

Id06-014

Análise estrutural do estanato de bismuto ($\text{Bi}_2\text{Sn}_2\text{O}_7$) sob diferentes temperaturas de calcinação

Gomes, E.S.(1); Silva, A.B.(1); Santos, A.O.(2); Macêdo, A.M.(1); Almeida, R.M.(1); Instituto Federal do Maranhão(1); Instituto Federal do Maranhão(2); Universidade Federal do Maranhão(3); Instituto Federal do Maranhão(4); Instituto Federal do Maranhão(5);

Este trabalho tem a finalidade de investigar a influência da temperatura de calcinação nas propriedades estruturais do estanato de bismuto ($\text{Bi}_2\text{Sn}_2\text{O}_7$, BSO). O BSO é uma cerâmica que vem atraindo atenção nos últimos anos devido às suas propriedades físico-químicas diversas, incluindo fotocatalise de poluentes do ar e da água. Foi estudado pela primeira vez por Coffen e Roth, quando constataram que, em altas temperaturas, apresenta estrutura similar a dos pirocloros, de fórmula geral $\text{A}_2\text{B}_2\text{O}_7$, onde A e B são metais. O BSO apresenta três fases: a fase alfa, estável entre a temperatura ambiente até 137°C ; a fase beta, entre 137°C a 626°C ; e, a fase gama acima de 626°C . A estrutura da fase alfa é monoclinica, com grupo espacial Cc, e parâmetros de rede $a = 13,15493(6) \text{ \AA}$; $b = 7,54118(4) \text{ \AA}$ e $c = 15,07672(7) \text{ \AA}$. Os ângulos $\alpha = \gamma = 90^\circ$; $\beta = 125,01^\circ$ e $V(\text{\AA}^3) = 1224,998(11)$. O BSO, além de semicondutor, é ferroelétrico à temperatura ambiente. O método experimental de síntese foi realizado por reação do estado sólido em cadinho fechado, utilizando os óxidos de bismuto (Bi_2O_3) e estanho (SnO_2). Primeiramente, fez-se o cálculo estequiométrico da reação, levando-se em consideração as impurezas dos materiais. Os óxidos de partida foram homogeneizados em almofariz e pistilo de ágata e passaram por tratamentos térmicos diferentes na calcinação. No primeiro passo, fez-se tratamento térmico na temperatura de 975°C , por 12 horas; em seguida, repetiu-se o procedimento; e, por fim, fez-se um tratamento térmico na temperatura de 1050°C , por 12 horas. Após os três tratamentos térmicos, o pó obtido foi caracterizado por difração de raios X, registrando os ângulos 2θ no intervalo de 5° a 50° , com passo de $0,01^\circ/\text{s}$. Em seguida, fez-se o refinamento de Rietveld, e os difratogramas de cada tratamento térmico da amostra foram comparados com padrões das fases alfa, beta e gama do BSO, conforme observado em cada análise. Identificou-se que a amostra continuou apresentando semelhança com a fase alfa. Os picos dos difratogramas ficaram mais intensos após a última temperatura de calcinação, quando também se constatou a síntese do material desejado. Realizou-se o refinamento visando a minimização no valor de S, observando que a cada análise, o valor dele se aproximava da unidade. Comparando os parâmetros experimentais com os teóricos do refinamento de Rietveld, observou-se uma diferença menor que 1%. Logo, sugere-se que a calcinação à temperatura de 1050°C , por 12h, com cadinho fechado, favoreceu a obtenção da fase monoclinica do BSO, conforme descrito pela literatura, com melhor resultado no refinamento se comparado aos das amostras calcinadas em temperaturas mais baixas.