

Estudo das Propriedades estruturais de $\text{TiO}_2:\text{Eu}^{3+}$ através da espectroscopia Raman

Aline L. Pena^{1*}(IC), João L. Rangel²(PG), Igor A. S. Carvalho³(PQ), Daniela P. Santos¹(PG), Juliana M.M.Buarque¹(PG), Marco A. Schiavon¹(PQ), Jefferson L. Ferrari¹(PQ)**

¹Universidade Federal de São João del-Rei, UFSJ, Praça Dom Helvécio, 74, 36.301-160, São João Del Rei, MG, Brasil; ²Universidade do Vale do Paraíba; ³Horiba Instruments Brasil LTDA

e-mail: *alinea_liiima@hotmail.com e **jeffersonferrari@gmail.com.

Palavras Chave: óxido de titânio, fotoluminescência, Raman

Introdução

Atualmente, os materiais com propriedades fotoluminescentes têm ganhado uma grande importância devido às suas potenciais aplicações em dispositivos de alta tecnologia. Assim, materiais constituídos de TiO_2 dopados com íons TR^{3+} tem causado um interesse considerável devido a inúmeras aplicações, que compreendem: suporte catalítico, sensores, células solares e amplificadores ópticos. O TiO_2 é característico de ser transparente em uma longa faixa do espectro eletromagnético e a sua dopagem com íons TR^{3+} tem obtidos resultados atraentes para aplicações em fotônica. O íon Eu^{3+} tem sido objeto de muitos estudos em análises de modificações estruturais, devido à sua fácil interpretação espectral. Portanto, o objetivo desse trabalho é obter materiais a base de TiO_2 dopados com íons Eu^{3+} e evidenciar suas propriedades fotoluminescentes e espectroscópicas, através da espectroscopia Raman, em função da temperatura de tratamento térmico.

Resultados e Discussão

Materiais a base de TiO_2 , dopados com 1, 2, 5 e 10% em mol de íons Eu^{3+} , foram preparados pelo processo sol-gel. Como precursores, foram utilizados tetraisopropilortitanato (TTIP) e uma solução alcoólica de Eu^{3+} 0,1mol. L^{-1} . A quantidade de íons TR^{3+} foi calculada em relação à quantidade total de íons Ti^{4+} . Sóis com volume de 20 mL, concentração $\text{TiO}_2 = 0,5\text{g}$ foram obtidos a partir da mistura de TTIP, etanol anidro, ácido clorídrico (0,27mol. L^{-1}) e a solução precursora de Eu^{3+} . A solução foi mantida sob agitação por 10 min e o sol formado foi submetido a aquecimento a 100°C por 24h obtendo-se os xerogéis que, por sua vez, foram triturados e tratados termicamente a 500, 700, 900 e 1100°C por 4hs. A partir das análises obtidas por Raman, foi possível identificar a fase cristalina do TiO_2 formada. Baseada na teoria de grupo, a fase Anatase possui seis modos vibracionais ativos no Raman, os quais se caracterizam pelos números de onda: 144, 197, 399, 513, 519 e 639 cm^{-1} , já a fase Rutilo exibe quatro modos vibracionais ativos, sendo

eles: 144, 239, 448 e 612 cm^{-1} . Podem-se observar a partir das análises das frequências vibracionais presentes nos espectros das amostras tratadas a 500 e 700°C indicam fase cristalina do tipo Anatase.

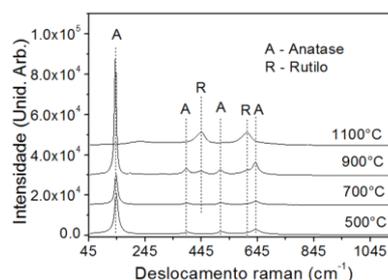


Figura 1. Espectro Raman das amostras dopadas com 5% em mols de íons de Eu^{3+} .

Para as amostras tratadas à 900°C indicam a presença das duas fases e à 1100°C apenas a fase Rutilo. A mudança de fase de Anatase para Rutilo é o fator responsável pela omissão da fotoluminescência, devido à presença do centro de inversão de simetria na fase Rutilo. Assim, o aumento da temperatura beneficia uma mudança da fase cristalina do TiO_2 do tipo Anatase para Rutilo, sendo um grande indício da localização do íon Eu^{3+} em uma simetria com centro de inversão distorcido.

Conclusões

A partir dos resultados encontrados pode-se observar que o aumento da temperatura de tratamento térmico interfere na fotoluminescência, uma vez que a formação da fase Rutilo promove a diminuição da mesma. Assim, inferiu-se que a fase Anatase apresenta propriedades fotoluminescentes tornando o TiO_2 um bom candidato para utilização em dispositivos fotônicos.

Agradecimentos

Os autores agradecem a Rede Mineira de Química, a Fapemig, a Capes, e ao CNPq.

¹ BERKANI, O.; LATROUS, K.; HAMZAOU EL, H.; CAPOEN, B.; BOUZAOU, M. *Effects of heat treatment and TiO_2 content on the optical properties of Eu^{3+} doped $\text{TiO}_2\text{-SiO}_2$ thin films*. Journal of Luminescence, v.113, p.2979-2983, 2012.

² OHSAKA, T.; *Temperature dependence of the Raman spectrum in anatase TiO_2* . Journal Physics Soc. Jpn. v.37, p.1661-1668, 1980.