

Estudo óptico e estrutural de nanomateriais de ZrO₂ obtido a partir da hidrólise de um precursor alcóxido.

José M. Carvalho^{*1}(PG), Lucas C. V. Rodrigues¹(PG), Maria C. F. C. Felinto²(PQ), Hermi F. Brito¹(PQ).
*jmc@iq.usp.br

1. Departamento de Química Fundamental, Instituto de Química, USP, Av. Lineu Prestes, 748, São Paulo-SP, Brasil.

2. CQMA, Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares, Av. Lineu Prestes, 2242, São Paulo-SP, Brasil.

Palavras Chave: Zircônia, Fotoluminescência, Hidrólise, Sol-Gel, Nanomateriais.

Introdução

Materiais com persistência luminescente encontram muitas aplicações como em pinturas luminosas e iluminações de emergência. A utilização da zircônia como matriz hospedeira nos fósforos sintetizados é vantajoso devido a presença de um *bandgap* grande e de sua baixa energia de fônon ($\approx 470 \text{ cm}^{-1}$) que reduz a probabilidade de decaimentos não-radiativos. O método de hidrólise proposto viabiliza a obtenção de materiais nanométricos com o controle fino da composição e formato de partícula, tornando-se uma grande alternativa na síntese de nanomateriais.[1]

Resultados e Discussão

As amostras de ZrO₂ nanoparticuladas foram obtidas a partir da hidrólise controlada do precursor tetrabutóxido de zircônio (TBZ) em butanol. A quantidade de água foi ajustada para que r ($r = [\text{H}_2\text{O}]/[\text{TBZ}]$) assumisse valores de 3 a 10.

O estudo da estrutura dos nanomateriais foi realizado por meio da técnica de difração de raios-X pelo método do pó. A figura 1A mostra os difratogramas das amostras calcinadas a 800 °C. A partir dos dados pode-se observar uma mistura de fases monoclinica e tetragonal (indicados pelos padrões JCPDS m-ZrO₂ e t-ZrO₂) cujas proporções variam de acordo com r . A figura 1b mostra a porcentagem de cada fase em função de r .

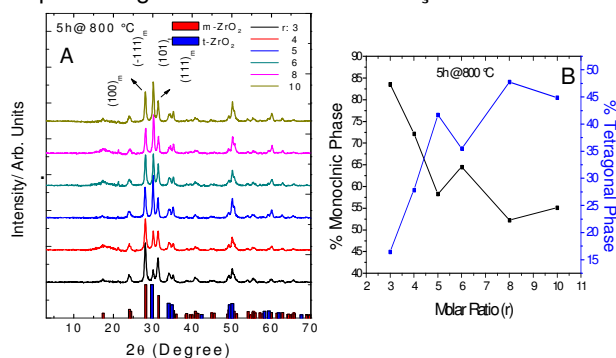


Figura 1: A) Difratogramas de raios-X das amostras de ZrO₂ calcinadas a 800 °C. B) Porcentagem das fases (tetragonal e monoclinica)

O estudo fotoluminescente foi realizado a partir dos espectros de excitação e emissão registrados a temperatura ambiente ($\sim 298 \text{ K}$). A figura 2a mostra os espectros de emissão da série de compostos calcinados a 800 °C. Pode-se observar em todos os espectros uma banda larga centrada em 500 nm oriunda provavelmente de defeitos na matriz (vacâncias de O e Zr). Pode-se notar uma variação de intensidades de acordo com r , possivelmente atribuída a estrutura dos óxidos. Na figura 2b pode-se observar a intensidade integrada da banda de emissão em função de r . Fica claro que a intensidade da luminescência é influenciada por r , encontrando um máximo em $r = 6$.

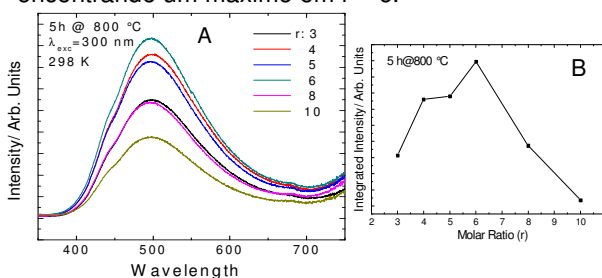


Figura 2: A) Espectros de emissão das amostras calcinadas a 800 °C. B) Intensidade de emissão integrada em função de r .

Conclusões

Com esse estudo foi possível verificar a influência de algumas variáveis (como r e temperatura) nas propriedades fotoluminescentes e estruturais de ZrO₂. Tais dados podem ajudar a otimizar a obtenção de uma matriz com grande potencialidade para sistemas fotônicos.

Agradecimentos

Os autores agradecem as agências de fomento CNPq, FAPESP e IMCT-INAMI

¹ Ekambaram, S.; Patil, K. C. e Maaza, M. *J. Alloy. Compd.* **2005**, 393, 81.

² Stefani, R.; Rodrigues, L. C. V.; Carvalho, C. A. A.; Felinto, M. C. F. C.; Brito, H. F.; Lastusaari, M. e Hölsä, J. *Opt. Mater.* **2009**, 31, 1815.