



ESTUDO DAS CARACTERÍSTICAS ÓPTICAS E ESTRUTURAIS DO MOLIBDATO DE SÓDIO DIHIDRATADO $\text{Na}_2\text{MoO}_4 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$

Fábio Garske da Fonseca, discente de pós-graduação, Universidade Federal do Pampa, Campus Bagé

Uhil Robson do Nascimento Antunes, discente de pós-graduação, Universidade Federal do Pampa, Campus Bagé

Bruna Carvalho Antunes, discente de pós-graduação, Universidade Federal do Pampa, Campus Bagé

Júlia Viana da Cunha, discente de pós-graduação, Universidade Federal do Pampa, Campus Bagé

Eduardo Ceretta Moreira, docente, Universidade Federal do Pampa

Wladimir Hernandez Flores, docente, Universidade Federal do Pampa

fabiofonseca@unipampa.edu.br

O molibdato de sódio dihidratado, $\text{Na}_2\text{MoO}_4 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$, é um sal inorgânico precursor para a obtenção de óxido de molibdênio (MoO_3), aplicado em dispositivos eletrocromicos por possuir efeito cromógeno. O estudo objetivou caracterizar o material por meio de análise e interpretação de resultados gerados através de espectroscopias vibracionais Raman e infravermelho com transformada de Fourier (FTIR), espectrofotometria de absorção UV-Vis e difração de raios X (DRX). As análises ocorreram em laboratórios do campus Bagé da Unipampa. A análise DRX foi feita em equipamento com geometria de Bragg-Brentano, com varredura de 10° a 80° . As medidas de espectroscopia Raman confocal foram realizadas na faixa espectral de $50 - 2500 \text{ cm}^{-1}$, com laser de 785 nm e resolução de 3 cm^{-1} . Para FTIR utilizou-se equipamento com resolução de 4 cm^{-1} e faixa espectral de $200-4000 \text{ cm}^{-1}$. Na absorção UV-Vis foi preparada solução $0,1 \text{ mol.L}^{-1}$ e utilizado espectrofotômetro com faixa de comprimento de onda de $190 - 1100 \text{ nm}$. Comparando o resultado de DRX com o previsto na literatura, a análise da amostra apresentou relativa concordância, denotando picos característicos do sistema cristalino ortorrômbico. A razão das diferenças de posições e intensidades dos picos é por se tratar de material hidratado, e com isso, haver efeitos cristalográficos distintos em diferentes análises. A espectroscopia Raman apresentou picos em $280, 325, 790, 830$ e 884 cm^{-1} referentes aos modos vibracionais do íon tetraédrico molibdato com forte influência, devido às vibrações, na contagem de ondas no espectro Raman, em 280 e 325 cm^{-1} são modos referentes à dobra (curvatura) simétrica (ν_2), em 790 e 830 cm^{-1} são modos referentes alongamento assimétrico (ν_3), em 884 cm^{-1} é referente ao alongamento simétrico (ν_1). FTIR apresentou bandas em $820, 858$ e 893 cm^{-1} referentes às vibrações de alongamentos assimétricos (ν_3) do íon tetraédrico molibdato e modo em 916 cm^{-1} corresponde à alongamento simétrico (ν_1) do mesmo, além de outras bandas contabilizadas como vibrações de dobra de água ($\sim 1680 \text{ cm}^{-1}$) e alongamento assimétrico ($\sim 3300 \text{ cm}^{-1}$). O espectro UV-Vis apresentou

comprimento de onda de absorção máxima em 284 nm, referente ao MoO_4^{2-} , que é a espécie dominante no meio, concordando com a literatura. Por fim, as espectroscopias Raman e FTIR demonstraram serem complementares; as vibrações moleculares identificadas pelos números de ondas nas duas técnicas ajudaram a identificar a simetria da estrutura do $\text{Na}_2\text{MoO}_4 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$, basicamente formada por tetraedros. Por DRX observou-se estrutura cristalina do sistema ortorrômbico, com planos definidos, confirmando sua identidade cristalográfica. Devido à complexidade formada por tetraedros MoO_4^{2-} e a presença de água, algumas incoerências podem ocorrer e ocasionar instabilidade da estrutura cristalina. Os métodos foram satisfatórios para a caracterização óptica e estrutural do material demonstrando que este conjunto de análises podem ser úteis na caracterização de materiais.

Agradecimentos: CAPES.

Palavras-chave: Molibdato de sódio dihidratado; Difratoograma; Espectroscopia; Estrutura tetraédrica; Fase ortorrômbica.