

SÍNTSE E CARACTERIZACAO DE BISMUTATO DE FERRO PARA UTILIZAÇÃO EM CÉLULAS FOTOVOLTAICAS

WESLEY RADTKE SCHWARTZ¹; LUCAS ROBERTO DI SALVO MELLO¹;
CAROLINA ELICKER²; SERGIO DA SILVA CAVA^{1,2}

¹*Engenharia de Materiais, Centro de Desenvolvimento Tecnológico, Universidade Federal de Pelotas – wesleyschwartz@hotmail.com; lrsmello.lucas@gmail.com*

²*Programa de Pós-Graduação em Ciência e Engenharia de Materiais, Centro de Desenvolvimento Tecnológico, Universidade Federal de Pelotas - carolinaelicker@yahoo.com.br; sergiocava@gmail.com*

1. INTRODUÇÃO

O Sol é a fonte de energia primária mais abundante para nosso planeta. A quantidade de radiação solar que atinge a superfície terrestre anualmente equivale a 7.500 vezes o consumo de energia primária de sua população. Se apenas 0,1% da energia solar pudesse ser convertida com uma eficiência de 10%, ainda assim a energia gerada seria quatro vezes maior que a capacidade mundial total de geração de energia, uma ordem de grandeza maior que a soma de todas as fontes não renováveis, incluindo os combustíveis fósseis e nucleares (VICHI e MANSOR, 2009).

A atual produção de células solares é dominada por módulos de silício cristalino devido às suas técnicas de fabricação maduras e relativamente alta eficiência. No entanto, materiais com mecanismos fotovoltaicos novos estão sendo explorados na busca de baixo custo ou a melhoria da eficiência (CAO *et al.*, 2012). Estudos realizados por Grinberg e colaboradores (2013) sugerem perovskitas ferroelétricas como uma classe de materiais ideal para a criação destes novos dispositivos fotovoltaicos. Isto é possível uma vez que a inata polarização espontânea nestes materiais que cria campos elétricos microscópicos através dos domínios ferroelétricos, que separa e transporta as cargas geradas a partir da irradiação solar (BUTLER, FROST e WALSH, 2015).

O Bismutato de ferro (BiFeO_3 , BFO) é um exemplo único de material ferroelétrico multiferroico, pois mostra simultaneamente propriedades magnéticas (antiferromagnéticas), ferroelásticas e ferroelétricas à temperatura ambiente. Recentemente, as propriedades fotoelétricas de BiFeO_3 têm gerado muito interesse principalmente por causa de seu baixo *bandgap* (2,7 eV, na região do visível do espectro eletromagnético). Este material permite tensões fotogeradas excedendo várias vezes o *bandgap*, o que o torna atraente para aplicações em dispositivos fotovoltaicos (ALEXE e HESSE, 2011).

Síntese por reação de combustão tem se destacado como um método importante para a produção de cerâmicas avançadas, catalisadores, compósitos, ligas, compostos intermetálicos e nanomateriais (PATIL, ARUNA e MIMANI, 2002). Por ser uma reação simples, rápida e auto propagada e de baixo custo financeiro (ARUNA e MUKASYAN, 2008), a reação de combustão possui vantagens quando comparado com outros métodos de síntese. A combustão acontece por meio de reações exotérmicas e tem como principal característica ser autossustentável após o início da reação, pois não é necessária uma fonte externa para fornecer calor no decorrer da reação. Esse calor é gerado pela própria reação. Além disso, as altas temperaturas que são atingidas garantem a cristalização e a formação de pós com alto grau de pureza em um curto espaço de tempo, homogeneidade química e quase sempre em escala manométrica (ALVES *et al.*, 2009). Este

método também permite a utilização de diversos combustíveis, tais como uréia, sacarose, ácido cítrico, amido, oxalil-di-hidrazida (ODH), dentre outros.

O objetivo deste trabalho é a síntese de BiFeO₃ pelo método de combustão em solução, investigando a influência do combustível na formação do produto e no tamanho de partícula obtido.

2. METODOLOGIA

Óxido de zinco (ZnO) foi preparado através do método de combustão em solução, utilizando nitrato de bismuto pentahidratado e nitrato de ferro nonohidratado como oxidantes e uréia, sacarose e ácido cítrico como combustíveis. As quantidades de combustível e oxidante foram calculadas de acordo com o determinado por Jain e colaboradores (1981).

Bismutato de Ferro (BiFeO₃) foi preparado através do método de combustão em solução, utilizando nitratos de bismuto pentahidratado e de ferro nonohidratado como oxidante e como combustíveis foi utilizado dois tipos de combustíveis a sacarose e o ácido cítrico anidro. As quantidades de combustível e oxidante foram calculadas de acordo com o determinado por JAIN et al. (1981).

O procedimento experimental adotado seguiu as recomendações de GARCIA (2011). Primeiro, dissolveu-se os nitratos de bismuto e ferro em água destilada a 60°C sob agitação constante. Posteriormente foram realizados dois tratamentos onde no primeiro foi adicionado sacarose, no segundo ácido cítrico anidro. Os sistemas foram mantidos sob aquecimento e agitação para garantir a homogeneização dos reagentes. As amostras foram então transferidas para o forno mufla (Quimis, modelo Q318M21), previamente aquecido a 400°C. As reações de combustão foram executadas em capela para a exaustão dos produtos gasosos da reação.

Após o término da reação, os produtos foram resfriados a temperatura ambiente e cominuídos com auxílio de almofariz e pistilo, e então peneirados em malha #325 (abertura de 44 µm) antes de serem caracterizados.

3. RESULTADOS E DISCUSSÃO

As caracterizações morfológicas e estruturais estão em andamento. A estrutura cristalina dos pós será elucidada por Difração de Raios-X (Bruker D8 Advance) e a identificação das fases presentes será feita por comparação com as fichas cristalográficas JCPDS-ICDD (*Joint Committee on Powder Diffraction Standards – International Center of Diffraction Data*). A microestrutura superficial será analisada em Microscópio Eletrônico de Varredura (Jeol, JSM - 6610LV) e o *bandgap* será determinado por Espectroscopia Ótica na faixa do ultravioleta-visível.

4. CONCLUSÕES

Foi possível obter os pós de BFO a partir do método de combustão em solução empregando os combustíveis estudados. Os pós estão sendo caracterizados.

5. REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

ALEXE M.; HESSE D. Tip-enhanced photovoltaic effects in bismuth ferrite. **Nature Communications**, v. 2, p. 256, 2011.

ALVES C. T.; BASTOS L. S.; MACÊDO L. S.; ANDRADE, H. M. C. Síntese através do método de combustão do aluminato de zinco ($ZnAl_2O_4$) como catalisador heterogêneo da produção de biodiesel. In: **VIII CONGRESSO BRASILEIRO DE ENGENHARIA QUÍMICA EM INICIAÇÃO CIENTÍFICA**. Uberlândia, 2009.

ARUNA T. S.; MUKASYAN A. S. Combustion synthesis and nanomaterials. **Current Opinion in Solid State Materials Science**, v. 12, n. 3, p. 44-50, 2008.

BUTLER, K. T.; FROST, J. M.; WALSH, A. Ferroelectric materials for solar energy conversion: photoferroics revisited. **Energy & Environmental Science**, v. 8, n. 3, p. 838-848, 2015.

CAO D.; WANG C.; ZHENG F.; DONG W.; FANG L.; SHEN M. High-Efficiency Ferroelectric-Film Solar Cells with an n-type Cu_2O Cathode Buffer Layer. **Nano Letters**, v. 12, n. 6, p. 2803-2809, 2012.

GARCIA, A.P. **Síntese de óxido de zinco nanoestruturado por combustão em solução e caracterização de propriedades microestruturais e atividade fotocatalítica**, Dissertação (Mestrado em engenharia) – Programa de Pós-graduação em Engenharia de Minas, Metalúrgica e de Materiais, UFRGS, 2011.

GRINBERG, I.; VINCENT WEST, D.; TORRES, M.; GOU, G.; STEIN, D. M.; WU, L.; CHEN, G.; GALLO, E. M.; AKBASHEV, A. R.; DAVIES, P. K.; SPANIER, J. E.; RAPPE, A. M. Perovskite oxides for visible-light-absorbing ferroelectric and photovoltaic materials. **Nature**, v. 503, n. 7477 p. 509-512, 2013.

JAIN, S. R.; ADIGA, K. C.; PAI VERNEKER, V. R. A new approach to thermochemical calculations of condensed fuel-oxidizer mixtures. **Combustion and Flame**, n. 40, p. 71-79, 1981.

PATIL K. C.; ARUNA S. T.; MIMANI T. Combustion synthesis: an update. **Current Opinion in Solid State Materials Science**, v. 6, n. 6, p. 507-512, 2002.

VICHI F. M.; MANSOR M. T. C. Energia, meio ambiente e economia: o Brasil no contexto mundial. **Química Nova**, v. 32, n. 3, p. 757-767, 2009.