

Síntese e caracterização de óxidos do tipo Perovskita

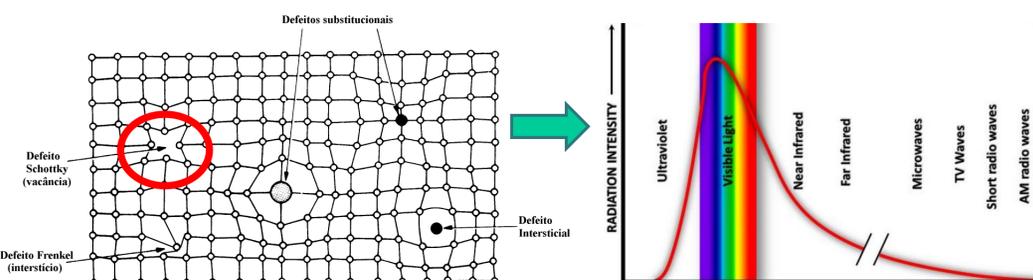
E. J. DAMIANI¹, J. FERREIRA LEITE SANTOS¹

¹ Instituto de Química, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre/RS, Brasil
edu.damiani@hotmail.com



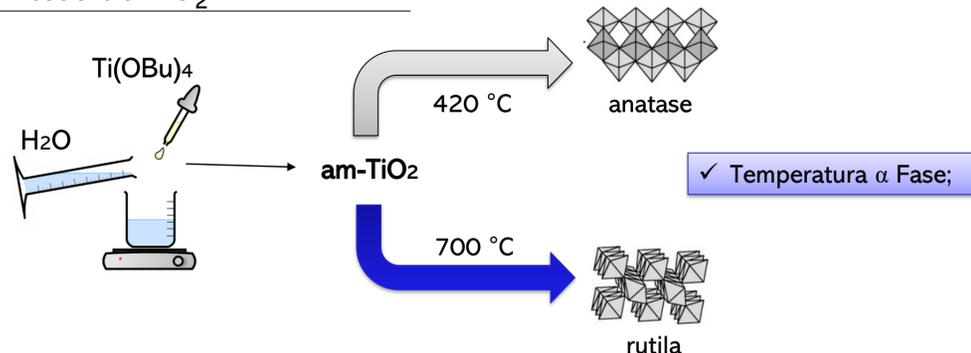
INTRODUÇÃO

A constante divulgação de resultados promissores mostrando a aplicação de perovskitas em células solares tem resultado em crescente interesse da comunidade científica neste material. Embora o mineral perovskita seja estudado há muitos anos, a pesquisa que envolve a síntese, caracterização e aplicação deste material é relativamente recente e um campo a ser explorado. Nesse trabalho, são estudadas as condições reacionais para a formação de perovskitas, buscando otimizar uma rota hidrotérmica de síntese para o controle de tamanho e estrutura cristalina, bem como os possíveis defeitos na rede cristalina do material, que são capazes de provocar alterações nas propriedades ópticas do material.



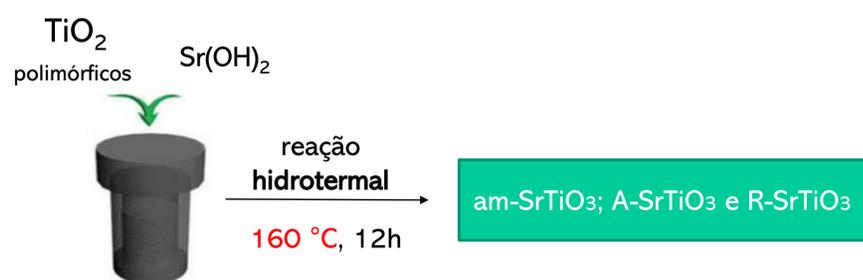
PROCEDIMENTO EXPERIMENTAL

Síntese de TiO₂



Síntese de SrTiO₃

A síntese foi realizada através de reações hidrotérmicas, utilizando nanopartículas de TiO₂ amorfo, anatase e rutila. Como precursor de estrôncio foi utilizado Sr(OH)₂.



Dopagem por vacâncias de oxigênio

Para as vacâncias de oxigênio, amostras de 500mg foram colocadas em uma barca de alumina e posicionadas no meio do tubo de quartzo dentro do forno com fluxo constante de gás Argônio. O processo de dopagem foi testado em temperaturas entre 300 – 1000 °C por 1 hora.

RESULTADOS E DISCUSSÃO

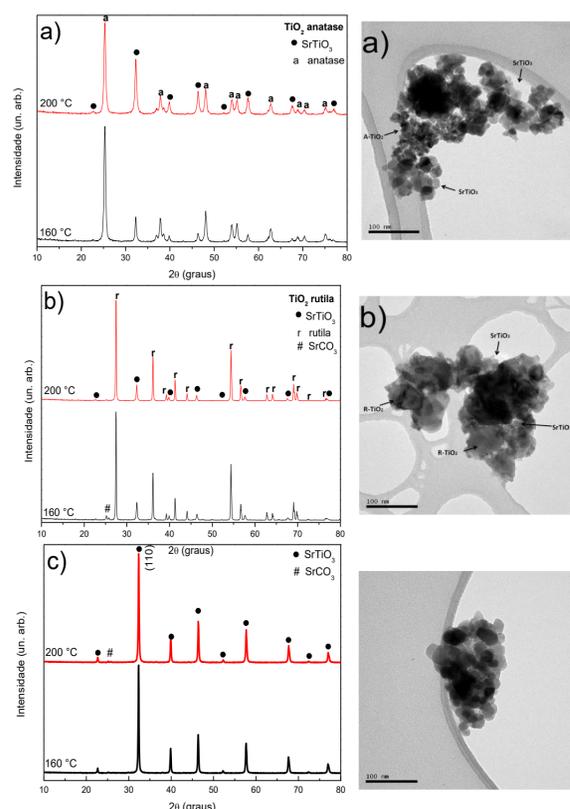


Figura 1: Difratomogramas do Titanato de Estrôncio sintetizado a partir de diferentes fases de TiO₂ e respectivas imagens de MET.

- ✓ A obtenção de SrTiO₃ é favorecida quando se utiliza nanopartículas de TiO₂ na fase amorfa (c);
- ✓ Em todas as rotas é possível observar a fase cristalina cúbica do SrTiO₃.
- ✓ Evidencia-se a conversão parcial de Dióxido de Titânio – anatase (a) e rutila (b) em Titanato de Estrôncio através dos difratogramas e das diferenças de morfologia das partículas nas imagens de MET.
- ✓ O aumento da estabilidade e energia de ligações das diferentes fases causa uma menor conversão do material.

Resultados – Dopagem por Vacâncias de Oxigênio

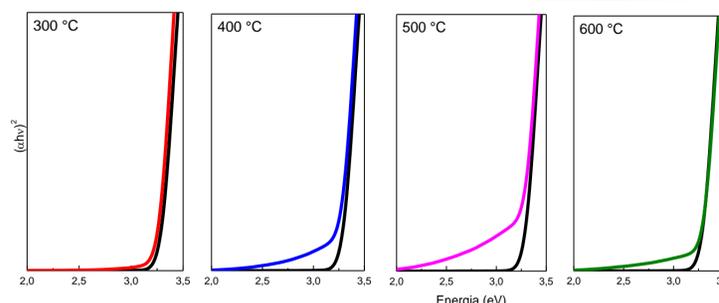


Figura 2: “band-gap” dos materiais dopados em diferentes temperaturas (linha colorida) em relação ao mesmo do material não dopado (linha preta).

- ✓ Material absorve luz na região do visível, promovendo saltos dos elétrons nas bandas de condução, importantes para aplicações em células voltaicas e fotocatalise.

Resultados – Produção de H₂

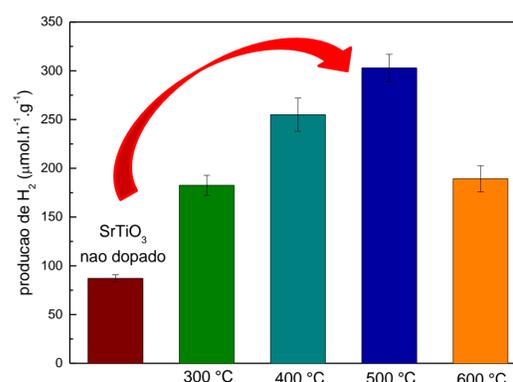


Figura 3: Produção de Hidrogênio nas diferentes amostras dopadas em atmosfera de Argônio em diferentes temperaturas.

- ✓ Aumento na produção de H₂ de, pelo menos 3,5x, em relação à amostra não-dopada.
- ✓ As vacâncias provocam uma maior absorção no visível, diminuição do “band-gap” e maior produção de hidrogênio no máximo de 500°C.
- ✓ O material perde cristalinidades com o aumento do número de vacâncias.