

Síntese e caracterização de pontos quânticos de ZnO produzidos por hidrólise alcalina.

Guilherme Adams, Antono Takimi, Carlos Pérez Bergmann
LACER – LABORATÓRIO DE MATERIAIS CERÂMICOS



Introdução:

Pontos quânticos de óxido de zinco (ZnO) são nanopartículas semicondutoras com tamanho tipicamente entre 1 a 10nm, onde suas propriedades situam-se entre aquelas de um semicondutor convencional e a de suas moléculas isoladas devido aos efeitos do confinamento quântico de seus elétrons. Este conjunto de propriedades faz com que os pontos quânticos de ZnO apresentem grande potencial para diversas aplicações tecnológicas, como em dispositivos óticos e fotovoltaicos, fotodetectores, LED's (light-emitting diode), ecrãs eletroluminescentes, marcadores biológicos fluorescentes, agente bactericida e fungicida, entre outros.

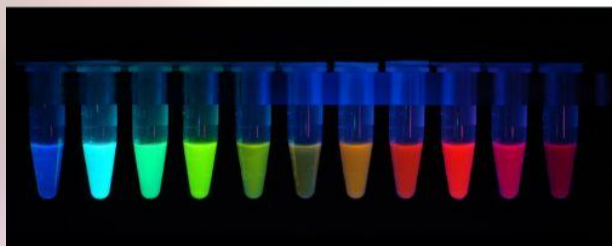


Figura 1: Marcadores biológicos fluorescentes

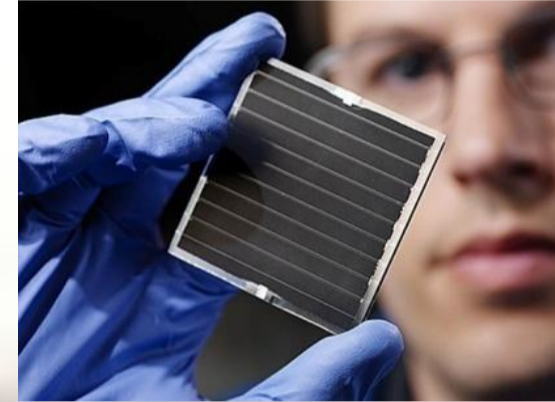


Figura 2: dispositivos fotovoltaicos.

Objetivo:

Estudar a síntese de pontos quânticos de ZnO através de hidrólise alcalina.

Materiais e Métodos:

Os pontos quânticos de ZnO foram sintetizados através da hidrólise alcalina de acetato de zinco (CH₃COO)₂Zn·2H₂O, empregando hidróxido de Sódio (NaOH) e hidróxido de Lítio (LiOH) como bases, em diferentes temperaturas de síntese.

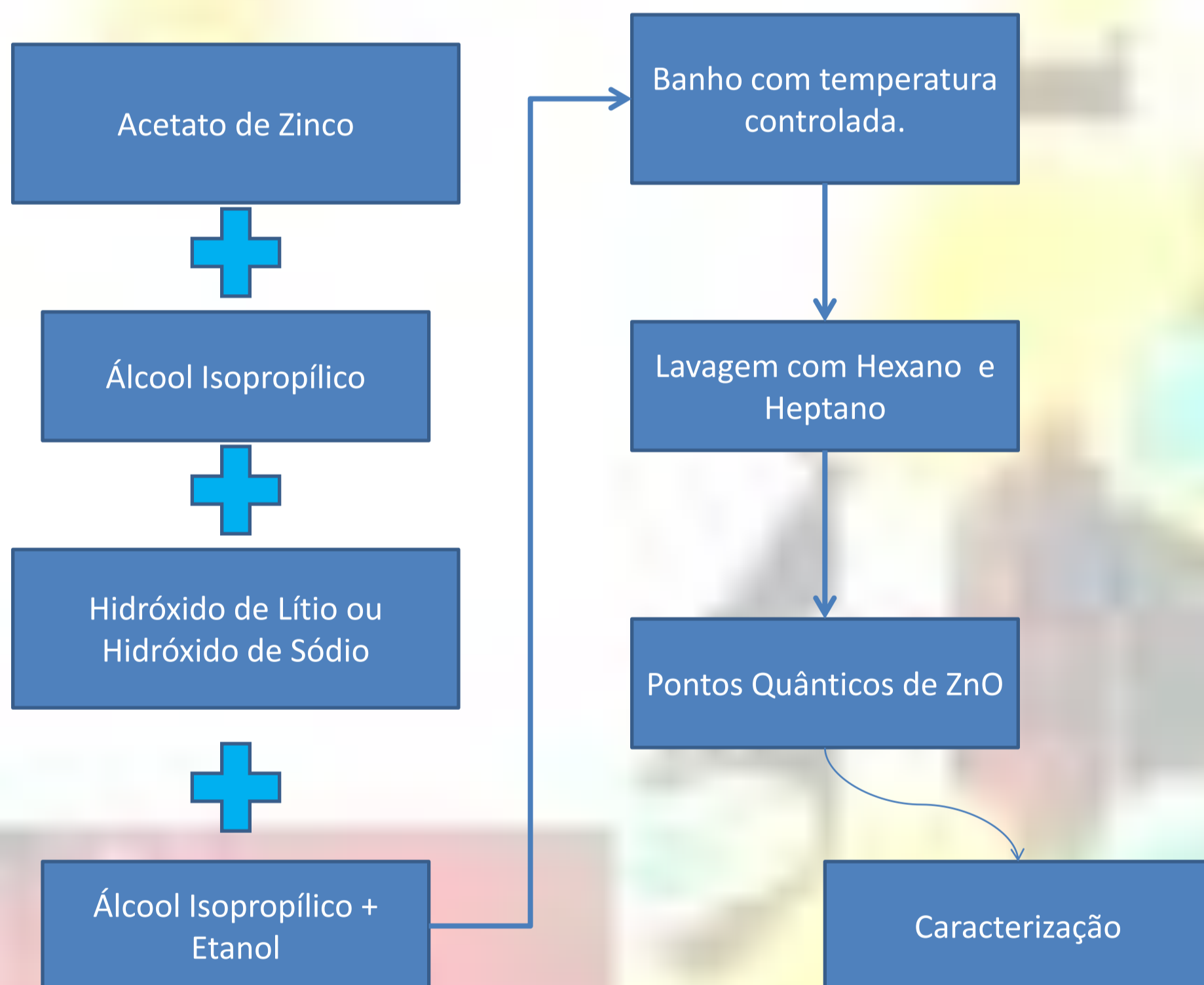


Figura 3: Fluxograma do processo de obtenção dos pontos quânticos.

Caracterização:

• Determinação do diâmetro médio dos pontos quânticos.

O ZnO apresenta efeitos quânticos de diâmetro médio de partículas ~7 nm. Assim, espectros de absorvância de UV / visível proporcionam uma forma conveniente para investigar o crescimento das partículas. Para a determinação do diâmetro médio dos pontos quânticos usamos o método do modelo da massa efetiva aprimorado pelo **Eric A. Meulenkamp**, onde o diâmetro dos pontos quânticos obedece uma equação desse tipo:

$$\frac{1240}{\lambda_{1/2}} = a + \frac{b}{D^2} - \frac{c}{D}$$

$\lambda_{1/2}$ é o comprimento de onda em que a absorção é 50% do que no pico excitônicas (ou ombro), a=3,301, b=294,0, c=-1,909 e D=Diâmetro da partícula.

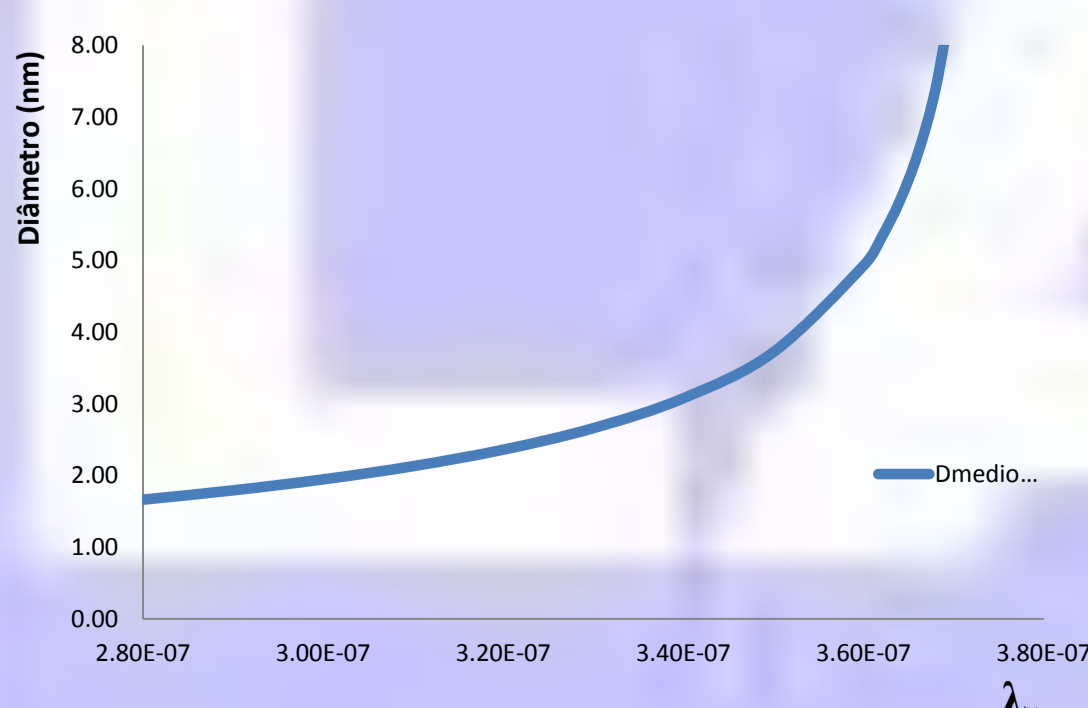


Figura 4: Gráfico do crescimento de pontos quânticos segundo o modelo de massa efetiva.

• Espectroscopia no ultravioleta visível (UV/VIS).

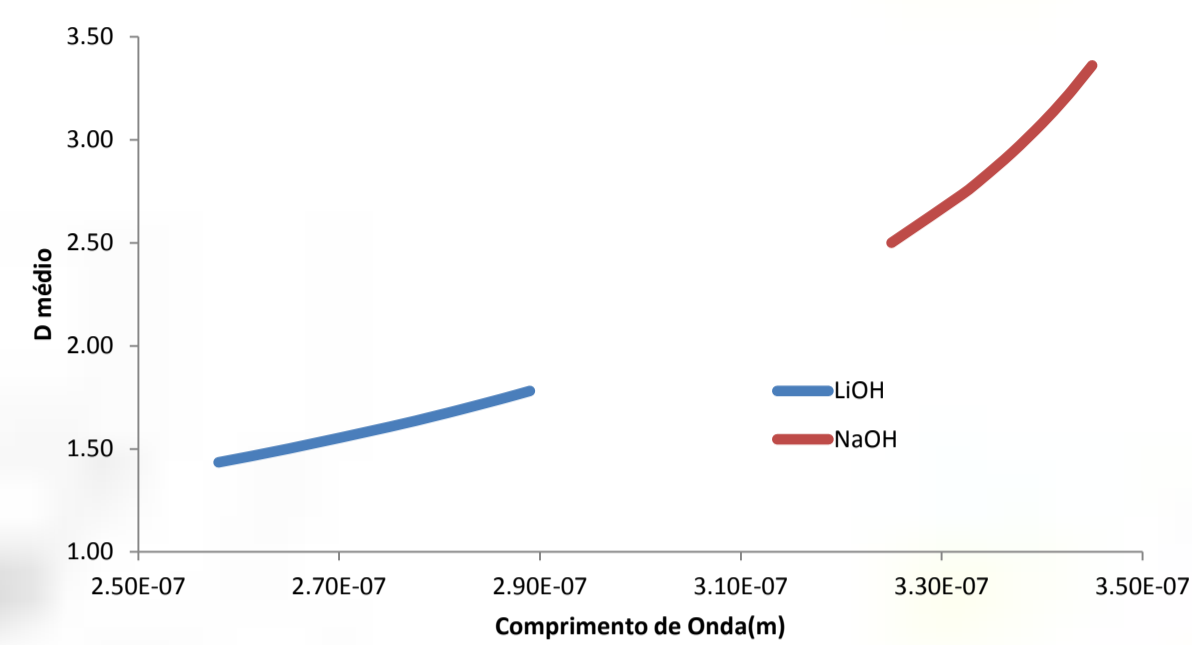
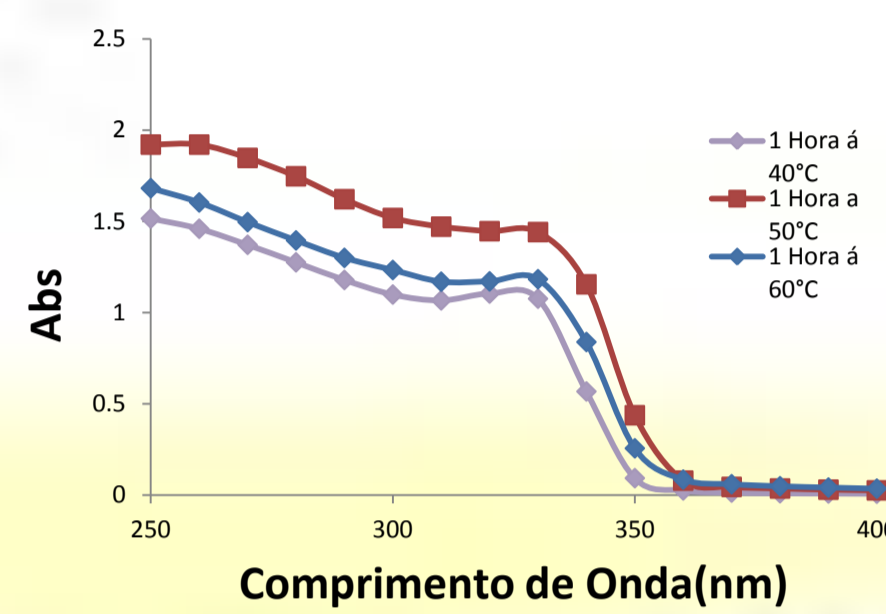


Figura 5: Comparação entre os crescimentos do diâmetro médio utilizando diferentes bases na síntese dos pontos quânticos de ZnO.



Temperatura de banho	$\lambda_{1/2}$ (m)	E_g (J)	E_g (ev)	D_{medio} (nm)
60°C	3.45E-07	5.76E-19	3.594	3.36
50°C	3.44E-07	5.77E-19	3.605	3.30
40°C	3.40E-07	5.84E-19	3.647	3.08

Figura 6: Gráfico mostra as curvas de absorvância de três sínteses com NaOH a diferentes temperaturas de banho.

Tabela 1: Valores de $\lambda_{1/2}$ e de diâmetro médio dos pontos quânticos.

• Análise de difração de raio-x (DRX).

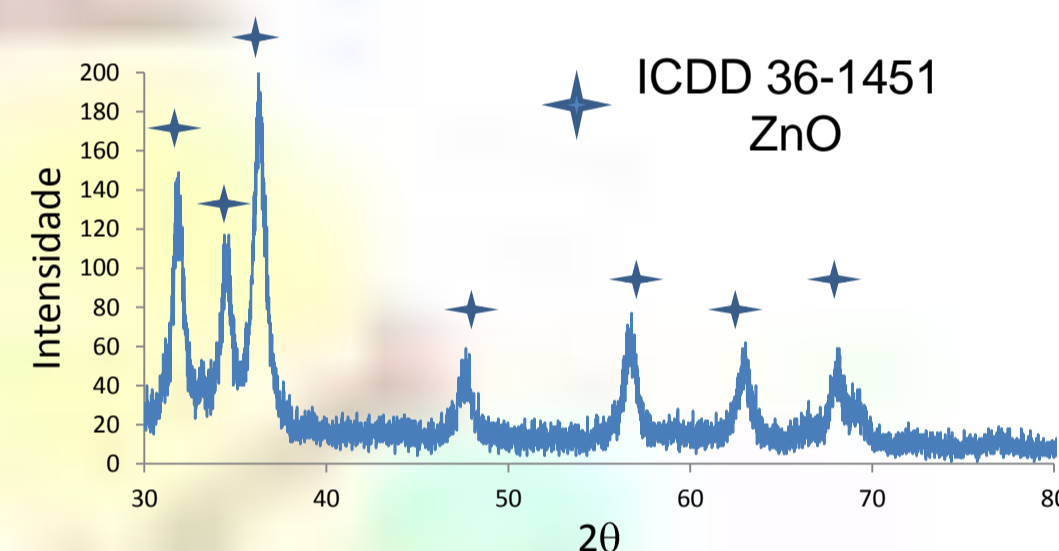


Figura 7: Picos característicos do Óxido de Zinco presente na amostra não lavada.

• Análise de Infravermelho por transformada de Fourier (FTIR).

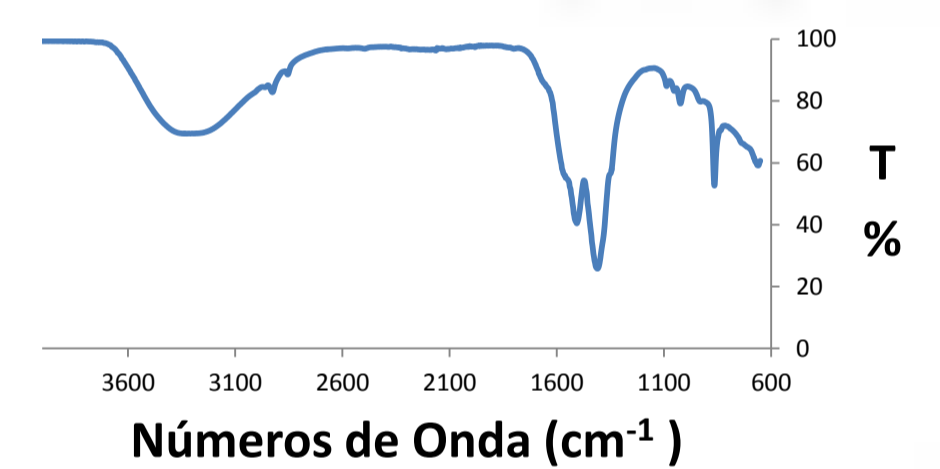


Figura 8: Esta análise indicou a presença de compostos orgânicos, como Li₂CO₃, heptano, hexano, álcool Isopropílico.

Resultado e discussão.

As partículas apresentaram, através da análise de absorvância de UV/visível, um tamanho próximo a 2nm. Esse tamanho só foi possível com a síntese utilizando LiOH como base. Já a análise de Raio-X mostrou a presença de partículas de ZnO, assim como de outros compostos. O infravermelho por transformada de Fourier (FTIR) indicou a presença de compostos orgânicos junto aos pontos quânticos. Isso se deve, possivelmente, pelo fato destes estarem adsorvidos na superfície dos pontos quânticos.

Conclusão.

Os resultados mostram uma forte correlação entre a temperatura e a cinética do processo de crescimento dos pontos quânticos. A síntese de pontos quânticos atingiu o diâmetro esperado. Pontos quânticos menores do que 2 nm podem ser sintetizados empregando-se LiOH. Entretanto, um número maior de análises deve ser feito, assim como um novo método de purificação dos pontos quânticos, visto que foi encontrado compostos que podem interferir em futuros testes microbiológicos.

Referências.

- Eric A. Meulenkamp, *Synthesis and Growth of ZnO Nanoparticles*, Philips Research Laboratories, WA 13, Prof. Holstlaan 4, 5656 AA Eindhoven, The Netherlands, 1998.
- Pralay K. Santra, Sumanta Mukherjee, and D. D. Sarma*, *Growth Kinetics of ZnO Nanocrystals in the Presence of a Base: Effect of the Size of the Alkali Cation*, Solid State and Structural Chemistry Unit, Indian Institute of Science, Bangalore 560012, India, 2010.