Phonon confinement model applied on Raman spectra of CVD diamond films grown through graphite etching

S. C. Ramos

Universidade do Estado da Bahia - UNEB

M. R. Baldan, N. G. Ferreira

Laboratorio Associado de Sensores e Materiais, LAS/INPE

Os filmes de nanodiamante sintetizados em condições experimentais específicas, tais como a concentração de metano, hidrogênio e argônio, e ainda temperatura, possuem um grande número de aplicações, principalmente em eletroquímica, devido a sua condutividade elétrica fortemente influenciada pelo composto transpoliacetileno que traz o dímero C_2 em sua estrutura o qual apresenta ligações do tipo π e a alternância entre os estados ligados e não ligados desta, influencia sobremaneira no valor do GAP do filme. Devido a esta e outras propriedades do nanodiamante caracterizá-los se tornou muito importante. Utilizando a técnica de crescimento por filamento quente e a caracterização por espectroscopia Raman, pode-se avaliar a redução nos tamanhos dos grãos em escala nanométrica com a aplicação do modelo de confinamento de fônons[1], baseado no fato que, num cristal infinito, somente fônons próximos ao centro da zona Brillouin ($q \approx 0$) contribuem para o espectro Raman devido a conservação do momento entre os fônons e a luz incidente. Isto é, num cristal finito, fônons podem estar confinados num espaço pelos contornos do cristal ou defeitos. Isto resulta na incerteza do momento, permitindo que fônons com $q \neq 0$ contribuam com o espectro Raman. O modelo avalia o alargamento do pico em 1332 cm^{-1} correspondente ao pico do diamante e a identificação do nanocristal é avaliada pelo par de bandas em torno de 1150 cm^{-1} e 1480 cm^{-1} , também considerados como característica do composto transpoliacetileno presente nos contornos dos grãos e na superfície dos filmes de diamante nanocristalino. Ainda, pode-se calcular efeitos de tensões induzidas no filme através de um deslocamento observados durante análise comparativa do espectro do modelo e os dados experimentais.

[1] Richter, H.; Wang, Z.P.; Ley, L.. The one phonon Raman spectrum in microcrystalline silicon. Solid State Communications, v. 39, p. 625-629, 1981.