

Gabriela Pinto Scussiatto<sup>1,\*</sup>, Jadna Catafesta<sup>2</sup>, Altair Soria Pereira<sup>1,3</sup>, Naira Maria Balzaretti<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Instituto de Física – Universidade Federal do Rio Grande do Sul.

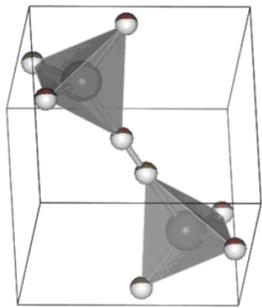
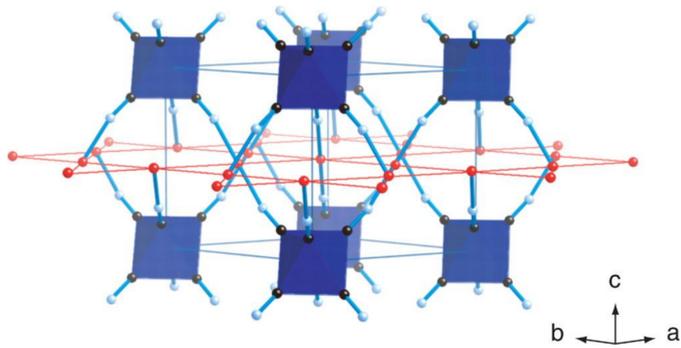
<sup>2</sup> PGCIMAT – Universidade Federal do Rio Grande do Sul.

<sup>3</sup> Escola de Engenharia – Universidade Federal do Rio Grande do Sul.

\*gabriela.scussiatto@ufrgs.br

## Introdução

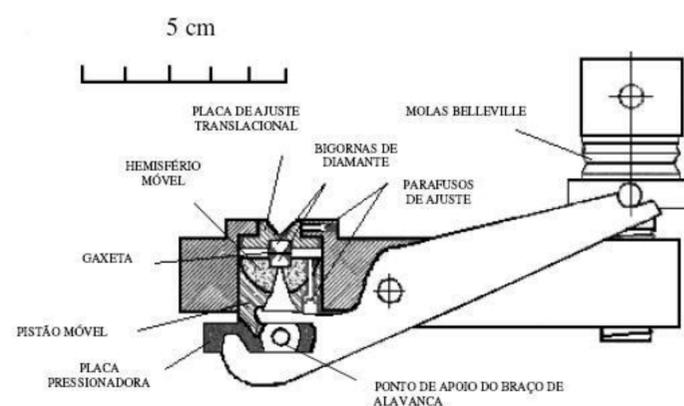
A flexibilidade estrutural de compostos com uma estrutura que pode ser descrita pela interconexão de unidades estruturais poliedrais rígidas abre a possibilidade dos mesmos apresentarem comportamentos não usuais. Como exemplo, materiais formados por esse tipo de arranjo estrutural são excelentes candidatos a apresentar amorfização induzida por pressão (AIP) e expansão térmica negativa (ETN), sendo esses dois fenômenos fortemente relacionados com a flexibilidade dessas estruturas poliedrais. Na literatura é sugerida uma origem física comum entre a ETN e a AIP. Este trabalho está inserido no estudo dos efeitos da aplicação de altas pressões, em particular, sobre dois cianetos metálicos:  $Zn(CN)_2$  e  $Ag_3[Co(CN)_6]$ .



**Figura 1:** Acima o composto  $Ag_3[Co(CN)_6]$  e à esquerda  $Zn(CN)_2$ . Ambos com a característica comum de apresentar ETN, e além disso, uma conectividade distinta entre as unidades rígidas que definem suas estruturas.

## Procedimentos experimentais

Foi utilizada a técnica da câmara de bigornas de diamante (DAC, da sigla para *Diamond Anvil Cell*) para geração das altas pressões. Com medidas *in situ* de absorção no infravermelho por transformada de Fourier, FTIR da sigla para *Fourier Transform InfraRed*, foi investigado o efeito de altas pressões nos modos vibracionais característicos do  $Zn(CN)_2$  e do  $Ag_3[Co(CN)_6]$ .



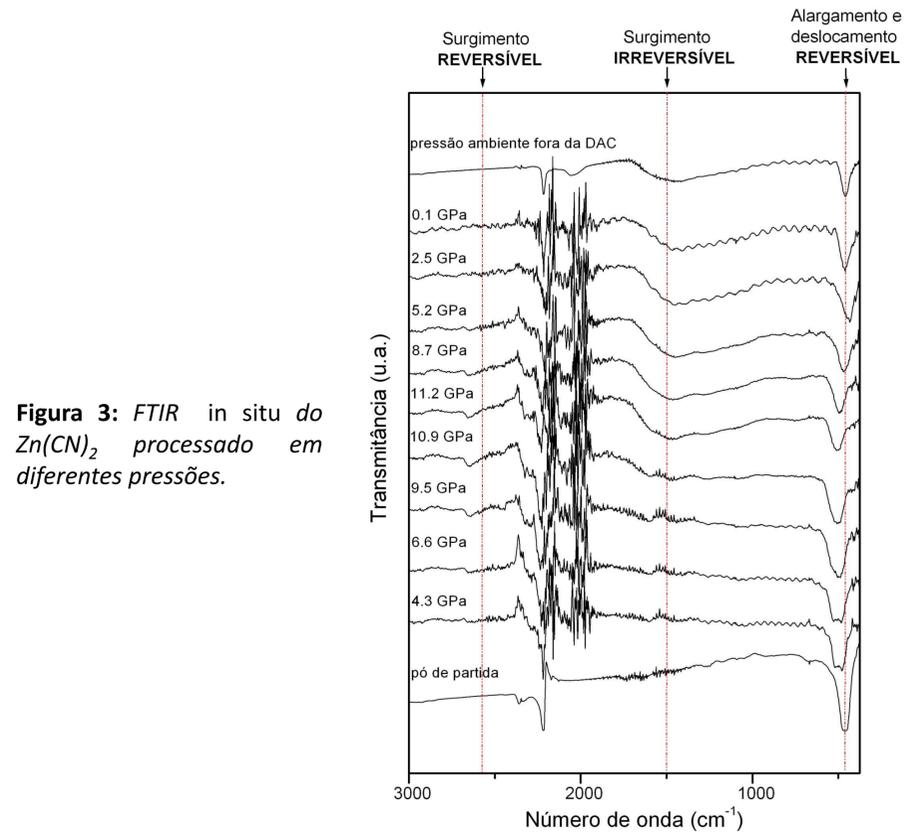
**Figura 2:** Esquema do tipo de DAC utilizada nos processamentos.

## Resultados

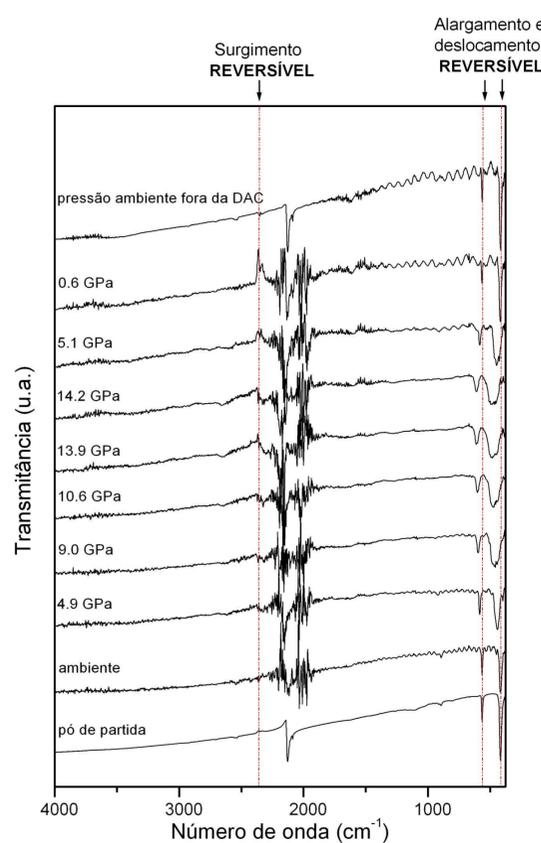
Nas Figuras 3 e 4 são apresentados alguns espectros de infravermelho das medidas realizadas *in situ* nas amostras de  $Zn(CN)_2$  e  $Ag_3[Co(CN)_6]$ .

### Referências

[1] CATAFESTA, J. *Comportamento estrutural sob altas pressões de materiais com expansão térmica anômala*. 2011. Tese (Doutorado em Ciências). Programa de Pós-Graduação em Ciência dos Materiais, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre.



**Figura 3:** FTIR *in situ* do  $Zn(CN)_2$  processado em diferentes pressões.



**Figura 4:** FTIR *in situ* do  $Ag_3[Co(CN)_6]$  processado em diferentes pressões.

## Conclusão

Os resultados apresentados neste trabalho evidenciaram a importância de técnicas de análise vibracional, permitindo identificar uma fase que não contribuía significativamente às medidas de difração de raios X [1]. Essas medidas de espectroscopia vibracional complementaram e trouxeram informações até então não acessíveis por difração de raios X. Esses resultados somados aos obtidos em trabalhos em paralelo [1], mostraram que tanto para  $Zn(CN)_2$  quanto para o  $Ag_3[Co(CN)_6]$  foram encontradas evidências de formação de fase amorfa após processamento em alta pressão e temperaturas moderadas. Porém, mesmo com possíveis similaridades entre a natureza dessas fases amorfas, e da correlação que parece existir entre a sua formação e um processo de decomposição cineticamente impedido, os detalhes das suas estruturas, a cinética envolvida na sua obtenção, e a natureza das demais fases que são formadas, são altamente dependentes das especificidades das estruturas poliedrais de partida.