Estudo cinético do crescimento de quantum dots de CdSe

João B. Souza Junior¹ (PG)*, Laudemir C. Varanda¹ (PQ)

Palavras Chave: quantum dots, seleneto de cádmio, estudo cinético, crescimento de nanopartículas.

Introdução

Quantum dots (QD) são nanopartículas de apresentam semicondutores que efeitos de confinamento quântico dos portadores de carga que podem ser ajustadas pelas dimensões destas partículas. Este efeito leva a uma alteração nas propriedades óticas semicondutores. dos caracterizando-se pelo aumento da energia de band gap e pela quantização dos níveis de energia para valores descontínuos conforme diminui dimensões dos QD.1 Assim, métodos de síntese que resultem em QD com elevado controle de tamanho e morfologia estão sendo amplamente estudados, haja vista que as propriedades deste materiais e, consequentemente, suas aplicações são extremamente dependentes das dimensões dos semicondutores. O método utilizado neste trabalho para a síntese dos QD de CdSe se baseia na injeção a quente, hot-injection method, do precursor dióxido de selênio solubilizado em etanol no meio reacional contendo acetilacetonato de cádmio(II) [Cd(acac)₂], ácido oleico, oleilamina e octadeceno na presença do poliol 1,2-hexadecanodiol como agente redutor. Durante a síntese, alíquotas de aproximadamente 0,5 mL foram retiradas em diferentes tempos de reação e imediatamente resfriadas em etanol imerso em banho de gelo, interrompendo a reação e, assim, possibilitando o estudo da cinética de crescimento destas partículas.

Resultados e Discussão

Após os processos de purificação, espectros de UV-Vis (excitação) e fluorescência (emissão) foram obtidos para avaliar o deslocamento da banda de absorção e fluorescência dos diferentes tamanhos de QD. A posição do máximo da banda de excitação do exciton de menor energia foi utilizada como parâmetro inicial para acompanhar a cinética de crescimento, pois as energias das bandas de excitação estão correlacionadas com as dimensões dos QD e o raio de Bohr do exciton. Os diâmetros das partículas foram obtidos por cálculos empíricos que correlacionam a energia do primeiro exciton com o diâmetro dos QD.2 Estes valores foram comparados para algumas amostras com imagens de microscopia eletrônica de transmissão de alta resolução (HRTEM) e mostraram-se condizentes

com os resultados teóricos. Adicionalmente, as amostras foram caracterizadas por difratometria de raios X (DRX), na qual se constatou a formação da fase cristalina cúbica do tipo blenda de zinco (esfalerita) de grupo espacial de simetria F-43m.

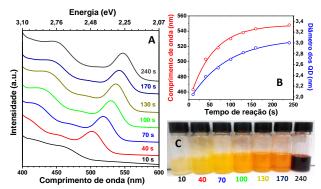


Figura 1. A) Espectro de absorção UVvis dos QD de CdSe obtidos em diferentes tempos de reação. B) Gráfico de tempo de reação pela posição da banda do *exciton* de menor energia demonstrando o deslocamento com dependência exponencial com o tempo de reação. C) Fotografia das amostras retiradas nos diferentes tempos de reação.

Os estudos da cinética de crescimento dos QD de CdSe indicaram uma dependência exponencial do crescimento das partículas com o tempo de reação. O espectro da amostra retirada em 10 s de reação apresenta uma banda alargada devido à presença de dióxido de selênio que possui uma absorção na região entre 300-400 nm próximo à banda de excitação situada em aproximadamente 460 nm.³

Conclusões

Os estudos cinéticos de crescimento dos QD de CdSe indicaram uma dependência exponencial do diâmetro das partículas e, consequentemente, do deslocamento da banda de excitação com o tempo de reação.

Agradecimentos

À FAPESP pela bolsa e suporte financeiro.

¹Instituto de Química de São Carlos – USP, Grupo de Materiais Coloidais, CP 780, 13560-970, São Carlos – SP, Brasil *ibjunior@igsc.usp.br

¹ Scholes, G. D. Adv. Funct. Mater. 2008, 18, 1157–1172.

² Yu, W. W.; Qu, L.; Guo, W.; Peng, X. Chem. Mater. **2003**, 15, 2854-2860.

³ Chen, O.; Chen, X.; Yang, Y.; Lynch, J.; Wu, H.; Zhuang, J.; Cao, Y. C. *Angew. Chem. Int. Ed.* **2008**, 47, 8638 –8641.

³⁷ª Reunião Anual da Sociedade Brasileira de Química