

Caracterização estrutural do niobato de estrôncio obtido por moagem de alta energia

Alan R. F. Lima* (IC), Gabriel M. M. Shinohara (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: SrNb_2O_6 , moagem de alta energia.

Introdução

Materiais com estrutura tipo perovskita são amplamente utilizados na indústria eletro-eletrônica como componentes eletromecânicos devido às suas excelentes propriedades piezoelétricas, ferroelétricas e piroelétricas¹. Ainda, a obtenção e aplicação destes materiais estão diretamente relacionadas ao conhecimento dos métodos de preparação. Neste trabalho foi investigada a fase SrNb_2O_6 obtida pelo método por moagem de alta energia.

Resultados e Discussão

Os reagentes de partida, utilizados na preparação do SrNb_2O_6 , foram $\text{Nb}_2\text{O}_5 \cdot 3,69\text{H}_2\text{O}$ e SrCO_3 em moinho de alta energia tipo atritor, operando a 1200 rpm durante 8 horas. SrNb_2O_6 monofásico foi obtido após calcinação do pó precursor a 900 °C durante 10 horas², em atmosfera de O_2 . A caracterização da fase SrNb_2O_6 foi realizada por difração de raios-X, utilizando-se o método de Rietveld e o programa CaRIne Crystallography 3.1[®]³. Os parâmetros estruturais do SrNb_2O_6 monofásico 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 ortorrômbica. O refinamento foi realizado considerando o grupo espacial P21/c. As coordenadas atômicas e ocupações relativas obtidas no refinamento, são mostradas na Tabela I.

Tabela I. Coordenadas atômicas e ocupações relativas P.

Átomos	X	Y	Z	P
Sr (1)	0,2523(4)	0,5360(4)	0,0393(7)	1,00
Nb(1)	0,0143(5)	0,0294(3)	0,1448(3)	1,00
Nb(2)	0,5232(2)	0,4698(2)	0,6428(5)	1,00
O(1)	0,0440(2)	0,2280(2)	0,9750(9)	1,00
O(2)	0,4560(2)	0,2620(13)	0,4670(7)	1,00
O(3)	0,0700(2)	0,3760(15)	0,2060(8)	1,00
O(4)	0,2580(2)	0,9630(14)	0,1490(17)	1,00
O(5)	0,7580(3)	0,1490(3)	0,1160(14)	1,00

Os parâmetros de rede calculados para o SrNb_2O_6 foram: $a = 10,9862 \text{ \AA}$, $b = 7,7369 \text{ \AA}$ e $c = 5,5977 \text{ \AA}$. A partir das posições atômicas obtidas no refinamento foi construída a estrutura do SrNb_2O_6 , utilizando o programa CaRIne Crystallography 3.1[®]. A Figura 1 mostra a estrutura atômica do SrNb_2O_6 .

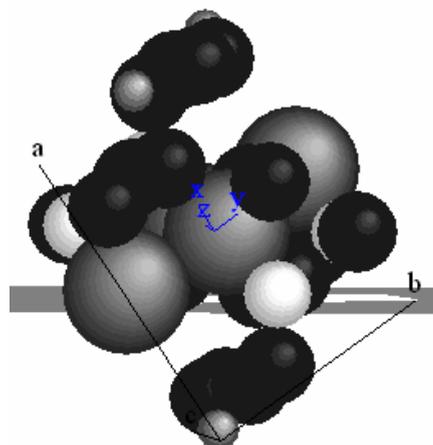


Figura 1. Estrutura atômica do SrNb_2O_6 no plano (210) e na direção $[1, -2, 1]^3$.

Conclusões

O SrNb_2O_6 obtido, por moagem de alta energia, mostrou-se monofásico. A caracterização estrutural do SrNb_2O_6 , utilizando-se o método de Rietveld, permitiu a determinação dos parâmetros estruturais. A partir das coordenadas atômicas, obtidas no refinamento, construiu-se a célula unitária do SrNb_2O_6 com planos e direções específicas, empregando-se o programa CaRIne Crystallography 3.1[®].

Agradecimentos

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

¹ Glass, A. M. *J. Appl. Phys.* **1969**, *40*, 4699.

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[®]*, **1989-1998[®]**, France.