

**SOCIEDADE BRASILEIRA
DE CRISTALOGRAFIA
XIV REUNIÃO**



RESUMOS

São Carlos, S P
20 a 22 de novembro de 1997 ✓



REFINAMENTO DA ESTRUTURA CRISTALINA DA CRIPTOMELANA UTILIZANDO O MÉTODO DE RIETVELD

F.M.S. Carvalho¹, D. Atencio^{1*}

¹Instituto de Geociências - USP

*Bolsa de Produtividade em Pesquisa CNPq

O método de Rietveld foi empregado para refinamento da estrutura cristalina de material sintético análogo ao mineral criptomelana, de fórmula química $K_{0,44}Mn^{III}_{1,69}Mn^{IV}_{6,62}O_{16} \cdot 0,43H_2O$, que, como o mineral natural, era criptocristalino.

Obtiveram-se para este composto: grupo espacial I4/m, parâmetros de cela unitária $a_0=9,82(1)$ e $b_0=2,855(4)$ Å. As coordenadas atômicas finais foram: K = 0 0 0,5; Mn = 0,3493(5) 0,1687(5) 0; O(1) = 0,157(1) 0,201(2) 0; O(2) = 0,534(2) 0,160(2) 0.

Os índices de critério para avaliação do refinamento obtidos foram: $R_{wp}=18,50$ para R_{wp} esperado de 32,92; $R_p=13,77$; $S=0,56$ e $Dw-d=0,42$; e $R_t=8,50$.

De maneira geral, os dados são concordantes com uma estrutura de inomanganato, formada por quatro cadeias duplas de octaedros de $[MnO_6]$ formando túnel onde se aloja K, cujo grau de ocupação (M) está de acordo com suas coordenadas e a composição química da criptomelana sintética.