

Correlação entre tamanho médio de cristalito e energia de *gap* em nanopós de $\text{NaSr}_2(\text{NiNb}_4)\text{O}_{13+\delta}$

Laura Maria Roselli* (IC), Gabriela Ap. A. Oliveira (IC), Gabriela D. da Silva (IC), Caroline Polini (PG), Diego H. M. de Gênova (PG), 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, R. Roberto Simonsen 305, C. P. 467, Presidente Prudente, SP 19060-900.

*e-mail: laura_roselli@hotmail.com

Palavras Chave: $\text{NaSr}_2(\text{NiNb}_4)\text{O}_{13+\delta}$, Tamanho médio de cristalito e Energia de *gap*.

Introdução

Niobatos de estrutura tungstênio bronze têm atraído interesse em diversos setores científicos e tecnológicos, por apresentarem ampla gama de propriedades, bem como por serem candidatos naturais à substituição de materiais à base de chumbo em sua composição como, por exemplo, o titanato zirconato de chumbo (PZT). Neste trabalho investigou-se o efeito do tempo de tratamento térmico na energia de *gap*, determinada por medidas de UV-Vis, do pó precursor da solução sólida de niobato de sódio e estrôncio dopado com níquel, com estequiometria $\text{NaSr}_2(\text{NiNb}_4)\text{O}_{13+\delta}$.

Resultados e Discussão

Nanopós de $\text{NaSr}_2(\text{NiNb}_4)\text{O}_{13+\delta}$, foram preparados por moagem de alta energia¹. 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 $\text{NaSr}_2(\text{NiNb}_4)\text{O}_{13+\delta}$ foi calcinado a 1150 °C em diferentes tempos: 4, 6, 8 e 10 horas, em atmosfera de oxigênio. A caracterização estrutural das nanopartículas foi realizada por difração de raios X. A partir dos dados de difração de raios X foram calculados o tamanho médio de cristalito e o grau de microdeformação na rede cristalina, utilizando as equações de Scherrer e Williamsom-Hall, respectivamente². A correlação entre parâmetros estruturais e a evolução do parâmetro *gap* óptico foi analisado por UV-Vis. A Figura 1 mostra a evolução de $(\alpha E)^2$ (onde α é o coeficiente de absorvidade) com a energia do fóton para o pó precursor.

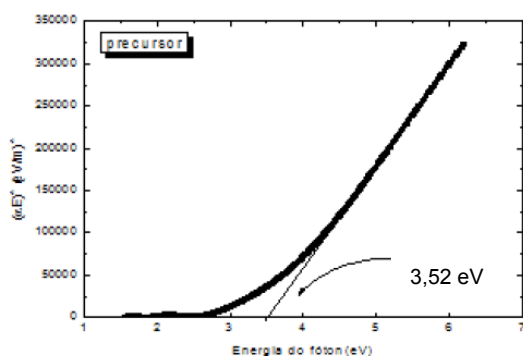


Figura 1: $(\alpha E)^2$ em função da energia do fóton para o pó precursor da solução do $\text{NaSr}_2(\text{NiNb}_4)\text{O}_{13+\delta}$.

A energia do *gap* óptico foi obtido pela extrapolação da curva de $(\alpha E)^2$ tendendo a 0. A Tabela 1 mostra os valores do tamanho médio de cristalino, microdeformação e energia de *gap* para diferentes tempos de tratamento térmico do pó precursor da solução sólida de $\text{NaSr}_2(\text{NiNb}_4)\text{O}_{13+\delta}$.

Tabela 1. Valores de tamanho médio de cristalito, microdeformação e energia de *gap* para diferentes tempos de tratamento térmico do pó precursor.

Tempo (horas)	Tamanho médio de cristalino (nm)	Micro-deformação (%)	Energia de <i>gap</i> (eV)
Sem tratamento térmico	--	--	3,52
4	29,5	0,258	3,49
6	32,5	0,245	3,44
8	34,1	0,235	3,16
10	34,3	0,232	3,08

A energia de *gap* diminui com o aumento do tamanho médio de cristalito e com a diminuição da microdeformação da rede, visto que a estrutura está mais ordenada, sendo necessário menor gasto de energia para a transição dos elétrons da banda de condução para a banda de valência³.

Conclusões

O aumento do tempo de tratamento térmico do pó precursor do $\text{NaSr}_2(\text{NiNb}_4)\text{O}_{13+\delta}$ mostrou um aumento do tamanho médio de cristalito e uma diminuição da microdeformação da rede, bem como um aumento da sua cristalinidade, promovendo uma diminuição do *gap* óptico.

Agradecimentos

À FAPESP e ao CNPq.

¹ Lanfredi, S.; Trindade, L. R.; Barros, A. R.; Feitosa, N. R. e Nobre, M. A. L. *Cerâmica* **2005**, *51*, 151.

² Lanfredi, S.; Lima, A. R. F e Nobre, M. A. L. *Química Nova*, **2010**, *33*, 1071.

³ Lucena, P. R. *et al. Cerâmica*, **2004**, *50*, 138.