

Aplicação do método de Rietveld nos pós compósitos de manganito de lantânio dopado com estrôncio e zircônia estabilizada com ítria

Rubens Chiba^I, Reinaldo Azevedo Vargas^{II}, Marco Andreoli^{III},
Luis Gallego Martinez^{IV}, Emília Satoshi Miyamaru Seo^V

I, II, III, IV, V Centro de Ciência e Tecnologia de Materiais, CCTM
Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares, IPEN-CNEN/SP
Av. Prof. Lineu Prestes, 2242 - Cidade Universitária (USP)
CEP 05508-000 - São Paulo - SP – Brasil

rchiba@ipen.com.br, ravargas@usp.br, mandreol@ipen.br,
lgallego@ipen.br, esmiyseo@ipen.br

O manganito de lantânio dopado com estrôncio (LSM) e a zircônia estabilizada com ítria (YSZ) são materiais cerâmicos tecnológicos utilizados como catodo compósito em dispositivos eletroquímicos geradoras de energia elétrica, denominadas Células a Combustível de Óxido Sólido de Temperatura Alta (CaCOSTA). Os pós compósitos de LSM e YSZ (LSM/YSZ) foram obtidos pela técnica de mistura de sólidos, utilizando pós de LSM sintetizado pela técnica dos citratos e pós de YSZ comercial. A importância do estudo dos pós compósitos de LSM/YSZ se deve ao aumento da condutividade iônica, além da condutividade eletrônica na região da interface entre o catodo LSM e o eletrólito YSZ. Nesta interface ocorre a reação de redução do oxigênio (RRO) à temperatura de operação elevada na faixa de 800 °C a 1000 °C. A RRO é considerada uma etapa importante para o bom funcionamento, desempenho e vida útil da CaCOSTA. Os pós compósitos de LSM/YSZ foram caracterizados por difração de raios X (DRX) e aplicado o método de Rietveld. O método de Rietveld permitiu a realização do refinamento das características estruturais dos pós, obtendo-se resultados como composição química, quantificação das fases presentes, densidade teórica, estrutura cristalina, grupo espacial parâmetros de rede e volumes de celas unitárias. O programa utilizado para o refinamento foi o *General Structure Analysis System* e os bancos de dados *Inorganic Crystal Structure Database* e *Powder Diffraction File*. Os resultados obtidos por este método de caracterização confirmam que as composições químicas obtidas são similares às nominais e a formação das estruturas cristalinas para as fases LSM e YSZ são hexagonal e cúbica, respectivamente. Somam-se resultados como: grupo espacial, parâmetros de rede e volume da célula unitária do composto LSM/YSZ obtidos pelo método de Rietveld, conforme os dados abaixo:

	Fase LSM	Fase YSZ
Grupo espacial	R-3cH	Fm-3m
Parâmetros de rede	a = b = 5,5182 Å c = 13,3631 Å	a = 5,1410 Å
Volume da célula unitária	352,40 Å ³	135,88 Å ³

Palavras Chave: célula a combustível de óxido sólido de temperatura alta, catodo compósito, manganito de lantânio dopado com estrôncio, zircônia estabilizada com ítria, método de Rietveld.