

Engenharia de Materiais

Emprego do método de Refinamento de Rietveld para materiais cristalinos com interesse para o agronegócio

Bárbara Rodrigues Meneguini dos Santos - 9º período de Engenharia de Materiais, UFLA, bolsista PIBIC/CNPq.

Jeferson Almeida Dias - Orientador, professor do Instituto de Ciência, Tecnologia e Inovação – ICTIN, UFLA - Orientador(a)

Resumo

O estudo e aprimoramento dos materiais aplicados ao agronegócio pode melhorar a qualidade e produtividade em muitos tipos de atividades, como na descontaminação de águas contaminadas com agroquímicos com o uso de fotocatalisadores e a liberação controlada de nutrientes com o uso de materiais suporte. Nesse sentido, o objetivo deste trabalho foi o treinamento no uso do método de refinamento de Rietveld, uma ferramenta de alta precisão para analisar as estruturas dos materiais, e sua posterior aplicação para refinamento de dióxido de titânio (TiO₂) e hidroxiapatita (HAp). A etapa de treinamento consistiu na capacitação em conceitos de cristalografia, princípio da técnica e softwares; realização do refinamento e atividades práticas. Já na etapa de aplicação foram realizados os refinamentos das estruturas de TiO₂ dopadas com boro e nitrogênio obtidos por diferentes métodos de síntese (precursores poliméricos – PP, solvotermal microondas – MW e ultrassom - US) visando emprego na descontaminação fotocatalítica de águas com poluentes orgânicos; e refinamento das estruturas de amostras de hidroxiapatita obtidas pelo mesmo método de síntese em via rápida e lenta, ambas visando emprego na liberação controlada de nutrientes no solo. Com o foco em fotocatalise, foi possível observar e quantificar que a dopagem do TiO₂ propiciou diferença nas fases formadas, onde a dopagem com boro apresentou ácido bórico remanescente da síntese em alguns métodos utilizados e a dopagem com nitrogênio foi completa para todos eles. Além disso, em todas as amostras houve distorção da estrutura, alterando os parâmetros de rede, onde ocorreu a formação da fase anatase, mais fotoativa, para todos eles. Também, o método MW foi o único que propiciou somente a formação das fases com atividade fotocatalítica (anatase e brookita) para ambas as dopagens. Com relação ao estudo de materiais suporte para liberação de nutrientes no solo, as análises de HAp indicaram que as amostras eram de fato HAp, apresentando convergência nos refinamentos, onde os resultados de parâmetro de rede estimados foram coerentes com os valores encontrados na literatura para a hidroxiapatita sem substituições catiônicas. Por fim, os resultados demonstraram a possibilidade de uso da técnica de Refinamento de Rietveld para estudar a estrutura desses materiais com bastante precisão, permitindo a correlação com diversas propriedades dos materiais, sendo uma técnica de custo baixo e bastante vantajosa para o agronegócio.

Palavras-Chave: caracterização, dióxido de titânio, hidroxiapatita.

Instituição de Fomento: CNPq

Link do pitch: <https://youtu.be/lsgjaBvRDfM>