



## Síntese e caracterização da cerâmica tipo perovskita SmMnO<sub>3</sub>

Juliana de Oliveira Silva<sup>1</sup> (IC)\*, Camila Costa Pinto<sup>2</sup>, Sérgio Michielon de Souza<sup>3</sup>.

\*e-mail: [juliana.os26@hotmail.com](mailto:juliana.os26@hotmail.com)

<sup>1</sup> Departamento de Engenharia de Materiais/UFAM – FAPEAM

<sup>2,3</sup> Programa de Pós-Graduação em Ciência e Engenharia de Materiais/UFAM

<sup>2,3</sup> Programa de Pós-Graduação em Física /UFAM

<sup>3</sup> Departamento de Física/UFAM

*Palavras Chave:* Cerâmicas, Ligações Químicas.

### Introdução

As propriedades e desempenho dos materiais são diretamente dependentes dos (1) tipos de átomos presentes; (2) suas ligações químicas e (3) das estruturas atômicas formadas. Isso explica a existência de diversos tipos de materiais em relação ao número restrito de elementos presentes na tabela periódica. Os materiais podem apresentar dois tipos de ligações: primárias e secundárias, cujo objetivo é assumir a estrutura eletrônica mais estável e minimizar a energia presente, dando estabilidade ao material<sup>1</sup>. As cerâmicas são definidas como materiais não-metálicos inorgânicos e que variam seu tipo de ligação desde puramente iônica até totalmente covalentes<sup>1</sup>. Além disso, existem inúmeras cerâmicas com a combinação desses dois tipos de ligação, sendo o grau da natureza iônica dependente da eletronegatividade dos átomos. Estas ligações irão influenciar o arranjo cristalino bem como o grupo espacial do cristal formado. As cerâmicas do tipo perovskitas em seu estado mais estável apresentam tipo estrutural ABO<sub>3</sub> e são objeto de pesquisa tendo em vista o largo leque em aplicações. O seu arranjo preferido pode ser dado pela Regra de Goldschmidt, que correlaciona os raios iônicos dos cátions com a estrutura formada. Esta relação é dada por:

$$t = \frac{r_A + r_O}{\sqrt{2}(r_B + r_O)}$$

Neste trabalho, o cátion A (maior raio iônico) é um elemento de terra rara samário e B (menor raio iônico) o metal manganês. O trabalho visa assim buscar relacionar a estrutura esperada a partir do cálculo do Fator de

Goldschmidt com a estrutura efetivamente formada, caracterizando a cerâmica complexa do sistema SmMnO<sub>3</sub> sintetizada por mecanoquímica através da Difração de Raios X.

### Material e Métodos

- Síntese por **Mecanoquímica** em moinho vibracional tipo Spex;
- **Difração de raios X** em cada intervalo de moagem no difratômetro Empyrean da fabricante Panalytical.

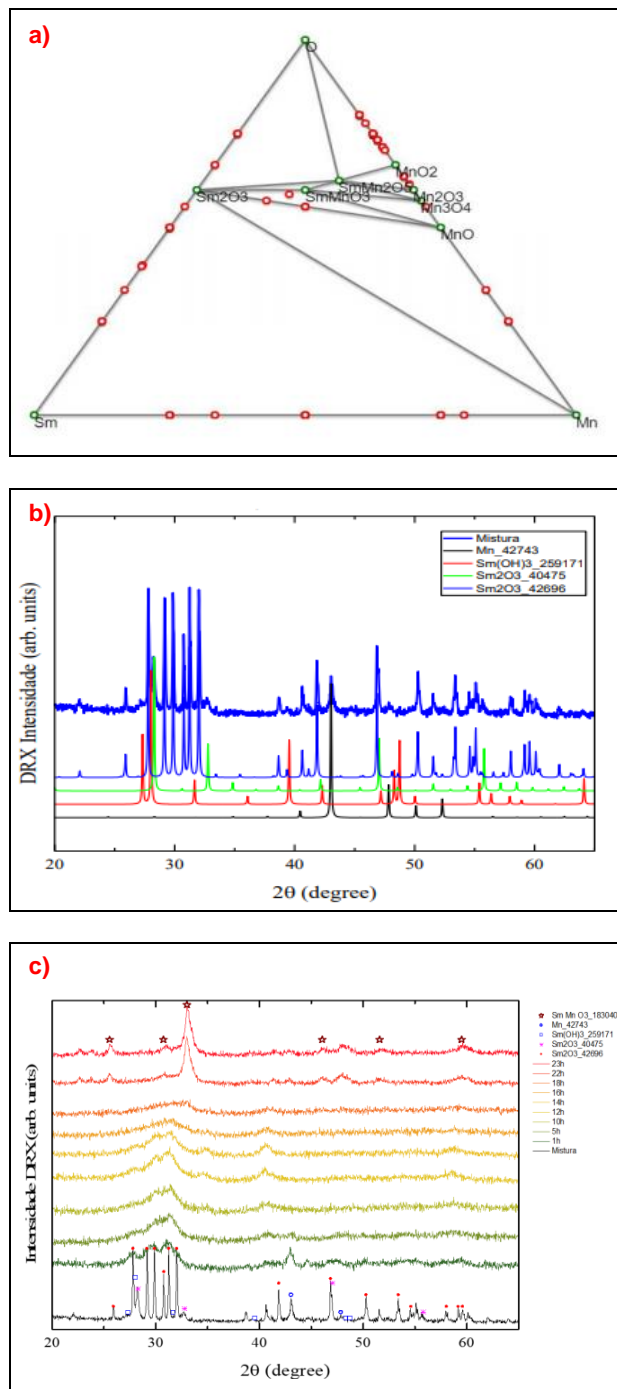
### Resultados e Discussão

A estrutura desejada é formada a partir dos átomos de Sm, Mn e O. Utilizando estes átomos para obter o fator de Goldschmidt, obtém-se o valor de 0.837, e assim a estrutura prevista é a Perovskita Ortorrômbica tipo GdFeO<sub>3</sub>.

A partir da modelagem da estrutura desejada, foram analisados os cálculos teóricos disponíveis na base de dados OQMD. Os cálculos DFT para estes elementos demonstram, pelo diagrama de fases obtido na plataforma OQMD na **Figura 1. a)**, que a estabilidade da fase SmMnO<sub>3</sub> é prevista<sup>2</sup>. O padrão de difração de raios X da mistura dos precursores está na **Figura 1. b)**, onde pode ser observada presença do manganês metálico (cartão ICSD # 42743 e grupo espacial I -4 3 m), juntamente com os polimorfos do óxido de samário (cartão ICSD #42696, grupo espacial I a -3, e #40475, grupo espacial C 1 2 / m 1) com uma pequena porção de tri-hidróxido de samário (cartão ICSD #259171, grupo

espacial  $P63/m$ )<sup>3</sup>.

A estrutura perovskita  $\text{SmMnO}_3$  formou-se com 18 horas de moagem e seu padrão torna-se mais aparente nas demais horas subsequentes, como se vê na **Figura 1. c)**. Esta estrutura corresponde àquela prevista pelo fator de Goldschmidt: Perovskita Ortorrômbica tipo  $\text{GdFeO}_3$ . A partir das 22 horas de moagem o material precursor apresenta apenas a estrutura monofásica do  $\text{SmMnO}_3$  e, ao se apresentar estável em 23 horas de moagem, o processo é interrompido.



**Figura 1.** a) Diagrama de fases a partir de samário, manganês e oxigênio segundo cálculos do OQMD; b) Difração de raios x experimental da mistura de precursores para obtenção do  $\text{SmMnO}_3$ , sobreposto aos padrões de polimorfos pelo CIF de  $\text{Sm}_2\text{O}_3$  e Mn; c)

Difração de raios x em função do tempo de moagem do  $\text{SmMnO}_3$ .

## Conclusões

Conforme previsto pela literatura, a estrutura perovskita  $\text{SmMnO}_3$  formada corresponde a perovskita ortorrômbica tipo  $\text{GdFeO}_3$  e esta formou-se com 18 horas de moagem. A obtenção desses resultados possibilitou de forma prática aquilo que se foi estudado na literatura.

Para trabalhos futuros, serão realizados o refinamento de Rietveld dos padrões de difração de raios x utilizando GSAS, fornecendo informações da microestrutura do material, bem como o norteamento para futuros tratamentos térmicos.

## Agradecimentos

Agradeço a FAPEAM pelo apoio financeiro deste trabalho; ao meu professor orientador Sérgio Michielon e todo o grupo de pesquisadores do LabMat pela oportunidade de conhecer a ciência dos materiais dentro e fora dos livros; e, por fim, mas não menos importante, à minha família e amigos.

<sup>1</sup> CALLISTER, William D. & RETHWISCH, D. G. *Ciência Dos Materiais Uma Introdução*. 8ª ed. Rio de Janeiro: LCT, 2012.

<sup>2</sup> PECHARSKY, V., ZAVALIJ P. Y., *Fundamentals of Powder Diffraction and Structural Characterization of Materials*, Springer US, Boston, MA, 2009. Doi: 10.1007/978-0-387-09579-0.

<sup>3</sup> MOIS I. AROYO, *International Tables for Crystallography, Volume A, Space-group symmetry*. 6th edition. Edited by Mois I. Aroyo. Wiley, 2016. Pp. xxi + 873., *Acta Crystallogr. Sect. A Found. Adv.* 73 (2016) 873. <http://scripts.iucr.org/cgi-bin/paper?S2053273317005526>.