



|                   |  |
|-------------------|--|
| <b>Evento</b>     | Salão UFRGS 2018: SIC - XXX SALÃO DE INICIAÇÃO CIENTÍFICA DA UFRGS |
| <b>Ano</b>        | 2018   |
| <b>Local</b>      | Campus do Vale - UFRGS   |
| <b>Título</b>     | Síntese e Caracterização de Óxidos do tipo Perovskitas             |
| <b>Autor</b>      | EDUARDO JOÃO DAMIANI   |
| <b>Orientador</b> | JACQUELINE FERREIRA LEITE SANTOS                                   |

## Síntese e Caracterização de Óxidos do tipo Perovskita

*Aluno: Eduardo Damiani*

*Orientadora: Jacqueline Ferreira Leite Santos*

*Instituto de Química, UFRGS*

Titanato de estrôncio ( $\text{SrTiO}_3$ ), um dos compostos denominados perovskita tem sido amplamente estudado como um importante semicondutor tipo n devido sua variedade de propriedades físicas relevantes. Além disso, a versatilidade nas aplicações dos óxidos de perovskita tem gerado muitos estudos no desenvolvimento de novas combinações elementares em sua estrutura que melhoram as propriedades térmicas, ópticas, catalíticas, elétricas e estruturais dos materiais que podem ser exploradas no desenvolvimento de células solares e sensores. No entanto, um dos grandes desafios ainda nesta área é desenvolver metodologias de síntese com rotas simples, rápidas e com elevada taxa de conversão, uma vez que normalmente estes materiais são obtidos através de condições experimentais sofisticadas de elevado custo. Baseado nisto, o objetivo deste trabalho foi investigar como as estruturas e proporções dos precursores alteram as taxas de conversão na perovskita e as propriedades resultantes de imperfeições na rede cristalina do  $\text{SrTiO}_3$ . Para isso,  $\text{TiO}_2$  amorfo (am- $\text{TiO}_2$ ) foi preparado com a adição de 15 mL de  $\text{Ti}(\text{O}i\text{Bu})_4$  em 150 mL de água sob agitação por 2 horas, seguida por secagem na estufa a 50 °C por 12 horas. Para obtenção de  $\text{TiO}_2$  anatase (A- $\text{TiO}_2$ ) e rutila (R- $\text{TiO}_2$ ), a amostra de  $\text{TiO}_2$  amorfo foi calcinada em forno do tipo mufla a 420 °C e 700 °C, respectivamente, durante 2 horas. As reações para formação do  $\text{SrTiO}_3$  foram realizadas com as três diferentes fases cristalinas do  $\text{TiO}_2$ , na temperatura de 160 - 200 °C, em um reator revestido com teflon adicionando  $\text{Sr}(\text{OH})_2 \cdot 8\text{H}_2\text{O}$ ,  $\text{TiO}_2$  e NaOH com tempo de reação de 12 horas. Para as vacâncias de oxigênio, as 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 de 100 mL.min<sup>-1</sup>. O processo de dopagem foi testado em temperaturas entre 300 – 1000 °C por 1 hora. Argônio é o gás utilizado nesse tipo de dopagem. Nos difratogramas dos produtos resultantes da reação hidrotermal utilizando A- $\text{TiO}_2$  e R- $\text{TiO}_2$ , foi possível observar os picos referentes à estrutura cúbica do  $\text{SrTiO}_3$ , assim como os picos de difração do precursor de  $\text{TiO}_2$  que não reagiu, estando de acordo com as imagens de Microscopia Eletrônica de Transmissão que sugerem uma conversão parcial do A- $\text{TiO}_2$  e R- $\text{TiO}_2$  em  $\text{SrTiO}_3$ . Foi possível observar também uma maior conversão dos precursores anatase e rutila quando as reações foram realizadas na temperatura de 200 °C. Após a dopagem por vacância de oxigênio, os materiais apresentaram maior absorção de luz na região do visível, além de menores “band-gap” (<2,0 eV) em relação ao material não dopado (3,0 eV), em virtude da criação de níveis intermediários de energia causados pelas vacâncias do material. As transições eletrônicas com menores energias fazem com que estes materiais sejam promissores para aplicação como catalisadores na hidrólise da água para produção de hidrogênio.