



Doutoranda: Thalita Antoniassi Canassa

Orientador: Além-Mar Bernardes Gonçalves

Coorientadores: Diego Carvalho Barbosa Alves e Ingrid David Barcelos

Síntese, Caracterização e Aplicação de Nanofitas de α -MoO₃

Fônons poláritons hiperbólicos (HP²) são quasi-partículas¹ - formadas pelo acoplamento de um campo eletromagnético a vibrações de rede do material - visualizados dentro de regiões espectrais específicas delimitada entre os fônons ópticos transversais (*TO*) e longitudinais (*LO*), conhecida como 'banda de Reststrahlen (RB)'. Este fenômeno oferece um caminho para manipular a propagação da luz, principalmente na região do infravermelho (IR), dentro do material. Estes poláritons vem sendo estudados em materiais nanoestruturados, tais como o nitreto de boro hexagonal, e em óxidos semicondutores. Neste contexto, o MoO₃ surge como um potencial candidato para tal estudo, uma vez que pode ser sintetizados por diversos métodos, e em uma variedade de nanoestruturas, como por exemplo: nanofios, nanofitas, nanoporos.. Dentre as fases cristalinas do MoO₃, destacamos a fase alfa (α), por apresentar uma estrutura ortorrômbica em camadas composta por octaedros MoO₆ distorcidos e compartilhados nas bordas, possibilitando a criação de morfologias unidimensionais (1D) e bidimensionais (2D). Essas camadas são formadas por ligações fracas (van der Waals), e as interações internas são ligações fortes (covalentes). Devido a essa característica, o material apresenta uma forte anisotropia estrutural, que o possibilita apresentar propriedades físicas diferentes no plano e fora dele.

Neste trabalho, sintetizamos nanofitas de trióxido de molibdênio na fase α (α -MoO₃) com uma estrutura 1D que suporta o confinamento de modos² HP² em uma ampla faixa espectral do infravermelho (médio e distante). Utilizamos o método hidrotérmico para a síntese de nanofitas de α -MoO₃, apresentando uma morfologia de formato retangular bem definido - típico de um material com estrutura 1D. As caracterizações microestruturais, realizadas por difração de raios-X, indicam a predominância da fase α . Enquanto as caracterizações ópticas foram realizadas por meio das técnicas Raman e Nanoespectroscopia de Infravermelho (Nano-FTIR), ambas nos permite sondar os modos vibracionais característicos para a fase α , incluindo na região do infravermelho distante (475 cm⁻¹) que não havia sido observado experimentalmente para uma estrutura 1D.

Por fim, exploramos a resposta polaritônica nas nanofitas de α -MoO₃, trazendo uma abrangente descrição das propriedades ópticas deste material como um dielétrico nanométrico e também como um material na forma de um guia de ondas. Através de imagens espectrais demonstrou-se que a luz é confinada em uma escala nanométrica formando uma cavidade de Fabry-Perot, um mecanismo que produz ondas estacionárias dentro do cristal. Por isso, essa descoberta expande as possibilidades do uso do α -MoO₃, que na forma de nanofitas (1D) é naturalmente otimizado para aplicações em ressonadores ópticos e, potencialmente, guia de ondas na faixa de infravermelho longo.

Palavras-chave: nano-FTIR, SINS, nanofitas, α -MoO₃, fônons poláritons hiperbólicos

- (1) Barcelos, I. D.; et al. Probing Polaritons in 2D Materials with Synchrotron Infrared Nanospectroscopy. *Adv. Opt. Mater.* **2020**, 8 (5), 1–16.
- (2) Zheng, Z.; et al. A Mid-Infrared Biaxial Hyperbolic van Der Waals Crystal. *Sci. Adv.* **2019**, 5 (5), 1–9.