

CARACTERIZAÇÃO ESTRUTURAL ASSOCIADA AO REFINAMENTO DE RIETVELD DAS MANGANITAS ÓXIDAS $\text{Bi}_{0,1}\text{Co}_{1,9}\text{MnO}_4$ E $\text{Bi}_{0,3}\text{Co}_{1,7}\text{MnO}_4$ (APOIO CNPq)

Aluna: Isabella Mara Lima

Orientadora: Profa. Dra. Adriana dos Reis

Curso: Engenharia de Produção Mecânica

Campus: Bauru

Materiais que apresentam variações em sua estrutura atômica têm a possibilidade de serem modificados, de modo a abrir um leque de suas aplicações. O composto Co_2MnO_4 é um material multiferróico capaz de ocupar sítios tetraedrais e octaedrais, por esse motivo, qualquer substituição feita pode resultar na variação das propriedades físicas desse composto. A inserção do Bismuto (Bi) constitui em um meio interessante para estudar a influência da variação dos estados de oxidação de Co e Mn nas propriedades elétricas e magnéticas desse composto multiferróico e com estrutura espinélio. A caracterização estrutural dos materiais foi realizada por difração de Raios-X e o modelamento via refinamento de Rietveld usando o programa *Fullprof Suite*, por conta das divergências de estruturas como a do raio atômico e outras, dessa maneira é possível ter certeza da formação do material pretendido. Para estudos, a técnica de difração de Raios-X é essencial para análise dos materiais. Um feixe de Raios-X incide sobre os átomos de uma estrutura cristalina, os elétrons pertencentes aos átomos se excitam e vibram na frequência do feixe incidente, emitindo radiação em todas as direções, toda a energia é quantizada e quando os elétrons emitem radiação eles saltam para outros níveis de energia. Já com o método de Rietveld é possível identificar os polimorfos e quantificar cada um. O método consiste em ajustar um difratograma teórico a partir de um perfil de DRX ou DN obtido experimentalmente, ajustando os parâmetros estruturais, como parâmetros de rede, forma e intensidade dos picos de difração, radiação de fundo, posições atômica, e outros.