



REFINAMENTO DE ESTRUTURAS CRISTALINAS DE MATERIAIS CERÂMICOS DO TIPO ILMENITA PELO MÉTODO RIETVELD.

Adla Jamilly Vieira Felipe ¹, Renilton Correia da Costa ²

RESUMO

O método de Rietveld se apresenta como uma forma para analisar e obter a estrutura cristalina dos materiais cerâmicos do tipo ilmenita, considerando para isso as fases que constituem esse material e os gráficos difratométricos resultantes da difração de raios x. As amostras de ilmenita estudadas foram produzidas no Laboratório de Física da Universidade Federal de São Carlos, através do método de reação do estado sólido, obtendo em seguida suas respectivas medidas de difração. Já a produção e tratamento dessas amostras, foram efetuadas no laboratório de síntese e caracterização de materiais cerâmicos, do Grupo de Espectroscopia Raman, do Departamento de Física (DF) da mesma universidade. Foram utilizados também os softwares Seach Macth e Mercury para realizar a identificação das fichas cristalográficas e gerar os gráficos com a representação dos seus picos de difração, respectivamente, dos compostos ilmenitas, titanato de níquel (NiTiO_3), titanato de cobalto (CoTiO_3), titanato de magnésio (MgTiO_3) e titanato de cádmio (CdTiO_3). E por fim foi usado o software GSAS, para que, pelo método do Refinamento de Rietveld, fossem extraídos os parâmetros estruturais para serem analisados e ou comparados com os difratogramas e valores observados na literatura. Foi possível observar que, os resultados obtidos foram bastante satisfatórios, tanto no estudo de suas propriedades físicas, quanto no controle e produção das amostras.

Palavras-chave: difração de raio x, amostras, Refinamento Rietveld.

¹Graduanda em Engenharia Civil, UACTA, UFPA, Pombal, PB, E-mail: adlajamilly18@outlook.com.

²Físico – Universidade Federal de Campina Grande. Doutor, UACTA, UFPA, Campina Grande, PB, E-mail: renilton@ccta.ufcg.edu.br.



REFINING OF CRYSTALLINE STRUCTURES OF ILMENITE TYPE CERAMIC MATERIALS BY THE RIETVELD METHOD.

ABSTRACT

The Rietveld method is presented as a way to analyze and obtain the crystal structure of ilmenite type ceramic materials, considering the phases that constitute this material and the resulting x-ray diffraction diffraction plots. The ilmenite samples studied were produced in the physics Laboratory of the Federal University of São Carlos, through the solid state reaction method, and then their respective diffraction measurements were obtained. The production and treatment of these samples, were performed in the laboratory of synthesis and characterization of ceramic materials, of the Raman Spectroscopy Group of the Physics Department (df) of the same university. The software Seach Macth and Mercury were also used to perform the identification of the crystallographic forms and generate the graphs with the representation of their diffraction peaks, respectively, of the ilmenite compounds, nickel titanate (NiTiO_3), cobalt titanate (CoTiO_3), magnesium titanate (MgTiO_3) and cadmium titanate (CdTiO_3). Finally, the GSAS software was used, so that, using the Rietveld Refinement method, the structural parameters were extracted to be analyzed and/or compared with the diffractograms and values observed in the literature. It was possible to observe that the results obtained were quite satisfactory, both in the study of its physical properties and in the control and production of samples.

Keywords: x-ray diffraction, samples, Rietveld Refinement.