



SÍNTESE E CARACTERIZAÇÃO DO SISTEMA P2-NaFeMnO₂ DOPADO COM Mo OBTIDO PELO MÉTODO SOL-GEL

¹Arthur Lima Medeiros (PG)*, ¹Alexandre Urbano (PQ)

arthur.l.medeiros@uel.br*

¹Laboratório de Pesquisa em Filmes Finos e Materiais - Departamento de Física, Universidade Estadual de Londrina (UEL), 86057-970, Londrina, PR, Brasil.

Palavras-chave: materiais de cátodo tipo P2; baterias de íons de sódio; bandgap óptico

HIGHLIGHTS

Synthesis and Characterization of Mo-Doped P2-NaFeMnO₂ Obtained by the Sol–Gel Method.

Mo doping preserved the P2 structure and tuned the bandgap.

Enhanced electronic conductivity suggests improved cathode performance.

RESUMO

Os óxidos lamelares do tipo P2 são cátodos promissores para baterias de íons de sódio devido à sua estrutura aberta e à difusão reversível de Na⁺. O composto NaFeMnO₂ se destaca por sua abundância e atividade redox multivalente de Fe/Mn, embora seu desempenho seja limitado pela baixa condutividade e desordem estrutural. A dopagem com Mo é investigada aqui como uma estratégia para aumentar a estabilidade e ajustar o bandgap do composto P2-Na_xFe_{0.5}Mn_{0.5}O₂. As amostras foram sintetizadas pelo método sol–gel, utilizando nitrato de ferro, acetato de manganês, acetato de sódio e molibdato de amônio. Um planejamento fatorial 2² variou a temperatura de calcinação (875–925 °C) e o teor de Mo (1–3%), incluindo uma amostra de referência sem dopagem. Após a pré-calcinação a 400 °C, os pós foram tratados termicamente e caracterizados por difração de raios X (DRX) e espectroscopia de reflectância difusa. A DRX confirmou a formação da fase P2 para todas as amostras, mostrando que a incorporação de Mo preserva a estrutura lamelar. As amostras calcinadas a 875 °C apresentaram picos mais largos, indicando menor ordenamento estrutural. O bandgap variou entre 1,54 e 1,57 eV, com um valor mínimo para 2% de Mo e 900 °C, sugerindo melhora na condutividade eletrônica. A dopagem com Mo manteve a estrutura P2, modificando sutilmente suas características eletrônicas e estruturais. Esses resultados apontam o Mo como dopante promissor para melhorar a condutividade e estabilidade em cátodos baseados em NaFeMnO₂. Utilizar difração de nêutrons para complementar a difração de raios X possibilitando a localização precisa de íons leves (Na⁺ e O²⁻), a distinção entre metais de transição com números atômicos próximos e identificação da desordem estrutural, fatores essenciais para o entendimento aprofundado das estruturas e do desempenho eletroquímico do composto P2-Na_xFe_{0.5}Mn_{0.5}O₂ dopado com Mo.

AGRADECIMENTOS

Agradeço à CAPES pelo apoio financeiro por meio da bolsa de mestrado e à UTFPR pela oportunidade de apresentar o dado trabalho na COPIMAT.