



PLANO DE TRABALHO

PROJETO PARA BOLSA PÓS-DOCTORADO – EDITAL 6

Nome do(a) Bolsista: **Anastasia Burimova**

Código do Projeto vinculado: **2020.06.IPEN.43**

DESCRIÇÃO DO PROJETO

Estudo de óxidos de vanádio e derivados com técnica nuclear espectroscopia de correlação angular perturbada e cálculos *ab initio*.

Prazo Execução (meses): 18 meses

Objetivo Geral

Abordagem de parâmetros hiperfinos em vanádia e derivados; sua interpretação

Objetivos Específicos

- Adaptação do equipamento (principalmente, software de aquisição e processamento de dados)
- Desenvolvimento de métodos experimentais para caracterização de vanádia e derivados a nível local
- Adaptação e otimização de abordagens teóricas para interpretação de parâmetros hiperfinos
- Desenvolvimento de algoritmos associados ao objetivo supracitado e implementação desses algoritmos

Palavras-chave

1 – perturbed angular correlations

2 – hyperfine interactions

3 - vanadia

4 -

5 -

Metas Físicas

1 - Adaptação do software para espectrometro TDPAC

2 - Revisão de resultados TDPAC+metodos acoplados

3 - Desenvolvimento de metodos de sintese e caracterização adequados



PLANO DE TRABALHO

PROJETO PARA BOLSA PÓS-DOCTORADO – EDITAL 6

4 - Adaptação e desenvolvimento de métodos teóricos relacionados a parâmetros hiperfinos

5 - Preparação de materiais educativos, preparação e submissão de artigos



PLANO DE TRABALHO

PROJETO PARA BOLSA PÓS-DOCTORADO – EDITAL 6

Justificativa Resumida:



PLANO DE TRABALHO

PROJETO PARA BOLSA PÓS-DOCTORADO – EDITAL 6

O interesse pela vanadia é impulsionado por suas várias aplicações. Um deles é como material catódico em baterias aquosas de íons de zinco que foram indicadas como uma solução promissora para armazenamento de energia dos fontes sustentáveis. Para melhor desempenho, pode-se querer incorporar íons *guest* ao vanádia. Compreender a influência dos íons *guest* na estrutura cristalina e distribuição de carga local é essencial para produzir insights sobre o comportamento do material. A espectroscopia TDPAC (espectroscopia de correlação angular perturbada diferenciada em tempo) tem se recomendado excelente para tais estudos locais. Assim, pretendemos aplicá-lo ao estudo de vanádia e derivados. No entanto, é necessária alguma otimização do software de serviço. Além disso, os dados do TDPAC devem ser complementados com previsões teóricas para uma interpretação precisa. Neste sentido pretendemos aplicar modelagem teórica, incluindo modelo iônico simples e, possivelmente, cálculos *ab initio*, ao sistema considerado.



PLANO DE TRABALHO

PROJETO PARA BOLSA PÓS-DOCTORADO – EDITAL 6



PLANO DE TRABALHO

PROJETO PARA BOLSA PÓS-DOCTORADO – EDITAL 6

CRONOGRAMA FÍSICO

META FÍSICA 1 – Adaptação do software para espectrometro TDPAC

ATIVIDADES:	INDICADOR FÍSICO DE EXECUÇÃO	Duração Prevista	
		Início	Fim
Desenvolvimento de algoritmos otimizados de gravação e processamento de dados brutos	scripts, exemplos de dados processados	1	18
Desenvolvimento e adaptação de scripts adequados para gravação e processamento de dados brutos	algorithms, exemplos de dados processados		

META FÍSICA: 2 – Revisão de resultados TDPAC+metodos acoplados em oxidos semicondutores, com foco em oxido de vanadio

ATIVIDADES:	INDICADOR FÍSICO DE EXECUÇÃO	Duração Prevista	
		Início	Fim
Análise de resultados de pesquisas conhecidas na área	spreadsheets de revisão, relatórios de forma alternativa	1	12



PLANO DE TRABALHO

PROJETO PARA BOLSA PÓS-DOCTORADO – EDITAL 6

META FÍSICA: 3 – Desenvolvimento de metodos de sintese e caracterização adequados

ATIVIDADES:	INDICADOR FÍSICO DE EXECUÇÃO	Duração Prevista	
		Início	Fim
Desenvolvimento de metodo de sintese de oxidos de vanadio e derivados Caracterização dos materiais sintetizados atraves de tecnicas diversas	Descrição de rotina de sintese	9	18
	Datasets de caracterização	9	18
Analise dos resultados de caracterização	Resultados da analise	9	18

META FÍSICA: 4 – Adaptação e desenvolvimento de metodos teoricos relacionados a parametros hiperfinos

ATIVIDADES:	INDICADOR FÍSICO DE EXECUÇÃO	Duração Prevista	
		Início	Fim
Revisão de metodos	-	1	18
Testes e adaptação	resultados dos testes	9	18
Scripting	scripts	1	18

META FÍSICA: 5 – Preparação de materiais educativos, preparação e submissão de artigos

ATIVIDADES:	INDICADOR FÍSICO DE EXECUÇÃO	Duração Prevista	
		Início	Fim
Preparação e submissão de artigos	Artigos submetidos	1	18
Preparação de material educativo	material educativo	1	18



PLANO DE TRABALHO

PROJETO PARA BOLSA PÓS-DOCTORADO – EDITAL 6

Resultados Esperados

1 – Scripts desenvolvidos para aquisição e processamento de dados em equipamentos TDPAC

2 – Modelos teóricos da estrutura dos materiais estudados, calculo de parametros hiperfinos no ambito destes modelos e algoritmos acoplados implementados em scripts

3 – Métodos de preparação e caracterização estabelecidos para vanádia e derivados (vanadatos)

4 - Material educativo

5 - Artigos publicados

6 -

7 -

8 -

9 -

10 -

Grau de Inovação (se houver):



PLANO DE TRABALHO

PROJETO PARA BOLSA PÓS-DOCTORADO – EDITAL 6

Imprevisível



PLANO DE TRABALHO

PROJETO PARA BOLSA PÓS-DOCTORADO – EDITAL 6

Bibliografia:



PLANO DE TRABALHO

PROJETO PARA BOLSA PÓS-DOCTORADO – EDITAL 6

A large, empty rectangular box with a thin black border, intended for the user to write the work plan.



PLANO DE TRABALHO

PROJETO PARA BOLSA PÓS-DOCTORADO – EDITAL 6