

ELUCIDANDO O PAPEL DOS DEFEITOS PONTUAIS NAS PROPRIEDADES LUMINESCENTES DE MATERIAIS SILICATOS CONTENDO Ln^{3+}

Daniel Prado da Fonseca¹, Gabriel Santos de Lacerda², Heveson Lima³.

¹*Discente do Centro Multidisciplinar de Luís Eduardo Magalhães (CMLEM/UFOB, Luís Eduardo Magalhães -Ba/Brasil), daniel.fonseca@ufob.edu.br,*

²*Discente do Centro Multidisciplinar de Bom Jesus da Lapa (CMBJL/UFOB, Bom Jesus da Lapa - Ba/Brasil), gabriel.l0563@ufob.edu.br,*

³*Docente do Centro Multidisciplinar de Luís Eduardo Magalhães (CMLEM/UFOB, Luís Eduardo Magalhães -Ba/Brasil), heveson.matos@ufob.edu.br.*

O silicato de cálcio (Ca_2SiO_4 e CaSiO_3) apresenta propriedades físicas, químicas e biológicas que ampliam significativamente seu campo de aplicações. Estudos recentes apontam seu potencial como um fósforo emitindo no vermelho profundo para conversão de diodos emissores de luz branca (W-LEDs). Apesar dos avanços recentes no desenvolvimento de fósforos emissores de vermelho, ainda existem desafios no desenvolvimento de materiais com altos rendimentos quânticos de fotoluminescência. Neste contexto, é essencial aprofundar o estudo de suas propriedades luminescentes, que estão diretamente relacionadas à caracterização dos defeitos mais prováveis em sua estrutura. Para isso, utilizamos simulações atomísticas e um conjunto de potenciais interatônicos que permitiram descrever com precisão as propriedades físicas do material e analisar os mecanismos de formação de defeitos associados à luminescência. Inicialmente, desenvolvemos parâmetros potenciais que reproduziram com alta precisão as propriedades estruturais, elásticas, mecânicas e dielétricas de Ca_2SiO_4 , CaSiO_3 e seus precursores (SiO_2 e CaO). Posteriormente, realizamos cálculos de energia de formação de defeitos intrínsecos utilizando a abordagem de duas regiões de Mott-Littleton, que forneceu as energias de solução de cada reação do estado sólido. Os resultados mostraram que o defeito intrínseco do tipo pseudo-Schottky, associado ao CaO , é o mais provável de ocorrer, com uma energia de solução de 2,22 eV para o cluster ($\text{V}_{\text{Ca}}^{\text{n}} + \text{V}_{\text{O}}^{\text{o}}$). A dopagem com íons Eu^{3+} e Ce^{3+} evidenciou forte afinidade pelos sítios de Ca^{2+} , enquanto a substituição nos sítios de Si^{4+} foi energeticamente desfavorável. Esses defeitos demonstram impacto significativo nas propriedades luminescentes do material, sugerindo um grande potencial para aplicações em tecnologias de iluminação avançada.

Palavras-Chave: Silicato de cálcio. Luminescência. Simulação. Defeitos pontuais.

Agência Financiadora: CNPq.