



Contribution ID : 14

Type : not specified

Refinamiento Rietveld en una mezcla de fases usando DRX por sincrotrón en la composición (SnPb_{0.4}In_{0.6})Ba₃Tm₂Cu₇O₂₀

Thursday, 5 May 2011 18:00 (0:20)

Abstract content

La difracción de rayos-X (DRX) por sincrotrón fue utilizada para cuantificar con más precisión la mezcla de fases presentes en la composición en estudio. La caracterización estructural de la composición (SnPb_{0.4}In_{0.6})Ba₃Tm₂Cu₇O₂₀, se realizó por medio de la técnica de difracción de rayos X, de alta resolución. Un análisis detallado del difractograma presentó los siguientes compuestos: BaTb_{0.5}Sb_{0.5}O₃ ICSD # 33619, Yb₂BaCuO₅ ICSD # 80573, CuO ICSD # 87122, Ba_{1.99}Y_{0.01}Cu₃O₇ ICSD # 69611, y Yb₂Cu₂O₅ ICSD # 79432. El ajuste Rietveld del archivo de datos de rayos X, indicó que el compuesto BaTb_{0.5}Sb_{0.5}O₃ (PDF-01-076-0127) reportado por Wittmann, U. et al. [1] se encuentra en mayor proporción. Los cristales en la muestra con morfología cúbica observados por SEM, presentaron una mayor proporción. De acuerdo a la determinación del porcentaje atómico promedio que se realizó por EDX, se asignó la fórmula estequiométrica. Por lo que se consideró escribir la fórmula Ba(Yb_{0.38}In_{0.10}Sn_{0.42}Pb_{0.10})O₃ isoestructural al compuesto BaTb_{0.5}Sb_{0.5}O₃. Para mantener un balance de cargas, se propuso una deficiencia en átomos de oxígeno Ba(Yb_{0.38}In_{0.10}Sn_{0.42}Pb_{0.10})O_{2.66}. Las posiciones atómicas para tal composición son la siguientes, dentro del grupo espacial Pm-3m: Ba²⁺, en la posición de Wyckoff 1a, mientras que Yb³⁺, In³⁺, Cu²⁺, Sn⁴⁺ y Pb²⁺ fueron distribuidos en la posición de Wyckoff 1b.

Referencia:

1. Wittmann U., Rauser, G. y Kemmler-Sack, S., Z.Anorganische und Allgemeine Chemie, 482 (1981) 143-153.

Este trabajo es parcialmente financiado por el proyecto CONACYT 80380.

Summary

Primary author(s) : Mr. M. ESTRADA, Joel (IIM-UNAM)

Co-author(s) : Dr. CHAVIRA, E. (Instituto de Investigaciones en Materiales, Universidad Nacional Autónoma de México); Dr. ROSALES, I. (Instituto de Investigaciones en Materiales, Universidad Nacional Autónoma de México); Prof. MARINERO, E. E. (Hitachi GST San José Research Center); Dr. SUCHOMEL, M. (Argonne National Laboratory)

Presenter(s) : Mr. M. ESTRADA, Joel (IIM-UNAM)