviera formada por un cubo ordinario, el valor del FEA sería 74.04%. Pero como el intersticio tiene la estructura de un prisma rectangular, se asume que el FEA tiene que ser menor que el de uno cubico.

Estos valores se comprobaron al haber obtenido el valor de la ecuación (25) para el arreglo cubico el cual es proporcional a

$$FEA \approx 69.12\% .$$

2.5. Estructura del Seleniuro de Cadmio (CdSe)

Cuando dos o más elementos son unidos en el proceso de la síntesis, los electrones juegan un papel importante; ya que estos al estar en el último nivel energético permiten establecer el tipo de enlace que los unirá, cediendo electrones

de un elemento a otro. Por ejemplo; en el caso del *CdSe*, los electrones de valencia permiten identificar al Selenio como el elemento que cederá electrones de su último nivel energético al Cadmio.

El arreglo geométrico en el que se ordenan los diferentes elementos después de su unión, varía dependiendo de varios factores físicos y químicos, de forma particular el *CdSe* se ordena en dos posibles formas: cubica o hexagonal. Para el caso de este trabajo se logró observar la hexagonal, figura 6.

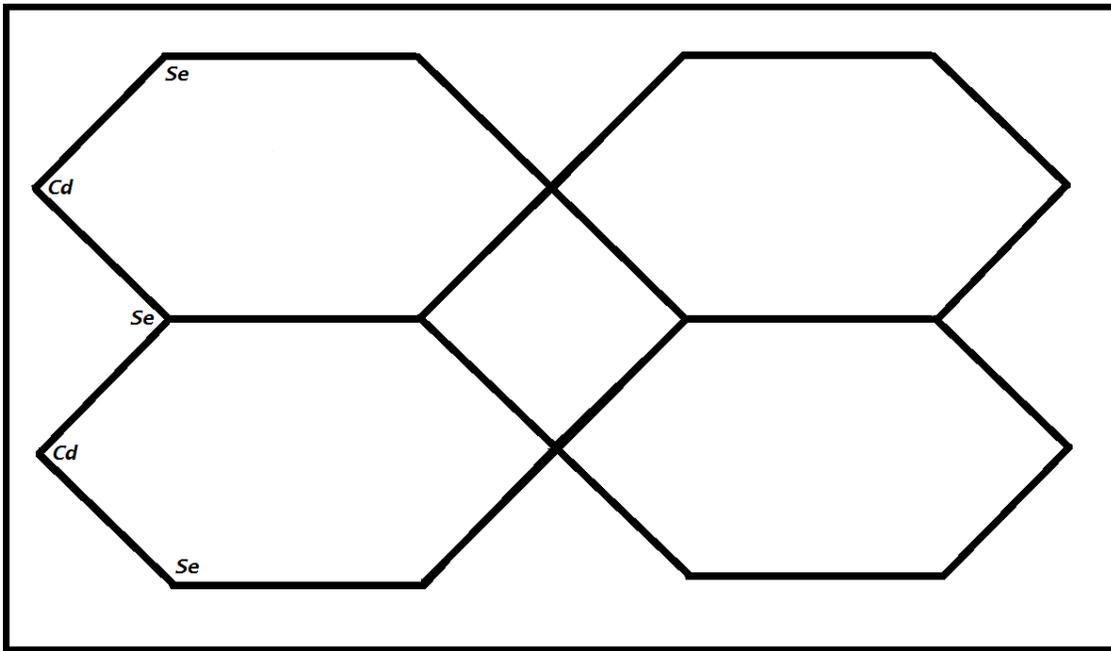


Figura 6. Red generada por el enlace iónico entre el Selenio y el Cadmio.

Sí consideramos la forma de paralelogramos, la red definida en la figura 5 nos ayuda a comprender como se genera o representa espacialmente la red de hexágonos como una serie de prismas hexagonales que al ser posicionados en una dirección de manera repetitiva, forman en su interior un intersticio cúbico.

Este tipo de estructura espacial tendría a definir al cristal como un material formado por dos tipos de estructuras una hexagonal y otra cúbica como se ha mostrado en la figura 6. Esta red hexagonal tiene la característica de que $a = b \neq c$, $\alpha = \beta = 90^\circ$ y $\gamma = 120^\circ$. Mientras que para la celda intersticial, por tener forma cúbica, $a = b = c$ y $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$.

CAPÍTULO III

DESARROLLO EXPERIMENTAL

3.1. Sobre el STM

Para el desarrollo de este trabajo se hizo uso de un microscopio de efecto túnel o STM (ver figura 7), dispositivo electrónico que permite analizar materiales con propiedades semiconductoras. El proceso de escaneo o técnica de barrido que realiza sobre la superficie de la muestra, genera como resultado micrografías a escala nanométrica del material en estudio que posteriormente es analizado con el software del dispositivo, propiamente.

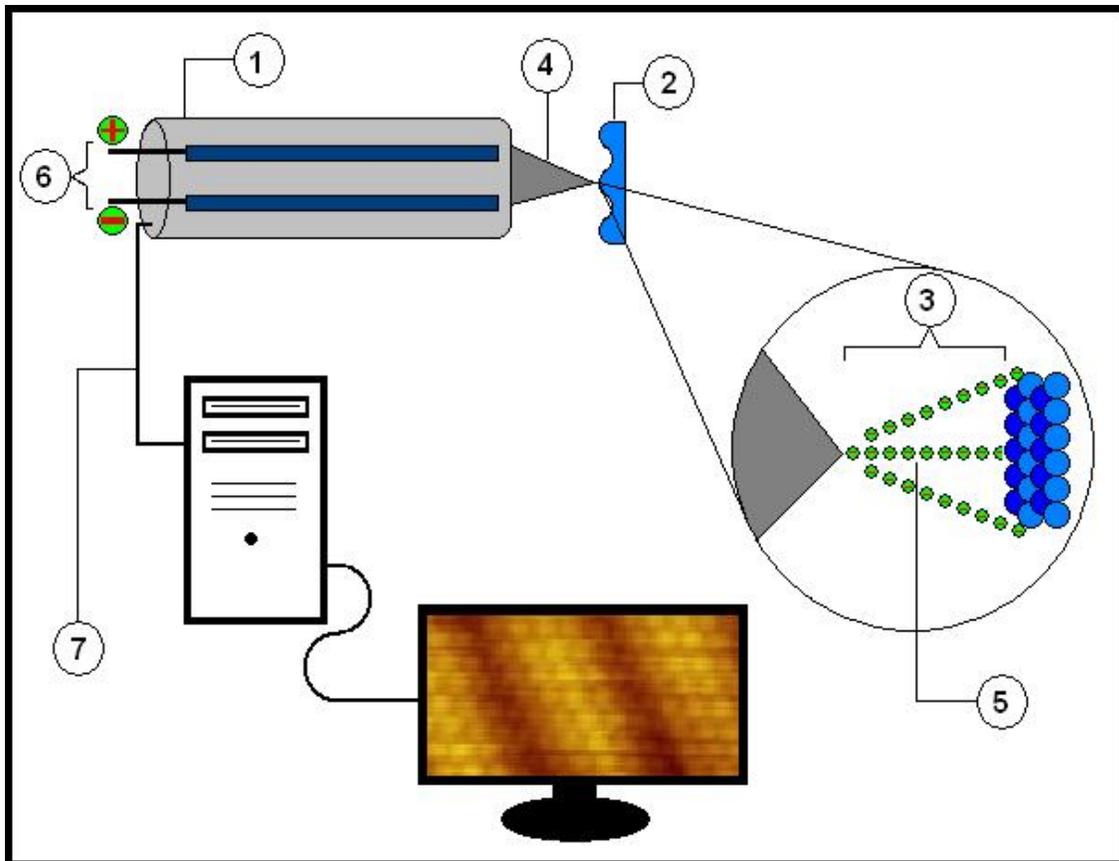


Figura 7. Esquema con las partes más importantes del STM.

dónde: 1. Piezoeléctrico, 2. Muestra a ser analizada colocada en el porta muestras, 3. Distancia “d” entre la punta conductora y la muestra (gap), 4. Punta del microscopio (conductor de iridio-platino), 5. Corriente amplificadora de tunelamiento emitida por la punta conductora, 6. Electrodo de tensión que regulan el voltaje y corriente, 7. Procesamiento de datos y visualización de micrografías a través del software.

3.2. Preparación de la muestra condiciones de operación y parámetros de escaneo

Las muestras CdSe con las que se trabajó fueron crecidas a una temperatura entre $1223 - 1423 K$ y un pH de 8. Debido a que el material se encuentra en polvo, con un dispositivo tipo prensa, se compactó el compuesto para formar pastillas firmes y tener una superficie uniforme sobre la cual se pudiera trabajar. Una vez compacta se adhiere la muestra a una base metálica

(superficie circular con un diámetro de aproximadamente $D = 8 \pm 0.5 \text{ mm}$) utilizando pintura de plata, dejándola secar en un tiempo aproximado de 24 horas a temperatura ambiente ($23.5 - 24.5 \text{ }^\circ\text{C}$). Una vez concluido este lapso de reposo, se procedió a colocar la base con la muestra en el porta muestras del microscopio; el cual como se ha mencionado anteriormente, se ubica en el riel del servomotor del STM.

Para poder obtener las micrografías del material es necesario colocar manualmente la muestra tan cerca como sea posible de la punta del microscopio (ver figura 8), como primera aproximación de la posición correcta, la cual, será corregida y controlada por medio del servomotor con ayuda del software del sistema. Esta distancia de separación es conocida como gap, a través del cual los electrones pasan en un flujo generado por la corriente (potencial V) de la punta a la muestra, provocando el fenómeno llamado **efecto túnel**. Una vez alcanzada la distancia óptima, el software comienza con el escaneo.

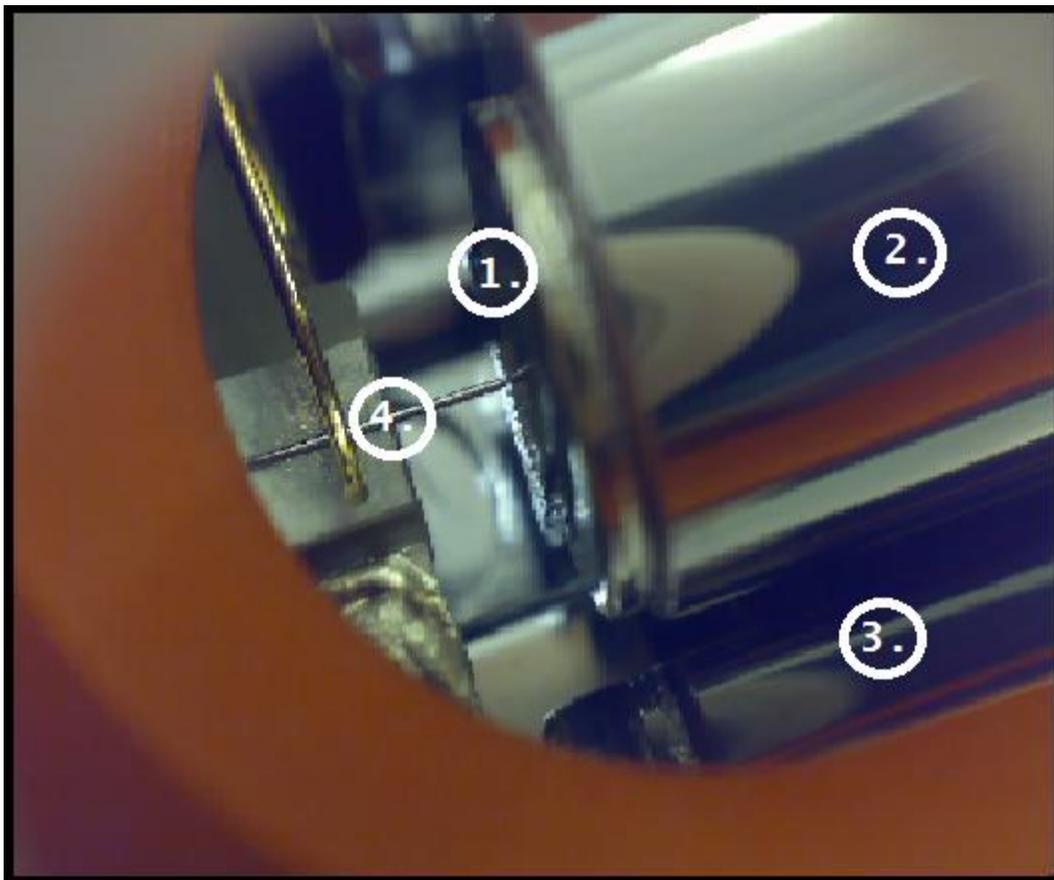


Figura 8. Fotografía del porta muestra con el material sobre el servomotor del STM. Se puede observar: 1. Material de *CdSe*, 2. Porta muestra, 3. Servomotor y 4. Punta conductora.

Para poder lograr las imágenes correctas y sin ruido fue necesario trabajar bajo ciertas condiciones específicas:

- * Se evitaron movimientos capaces de alterar la posición adecuada de la muestra en el cabezal del microscopio.
- * También se evitó al máximo la exposición del sistema a sonidos ajenos al medio de trabajo debido a que estos también provocan movimientos y vibraciones que alteran el campo electromagnético sobre la muestra.
- * Se evitó hablar con demasiada frecuencia cerca del microscopio debido a que al hablar se liberan moléculas de vapor aumentando la posibilidad de provocar o alterar el medio del gap, alterando el escaneo.

Por otro lado los parámetros más relevantes de funcionamiento del sistema para lograr un buen registro de las micrografías según las condiciones de laboratorio antes mencionadas fueron:

- Voltaje: *50 mV*.
- Escaneo sobre la superficie de 128 puntos por línea con aproximaciones de hasta 256 según la irregularidad de la superficie.
- Tiempo de escaneo por línea de 0.2 spp (segundos por punto).
- Temperatura ambiente entre 23 - 25 °C.

Cabe mencionar que la diferencia de potencial puede cambiar dependiendo la superficie, según la región en la cual se escanee. Del mismo modo al emitir el flujo de electrones sobre la superficie se podrá producir el nivel mínimo de energía de Fermi adecuado por el cual se generará la nube electrónica; de esta se obtendrá la respectiva información (micrografía) [14].

CAPÍTULO IV

RESULTADOS Y ANÁLISIS

4.1. Micrografías y FFT del CdSe

Después de una serie de intentos repetidos para lograr conseguir detectar señal del material, se logró conseguir obtener el acercamiento ideal para poder realizar el escaneo del Seleniuro de Cadmio (*CdSe*) logrando obtener así la micrografía que se muestra en la figura 7:

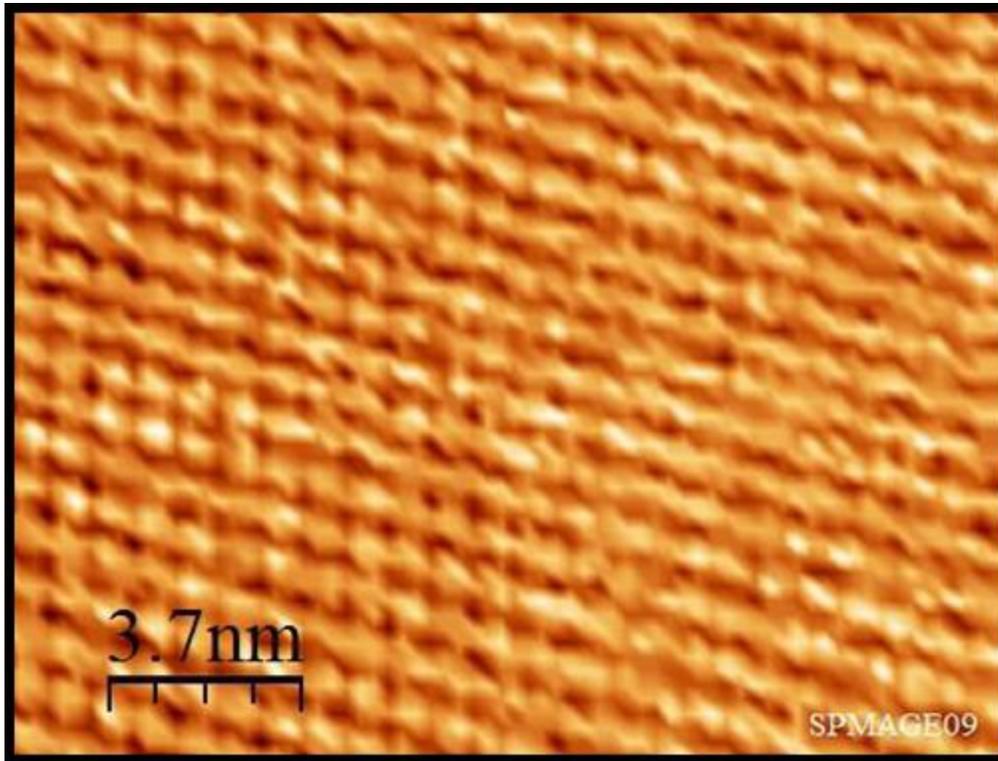


Figura 7. Micrografía del *CdSe* obtenida con el STM.

En la figura 7 se muestra una micrografía de tunelamiento del Seleniuro de Cadmio (*CdSe*) nanoestructurado, en la cual se puede observar que la superficie se asemeja a una malla periódica, la cual es característica de un material cristalino. Para poder obtener la información física del material, fue necesario trabajar las micrografías obtenidas con el software del microscopio y además fue necesario hacer acercamientos en diferentes regiones, como se observa en la figura 8.

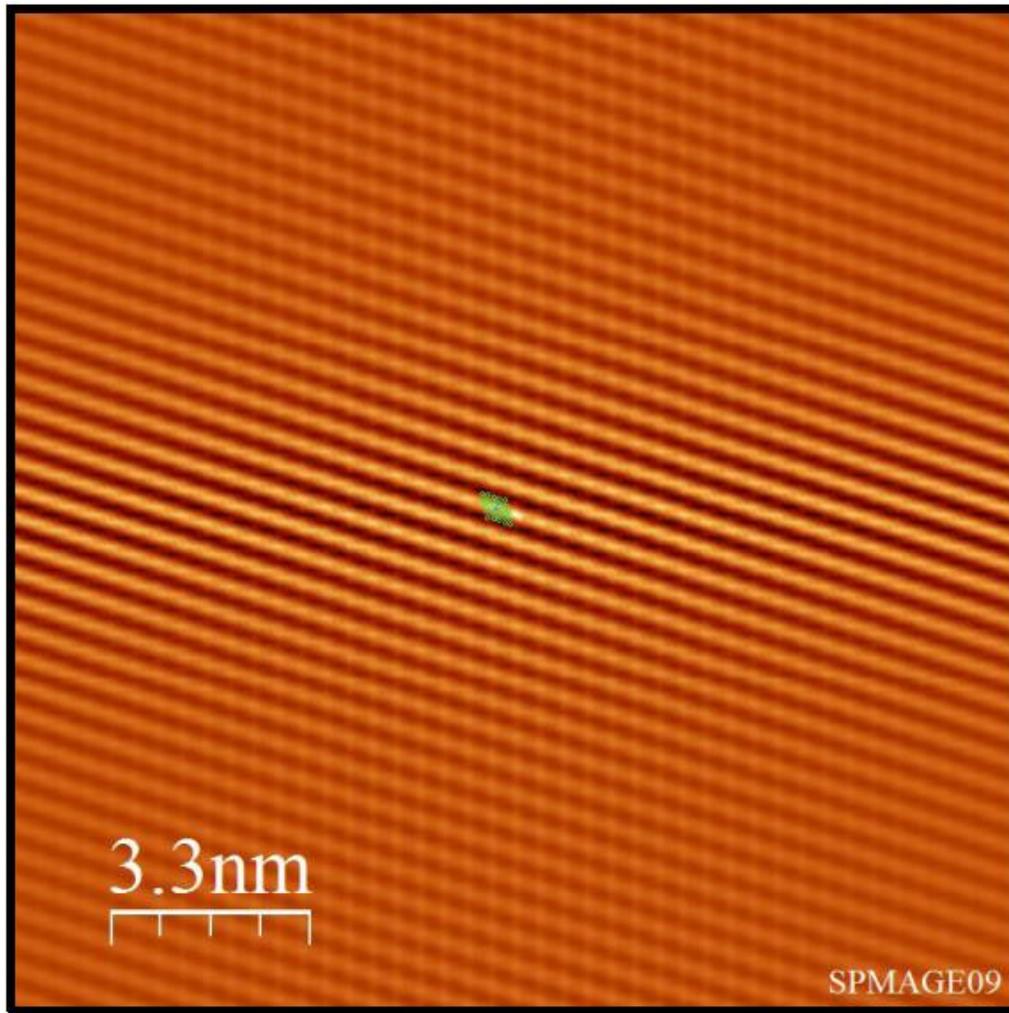


Figura 8. Suavizado de la señal original, donde se observa más fácilmente el arreglo periódico.

En la figura 8, se muestra un suavizado de la señal original, lo que nos permite poder observar con mayor detalle el arreglo de la malla. Sobre esta superficie se realizó el ajuste y ordenamiento de la forma que presenta el material utilizando la técnica de enrejado, el cual permite identificar los tipos de forma geométrica que definen el material.

Debido a que esta forma geométrica no se aprecia con claridad, se realizó un acercamiento sobre la región marcada en verde, la cual representa el enrejado.

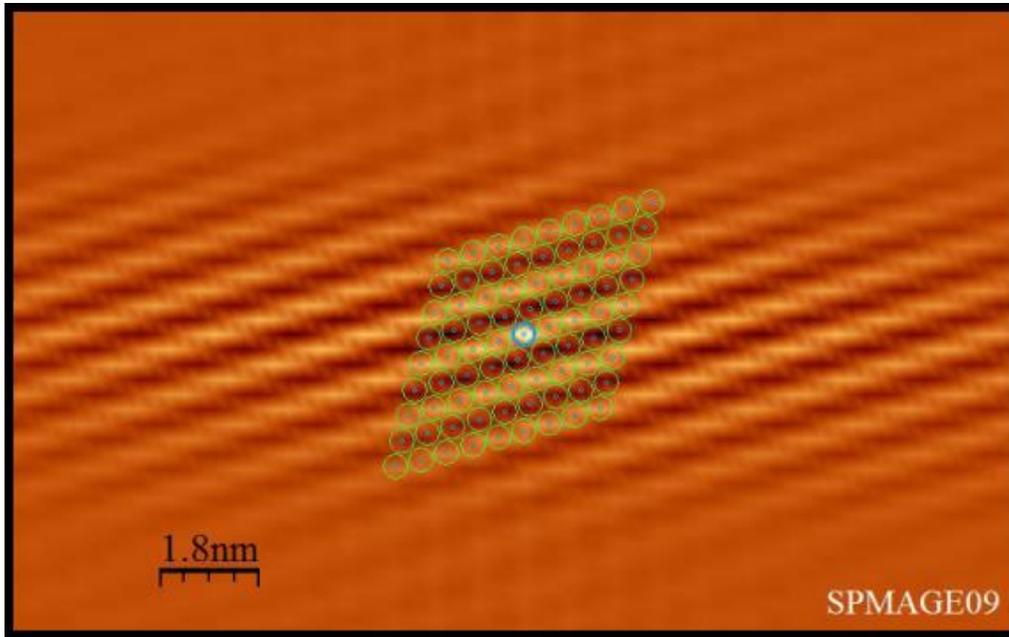


Figura 9. Detalle sobre la micrografía en el área del enrejado (hexagonal).

En el arreglo de la figura 9 se puede mostrar el enrejado marcado en verde, el cual representa una forma de ordenamiento hexagonal.

Cada punto intrínseco (punto azul) marcado entre los enrejados representa los puntos reticulares del material. Estos puntos también generan la información de separación entre átomos la cual es de aproximadamente 0.45 nm y FEA igual a 41.4% .

Sin embargo, también se hicieron acercamientos sistemáticos a otras regiones, como se puede observar en la siguiente figura:

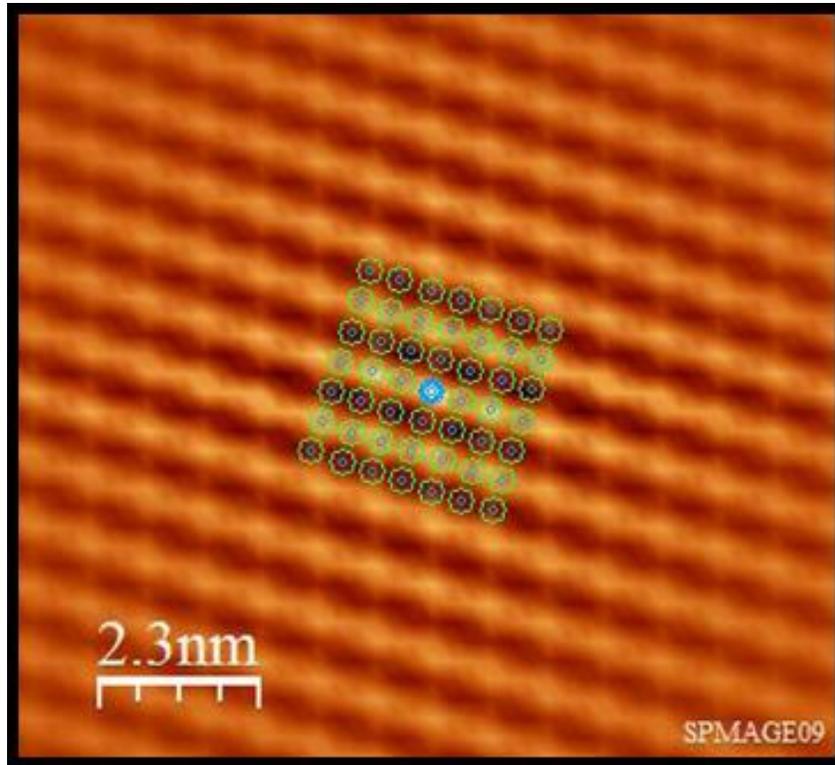


Figura 10. Aproximación de la micrografía sobre una región diferente al del enrejado hexagonal.

Como se puede observar en la figura 10, también existe un arreglo de red cristalina de forma cúbica. Esta información podría generar incertidumbre si el material es un policristal o tiene doble ordenamiento atómico de cristales debido a la naturaleza del Selenio y/o del Cadmio.

Sin embargo, de acuerdo a la literatura especializada, se ha encontrado que este tipo de material presenta ambas fases: cúbica y hexagonal.

Para este caso particular se encontró que la distancia entre cada punto reticular de la celda cubica es de aproximadamente 0.575 nm y el volumen atómico ocupado es de apenas 69.12% de acuerdo a la ecuación (25).

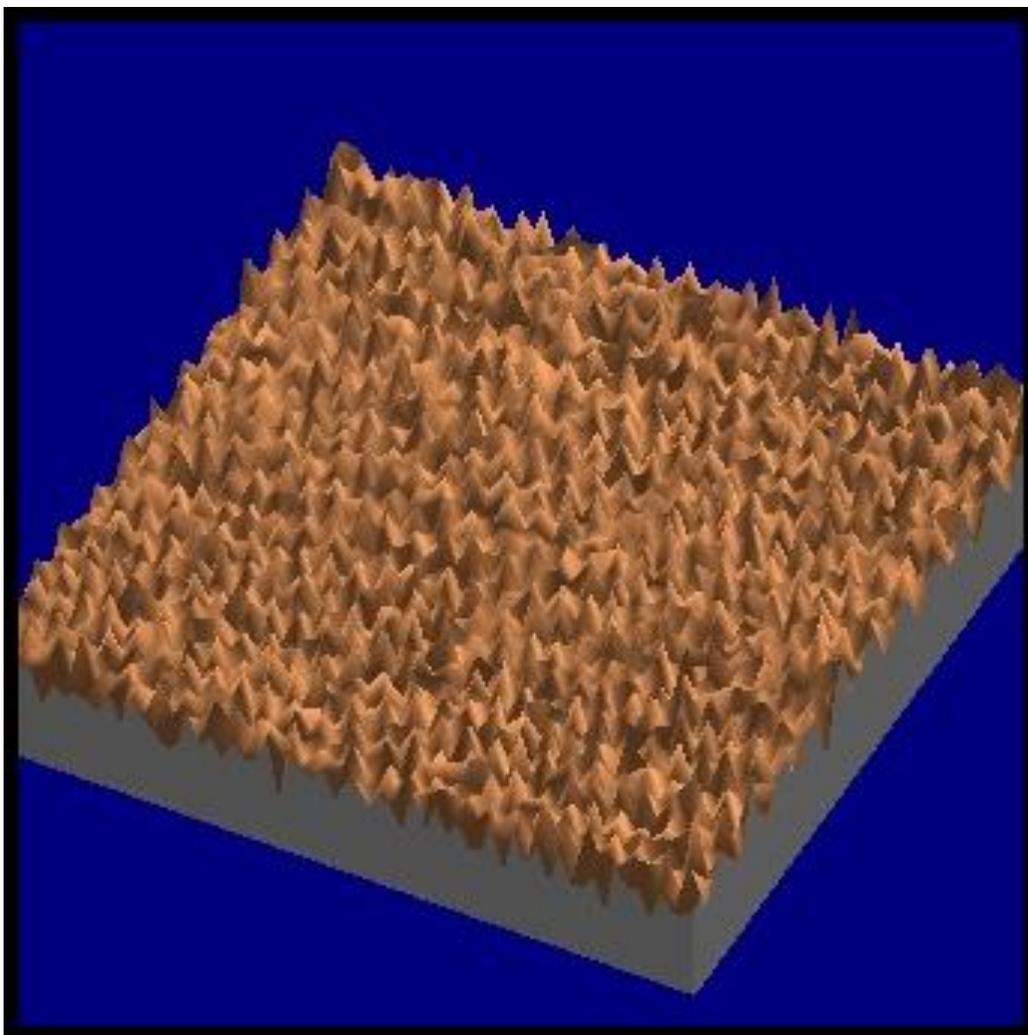


Figura 11. Representación tridimensional de la micrografía de *CdSe* original.

En la figura 11, se puede observar la micrografía en 3D del *CdSe*, la cual, con ayuda del software se pudo obtener la siguiente información: **1.** Los picos de la señal varían entre un valor máximo de 17.61 pA y un mínimo de -19.06 pA , **2.** $z = 36.67 \text{ pA}$ (diferencia promedio entre máximo y mínimo).

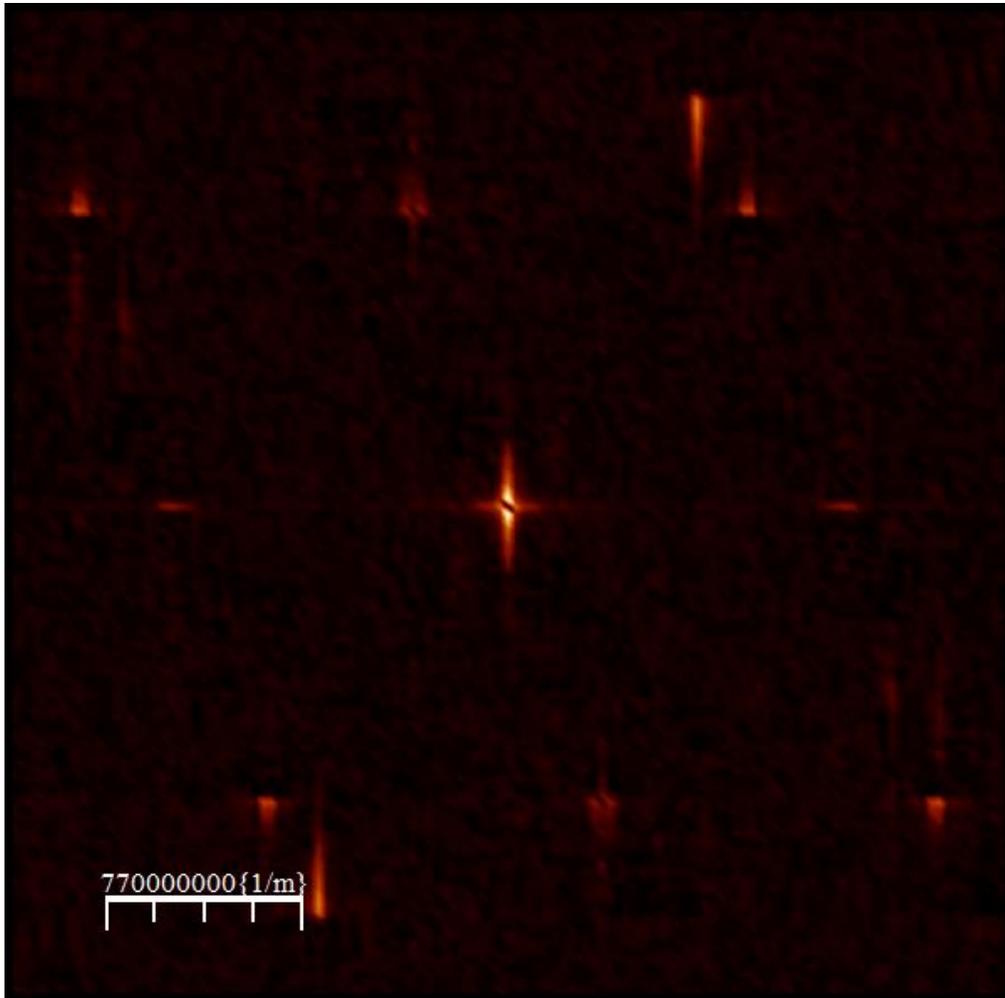


Figura 12. Espectro de Fourier.

De acuerdo a la regularidad y periodicidad que presenta la micrografía de la figura 7, el sistema físico se trata de un material cristalino y para poder corroborarlo fue necesario obtener el espectro de Fourier (figura 12), en la cual se observan los picos correspondientes a los centros dispersores típicos y característicos de un sistema cristalino. La distancia entre centros dispersores en el espacio recíproco nos muestran que tienen la misma magnitud, lo que lleva a poder calcular el parámetro de red del sistema físico: $a = 4.13 \text{ \AA}$.

Más adelante se mostrara la conexión de los puntos dispersores y la estructura del cristal dada por estos.

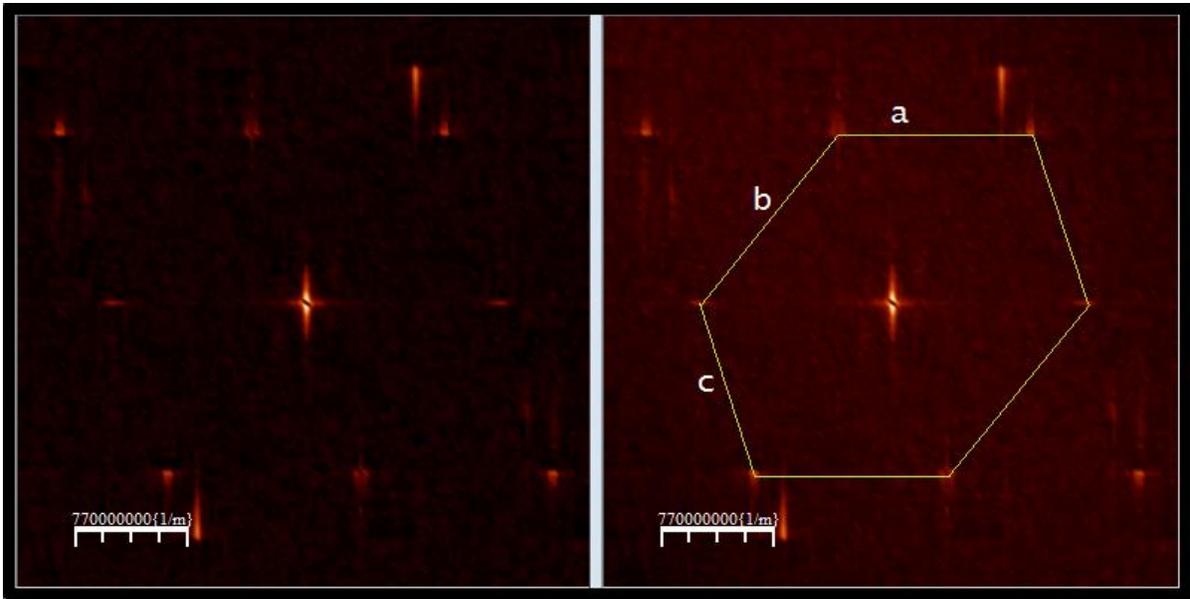


Figura 13. Representación del espectro de Fourier con la unión de los centros dispersores formando el tipo de conexión hexagonal en la red del *CdSe*.

Como puede observarse en la figura 13, se hace una comparación a la figura 12 tomando el espectro de Fourier (izquierda) y la misma conectando los centros dispersores (derecha) de la muestra de *CdSe*; de la cual se calculó que la longitud en unidades de Å son para el segmento $a = 7.66$, mientras que para la longitud del segmento $b = 6.71$ y finalmente para $c = 8.03$.

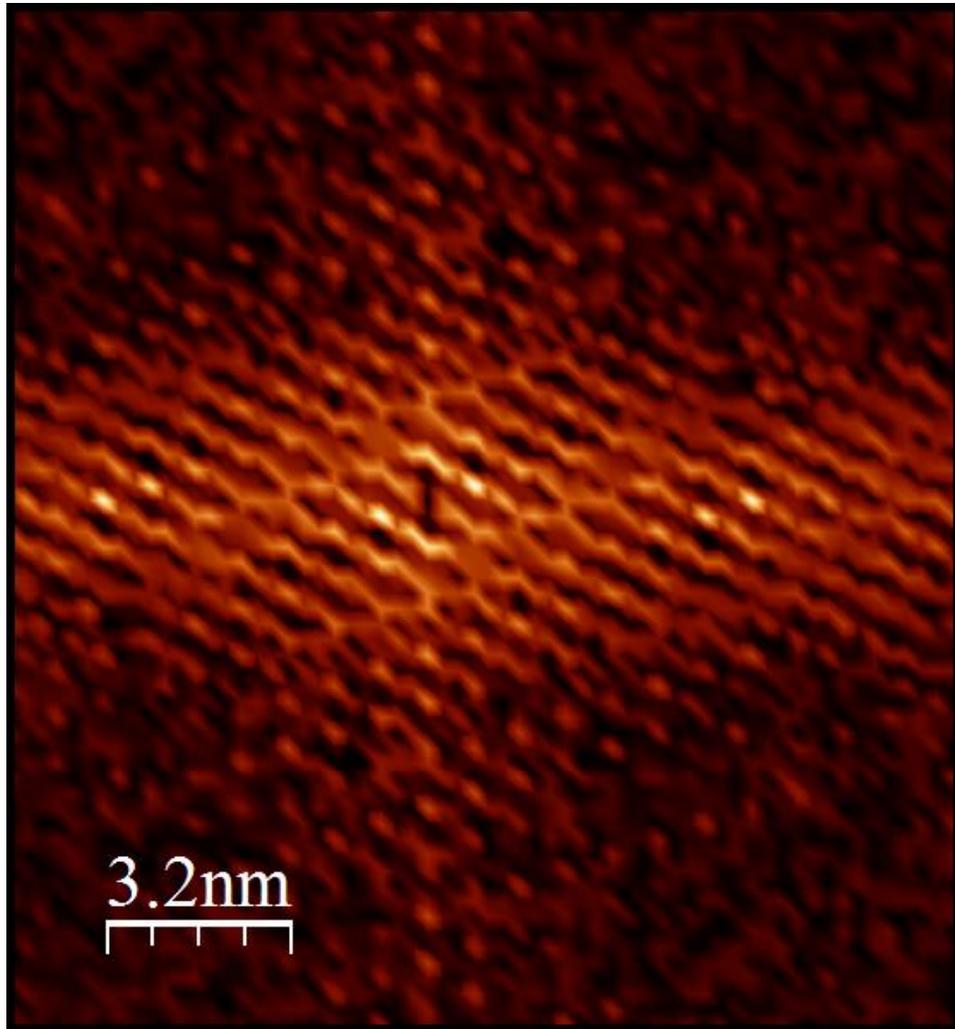


Figura 14. Representación de la red de Fourier.

En la imagen anterior (figura 14) puede mostrarse de una manera más específica, el tipo de estructura que define al material nanoestructurado de *CdSe* mediante una malla a partir del espectro de Fourier obtenido en la figura 12. Esta imagen recibe el nombre de *Red de Fourier*.

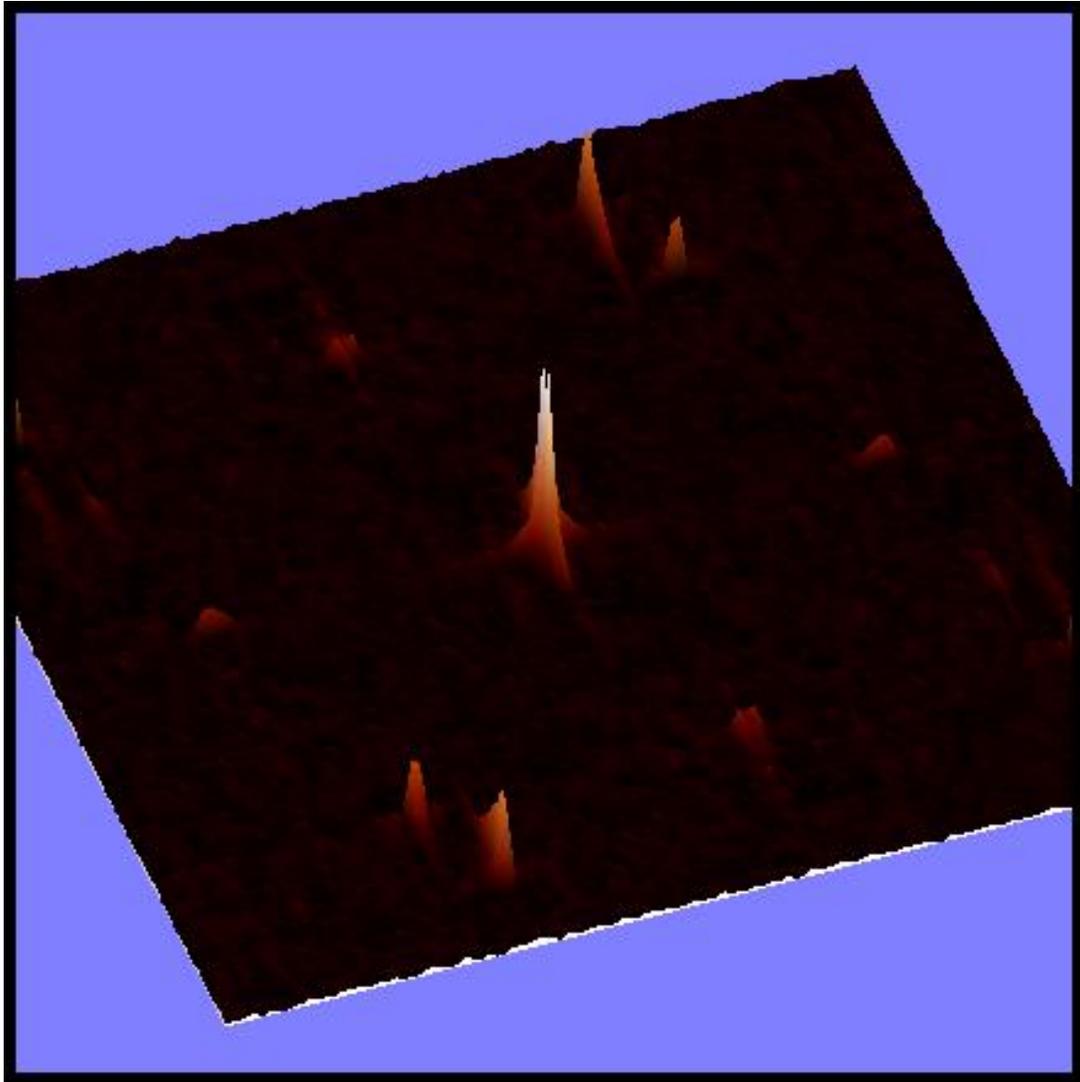


Figura 15. Espectro de Fourier en 3D.

En la figura 15 se muestra el espectro de Fourier tridimensional de la micrografía de *CdSe*, en la cual se puede observar más claramente la magnitud de la intensidad de dispersión.

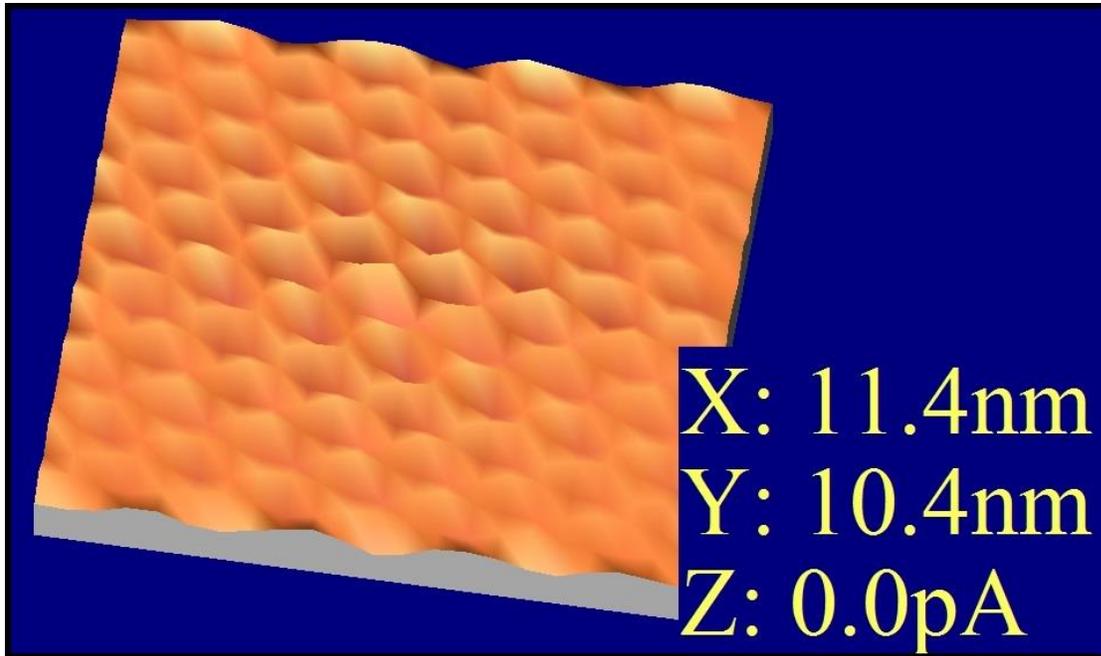


Figura 16. Representación de la red de Fourier en 3D.

La figura 16 muestra de manera específica la estructura espacial de la red de Fourier, en la cual se pueden apreciar los máximos que representan los retículos espaciales correspondientes al *CdSe* los cuales presentan un arreglo hexagonal.

4.2. Electronegatividad del sistema físico

Uno de los aspectos importantes de todo sistema físico a analizar con esta técnica de caracterización, es la electronegatividad dada por el tipo de enlace entre elementos que lo conforman [14]. Para el caso específico del *CdSe*, esto se determinó a partir de la micrografía mostrada en la figura 7, para ello fue necesario obtener el perfil que relaciona a la intensidad de corriente con el voltaje, como se puede observar en la figura 17.

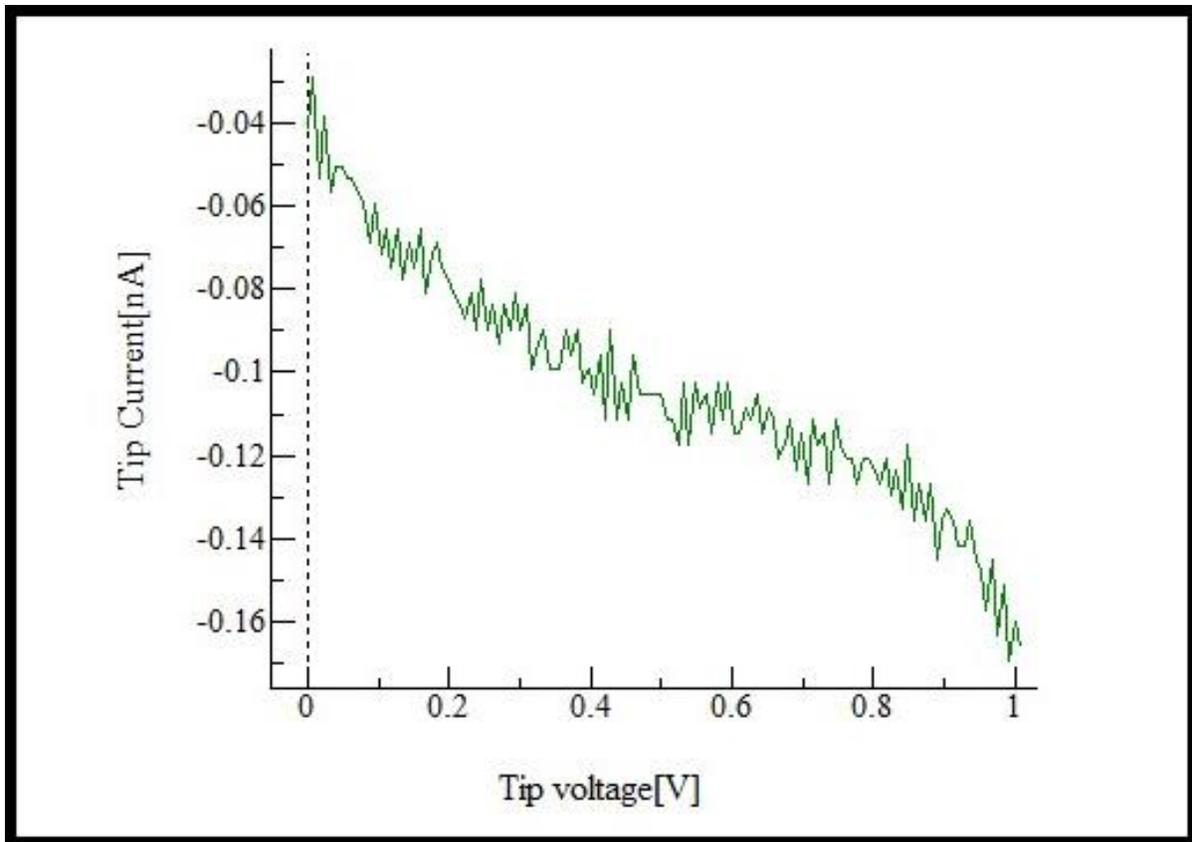


Figura 17. Perfil de intensidad de corriente con respecto al potencial aplicado en la punta conductora del STM.

En esta figura se puede verificar que el valor de los parámetros establecidos para I y V en el arranque del funcionamiento del microscopio tendrá que variar para lograr alcanzar el potencial adecuado con el cual se efectuara el efecto de tunelamiento. Mostrado este perfil se asume que entre menor sea el valor de I aplicado a la punta conductora del STM; mayor será el voltaje que se debe aplicar a la punta.

Corroborando de esta manera y de acuerdo a la literatura especializada [14] que el tipo de enlace iónico antes mencionado es mayormente electronegativo debido a la presencia del Cadmio.

CAPÍTULO V

CONCLUSIONES

La microscopia de efecto túnel es una técnica de gran ayuda que ha permitido el estudio de la estructura en los arreglos cristalinos formados por elementos, los cuales al unirse por un enlace iónico crean un semiconductor definido por determinada estructura cristalina.

Según el tipo de enlace por el cual se unen ciertos elementos, pueden ser moléculas si se trata de un enlace covalente o un arreglo cristalino periódico o aperiódico si es un enlace iónico.

La micrografía de *Seleniuro de Cadmio* se obtuvo bajo ciertos parámetros establecidos en el arranque del funcionamiento del Microscopio de Tunelamiento y bajo ciertas restricciones como las condiciones en el medio donde se trabajó. Por ejemplo la muestra debería estar lo más lisa posible para que la punta conductora del STM realizara el efecto de tunelamiento correcto.

Se detectó que en la muestra de Seleniuro de Cadmio existen dos tipos de estructuras: una del tipo hexagonal que representa el ordenamiento de los retículos y otra cúbica la cual es el generado por los intersticios en el arreglo del material.

El ordenamiento que tiene el *CdSe* para el arreglo hexagonal está dado por hexágono simple (HS) y para el arreglo cúbico por un cúbico simple (CS).

Los arreglos de Seleniuro de Cadmio ($CdSe$) contienen un parámetro en la red cúbica de 3.9 \AA mientras que para el arreglo hexagonal su parámetro en la red es de 4.2 \AA .

Los parámetros mencionados entre los arreglos hexagonal cúbico tienen una diferencia aproximadamente de 0.3 \AA con una incertidumbre de $\pm 0.05 \text{ \AA}$; permitiendo asumir que los tamaños de las redes son muy similares, debido a que se encuentran en la composición con características similares.

La distancia entre los retículos ubicados en cada vértice del hexágono es proporcional a la distancia entre el retículo central y cualquiera de estos. A su vez el retículo central representa la repetición de las celdas hexagonales centradas en las caras que se encuentran apiladas con una pequeña rotación.

Anexos

Recomendaciones sobre el uso del STM

El uso del microscopio requiere de tener un cuidado y la mayor precaución posible, ya que este dispositivo es muy sensible a cualquier factor que pueda alterar o afectar su funcionamiento o calibración. Algunos de estos factores pueden ser los efectos de vibración sobre el dispositivo, cambios de temperatura, entre otros.

Como recomendación y primer paso se debe realizar la limpieza adecuada al servomotor, la punta conductora y utensilios requeridos que se emplearan, utilizando alcohol isopropílico (C_3H_8O); ya que el contacto prolongado o repetido por frotamiento del propanol provoca que se remuevan sustancias ajenas a este o el desengrase contenido por efecto del contacto indirecto de cualquier objeto portador de estos elementos ajenos al dispositivo o muestra que será analizada; por ejemplo, la epidermis sin protección es una gran portadora de lubricante natural (grasa corporal) o suciedad. La manera en cómo puede evitarse la creación de una capa de grasa entre los instrumentos o el microscopio y el factor contaminante; en este caso la epidermis, es cubriéndola por medio de guantes (latex preferentemente).

Es indispensable separar la grasa o cualquier factor alterno contaminante de los instrumentos, pues la cantidad de estos por mínima que esta pueda ser, crea una barrera entre la punta conductora y la muestra a ser analizada (es decir, actúa como un aislante para la punta del microscopio), provocando que los electrones no pasen a través del gap; en otras palabras, crea una barrera no penetrable anti conductora.

Bibliografía

- [1] Ebbing, Darrell D., *Química general: compuestos ternarios*. 4ta Editorial. Etievan, 2011.
- [2] Oliva Arias A. *Ingeniería: Nuevas propiedades físicas de materiales Nanoestructurados*. 9-3 (2005) 39-46.
- [3] Streetman, Ben G.; Sanjay Banerjee (2000). *Solid State electronic Devices* (5th edition). Nueva Jersey: Prentice Hall. p. 524. ISBN 0-13-025538-6.
- [4] Francisco José Yndurain Muñoz. *Mecánica Cuántica*. 2da. Edición Actualizada – Edit. Ariel Ciencia.
- [5] M. Olmo R. Nave, N. W. Ashcroft y N. D. Mermin. *Materia condensada - Estado Sólido*.
- [6] C. Julian Chen. *Introduction to Scanning Tunneling Microscopy* (1993). Oxford University Press. ISBN 0195071506.
- [7] Cruz-Garriz, Diana; Chamizo, José A.; Garriz, Andoni. “Estructura Atómica. Un enfoque Químico.” PEARSON EDUCACIÓN, México, 2002. ISBN: 970-26-0368-4.
- [8] Scanning Tunneling Microscopy. IBM: Almaden Research Center Visualization.
- [9] Streetman, Ben G.; Sanjay Banerjee (2000). *Solid State Electronic Devices* (5th edit. 2000). Nueva Jersey: Prentice Hall. p. 524. ISBN 0-13-025538-6.
- [10] Schaffer, Saxena, Antolovich, Sanders, and Warner. *The Science and Design of Engineering Materials* (Second Edition 1999). Nueva York: WCB/McGraw-Hill. pp. 81-88.
- [11] Callister, W. *Materials Science and Engineering* (Sixth Edition 2002). San Francisco: John Wiley and Sons. pp. 105-114.
- [12] Charles Kittel. *Introducción a la Física del Estado Sólido*. Edit. REVERTE, 2006.
- [13] P. V. Pavlov. *Física del Estado Sólido*. Edit. MIR, 2005
- [14] Pauling. L. “The Nature of the Chemical Bond. IV. The Energy of Single Bonds and the Relative Electronegativity of Atoms”. *Journal of the American Chemical Society* 54 (1932). (9): 3570-3582.