

Óxido de zinco co-dopado com enxofre e íons alcalinos terrosos obtidos a partir de precursores “single-source”

André L. B. Brunozi(IC)[†], Gabriela Z. Bosshard(PG), Ítalo O. Mazali(PQ), Fernando A. Sigoli(PQ)

Laboratório de Materiais Funcionais- LMF - Instituto de Química, Universidade Estadual de Campinas, CEP 13083-970, Campinas, SP

*Email: g072802@iqm.unicamp.br

Palavras Chave: semicondutores, single-source, óxido de zinco, terras raras

Introdução

A partir do controle de tamanho e da forma das partículas pode-se obter compostos com propriedades químicas e eletrônicas diferenciadas. Neste contexto, o óxido de zinco, um semicondutor intrínseco, voltou a ser foco de diversas pesquisas, visto que pode ser obtido como nanopartículas com potencial aplicação em campos de óptica não-linear, luminescência, eletrônica, catálise, energia solar, dentre outros. Dentre os métodos de preparação de semicondutores, destaca-se uma rota sintética para materiais nanoestruturados denominada método do precursor de fonte única (*single-source*). Estes precursores recebem este nome pois apresentam elementos metálicos e não-metálicos na mesma molécula, e a partir desta se obtém o semicondutor binário de interesse. A dopagem de nanopartículas de ZnS com íons terras raras representa uma nova classe de materiais luminescentes.¹ Porém, um dos impedimentos para a inserção de terras raras é o volume destes íons que ainda são trivalentes. A expansão da rede surge como uma parte das possíveis soluções de tais dificuldades. Para tal, realiza-se a dopagem do sulfeto de zinco com íons alcalinos terrosos, o qual é posteriormente tratado termicamente sob atmosfera oxidante para formação do óxido de zinco não-estequiométrico, co-dopado com sulfeto e com íons alcalinos terrosos. O óxido de zinco co-dopado obtido pode ser considerado um promissor candidato a matriz para íons terras raras, devido a sua estabilidade química, ao alto valor da banda proibida, e ao fato de absorver radiação ultravioleta.

Resultados e Discussão

Os precursores de zinco e de cálcio foram obtidos a partir de uma reação de dupla troca envolvendo o sal de partida (dietilditiocarbamato de sódio) e acetato de zinco ou de cálcio. O difratograma de raios X do precursor de zinco obtido apresenta o mesmo padrão de difração do difratograma encontrado na literatura (*JCPD: 23-1973*). Para o precursor de cálcio, não se pode obter a ficha

cristalográfica, já que não há na literatura o difratograma deste composto indexado. Os espectros vibracionais na região do infravermelho das amostras de ambos os precursores apresentam as bandas atribuídas aos estiramentos C-S, C-N e deformações S-C-S e C-N-C, características do composto. As temperaturas de decomposição das amostras foram obtidas por análise termogravimétrica: 325°C para o precursor de zinco e 760°C para o precursor de cálcio. As amostras de sulfeto de zinco puras ou dopadas com cálcio foram obtidas por tratamentos térmicos dos precursores metalorgânicos sob atmosfera inerte. O difratograma da amostra de sulfeto de zinco puro indica que o tratamento térmico do precursor leva ao sulfeto de zinco hexagonal, fato importante já que a estrutura cúbica é mais estável a esta temperatura. A dopagem com íons cálcio se deu por preparo de uma solução sólida de ambos os precursores com diferentes porcentagens em massa de dopante (1%, 5% e 10%) e posterior tratamento térmico sob atmosfera inerte a 800°C. Os difratogramas de raios X indicam um pequeno deslocamento dos picos de difração do ZnS em virtude da presença dos íons cálcio indicando a dopagem do sulfeto de zinco. Para a síntese do óxido de zinco co-dopado com enxofre e cálcio, realizou-se o tratamento térmico das amostras sob atmosfera oxidante nas temperaturas obtidas através de análise termogravimétrica das amostras de sulfeto.

Conclusões

O tratamento térmico do precursor de zinco leva a obtenção do sulfeto de zinco hexagonal. O produto obtido pelo método de dopagem dos sulfetos com íons cálcio mostra deslocamento dos picos de difração.

Agradecimentos

FAPESP, CAPES, CNPq, LNLS, LMF, INOMAT

¹ Pearton S.J.; Norton, D.P.;IP, K.; Heo, Y.W.; Steiner, T.Recent progress in processing and properties of ZnO. *Progress in Materials Science*, v.50, n.3, p.293-340, mar. 2005.