

<b>Dados do Plano de Trabalho</b>	
<b>Título do Plano de Trabalho:</b>	Estudo de Transições de Fase em Molibdatos e Tungstatos de Prata Micro(Nano)estruturados
<b>Modalidade de bolsa solicitada:</b>	PIBIC
<b>Projeto de Pesquisa vinculado:</b>	Propriedades Físicas de Micro/nanoestruturas Inorgânicas e Aplicações

## 1. OBJETIVOS

### 1.1. Objetivo geral:

Sintetizar micro(nano)materiais puros e/ou dopados a base de molibdênio e Tungstênio a fim de estudar transições de fase estruturais e morfológicas em condições extremas de temperatura, a fim de acessar novas fases estáveis e metaestáveis com propriedades físicas melhoradas quando comparados às estruturas cristalinas em condições ambientes.

### 1.2. Objetivos Específicos:

- Sintetizar molibdatos e tungstatos de prata via rota hidrotérmica e reação de estado sólido;
- Estudar as propriedades estruturais, vibracionais e morfológicas de molibdatos e tungstatos micro(nano)estruturados em condições atmosféricas;
- Obter um melhor entendimento da morfologia e estrutura atômica das amostras a partir da combinação de diferentes técnicas experimentais de caracterização;
- Realizar estudos de transições de fase estruturais em condições extremas de temperatura nos molibdatos e tungstatos de prata utilizando técnicas de análise térmica como DSC (do inglês *Differential Scanning Calorimetry*) e TGA (do inglês *Thermogravimetric Analysis*);
- Executar um estudo *ex situ* sobre o comportamento morfológico de micro(nano)estruturas de molibdatos e tungstatos de prata a altas temperaturas.
- Estudar transições de fase estruturais em cristais de molibdatos e tungstatos de prata utilizando espectroscopia Raman em condições extremas de temperatura (*in situ*).

## 2. METODOLOGIA

A principal área de esforço desse plano de trabalho é a síntese e caracterização de micro/nanoestruturas de molibdatos e tungstatos de prata. Para isso em primeiro momento, serão realizadas sínteses utilizando rotas químicas e físicas em especial a síntese hidrotérmica e síntese de reação de estado sólido, respectivamente. Essas condições de síntese hidrotérmica, muitas vezes, resultam em estruturas cristalinas com defeitos singulares, que não podem ser alcançados a temperaturas muito altas, como nos métodos clássicos (reação de estado sólido por exemplo), o que pode resultar em materiais com propriedades únicas.

A partir das amostras já sintetizadas as mesmas serão caracterizadas em condições atmosféricas por fluorescência de raios-X (FRX), difração de raios-X (DRX), espectroscopia no infravermelho por transformada de Fourier (FTIR do inglês *Fourier*

*Transform Infrared Spectroscopy*), espectroscopia Raman e microscopia eletrônica de varredura (MEV) com intuito de avaliar as propriedades elementares, estruturais, vibracionais e morfológicas, respectivamente. As análises de FRX, DRX, FTIR e MEV assim como os procedimentos de síntese das amostras serão realizados no laboratório de caracterização de materiais da Universidade Federal do Cariri (UFCA), enquanto que as análises por espectroscopia Raman serão realizadas em colaboração com o Grupo de Física de Materiais (FISMAT) na Universidade Federal do Piauí (UFPI).

Apos as análises das amostras em condições atmosféricas as mesmas passarão por uma caracterização por análise térmica (TGA e DSC) no laboratório de caracterização de materiais da UFCA a fim de estudar transições de fase estruturais a altas temperaturas. Junto aos resultados de TGA e DSC, uma caracterização por espectroscopia Raman *in situ* em condições extremas de temperatura poderá mostrar novas fases metaestáveis das amostras estudadas que poderão contribuir com novas aplicações futuras, uma vez que os fônons são muito sensíveis a mudanças estruturais visto que o grau de liberdade das vibrações está intimamente associado a mudanças nos comprimentos das ligações e nos ângulos de ligação. A evolução dos fônons nos resultados das análises por espectroscopia Raman poderá apontar para uma descrição dos mecanismos que levarão a transições de fase estruturais nessa classe de materiais ainda pouco estudada. A espectroscopia Raman é uma técnica não destrutiva e não invasiva, uma vez que os experimentos podem ser realizados com materiais em diferentes condições de operação, inclusive sendo submetidos a altas pressões dentro da célula de bigorna de diamante, ou a variação de temperatura dentro de uma câmara de aquecimento ou resfriamento.

As amostras passarão por tratamentos térmicos para serem avaliadas a evolução morfológica das mesmas em condições de altas temperaturas. As amostras tratadas termicamente serão analisadas por MEV (*ex situ*) com intuito de caracterizar a evolução dos tamanhos de grãos em função do processo de aquecimento para uma possível correlação entre as transições de fase estruturais e o comportamento morfológico dos molibdatos e tungstatos de prata.

### 3. CRONOGRAMA DE ATIVIDADES

As atividades a serem realizadas pelo estudante são:

- AT1. Revisão bibliográfica;
- AT2. Síntese das amostras de molibdatos e tungstatos de prata;
- AT3. Caracterização em condições ambientes das amostras obtidas;
- AT4. Análises térmicas dos molibdatos e tungstatos por DSC e TGA;
- AT5. Tratamento termicos *ex situ* das amostras e caracterização por MEV;
- AT6. Ajuste teórico-computacional dos espectros Raman (fit) experimentais;
- AT7. Análise dos resultados e escrita de artigos científicos;
- AT8. Escrita de relatórios.

Nº	2018					2019						
	08	09	10	11	12	01	02	03	04	05	06	07
AT1	X	X	X	X								
AT2		X	X	X								
AT3		X	X	X								

AT4				X	X	X						
AT5				X	X	X						
AT6					X	X	X	X				
AT7							X	X	X	X	X	
AT8											X	X