

Caracterização química e estrutural de quartzo

Adriano C. Batista^{1*} (PG), Laysa P. de Figueiredo³ (IC), Amanda L. Ibiapino³ (IC), Rogério J. Prado¹ (PQ), Rubia R. Viana² (PQ). adrianocorreia77@gmail.com

¹ Departamento de Física – ² Departamento de Recursos Minerais/DRM – ³ Departamento de Química – Laboratório Multi Usuário de Técnicas Analíticas/LAMUTA – Instituto de Ciências Exatas e da Terra/ICET – Universidade Federal de Mato Grosso/ UFMT.

Palavras Chave: quartzo, EDX, XRD e Rietveld.

Introdução

A literatura dispõe de muita informação química e estrutural do quartzo que, desde a descoberta de sua propriedade piezoelétrica¹ tem ocupado lugar de destaque na economia mundial. O quartzo pertence à classe mineralógica dos silicatos, sendo sua fórmula a do dióxido de silício (SiO₂), cuja composição é de 46,75% – Si e 53,25% – O, em porcentagem de massa. Seus cristais têm átomos ligados por um sistema contínuo de ligações covalentes formando um retículo tridimensional muito rígido². Neste trabalho foi feita a caracterização química por fluorescência de raios X dispersiva em energia (EDX) e estrutural com difração de raios X (XRD) e o refinamentos dos dados estruturais utilizando o Método de Rietveld de algumas amostras de quartzo ametista provenientes dos estados do Pará e Mato-Grosso.

Resultados e Discussão

Nas amostras de quartzo analisadas por EDX, observou-se que a concentração de SiO₂ era de 98 e 99% enquanto que as análises de XRD mostraram a presença de uma única fase cristalina, a do quartzo α , que se apresenta na forma estável da sílica em temperaturas abaixo de 573 °C, cristalizada no sistema trigonal. A tabela 1 mostra os parâmetros de rede e critérios de qualidade do refinamento dos dados de XRD obtidos com o método de Rietveld para o quartzo ametista (QA01).

Tabela I – Parâmetros de rede e critério de qualidade do refinamento dos dados de XRD

Rietveld	QA01
a e b (Å)	4,9141
c (Å)	5,4052
volume(Å ³)	113,039
Wrp%:14,54	Rp%:10,50
CHI ² %:3,659	R(F ²)%:5,55

A figura 1 mostra o difratograma experimental (cruzes) e teórico (linha vermelha), para a amostra de quartzo. Nota-se a discordância entre o difratograma experimental e o calculado. Essa discordância sugere que o refinamento executado durante este trabalho não foi satisfatório. Esse fato nos força a pensar que o modelo estrutural do quartzo α proposto como ponto de partida para o refinamento não foi o ideal.

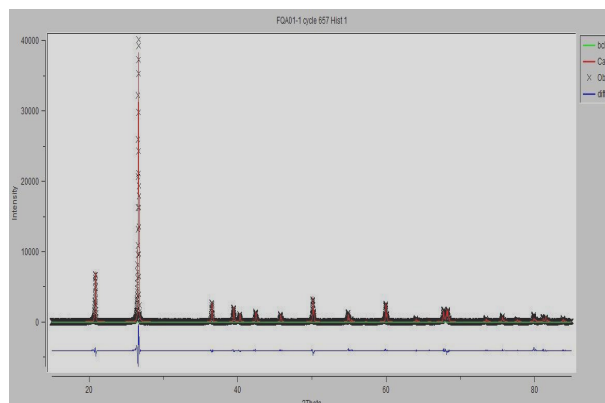


Figura I - Dados experimentais, difratograma do modelo e resíduo do refinamento obtido.

Todavia, várias outras estruturas de quartzo α (catalogadas na base de dados do ICSD e CAPES) foram testadas e trabalhamos com a que proporcionou a melhor qualidade de refinamento para os dados experimentais utilizados.

Conclusões

As análises mostraram que as amostras de quartzo estudadas neste trabalho são de boa pureza. Deve-se enfatizar aqui que vários procedimentos diferentes de refinamento foram realizados, mas nenhum deles se mostrou satisfatório para as amostras analisadas. Lembramos que a busca em bancos de dados já existentes para o quartzo ametista nos oferece apenas informações estruturais e não informa a composição química, fator este que é de extrema importância visto que as amostras deste trabalho são de formação geológica e outros elementos químicos fazem parte destas estruturas e sua variação em quantidade e diversidade geram distorções, defeitos e outras características intrínsecas de cada amostras e de cada região de origem.

Agradecimentos

CNPq e UFMT

¹ Dana, E.S., A Textbook of Mineralogy. John Wiley, New York. 4th.ed. p732, 1932.

² Departamento Nacional de Produção Mineral. Anuário Mineral Brasileiro. DNPM, Brasília. 380 p, 1990.

Batista, A.C., Caracterização Química e Estrutural de Quartzo, Dissertação de Mestrado, Instituto de Física,UFMT,Cuiabá,2008.