

## Síntese e caracterização de pontos quânticos para aplicação em dispositivos híbridos

### RESUMO

**João Paulo Almirão de Jesus**  
[joaoj.2015@alunos.utfpr.edu.br](mailto:joaoj.2015@alunos.utfpr.edu.br)  
Universidade Tecnológica Federal do Paraná, UTFPR, Londrina, Paraná, Brasil

**Marco Aurélio Toledo da Silva**  
[marcosilva@utfpr.edu.br](mailto:marcosilva@utfpr.edu.br)  
Universidade Tecnológica Federal do Paraná, UTFPR, Londrina, Paraná, Brasil

**Roberta Caroline dos Santos**  
[robertasantos@alunos.utfpr.edu.br](mailto:robertasantos@alunos.utfpr.edu.br)  
Universidade Tecnológica Federal do Paraná, UTFPR, Londrina, Paraná, Brasil

Este trabalho tem como objetivo a síntese e a caracterização de pontos quânticos de CdSe. Os pontos quânticos foram obtidos através da técnica de deposição por banho químico e as características estruturais e ópticas foram estudadas através de difração de raios X, perfilometria, microscopia óptica, absorção UV-VIS e fotoluminescência. A síntese teve como produto filmes cristalinos de fase hexagonal, depositados uniformemente e com alta absorbância na região do espectro visível e ultravioleta. Através da análise dos dados obtidos, foi comprovado a existência de pontos quânticos com alto grau de confinamento quântico.

**PALAVRAS-CHAVE:** Ponto Quântico. CdSe. Banho Químico. Caracterização. Síntese.

## 1 INTRODUÇÃO

O ponto quântico pode ser uma nanopartícula semicondutora que apresenta o efeito de confinamento quântico de portadores de carga (elétron e buraco, ou éxciton) nas três dimensões. Esse confinamento faz com que o ponto quântico apresente dimensões menores que o valor *bulk* do éxciton. Por causa do efeito de confinamento do par elétron-buraco, há uma alteração também na energia da banda proibida do semicondutor, no qual aumenta conforme o tamanho do ponto quântico decresce. Graças ao efeito de confinamento quântico, é possível ajustar as propriedades ópticas e eletrônicas através do tamanho do nanocristal (GUPTA et al, 2017, p. 113).

Outras características que os pontos quânticos apresentam é a alta absorção de luz em diversos comprimentos de onda que vão do ultravioleta ao infravermelho. Essas características dão ao ponto quântico uma grande diversidade de uso, entre eles estão as células fotovoltaicas, diodos emissores de luz (*LED*), lasers, fotodetectores e entre outros (HONE et al, 2015, p. 69).

A deposição por banho químico é uma das diversas maneiras de se produzir pontos quânticos. Portanto, a síntese de pontos quânticos de CdSe e sua caracterização é o principal objetivo deste trabalho.

## 2 MÉTODOS E MATERIAIS

### 2.1 LIMPEZA DOS SUBSTRATOS

Lâminas de vidro de microscopia foram empregadas como substrato na síntese. Foram cortados pedaços retangulares dessas lâminas e feito a limpeza em acetona e álcool isopropílico, respectivamente, por 15 minutos em ultrassom. Após o ultrassom, os substratos foram enxaguados novamente com jatos de água ultrapura e deixados para secar em temperatura ambiente.

### 2.2 MATERIAIS E CONCENTRAÇÕES

Na síntese de pontos quânticos de CdSe por banho químico foi empregado  $\text{CH}_3\text{COONa}$  como agente complexante e ajustador do pH para meio alcalino,  $\text{Cd}(\text{NO}_3)_2$  como fonte de íons  $\text{Cd}^{2+}$  e  $\text{Na}_2\text{SeSO}_3$ , obtido do refluxo de selênio em pó e  $\text{Na}_2\text{SO}_3$  em água, como fonte de íons  $\text{Se}^{2-}$ . O tempo do banho foi de 2h à 65 °C.

No total, foram sintetizadas 3 soluções com concentrações distintas de  $\text{CH}_3\text{COONa}$ , sem alteração dos outros reagentes. Assim, foram obtidas duas amostras de cada solução, no qual as concentrações se encontram na tabela 1.

Tabela 1 – Concentrações utilizadas na síntese

Reagente	Solução 1	Solução 2	Solução 3
$\text{CH}_3\text{COONa}$	3,00 mol/L	3,60 mol/L	4,20 mol/L
$\text{Cd}(\text{NO}_3)_2$	0,03 mol/L	0,03 mol/L	0,03 mol/L
$\text{Na}_2\text{SeSO}_3$	0,06 mol/L	0,06 mol/L	0,06 mol/L

Fonte: Autoria própria (2017).

## 2.3 CARACTERIZAÇÃO

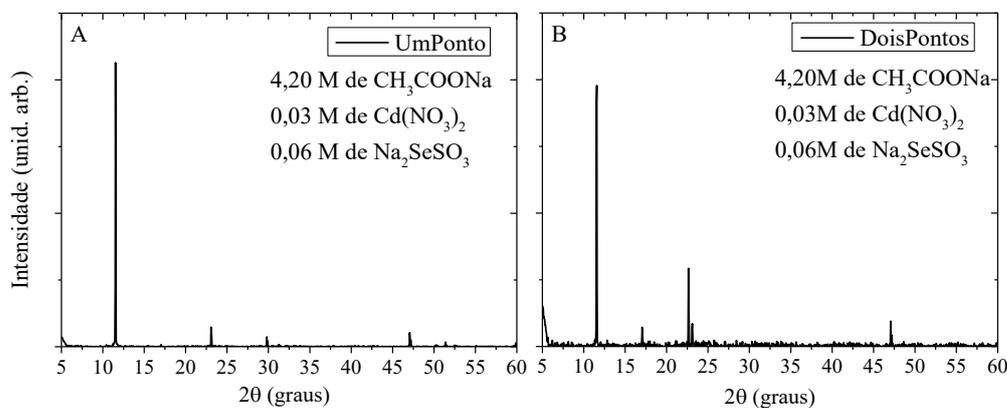
As medidas de difração de raios X e microscopia óptica foram obtidas no Laboratório Multiusuários da Pró Reitoria de Pesquisa de Pós-Graduação da UEL. Os dados de difração de raios X foram feitos em um difratômetro PANalytical X'Pert PRO MPD com radiação  $\text{CuK}\alpha$  e geometria  $\theta$ - $2\theta$  do LARX, UEL. As medidas pela técnica de perfilometria foram mensuradas usando um perfilômetro Bruker DektakXT® no laboratório de Dispositivos Fotônicos e Materiais Nanoestruturados, UTFPR. A absorção óptica UV-VIS foi realizada em espectrofotômetro Biochrom Libra S60 Double Beam Spectrophotometer no laboratório multiusuário A-304 da UTFPR. Os dados de fotoluminescência foram obtidos através de um sistema de laser e lentes e um espectrofotômetro Edmund Optics BRC112E-USB VIS/NIR Fiber-Coupled USB CCD Spectrometer no Laboratório de Dispositivos Fotônicos e Materiais Nanoestruturados, UTFPR.

## 3 RESULTADOS E DISCUSSÃO

A solução 3, com a maior concentração de acetato de sódio, apresentou os melhores resultados comparada com as outras, tais como: cristalinidade, alta absorbância na região do espectro visível e ultravioleta e filmes mais uniforme com deposição em maior área superficial. Portanto, essa solução será discutida a seguir.

Os resultados obtidos para difração de raios X de ambas as amostras se encontram na figura 1.

Figura 1 – Gráfico de difração de raios X para: A) amostra com um ponto e B) dois pontos.



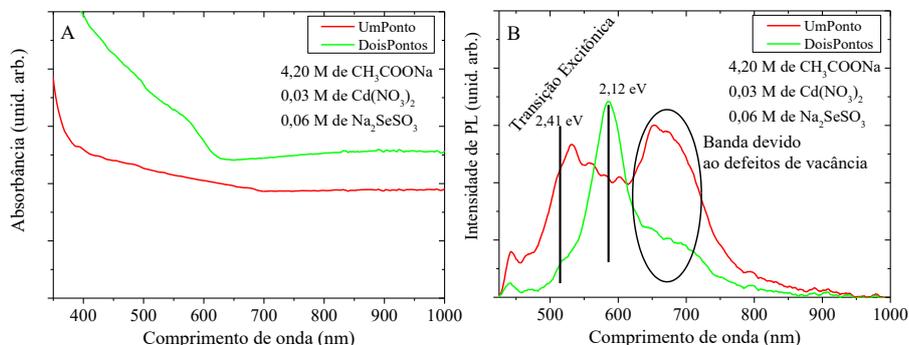
Fonte: Autoria própria (2017).

Observando o gráfico de difração de raios X na figura 1, é possível observar picos em  $23^\circ$  e  $47^\circ$  em ambas as amostras. Esses picos representam, respectivamente, aos planos (100) e (103) da fase hexagonal (wurtzita) do CdSe (GUPTA et al, 2017, p. 115). Além disso, a ausência de ruído faz com que a solução 3 apresente maior cristalinidade.

A espessura medida por perfilometria do filme um ponto é igual a 95 nm enquanto do filme dois pontos é igual a 185 nm. Também foi possível observar por microscopia óptica que ambos os filmes apresentam uma deposição

uniforme. Na Figura 2 são mostrados os espectros de absorvância e fotoluminescência das amostras.

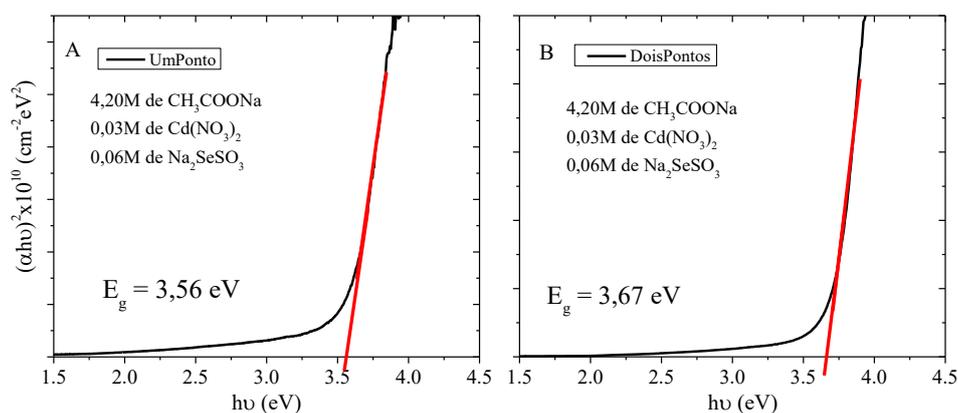
Figura 2 – A) Espectro de absorvância e B) fotoluminescência



Fonte: Autoria própria (2017).

Observando os espectros na figura 2, a amostra marcada com um ponto apresenta ligeira absorvância na região do espectro visível e ultravioleta, no entanto, a segunda amostra possui absorvância ainda maior. Já no espectro de fotoluminescência, ambas amostras possuem banda de transição excitônica de 514 nm (2,41 eV). Elas também possuem bandas devido aos defeitos de vacância por possuírem imperfeições na rede cristalina na região de 670 nm. Esse fenômeno é causado pela existência de pontos quânticos de diferentes tamanhos e é mais intenso na amostra marcada com dois pontos. Na figura 3 é mostrado o gráfico de  $(\alpha h\nu)^2$  vs  $h\nu$  de ambas amostras onde foi realizado o ajuste de Tauc.

Figura 3 – Gráfico de  $(\alpha h\nu)^2$  vs  $h\nu$



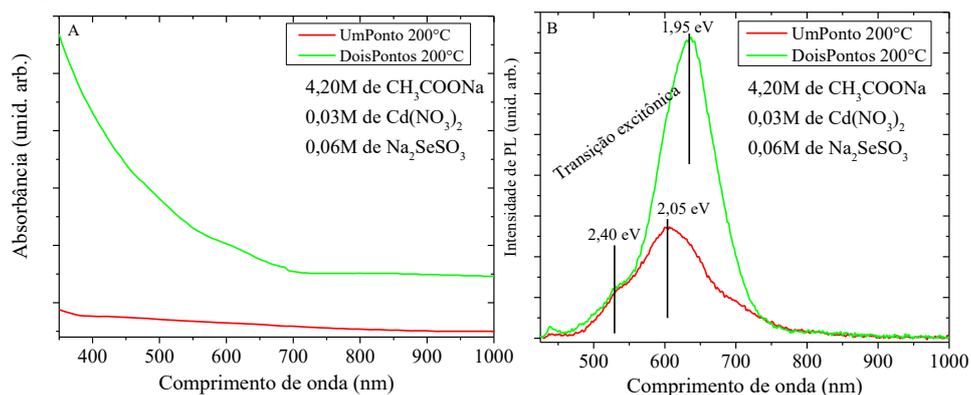
Fonte: Autoria própria (2017).

Ao extrapolar a parte linear do gráfico de  $(\alpha h\nu)^2$  vs  $h\nu$  é possível obter o valor da energia banda proibida  $E_g$  de semiconductor, no qual é o valor em que a extrapolação toca no eixo da energia do fóton  $h\nu$ . Portanto, o valor calculado de  $E_g$  para a amostra um ponto é igual a 3,56 eV e a dois pontos é 3,67 eV. Considerando o valor *bulk* do CdSe igual a 1,74 eV (HONE et al, 2015, p. 69), fica evidente a presença de efeitos de confinamento quântico e da presença de pontos quânticos. Na figura 4 são mostrados os espectros de absorvância e

fotoluminescência das amostras depois de fazer um tratamento térmico de 200°C.

Após o tratamento, o espectro de fotoluminescência apresentou redução das bandas causada pelo defeito de vacância e bandas mais discretas, principalmente a evidência de uma banda de transição excitônica de 2,05 eV em 603 nm na amostra com um ponto.

Figura 4 – A) Espectro de absorvância e B) fotoluminescência tratadas a 200°C



Fonte: Autoria própria (2017).

Também há o *redshift* das bandas anteriores, agora com transições excitônica de 2,40 eV (530 nm) e 1,95 eV (645 nm). Esses dados indicam um rearranjo da rede cristalina causado pelo tratamento térmico.

#### 4 CONSIDERAÇÕES FINAIS

A síntese de deposição por banho químico de pontos quânticos de CdSe com concentração de CH<sub>3</sub>COONa igual a 4,20 mol/L resultou em filmes cristalinos de fase hexagonal, com alta absorvância na região do espectro visível e ultravioleta. Também, é confirmado a presença de pontos quânticos pelo *blueshift* da energia da banda proibida quando comparada com o valor do *bulk*. Por fim, o tratamento térmico foi eficaz pelo rearranjo da rede cristalina, diminuindo as bandas de defeito de vacância do nanocristal.

## Synthesis and characterization of quantum dots with application in hybrid devices

### ABSTRACT

This paper has the synthesis and characterization of CdSe quantum dots as objective. The quantum dots were obtained through chemical bath deposition and its optical and structural properties studied with X ray diffraction, perfilometry, optical microscopy, UV-VIS absorption and photoluminescence. The synthesis has as product crystalline films with hexagonal phase, evenly deposited and with high absorption in visible and ultraviolet spectra. Through the data analysis, it was comproved the existence of high degree quantum confinement quantum dots.

**KEYWORDS:** Quantum dots. CdSe. Chemical Bath Deposition. Synthesis. Characterization.

---

## 5 AGRADECIMENTOS

Agradeço a CNPq e a Fundação Araucária pelo auxílio financeiro, a UTFPR, a CAPES, aos Laboratórios Multiusuários da Pró Reitoria de Pesquisa de Pós-Graduação da UEL (LARX) e ao Prof. Dr. Marco Aurélio Toledo da Silva pelo ensinamento.

## 6 REFERÊNCIAS

GUPTA, D. K. et al. Synthesis, characterization and optical properties of CdSe/CdS and CdSe/ZnS core-shell nanoparticles. **Indian Journal Of Pure & Applied Physics**, [S. l.], v. 55, n. 2, p.113-121, fev. 2017.

HONE, Fekadu Gashaw et al. Synthesis and Characterization of CdSe Nanocrystalline Thin Film by Chemical Bath Deposition Technique. **International Journal Of Thin Films Science And Technology**, [S. l.], v. 4, n. 2, p.69-74, maio 2015.

**Recebido:** 31 ago. 2017.

**Aprovado:** 02 out. 2017.

**Como citar:**

JESUS, J. P. A. et al. Síntese e caracterização de pontos quânticos para aplicação em dispositivos híbridos. In: SEMINÁRIO DE INICIAÇÃO CIENTÍFICA E TECNOLÓGICA DA UTFPR, 22., 2017, Londrina. **Anais eletrônicos...** Londrina: UTFPR, 2017. Disponível em: <<https://eventos.utfpr.edu.br/sicite/sicite2017/index>>. Acesso em: XXX.

**Correspondência:**

João Paulo Almirão de Jesus  
Rua Amapá, 518, Centro, Londrina, Paraná, Brasil.

**Direito autoral:**

Este resumo expandido está licenciado sob os termos da Licença Creative Commons-Atribuição-Não Comercial 4.0 Internacional.

