

Física

Análise de estrutura e composição de Nanopartículas via Identificação de Fase e Refinamento Rietveld

Cleber Henrique Silva Junior - 5º módulo de Engenharia de Controle e Automação, UFLA, bolsista PIBIC/CNPq.

Alexandre Alberto Chaves Cotta - Orientador DFI, UFLA. - Orientador(a)

Resumo

O campo das nanotecnologias vem crescendo e tomando grande importância no cenário tecnológico e da engenharia, pois essas estruturas apresentam propriedades únicas e diferenciadas. Algumas dessas estruturas, como as ferritas e hematita, vêm sendo utilizadas amplamente para melhora da eficiência e estabilidade de células fotovoltaicas, como as células de perovskita e células orgânicas. Após realizar a síntese química dessas nanoestruturas, é feita a caracterização, a qual visa determinar a composição da amostra e usualmente é por difração de raios x (XRD). Após a caracterização, obtém-se dados a respeito da estrutura cristalina do material analisado, sendo necessário a utilização de técnicas para analisar tais dados e determinar a composição da amostra. Essas técnicas são a identificação de fase e refinamento, destacando-se o refinamento Rietveld. Assim, este trabalho visou dar continuidade ao projeto anterior, a respeito do estudo de nanoestruturas e suas aplicações. Objetivou-se ainda o estudo, síntese e caracterização de nanoestruturas que podem ser aplicadas a confecção de células fotovoltaicas. No entanto, devido a pandemia de covid-19 não foi possível trabalhar presencialmente e passou-se a realizar estudos voltados para os processos de análise de composição pós caracterização via difração de raios x (XRD). Dessa forma, primeiramente realizou-se o estudo e análise de dados genéricos, obtidos de bancos online, por meio da linguagem Python e bibliotecas gráficas. Em seguida, foram realizadas identificações de fase e refinamentos Rietveld por meio do software Profex, para determinar a composição de amostras de ferrita de cobalto e ferrita de cobalto com polianilina. Após a realização de todos os refinamentos citados, foi possível gerar no software VESTA a estrutura tridimensional das amostras. Nos refinamentos com ferrita de cobalto, foram encontradas composições de ferrita de cobalto e maghemita para ambos os procedimentos, com um pico característico da maghemita. Assim, com os estudos e procedimento realizados foi possível constatar a vasta aplicação de nanopartículas no desenvolvimento tecnológico. Ainda, foi possível determinar a composição e estrutura de amostras de maneira condizente com o esperado, confirmando ainda que a análise pós caracterização é fundamental para determinar corretamente a composição da amostra. Agradecimentos ao Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPq), que financiou o projeto.

Palavras-Chave: nanotecnologia, caracterização, refinamento.

Instituição de Fomento: CNPq

Link do pitch: <https://youtu.be/ojx1qUwFar4>