

Síntese e caracterização dos compostos $H_{1-x}Fe_{x/3}TaWO_6$ e $H_{1-x}Cu_{x/2}TaWO_6$ com estruturas Pirocloro e Trirrutilo

Cauê Ferreira Esmi (IC)* e Oswaldo Luiz Alves (PQ)

Laboratório de Química do Estado Sólido – LQES, Instituto de Química – UNICAMP, CP 6154, Campinas, SP, Brasil, CEP: 13083-970. *E-mail: g031776@unicamp.br; <http://lqes.iqm.unicamp.br>

Palavras Chave: Materiais cerâmicos, Pirocloro, Trirrutilo, Troca Iônica (máximo de 6 palavras até 30 caracteres).

Introdução

Os óxidos hidrogenados de fórmula geral $HM^V M^{VI} O_6$ têm sido estudados devido as suas possibilidades de aplicações em condutores iônicos rápidos (fast-ion conduction) e na formação de nanocompósitos^{1,2}. Dentre todos os compostos com esta formulação destaca-se o $HTaWO_6$, que apresenta as formas estruturais de pirocloro e trirrutilo. A primeira forma, proveniente do precursor $KTaWO_6$ é caracterizada por um empacotamento de esqueletos tridimensionais de octaedros MO_6 ($M = Ta$ e W) ligados pelos vértices e um sistema de canais abertos na direção $[110]$ do sistema cúbico. A segunda, proveniente do precursor $LiTaWO_6$ apresenta o mesmo empacotamento dos octaedros MO_6 , porém, ligados pelos vértices e arestas em uma configuração lamelar perpendicular ao eixo c . Em ambos os casos, o $HTaWO_6$, obtido através de reações de troca iônica dos metais alcalinos pelo próton, foi utilizado como intermediário na obtenção dos compostos $H_{1-x}Fe_{x/3}TaWO_6$ e $H_{1-x}Cu_{x/2}TaWO_6$.

Resultados e Discussão

A síntese dos compostos de interesse foi acompanhada por análises de DRX, FTIR e TG.

Através da comparação das posições dos picos obtidos na difração de raios-x com os resultados apresentados na literatura, pode-se estabelecer os grupos espaciais dos precursores e produtos. Os compostos pirocloro ($KTaWO_6$) são pertencentes ao grupo espacial $Fd3m$ e os compostos trirrutilo ($LiTaWO_6$), pertencentes ao grupo $P4_2/mnm$. Foi observado que nenhuma das trocas iônicas realizadas ($K/H/Cu$ ou Fe) altera a estrutura espacial dos compostos pirocloro, Figura 1a. No composto trirrutilo a substituição do metal alcalino pelo próton provoca a expansão da distância interlamelar. A estrutura, no entanto, é preservada, Figura 1b

O comportamento térmico dos compostos foi acompanhado pela análise térmica (TG), Figura 2. Independentemente da estrutura, são notados três eventos distintos envolvendo a perda de moléculas de água. Da temperatura ambiente à $230^\circ C$, ocorre perda da água de hidratação; de $340^\circ C$ à $460^\circ C$ há a perda da água interna e de $520^\circ C$ a $600^\circ C$, ocorre a decomposição do produto e formação de bronzes.

30ª Reunião Anual da Sociedade Brasileira de Química

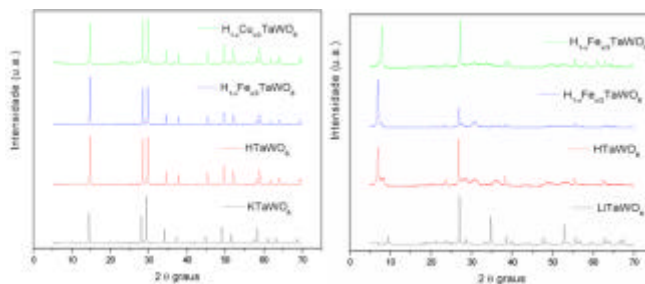


Figura 1. DRX dos compostos com estrutura (a) pirocloro e (b) trirrutilo, antes e após as reações de troca iônica

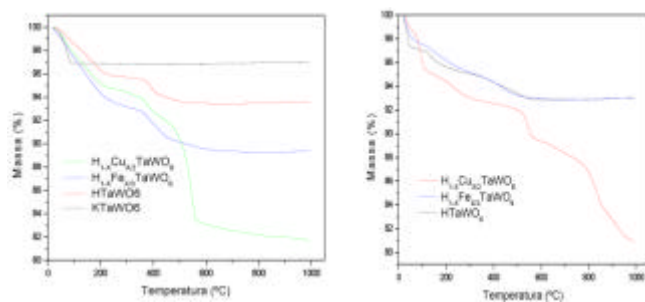


Figura 2. DRX dos compostos com estrutura pirocloro e trirrutilo, antes e após as reações de troca iônica.

Conclusões

Os compostos $H_{1-x}Fe_{x/3}TaWO_6$ e $H_{1-x}Cu_{x/2}TaWO_6$ puderam ser obtidos através de reações de troca iônica utilizando o $HTaWO_6$ (pirocloro e trirrutilo). A manutenção das fases é observada para ambas as estruturas e apresenta grande interesse para aplicações futuras, como a inserção de espécies ionóforas.

Agradecimentos

Programa Institucional de Bolsas de Iniciação Científica – PIBIC – Unicamp; Instituto do Milênio de Materiais Complexos (IM²C)

1 - Catti, M. et al. *J. Solid State Chem.* **1993**, 107, 108.

2 - Wang, L. et al *J. Porous Materials* 2005, 12

