

Propriedades cristalográficas do $\text{Sr}_2\text{NaNb}_5\text{O}_{15}$ de estrutura tetragonal tungstênio bronze

Silvania Lanfredi (PQ)*, Samara de Araújo Dantas (IC), Cláudio Mikaro (IC), Alan Rogério F. Lima (IC), Marcos Augusto Lima Nobre (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.

*silvania@fct.unesp.br

Palavras Chave: $\text{Sr}_2\text{NaNb}_5\text{O}_{15}$, Difração de raios X, Caracterização estrutural.

Introdução

Niobatos com estrutura tetragonal tungstênio bronze (TTB) têm apresentado importantes aplicações como materiais dielétricos lineares e não lineares. A estrutura TTB consiste de sítios octaédricos distorcidos de NbO_6 arranjados de forma a criar túneis pentagonais e tetraedrais, similares aos encontrados na estrutura perovskita, os quais são favoráveis à substituição por outros cátions e túneis trigonais vazios¹. Neste trabalho foi realizada a caracterização estrutural do niobato de estrôncio e sódio ($\text{Sr}_2\text{NaNb}_5\text{O}_{15}$), de estrutura TTB, preparado pelo método de moagem de alta energia.

Resultados e Discussão

Nanopós de $\text{Sr}_2\text{NaNb}_5\text{O}_{15}$ foram preparados por moagem de alta energia². Os reagentes de partida utilizados foram: Na_2CO_3 , SrCO_3 e $\text{Nb}_2\text{O}_5 \cdot n\text{H}_2\text{O}$. O processo de moagem dos reagentes foi realizado em um moinho tipo atritor da marca NETZSCH. A velocidade de rotação utilizada foi de 1200 rpm durante 5 horas. O pó precursor de $\text{Sr}_2\text{NaNb}_5\text{O}_{15}$ foi calcinado a 1150 °C por 10 horas, em atmosfera de oxigênio. Nanopartículas de 21 nm foram obtidas. A caracterização estrutural foi realizada por difração de raios X, sendo os parâmetros estruturais determinados pelo método de Rietveld, utilizando o programa Fullprof³. A partir dos dados de ocupação relativa, coordenadas atômicas, parâmetros de rede e grupo espacial, obtidos no refinamento, foi possível construir a estrutura do $\text{Sr}_2\text{NaNb}_5\text{O}_{15}$, utilizando o programa CaRine Crystallography 3.1^{®4}. O pó de $\text{Sr}_2\text{NaNb}_5\text{O}_{15}$, caracterizado por difração de raios X, mostrou-se monofásico, sendo identificado pela ficha JCPDS: 34-0429 com simetria tetragonal. O refinamento do difratograma foi realizado considerando o grupo espacial P4bm (100). A Figura 1 mostra a representação esquemática da estrutura TTB do $\text{Sr}_2\text{NaNb}_5\text{O}_{15}$. Os resultados mostraram que o melhor grau de refinamento foi obtido com os sítios pentagonais (sítio 4c(x, x+1/2, z)) ocupados por igual quantidade de átomos de Na^+ e Sr^{2+} , os sítios tetragonais (sítio 2a (0,0,z)) ocupados por átomos de Sr^{2+} , e os sítios octaedrais (8d) ocupados por átomos de Nb^{5+} . Os sítios trigonais não são ocupados por nenhum íon.

Isso se deve ao raio iônico do estrôncio (Sr^{2+}) e do sódio (Na^+) serem grandes o suficiente para impedir que eles ocupem os sítios trigonais. Os sítios octaedrais, ocupados por átomos de nióbio, são coordenados por seis átomos de oxigênio, sendo que quatro deles se encontram no mesmo plano do átomo de nióbio, e os outros dois acima e abaixo do plano, respectivamente.

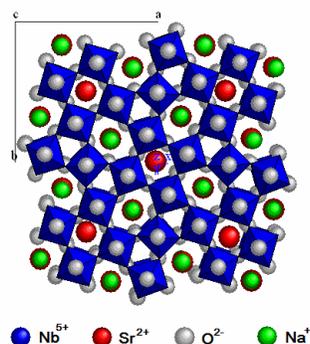


Figura 1. Representação dos sítios ativos na estrutura TTB do $\text{Sr}_2\text{NaNb}_5\text{O}_{15}$.

A formação de arranjos octaedrais de NbO_6 possibilitam a formação dos sítios ativos na estrutura TTB.

Conclusões

A técnica de moagem de alta energia mostrou-se adequada à preparação de pós monofásicos e cristalinos de $\text{Sr}_2\text{NaNb}_5\text{O}_{15}$. A determinação da estrutura cristalográfica mostra que os sítios ativos pentagonais são ocupados por iguais quantidades de íons Na^+ e Sr^{2+} e os sítios tetragonais totalmente ocupados por íons Sr^{2+} .

Agradecimentos

CNPq e FAPESP pelo apoio financeiro.

¹Simon, A. e Ravez, J. C. R. *Chimie* **2006**, 9, 1268.

²Lanfredi, S.; Trindade, L. R.; Barros, A. R.; Feitosa, N. R. e Nobre, M. A. L. *Cerâmica* **2005**, 51, 151.

³Carvajal, J. R., *An introduction to the program FullProf 2000 (version February 2008)*, Laboratoire Léon Brillouin (CEA-CNRS) CEA/Saclay, France, **2008**.

⁴Boudais, C.; & Monceau, D.; *CaRine Crystallography 3.1^(R)*, France, **1998**.