

# 1 Introdução

Para a grande maioria dos materiais o coeficiente de expansão térmica é positivo, por conta da assimetria do poço potencial da ligação atômica. Para algumas aplicações tecnológicas e industriais é interessante poder contar com materiais que apresentam expansão térmica controlada zero, baixa positiva ou negativa. Por exemplo, materiais com expansão térmica zero podem ser utilizados para suportes ou carcaças de espelhos ópticos de alta precisão (telescópios) com a finalidade de evitar que as propriedades ópticas do espelho sejam afetadas por variações dimensionais decorrentes da temperatura. Outra aplicação seria nos sensores de temperatura e deformação baseados nas redes de Bragg, onde os materiais que apresentam expansão térmica negativa podem ser usados para compensar as mudanças das dimensões da fibra de vidro em função da temperatura. Cerâmicas de baixa expansão térmica (Pirex) têm larga aplicação por conta de sua resistência ao choque térmico.

Os materiais com coeficiente de expansão térmica negativo podem também ser usados para compensar a variação dimensional na indústria eletrônica, na produção de placas de circuito impressas e dissipadores de calor. Outro exemplo de crescente aplicação refere-se aos enchimentos dentais que precisam ter expansão térmica que acompanhe a dos dentes. Finalmente, algumas aplicações serão descritas detalhadamente neste documento.

Na literatura foram reportados por Tyagi et al. 2002 [1], os coeficientes de expansão térmica negativa para o  $\text{Al}_2\text{Mo}_3\text{O}_{12}$ ,  $\text{Cr}_2\text{Mo}_3\text{O}_{12}$ , e  $\text{Fe}_2\text{Mo}_3\text{O}_{12}$  sendo  $-2,83 \times 10^{-6}/^\circ\text{C}$ ,  $-9,39 \times 10^{-6}/^\circ\text{C}$  e  $-14,82 \times 10^{-6}/^\circ\text{C}$  respectivamente. Estes estudos foram realizados por dilatométrica. No presente trabalho estudou-se a expansão térmica, através de difração de raios-X, em três sistemas da família  $\text{A}_2\text{M}_3\text{O}_{12}$ , com o intuito de produzir materiais de expansão térmica controlada pela substituição química do cátion trivalente "A" pelos cátions Al, Cr e Fe. Os sistemas produzidos foram:  $\text{Cr}_{2x}\text{Fe}_{2-2x}\text{Mo}_3\text{O}_{12}$  (molibdato de cromo – ferro),  $\text{Al}_{2x}\text{Cr}_{2-2x}\text{Mo}_3\text{O}_{12}$  (molibdato de alumínio – cromo) e  $\text{Al}_{2x}\text{Fe}_{2-2x}\text{Mo}_3\text{O}_{12}$  (molibdato de alumínio – ferro).

Além disso, o composto  $\text{HfMgMo}_3\text{O}_{12}$  foi sintetizado para avaliar a substituição do cátion trivalente por um cátion divalente ( $\text{Mg}^{2+}$ ) mais um

tetravalente ( $\text{Hf}^{4+}$ ). Não há relatos da síntese e estrutura cristalina deste composto na literatura, portanto, o grupo espacial, parâmetros de rede e coeficiente de expansão térmica foram determinados e relatados pela primeira vez na presente tese.

A seguir está descrito de forma sucinta o conteúdo dos capítulos do presente documento:

**Capítulo 1:** Apresenta uma introdução, as motivações para a realização do presente trabalho, assim como a estrutura e conteúdo da tese.

**Capítulo 2:** Apresenta os conceitos relacionados à expansão térmica, os mecanismos envolvidos e as estruturas que apresentam expansão térmica negativa e as diversas aplicações.

**Capítulo 3:** Descreve o procedimento experimental realizado para a síntese das soluções sólidas e as respectivas análises térmicas, morfológicas e estruturais.

**Capítulo 4:** Apresenta os resultados obtidos através das medições descritas no capítulo anterior.

**Capítulo 5:** Neste capítulo é apresentada uma discussão sobre os resultados.

**Capítulo 6:** Apresentam-se as conclusões referentes ao trabalho.