

8 Propostas futuras de trabalho

Os resultados obtidos no presente estudo sugerem diversos trabalhos a serem realizados em um futuro próximo. Primeiramente seria extremamente interessante realizar medidas de propriedades eletrônicas do óxido Al_2MnO_4 na região em que o comportamento anômalo no C_p se faz presente. Neste sentido, medidas de resistividade elétrica e permissividade dielétrica seriam extremamente interessantes, pois permitiriam elucidar um pouco mais a natureza do estado eletrônico alcançado. Usualmente, transições envolvendo algum tipo de ordenamento eletrônico vêm acompanhadas de distorções na rede cristalina [32, 33]. Estas poderiam ser estudadas mediante a obtenção da difração de raios X variando-se a temperatura na faixa em que a transição se processa. Como as distorções apresentam em geral pequena magnitude, ou seja, não envolvem deslocamentos atômicos em longas distâncias, convém utilizar uma fonte de radiação de maior intensidade, aumentando assim a resolução do difratograma gerado. Dados obtidos com radiação Síncrotron seriam neste caso bastante elucidativos.

Outro estudo interessante diz respeito aos defeitos presentes nas amostras. Técnicas como a espectroscopia Mössbauer, são sensíveis ao campo elétrico nas vizinhanças de uma dada posição atômica, e permitem determinar as diferentes valências dos cátions em uma dada estrutura. O elemento em questão deve ser magnético, o que ocorre com o manganês. Medidas do espectro Mössbauer em amostras armazenadas no vácuo, e em contato com atmosfera durante tempos distintos seriam de grande valia, no sentido de comprovar a presença ou não de manganês no estado +3.

A presença de água (fonte de oxigênio) na atmosfera do tubo, bem como também o tempo de armazenamento em contato com o ar consistem em variáveis capazes de influenciar a concentração de defeitos. Desta forma, convém realizar medidas de C_p em temperaturas inferiores a 298.15 K para amostras recém preparadas, na presença e na ausência de vácuo. Espera-se que este procedimento ajude a elucidar as diferenças nos valores de C_p observadas em temperaturas inferiores a 10 K.

A construção da energia de Gibbs molar do óxido Al_2MnO_4 ainda não chegou ao fim. Não existem dados de entalpia de formação para esta fase. Experimentos de calorimetria de solução em temperaturas elevadas poderiam ser pensados de maneira a se obter o valor desta grandeza. Finalmente, visando à completa descrição da energia de Gibbs do óxido em questão da temperatura ambiente até sua fusão congruente (2214 K), convém medir a entalpia (calorimetria de queda) e C_p em temperaturas acima de 1600°C. Nesta faixa há considerável desordem catiônica [9]. Utilizando-se o modelo estequiométrico construído no presente trabalho como base, os dados poderiam ser

ajustados com o formalismo da energia composta, o que permitiria então obter uma descrição da energia de Gibbs do óxido Al_2MnO_4 mais próxima da realidade. Somente assim, seria possível elevar a confiabilidade nos parâmetros estimados para a fase escoria, e reduzir as discrepâncias observadas no ajuste apresentado no tópico (6). Isso é fundamental, pensando-se em estender o banco de dados para sistemas de ordem superior.