

**110-006**

**USO DO MÉTODO DE RIETVELD PARA ELUCIDAÇÃO DAS ALTERAÇÕES ESTRUTURAIS NA FASE ANATASE DO DIÓXIDO DE TITÂNIO MODIFICADO COM SILÍCIO E ZIRCÔNIO**

Cavalheiro, A.A.(1); Stropa, J.M.(2); Favarin, L.R.V.(2); Junior, A.M.(2); Amoresi, R.A.C.(3); Silva, M.S.(4); Zaghete, M.A.(3); Oliveira, L.C.S.(2);

Universidade Estadual de Mato Grosso do Sul(1); Universidade Federal de Mato Grosso do Sul(2); Universidade Federal de Mato Grosso do Sul(3); Universidade Federal de Mato Grosso do Sul(4); Universidade Estadual Paulista(5); Universidade Estadual de Mato Grosso do Sul(6); Universidade Estadual Paulista(7); Universidade Federal de Mato Grosso do Sul(8);

O rearranjo estrutural em materiais cerâmicos cristalinos como o dióxido de titânio, pode ser avaliado por difração de raios-X e refinamento pelo Método de Rietveld. As propriedades desta cerâmica dependem da quantidade de cada uma das duas fases tetragonais que ocorrem nesta cerâmica, uma de baixa simetria, denominada anatase e outra de alta simetria, denominada rutilo. Neste trabalho, o efeito da modificação do dióxido de titânio com 4mol% de zircônio e 2mol% de silício, concomitantemente, foi investigada Rietveld. Ambas as amostras, modificada e não modificada, foram sintetizadas por Sol-Gel e calcinadas em várias temperaturas. Observou-se uma expansão volumétrica da cela unitária e a redução da tetragonalidade na amostra modificada, e a fase única anatase persiste até 900°C, com consequências morfológicas e fotônicas, quando comparada com a amostra não modificada, marcada por uma contração da cela unitária e aumento de tetragonalidade até sua completa conversão em fase rutilo a 600°C.