



E0551

AVALIAÇÃO DA INFLUÊNCIA DA CRISTALINIDADE SOBRE A DETERMINAÇÃO DO TAMANHO DE CRISTALITO DO ÓXIDO SEMICONDUTOR ZNO

Diego Costa Ferreira Moreira (Bolsista PIBIC/CNPq), Fernando A. Sigoli (Co-orientador) e Prof. Dr. Ítalo Odone Mazali (Orientador), Instituto de Química - IQ, UNICAMP

Teve-se por objetivo investigar a contribuição do grau de cristalinidade sobre a largura a meia-altura dos picos de difração de raios X (XRD) de nanopartículas de ZnO devido sua aplicação tecnológica. A maioria das rotas de síntese produz inicialmente nanopartículas não-cristalinas. O crescimento de cristalito é seguido pelo aumento do grau de cristalinidade, obtido via tratamento térmico, fato que interfere na determinação do tamanho do cristalito a partir da equação de Scherrer. Cristalitos inferiores a 1 μm causam o alargamento dos picos de XRD e redução da intensidade, que sob a perspectiva do ordenamento a longa distância implica em redução do grau de cristalinidade. Experimentalmente se utilizou de processos sol-gel e da metodologia de ciclos de impregnação-decomposição (CID) de precursores metalorgânicos "in situ" em matrizes mesoporosas, que permite a obtenção de cristalitos de diferentes tamanhos com mesma cristalinidade. Compararam-se os resultados obtidos de XRD, Raman, UV-Vis, SEM pelas diferentes metodologias para o entendimento da contribuição da cristalinidade na determinação do tamanho de cristalito a partir de dados de XRD aplicados a equação de Scherrer.

Óxidos semicondutores - Nanopartículas - Cristalinidade