

Cálculo do fator de Debye-Waller na Níquel-Fluorohectorita por EXAFS

Matheus Norberto Jácome (IC), Luciano Ribeiro (PQ)

Câmpus Anápolis de Ciências Exatas e Tecnológicas - Henrique Santillo – Universidade Estadual de Goiás, CP 459, Anápolis, GO, Brasil

lribeiro@ueg.br

Keywords: Debye Waller fator, Níquel-Fluorohectorita, XAS

INTRODUÇÃO

Nenhum outro material foi e continua a ser tão importante para a história da humanidade como a argila, devido as suas propriedades: de plasticidade, ou seja, grande maleabilidade, afinidade pela água e aderência a certas superfícies. Estas e outras características das argilas podem ser explicadas e compreendidas pelo conhecimento de sua composição química, estrutura e propriedades moleculares.

A hectorita é uma argila mineral muito usado na atualidade, é possível encontrá-la em esmaltes cerâmicos, colas e adesivos, produtos de limpeza doméstica e entre outros. A fluorohectorita é um tipo de hectorita, uma argila mineral sintetizada quimicamente, possui fórmula química, pela semi-cela unitária, como $M_x - (Mg_{3-x}Li_x)Si_4O_{10}F_2$, onde, M se refere ao cátion entremeadado por camadas e x é a proporção dos átomos de lítio.

A Figura 1 mostra sua distribuição espacial e sua estrutura molecular formada pelos tetraedros e octaedros, com o cátion o níquel entremeadado entre duas camadas.

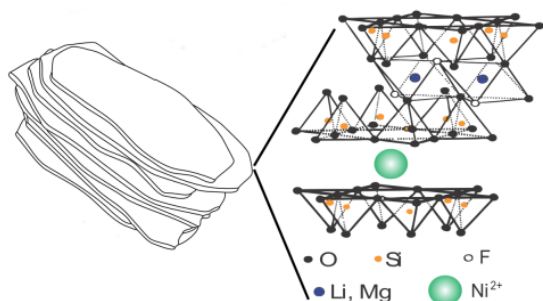


Figura 1 – A distribuição espacial de uma níquel-fluorohectorita (Ni-FHT).

O fator de Debye-Waller (DW), também chamado de fator de temperatura, é um termo utilizado para descrever a atenuação do espalhamento de raios X causado pela vibração térmica. Quando se trata da estrutura fina de absorção de raios X (EXAFS), o fator de Debye-

Waller está relacionado com as flutuações quadráticas médias das distâncias interatômicas entre os átomos. Para obter o fator DW esse trabalho analisou dados de EXAFS realizados no LNLS, Campinas –SP, na amostra Ni-FHT em função da temperatura e umidade relativa.

MÉTODOS

O fator de temperatura é possível ser obtido através do método da razão ¹, que é uma técnica muito usada na literatura. Ela traz informações sobre o termo que representa a agitação térmica do sistema na equação de EXAFS². A técnica usa por meio de uma relação entre os sinais de EXAFS de duas temperaturas diferentes para fornecer o fator Debye-Waller relativo a uma dessas temperaturas.

Recentemente foi publicado um artigo onde os autores obtiveram o fator Debye-Waller da argila sintética Ni-FHT. Os valores apresentados possuíam uma dependência crescente com a temperatura da argila³. Por outro lado, essa informação, se faz necessária no momento, para corroborar com a possibilidade de que as reduções das intensidades dos picos nas transformadas de Fourier das oscilações de EXAFS (ver Fig.2) seja realizada pela mudança do fator de Debye-Waller devido as mudanças de temperatura e umidades na amostra.

RESULTADOS E DISCUSSÕES

A partir da transformada inversa de Fourier no intervalo de $\Delta R = 1,2 - 2,2 \text{ \AA}$, da Fig. 2, foi selecionada a primeira esfera de coordenação níquel – oxigênio.

Por meio do método da razão o comportamento da curva $\ln[\chi(20^\circ\text{C})/\chi(T)]$ versus k^2 foi obtido. A Fig. 3 descreve as curvas obtidas e estas se mostraram ser aproximadamente linear na região estudada para todas as temperaturas.

Para a obtenção da Fig. 3, a temperatura 20 °C foi usada como referência.

Para a transformada de Fourier inversa foi usado o intervalo de $\Delta R = 1,0 - 2,4 \text{ \AA}$, nas oscilações de EXAFS da Fig. 2.

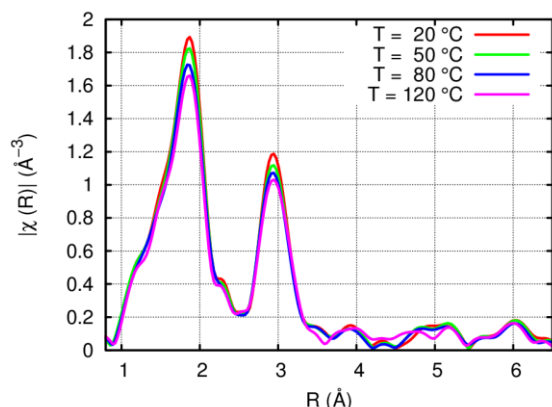


Figura 2 – Transformada de Fourier das oscilações de EXAFS, para a Ni-FHT em função da temperatura.

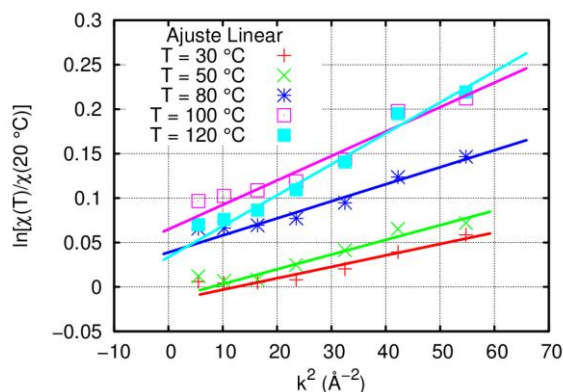


Figura 3 – A figura apresenta o comportamento esperado $\ln[\chi(20^\circ\text{C})/\chi(T)]$ no intervalo de $\Delta k^2 = 5,5 - 55 \text{ \AA}^{-2}$.

A Fig. 4 ilustra comportamento do fator de Debye-Waller em função da temperatura, encontrado através do coeficiente linear da reta, obtidas em cada uma das temperaturas da Fig. 3.

Cada ponto, presente na Fig. 4 representa o valor do coeficiente linear das retas ajustadas na Fig. 3.

CONCLUSÕES

OS resultados do método da razão, Fig. 3 mostrou que o comportamento obtido para a curva $\ln[\chi(20^\circ\text{C})/\chi(T)]$ versus k^2 está aproximadamente linear na região estudada, como era esperado para este método^{1,4,5}.

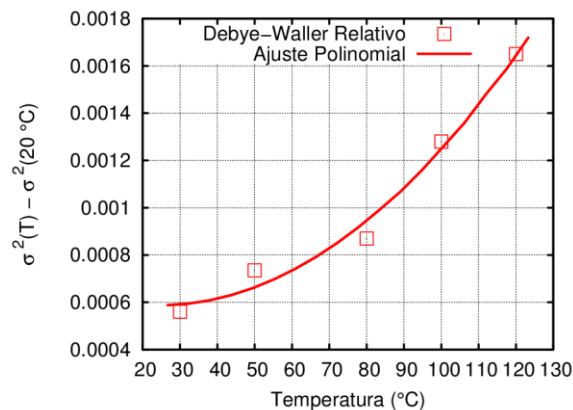


Figura 4 – O gráfico apresenta o fator de Debye-Waller relativo à temperatura de 20°C versus o intervalo de temperatura da Fig. 3.

Em termo da Fig. 4 ilustrou o comportamento do fator de Debye-Waller a temperatura de 20°C , encontrado através do coeficiente linear da reta de cada temperatura na Fig. 3. O gráfico confirmou o aumento da desordem diante da elevação da temperatura.

AGRADECIMENTOS

Os autores agradecem ao apoio financeiro da CAPES, pela bolsa de iniciação científica, a FAPEG pelos recursos concedidos para a apresentação desse trabalho e a UEG pela estrutura de trabalho.

¹ E.A. Stern, D.E. Sayers, and F.W. Lytle, Phys. Rev. B **11**, 4836 (1975).

² J.J. Rehr and R.C. Albers, Rev. Mod. Phys. **72**, 621 (2000).

³ L. Michels, L. Ribeiro, M.S.P. Mundim, M.H. Sousa, R. Droppa, J.O. Fossum, G.J. da Silva, and K.C. Mundim, Appl. Clay Sci. **96**, 60 (2014).

⁴ S.M. Heald and E.A. Stern, Phys. Rev. B **17**, 4069 (1978).

⁵ R.B. Gregor and F.W. Lytle, Phys. Rev. B **20**, 4902 (1979).