

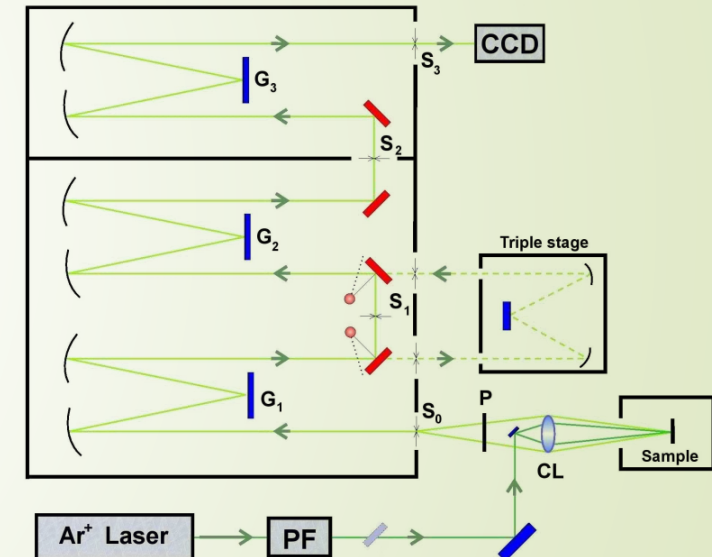


Espectroscopia Raman

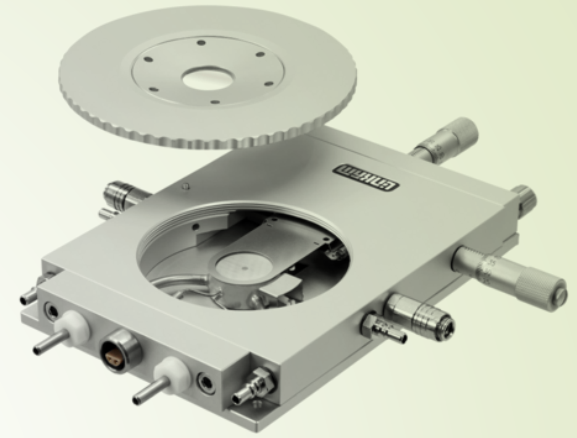
Geo3BCN-CSIC

Equipo

- ▶ Espectrómetro triple Jobin-Yvon T64000. Alta resolución espectral ($\sim 0.7 \text{ cm}^{-1}$)
- ▶ Microscopio con platina motorizada y autofocus. Resolución espacial ($\sim 1 \mu\text{m}$)
- ▶ Fuentes de excitación: Ti:Zafiro (700-1100nm), He-Ne (632nm), Ar^+ (457.9, 476.5, 488, 514.5, 520.8 nm), Nd:YAG (532 nm), He-Cd (325 nm)



- ▶ Platina Linkam FDCS196 (80 – 400 K)
- ▶ Platina Linkam THMS600 (300 – 875 K)
- ▶ Criostato TBT LN2 (80 - 350 K)

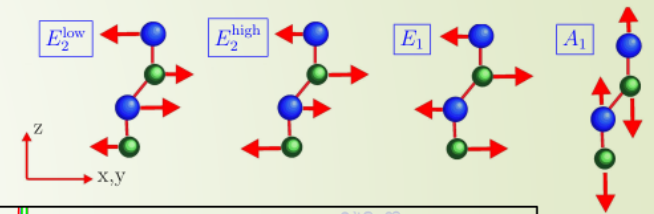
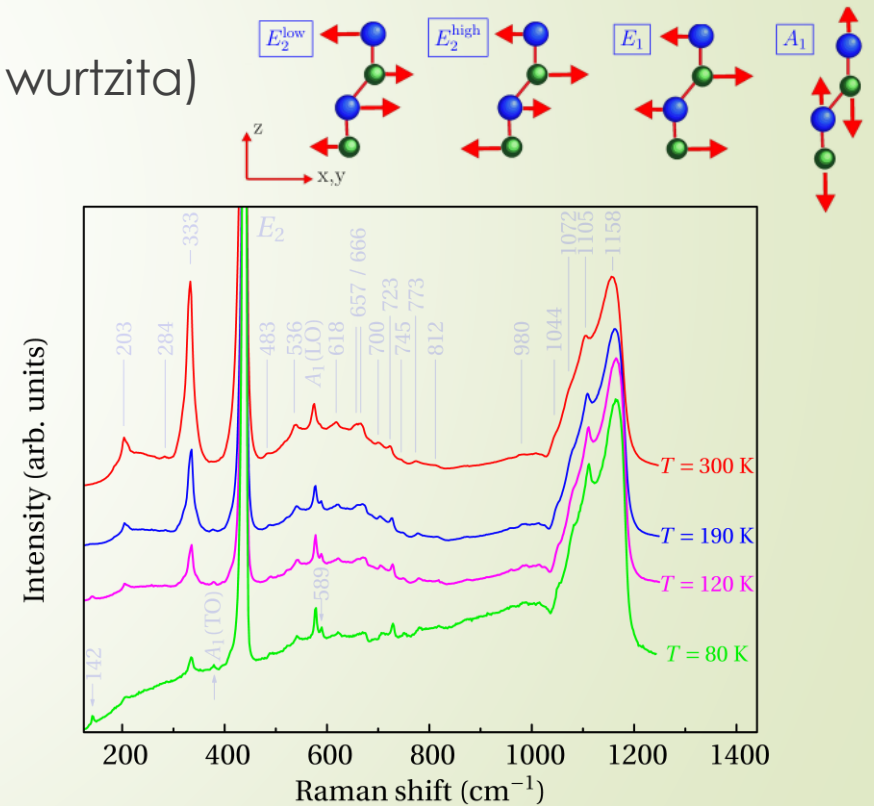
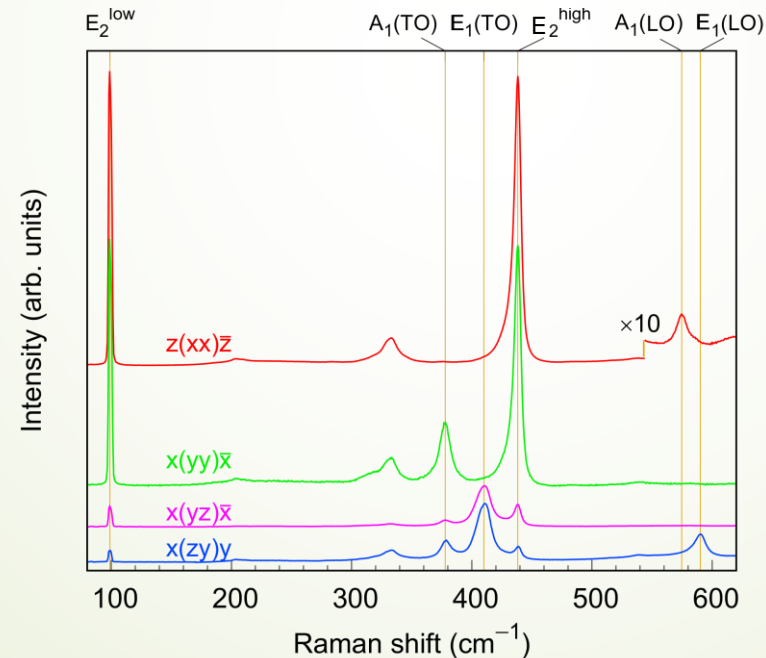


- ▶ Celda de presión de diamante (hasta 20 GPa)

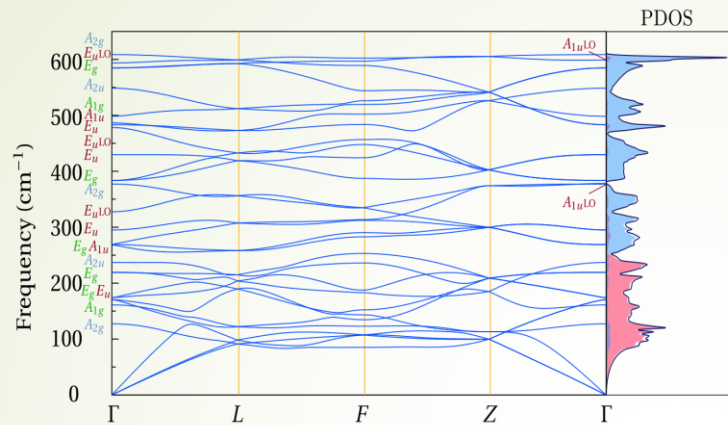
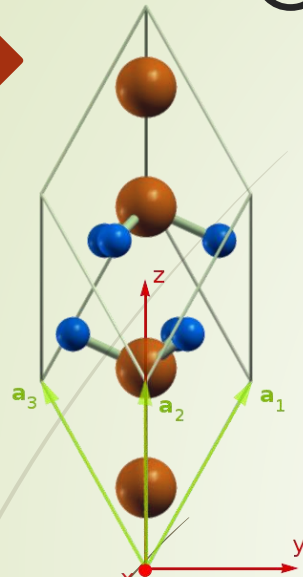


Estudios fundamentales de fonones

- Estudio detallado del espectro Raman de primer y segundo orden en cristales de alta calidad; análisis de las simetrías de los modos
- Correlación con cálculos ab-initio de las frecuencias y densidad de estados
- Espectro de referencia del ZnO (estructura wurtzita)

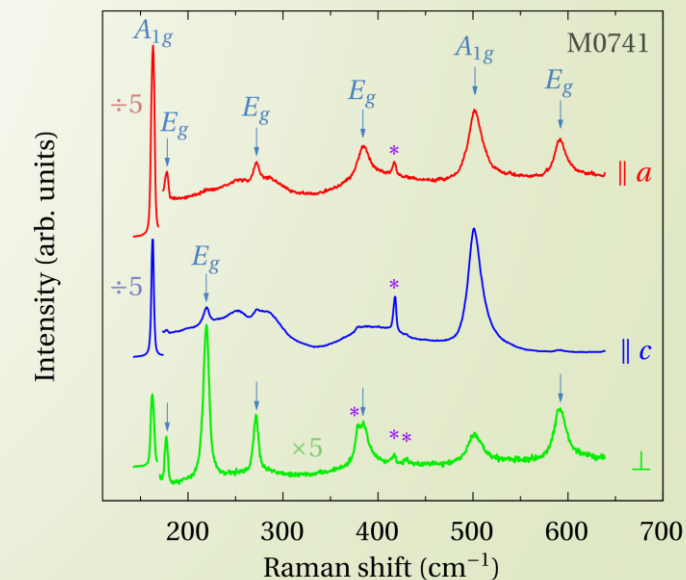
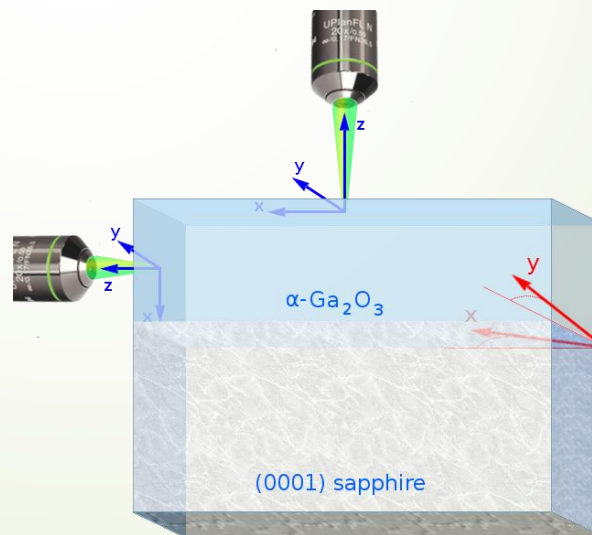
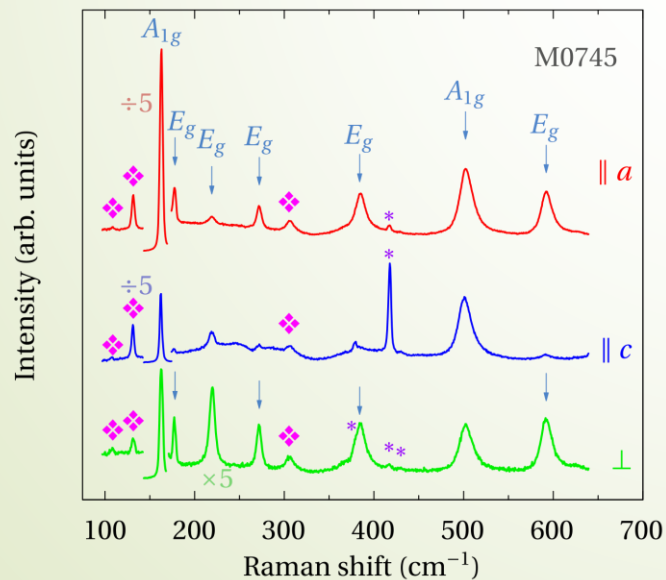
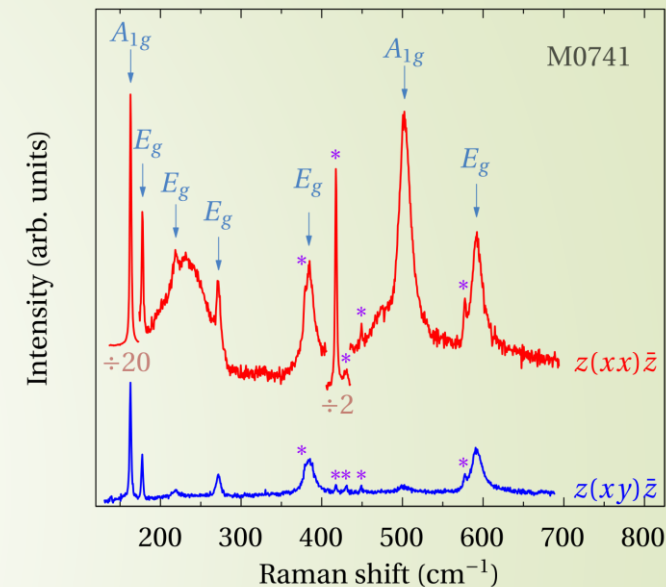


Óxidos de gap ancho: $\alpha\text{-In}_2\text{O}_3$



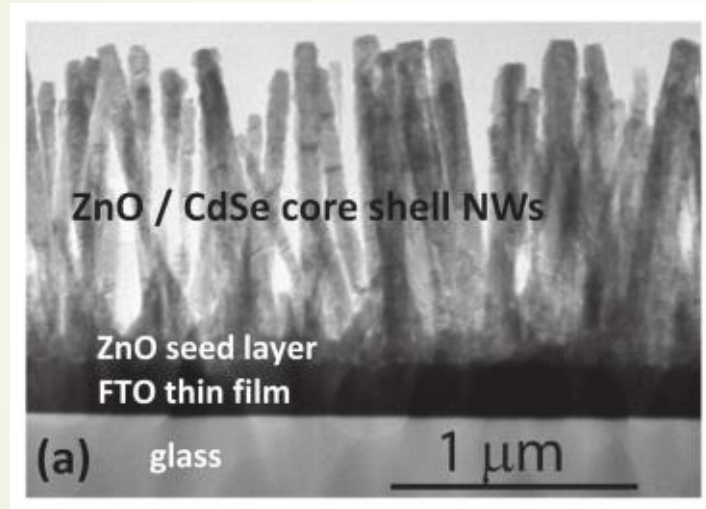
Capa monocristalina (~1 μm) de alta calidad crecida por mist-CVD (Tokyo)

Coexistencia fases bixbita/corindón

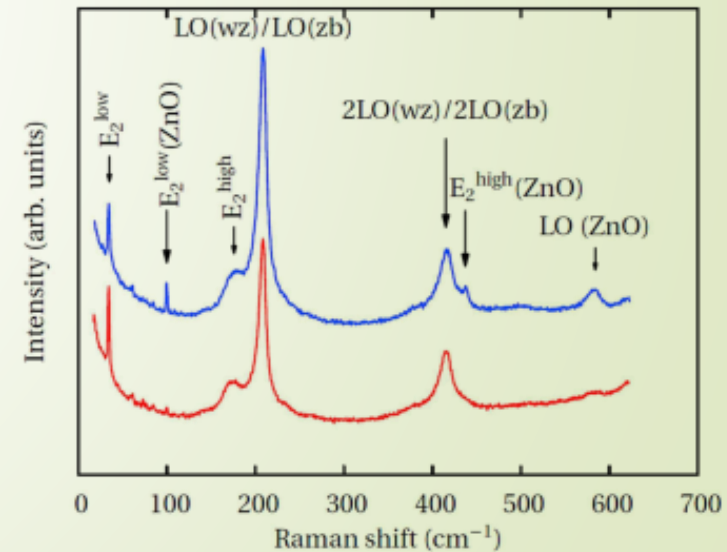
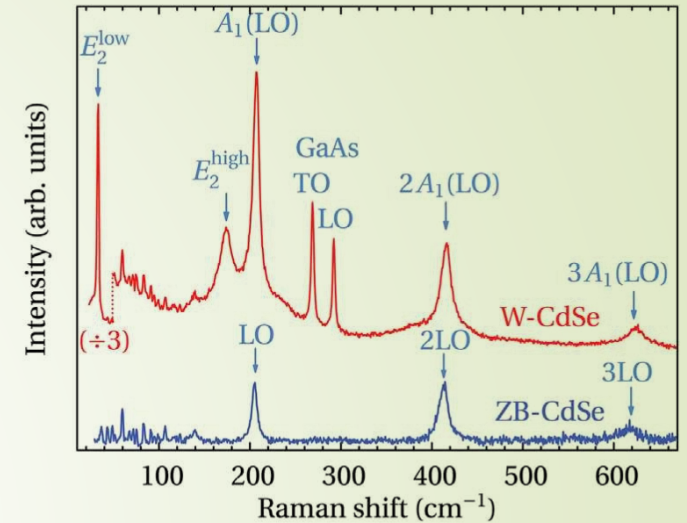


... y aplicaciones

- Identificación de fases: CdSe wurtzita/zincblenda

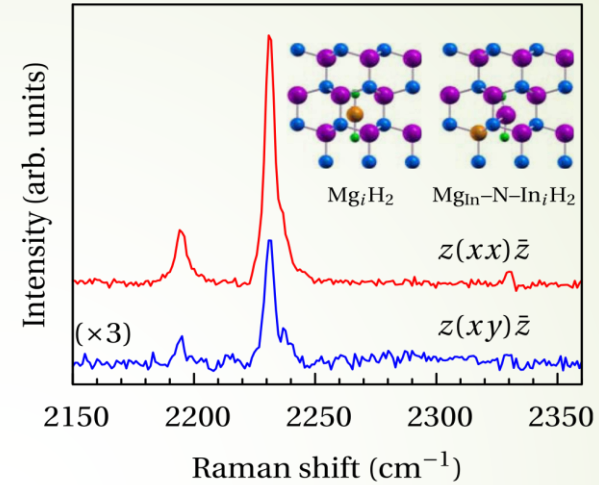


ZnO nanowires crecidos por Chemical Bath Deposition recubiertos por CdSe mediante MBE (Univ. Grenoble)

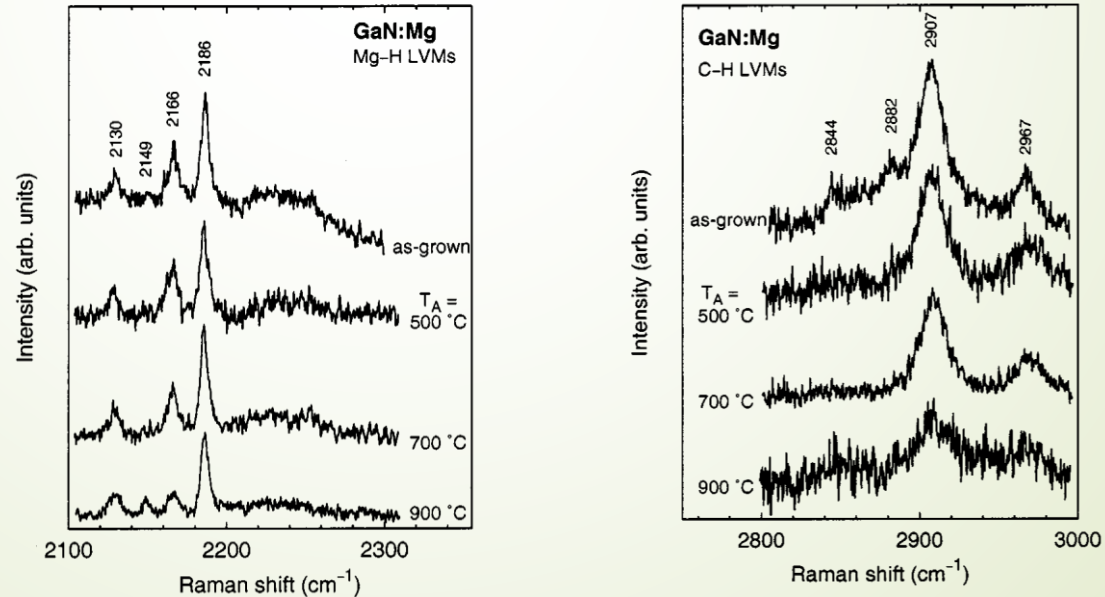


Modos locales de vibración

LVMS Mg-H en *p*-InN



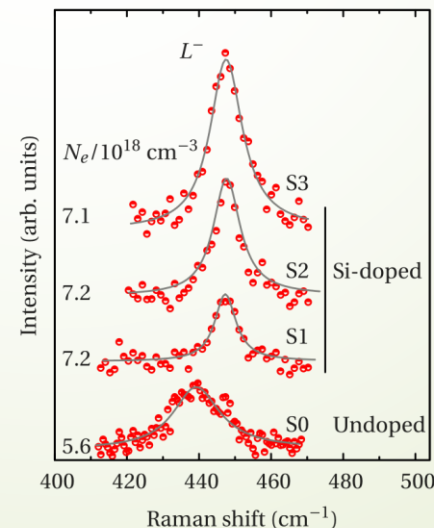
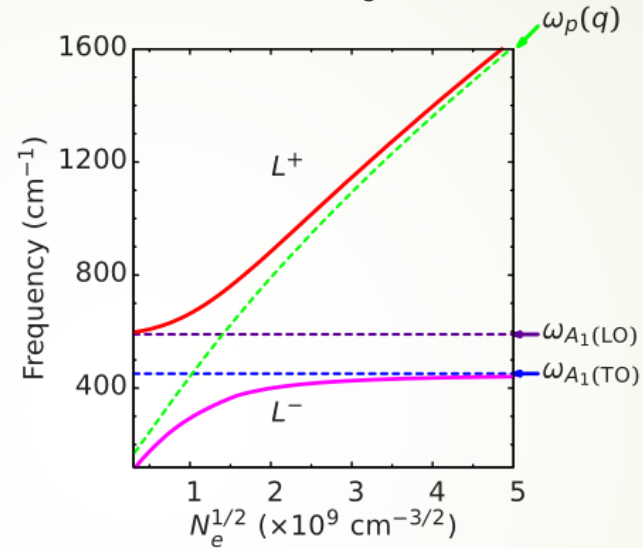
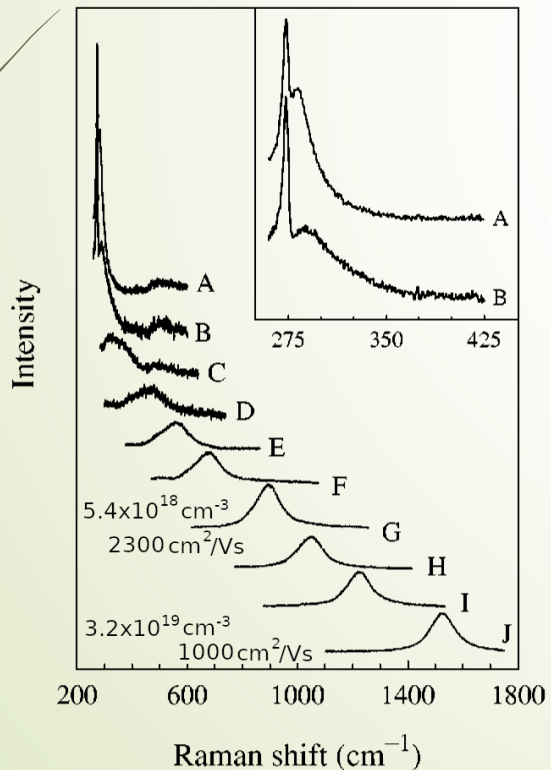
Evolución bajo recocidos térmicos en *p*-GaN



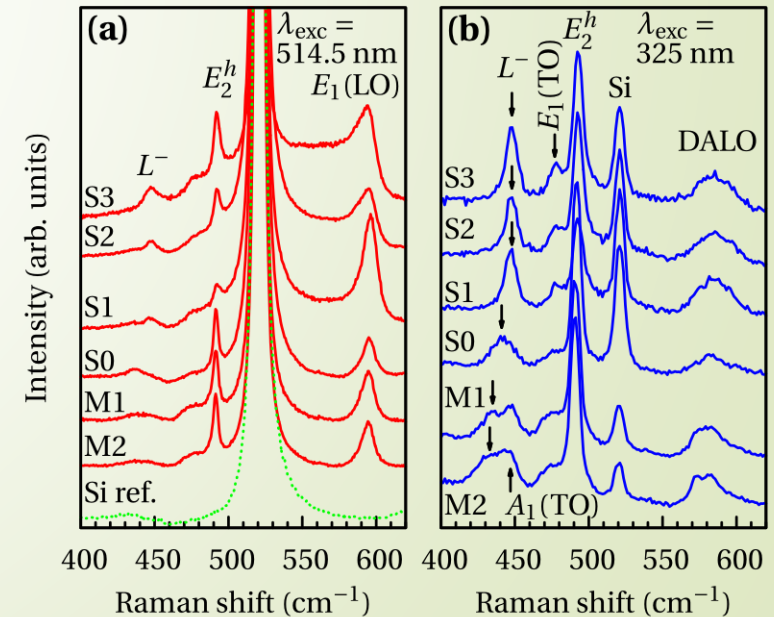
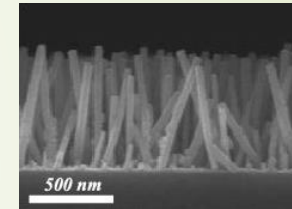
Acoplamiento carga-fonones polares

- Modos acoplados fonón-plasmón ($N_e \sim 10^{17} - 10^{19} \text{ cm}^{-3}$, alta movilidad)

$\text{In}_{0.53}\text{Ga}_{0.47}\text{As}$
 $m_e^* = 0.041m_0$

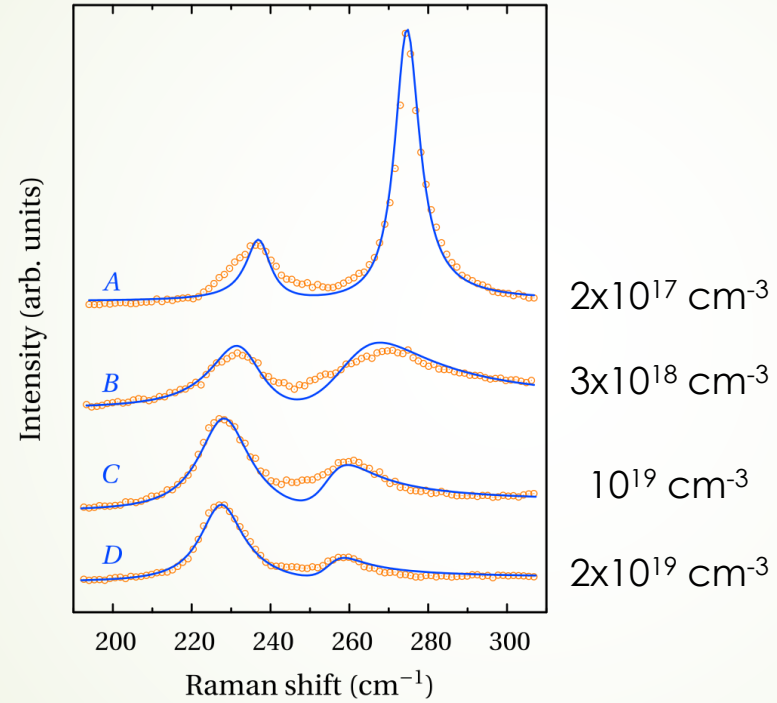


InN nanowires dopados con Si



► Plasmones sobreamortiguados

p-In_{0.57}Ga_{0.43}As



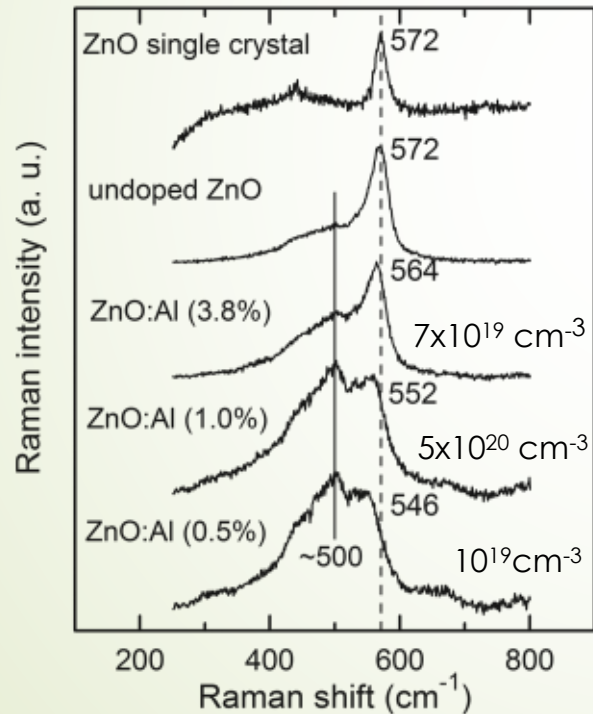
$$m_{HH} = 0.55 m_0$$

$$\Gamma \sim 1000 \text{ cm}^{-1}$$

Raman UV en capas de ZnO

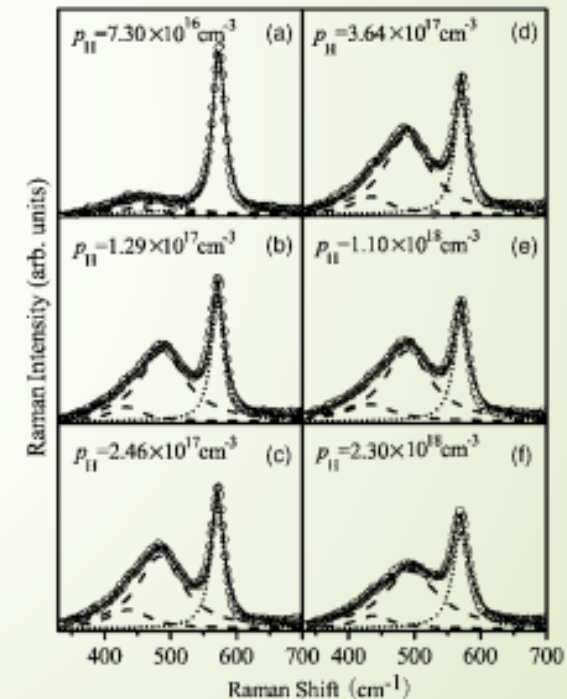
K. Ding *et al.* APL (2012)

MOCVD *n*-ZnO:Al

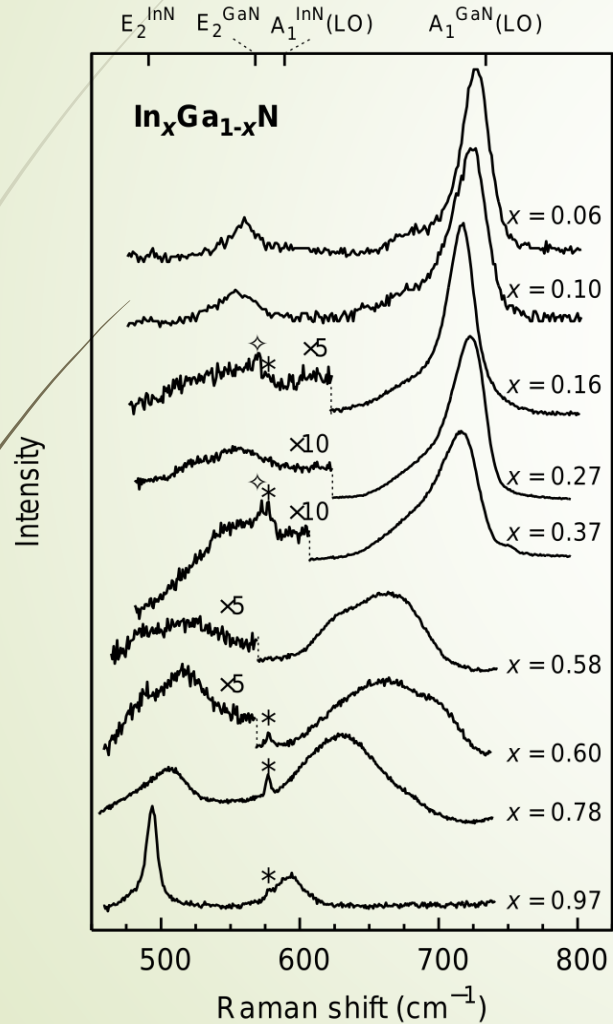


J. F. Kong *et al.* APL (2007)

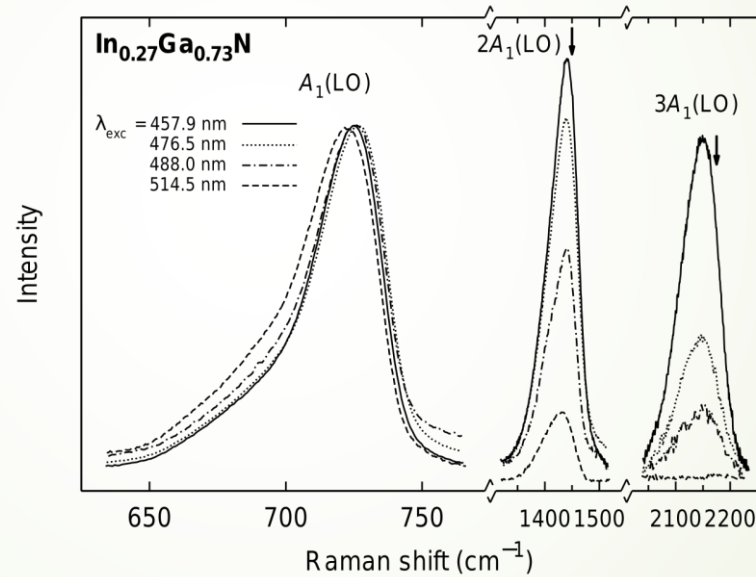
MOCVD *p*-ZnO:In/N



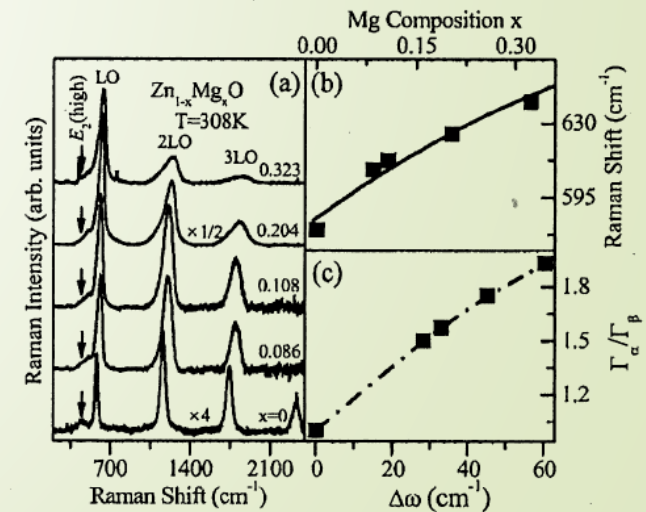
Caracterización de aleaciones



Variaciones en la frecuencia de los fonones y en el gap (resonancias)

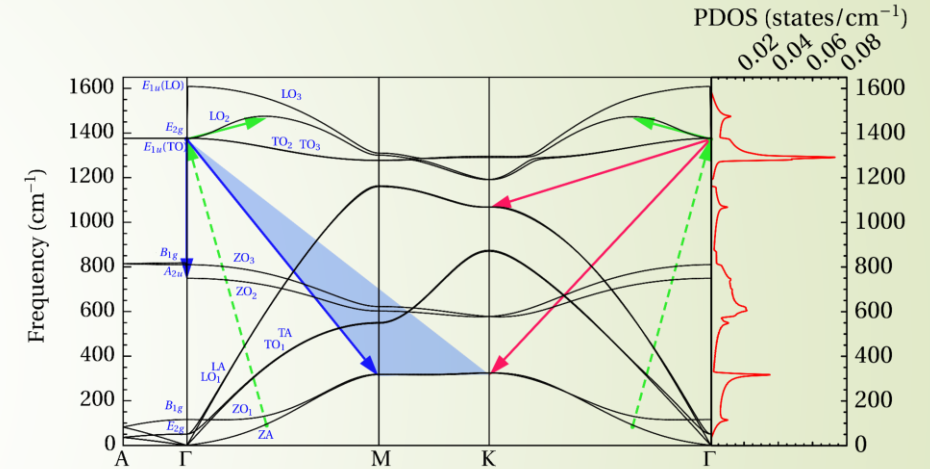
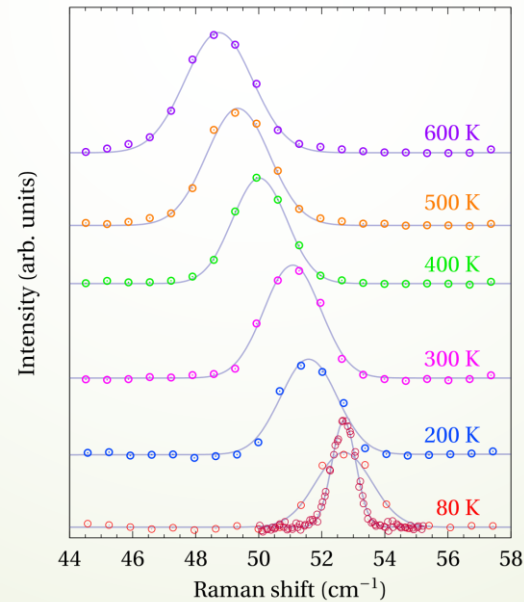
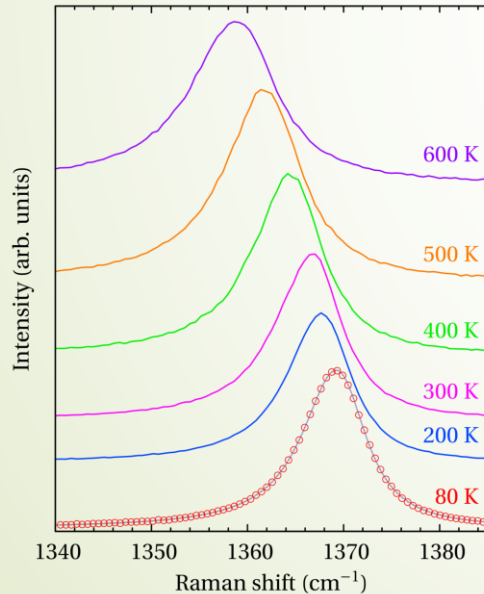
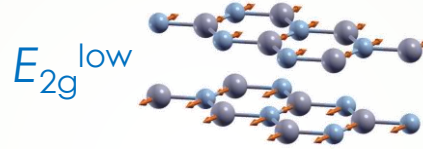
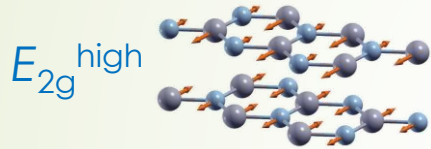


Kong et al. APL **92** (2008):
Incorporación de Mg en ZnMgO

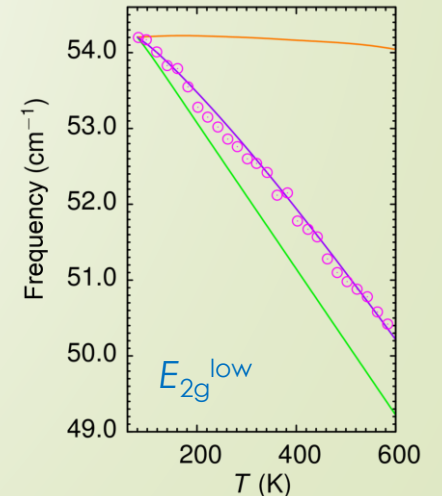
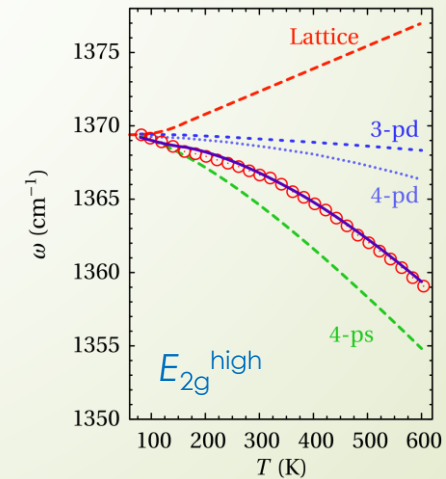


Dependencia en temperatura y presión: anarmonicidad y tensiones

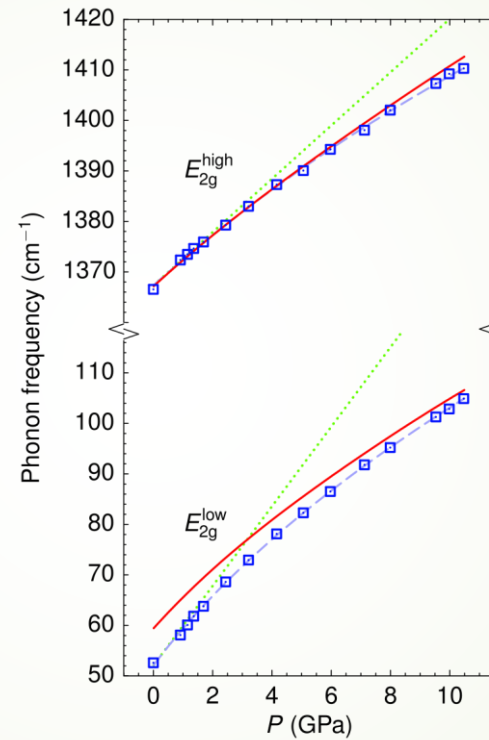
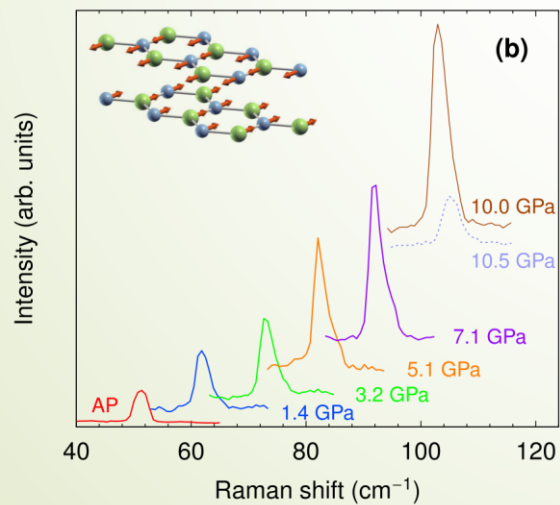
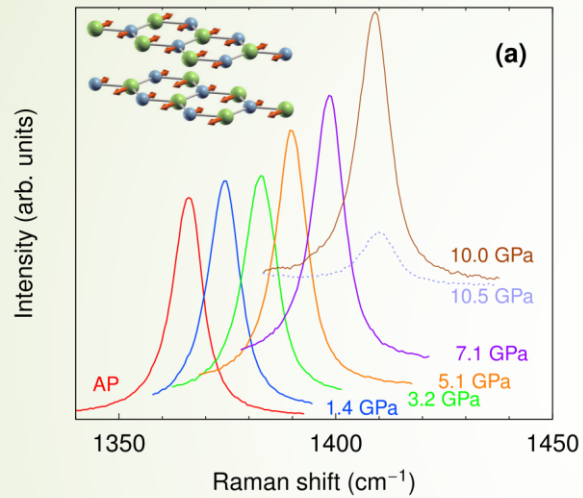
h-BN: estructura laminar



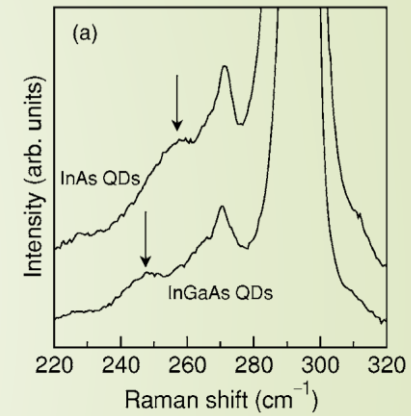
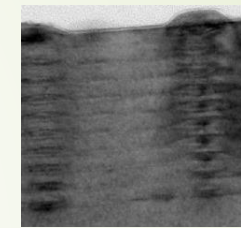
Cálculos DFT/Teoría de perturbaciones



Deformación: parámetros de Grüneisen, tensiones.

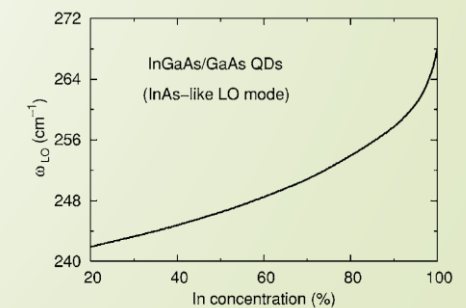


InGaAs/GaAs stacked QDs



Teoría lineal de elasticidad

$$\omega_{LO}^{QD}(x) = \omega_{LO}^0(x) \left[1 + \frac{1}{2} \tilde{K}_{12} (\bar{\epsilon}_{xx} + \bar{\epsilon}_{yy}) + \frac{1}{2} \tilde{K}_{11} \bar{\epsilon}_{zz} \right]$$



Conclusiones

Espectroscopia Raman. La frecuencia y la anchura de los picos Raman proporcionan información sobre multitud de propiedades físicas de los cristales:

- Fases cristalinas
- Grado de cristalinidad
- Tensiones elásticas
- Composición en aleaciones
- Carga libre
- Anarmonicidad

Ventajas

- ♣ Técnica no destructiva. No necesita preparación de muestras.
- ♣ Alta sensibilidad y especificidad.
- ♣ Análisis local ($\sim 1 \mu\text{m}$)
- ♣ Diferentes niveles de análisis de los resultados. Correlación con modelos teóricos. DFT.

Inconvenientes

- ♦ Bajo nivel de señal. Dispersión elástica en superficies rugosas. Fluorescencia.
- ♦ Necesidad de un volumen de scattering mínimo. En materiales transparentes, señal del substrato.
- ♦ En óxidos transparentes, resonancia en el UV. Dificultades experimentales en la configuración UV.