

## Efeito da temperatura nos parâmetros óticos no espectro de reflectância da composição $\text{Li}_2\text{Co}_{1-x}\text{Ni}_x\text{Ti}_3\text{O}_8$ dopado com níquel em 8%

Anderson M. de Arandas <sup>1</sup>(IC), Maria Suely C. da Câmara <sup>1</sup> (PQ), Carina S. de Moraes <sup>1</sup> (IC) e Elson Longo <sup>2</sup> (PQ)

\* andersonarandas@gmail.com

1- Universidade Federal Rural de Pernambuco- Unidade Acadêmica de Serra Talhada – UAST - Fazenda Saco- S/N – Caixa Postal 063 CEP: 56900-000 - Serra Talhada/PE

2- Universidade Federal de São Carlos – LIEC/CMDMC

Palavras Chave: Pigmentos Nanométricos, Espinélio, Método de Pechini, Espectroscopia

### Introdução

Óxidos do tipo espinélio  $\text{AB}_2\text{O}_4$  representam uma das classes mais estudadas na ciência dos materiais em estado sólido, devido a sua relevante propriedade magnética, refratários, semicondutores e propriedades de coloração. As propriedades de coloração de espinélios obtidos por intermédio do método de Pechini é determinada principalmente pelo campo do cristal em torno do íon TM, isto é, pela sua d-D e / ou transições de transferência de carga. Um grande número de cátions pode ser acomodado na estrutura espinélio. Além disso, esses cátions podem ocupar dois tipos de sítios, T, tetraédricos, ou O, octaédrica. Neste trabalho foi estudado o efeito da temperatura no sistema  $\text{Li}_2\text{CoTi}_3\text{O}_8$  nanoestruturado dopado com níquel em 8%, a partir dos espectros de reflectância, nas temperaturas de 500, 600, 700 e 1000°C. Obtivemos para a regra de Simpson, o baricentro das transições da composição nas altas temperaturas e nos respectivos calculados através do programa SIMP2FOS; força do oscilador relativa e para o programa POLAZ-F, a polarizabilidades estática e dinâmica

### Resultados e Discussão

A tabela 1 ilustra as Polarizabilidades e Baricentro da frequência, da força do oscilador relativo e estático e dinâmico relativa do  $\text{Li}_2\text{CoTi}_3\text{O}_8$  dopado com níquel em 8% em diferentes temperaturas. Observamos a partir dos dados da tabela 01, que o baricentro as transições e foi movida a força do oscilador e a polarizabilidades relativas também foram influenciados pelo aquecimento do composto e tiveram seus valores ampliados na faixa que vai de 500 a 700 °C. A diminuição nos valores das polarizabilidades, exceto para o baricentro que continuou a aumentar, verificou-se a 1000°C, que pode está relacionada com alguma alteração estrutural da composição, ou modificação em sua composição causada pela ação de um maior aquecimento e conseqüente ação oxidativa pela

atmosfera no composto, combinada com uma inevitável alteração estrutural. A 700 °C, observou-se, a maior contribuição para a reflexão deste composto, que pode ser atribuído a uma acomodação ideal do composto apresentando total ordenação, de modo que os átomos do material, os fótons de transferência através dos níveis de energia com maior eficiência, o que possibilita uma dispersão maior média de luz em torno de 510 nm. Resultado este comprovando por intermédio de DRX e Raman.

Tabela 1- Polarizabilidades e Baricentros.

Temperatura °C	Baricentros of Transições cm <sup>-1</sup>	Relativa Oscilador Strength (x10 <sup>4</sup> )	Polarizabilidade Relativa		
			$\alpha_{sta}$ x10 <sup>27</sup> (cm <sup>3</sup> )	$\alpha_{max}$ x10 <sup>-20</sup> (cm <sup>3</sup> )	$\alpha_{out}$ phas x10 <sup>-19</sup> (cm <sup>3</sup> )
500	19.489,7	1,382	2,600	5,639	1,128
600	19.526,4	1,910	3,580	7,749	1,550
700	19.603,1	2,421	4,502	9,708	1,942
1000	19.633,1	1,557	2,887	6,215	1,243

### Conclusões

A 700 °C, foi observado a maior contribuição para a reflexão deste composto, que pode ser atribuído a uma acomodação ideal do composto apresentando total ordenação. Resultado este comprovando por intermédio de DRX e Raman.

### Agradecimentos

CNPQ, UFRPE-UAST, FACEPE, CMDMC-LIEC

<sup>1</sup> Câmara, M. S. C.; Gurgel, M. F. C.; Lazaro, S. R.; Beltran, A.; Leite, E. R.; BOSCHI, T. M.; Pizani, P. S.; Longo, E., Room Temperature Photoluminescence Of The  $\text{Li}_2\text{ZnTi}_3\text{O}_8$  Spinel: Experimental And Theoretical Study. *INTERNATIONAL Journal Of Quantum Chemistry*, V. 3, P. 580-587, (2005).

<sup>2</sup> F. J. S. Lima, V. S. M, Lopes, D. R Silva, A. S. Dantas, D. M. A. E. Moura, - T.Quim., 06(2009), 7-10