

SÍNTESE E CARACTERIZAÇÃO DE ÓXIDOS MULTIFERROICOS COMPOSICIONALMENTE COMPLEXOS

Júlia de Souza Flóes (PIBIC/CNPq/FA/UEM), Manoel da Conceição Souza, Ivair
Aparecido Dos Santos (Orientador). E-mail: ra119950@uem.br

Universidade Estadual de Maringá, Departamento de Física, Centro de Ciências
Exatas, Maringá, PR.

**Área e subárea do conhecimento: Física, Física da Matéria Condensada /
Materiais Magnéticos e Propriedades Magnéticas.**

Palavras-chave: óxidos, multiferroicos, perovskita.

RESUMO

Neste trabalho, um óxido multiferroico à base de ferrita de Bismuto (BiFeO_3 - BFO) modificada com óxidos de Disprósio, Érbio, Gadolínio, e Lantânio ($\text{Bi}_{0,2}\text{Dy}_{0,2}\text{Er}_{0,2}\text{Gd}_{0,2}\text{La}_{0,2}\text{FeO}_3$ - BDEGLFO) foi sintetizado utilizando a técnica de moagem em altas energias seguida de tratamento térmico rápido a altas temperaturas. O objetivo do estudo foi investigar a influência dessas substituições na estabilidade da ferrita de bismuto, bem como na modificação de sua estrutura cristalina. Foram realizadas análises estruturais para avaliar as mudanças cristalográficas, visando entender melhor o comportamento do material sob diferentes condições de processamento.

INTRODUÇÃO

Materiais multiferroicos, que exibem mais de um tipo de ordem ferroica simultaneamente, como ferromagnetismo, ferroeletricidade e ferroelasticidade, têm atraído grande interesse por seu potencial para aplicação em dispositivos de armazenamento de dados, sensores e atuadores (GOTARDO, 2011). Entre esses materiais, as perovskitas destacam-se por sua estrutura cristalina versátil, que permite a interação entre propriedades elétricas e magnéticas, facilitando a modulação de suas características para aplicações específicas. Um exemplo notável é a ferrita de bismuto (BiFeO_3 - BFO), que, devido à sua estrutura cristalina (perovskita romboédrica à temperatura ambiente), possui propriedades elétricas e magnéticas únicas, além de uma alta temperatura de Curie, tornando-a ideal para aplicações em dispositivos que operam em condições extremas. A substituição catiônica da ferrita de bismuto com elementos como o titanato de chumbo (PbTiO_3)

pode melhorar significativamente suas propriedades, como a condutividade elétrica, além de influenciar/introduzir transições de fase estruturais e a estabilidade térmica (GOTARDO, 2011) (ASTRATH, 2020). Recentes estudos demonstram que o uso de terras raras pode aprimorar as propriedades ferroelétricas, estabilidade estrutural, características dielétricas e entropia configuracional do BiFeO_3 , tornando-o promissor para aplicações tecnológicas avançadas (NI; BAO; et al., 2023). Nesse contexto, o estudo de óxidos de alta entropia ganha relevância significativa, uma vez que esses materiais não apenas apresentam uma entropia configuracional elevada, mas também desempenham um papel crucial na estabilização da fase e na manutenção de propriedades desejáveis (AAMLID, S. S; et al., 2023). A investigação dessas características em óxidos de alta entropia pode ser fundamental para o avanço na descoberta de novos materiais com funcionalidades aprimoradas, potencializando assim a inovação em diversas aplicações tecnológicas. Como discutido em estudos atuais, o aumento na entropia, especialmente em materiais dopados, contribui para a estabilidade e a funcionalidade em condições extremas. Esse papel crítico da entropia é corroborado por pesquisas que exploram como distorções locais e o arranjo de cátions em óxidos de alta entropia afetam positivamente suas propriedades e estabilidade estrutural. Neste trabalho, a pesquisa foi conduzida com o objetivo de desenvolver um óxido com características multiferroicas aprimoradas, superando as propriedades naturais do BFO. O foco foi não apenas em modificar essas características, mas também em garantir a sua estabilidade. No decorrer deste trabalho, será exposto o processo para a obtenção desse material, que inclui técnicas específicas de síntese e tratamento térmico empregados para alcançar as propriedades desejadas e assegurar seu desempenho consistente em diversas condições.

MATERIAIS E MÉTODOS

A síntese do óxido foi realizada pelos processos de moagem em altas energias e tratamento térmico à altas temperaturas. Utilizando como base BiFeO_3 , modificado com os elementos terra-rara Disprósio, Érbio, Gadolínio, e Lantânio, resultando na formação do composto $\text{Bi}_{0,2}\text{Dy}_{0,2}\text{Er}_{0,2}\text{Gd}_{0,2}\text{La}_{0,2}\text{FeO}_3$ (BDERGLFO). Inicialmente, as quantidades dos precursores foram medidas em uma balança de precisão, seguindo rigorosamente a estequiometria estabelecida para a síntese. Os elementos pesados foram então transferidos para um almofariz de ágata, onde foram submetidos a maceração manual por aproximadamente 15 minutos. Em seguida, o material foi submetido a uma moagem em altas energias, realizada em um moinho de bolas planetário de alta energia Retsch PM 100/200 por 1 hora a uma rotação de 200 rpm. Esse processo reduz o tamanho das partículas, promove uma mistura homogênea dos componentes e pode induzir alterações na estrutura cristalina e na formação de

fases metastáveis. A moagem intensa também aumenta a área de superfície do material e pode introduzir defeitos estruturais, potencializando suas propriedades reativas e funcionais. Após o processo de moagem, foram confeccionadas pastilhas de 0,3 g utilizando uma prensa hidráulica manual. Essas pastilhas foram então preparadas para tratamento térmico, sendo mantidas em um forno com a temperatura constante de 1100°C por 3 horas. Por fim, as amostras foram submetidas a análise e caracterização estrutural utilizando um difratômetro de raios X Shimadzu XRD 7000.

RESULTADOS E DISCUSSÃO

Após a finalização do processo de síntese, o óxido obtido foi submetido à análise por difração de raios X com o objetivo de determinar sua estrutura cristalina. Na figura 1 (a), é apresentada a análise inicial, focada na identificação das fases do BFO, evidenciando as características estruturais durante as etapas iniciais do processo. Já na figura 1 (b), são apresentados os dados referentes ao material final obtido, onde é possível identificar as subfases presentes. A determinação precisa da estrutura cristalina é essencial para a compreensão das propriedades do material, destacando a importância dessa análise no contexto do experimento realizado.

(a) BiFeO_3 - Grupo espacial $R3c$. (b) $\text{Bi}_{0,2}\text{Dy}_{0,2}\text{Er}_{0,2}\text{Gd}_{0,2}\text{La}_{0,2}\text{FeO}_3$ - Grupo espacial $Pbma$

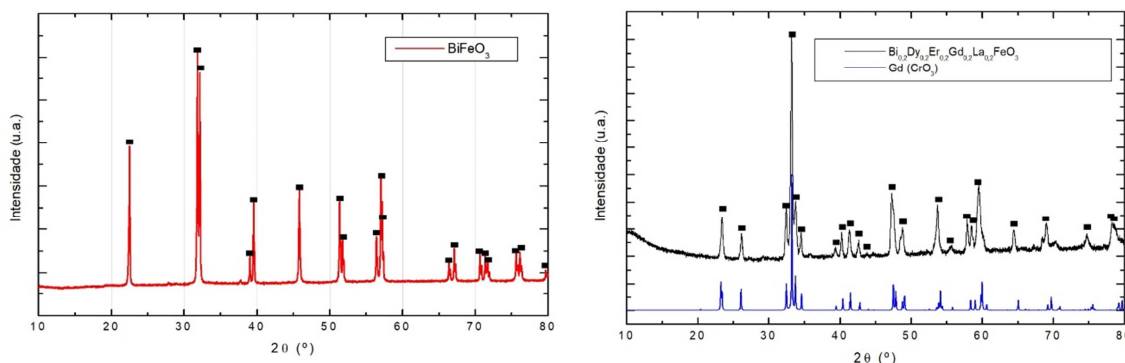


Figura 1 (a) – Difrátograma apresentando as fases do BFO. **(b)** – Difrátograma apresentando as fases do BDEGLFO.

A síntese foi bem-sucedida, resultando em um material monofásico com estrutura perovskita e grupo espacial $Pbma$, o que confirma a eficácia do processo de síntese empregado. Este é um excelente indicativo de que o objetivo foi alcançado. A perspectiva positiva é que, ao realizar medições das propriedades elétricas e magnéticas desse novo material, ele apresente características distintas em relação ao BFO, abrindo possibilidades para novas aplicações tecnológicas.

CONCLUSÕES

Concluimos que a modificação com terras-raras e a modificação na configuração estrutural do BDEGLFO resultaram em uma mudança significativa na estrutura cristalina, conforme era esperado. Também foi observada uma alteração nas fases, o que sugere que a perovskita aceitou cinco diferentes átomos no sítio A. Embora a caracterização completa do material ainda não tenha sido concluída, é crucial ressaltar que tanto o desenvolvimento quanto uma análise mais detalhada desse composto apresentam um grande potencial para futuras aplicações tecnológicas. As alterações estruturais observadas sugerem que este material pode atender às necessidades crescentes por novas soluções em diversos campos, especialmente em tecnologias avançadas, abrindo portas para inovações e aprimoramentos significativos em dispositivos que demandam propriedades específicas e eficientes.

AGRADECIMENTOS

A Fundação Araucária pelo suporte financeiro.

REFERÊNCIAS

AAMLID, S. S.; OUDAH, M.; *et al.* Understanding the Role of Entropy in High Entropy Oxides. **Journal of the American Chemical Society**, 2023, 145 (11), 5991-6006
DOI: 10.1021/jacs.2c11608. Acesso em: 24 ago. 2024.

ASTRATH, E. A. C. **Desenvolvimento, descrição e caracterização (estrutural, elétrica e fotovoltaica) de filmes finos de solução sólida (0,6) BiFeO₃ – (0,4)PbTiO₃**. Orientador: Prof. Dr. Ivair Aparecido Dos Santos. 2020. Tese (Doutorado em Física) - Universidade Estadual de Maringá, Maringá, 2020.

GOTARDO, R. A. M. **Mecanismos de Ferroeletricidade em Materiais Multiferroicos Magnetoelétricos**. Orientador: Prof. Dr. Ivair Aparecido Dos Santos. 2011. Tese (Doutorado em Física) - Universidade Estadual de Maringá, Maringá, 2011.

NI, B.; BAO, A.; GU, Y.; *et al.* High-entropy enhanced room-temperature ferroelectricity in rare-earth orthoferrites. **Journal of Advanced Ceramics**, 2023, 12(4): 724-733. <https://doi.org/10.26599/JAC.2023.9220715>. Acesso em: 30 jul. 2024.