XXX Encontro Anual de Iniciação Científica
VII Encontro Anual de Iniciação Científica Júnior
eaic 2021

ANÁLISE ESTRUTURAL E MICROESTRUTURAL DE SISTEMAS CERÂMICOS BASEADOS EM CCTO UTILIZANDO DIFRAÇÃO DE RAIOS X E O MÉTODO DE RIETVELD

Cassiana Vitoria Kryzanowski Miranda (CNPq), Sandra Regina Masetto Antunes, Christiane Philippini Ferreira Borges, Eder Carlos Ferreira de Souza, Marília Bessa Barros Ferreira, André Vitor Chaves de Andrade (Orientador), e-mail: avcandrade@gmail.com.

Universidade Estadual de Ponta Grossa / Departamento de Física

Física; Física da Matéria Condensada

Palavras-Chave: *Titanato de cobre e cálcio, cerâmica eletrônica, Método de Rietveld.*

Resumo

O titanato de cobre e cálcio ($CaCu_3Ti_4O_{12}$), conhecido como CCTO, apresenta relevantes propriedades ópticas, sendo um material muito utilizado em dispositivos eletrônicos [1]. Essas propriedades podem diferir conforme a microestrutura do material. O objetivo desse trabalho foi a análise do CCTO puro e dopado em relação ao tamanho de cristalito, bem como suas microdeformações.

Introdução

Uma das formas de aperfeiçoar as propriedades dielétricas do CCTO é o controle da sua microestrutura [2]. A difração de raios X combinada à métodos computacionais como o Método de Rietveld (MR) é capaz de fornecer dados importantes sobre tamanho de cristalito e microdeformações no retículo cristalino. No trabalho presente, os dados apontaram um tamanho grande de cristalito para amostras puras de CCTO. A partir disso, realizou-se o estudo do comportamento microestrutural após a adição de Nióbio e Cromo.

Material e Métodos

Para o estudo, utilizou-se dados já disponíveis de DRX para nove amostras de CCTO, uma sem dopante e oito dopadas com nióbio ou cromo em diferentes proporções. Os resultados computacionais foram obtidos através do software GSAS II.

Resultados e Discussão

A tabela 1 e a figura 1 demonstram a qualidade de refinamento. As amostras dopadas com 0,025% de Nióbio apresentaram uma dificuldade no ajuste de perfis calculado e observado.

Tabela 1. Parâmetros R_{wp} e S de qualidade de refinamento.

Amostras	R_{wp} (%)	S
CCTO não dopado	4,28	1,26
CCTO 0,1% Cr	4,12	1,22
CCTO 0,025% Nb	6,60	1,86

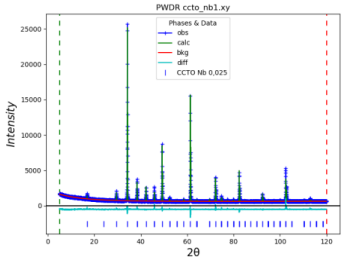


Figura 1. Gráfico de Rietveld para a amostra dopada com 0,025% de Nióbio.

Na figura 2, os gráficos apontam a tendência de crescimento do cristalito e das microdeformações quando a amostra é dopada com cromo. O contrário ocorre com a adição do dopante Nióbio. A justifica disso pode ser a diferença de tamanho de raio iônico ($Ri_{Ni} > Ri_{CCTO}$), causando uma deformação na rede de átomos, o que pode aumentar o limite de solubilidade do CCTO para esse dopante.

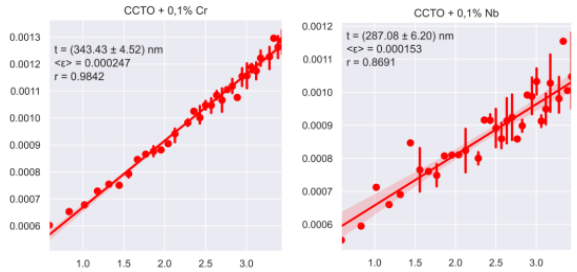


Figura 2. Gráficos de Williamson-Hall para as amostras dopadas com 1% de Cromo e 1% de Nióbio, respectivamente.

Conclusão ou Conclusões

A adição de dopantes pode alterar a microestrutura do material, podendo assim causar alterações nas propriedades ópticas do CCTO [2].

Agradecimentos

Os autores agradecem ao PIBIC/CNPq e a UEPG.

1 ALMEIDA, A. F. L.; OLIVEIRA, R. S.; GÓES, J. C.; SASAKI, J. M.; SOUZA FILHO, A. G.; MENDES FILHO, J.; SOMBRA, A. S. B. Structural properties of CaCu3Ti4O12 obtained by mechanical alloying. **Materials Science and Engineering B: Solid-State Materials for Advanced Technology**, v. 96, n. 3, p. 275–283, 2002.

2 AHMADIPOUR, M.; ABU, M. J.; RAHMAN, M. F. A.; AIN, M. F.; AHMAD, Z. A. Assessment of crystallite size and strain of CaCu3Ti4O12 prepared via conventional solid-state reaction. **Micro and Nano Letters**, v. 11, n. 3, p. 147–150, 2016.