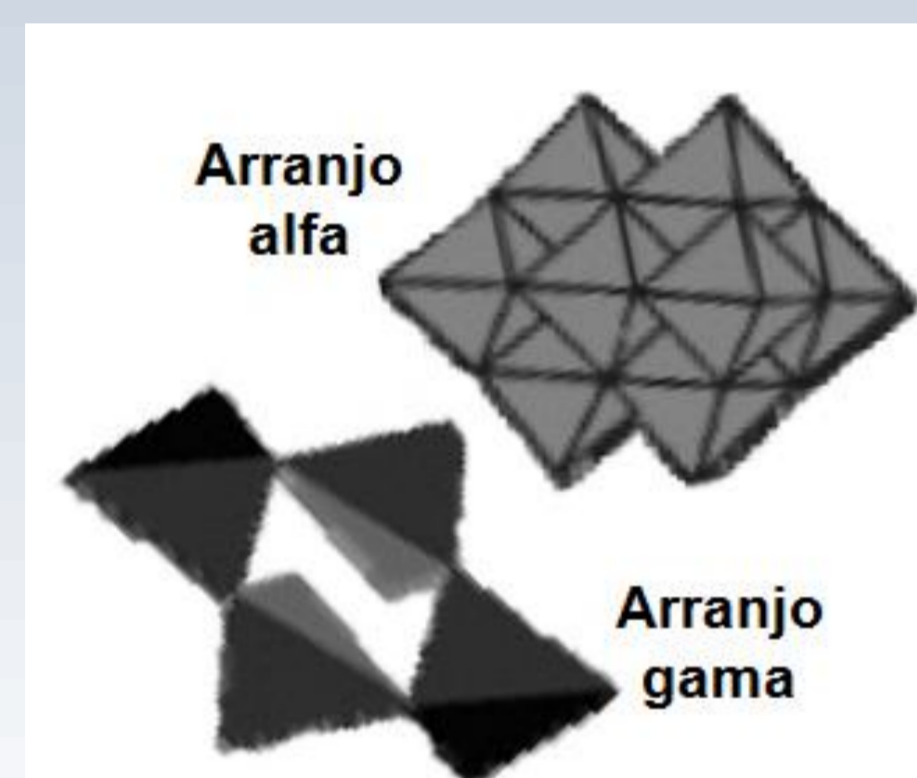


Em xerogeis (XG) e materiais organo-inorgânicos baseados em óxido de vanádio é sabido que a valência e as conformações deste metal podem sofrer diversas modificações através de reações de oxirredução. As características e aplicabilidades dos diferentes materiais baseados em vanádio dependem de tais propriedades. Neste estudo é caracterizada a estrutura de um material sintetizado da forma $V_2O_5(\text{surfactante})_y$, através de difração de Raios-X (XRD) e espectroscopia de infravermelho, com o objetivo de analisar as conformações e estados de oxidação do vanádio, e por fim compará-las com o XG e o V_2O_5 .

Introdução

Nanoestruturas organo-inorgânicas (OI) baseadas em óxido de vanádio (V_2O_5) ainda são uma área de intensa pesquisa pelos usos destes materiais como componentes de baterias de íons de Lítio, dispositivos eletrocromicos, entre outros. Nosso grupo tem estudado as propriedades eletrônicas e vibracionais de nanoestruturas unidimensionais (1D) como nanotubos e nanobastões; e tridimensionais, como os nano-ouriços.



É bem conhecido que o xerogel de óxido de vanádio (XG) é um gel envelhecido que quando seco produz um pó leve, que possui dois tipos de arranjos nos seus octaedros. Um chamado alfa, muito ordenado, e outro denominado gama, que é desordenado.

Neste estudo se apresenta os resultados de análise da caracterização do material sintetizado da forma $V_2O_5(\text{surfactante})_y$ usando técnicas como difração de Raio-X (XRD) e espectroscopia do infravermelho (FT-IR), com o objetivo de analisar a constituição do material lamelar, bem como as conformações e estados de oxidação do Vanádio, e, por fim, compará-las com o reagente inicial.

Parte Experimental

O material foi sintetizado a partir de óxido de Vanádio e um surfactante. A relação molar entre os compostos foi variada de 0,5 até 2,5, estudando assim as diferenças estruturais causadas pela relação molar no material resultante.

Todos os compostos obtidos tiveram aparência porosa e amarelada e estrutura lamelar, conforme Fig 1. Ao secar, tornavam-se mais sólidos e com aparência de pó.

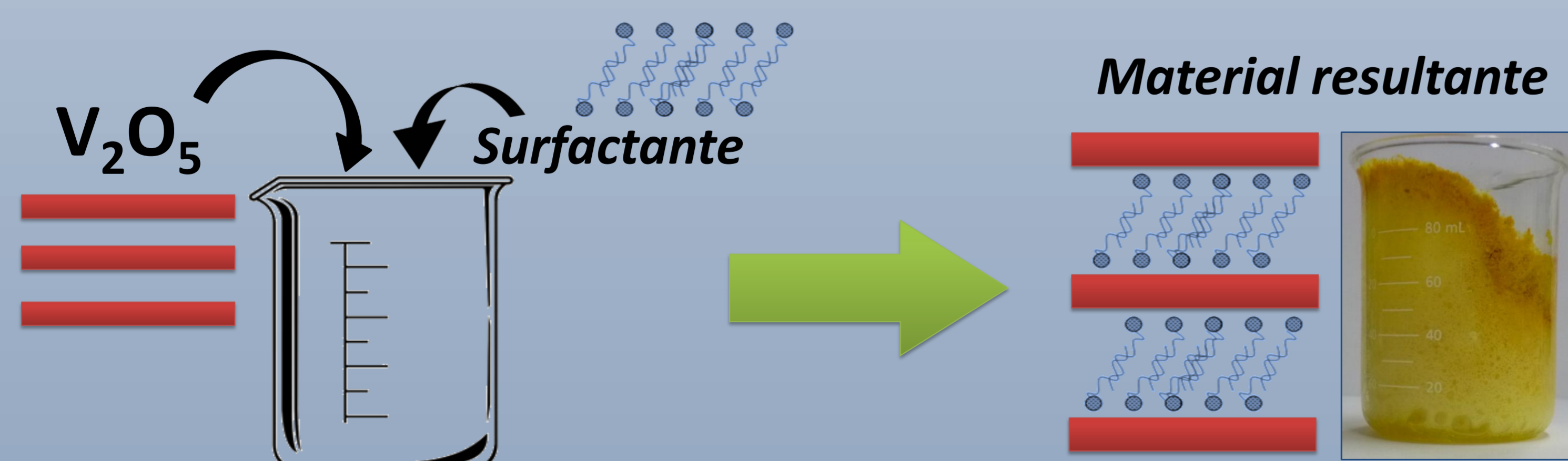


Figura 1. Esquema de formação dos compostos organo-inorgânicos (OI) baseados em óxido de Vanádio.

Resultados e Discussão

As distâncias entre as camadas variaram de 3,2 a 7,2 nm e foram calculadas através do padrão do XRD, apresentado na Fig. 2.

O modelo proposto da estrutura deste material pode ser explicada usando conceitos de "baixo para cima", química supramolecular e reações topotáticas.

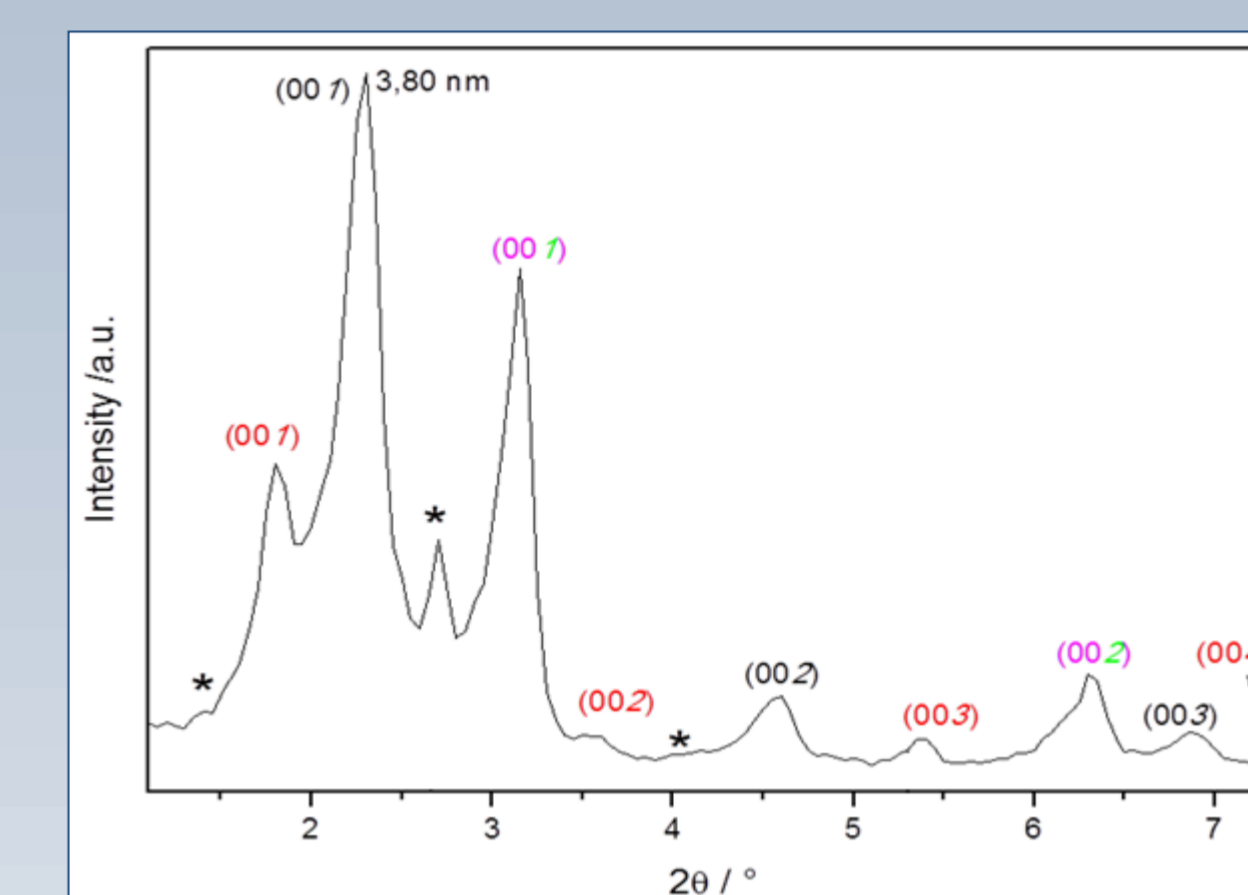


Figura 2. Padrão de DRX do material resultante.

A análise cuidadosa do modo vibracional do grupo vanadilo ($V=O$) na região do infravermelho mostra uma constante de força de $9,4 \times 10^{-5}$ dina.cm⁻¹, além de uma relação das valências V^{4+}/V^{5+} de 0,27. As amostras apresentam luminescência perto de 2,2 eV.

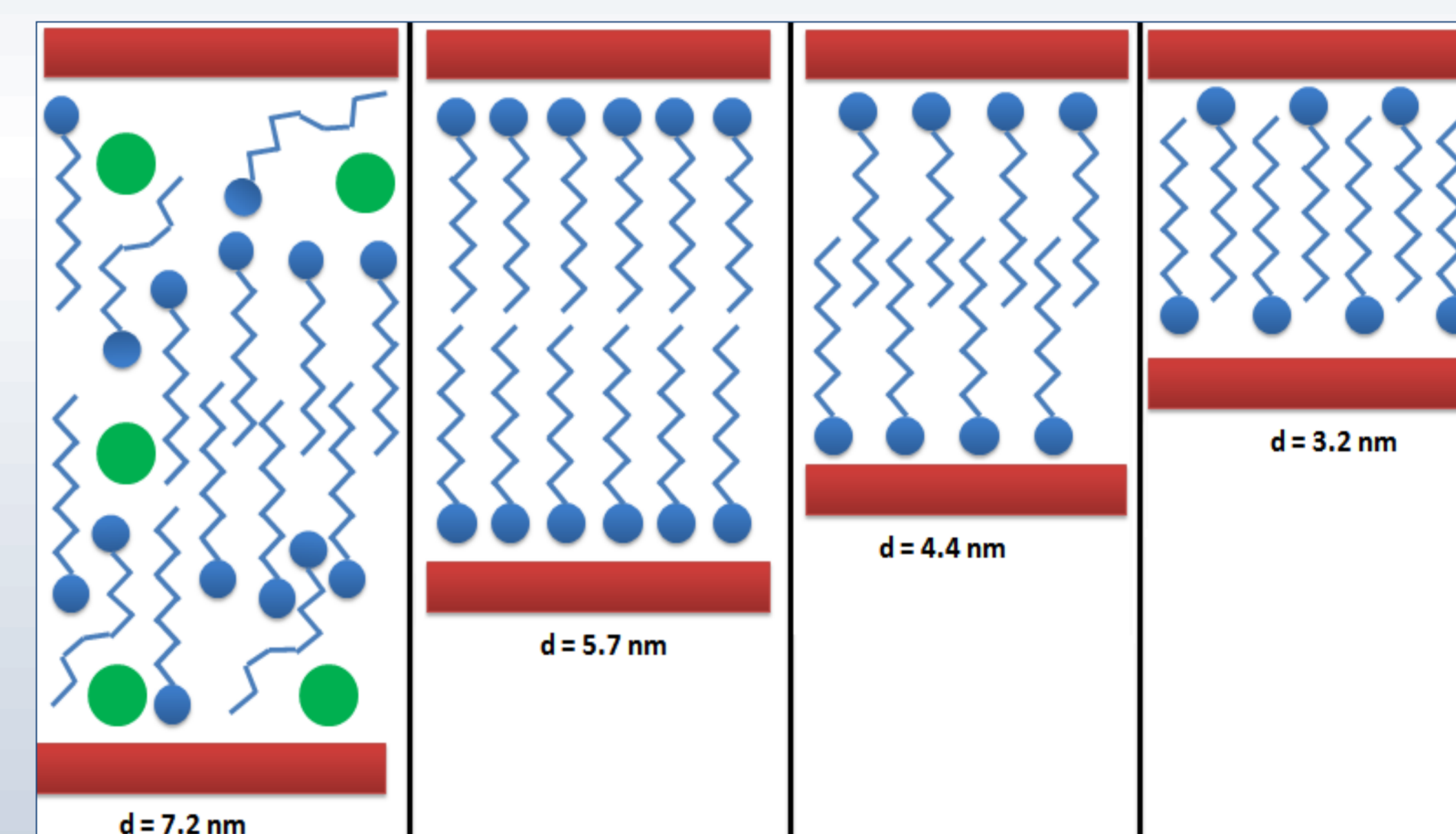


Figura 3. Modelo estrutural proposto do material resultante.

Baseados nos dados estruturais a partir das diversas técnicas, se propõe a presença de camadas lamelares a quatro diferentes distâncias, conforme Fig.3, onde em vermelho está representado os poliânions de Vanádio (tetra- e decapolivanadatos), em azul o surfactante, e em verde a água.

Neste estudo realizou-se uma caracterização do nanomaterial OI sintetizado a base de óxido de Vanádio. Determinou-se concentrações relativas das espécies de Vanádio, a constante de força da ligação vanadato e a distância entre as camadas inorgânicas. Por fim, apresentou-se um modelo da estrutura.

Agradecimentos

Os autores agradecem às facilidades do CNANO/UFRGS, assim como ao programa PIBIC e ao CNPq pelo apoio financeiro.

Referências bibliográficas

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