

SÍNTESIS Y ANÁLISIS ESTRUCTURAL DE LA HULSITA DE NIQUEL DOPADA CON ANTIMONIO $\text{Ni}_{5.33}\text{Sb}_{0.67}\text{B}_2\text{O}_{10}$

A. N. Zavala T.,¹ J. Quispe M.,¹ D. R. Sánchez C.²

¹Facultad de Ciencias Físicas, Universidad Nacional Mayor de San Marcos. Apartado postal 14-0149.
Lima 14. Perú

²Instituto de Física, Universidade Federal Fluminense, Campus da Praia Vermelha, Niterói, Rio de Janeiro 24210-346, Brazil

El presente artículo reporta el estudio sobre la síntesis del compuesto $\text{Ni}_{5.33}\text{Sb}_{0.67}\text{B}_2\text{O}_{10}$ por el método del fundente y su caracterización estructural mediante la técnica de la difracción de rayos X para monocristal. El software Científico Match aplicado a los datos experimentales de la difracción de los rayos X determinó que el compuesto tuvo una sola fase. El archivo de salida (out) del programa Fullprof, mediante el refinamiento Rietveld reveló una sola fase del compuesto con un $\chi^2 = 8.62$. También mostró que en la celda unitaria hay una molécula del compuesto por 18 átomos, cuyas proporciones de los diferentes tipos de átomos que la conforman coinciden con la fórmula estequiométrica química. A través del software de gráficos Vesta se visualizó que los iones boro B, Ni y Sb, forman enlaces con oxígenos generando unidades estructurales en forma de triángulos (BO_3) y octaedros (NiO_6 , SbO_6). La peculiaridad de las hulsitas es que están formadas por subestructuras de bajas dimensiones: dos en forma de cintas planas paralelas y otra ubicada en el medio de las cintas por planos en forma de zigzag. Los átomos de antimonio se ubican en las cintas planas paralelas y entre estos átomos ubicándose un átomo de níquel, mientras que en los planos en forma de zigzag se ubican los átomos de níquel. Tanto, los planos en forma de cintas paralelas y los planos en forma de zigzag se extienden a lo largo del eje cristalográfico b. Estas subestructuras son las que le dan el carácter de únicas en su especie y son las responsables de sus propiedades físicas.

Palabras clave: Hulsita, refinamiento Rietveld, patrón de difracción en polvo, método del fundente, celda unitaria.

Bibliografía

- 1.- Contreras, C. P. (2017). Study of magnetic oxiborates with ludwigite and hulsite structures [Tese doutoral, Universidade Federal Fluminense]
- 2.- Silva de Freitas, D. C. (2011). Estudos estruturais e magnéticos de oxiboratos anidros de cobalto dos tipos ludwigita e hulsita. [Tese doutoral, Universidade Fluminense]
- 3.- International Tables for Crystallography. (2016)-Volume A. Edited by Hahn, Theo. Published for The International Union of Crystallography by Springer
- 4.- Moma, K. and Izumi, F. (2011). "VESTA 3 for three-dimensional visualization of crystal, volumetric and morphology data," J. Appl. Crystallogr., 44, 1272-1276.
- 5.- Giacovazzo, C. (2000). Fundamentals of Crystallography. IUCr, Oxford University Press
- 6.- Cruz-Gandarilla, F. (2005). Aplicaciones de la Difracción de Rayos X a Materiales Policristalinos.
- 7.- Young, R. A. (2002). The Rietveld Method. IUCr, Oxford, University Press.