



Filmes nanoestruturados de WO_3 visando aplicações em células solares

Aluno: André Delfino Rodrigues
Instituto de Química, Universidade Federal do Rio Grande do Sul

Orientadora: Prof^a. Dr^a. Irene T. S. Garcia

Introdução

A dopagem do óxido de tungstênio (WO_3) com molibdênio tem sido estudada para modificar o desempenho fotocatalítico de óxidos de metais de transição [1] e [2]. Nesses estudos, a inserção do dopante traz ainda mudanças na estrutura cristalina e na morfologia, de modo que os efeitos do metal dopante e o seu efeito específico no processo fotocatalítico ainda não são completamente compreendidos. Nesse sentido, este trabalho tem como objetivo analisar a influência da dopagem com diferentes concentrações de molibdênio na estrutura do óxido de tungstênio; assim, os óxidos cuja dopagem não resulte em modificações morfológicas serão selecionados para estudos em processos fotocatalíticos.

Metodologia

Quatro substratos de silício de dimensões 1 cm x 2 cm e sete de dimensões 1 cm x 1 cm foram limpos com etanol durante 30 min, lavados com água milli-Q e secos em estufa durante 90 min. A deposição do óxido de tungstênio sobre os substratos foi realizada por sputtering em atmosfera de oxigênio de um alvo de tungstênio. Os filmes foram dopados por *dip coating* em soluções de Mo_2Cl_{10} em metanol seco. Após um período de repouso, os filmes foram submetidos a tratamento térmico a 60 °C (75 min) e annealing a 550 °C (2h).

Resultados

A espessura, a densidade e a rugosidade dos filmes de óxido de tungstênio recém depositados foram determinadas por reflectância de raios X (Figura 1). Na Figura 2, estão apresentados espectros Raman dos filmes com diferentes concentrações de molibdênio.

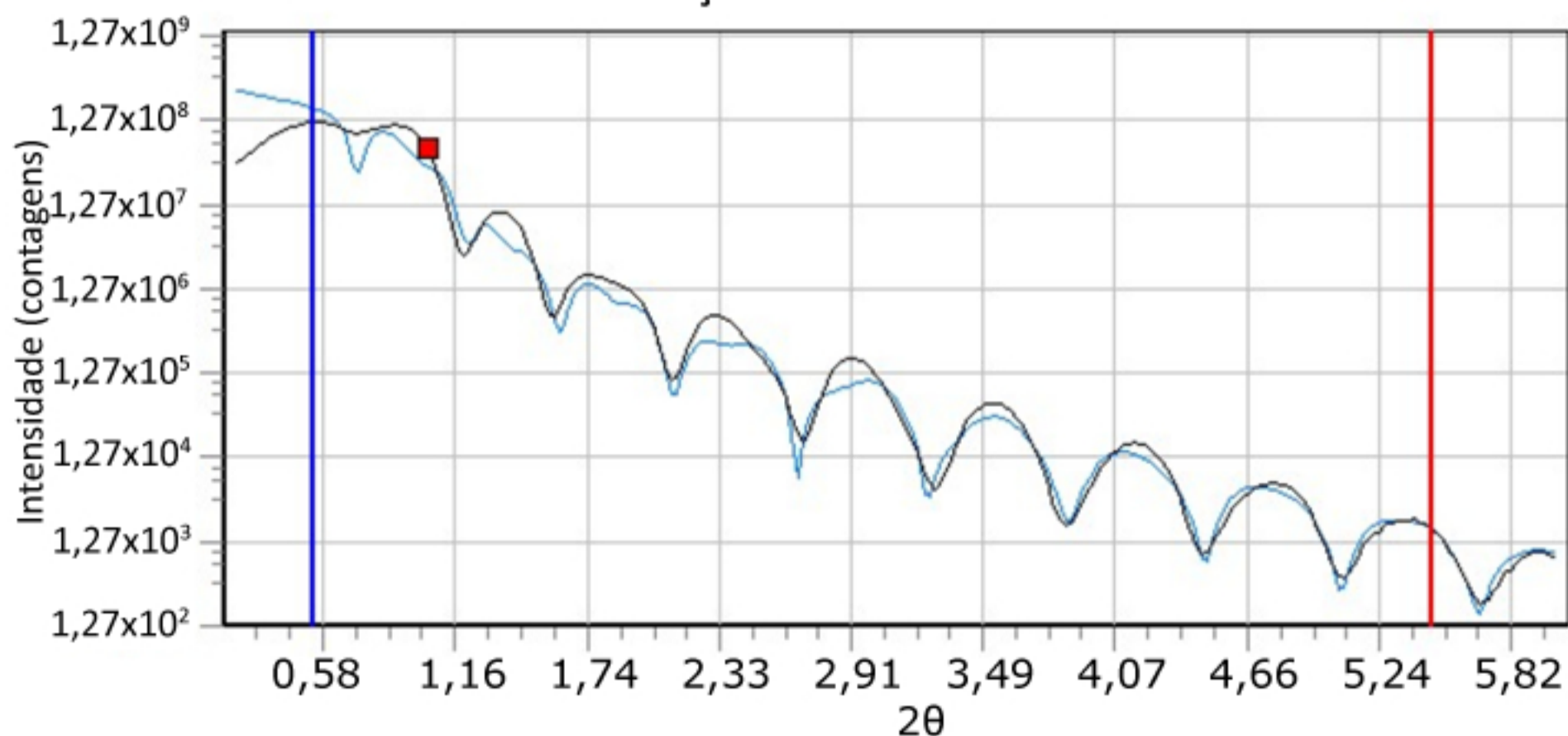


Figura 1: Refletividade do óxido de tungstênio no substrato de silício (filmes de 17 nm de espessura, 0,67 nm de rugosidade e 5,6 g cm⁻³ de densidade)

Os filmes foram analisados por difração de raios X, espectroscopia Raman e espectrometria de retroespalhamento Rutherford (RBS). Os difratogramas e respectivos espectros Raman do filme não dopado (sem annealing) e dos filmes dopados (com annealing) com concentrações iguais a 118,2 mmol L⁻¹ e 59,1 mmol L⁻¹ de Mo_2Cl_{10} são mostrados na Figura 2, bem como os espectros de RBS.

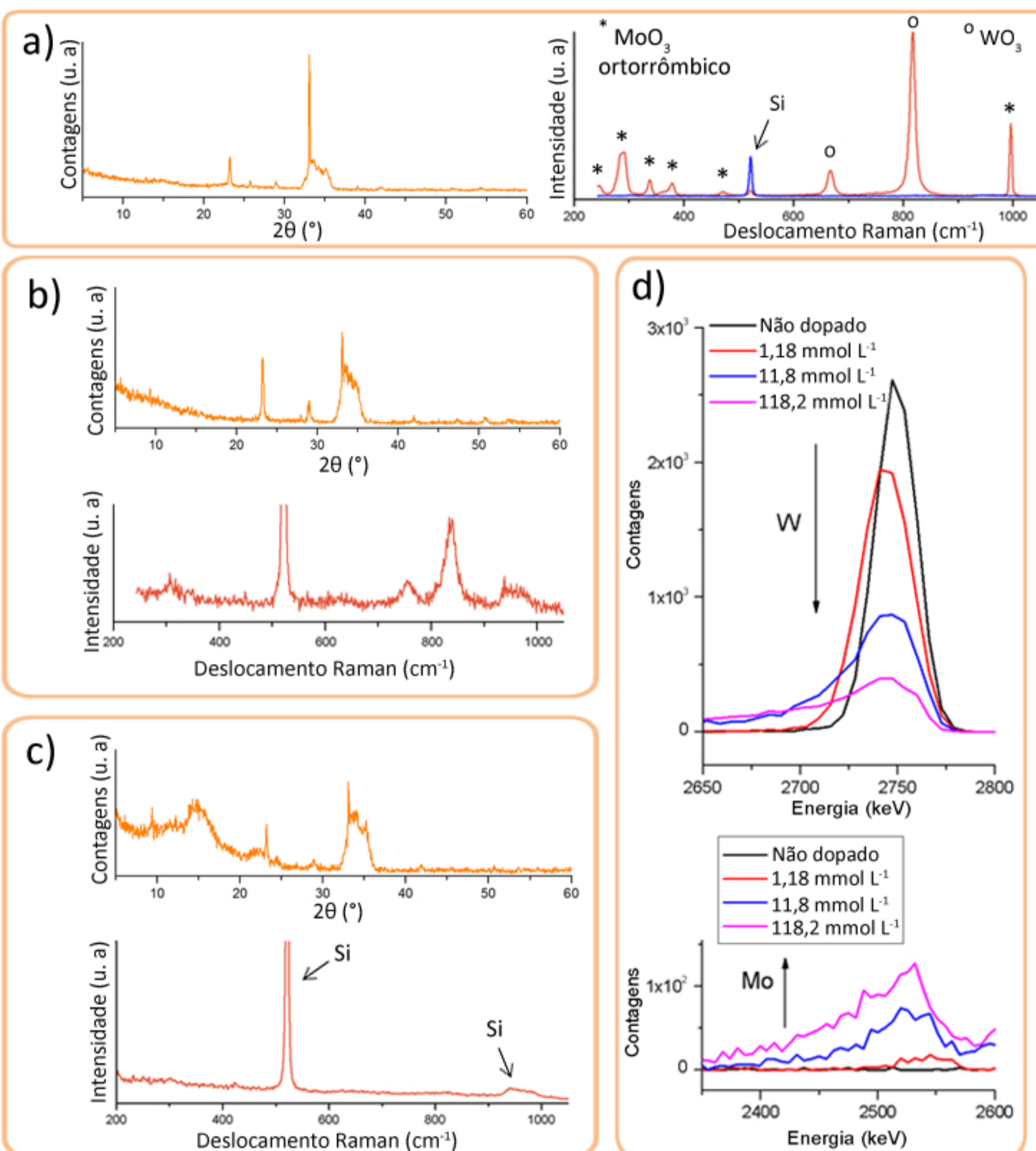


Figura 2: Difratogramas e espectros Raman dos filmes de óxido de tungstênio após annealing dopados com: a) 118,2 mmol L⁻¹, b) 59,1 mmol L⁻¹ de Mo_2Cl_{10} e c) não dopado e sem annealing. d) RBS He⁺ 3 MeV.

Conclusão

Os filmes foram dopados com sucesso, e os difratogramas mostram que a estrutura preferencial é a monoclinica. Até 59,1 mmol L⁻¹ não foi observada modificação estrutural nos filmes dopados com Mo_2Cl_{10} . Porém, nos filmes dopados com 118,2 mmol L⁻¹ de Mo_2Cl_{10} , observou-se separação de fases, com a formação de trióxido de molibdênio ortorrômbico. Dessa forma, filmes dopados até 59,1 mmol L⁻¹ poderão ser usados para caracterizar, sem dúvida, o efeito da presença do Mo na atividade fotocatalítica dos óxidos de tungstênio.

Referências

- [1] S. S. Kalanur e H. Seo, *Journal of Colloid and Interface Science* **2018**, v. 509, p. 440-447.
- [2] A. Hasani, Q. V. Le, T. P. Nguyen, K. S. Choi, W. Sohn, J. Kim, H. W. Jang e S. Y. Kim, *Scientific Reports* **2017**, v. 7, p. 1-10.

Agradecimentos