

ESTUDO DO CaTiO_3 POR MEIO DE ESPECTROSCOPIA RAMAN

Antonio Geovane Cavalcante da Silva, Paulo de Tarso Cavalcante Freire

Estudou-se durante o último ano alguns conceitos relacionados com as técnicas espectroscópicas. O interesse principal era estudar materiais com interesse na geologia e áreas afins como a paleontologia. Inicialmente estudou-se o espalhamento Raman, que é uma técnica através da qual é possível verificar os modos normais de vibração de diversos materiais. A descrição precisa do fenômeno envolve teoria de perturbação quântica. Uma vez que ainda não tivemos a referida disciplina, estudamos o fenômeno de uma forma aproximada através de uma descrição clássica. O espalhamento Raman consiste no espalhamento inelástico da luz, ou seja, a luz espalhada possui uma energia diferente da energia da luz incidente. A diferença de energia entre a luz incidente e a luz espalhada está relacionada à energia dos modos vibracionais do material, que pode ser um sólido, um líquido ou mesmo um material em fase gasosa. Investigou-se o espectro Raman do CaTiO_3 sob condições de baixas temperaturas. Esse material apresenta uma banda em aproximadamente 639 cm^{-1} que foi classificada como um estiramento simétrico TiO; modos entre 450 e 500 cm^{-1} que foram classificados como torção do Ti-O₃; modos entre 180 e 400 cm^{-1} , que foram classificados como dobramento O - Ti - O. Observa-se ainda uma banda em aproximadamente 155 cm^{-1} que foi classificado como um modo da rede. Baixando-se a temperatura observou-se o deslocamento das frequências de todas as bandas para mais altos valores, ao mesmo tempo em que se observou que de uma forma geral a largura de linha diminuiu. Esse resultado já seria esperado, uma vez que em temperaturas menores, a desordem é menor. Uma discussão sobre o comportamento geral das bandas do CaTiO_3 a baixas temperaturas é fornecido nesse trabalho.

Palavras-chave: espectroscopia. Raman. CaTiO_3 . geologia.