

20-007 Enriquecimento isotópico do alfa-ZrW₂O₈ e identificação dos sítios cristalográficos ocupados pelo oxigênio por ressonância magnética nuclear em estado sólido

Fernanda Miotto

Miotto, F. (1); Catafesta, J. (1); Perottoni, C.A. (1)/(1) UCS

Ressonância magnética nuclear (RMN) de estado sólido é uma técnica capaz de fornecer informações sobre a vizinhança química de um átomo e, conseqüentemente, sobre o sítio cristalográfico ocupado por ele. Os átomos de oxigênio presentes na fase alfa-ZrW₂O₈ estão dispostos em quatro sítios cristalográficos distintos. A técnica de RMN permite distinguir estes sítios, desde que a amostra seja enriquecida isotopicamente. Neste trabalho, a fase alfa-ZrW₂O₈ foi enriquecida isotopicamente com ¹⁷O. Após, foi realizada uma medida de RMN em estado sólido para identificar o sinal proveniente dos quatro sítios cristalográficos ocupados pelo oxigênio nesta estrutura e comprovar a eficiência da rota de enriquecimento utilizada. Os oxigênios O1 e O2 estão em ambientes químicos semelhantes e originaram duas ressonâncias sobrepostas em 434 ppm. O oxigênio O3 situa-se em um sítio assimétrico W1...O3-W2 e originou uma ressonância em 561 ppm. O oxigênio O4 (número de coordenação 1) originou uma ressonância em 734 ppm.