

## SÍNTESE E CARACTERIZAÇÃO DE PEROVSKITAS DO TIPO



Leonardo Secorun Pinheiro (PIBIC/CNPq/FA/Uem), Flávio Francisco Ivashita (Orientador), e-mail: ra100698@uem.br.

Universidade Estadual de Maringá / Centro de Ciências Exatas/Maringá, PR.

**Ciências Exatas e da Terra / Física**

**Palavras-chave:** Perovskita, fusão, DRX.

### Resumo:

Foram produzidas perovskitas do tipo  $YFe_xV_{1-x}O_3$  onde x foi variado de 0,1 até 0,5. As amostras de perovskita foram preparadas utilizando-se do processo de fusão a arco, e para algumas, realizou-se tratamento térmico em atmosfera redutora de hidrogênio. A caracterização das amostras foram feitas por difração de raios-X.

### Introdução

Perovskita é o nome dado a classe de materiais que apresentam a forma  $ABO_3$  onde os sítios A são ocupados por cátions divalentes ou trivalentes, e os sítios B são ocupados por metais de transição. A estrutura da perovskita pode apresentar diversas simetrias diferentes, como tetragonal, cúbica, ortorrômbica, romboédrica ou monoclinica [IVASHITA, F. F.].

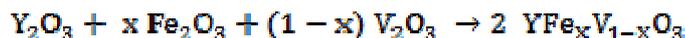
Uma característica comum em alguns cristais de perovskita é a piezeletricidade, que se trata da produção de um campo elétrico quando o cristal está sob tensão, cuja característica pode ser aplicada em transdutores de pressão, ultramicromanipuladores, detectores de sons, entre outros. Outra característica presente em alguns variantes da estrutura da perovskita, é o fato delas serem considerados materiais supercondutores, podendo apresentar resistência elétrica zero em determinadas temperaturas [WELLER, M., at all].

Algumas outras aplicações das perovskitas estão relacionadas com energia fotovoltaica, LEDs, geladeiras magnéticas, sensores de campo magnético e memórias RAM [PERVOSKITE-INFO].

As perovskitas podem apresentar diversas propriedades e aplicações ao substituir totalmente ou parcialmente os elementos A e B, e como há muito pouco estudos com sistemas do tipo  $YFe_xV_{1-x}O_3$ , nosso objetivo será produzir e caracterizar este tipo de perovskita.

## Materiais e métodos

A fase perovskita foi formada por meio da fusão em um forno a arco, de três óxidos, sendo eles: óxido de ítrio ( $Y_2O_3$ ), óxido de ferro ( $Fe_2O_3$ ) e óxido de vanádio ( $V_2O_3$ ), obedecendo o cálculo estequiométrico conforme descrito abaixo.



onde os valores de x foram variados de 0,1 até 0,5.

Desta mistura homogênea, confeccionou-se uma pastilha que foi fundida no forno a arco com uma corrente de 140 amperes em atmosfera controlada de argônio.

As amostras confeccionadas, foram caracterizadas em um difratômetro, com feixe de raio-x produzido por um tubo de cobre ( $\lambda = 1,54060 \text{ \AA}$ ), na geometria convencional  $\theta/2\theta$ , com intervalo angular de  $10^\circ$  a  $90^\circ$  e passo de  $0,02^\circ$  por segundo.

Os difratogramas obtidos foram comparados com um banco de dados (JCPDS), onde foi possível fazer a identificação das fases presentes na amostra.

Além da fase perovskita, algumas amostras apresentaram também a fase  $YVO_4$ . Nestas amostras, além da fusão, foi feito um tratamento térmico (forno tubular resistivo) em atmosfera redutora de hidrogênio na temperatura de  $800^\circ\text{C}$ , com tempo máximo de tratamento de até 12 minutos.

## Resultados e Discussão

Foram preparadas perovskitas  $YFe_xV_{1-x}O_3$ , com  $x = 0,1; 0,2; 0,3; 0,4$  e  $0,5$ . As fases foram identificadas pelas medidas de difração de raios-X, conforme apresentada na figura 1 para a amostra  $x = 0,3$ . É importante informar que a fase da perovskita  $YFe_xV_{1-x}O_3$  apresenta a mesma estrutura cristalina (ortorrômbica) e grupo espacial (Pbnm) do ortovanadato ( $YVO_3$ ), assim, utilizamos esta fase do banco de dados para identificar a perovskita formada neste trabalho.

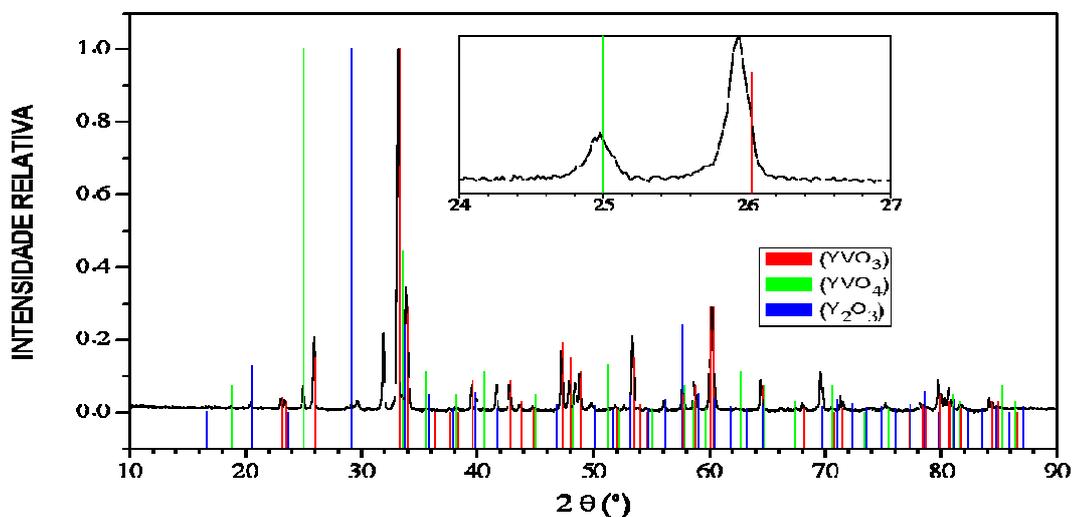


Figura 1 – Difratoograma para a amostra x=0,3.

Identificou-se em todos os difratogramas a presença de um pico (em torno de  $29^\circ$ ) que atribuímos ao óxido de ítrio (precursor), e também a presença de um pico (em  $25^\circ$ ) identificado como  $YVO_4$ .

Com o objetivo de eliminar a fase  $YVO_4$ , realizou-se um tratamento térmico redutor em  $800^\circ\text{C}$  com tempo suficiente para eliminar a fase oxidada. A figura 2 apresenta o difratograma obtido para a amostra  $x = 0,3$  na qual foi realizado o processo de tratamento térmico.

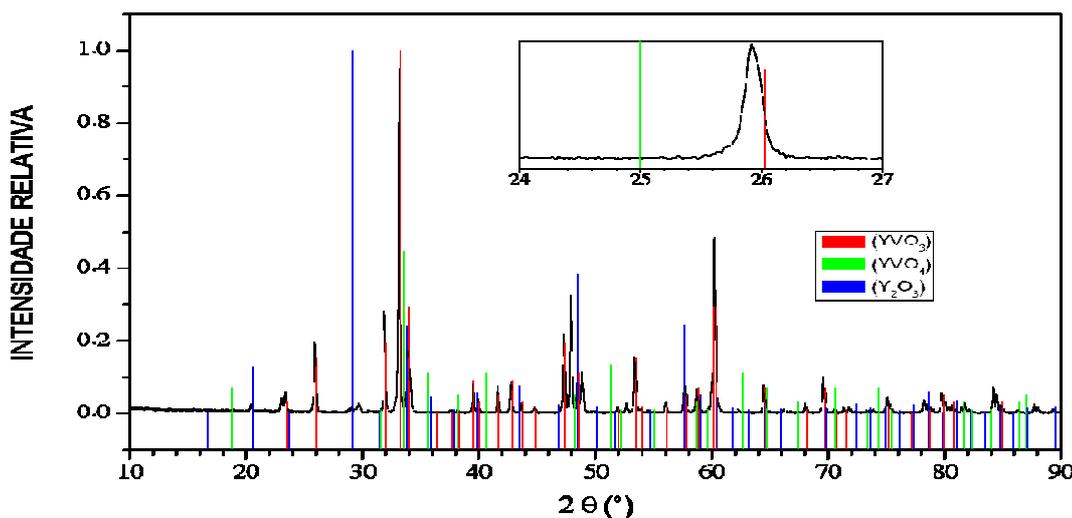


Figura 2 – Difratoograma da amostra  $x = 0,3$  após realizado tratamento térmico.

Observa-se que, nesta amostra, o tratamento térmico redutor eliminou completamente a fase  $YVO_4$ . No entanto, em algumas amostras, este tratamento térmico não conseguiu eliminar completamente essa fase, mas houve uma diminuição significativa após o tratamento. Acreditamos que em temperatura e/ou tempos diferentes de tratamentos térmico, conseguiríamos eliminar completamente esta fase oxidada.

Em todos os difratogramas foram identificados picos referentes ao precursor de ítrio, atribuímos a presença desta fase, ao fato da fusão não ter ocorrido completamente na amostra.

## Conclusões

Foram preparadas e caracterizadas perovskitas do tipo  $YFe_xV_{1-x}O_3$  com  $x = 0,1; 0,2; 0,3; 0,4$  e  $0,5$ ;

As perovskitas foram obtidas através de um processo de fusão, no entanto, identificou-se também uma pequena quantidade de precursor de óxido de ítrio e uma fase  $YVO_4$ ;

Ao realizar um tratamento térmico redutor foi possível, reduzir e em alguns casos, eliminar completamente a fase  $YVO_4$ .

## Agradecimentos

A Universidade Estadual de Maringá (UEM) pela bolsa de iniciação científica concedida por meio do Programa Institucional de Bolsas de Iniciação Científica PIBIC/CNPq-Fundação Araucária-UEM-2017/2018.

## Referências

IVASHITA, F. F. **Síntese e caracterização de perovskitas do tipo  $TR(Fe_xV_{1-x}O_3)$  ( $TR = La - Er, Y$ )**. 2010. Tese (Doutorado) - Programa de pós Graduação em Física, Universidade Estadual de Maringá, Maringá, 2010.

WELLER, M., OVERTON, T., ROURKE, J., ARMSTRONG, F. **Química Inorgânica**. 6 ed. Oxford: Bookman Companhia Editora Ltda, 2014.

PEROVSKITE-INFO. Disponível em <<https://www.perovskite-info.com/>>. Acesso em 31 Jul 2018.