



“Estudo da superfície de ZnO(0001) reconstruída em (1x1) e (2x2) via Difração de Fotoelétrons”

Aluno : Iago Aédon Silva Prior - RA: 141744

Orientador: Prof. Abner de Siervo

Departamento de Física Aplicada, Instituto de Física “Gleb Wataghin”-UNICAMP

1-Introdução à Temática:

O óxido de Zinco (ZnO) é um material que possui várias aplicações importantes como em optoeletrônica. A estrutura a ser estudada é a wurtzita na direção (0001) com reconstrução (1x1) terminada em Zn e reconstrução (2x2) terminada em Zn-A ou Zn-B.

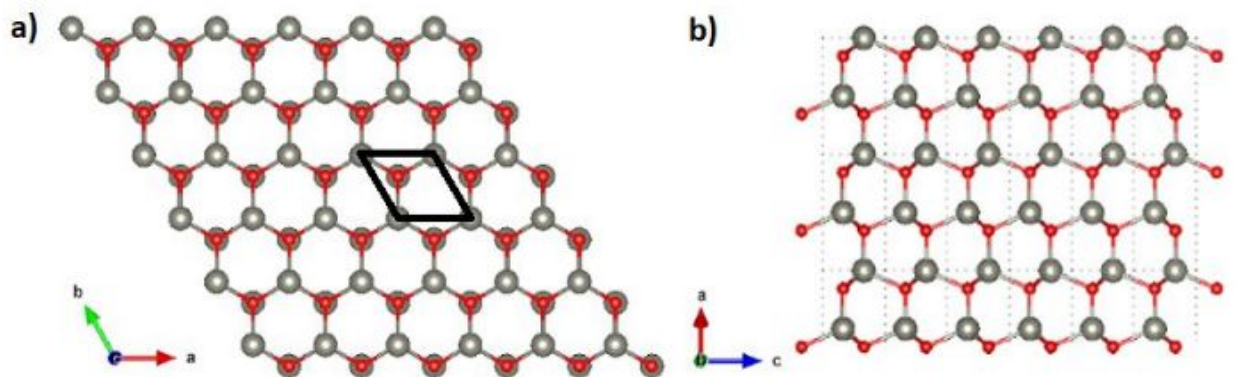


Figura 1. Estrutura de ZnO(1x1) vista na direção (0001) em **a)**, e vista lateralmente em **b)**. Onde as esferas vermelhas são o O e as cinzas o Zn, com a superfície terminada em Zn. A linha preta indica a superfície reconstruída em 1x1.

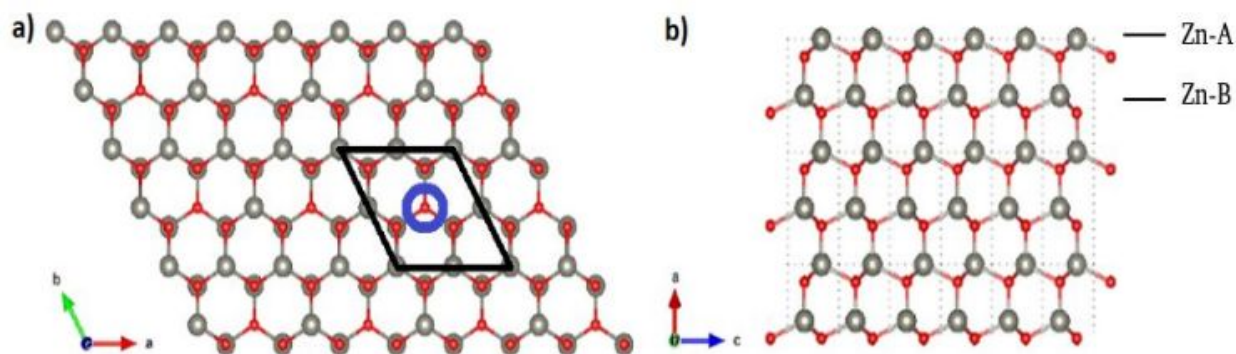


Figura 2. Estrutura de ZnO(2x2) onde as esferas vermelhas são o O e as cinzas o Zn. Em **a)** temos a vista na direção (0001) com a linha preta indicando a primeira camada reconstruída em 2x2 com uma vacância de Zinco no centro representada pelo círculo em azul. Em **b)** vista lateralmente podendo a estrutura ser terminada em Zn-A ou Zn-B.



Na reconstrução (2x2) cada terminação possui 8 configurações possíveis de se montar a primeira camada. Como por exemplo na figura 3 onde temos as configurações para Zn-A.

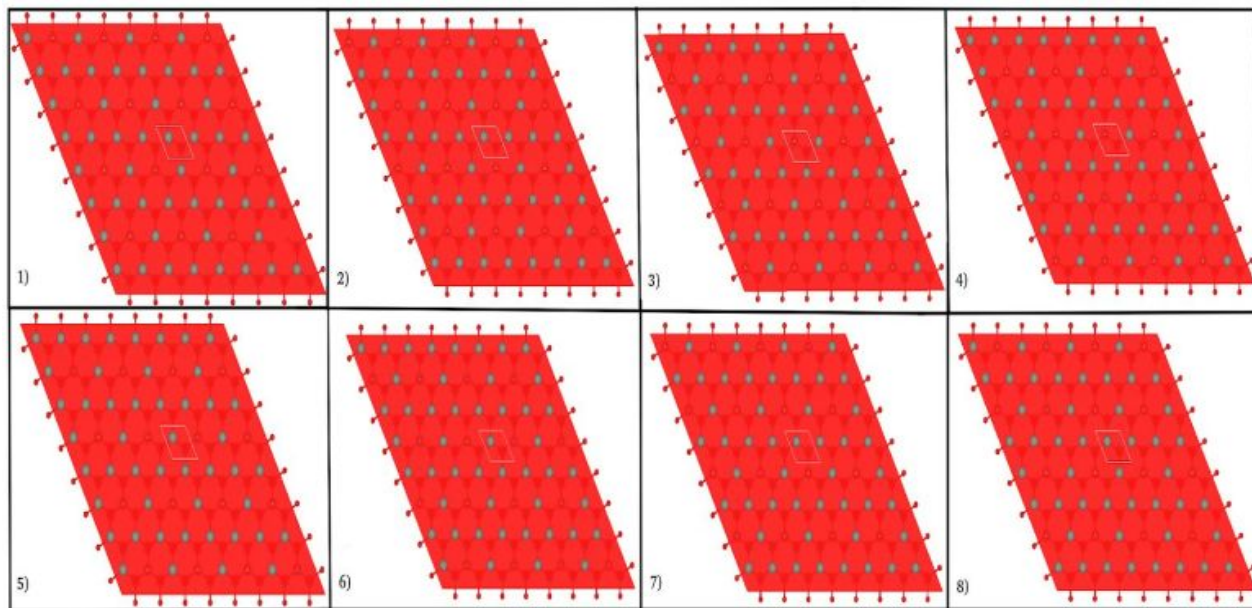


Figura 3. Todas as 8 possíveis configurações da primeira camada de Zn(2x2) da estrutura terminada em Zn-A.

2-Objetivos:

1. Realizar a reconstrução (1x1) da estrutura de ZnO(0001) terminada em Zn.
2. Realizar a simulação e otimização da reconstrução (1x1) através de relaxações feitas nas distâncias interplanares e comparar o resultado com o dado experimental obtendo o menor fator R_a .
3. Realizar as reconstruções (2x2) da estrutura de ZnO(0001) terminada em Zn-A e Zn-B com suas possíveis configurações.
4. Realizar simulações e otimizações das reconstruções (2x2) através de relaxações feitas nas distâncias interplanares e comparar o resultado com o dado experimental a fim de obter o menor fator R_a , com objetivo de caracterizar se a (2x2) termina em Zn-A ou Zn-B e qual sua configuração.

3-Metodologia Experimental:

O sistema de análise e deposição/preparação de amostras está equipado com analisador de elétrons que permite caracterização química e elementar via XPS (*X-Ray Photoelectron*



Spectroscopy), fonte de raios X (Al/Mg), óptica LEED (*Low-Energy Electron Diffraction*) para caracterização estrutural, e um manipulador com 5 graus de liberdade que permite executar experimentos de XPD (*X-ray Photoelectron Diffraction*) para caracterização estrutural elemento e química específica.

Growth and Characterization chamber

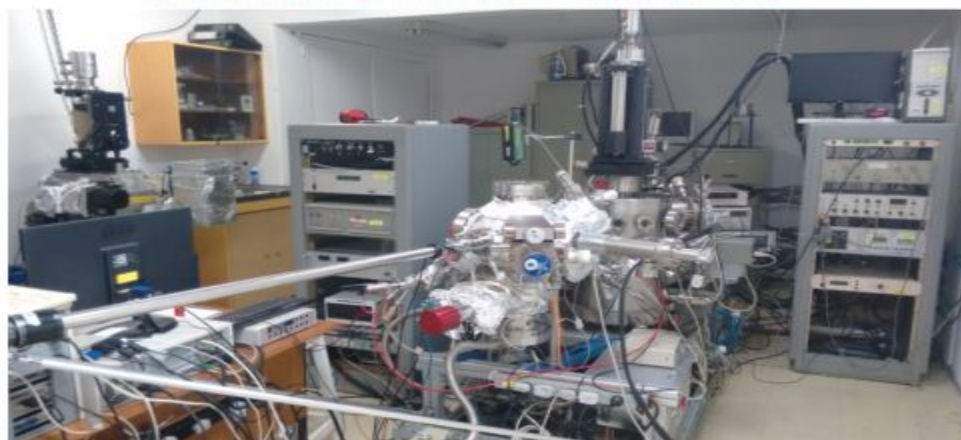


Figura 4. Laboratório de crescimento e caracterização por espectroscopia e difração de elétrons.

4-Resultados:

Para a superfície de ZnO(1x1), seguem os resultados obtidos em relação ao dado experimental.

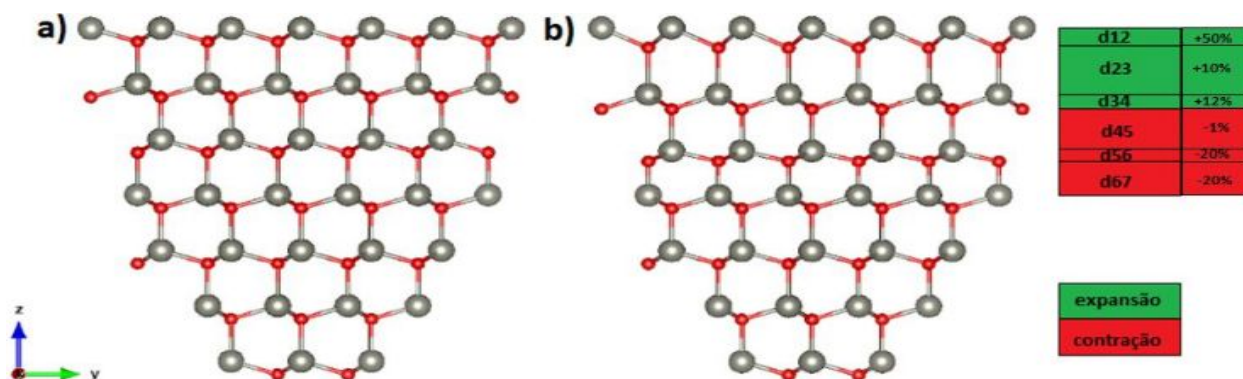


Figura 5. Clusters obtidos da estrutura de ZnO(1x1), onde em **a)** representa o bulk e em **b)** o cluster obtido através de relaxações em suas distâncias interplanares e suas porcentagens (vista lateral).

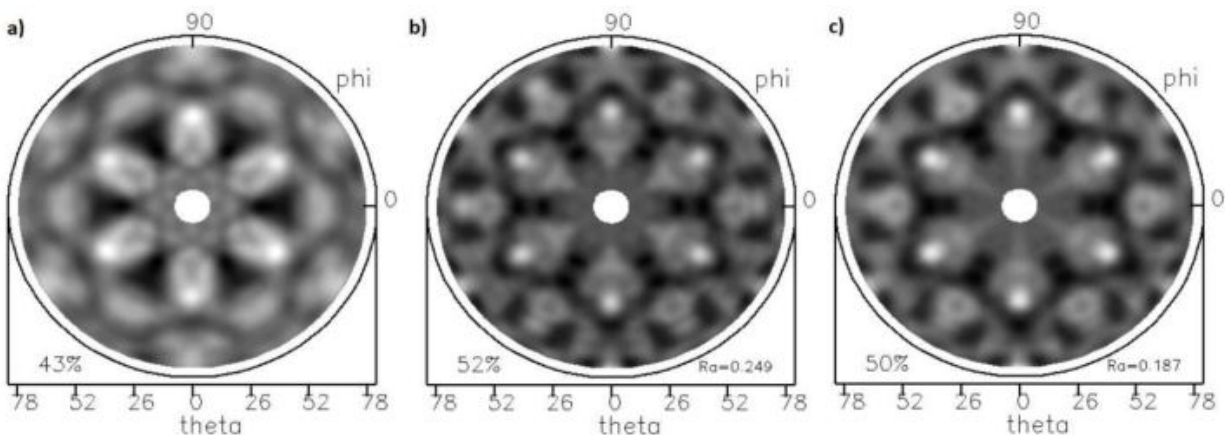


Figura 6. Padrão de difração obtido da estrutura de $\text{ZnO}(1 \times 1)$ onde o padrão em **a)** representa o dado experimental, em **b)** representa a simulação da superfície considerando as distâncias interplanares de volume e em **c)** com as relaxações feitas.

Seguem os resultados obtidos para a superfície de $\text{ZnO}(2 \times 2)$ para o melhor resultado que foi superfície com terminação em Zn-A com a configuração 5.

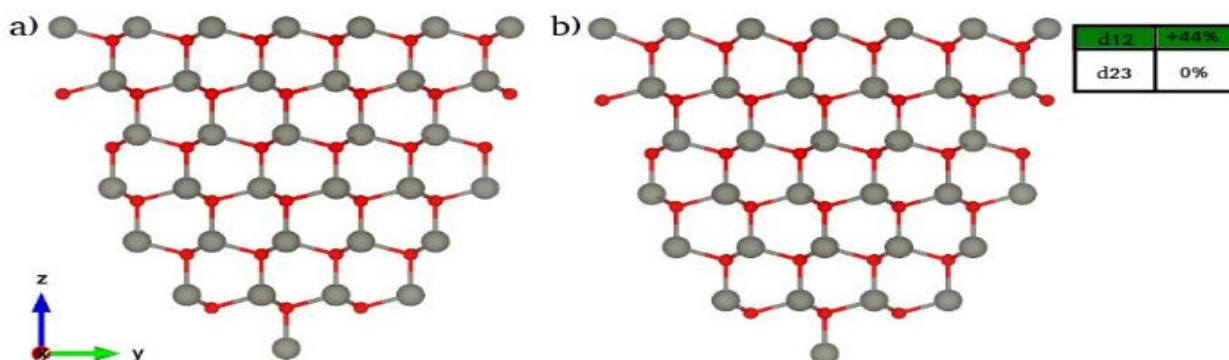


Figura 7. Clusters obtidos da estrutura de $\text{ZnO}(2 \times 2)$, onde em **a)** representa o bulk e em **b)** o cluster obtido através de relaxações em suas distâncias interplanares e suas porcentagens (vista lateral).

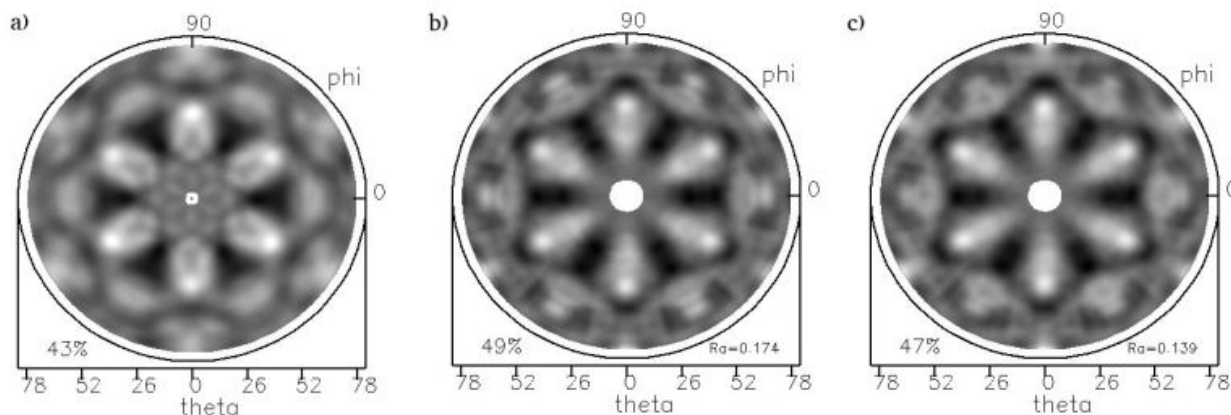


Figura 8. Padrão de difração obtido da estrutura de $\text{ZnO}(2 \times 2)$ onde o padrão em **a)** representa o dado experimental, em **b)** representa a simulação da superfície considerando as distâncias interplanares de volume e em **c)** com as relaxações feitas.



5-Conclusões:

Os resultados obtidos para a ZnO(1x1) mostram que o fator R_a melhorou de 0.249 para 0.187 com as relaxações, se aproximando mais do resultado experimental, portanto da estrutura real. Os valores das distâncias interplanares d_{12} sofreram expansão de 50%, porém na literatura ocorre contração em torno de 27%, fazendo o resultado obtido se distanciar do esperado. Este resultado está sob investigação. Uma possibilidade encontrada é de hidrogenação da superfície, visto que na câmara de vácuo em que se prepara o cristal para medidas, sempre existe uma pressão residual de oxigênio.

Os resultados obtidos para a ZnO(2x2) mostram que a estrutura possui terminação em Zn-A e que os buracos na primeira camada se organizam de acordo com a configuração 5 (figura 3), podendo então caracterizar a estrutura de ZnO(2x2). Pois o fator R_a obtido foi de 0.139, o melhor valor entre todas as 8 possíveis configurações testadas para estruturas terminadas em Zn-A e Zn-B. Os diferentes valores obtidos de fator R_a mostram que a estrutura realmente possui buracos na primeira camada, se diferenciando de uma ZnO(1x1).

6-Referências:

- ¹Pal, Jasper-Tönnies, Hack, and Pehlke, Phys. Rev. B 87, 085445 (2013).
- ²G.Kresse, O.Dulub, and U. Diebold, Phys. Rev. B 68, 245409 (2003).
- ³B.Meyer and D.Marx, Phys. Rev. B 67, 035403 (2003).
- ⁴J.M. Carlsson, Comput. Mater. Sci. 22, 24 (2001).
- ⁵"MSCD - Multiple Scattering Calculation of Diffraction" por Y. Chen, M.A. van Hove, C. S. Fadley, F. Bondino e R. Diez Muiño.
- ⁶(http://www.icts.hkbu.edu.hk/surfstructinfo/SurfStrucInfo_files/mscd/mscdpack.html)
- ⁷A.Siervo e L.H. de Lima, Difração de Fótoeletrons. 2017.
- ⁸L.H. de Lima, "Monocamadas sp² corrugadas e suas aplicações" (2014), Tese de Doutorado.
- ⁹P.Hofmann. Surface Physics : An Introduction. Written and published by P.Hofmann. 2013.