

## Estudo da estrutura do sistema $\text{Bi}_{4-x}\text{La}_x\text{Ti}_3\text{O}_{12}$ por DRX com luz síncrotron.

K. D. Paiva<sup>1</sup>, V.B. Santos<sup>2</sup>, M. Mir<sup>1</sup>, P. P. Neves<sup>1</sup>, V.R. Mastelaro<sup>2</sup>.

<sup>1</sup> Universidade Federal de Alfenas, Alfenas, Brasil.

<sup>2</sup> Universidade de São Paulo, São Carlos, Brasil.

As cerâmicas ferroelétricas têm sido intensamente estudadas e desenvolvidas a fim de explorar suas propriedades físicas as quais são influenciadas pelo processo de síntese e pela adição de dopantes ou substituintes à composição básica. A caracterização desses materiais através da técnica de Difração de Raios X (DRX) é indispensável para o estudo das propriedades fundamentais, e suas possíveis aplicações tecnológicas.

Dentre os compostos ferroelétricos cerâmicos encontrados, os mais estudados e utilizados são à base de chumbo. Entretanto, estes materiais apresentam certas desvantagens como a volatilidade e a toxicidade do composto  $\text{PbO}$ . Já os compostos cerâmicos a base de bismuto, como o  $\text{Bi}_{(4-x)}\text{La}_x\text{Ti}_3\text{O}_{12}$  (BLT) são materiais que apresentam menor toxicidade, possuem alta temperatura de Curie ( $T_c$ ) e baixa constante dielétrica. O sistema BLT apresenta uma estrutura em forma de camadas como mostrado na Figura 1.

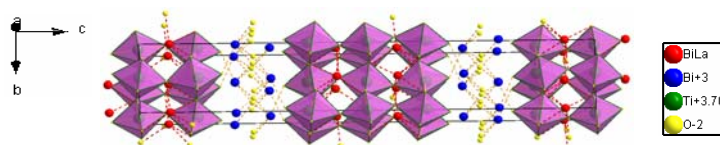


Figura 1: Representação da célula unitária do sistema ferroelétrico  $\text{Bi}_{4-x}\text{La}_x\text{Ti}_3\text{O}_{12}$ .

As amostras foram preparadas por meio do método de reação de estado sólido, onde as variações estruturais decorrentes da substituição do átomo de Bismuto por Lantânio ocorreram num intervalo de composição de  $0 < x < 2$ . A sinterização das amostras foi realizada por tratamento térmico na faixa de temperaturas de 1323 a 1523 K. Os dados da difração foram coletados abaixo e acima da temperatura de  $T_c$  para cada composição, na linha D10B XPD do Laboratório Nacional de Luz Síncrotron (LNLS).

Para a caracterização do sistema  $\text{Bi}_{4-x}\text{La}_x\text{Ti}_3\text{O}_{12}$ , por DRX foram feitos refinamentos utilizando o método de Rietveld ou de Le Bail, segundo o caso, através do programa FullProf [1]. Os resultados obtidos do refinamento para cada amostra estão resumidos na Tabela 1.

Tabela 1: Dados e resultados dos refinamentos para o sistema  $\text{Bi}_{4-x}\text{La}_x\text{Ti}_3\text{O}_{12}$  com  $x = 0.5, 0.75, 1$  e  $1.5$ . As nomenclaturas utilizadas na tabela significam: Sistema=sistema cristalino, GE=grupo espacial, T=temperatura na qual foi realizada a medida de DRX; a,b,c e  $\beta$ =parâmetros da célula.

Amostras	Sistema	GE	T(DRX)	a (Å)	b (Å)	c (Å)	$\beta$ (°)
BLT 0.5	Monoclínico	A11A	547°C	5.4437	5.4407	33.1485	90.020
BLT 0.75	Monoclínico	B1a1	RT	5.4257	5.4182	32.897	89.976
BLT 1	Ortorrômbico	B2cb	327°C	5.4282	5.4283	33.0358	-
BLT 1	Ortorrômbico	B2cb	RT	5.4184	5.4184	32.9244	-
BLT 1.5	Ortorrômbico	B2cb	-223°C	5.4054	5.4058	32.8724	-
BLT 1.5	Ortorrômbico	B2cb	RT	5.4146	5.4144	32.9402	-

[1] <<http://www.ccp14.ac.uk/ccp/web-mirrors/fullprof/php/reference.html>>. Acesso em: 03 agosto 2009.