SÍNTESE DE PEROVSKITAS DE ALTA ENTROPIA COM INSERÇÃO DE PONTOS QUÂNTICOS DE CARBONO

João Otavio Rodrigues Pereira (PIBIC/UEM), Lucas Spessato de Souza (Orientador). E-mail: ra112682@uem.br

Universidade Estadual de Maringá, Departamento de Química, Maringá, PR.

Área e subárea do conhecimento: Ciências Exatas e da Terra / Química

Palavras-chave: materiais cerâmicos; análises físico-químicas; materiais híbridos.

RESUMO

Foi sintetizada uma perovskita de alta entropia La(CoFeNiCrAl)O□ modificada com Ponto quânticos de carbono (PQCs) por rota hidrotermal, seguida de calcinação a 900 °C. As caracterizações mostraram maior organização estrutural e redução da área superficial após a calcinação. Mesmo com menor área superficial, P2C apresentou a maior resposta eletroquímica (~0,08 mA), demonstrando o potencial dos materiais obtidos.

INTRODUÇÃO

As perovskitas (ABO□) são materiais cerâmicos de interesse devido às suas propriedades estruturais, ópticas, elétricas e catalíticas (CAO et al., 2024). As perovskitas de alta entropia destacam-se pela incorporação de múltiplos cátions em proporções aproximadamente equimolares, possibilitando propriedades físico-químicas diferenciadas (BANERJEE et al., 2020). Os pontos quânticos de carbono apresentam propriedades luminescentes e eletrônicas que podem modificar materiais inorgânicos. Nesse contexto, este trabalho teve como objetivo desenvolver uma perovskita de alta entropia modificada com PQCs por síntese hidrotermal,

seguida de tratamento térmico e caracterizações físico-químicas e eletroquímicas, visando avaliar os efeitos da incorporação das espécies carbonáceas nas propriedades do material.

MATERIAIS E MÉTODOS

A perovskita de alta entropia foi sintetizada por rota hidrotermal a partir de La(NO□)□·6H□O, Fe(NO□)□·9H□O, Co(NO□)□·6H□O, Ni(NO□)□·6H□O, Cr(NO□)□·9H□O e Al(NO□)□·9H□O, em proporção equimolar dos cátions do sítio B. Os precursores foram dissolvidos em água com ácido cítrico, EDTA e ureia, após ajuste do pH em 5.5 com hidróxido de amônio, a amostra seguiu para o tratamento hidrotermal a 180°C por 12h e calcinação a 900°C por 8h em forno mufla. Os PQCs foram obtidos por tratamento hidrotermal de açúcar e incorporados à perovskita, sendo sua solução usada como meio reacional. Os materiais foram caracterizados por Difração de raios X (DRX), Espectroscopia de infravermelho por transformada de Fourier (FTIR), Espectroscopia Raman, adsorção/dessorção de N□ e voltametria cíclica.

RESULTADOS E DISCUSSÃO

A análise de DRX figura 1, mostrou que P1 e P2 apresentaram baixa cristalinidade antes da calcinação. Após o tratamento a 900 °C, P1C e P2C apresentaram picos de difração mais definidos, indicando aumento da cristalinidade e formação de uma estrutura inorgânica mais organizada. A similaridade entre os difratogramas indica que os PQCs não alteraram significativamente a estrutura cristalina.

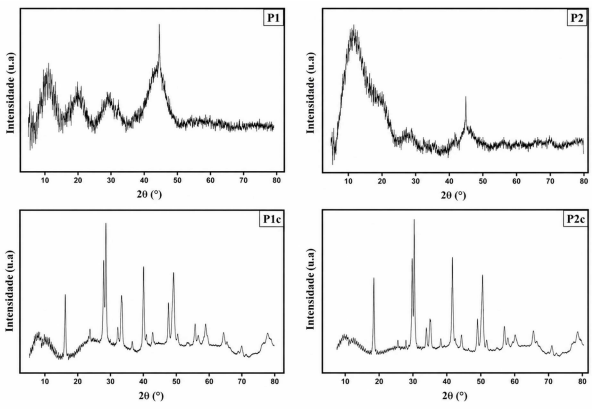


Figura 1. Difratogramas de raios X das amostras P1, P2, P1C e P2C.

Os espectros de FTIR figura 2, mostraram bandas de grupos orgânicos nas amostras precursoras. Após a calcinação, essas bandas diminuíram, predominando as vibrações metal–oxigênio. A similaridade entre P1C e P2C indica que os PQCs não alteraram significativamente a composição química superficial após o tratamento térmico.

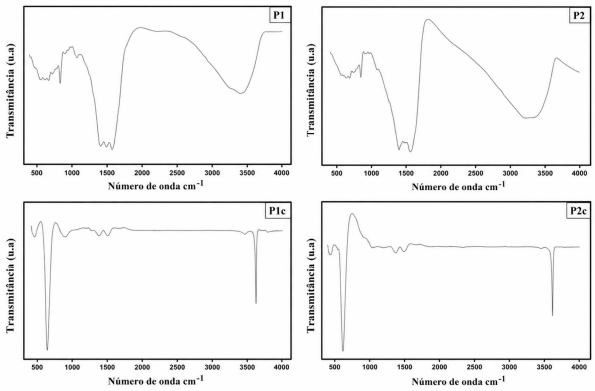


Figura 2. Espectros de FTIR das amostras P1, P2, P1C e P2C.

De maneira semelhante, as análises Raman, Figura 3, das amostras precursoras foram prejudicadas pela intensa fluorescência, enquanto os materiais calcinados apresentaram sinais mais definidos relacionados às vibrações da rede inorgânica. A redução das contribuições associadas às espécies orgânicas após a calcinação reforça os resultados obtidos por DRX e FTIR, indicando maior organização estrutural após o tratamento térmico.

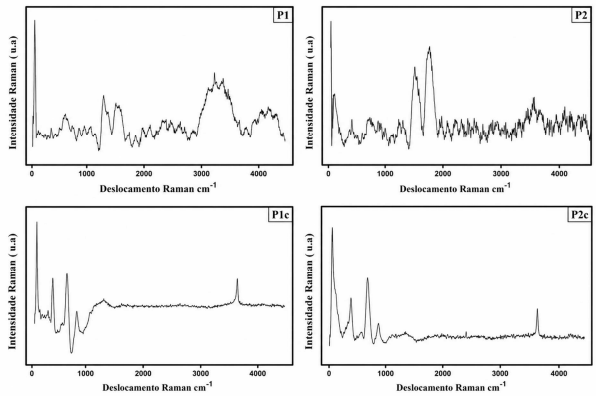


Figura 3. Espectros Raman das amostras P1, P2, P1C e P2C.

A porosimetria de N□ revelou redução da área superficial após a calcinação, de 52 para 26 m² g⁻ ¹ em P1 e de 44 para 18 m² g⁻ ¹ em P2, associada ao

crescimento e à sinterização das partículas. Mesmo com a menor área superficial, P2C apresentou a maior resposta eletroquímica (~0,08 mA).

CONCLUSÕES

A síntese hidrotermal permitiu obter as perovskitas, e a calcinação a 900 °C aumentou a cristalinidade. Os PQCs reduziram a área superficial, mas P2C apresentou maior resposta eletroquímica, mostrando que o desempenho depende também das características estruturais, superficiais e eletrônicas.

AGRADECIMENTOS

Ao Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPq), à Fundação Araucária e à Universidade Estadual de Maringá (UEM) pela concessão da bolsa e pelo apoio ao desenvolvimento da pesquisa. Ao Departamento de Química da UEM e ao orientador pelo suporte científico e técnico durante a realização do projeto.

REFERÊNCIAS

BANERJEE, Ritwik; CHATTERJEE, Sabitabrata; RANJAN, Mani; *et al*. High-Entropy Perovskites: An Emergent Class of Oxide Thermoelectrics with Ultralow Thermal Conductivity. **ACS Sustainable Chemistry &amp**; Engineering, v. 8, n. 46, p. 17022–17032, 2020.

CAO, Jingrui; WU, Shibo; HE, Jiahao; *et al*. Research progress of high-entropy perovskite oxides in energy and environmental applications: **A review. Particuology**, v. 95, p. 62–81, 2024.