

**10-010**

**Estudo Teórico-Experimental para o Sistema Ternário  $Pb_{1-(x+y)}Ca_xSr_yTiO_3$ : Um Cálculo Ab-initio**

Gouveia, A. F.(1); Pontes, F.M(1); Sambrano, J.R.(1); Longo. E.(2)  
(1) UNESP-FC; (2) UNESP-IQ

Neste trabalho foi realizado um estudo teórico-experimental sobre o sistema  $Pb_{1-(x+y)}Ca_xSr_yTiO_3$  avaliando-se a evolução estrutural e propriedades ópticas em função dos substituintes Ca e Sr na rede cristalina da matriz  $PbTiO_3$ .

Foram preparadas amostras na forma de filmes finos e pó para o sistema ternário  $Pb_{0,25}Ca_{0,50}Sr_{0,25}TiO_3$  e  $Pb_{0,25}Ca_{0,25}Sr_{0,50}TiO_3$  utilizando-se o método dos precursores poliméricos; os filmes finos foram preparados pela técnica spin-coating sobre substrato de Si/SiO<sub>2</sub>/Ti/Pt. Realizou-se a caracterização estrutural utilizando-se as técnicas de DRX, espectroscopia de micro-Raman e FT-IR. A análise dos resultados mostrou que os sistemas ternários evoluíram para uma maior simetria, em direção a estrutura cúbica do  $SrTiO_3$ .

Realizaram-se os cálculos teóricos de estrutura eletrônica em nível ab-initio para o estudo dos sistemas ternários utilizando-se o programa CRYSTAL06, associado à DFT e ao funcional híbrido, B3PW. Analisaram-se as propriedades eletrônicas e estruturais desses materiais a fim de corroborar com os resultados experimentais.