Revista Multidisciplinar do Nordeste Mineiro, v.05, 2025
ISSN 2178-6925

PROPRIEDADES ESTRUTURAIS E ELETRÔNICAS DO CAWO4

STRUCTURAL AND ELETRONIC PROPERTIES OF CAWO4

João Vítor Melonio Silva
Graduando em Física pela Universidade Estadual do Maranhão, Brasil
E-mail: vitormelonio319@gmail.com

Iury Thiago Dias Botelho
Licenciado em Física pela Universidade Estadual do Maranhão, Brasil
E-mail: iurythiago58@gmail.com

Suelen Rocha Botão Ferreira
Doutora em Biotecnologia pelo Centro de Estudos Superiores de Pinheiro, Brasil
E-mail: suelen.rocha@gmail.com

Welberth Santos Ferreira
Doutor em Física pela Universidade Estadual do Maranhão, Brasil
E-mail: welberthsf @gmail.com

Recebido: 01/03/2025 – Aceito: 14/03/2025

Resumo

O tungstato de cálcio ($CaWO_4$) é um material com propriedades físico-químicas excepcionais, como luminescência, tornando-o promissor para aplicações em optoeletrônica, como LEDs, e em áreas biomédicas, como sistemas de entrega de medicamentos e fotocatálise. Suas vantagens incluem baixa toxicidade, custo-benefício favorável e versatilidade, o que amplia seu potencial em diversas tecnologias. No entanto, apesar das aplicações emergentes, ainda existem lacunas teóricas no entendimento do material, as quais podem ser abordadas e enriquecidas. A Teoria do Funcional da Densidade (DFT) se mostra uma ferramenta eficiente para analisar os materiais, permitindo uma compreensão detalhada de sua estabilidade e reatividade. Neste trabalho, investigamos as propriedades estruturais e eletrônicas do tungstato de cálcio via DFT, destacando suas potenciais aplicações.

Palavras-chave: DFT; CAWO4; Modelagem Computacional.

Abstract

Calcium tungstate ($CaWO_4$) is a material with exceptional physicochemical properties, such as luminescence, making it promising for applications in optoelectronics, such as LEDs, and biomedical

fields, including drug delivery systems and photocatalysis. Its advantages include low toxicity, cost-effectiveness, and versatility, which enhance its potential in various technologies. However, despite emerging applications, theoretical gaps still exist in the understanding of this material, which can be further explored and enriched. Density Functional Theory (DFT) proves to be an efficient tool for analyzing materials, providing a detailed understanding of their stability and reactivity. In this work, we investigate the structural and electronic properties of calcium tungstate via DFT, highlighting its potential applications.

Keywords: DFT; CAWO4; Computacional Modeling.

1. Introdução

Os tungstatos são compostos inorgânicos formados por cátions metálicos divalentes, com fórmula geral AWO_4 (Sousa *et al.*, 2021), e destacam-se devido às suas propriedades estruturais e eletrônicas. Os tungstatos, incluindo o tungstato de cálcio ($CaWO_4$), se destacam por apresentarem características únicas, como luminescência, alta estabilidade térmica e eficácia na absorção de radiação de alta energia (Barbosa *et al.*, 2011). Essas propriedades tornam o $CaWO_4$ um material promissor para diversas aplicações tecnológicas, incluindo dispositivos optoeletrônicos, sistemas de entrega de fármacos, sensores e catalisadores fotossensíveis.

Ademais, o $CaWO_4$ tem sido empregado em aplicações avançadas, como na detecção de matéria escura no experimento CRESST (*Cryogenic Rare Event Search with Superconducting Thermometers*). Nessa área, os cristais de $CaWO_4$ funcionam como calorímetros criogênicos altamente sensíveis, permitindo a identificação de eventos raros e interações com partículas exóticas (Song; Nagorny; Vicent, 2021; Angloher *et al.*, 2023). Paralelamente, no campo da nanotecnologia, a miniaturização das partículas desse material viabiliza suas aplicações em biomateriais.

Diante disso, o estudo e a aplicação desses materiais em escalas reduzidas permitem a criação de soluções inovadoras, com grande potencial para transformar vários campos científicos e tecnológicos (Silva *et al.*, 2024).

A compreensão detalhada das propriedades estruturais e eletrônicas do $CaWO_4$ é essencial para otimizar suas aplicações tecnológicas. No entanto, muitos aspectos fundamentais desse material ainda necessitam de exploração teórica e experimental. Nesse contexto, a Teoria do Funcional da Densidade (DFT) emerge como uma ferramenta poderosa para a investigação das propriedades quânticas do

$CaWO_4$, permitindo uma descrição detalhada de sua estrutura eletrônica, estabilidade e interações atômicas.

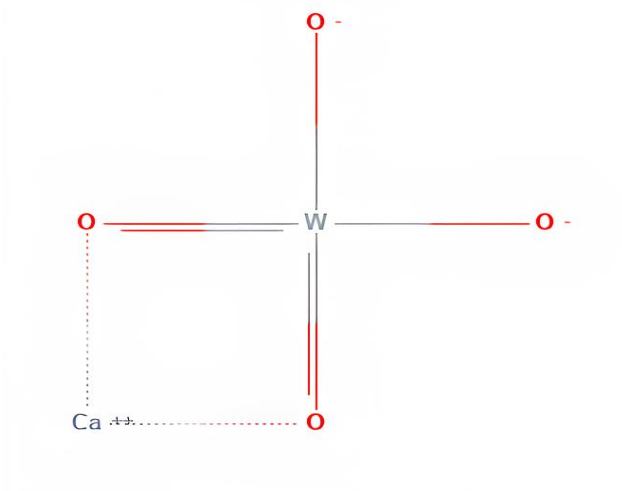
Dessa forma, este trabalho tem como objetivo analisar as propriedades estruturais e eletrônicas do $CaWO_4$ utilizando a DFT. A partir dessa abordagem, pretende-se contribuir para um entendimento mais abrangente desse material e ampliar suas perspectivas para o desenvolvimento de novas tecnologias.

2. Revisão da Literatura

O tungstato de cálcio compõe a scheelita, um mineral essencial para a extração de tungstênio, metal reconhecido por seu alto ponto de fusão, densidade e resistência. O minério foi inicialmente descrito em 1781, a partir de uma amostra encontrada no Monte Bispbergs Klack, na Suécia. O nome “scheelita" foi dado em homenagem a Carl Wilhelm Scheele, que a descobriu. Devido ao seu peso incomum, os suecos inicialmente o chamaram de “tung sten", que significa “pedra pesada". O termo “tungsten" foi posteriormente utilizado para nomear o metal. Entre 1779 e 1781, tanto Peter Woulfe quanto Scheele identificaram que o ácido túngstico, o precursor do tungstênio metálico, poderia ser extraído deste mineral, inicialmente denominado de tungstenita, que mais tarde foi rebatizado como scheelita (Paulino; Afonso, 2013; Passos, 2018). No Brasil, destaca-se o estado do Rio Grande do Norte, que abriga as maiores minas de extração de scheelita da América do Sul, com concentração principal na região de Currais Novos (Moreira, 2018).

O tungstato de cálcio tem seu peso molecular de 287,92 g/mol, enquanto sua massa monoisotópica é de 287,893183 Da. Este material apresenta uma área de superfície polar topológica de 80,3 $Å^2$, (National Center for Biotechnology Information, 2025). Sua estrutura pode ser vista na Figura 1.

Figura 1 – Representação em duas dimensões do $CaWO_4$.



Fonte: (National Center for Biotechnology Information, 2025).

Estruturalmente, o tungstato de calcio pertence à família dos tungstatos metálicos, cristalizando em uma estrutura que apresenta simetria tetragonal $I4_1/a$, associada ao grupo pontual (C_4^{6th}). No grupo scheelita, essa composição se sobressai (Sousa *et al.*, 2021; Shivakumara *et al.*, 2015).

Em geral, os tungstatos formados por cátions divalentes de raio iônico relativamente grande (superior a 0,099 nm), como Ca^{2+}, Ba^{2+}, Pb^{2+} e Sr^{2+}, apresentam a característica de cristalizar na estrutura scheelita (Chai *et al.*, 2018). Nessa estrutura, os íons de metais alcalino-terrosos são coordenados por oito átomos de oxigênio, enquanto os íons de tungstato estão conectados a quatro átomos de oxigênio em uma simetria tetraédrica. Na rede cristalina do $CaWO_4$, os íons de cálcio (Ca^{2+}) ocupam o sítio (A) e são coordenados por oito átomos de oxigênio, formando um arranjo deltadral $[CaO_8]$. Por outro lado, os íons de tungstênio (W^6+) estão ligados a quatro átomos de oxigênio, formando grupos tetraédricos do tipo $[WO_4]$ (Shivakumara *et al.*, 2015; Yadav *et al.*, 2024).

A estabilidade dessa configuração estrutural não apenas define a organização atômica do material, mas também influencia diretamente suas propriedades físicas e químicas. A simetria e a robustez da rede cristalina dependem fortemente do raio iônico do cátion no sítio (A), bem como da compatibilidade entre dopantes e a matriz hospedeira. A estrutura tipo scheelita do $CaWO_4$, quando livre de impurezas, ressalta sua importância em diversas aplicações científicas e

tecnológicas devido à sua combinação única de propriedades (Yadav *et al.*, 2024).

2.1 Introdução a Teoria do Funcional de Densidade.

A Teoria do Funcional da Densidade (DFT) é um método baseado nos primeiros princípios da mecânica quântica, amplamente empregado no estudo de sistemas na física computacional. Sua principal vantagem está na capacidade de prever propriedades fundamentais dos materiais, como estrutura eletrônica, bandas de energia e características vibracionais. Desse modo, a DFT funciona como um laboratório experimental virtual para simulações.

Inicialmente, as propriedades podem ser analisadas utilizando a equação de Schrödinger no qual é a base fundamental para a descrição de sistemas quânticos, fornecendo informações precisas sobre a estrutura eletrônica e as propriedades de moléculas e sólidos.Para um sistema de (N) elétrons e (M) núcleos, a equação de Schrödinger independente do tempo é dada pela Equação 1.

$$\hat{\mathrm{H}}\,\Psi(\mathrm{r},\,\mathrm{R}) \;=\; \mathrm{E}\,\Psi(\mathrm{r},\,\mathrm{R}), \tag{1}$$

onde $(\Psi(r,R))$ é a função de onda do sistema, que depende das coordenadas eletrônicas $(r=\{r_1,r_2,\dots,r_N\})$ e nucleares $(R=\{R_1,R_2,\dots,R_M\})$. O Hamiltoniano $(\hat{H})$ é dado pela Equação 2.

$$\hat{H}=\hat{T_e}+\hat{T_n}+\hat{V_{ee}}+\hat{V_{en}}+\hat{V_{nn}}. \tag{2}$$

Onde $(\hat{T_e})e(\hat{T_n})$ são os operadores de energia cinética dos elétrons e núcleos, respectivamente e $(\hat{V_{ee}}),(\hat{V_{en}})e(\hat{V_{nn}})$ são os termos de interação elétron-elétron, elétron-núcleo e núcleo-núcleo, respectivamente.

No entanto, para sistemas com muitos elétrons, a solução direta dessa equação torna-se intratável devido à complexidade computacional e ao custo exponencial associado ao aumento do número de partículas. Esse desafio motiva o desenvolvimento de aproximações e métodos teóricos que permitam descrever

sistemas complexos de forma eficiente e precisa como a aproximação de Born-Oppenheimer.

2.1.1 A Aproximação de Born-Oppenheimer: Separando Núcleos e Elétrons

A aproximação de Born-Oppenheimer é uma simplificação crucial para tratar sistemas moleculares e sólidos. Ela se baseia na grande diferença de massa entre núcleos e elétrons, permitindo que os núcleos sejam considerados fixos em relação ao movimento rápido dos elétrons. Isso separa o Hamiltoniano em duas partes Equação 3 e 4.

$$\widehat{H} = \widehat{H_e} + \widehat{H_n}, \tag{3}$$

$$\widehat{H_e} = \widehat{T_e} + \widehat{V_{ee}} + \widehat{V_{en}}, \tag{4}$$

onde $(\widehat{H_e})$ descreve o movimento dos elétrons em um campo de núcleos fixos. Essa separação reduz o problema de muitos corpos a um problema eletrônico em um potencial externo gerado pelos núcleos. e $(\widehat{H_n})$ descreve o movimento dos núcleos em um potencial efetivo gerado pelos elétrons. A função de onda eletrônica $(\Psi_e(r;R))$ é obtida resolvendo a equação de Schrödinger eletrônica na Equação 5.

$$\widehat{H_e}\Psi_e(r;R) = E_e(R)\Psi_e(r;R). \tag{5}$$

no qual $(E_e(R))$ é a energia eletrônica, que atua como um potencial efetivo para o movimento nuclear, mas ainda não é possível resolver totalmente o problema dessas interações, assim são necessários os teoremas de Hohenberg-Kohn.

2.1.2 Teoremas de Hohenberg-Kohn

No ano de 1964, Pierre Hohenberg e Walter Kohn realizaram uma demonstração notável que estabeleceu que a energia total no estado fundamental de um conjunto de elétrons interagindo. Este trabalho seminal apresenta a prova de dois teoremas fundamentais, que formam os alicerces primordiais da teoria do funcional de densidade.

- **Teorema 1:** A densidade eletrônica $(\rho(\boldsymbol{r}))$ determina unicamente o potencial externo $(V_{ext}(\boldsymbol{r}))$ e, portanto, todas as propriedades do sistema.

- **Teorema 2:** A energia do estado fundamental pode ser obtida minimizando um funcional da densidade $(E[\rho])$.

Dessa forma o funcional de energia total é dado pela Equação 6.

$$E[\rho] = T[\rho] + E_{ee}[\rho] + \int V_{ext}(r)\rho(r)\,dr. \quad (6)$$

onde $(T[\rho])$ é a energia cinética, $(E_{ee}[\rho])$ é a energia de interação elétron-elétron, e $(V_{ext}(r))$ é o potencial externo.

2.1.3 O Método de Kohn-Sham: Transformando o Problema de Muitos Corpos

O método de Kohn-Sham substitui o sistema de muitos elétrons por um sistema fictício de elétrons não interagentes, que reproduz a mesma densidade eletrônica **ρ**(**r**). As equações de Kohn-Sham são dadas pela Equação 7.

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V_{eff}(r)\right)\phi_i(r) = \epsilon_i\phi_i(r), \quad (7)$$

onde $(\phi_i(r))$ são as orbitais de Kohn-Sham, (ϵ_i) são as energias correspondentes, e$(V_{eff}(r))$ é o potencial efetivo na Equação 8.

$$V_{eff}(r) = V_{ext}(r) + V_H(r) + V_{xc}(r). \quad (8)$$

No qual o $(V_{ext}(r))$ é o potencial externo e a expressão $(V_H(r))$ é o potencial de Hartree, dado pela Equação 9.

$$V_H(r) = \int \frac{\rho(r')}{|r-r'|}\,dr'. \quad (9)$$

Assim, a densidade eletrônica é obtida a partir das orbitais de Kohn-Sham na Equação 10.

$$\rho(r) = \sum_{i=1}^{N}|\phi_i(r)|^2. \quad (10)$$

2.1.4 Pseudopotenciais e o Funcional GGA-PBE

Para sistemas periódicos, o uso de pseudopotenciais é essencial para reduzir o custo computacional. Pseudopotenciais substituem os elétrons de caroço por

potenciais efetivos, mantendo as propriedades dos elétrons de valência. O funcional GGA-PBE (Generalized Gradient Approximation - Perdew-Burke-Ernzerhof) é amplamente utilizado para descrever energias de troca e correlação. Ele inclui correções dependentes do gradiente da densidade, melhorando a precisão em comparação com aproximações locais. O funcional de troca e correlação no GGA-PBE é dado pela Equação 11.

$$E_{xc}^{GGA}[\rho] = \int \epsilon_{xc}\big(\rho(r), \nabla\rho(r)\big)\,\rho(r)\,dr, \tag{11}$$

onde (ϵ_{xc}) é a energia de troca e correlação por partícula, que depende tanto da densidade $(\rho(r))$ quanto de seu gradiente $(\nabla\rho(r))$, no próximo tópico será explicado como foram feitos esses cálculos.

3. Metodologia

A metodologia adotada baseia-se em uma abordagem explicativa, combinando revisão bibliográfica e métodos computacionais para a análise das propriedades estruturais e eletrônicas do $CaWO_4$, realizou-se uma revisão bibliográfica exaustiva com o objetivo de coletar informações atualizadas e relevantes sobre o material, utilizando periódicos científicos, livros e outras fontes confiáveis. Com base nesses estudos, buscou-se relacionar as propriedades do $CaWO_4$ com descobertas e teorias já estabelecidas.

Os cálculos de Teoria do Funcional da Densidade (DFT) foram realizados utilizando o *software Materials Studio*. Os arquivos de entrada foram gerados a partir de uma estrutura cristalina simetrizada, obtida com base em informações experimentais disponíveis na literatura. A optimização geométrica foi conduzida com um critério de convergência rigoroso, estabelecendo um máximo de 300 ciclos de autoconsistência e uma energia de tolerância por átomo definida.

O pseudopotencial utilizado foi do tipo norma-conservada, enquanto o tratamento relativístico foi realizado com a aproximação de Schrödinger. Os cálculos consideraram uma rede de pontos k de $3 \times 3 \times 3$ e uma energia de corte de 750 eV para assegurar a confiabilidade dos resultados.

Os dados obtidos foram analisados qualitativamente utilizando o software de plotagem *ORIGIN*, onde métodos estatísticos foram aplicados para interpretar e quantificar as informações coletadas. Este processo permitiu a identificação de tendências e relações entre as variáveis estudadas, fornecendo uma base sólida para a análise.

4. Resultados e Discussão

A optimização geométrica do $CaWO_4$ foi realizada com o funcional GGA-PBE, desenvolvido por (Perdew; Burke; Ernzerhof, 1996), que considera não apenas a densidade eletrônica local, mas também seu gradiente (Bonani, 2021). Esse processo permitiu a investigação das propriedades estruturais e eletrônicas do material, com os parâmetros ajustados após a minimização da energia.

4.1 Propriedades Estruturais

O $CaWO_4$, ilustrado na Figura 2, é composto por 24 átomos e possui estrutura cristalina tetragonal, conforme mostrado na Figura 2(a), onde os átomos de tungstênio aparecem em azul, os de oxigênio em vermelho e os de cálcio em verde. O cristal utilizado nos cálculos revelou pertencer ao grupo espacial $I4/a$ e ao grupo pontual $4/m$, com densidade de $6{,}10\ g.cm^{-3}$.

Para desenvolver os cálculos, alguns parâmetros foram ajustados, conforme a Tabela 1. Os valores teóricos e experimentais obtidos por (Du; Wu; Yu, 2016) indicam uma diferença de apenas 0,762% no volume da célula unitária. A Figura 2(b) exibe a zona de Brillouin, representando o espaço recíproco da rede cristalina, cuja forma foi mantida para preservar a simetria original nos cálculos, sem redução explícita para o grupo espacial $P1$. Essa análise é essencial para compreender as propriedades eletrônicas e a condutividade do material.

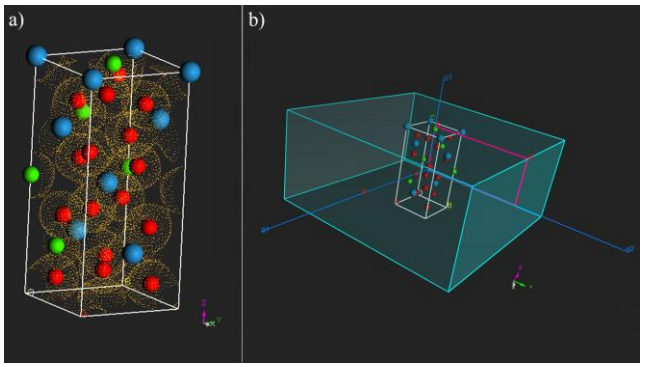
Tabela 1 – Parâmetros de rede (a, b, c, α, β e γ) e volumes (V) obtidos no CASTEP após otimização da geometria, incluindo os respectivos erros percentuais em relação aos valores experimentais.

Parâmetro	a (Å)	b (Å)	c (Å)	α (°)	β (°)	γ (°)	V (Å³)

Teórico (CASTEP)	5.255993	5.255993	11.348681	90	90	90	313.513
Experimental	5.2347	5.2347	11.3546	90	90	90	311.13
Erro (%)	0.405	0.405	0.052	0.000	0.000	0.000	0.762

Fonte: Autores, 2025.

Figura 2 – Estrutura cristalina do $CaWO_4$: célula primitiva (a) e Zona de Brillouin com vetores de alta simetria e vetores primitivos (b).



Fonte: Autores, 2025.

4.2 Propriedades Eletrônicas

Além das propriedades estruturais, também foram investigadas as propriedades eletrônicas do material. A análise dessas características é essencial para compreender o comportamento dos elétrons no sistema, fornecendo informações sobre a condutividade e outras propriedades eletrônicas fundamentais.

A estrutura cristalina do $CaWO_4$ resulta de diversas interações entre os átomos que compõem o material. Essas interações, tanto entre átomos vizinhos quanto entre os mais distantes, geram uma distribuição discreta de níveis de energia, conhecidos como bandas eletrônicas. A Figura 3 ilustra a estrutura de bandas eletrônicas e a densidade de estados (DOS) total e parcial do cristal de $CaWO_4$, abrangendo um intervalo de energia de -20 eV a 22 eV. O nível de Fermi foi fixado em 0,0 eV como referência.

Na estrutura de bandas, os níveis de energia abaixo de 0,0 eV representam os estados eletrônicos das bandas de valência, enquanto os valores acima do nível de Fermi correspondem às bandas de condução. O intervalo energético entre a

banda de valência mais alta e a banda de condução mais baixa, conhecido como gap eletrônico, foi calculado como 3,809 eV para este material. Comparando esse valor com o resultado experimental reportado por (Du; Wu; Yu, 2016), que determinou um gap de 3,94 eV, obteve-se um erro percentual de 3,325%. Esse valor está em boa concordância com o resultado experimental, evidenciando a similaridade na estrutura de bandas. Além disso, o material pode ser classificado como isolante, de acordo com (Callister Jr. e Rethwisch, 2020).

O gap resulta da natureza quantizada do mundo quântico, onde os elétrons precisam de uma energia específica para transitar da banda de valência para a de condução. Esse gap foi determinado ao longo das direções de alta simetria da zona de Brillouin, conforme representado no diagrama de bandas.

Ao observar a Figura 3, verifica-se que as bandas de valência do $CaWO_4$ apresentam uma contribuição significativa dos orbitais *s* e *p*, conforme destacado na densidade de estados parcial (PDOS). Nessa figura, os orbitais *s* são representados em azul, os *p* em vermelho e os *d* em verde, enquanto a DOS total (SUM), que corresponde à soma das contribuições individuais dos orbitais, é exibida na cor rosa. O orbital *f* não está incluído, pois não se aplica à estrutura eletrônica deste material.

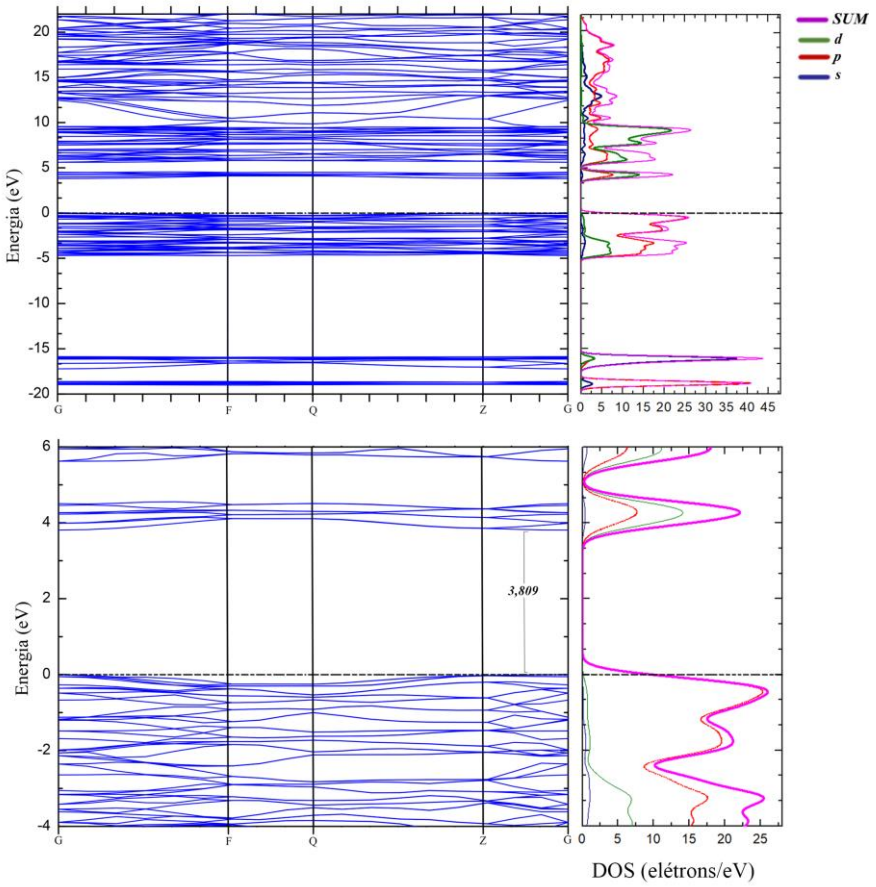
Como complemento, devido ao tamanho reduzido das contribuições individuais na Figura 3, a Figura 4 apresenta a densidade parcial de estados na horizontal, proporcionando uma melhor visualização dessas contribuições. Essa figura também exibe a distinção das cores correspondentes a cada orbital e à DOS total (SUM).

A distribuição da densidade de estados revela aspectos eletrônicos fundamentais do $CaWO_4$. O orbital *s* apresenta um pico expressivo em aproximadamente -16 eV, influenciando diretamente as propriedades eletrônicas do material. Os orbitais *p* têm um papel relevante na formação das bandas de valência, destacando-se um pico significativo em -18,7 eV. Já o orbital *d*, caracterizado por sua forte participação nas bandas de condução e significativa hibridização com outros estados eletrônicos, exibe proeminência na faixa de 4 a 10 eV, com um pico marcante em aproximadamente 9,25 eV.

As primeiras faixas das bandas de valência se estendem aproximadamente de -20 eV a -15 eV, com contribuições predominantes dos orbitais *s* e *p*. A primeira

banda de valência, entre -19,1 eV e -18,6 eV, é dominada pelo orbital *p*, enquanto a segunda, de -17,2 eV a -15,8 eV, é dominada pelo orbital *s*. A faixa subsequente, mais próxima do nível de Fermi, situa-se entre -5 eV e 0 eV, apresentando uma maior influência dos orbitais *p* e *d*. As bandas de condução começam a partir de cerca de 3,8 eV e se estendem para energias mais altas, sendo também dominadas pelos orbitais *p* e *d*.

Figura 3 – Estrutura de bandas e densidade de estados do $CaWO_4$.

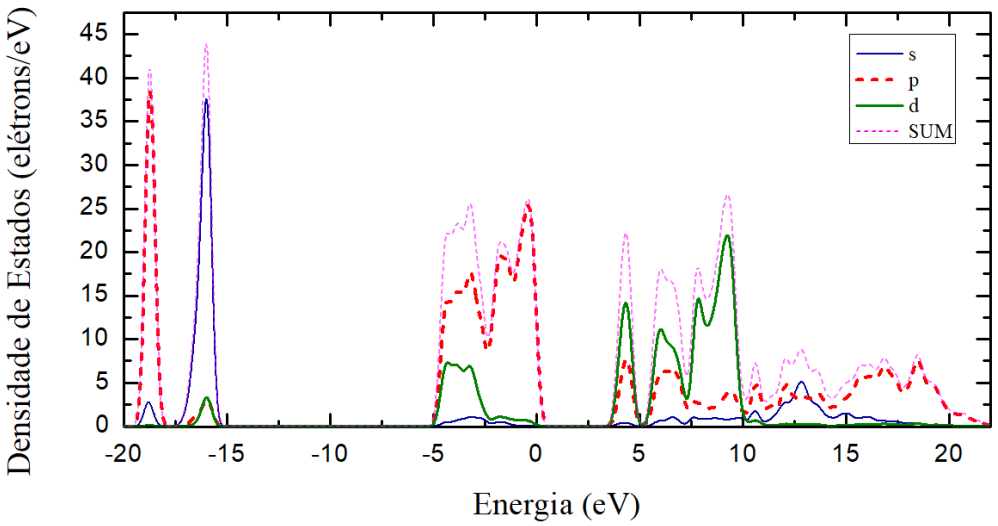


Fonte: Autores, 2025.

Na análise da densidade de estados, observam-se picos acentuados na região das bandas de valência, indicando uma elevada concentração de estados eletrônicos nessa faixa de energia. Já na banda de condução, os estados eletrônicos apresentam-se mais dispersos, refletindo uma menor densidade de estados nas energias mais altas, embora haja uma maior presença de orbitais na faixa de energia superior. Essa combinação de características revela informações essenciais sobre a

natureza eletrônica e o comportamento optoeletrônico do material, que ainda serão investigados.

Figura 4 – Visualização Expandida da Densidade Parcial de Estados (PDOS).



Fonte: Autores, 2025.

5. Conclusão

Os parâmetros de rede definidos garantiram uma representação fiel da estrutura do $CaWO_4$ permitindo a obtenção de um gap eletrônico de 3,809 eV. Esse valor apresenta um erro percentual de apenas 3,325% em relação ao dado experimental de 3,94 eV reportado por (Du; Wu; Yu; 2016) evidenciando a confiabilidade do modelo empregado. A escolha de preservar a simetria scheelita tetragonal, em vez de reduzir o sistema para a simetria $P1$, assegurou uma descrição mais realista das interações atômicas, mantendo a coerência com a estrutura cristalina observada experimentalmente.

A análise da estrutura de bandas eletrônicas confirmou o caráter isolante do $CaWO_4$, reforçando sua adequação para aplicações tecnológicas específicas. A densidade parcial de estados (PDOS) demonstrou que os orbitais *s* e *p* desempenham papel fundamental na formação das bandas de valência, enquanto os orbitais *d* são predominantes na banda de condução. Esses resultados, além de serem consistentes com os dados experimentais, validam a robustez do modelo teórico adotado.

Dado o gap relativamente amplo e a estabilidade estrutural do $CaWO_4$, torna-se viável a exploração de suas propriedades ópticas, ampliando suas possíveis aplicações em dispositivos optoeletrônicos e nanotecnologia consolidando sua importância na ciência dos materiais e suas aplicações tecnológicas emergentes.

Agradecimentos

Os autores agradecem a Pró-Reitoria de Pesquisa e Pós-Graduação – PPG/UEMA (N. 156279/2023), Programa de Doutorado em Ensino da Rede Nordeste de Ensino (RENOEN), Mestrado em Educação Inclusiva (PROFEI), ao programa de Mestrado em Processos e Tecnologias Educacionais (PROFEDUCATEC) e ao grupo de pesquisa GRUMA.

Referências

ANGLOHER, G. et al. **Latest observations on the low energy excess in CRESST-III**. *SciPost Physics Proceedings*, n. 12, p. 013, 2023.

BARBOSA, H. P. et al. **Photoluminescence study of nanophosphorous $CaWO_4$: Eu^{3+} ; estudo da fotoluminescência dos nanofósforos $CaWO_4$: Eu^{3+}** . 2011.

BONANI, F. D. **Estudo da Teoria do Funcional da Densidade aplicada aos semicondutores III-V na fase wurtzita**. 2021. Tese (Doutorado) — Universidade de São Paulo.

CALLISTER JR, W. D.; RETHWISCH, D. G. **Materials science and engineering: an introduction**. John Wiley & Sons, 2020.

CHAI, R. et al. **In situ preparation and luminescence properties of $CaWO_4$ and $CaWO_4$: Ln (Ln = Eu^{3+} , Tb^{3+}) nanoparticles and transparent $CaWO_4$: Ln/PMMA nanocomposites**. *Journal of Luminescence*, v. 202, p. 65–70, 2018.

DU, P.; WU, S.; YU, J. S. **Synthesis, electronic structure and luminescence properties of color-controllable Dy^{3+} /Eu^{3+} -codoped $CaWO_4$ phosphors**. *Journal of Luminescence*, v. 173, p. 192–198, 2016.

MOREIRA, G. L. **A exploração do minério scheelita: estudo de caso: Mina Brejuí-Currais Novos-RN**. 2018.

NATIONAL CENTER FOR BIOTECHNOLOGY INFORMATION. **PubChem Compound Summary for CID 123264, Calcium tungsten oxide ($CaWO_4$)**. 2025. Disponível em: https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/compound/123264. Acesso em: 19 fev. 2025.

PASSOS, R. H. D. **Elaboração e estudo das propriedades elétricas e catalíticas dos tungstatos (Sr, Ce) WO_4 : aplicação para a conversão de metano**. 2018.
PAULINO, J. F.; AFONSO, J. C. **Tungstênio**. *Química Nova na Escola*, São Paulo, v. 35, n. 2, p. 141–142, 2013.

PERDEW, J. P.; BURKE, K.; ERNZERHOF, M. **Generalized gradient approximation made simple**. *Physical Review Letters*, v. 77, n. 18, p. 3865, 1996.
SANTOS, M. S. et al. **Estudo da supercondutividade na bicamada de grafeno rotacionada e intercalada com carbono**. Universidade Federal de Campina Grande, 2022.

SHIVAKUMARA, C. et al. **Scheelite-type MWO_4 (M = Ca, Sr, and Ba) nanophosphors: facile synthesis, structural characterization, photoluminescence, and photocatalytic properties**. *Materials Research Bulletin*, v. 61, p. 422–432, 2015.

SILVA, J. et al. **Structural and electronic properties of hyaluronic acid**. *Current Trends in Biomedical Engineering and Bioscience*, v. 22, n. 5, p. 556100, 2024.

SONG, N.; NAGORNY, S.; VINCENT, A. C. **Pushing the frontier of WIMPy inelastic dark matter: Journey to the end of the periodic table**. *Physical Review D*, v. 104, n. 10, p. 103032, 2021.

SOUSA, P. D. et al. **Electronic structure, optical and sonophotocatalytic properties of spindle-like $CaWO_4$ microcrystals synthesized by the sonochemical method**. *Journal of Alloys and Compounds*, v. 855, p. 157377, 2021.

YADAV, P. et al. **Investigation of structural and optoelectronic integrity of Sm^{3+} doped $CaWO_4$ for LED applications**. *Ceramics International*, v. 50, n. 19, p. 35203–35213, 2024.