



# II MOSTRA UFFS

## ESTUDO TEÓRICO DE PROPRIEDADES TERMODINÂMICAS DA LIGA (Ba,Sr)TiO<sub>3</sub>

VICELI, S.<sup>1</sup>; CAETANO, C.<sup>2</sup>

O titanato de bário e estrôncio, (Ba,Sr)TiO<sub>3</sub>, também conhecido como BST, é um material ferroelétrico de estrutura perovskita derivado de uma solução sólida de titanato de bário (BaTiO<sub>3</sub>) e titanato de estrôncio (SrTiO<sub>3</sub>). Esse material tem sido objeto de extensa investigação nas últimas décadas devido às suas notáveis propriedades, como alta constante dielétrica, capacidade significativa de armazenamento de carga e boa estabilidade térmica, além de sua temperatura de Curie variar de acordo com a concentração Ba/Sr presente na liga. Essas características, dentre muitas outras, conferem ao BST uma versatilidade impressionante, tornando-o adequado para uma ampla gama de aplicações em dispositivos eletrônicos e optoeletrônicos, que incluem, entre outras, a utilização em capacitores, atuadores, transdutores, sistemas de armazenamento de energia e memórias de acesso aleatório dinâmico (DRAM). Devido a essa variedade de características, foi realizada uma investigação teórica da liga BST por meio da modelagem computacional de suas propriedades termodinâmicas. A metodologia empregada consistiu na combinação de cálculos de energia de rede a partir de potenciais interatômicos e métodos estatísticos de termodinâmica de ligas. Inicialmente foi feita uma revisão bibliográfica para levantamento de dados teóricos e experimentais presentes na literatura. Em seguida, foram calculadas as constantes de rede dos compostos puros com o uso de três diferentes conjuntos de potenciais interatômicos, e os resultados foram comparados com os da literatura. A próxima etapa foi a determinação das configurações não-equivalentes da liga BST, e para todas essas configurações foram calculadas as degenerescências e as energias de rede. Por fim, foram determinadas propriedades termodinâmicas e analisada a estabilidade da liga por meio do método de aproximação quase-química generalizada (GQCA). Como resultados do trabalho, verificou-se que as constantes de rede dos compostos puros apresentaram ligeira diferença para os três conjuntos de parâmetros interatômicos usados, mas ainda assim todos muito próximos dos valores experimentais. Quanto aos parâmetros de rede da liga, foi possível verificar que a variação com a concentração de Ba/Sr apresenta um pequeno desvio da linearidade. Finalmente, a partir do método GQCA, foram determinadas a energia interna, a entropia e a energia livre da liga. Analisando-se o comportamento da energia livre com a variação da temperatura, verificou-se que a liga BST deve apresentar separação de fase para baixas temperaturas, o que está de acordo com dados experimentais e teóricos encontrados na literatura. Os resultados apontam que a metodologia empregada é promissora para o estudo da estabilidade de outras ligas de perovskitas.



ciências básicas para o  
desenvolvimento  
sustentável

<sup>1</sup>Saene Viceli. Estudante. Curso de Licenciatura em Física.

<sup>2</sup>Clóvis Caetano. Docente. Curso de Licenciatura em Física.





UNIVERSIDADE  
FEDERAL DA  
FRONTEIRA SUL

II MOSTRA DE PRODUÇÃO ACADÊMICA DA UFFS - XII SEMINÁRIO  
DE ENSINO, PESQUISA, EXTENSÃO (XII SEPE)

# II MOSTRA UFFS

**Palavras-chave:** Ligas; Perovskita; BST; Termodinâmica.

**Área do Conhecimento:** Ciências Exatas e da Terra.

**Origem:** Pesquisa.



*ciências básicas para o  
desenvolvimento  
sustentável*

