

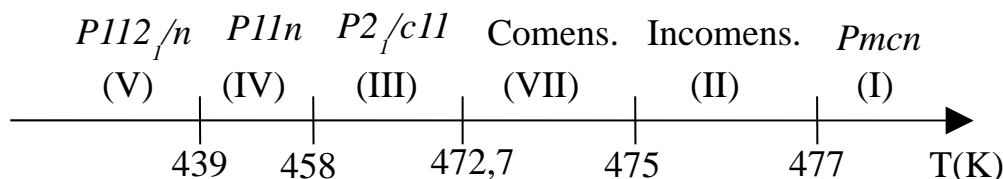
Transições estruturais termotrópicas no LiRbSO_4

L. T. Oliveira, A. Righi e N. L. Speziali

Departamento de Física, ICEx, UFMG, Belo Horizonte, Brasil.

O LiRbSO_4 pertence a uma família de compostos do tipo $Y'Y''\text{SO}_4$, nos quais Y' e Y'' são cátions alcalinos, que apresentam transformações estruturais incluindo fases ferroelétricas, comensuráveis e incomensuráveis.

Este composto apresenta cinco transições de fase acima da temperatura ambiente^{[1][2]}, com simetrias, estruturas e propriedades físicas distintas. De acordo com a literatura, a simetria de cada fase e as temperaturas de transição podem ser esquematizadas conforme a seqüência abaixo:



É interessante observar a existência de fases comensurável e incomensurável no pequeno intervalo de temperatura de 472 até 477 K.

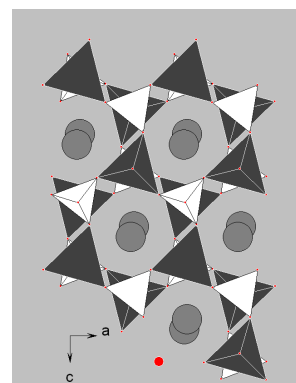
Na fase de temperatura ambiente ($P2_1/n$), a estrutura deste cristal pode ser descrita por conjuntos de tetraedros de SO_4^{2-} (menores) e LiO_4^{7-} (maiores), contendo íons de O^{2-} em comum e íons de Rb^+ ocupando as cavidades, conforme mostrado na figura ao lado. A variedade de transições é, geralmente, atribuída ao movimento relativo destes tetraedros.

Estudos de calorimetria diferencial de varredura (DSC)^[3] abaixo da temperatura ambiente evidenciam anomalias durante o resfriamento e aquecimento.

No presente trabalho serão mostrados resultados parciais obtidos no estudo estrutural que vem sendo feito em temperaturas abaixo da ambiente, usando-se difração de raios X (DRX) e espectroscopia Raman.

Resultados de DRX mostram que há uma mudança significativa na orientação relativa dos tetraedros de SO_4^{2-} entre 250 e 220 K durante o resfriamento, com ligeiro deslocamento dos cátions. Apesar de estas alterações ocorrerem, as estruturas são bem descritas pelo mesmo grupo de espaço $P2_1/n$ em todas as temperaturas de medida.

Estão sendo realizadas medidas DRX em intervalos menores de temperatura, de Raman e DSC, de modo a se obter mais informação sobre as mudanças ocorridas.



Estrutura do LiRbSO_4 em $T=\text{ambiente}$ (projeção $a \times b$).

[1] Mashiyama, H., Unruh, H. G., *Journal of the Physical Society of Japan*, **54** / **2**, 822 – 828 (1985).

[2] Kunishige, A., Mashiyama, H., *Journal of the Physical Society of Japan*, **56** / **9**, 3189 – 3195 (1987).

[3] Abello, L., Chhor, K., Pommier, C., *Journal of Chemical Thermodynamics*, **19**, 797 – 808 (1987).

Agradecimentos: trabalho desenvolvido com apoio do CNPq, da FAPEMIG e da FINEP.