

NIOBATO DE POTÁSSIO PARA APLICAÇÕES EM DISPOSITIVOS FOTOVOLTAICOS

**FRANCIELEN SAN MARTINS RODRIGUES¹; MATEUS MONTEIRO MARQUES²;
LUCAS RAFAEL QUIRINO DE ANDRADE³; CÁTIA LIANE ÜCKER⁴; CRISTIANE
RAUBACH RATMANN⁵; SÉRGIO DA SILVA CAVA⁶**

¹Universidade Federal de Pelotas – francielensmr2@hotmail.com

²Universidade Federal de Pelotas – mateusmarques99m@gmail.com

³Universidade Federal de Pelotas – lucajac2009@hotmail.com

⁴Universidade Federal de Pelotas – catiaucker@gmail.com

⁵Universidade Federal de Pelotas – craubach.iqg@ufpel.edu.br

⁶Universidade Federal de Pelotas – sergiocava@gmail.com

1. INTRODUÇÃO

Como fonte de energia renovável, as células solares são uma alternativa de energia inesgotável (SAGADEVAN 2013). Células solares sensibilizadas por corantes (DSSC), pertencem a 3º geração e são constituídas de diversos componentes que permitem a absorção de luz (YAN 2014).

Óxidos do tipo perovskitas por apresentarem interessantes propriedades físicas, tem-se apresentado como fortes candidatas para dispositivos elétricos (MOUYANE 2014).

O niobato de potássio ($KNbO_3$) é um material ferroelétrico do tipo perovskita, que apresenta propriedades piezoelectricas e eletro-ópticas, devido a essas propriedades tem-se realizado estudos que visam um maior esclarecimento de suas propriedades (KOMATSU 2014 e SHOMRAT 2015).

Recentemente foi-se demonstrado que o bandgap de $KNbO_3$ pode ser reduzido com aplicação de dopantes. O $KNbO_3$ isento de dopantes, apresenta um bandgap de 3,2 eV, enquanto com a inserção de um dopante o bandgap é de 2,2eV. Estes valores indicam que a presença de metais de transição não é necessária para que haja a diminuição do bandgap (CHIGUERU 2000).

2. METODOLOGIA

Preparação das amostras: Os pós serão preparados usando precursores de alta pureza: hidróxido de potássio - KOH e oxalato de nióbio e amônio – $(NH_4[NbO(C_2O_4)_2(H_2O)])$. Para a adição de Fe^{3+} , será utilizado o nitrato de ferro - $Fe(NO_3)_3$, resultando em diferentes composições a base de $KNb_{1-2x}Fe_{2x}O_{3-2x}$ onde $x=0; 0,02; 0,04; 0,06; 0,1; 0,2$.

Síntese Hidrotermal assistida por micro-ondas

O composto $KNbO_3$ será sintetizado e caracterizado no laboratório de Crescimento de Cristais Avançados e Fotônica (CCAF), conforme as seguintes etapas:

Os precursores serão diluídos em água deionizada a temperatura de 50°C sob agitação em uma capela fechada, resultando em soluções de 0,05 mol.L⁻¹ dos precursores, às quais serão adicionados 50mL de soluções KOH 6 mol.L⁻¹ e a mistura homogeneizada. As soluções resultantes serão transferidas para copos de Teflon® com volume de 110mL até que seja preenchido cerca de 90% do seu volume, visando a obtenção de máxima eficiência auto-gerada. A cela reacional será selada hermeticamente e acondicionada na cavidade de um sistema irradiador de micro-ondas (MAH) (ALMEIDA 2008).

Os parâmetros a serem variados são: (I) Temperatura; (II) Taxa de aquecimento; (III) Tempo de patamar, visando à identificação das melhores condições operacionais que resultem nas características morfológicas e estruturais e nas propriedades ideias dos compostos obtidos.

Após, será retirado o copo do (MAH) e resfriado a temperatura ambiente, o conteúdo contido na cela reacional, será lavado continuamente com água destilada, até que seu pH atinja 7. Assim que o pH desejado seja alcançado, será feito uma última lavagem, dessa vez com etanol. Feito esse processo, óxidos então serão colocados em uma estufa a 60°C e mantidos por 12h, sendo após acondicionados à caracterização.

Caracterização da perovskita KNbO_3

Caracterização e estrutura cristalina: A cristalinidade dos pós cerâmicos será avaliada por Difração de Raio-X (DRX) usando um difratômetro Shimadzu XRD 6000 com uma fonte de radiação Cu ($\lambda=0,15418$ nm).

Caracterização das características vibracionais: Os espectros de Raman das cerâmicas serão obtidos com um espectrômetro Confocal Raman (Voyage, BWTEK) com um comprimento de onda de excitação de 785 nm, e resolução espectral de 3 cm^{-1} , operando a temperatura ambiente. Isto irá facilitar o acesso a pequenas distorções que não são resolvidas por DRX.

Caracterização das características e da sub-estrutura do grão: Através do MEV (Microscopia Eletrônica de Varredura – JSM-6610LV, JEOL, Japan) operando a 15 kV com microsonda EDS, será avaliada a morfologia e o tamanho de grão. Com o MET (Microscopia Eletrônica de Transmissão – utilizando um microscópio da marca Phillips modelo CM 20) será estudada a sub-estrutura (subgrão) enfatizando os tamanhos dos domínios e a densidade das paredes do domínio.

Caracterização do bandgap: Espectros de reflectância difusa foram obtidos por um espectrômetro UV-Vis (Varian Cary 5000, USA), na faixa de comprimento de onda de 200-800 nm: o bandgap óptico das amostras foram estimados pela equação de Tauc model, usando a interseção de linhas tangentes em um gráfico de $(\alpha h\nu)^2$ versus $h\nu$, onde α é o coeficiente de absorção, h é a constante de Planck e ν é a velocidade da luz.

3. RESULTADOS E DISCUSSÃO

O KNbO_3 foi sintetizado por meio do método de síntese hidrotermal assistida por micro-ondas (MAH), analisando sua influência nas propriedades do material.

Foi investigado o efeito da inserção de dopantes Fe^{+3} na distorção local da rede cristalina e polarização do KNbO_3 e criação de lacunas de oxigênio no bandgap.

É esperado que as propriedades elétricas obtidas dos pós cerâmicos através das caracterizações apresentem uma eficiência baseada na média das já existentes, possibilitando assim que a perovskita KNbO_3 possa ser aplicada em dispositivos aumentando a eficiência e características deste.

Com o resultado obtido neste trabalho foi possível notar as influências do método de síntese e adição de metais de transição no bandgap.

Além disso, a possibilidade de desenvolver este projeto através da bolsa de iniciação tecnológica promove que o conhecimento seja expandido através das pesquisas por bibliografias e documentos especializados e incentivando a inovação e competitividade brasileira.

4. CONCLUSÕES

A síntese hidrotermal assistida por micro-ondas apresenta grande benefício tanto aos pesquisadores quanto meio ambiente. O consumo de energia é extremamente baixo em relação aos métodos tradicionais, o tempo necessário para a produção dos óxidos desejados é extremamente baixo e a água é um solvente abundante e atóxico. A dopagem utilizando-se deste método de síntese é um processo bastante viável e preciso ampliando as propriedades dos óxidos cerâmicos, principalmente das perovskitas.

Contudo, o trabalho se mantém em andamento.

5. REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- S. Sagadevan, Reviews on Advanced Materials Science 34 (2013) 44.
J. Yan, B.R. Saunders, Rsc Advances 4 (2014) 43286.
M. Mouyane, B. Itaalit, J. Bernard, D. Houivet, J.G. Noudem, Powder Technology 264 (2014) 71.
R. Komatsu, N. Masuda, M. Ueda, H. Itoh, Journal of Crystal Growth 401 (2014) 772.
N. Shomrat, S. Baltianski, C.A. Randall, Y. Tsur, Journal of the European Ceramic Society 35 (2015) 2209
T. Chigueru, Atlas Solarimétrico do Brasil - banco de dados terrestres, Editora Universitária da UFPE, Recife, 2000
D.K.A. ALMEIDA, D.P. VOLANTI, E. LONGO, J.A. VARELA, Aparato assistido por microondas para síntese hidrotérmica de óxidos nanoestruturados, PI0815393-0 A2, Brazil, 2008.