

Estudo da fase cúbica no Sistema Binário $3\text{Bi}_2\text{O}_3:2\text{TeO}_2$

Paulo Palastrim (IC), Kátiuscia Ferreira (PQ)

PIBIC-EM/PIBIC/PIBITI

Câmpus Itumbiara

kátiuscia.ferreira@ifg.edu.br

Palavras Chave: $3\text{Bi}_2\text{O}_3:2\text{TeO}_2$; Estrutura cristalina; Espectroscopia vibracional; Vacâncias de oxigênio

Introdução

O presente trabalho apresenta um estudo da fase cúbica resultante do sistema binário $3\text{Bi}_2\text{O}_3:2\text{TeO}_2$. Esse sistema apresenta duas estruturas cristalinas: a fase ortorrômbica estável a temperatura ambiente, $\text{Bi}_6\text{Te}_2\text{O}_{15}$, e a cúbica de alta temperatura, $\text{Bi}_6\text{Te}_2\text{O}_{13}$. A fase cúbica foi explorada devido a necessidade de elucidar melhor esta estrutura, que apresenta poucas informações e boas possibilidades de aplicações, especialmente elétricas (FERREIRA *et al*, 2021).

Metodologia

A síntese da amostra ocorreu por reação no estado sólido em 870°C seguido de resfriamento rápido. Essa é uma temperatura acima da transição de fase ortorrômbica/cúbica (FERREIRA *et al*, 2021). O material resultante foi analisado através das técnicas de Difração de Raio-X, Espectroscopia de Infravermelho por Transformada de Fourier e Espectroscopia Raman.

Resultados e Discussão

O difratograma resultante (Figura 1) mostra a presença da fase cúbica $\text{Bi}_6\text{Te}_2\text{O}_{13}$ com parâmetro $a=5.589 \text{ \AA}$, calculado pelo programa Powder X. Porém, picos “extras”, de baixa intensidade podem ser percebidos.

Todas essas reflexões que não pertenciam a célula cúbica primitiva puderam ser indexadas por uma “superestrutura” cúbica com parâmetro de cela igual a $a' = 22.368 \text{ \AA}$, aproximadamente o quádruplo da primitiva: $a' = 4a$ (PALASTRIM e FERREIRA, 2021).

Nos resultados de espectroscopia de infravermelho por transformada de Fourier (FTIR) observou-se um alargamento das bandas vibracionais quando comparadas com as da fase ortorrômbica. Esse comportamento pode estar relacionado à tensão estrutural presente na fase cúbica, sintetizada a alta temperatura e resfriada rapidamente.

No espectro Raman, pode-se notar o mesmo fenômeno de alargamento dos picos. No entanto, nota-se que um pico em 397cm^{-1} que aparece na fase ortorrômbica, correspondente a ligação dos átomos de Te e O, não ocorre na fase cúbica. A perda de dois oxigênios por fórmula na transição da fase ortorrômbica para cúbica ($\text{Bi}_6\text{Te}_2\text{O}_{15} \rightarrow \text{Bi}_6\text{Te}_2\text{O}_{13}$) pode estar relacionada a ausência deste pico na fase

cúbica. O resultado sugere que os oxigênios eliminados pela redução do Te^{+6} a Te^{+4} na transição de fases, estão posicionados em sítios específicos e distintos na estrutura, corroborando com os resultados apresentados na difração de raios X, que mostram uma superestrutura, possivelmente devido a reflexões de vacâncias distribuídas periodicamente na estrutura.

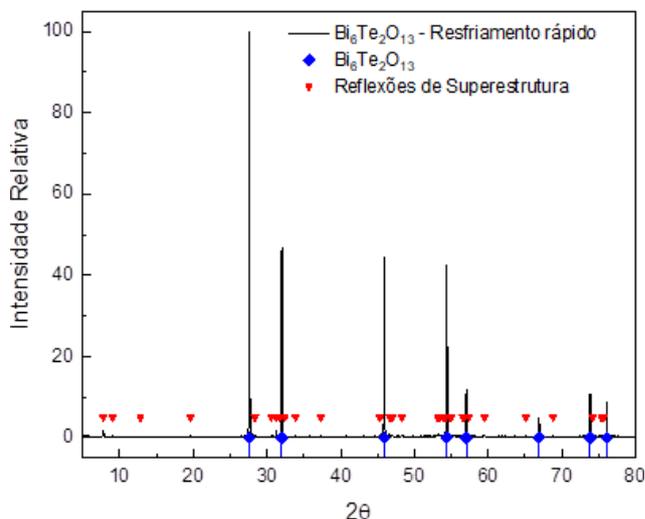


Figura 1. Difratograma da fase cúbica $\text{Bi}_6\text{Te}_2\text{O}_{13}$. Losangos azuis: fase cúbica primitiva ; triângulos vermelhos: reflexões de superestrutura.

Conclusões

Os resultados mostram que há muito a se estudar sobre a estrutura cúbica, que apresenta posições de oxigênio vacantes ocasionadas pelas perdas na ligação Te-O em alguns sítios da estrutura, possibilitando interessantes propriedades elétricas.

Agradecimentos

Agradeço ao IFG pela oportunidade e a Prof. Kátiuscia por sua dedicação.

FERREIRA, K. D.; GASPAROTTO, G.; MAIA, L. J. Q.; REIS, S. P.; ARAÚJO, E. B.; CARVALHO, J. F. **Phase stability and properties of $\text{Bi}_6\text{Te}_2\text{O}_{13+\delta}$ ($\delta = 0$ or 2)**. *Physica B: Condensed Matter*, 605, 15 2021.

PALASTRIM, P. A. M.; FERREIRA, K. D. **Estudo da fase cúbica no Sistema Binário $3\text{Bi}_2\text{O}_3:2\text{TeO}_2$** . I Congresso Nacional de Física, Química e Engenharia de Materiais. São João del-Rei. abr. 2021.