

Estudo comparativo do espectro vibracional de nanoestruturas de óxido de vanádio

Vitor Sudbrack¹ (IC), Vladimir Lavayen^{1*} (PQ)

¹Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Instituto de Química, BR-91501970, Porto Alegre-RS, Brasil.

Palavras Chave: óxido, vanádio, infravermelho, nanoestruturas.

Introdução

Nanoestruturas híbridas baseadas em óxido de vanádio (V_2O_5) é ainda uma área de intensa pesquisa pelos uso destes materiais como componentes de baterias de Íons de Lítio, dispositivos electrocrômicos entre outros.¹⁻⁴ Nosso grupo tem estudado as propriedades eletrônicas, vibracionais de nanoestruturas unidimensionais (1D) como nanotubos, nanobastões, e os nanocorais 3D.^{1,4}

Xerogel de óxido de vanádio (XG) é um gel envelhecido que seco produz um pó leve, que possui dois tipos de arranjos nos seus octaedros. Ou chamado alfa, muito ordenado, e ou gamma que é desordenado.^{1,4}

V_2O_5 ortorrômbico apresenta um modo vibracional activo no infravermelho pertencente ao grupo vanadilo, $V^{5+}=O$ a 1001 cm^{-1} . Reações oxido-redução podem ocorrer neste tipo de materiais, assim a co-existência das espécies V^{5+} , V^{4+} , e V^{3+} , ao mesmo tempo da presença de diversas conformações.^{1,4}

Neste trabalho se apresenta a caracterização vibracional focada no vanádio de estruturas híbridas organo-inorgânicas, assim como a comparação com ou XG e V_2O_5 .

Resultados e Discussão

Ou material sintetizado, chamado de YF, com composição $V_2O_5(\text{surfactante})_y$, onde y tem valores de 2,3,6, apresenta morfologia lamelar e de cor amarelo. No espectro infravermelho pode ser observado bandas correspondentes aos modos vibracionais ativos do vanádio no intervalo $400\text{-}1100\text{ cm}^{-1}$, veja-se **Figura 1**.

A banda observada perto de 1001 cm^{-1} é atribuído ao modo de deformação axial $V^{5+}=O$.¹⁻⁴ Na **Figura 1**, se observa bandas a 1033 cm^{-1} , 954 cm^{-1} e 940 cm^{-1} bandas atribuídas ao vibração axial V-O-V em suas diferentes conformações. Ou modo de vibração axial da espécie V^{4+} é observado a 910 cm^{-1} . Foi relatado que ou XG apresenta bandas a 1010 cm^{-1} , 945 cm^{-1} e 910 cm^{-1} .⁴

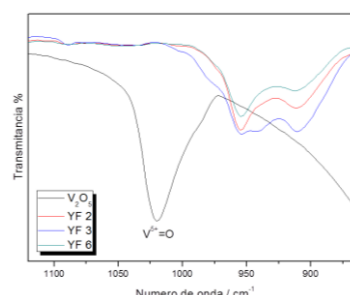


Figura 1. Espectro infravermelho dos híbridos $V_2O_5(\text{surfactante})_y$ e V_2O_5 .

A partir das intensidades das bandas se determino uma relação V^{5+}/V^{4+} dos materiais estudados. Se encontro uma tendência de **YF 3** > **YF 6** > **YF 2** > XG > V_2O_5 no aumento da espécie V^{4+} . Também serão apresentados e discutidos resultados de análises morfológico, e de difração de raios X.

Conclusões

Se determino uma relação aproximada dos estados de oxidação, V^{5+}/V^{4+} , que será corroborada por outras técnicas de maior confiabilidade.

Mediante ou conteúdo do surfactante pode se regular a composição do hospede, assim como ou estado de oxidação do vanádio.

Agradecimentos

Os autores agradecem ao facilidades do CNANO/UFRGs, assim como ao programa PIBID e ao CNPq pelo apoio financeiro.

¹ O'Dwyer, C.; Lavayen, V.; Tanner, D.; Newcomb, S.; Benavente, E.; Gonzalez, G. e Sotomayor-Torres C. *Adv. Funct. Mater.* **2009**, 19, 1736.

² Kweon, H.; Lee, K. W.; Lee, E. M.; Park, J.; Kim, I. M.; Lee, C. E.; Jung, G.; Gedanken, A. e Koltypin, Y. *Phys. Rev. B.* **2007**, 76, 045434.

³ Zylbersztejn, A. e Mott, N. F. *Phys. Rev. B.* **1975**, 11, 4383.

⁴ O'Dwyer, C.; Lavayen, V.; Newcomb S.B.; Santa Ana M.A.; Benavente, E.; González, G.; e Sotomayor-Torres C.; *J. Electrochem. Soc.* **2007**, 154, K29-K35.