

CARACTERIZAÇÃO DO PÓ Bi2212 UTILIZANDO OS PROGRAMAS POWDER CELL E FULLPROF

H. P. Gonçalves¹, B. B. Lima-Kühn¹, D. Rodrigues Jr.², A. R Bigansolli^{1*}

¹UFRRJ – Universidade Federal Rural do Rio de Janeiro. Rodovia BR 465, Km 7, Seropédica, RJ, 23851-970, Brasil.

²EEL/USP – Escola de Engenharia de Lorena, Universidade de São Paulo. Estrada Municipal do Campinho, s/n, Lorena, SP, 12600-000, Brasil.

1. Introdução

O *FullProf* é um programa de refinamento de estrutura cristalina pelo método Rietveld (MR). O MR consiste em ajustar uma curva teórica aos picos do difratograma experimental, minimizando a diferença entre o padrão de pontos experimentais e o padrão de pontos calculados, pelo método dos mínimos quadrados [1]. A fase Bi2212 pertence ao grupo espacial Fmmm, com valores de parâmetros de rede e posições atômicas similares àqueles reportados por Matheis *et al.* [2].

2. Procedimento Experimental

O programa *FullProf* foi usado para realizar o refinamento estrutural da fase supercondutora Bi2212 ortorrômbica a partir do difratograma experimental da amostra Bi2212. O difratograma foi obtido a partir de pós-estequiométricos da fase Bi2212 produzidos pela empresa UniQuest Ltda. – Austrália, com tamanho médio de partículas de 2,24 μm . As medidas foram realizadas em temperatura ambiente, sob radiação $\text{CuK}\alpha$, no intervalo de $10^\circ \leq 2\theta \leq 70^\circ$, $0,05^\circ$ de passo angular e tempo de contagem por ponto de 2 s, utilizando um difratômetro RICH-SEIFERT modelo ISSO-DEBYEFLEX. No refinamento a função Pseudo-Voigt foi adotada como função perfil e foram utilizados como dados iniciais os valores obtidos a partir da comparação do padrão com o resultado experimental através do programa *Powder Cell*.

3. Resultados e Discussões

O padrão da fase Bi2212 e o difratograma experimental da amostra são apresentados nas Fig. 1 e Fig. 2, respectivamente. Os valores dos parâmetros de rede obtidos a partir do refinamento Rietveld da fase Bi2212 neste estudo são: $a = 5,3893$ $b = 5,4172$ Å e $c = 30,8861$ Å .

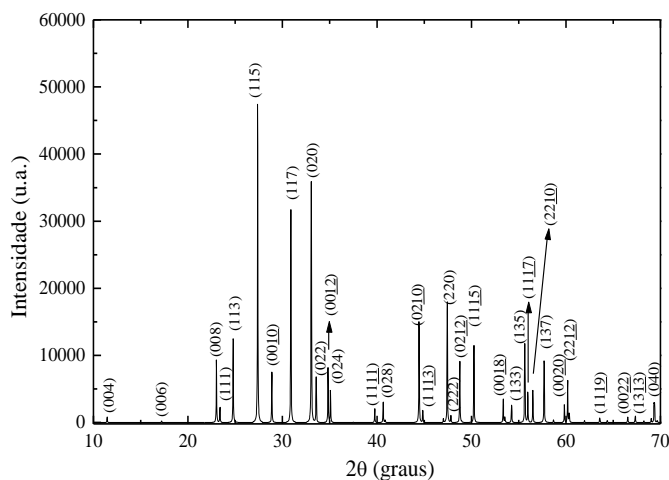


Fig. 1 - Simulação da fase Bi2212 utilizando o programa *Powder Cell*

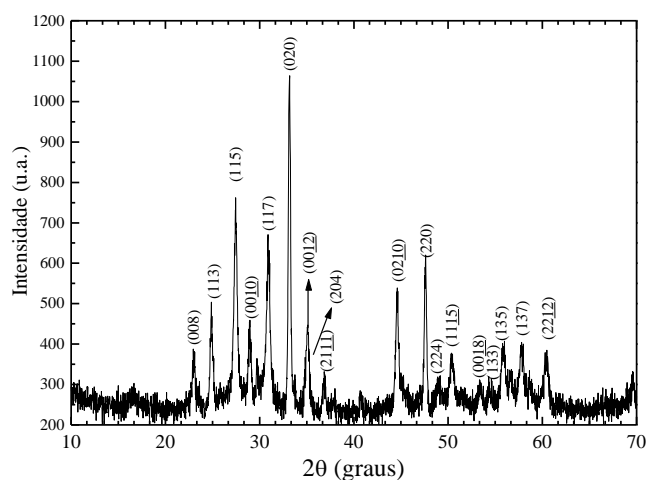


Fig. 2 - Difratograma obtido a partir do pó da fase Bi2212

4. Referências

- [1]- L. B. McCusker *et al.*, J. Appl. Cryst, **32**, 36-50, (1999).
 [2]- D. P. MATHEIS, et al., Powder Diffraction, **5** (1), (1990) 8.

Agradecimentos

Os autores agradecem à empresa UniQuest Ltda. – Austrália pelo material doado para a realização deste trabalho.

* bigansolli.arb@gmail.com