

## Caracterização da estrutura cristalina de turmalinas pelo método de Rietveld, XRD e EDX

Amanda L. Ibiapino<sup>3\*</sup> (IC), Laysa P. de Figueiredo<sup>3</sup> (IC), Luiz A. de França<sup>1</sup> (PG), Rogério J. Prado<sup>1</sup> (PQ), Rubia R. Viana<sup>2</sup> (PQ).  
[\\*nana.laura@hotmail.com](mailto:nana.laura@hotmail.com)

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

Palavras Chave: turmalina, EDX, XRD, Rietveld.

### Introdução

Os minerais do grupo da turmalina constituem um dos mais complexos grupos de minerais de silicato quanto à sua composição química, sendo todos eles ciclossilicatos. Trata-se de um conjunto de minerais de silicato de boro e alumínio, cuja composição é muito variável devido as substituições isomórficas (em solução sólida) que podem ocorrer na sua estrutura.

A fórmula estrutural é complexa, sendo simplificada como  $XY_3Z_6(T_6O_{18})(BO_3)V_3W$ , mostrando vários tipos de substituições entre os sítios Y e Z, e ainda, vacâncias no sítio X<sup>[1]</sup>. Neste trabalho, gemas da região Amazônica e de Minas Gerais foram analisadas por difração de raios X com o objetivo de se determinar a estrutura cristalina (parâmetros de rede, posições atômicas, números de ocupação e desordem estrutural) através do refinamento de estrutura cristalina pelo Método de Rietveld, enquanto experimentos de espectrometria de raios X permitiram quantificar os elementos presentes na amostra.

### Resultados e Discussão

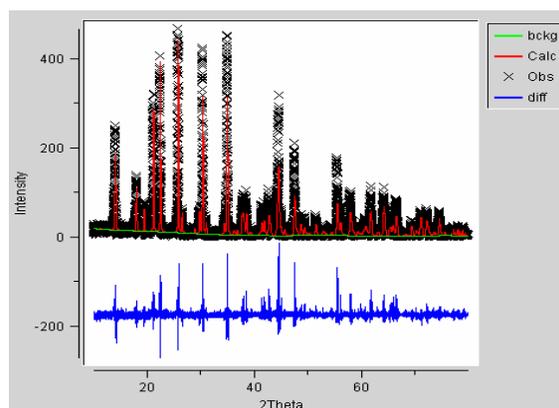
Os experimentos de XRD foram realizados em um difratômetro de raios X (Shimadzu XRD-6000) com fonte convencional (tubo de cobre, teta-2teta e monocromador) logo os experimentos de espectrometria de raios X no espectrômetro (Shimadzu EDX-700HS), permitiu a quantificação de elementos químicos do Na ao U. O refinamento da estrutura cristalina pelo método de Rietveld foi feito utilizando-se o programa GSAS.

O mineral cristalizou-se no sistema trigonal e grupo espacial R3m, cujo parâmetro de rede é,  $a=15.933779(\text{Å})$ ,  $b=15.933779(\text{Å})$ ,  $c=7.171841(\text{Å})$ .

A concentração de elementos foi em média 40.458%, 25.554%, 18.004%, 8.862%, 2.713%, 2.219%, 1.607%, 0.166%, 0.131%, 0.084%, 0.067%, 0.048%, 0.027%, 0.020%, para SiO<sub>2</sub>, Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, MgO, Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, Na<sub>2</sub>O, CaO, TiO<sub>2</sub>, K<sub>2</sub>O, MnO, Cr<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, ZnO, Ga<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, SrO, CuO.

A figura 1, mostra os difratogramas experimental (cruzes) e teórico (linha vermelha), o polinômio que simula a radiação de fundo (linha verde) e o resíduo (diferença entre o difratograma experimental e teórico) para turmalina T4.

Figura 1 - Dados experimentais, difratograma do modelo e resíduo do refinamento obtido.



### Conclusões

O refinamento de estrutura para a amostra de turmalina T4 foi realizado, estando os dados de acordo com o relatado na literatura. O resultado obtido através do refinamento de estrutura da turmalina ainda precisa ser melhorado. No momento, tentou-se reduzir efeitos de orientação preferencial quando da montagem da amostra para também levar em conta o efeito da substituição de íons nos sítios cristalográficos durante o refinamento. Todavia, até o momento, foi conseguido avanços significativos referentes ao refinamento da estrutura cristalina de turmalina provenientes dos Pegmatitos Serra e Araçuaí (Minas Gerais).

### Agradecimentos

CNPq e UFMT

<sup>[1]</sup>FRANÇA, L.A., Caracterização Química e Estrutural de Turmalinas. UFMT. Dissertação de Mestrado (2008)