

Propriedades Cristalográficas de Nanopós de Niobato de Potássio e Neodímio de Estrutura Tungstênio Bronze (TB)

Eliane A. Namikuchi(IC)*, Diego H. M. Gênova(PG), Claudio Mikaro(IC), Marcos A. L. Nobre (PQ), Sylvania 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 - Rua Roberto Simonsen 305, C. P. 467, Presidente Prudente, SP 19060-900

*li_namikuchi@hotmail.com

Palavras Chave: Método de Rietveld, $K_2NdNb_5O_{15}$, tungstênio bronze.

Introdução

Nos últimos anos, niobatos com estrutura tungstênio bronze (TB) têm demonstrado interesse, principalmente pela alta anisotropia da estrutura cristalina. Ainda, a obtenção e aplicação destes materiais estão diretamente relacionadas ao conhecimento dos métodos de preparação. Neste trabalho foram investigadas as propriedades cristalográficas do óxido niobato de potássio e neodímio de estequiometria $K_2NdNb_5O_{15}$.

Resultados e Discussão

O $K_2NdNb_5O_{15}$ foi preparado pelo método de moagem de alta energia¹. 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. O maior valor de tamanho de cristalito, em torno de 41,07 nm, foi encontrado para o pó precursor do $K_2NdNb_5O_{15}$ tratado termicamente a 1000 °C, onde se identifica o menor índice de microdeformação na rede de 0,16%. Os parâmetros estruturais foram determinados utilizando-se o método de Rietveld, empregando-se o programa Fullprof³. O pó de $K_2NdNb_5O_{15}$ mostrou-se monofásico, sendo identificado pela ficha JCPDS: 39-0237 com simetria tetragonal. A Figura 1 mostra o gráfico de Rietveld para o pó precursor de $K_2NdNb_5O_{15}$ tratado termicamente a 1000 °C por 10,0 horas.

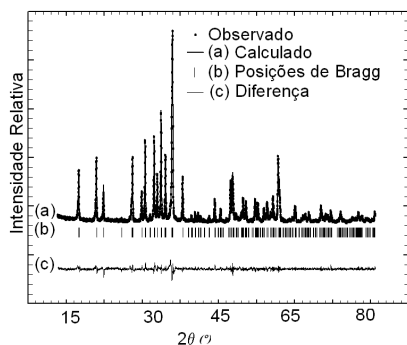


Figura 1 – Gráfico de Rietveld do $K_2NdNb_5O_{15}$.

A partir dos dados cristalográficos obtidos foi possível construir a estrutura do $K_2NdNb_5O_{15}$, utilizando o programa Diamond. Os resultados mostraram que o melhor grau de refinamento foi obtido com os sítios pentagonais (sítio 4c(x, x+1/2, z)) ocupados por iguais quantidade de átomos de K^+ e Nd^{3+} , os sítios tetragonais (sítio 2a (0,0,z)) ocupados somente por átomos de Nd^{3+} e os sítios octaédricos ocupados por cátions Nb^{5+} . Os sítios trigonais não são ocupados por nenhum íon. A Figura 2 mostra a representação esquemática da estrutura tungstênio bronze (TB) do $K_2NdNb_5O_{15}$.

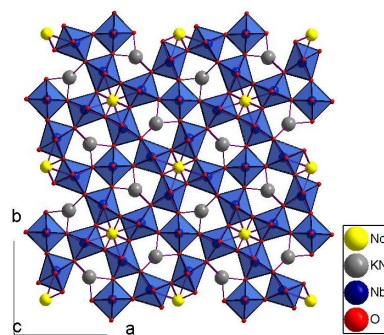


Figura 2: Representação esquemática da unidade de célula obtida para o $K_2NdNb_5O_{15}$.

Conclusões

A técnica de moagem de alta energia mostrou-se adequada à preparação de pós monofásicos e cristalinos de $K_2NdNb_5O_{15}$. A determinação da estrutura cristalográfica do $K_2NdNb_5O_{15}$ mostrou que os sítios pentagonais são ocupados por iguais quantidades de íons K^+ e Nd^{3+} e os sítios tetragonais ocupados somente por átomos de Nd^{3+} .

Agradecimentos

À FAPESP e ao CNPq.

¹ Lanfredi, S.; Lima, A. R. F e Nobre, M. A. L. *Química Nova*, **2010**, 33, 1071.

² Williamsom, G. K., Hall, W. H. *Acta Met.*, **1953**, 1, 22.

³ Carvagal, J. R.; *An introduction to the program Fullprof 2000*, **2001**, FRANCE.