

Análise estrutural do vidro aluminosilicato de cálcio submetido a altas pressões via adaptação da célula DAC acoplada à espectroscopia Raman

Robson Ferrari Muniz^{1*}, Francielle Sato¹, Jairo Fonseca², Ulisses Ferreira Kaneko², Ricardo D. dos Reis², Narcizo M. Souza-Neto², Antonio Medina Neto¹

1- Departamento de Física, Universidade Estadual de Maringá, 87020900, Maringá, PR, Brasil

2- Laboratório Nacional de Luz Síncrotron, 13083-970, Campinas, SP, Brasil

*rferrarimuniz@gmail.com.

Palavras Chave: Estrutura vítrea, condições extremas de pressão, densificação permanente.

Introdução

A gama de materiais analisadas em câmaras de bigornas de diamante (DAC - *Diamond Anvil Cell*) tem progredido continuamente, de forma que atualmente as mais diversas técnicas de investigação experimental podem ser acopladas para estudos *in-situ* de materiais em condições extremas. O uso da célula de pressão para estudos de materiais em condições extremas versa sobre as mais diversas áreas; materiais geológicos, farmacêuticos, químicos, etc. No entanto, o uso dessa ferramenta para estudo de vidros não é amplamente praticado. O entendimento absoluto das modificações estruturais de curto alcance em vidros é um desafio, mas tem se tornado interesse eminente. Nosso último artigo sobre o assunto aborda vidros aluminosilicatos de cálcio com diferentes composições de sílica. A espectroscopia Raman foi utilizada para avaliar a estrutura dos vidros em condições normais e de altas pressões. Utilizamos uma célula DAC, tipo membrana, e argônio como meio hidrostático de pressão. A pressão máxima na qual os vidros foram submetidos foi, até o então, 19 GPa. Neste trabalho, selecionamos a matriz com menor quantidade de sílica, ou seja, o com maior número de oxigênios ligados (NBOs) em T-O-T (T = Si ou Al) e, portanto, mais depolimerizado. Usamos uma célula DAC (de manuseio mecânico usinada no LNLS), na qual submetemos o vidro a uma pressão máxima de aproximadamente 33 GPa. Uma adaptação foi efetivada na célula de pressão, permitindo as medidas de espectroscopia micro-Raman.

Resultados e Discussão

Figura 1.a) apresenta os espectros Raman da amostra LSCAS, *in situ* em DAC, em diferentes pressões, 1.b) a evolução da banda principal (BP) e 1.c) a região de alta frequência do espectro, após subtração de linha de base e normalização. A posição da BP apresentou um *redshift*, concomitante com uma redução substancial na intensidade. Isso corresponde a uma mudança na simetria local dos átomos de oxigênio, e pode ser indicativo do aumento da coordenação de Al ou destruição parcial da rede.

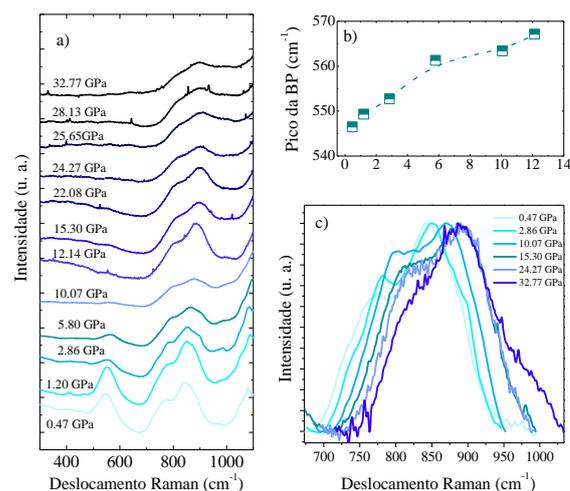


Figura 1. Espectros Raman da amostra LSCAS.

Uma vez que a BP desaparece completamente para pressões superiores à 15 GPa, aumentar a pressão não nos traria informações adicionais sobre a estrutura do vidro. No entanto, como podemos observar na Figura 1.c) importantes modificações podem ser destacadas na banda de alta frequência, ligada às espécies Qⁿs do vidro e, portanto, a depolimerização do mesmo. No trabalho precedente, a discussão dessa banda precisou ser negligenciada devido a sobreposições no espectro Raman devido ao aparato experimental utilizado. Agora, com a nova célula e condições diferenciadas de medidas, fomos capazes de investigar meticulosamente essa banda.

Conclusões

Informações adicionais referentes ao efeito da pressão na estrutura do vidro LSCAS foram efetivadas. Em especial, a variação de NBOs, a densificação e a depolimerização da rede foram discutidos. A banda relacionada às ligações Al-O-Al evolui progressivamente com a pressão sugerindo que tais ligações foram modificadas.

Agradecimentos

CAPES, CNPq, LNLS e FINEP.

¹R. F. Muniz, D. de Ligny, C. Martinet, M. Sandrini, A. N. Medina, J. H. Rohling, M. L. Baesso, S. M. Lima, L. H. C. Andrade, and Y. Guyot, *J. Phys. Condens. Matter*, 2016, p. 315402.