



## Fotoluminescência em Nanomateriais Semicondutores

Arthur Aló de Oliveira\*, Lázaro Aurélio Padilha Junior.

### Resumo

Foram estudados nanomateriais semicondutores, como pontos quânticos e nanoplacas, que, por possuírem tamanho na ordem de nanômetros, aprisionam um par elétron-buraco ligado (éxciton), em um espaço menor que o raio de Bohr do éxciton. Este aprisionamento causa um confinamento quântico que resulta numa discretização das energias, semelhante ao que ocorre com os orbitais atômicos. Para isso, foram feitos modelos para descrever os nanomateriais, usando poços de potencial para resolver a equação de Schrödinger, de forma a determinarmos sua estrutura de bandas e fotoluminescência.

### Palavras-chave:

Nanomateriais, pontos quânticos, nanoplacas.

### Introdução

Nanomateriais semicondutores são pequenas estruturas, tendo dimensão na ordem de nanômetros, comparável à escala de tamanho de um par elétron-buraco ligado, chamado éxciton. Desta forma, um éxciton em seu interior sofre um confinamento quântico, que discretiza os níveis de energia no interior no nanomaterial.

Como a discretização dos níveis de energia depende do tamanho do nanomaterial, é possível, ao controlarmos as dimensões do nanomaterial, controlar o “gap” de energia deste e, conseqüentemente, o comprimento de onda da luz emitida. Isto está ilustrado na figura 1 por uma foto de nanopartículas suspensas que mostra que é possível obter basicamente todo o espectro visível de comprimento de ondas.



**Figura 1.** Foto de nanopartículas em suspensão, iluminadas por lâmpada UV.

Assim, neste trabalho é estudado a influência do confinamento do éxciton sobre a estrutura de bandas do nanomaterial e a fotoluminescência deste. Para isso, fazemos modelos para descrever os nanomateriais por poços de potencial e, então, resolver a equação de Schrödinger.

### Resultados e Discussão

Podemos classificar o confinamento do éxciton nos nanomateriais em alguns regimes<sup>1</sup>, dependendo do raio “ $a$ ” do nanomaterial em relação ao tamanho dos portadores no meio, definido pelo raio de Bohr, dado pela relação  $a_B = \epsilon \frac{m}{m^*} a_0$ , onde  $\epsilon$  é a constante dielétrica do material,  $m$  é a massa de repouso do elétron e  $m^*$  é a massa efetiva do portador. Assim, temos os regimes de confinamento:

- Forte, quando o raio  $a$  é menor que o raio do elétron e do buraco, estando ambos fortemente confinados.

- Intermediário, quando apenas um dos portadores estar fortemente confinado.
- Fraco, quando apenas o centro de massa do par elétron-buraco está confinado.

O primeiro nanomaterial estudado foram os pontos quânticos semicondutores. Estes, confinam o éxciton nas três direções espaciais. Foi usado um modelo de um poço esférico de potencial para descrevê-los. Assim, foi possível encontrar que a energia devido ao confinamento diminui conforme o raio do nanomaterial aumenta, resultando numa emissão de comprimentos de onda maiores. Também foi encontrada uma relação para a taxa de decaimento dos elétrons excitados nestes nanomateriais, de forma a calcular o tempo de vida da fotoluminescência.

Também foram estudadas as nanoplacas semicondutoras. Estas, confinam o éxciton principalmente em uma única direção. Foi usado um modelo de poço retangular de potencial finito para os cálculos. Assim, encontramos novamente uma relação para a taxa de decaimento. Em seguida, calculou-se o aumento da energia do “gap” do material e, usando dados experimentais, estimou-se o “gap” de energia do material  $CsPbBr_3$  em torno de  $2,2eV$ .

### Conclusões

Neste projeto foram estudados alguns nanomateriais semicondutores, como pontos quânticos e nanoplacas e o efeito do confinamento, causado devido à escala de tamanho manométrica, sobre o éxciton. Foi encontrado, usando modelos de poços de potencial, a influência sobre a estrutura de bandas e a taxa de decaimento dos elétrons excitados. Usando estes resultados, estimou-se o “gap” de energia do material  $CsPbBr_3$  em torno de  $2,2eV$ .

### Agradecimentos

Agradecimentos a todos que tenham, de qualquer forma, colaborado com este projeto e pelo financiamento do PIBIC/CNPQ.

<sup>1</sup> Klimov, Victor I. Nanocrystal Quantum Dots. 2nd ed, Taylor & Francis, 2010.