

**19<sup>a</sup> ABCr**

**Estudo do alargamento dos picos de difração de raios-x do NiO usando a equação de Scherrer e o gráfico Williamson-Hall**

Nizomar de Sousa Gonçalves, José Marcos Sasaki

*Departamento de Física, Universidade Federal do Ceará, Fortaleza, Brasil*

Existem vários métodos para cálculo do tamanho de partícula. Entre estes a equação de Scherrer é talvez o mais conhecido [1]. Scherrer deduziu o tamanho de partícula como sendo calculado através de  $K\lambda \cos(\theta)/FWHM$ , onde  $K$  é uma constante próxima de um,  $FWHM$  corresponde à largura do pico de difração à meia altura e  $\theta$  é o ângulo de Bragg da reflexão. A primeira teoria para o alargamento dos picos de difração foi proposta por Warren e Averbach [2], onde eles assumiram que a largura do pico é devida ao tamanho de partícula e também devida à microdeformação. O gráfico de Williamson-Hall é um método clássico para obter informação quantitativa sobre a microdeformação e o tamanho de partícula considerando o alargamento dos picos de difração. Williamson e Hall [3] assumiram que os perfis dos alargamentos provocados pelo tamanho de partícula e pela microdeformação são curvas Lorentzianas. Baseados nesta suposição, uma expressão matemática envolvendo a largura do pico de difração, o tamanho médio de partícula e a microdeformação foi definida. O gráfico de Williamson e Hall dá o valor da microdeformação através da inclinação da curva e o tamanho médio de partícula através da intersecção da curva com o eixo das ordenadas. Neste trabalho apresentamos uma entre o tamanho de nanopartículas de NiO calculados da difração de raios-x (método Ritveld de refinamento) pelos métodos de Scherrer e Williamson e Hall. O tamanho médio das partículas é 7nm, pelo método de Scherrer, e 20nm, pelo método de Williamson e Hall. Mostramos como considerar a contribuição da microdeformação para a largura dos picos de difração e sugerimos uma correção na equação de Scherrer. Usando esta correção encontramos tamanhos de partícula mais coerentes.

[1] S. Vives et al., Materials Science and engineering A, 366, 2004.

[2] B.E. Warren, B.L. Averbach, J. Appl.Phys. 23, 1952.

[3] G.K. Williamson, W.H. Hall, Acta Metall. 1, 1953, 22.

Agradecimentos: CNPq, CAPES.