cbecimat26
26° Congresso Brasileiro de Engenharia e Ciência dos Materiais
22 a 26 de novembro de 2026
Costão do Santinho
Florianópolis-SC

$KBiFe_2O_5$: sínteses e suas influências na morfologia da fase

Márcio R. Morelli[1]; Jhonata Rafael Verza[2]
1.; 2. Universidade Federal de São Carlos – Departamento de Engenharia de Materiais

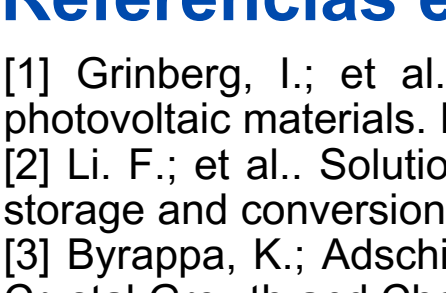
Introdução

A eficiência fotovoltaica de células solares compostas por semicondutores ferroelétricos tem sido limitada, há muito tempo, por seus elevados band-gaps (Eg), na ordem de 2,7 a 4 eV [1], o que permite a absorção de apenas 8% a 20% do espectro solar. Óxidos ferroelétricos com band-gaps menores como a perovskita $KBiFe_2O_5$ (Eg = 1,60 eV), demonstraram a viabilidade em dispositivos fotovoltaicos e podem ser preparados por síntese química. A Síntese por Combustão em Solução (SCS) ocorre de forma auto-propagável, atingindo elevadas temperaturas em tempos muito curtos permitindo a obtenção de pós com elevada área superficial e pureza [2]. Também a síntese química hidrotérmica ocorre em solução sobre pressões superiores à atmosférica e temperaturas elevadas produzindo pós com partículas na escala nanométrica [3].

Objetivos

Sintetizar a fase $KBiFe_2O_5$ por meio de dois métodos de síntese química, por combustão em solução (SCS) e hidrotérmica, e avaliar as influências desses métodos no pó obtido.

Metodologia



SCS

Mistura de Precursores (Íons Metálicos)

Precursores+combustível aquecidos 1 hora a 60°C

A temperatura aumentada até 300°C

A solução foi a mufla a 600°C por 15 minutos

Produto solido foi desaglomerado

Calcinacão a 750°C/1h

Hidrotérmica

Nitratos + KOH

Agitação magnética 1 h

A mistura foi para um reator (70% capacidade)

Reação por 72hs a 220°C

O produto foi lavado e filtrado

O pó final foi seco a 110ºC/24hs

Difração de raios X, SEM, Espectroscopia ultravioleta-visível

Resultados e Discussão

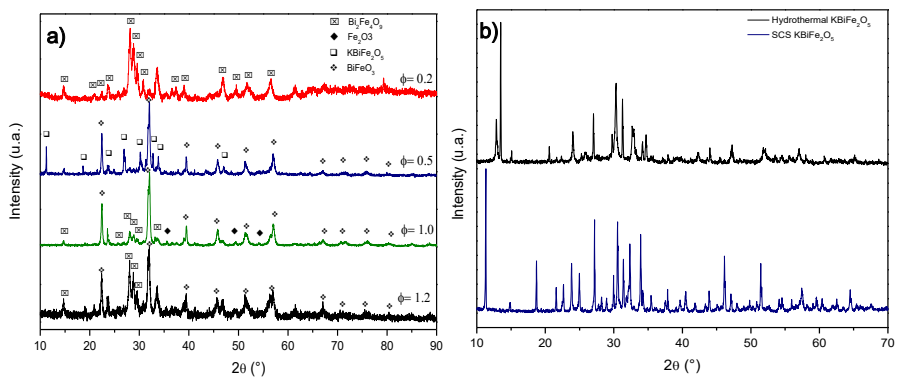


Figura 1. DRX *a)* KBFO por SCS e diferentes quantidades de combustível e calcinado a 750 ºC/1 h; *b)* KBFO pelo método hidrotérmico.

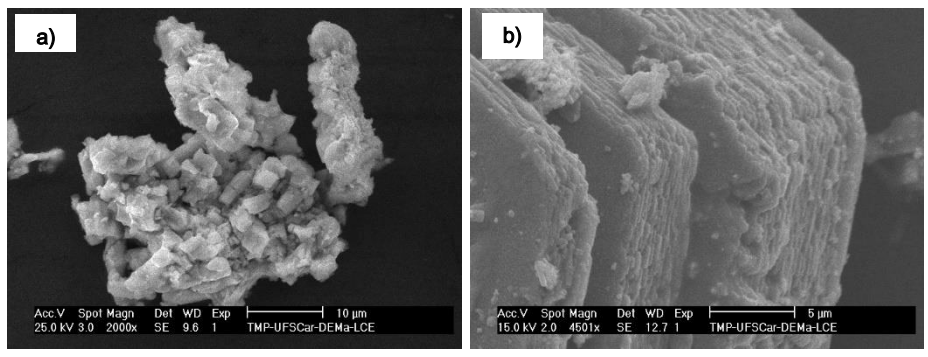


Figura 2. Micrografias de pós de KBFO obtidos por *a)* SCS e calcinado a 750 °C/1 h e *b)* por síntese hidrotérmica. h.

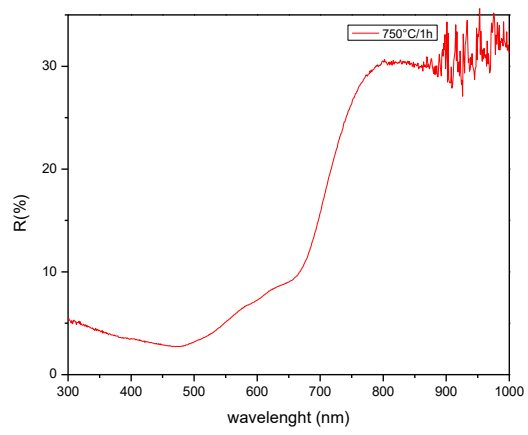


Figura 3. Espectroscopia de reflectância difusa no UV-Vis – função de Kubelka-Munk em função de hv para o KBFO sintetizado por SCS e calcinado a 750 ºC/1 h.

Conclusões

O band-gap do KBFO obtido a 750 °C pela rota SCS é adequado para aplicações fotovoltaicas devido ao seu valor menor (1,75 eV);
Embora se tenha obtido a fase desejada relatando-se, pela primeira vez, a síntese de KBFO via SCS, essa rota ainda comporta melhorias que possam permitir obter pós com partículas de menor tamanho, eliminando a etapa de calcinação;
A fase KBFO, com estrutura ortorrômbica, foi obtida por meio de método hidrotérmico; contudo, são necessários mais estudos.

Referências e Agradecimentos

[1] Grinberg, I.; et al.. Perovskite oxides for visible-light-absorbing ferroelectric and photovoltaic materials. Nature, 509–12, 2013.
[2] Li. F.; et al.. Solution combustion synthesis of metal oxide nanomaterials for energy storage and conversion. Nanoscale 7,17590–17610, 2015.
[3] Byrappa, K.; Adschiri, T.. Hydrothermal technology for nanotechnology., Progress in Crystal Growth and Characterisation of Materiais, 53, 117-166, 2007.

Agradecimentos a CAPES (proc. 2018/06232-4) e CNPq (proc. 316667/2021-8)