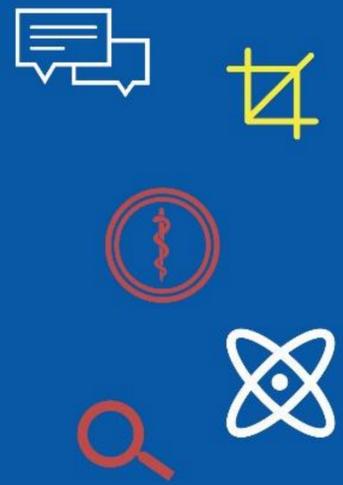




**PUC**  
CAMPINAS  
PONTIFÍCIA UNIVERSIDADE CATÓLICA

# 2ª MOSTRA DE TALENTOS DA GRADUAÇÃO

Centro de Ciências Exatas,  
Ambientais e de Tecnologias (CEATEC)



## CARACTERIZAÇÃO DE MATERIAIS CERÂMICOS NA BASE DE $\text{SiO}_2$ , $\text{Fe}_2\text{O}_3$ E $\text{SiC}$ POR DIFRAÇÃO DE RAIOS X

Cássia Spósito dos Reis (cassia-reis05@hotmail.com)

Orientador: Prof. Dr. Augusto Etchegaray Júnior (augusto.etchegaray@puc-campinas.edu.br)

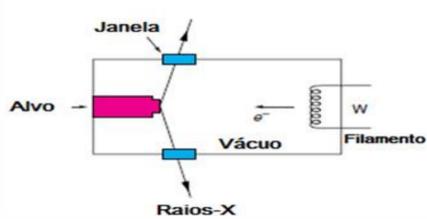
FACULDADE DE QUÍMICA

### INTRODUÇÃO

A descoberta dos raios X foi dada no ano de 1895. Wilhelm C. Röntgen efetuou uma descarga elétrica através de um gás e observou propriedades diferentes e desconhecidas, percebendo que esta radiação podia atravessar corpos opacos à luz (ROZENBERG, 1973). A técnica de raios X pode se aplicar a diversos tipos de materiais, com os ajustes corretos dos fatores intrínsecos e extrínsecos que podem interferir na caracterização correta do material. Outras técnicas de raios X e instrumentos óticos, como microscópio eletrônico, são auxiliares para caracterização dos picos no difratograma de uma amostra obtidos pela difração de raios X.

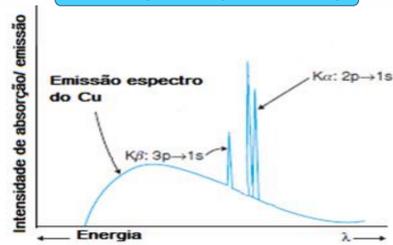
A geração de raios X consiste em que elétrons são retirados de um cátodo e acelerados por um campo eletromagnético em direção a um ânodo, eles colidem e são desacelerados, emitindo radiação em comprimento de onda na faixa dos raios X (BRUNDLE; EVANS; WILSON, 1992 apud FONSECA FILHO; LOPES, 2013).

Esquema de um tubo de raios X



(Fonte: Adaptado de WEST, 2014, p. 234)

Identificação dos picos  $K\alpha$  e  $K\beta$



### Método Rietveld

Determina e quantifica as estruturas cristalinas  
Ajustes nos parâmetros das células  
Estudos estruturais  
Refina fatores de escala

### OBJETIVO

Avaliar o desempenho do equipamento de difração de raios X aplicando o método Rietveld, caracterizando as amostra de:



### MATERIAL E MÉTODOS

Difratômetro Rigaku –Ultima IV, software HighScore Plus da PANalytical

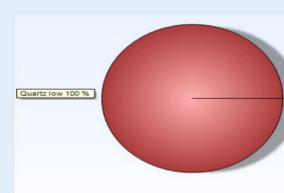
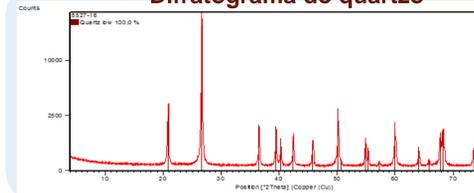


(Fonte: Adaptado do site da Rigaku)

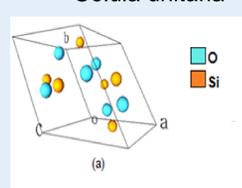
### RESULTADOS E DISCUSSÃO

Para a amostra de quartzo todos os picos obtidos foram referentes ao mineral. Já para amostra de óxido de ferro obteve o mineral hematita e ilmenita ( $\text{FeTiO}_3$ ). E para a amostra carbeta de silício obteve diversos picos e ruídos no difratograma, evidenciando que amostra possui características de um produto de reuso. Mesmo com o auxílio da fluorescência de raios X não foi possível caracterizar todos os picos no difratograma para a amostra de  $\text{SiC}$ .

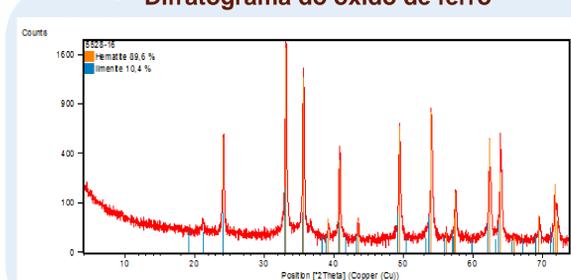
#### Difratograma do quartzo



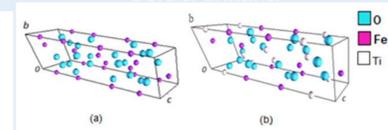
Célula unitária



#### Difratograma do óxido de ferro

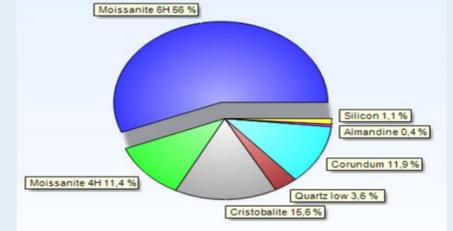
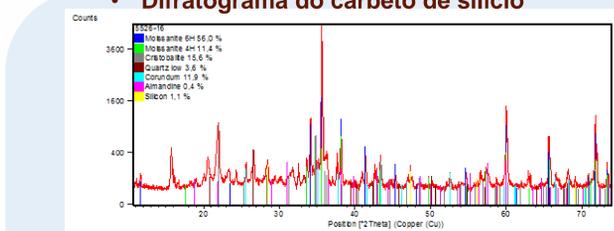


Célula unitária

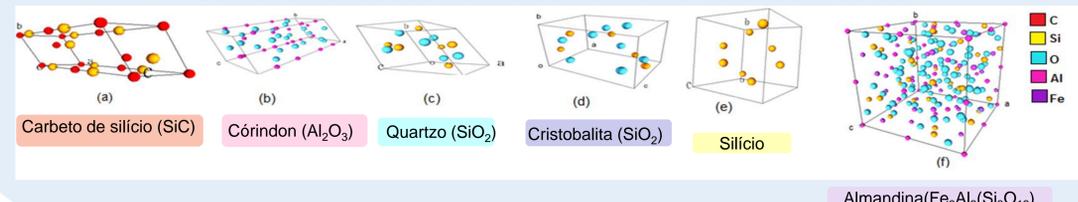


(a) Cella unitária do óxido de ferro ( $\text{Fe}_2\text{O}_3$ ).  
(b) Cella unitária da ilmenita ( $\text{FeTiO}_3$ ).

#### Difratograma do carbeta de silício



Células unitárias dos materiais encontrados na amostra de  $\text{SiC}$



### CONCLUSÃO

- As amostras foram caracterizadas com picos dos respectivos minerais.
- A amostra de carbeta de silício é um produto de reuso.
- A difração de raio X não caracterizou todos os picos da amostra de carbeta de silício.
- O método Rietveld faz com que os difratogramas sejam caracterizados corretamente, além de fornecer dados para interpretação, como porcentagens dos minerais obtidos e células unitárias.
- O equipamento de difração de raio X é aplicável tanto para uso industrial de diversos segmentos, ou para pesquisas envolvendo conceitos de cristalinidade.

### REFERÊNCIAS

BRUNDLE, C.R.; EVANS, C.A.; WILSON, S. *Encyclopedia of Materials Characterization: Surfaces, Interfaces, Thin Films*. Stoneham: Butterworth-Heinemann, 1992 apud FONSECA FILHO, D.H.; LOPES, C.A.G. Avanços em caracterização de amostra sólida cristalinas através de Difratometria de Raios-X. *Estação Científica (UNIFAP)*, Macapá, v.3 n.3, p.31-45, 2013.

RIGAKU, LEADING WITH INNOVATION. Product lines. X-ray diffraction. Multipurpose X-ray diffraction system. Disponível em: <<http://www.rigaku.com/en/products/xrd/ultima>> .

ROZENBERG, L.M. *Elementos de química geral e inorgânica*. São Paulo: Nacional, 1973. v.13, p.219-221.

WEST, A.R. *Solid State Chemistry and its Applications*. 2. Ed. New York: John Wiley & Sons Inc, 2014.