

SIMULAÇÃO DA RESPOSTA DE FILMES FINOS DE ÓXIDO DE TUNGSTÊNIO À IMPLANTAÇÃO DE ÍONS NÍQUEL E ALUMÍNIO

AUDEH, Dalal J. S. A.¹, CORRÊA, Diogo S.², GARCIA, Irene T. S.³

¹ Bacharelado em Química, Instituto de Química e Geociências, Universidade Federal de Pelotas, dalal_audeh@yahoo.com.br. ² Bacharelado em Química, Instituto de Química e Geociências, Universidade Federal de Pelotas, dscquimica@gmail.com. ³ Depto. Físico-Química, Instituto de Química, Universidade Federal do Rio Grande do Sul- irene@iq.ufrgs.br

1 INTRODUÇÃO

Diante do grande impacto causado pelas descargas de poluentes orgânicos, sobretudo, pelas atividades industriais, pesquisadores têm buscado alternativas eficientes que não causem grandes impactos ao meio ambiente. Nesse contexto, os processos oxidativos avançados (POAs) vêm ganhando destaque devido à sustentabilidade a longo prazo.¹

Dentre os processos oxidativos avançados, pode-se destacar a fotocatalise heterogênea, baseada na ativação de um semicondutor por luz solar ou artificial. Um semicondutor é caracterizado por um *bandgap* (região que separa a banda de valência da banda de condução) de baixa energia. A absorção de fótons com energia superior à energia do *bandgap* resultará na promoção de um elétron da banda de valência para a banda de condução. Este fenômeno dá origem à formação de uma lacuna (h^+) na banda de valência. A diferença de potencial gerada é suficientemente positivo para produzir radicais a partir de moléculas orgânicas ou de água adsorvidas na superfície², conforme a Figura 1.

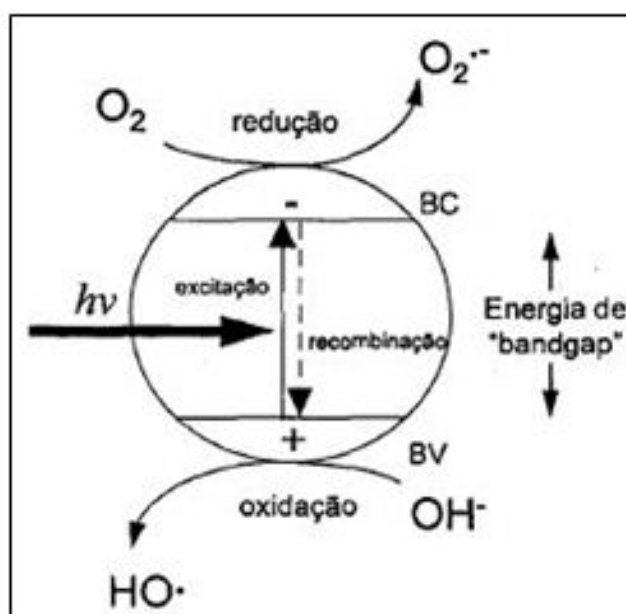


FIGURA 1. Representação esquemática da formação do par elétron-lacuna no momento da absorção de um fóton.¹

Vários são os semicondutores utilizados na fotocatalise heterogênea, alguns exemplos são: TiO_2 , WO_3 , Fe_2O_3 , CuO , ZnO , ZnS , ZrO_2 , CdO , HgO , PbO , PbO_2 , Al_2O_3 e NiO , sendo que cada um possui peculiaridades próprias, tais como o tempo de recombinação do par elétron-lacuna, superfície específica do catalisador ou comprimento

de onda absorvido.³ Exemplo disso é a faixa de absorção existente entre o TiO_2 e o WO_3 ; enquanto o TiO_2 absorve energia em torno de 388 nm, o WO_3 absorve energia próxima a 440 nm.

Os catalisadores podem ser sintetizados na forma de pó ou ainda, suportados em material particulado, o qual oferece maior versatilidade, como em revestimento de vidros, cerâmicas, paredes ou pisos, pois não há a necessidade da separação do catalisador ao final da reação.⁴

Através da modificação da superfície do semicondutor, feita com a inserção de metais (dopagem), há um aumento na eficiência fotocatalítica, caracterizado pela inibição temporária da recombinação de carga do par elétron-lacuna, favorecendo assim a formação de radicais.⁵

A dopagem via implantação iônica, em não equilíbrio, permite a inserção rápida e controlada de íons em uma matriz, sem impurezas provenientes de reações químicas. Um aspecto importante a ser considerado na dopagem de semicondutores, utilizando esse processo, é garantir que o íon incidente não altere significativamente a composição do material, criando defeitos na matriz. Outro aspecto a considerar é a distribuição desses íons na matriz, que depende do tipo de íon a ser implantado, da eficiência da transferência de energia do íon incidente para o filme, da composição e dimensões do filme.

Neste trabalho foram investigadas as alterações produzidas em filmes finos de WO_3 , um semicondutor bastante promissor devido à possibilidade de absorção de luz numa ampla faixa do espectro visível, dopados com Ni^{+2} e Al^{+3} .

2 METODOLOGIA (MATERIAL E MÉTODOS)

Os filmes de WO_3/SiO_2 foram sintetizados através da técnica de pulverização catódica. A espessura do filme foi determinada por Espectroscopia de Retroespalhamento Rutherford (RBS) utilizando íons He^+ a 800 keV, com ângulo de incidência de 0° . A partir dos dados obtidos, foram determinados os parâmetros de simulação dos danos e do alcance dos íons Al^{+3} e Ni^{+2} nos filmes de WO_3/SiO_2 . Esses estudos foram realizados com o software *Transport Ion in Matter* (TRIM 95)[®].

3 RESULTADOS E DISCUSSÕES

Os filmes de WO_3/SiO_2 foram caracterizados através da técnica de RBS. Essa técnica permite inferir a espessura da amostra ao relacionar a perda de energia da partícula incidente com o trajeto percorrido pela partícula na amostra. Essa energia é proporcional ao número de colisões no interior da amostra.

Os filmes obtidos apresentaram espessura de 60 ± 2 nm, com espectros característicos aos da Figura 2.

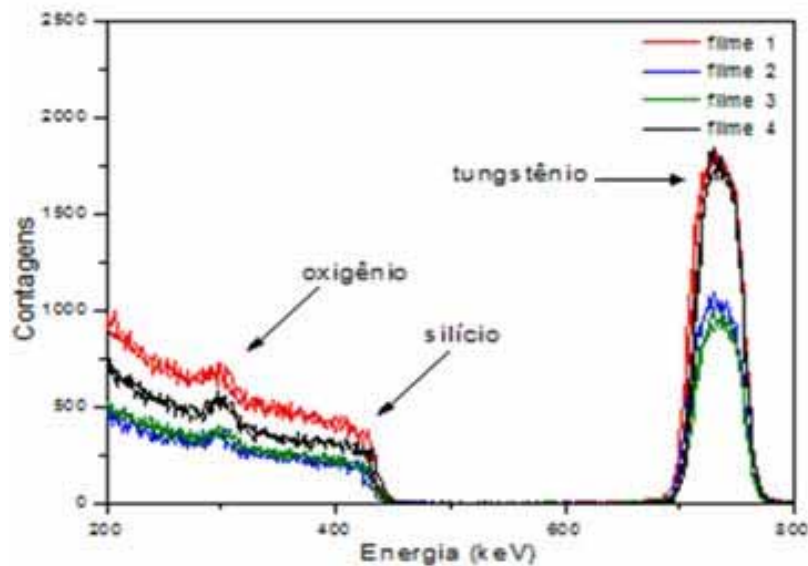


FIGURA 2. Espectros de quatro filmes de WO_3 obtidos com íons 800 keV de He^+ a 0° de incidência.

Pode-se inferir que a técnica de deposição catódica permitiu a obtenção de filmes com espessura uniforme.

Com a espessura conhecida, foi possível realizar simulações de implantação de íons Ni^{+2} e Al^{+3} , adequando a energia de maneira a obter uma dopagem homogênea ao longo dos 60 nm dos filmes de WO_3/SiO_2 .

TABELA 1. Dados de simulação do TRIM 95[®] para o WO_3/SiO_2

Íon	Energia (keV)	S_e (eV/Å)	S_n (eV/Å)	$W_{ejetado}$ por íon	$O_{ejetado}$ por íon
Al^{+3}	26	10,56	36,13	0,23	0,76
Ni^{+2}	60	24,66	107,7	0,49	1,6

OBS: S_e é a transferência de energia através de interações eletrônicas e S_n é a transferência de energia através de interações nucleares.

4 CONCLUSÕES

A síntese de filmes de WO_3/SiO_2 Pela técnica de deposição catódica permitiu a obtenção de filmes finos homogêneos. Os estudos de simulação mostraram que a forma predominante de transferência de energia entre os íons estudados e a matriz é por interações entre núcleos. As simulações demonstram que tanto a implantação de íons Al^{+3} como Ni^{+2} são eficazes, proporcionando pequenas alterações na razão W/O da matriz, além de uma distribuição homogênea ao longo do filme. O íon alumínio provoca menores danos no filme. O íon níquel também apresenta baixo potencial de danos no filme. Sendo um metal d^8 , o íon níquel foi escolhido para as próximas fases do estudo.

5 AGRADECIMENTOS

Agradecemos ao CNPq pela bolsas PIBIC e ITI.

6 REFERÊNCIAS

1. NOGUEIRA, R. F. P., JARDIM, W. F. A fotocatalise heterogênea e sua aplicação ambiental. **Química Nova**, São Paulo, v. 21, n. 1, p. 69-72, 1998.
2. HAMEED, A., GONDAL, M. A., YAMANI, Z. H. Effect of transition metal doping on photocatalytic activity of WO₃ for water splitting under laser illumination: role of 3d-orbitals. **Catalysis Communications**, v. 5, p. 715-719, 2004.
3. LIU, H., PENG, T., KE, D., PENG, Z. Preparation and photocatalytic activity of dysprosium doped tungsten trioxide nanoparticles. **Materials Chemistry and Physics**, v. 104, p. 377-383, 2007.
4. VALENTE, J. P. S., ARAÚJO, A. B., BOZANO, D. F., PADILHA, P. M., FLORENTINO, A. O. Síntese e caracterização textural do catalisador CeO₂/TiO₂ obtido via sol-gel: fotocatalise do composto modelo hidrogenoftalato de potássio. **Eclética Química**, v. 30, p. 7-13, 2005.
5. CHENG, X. F., LENG, W. H., LIU, D. P., ZHANG, J. Q., CAO, C. N. Enhanced photoelectrocatalytic performance of Zn-doped WO₃ photocatalysts for nitrite ions degradation under visible light. **Chemosphere**, v. 68, p. 1976-1984, 2007.