

Investigação cristalográfica do niobato de potássio e estrôncio com estrutura tipo tetragonal tungstênio bronze (TTB)

Alan R. F. Lima* (IC), Marcos A. L. Nobre (PQ), Silvania Lanfredi (PQ)

Laboratório de Compósitos e Cerâmicas Funcionais – LaCCeF, Departamento de Física Química e Biologia – DFQB, Faculdade de Ciências e Tecnologia – FCT, Universidade Estadual Paulista – UNESP - C.P. 467, CEP: 19060-900, Presidente Prudente – SP

*alan_rogerio2000@yahoo.com.br

Palavras Chave: $\text{KSr}_2\text{Nb}_5\text{O}_{15}$, estrutura tipo TTB.

Introdução

Materiais cerâmicos com estrutura tipo tetragonal tungstênio bronze (TTB) apresentam alta constante dielétrica, alta polarização e propriedades piezoelétricas. A investigação dos fenômenos estruturais conduz à compreensão dessas propriedades¹. Neste trabalho foi investigada a preparação e a caracterização estrutural do $\text{KSr}_2\text{Nb}_5\text{O}_{15}$ (KSN) de estrutura TTB.

Resultados e Discussão

O KSN foi preparado por moagem de alta energia. Os reagentes de partida utilizados foram $\text{Nb}_2\text{O}_5 \cdot n\text{H}_2\text{O}$ (CBMM), K_2CO_3 e SrCO_3 em moinho de alta energia tipo atritor, operando a 1200 rpm durante cinco horas. Pó monofásico de $\text{KSr}_2\text{Nb}_5\text{O}_{15}$ (KSN) foi obtido após calcinação do pó precursor a 1200°C durante 10 horas², em atmosfera de O_2 . Com os dados do refinamento, obtidos pelo método de Rietveld, foi possível construir a estrutura cristalográfica do $\text{KSr}_2\text{Nb}_5\text{O}_{15}$ (KSN), utilizando o programa *CaRine Crystallography 3.1*³. Os parâmetros estruturais do sistema monofásico KSN foram determinados utilizando-se o método de Rietveld, empregando o programa *Fullprof*. A difração de raios-X foi indexada com base na unidade de célula tetragonal. O refinamento foi realizado considerando o grupo espacial $P4bm$. A Figura 1 mostra o difratograma experimental do $\text{KSr}_2\text{Nb}_5\text{O}_{15}$ e o difratograma calculado, a partir do refinamento. Uma boa curva

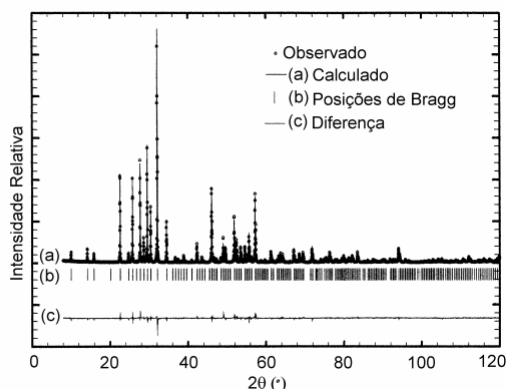


Figura 1: Difratogramas de raios-X experimental e calculado para o KSN.

Os parâmetros de rede calculados para o KSN foram: $a = 12,4641$ (2) Å e $c = 3,9391$ (3) Å e o volume $V = 611,95$ (2) Å³. A partir das posições atômicas obtidas no refinamento foi construída a estrutura do KSN, utilizando-se o programa *CaRine Crystallography 3.1*³. A Figura 2 mostra a representação esquemática da estrutura do KSN, onde A, B e C representam os sítios pentagonais, tetraedrais e trigonais, respectivamente.

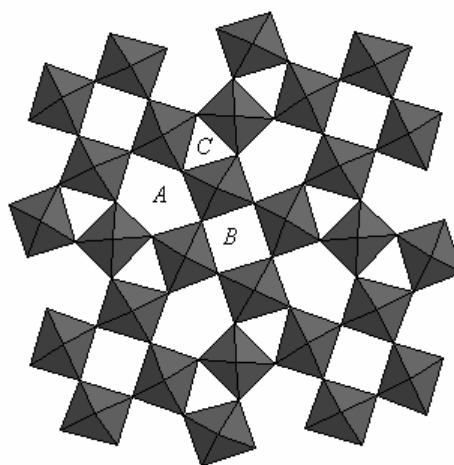


Figura 2: Representação esquemática da estrutura tetragonal tungstênio bronze (TTB)³.

Conclusões

O $\text{KSr}_2\text{Nb}_5\text{O}_{15}$ (KSN) obtido por moagem de alta energia mostrou-se monofásico. O refinamento pelo método de Rietveld mostrou que os sítios pentagonais são ocupados por igual quantidade de íons K^+ e Sr^{2+} e os sítios tetragonais apenas por íons Sr^{2+} .

Agradecimentos

À FAPESP, CNPq, CAPES e aCBMM - Brasil pela doação de insumos de nióbio.

¹ Lanfredi S.; Trindade, L. R.; Barros, A. R.; Feitosa, N. R. e Nobre, M. A. L. *Cêramica*. **2005**, 51, 151.

² Lanfredi, S.; Cardoso, C. X.; Nobre, M. A. L. **2004**, *Mat. Sci. Eng*, 112, 139.

³ Boudais, C. & Monceau, D. *CaRIne Crystallography* 3.1^(R), **1989-1998^(R)**, France.