

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

Aline L. Pena<sup>1\*</sup>(IC), João L. Rangel<sup>2</sup>(PG), Igor A. S. Carvalho<sup>3</sup>(PQ), Daniela P. Santos<sup>1</sup>(PG), Juliana M.M.Buarque<sup>1</sup>(PG), Marco A. Schiavon<sup>1</sup>(PQ), Jefferson L. Ferrari<sup>1</sup>(PQ)\*\*

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

e-mail: \*alinea\_liiima@hotmail.com e \*\*jeffersonferrari@gmail.com.

Palavras Chave: óxido de titânio, fotoluminescência, Raman

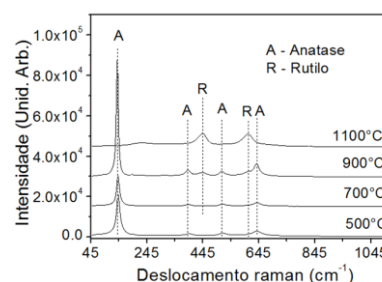
### Introdução

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  $\text{TiO}_2$  dopados com íons  $\text{TR}^{3+}$  tem causado um interesse considerável devido a inúmeras aplicações, que compreendem: suporte catalítico, sensores, células solares e amplificadores ópticos. O  $\text{TiO}_2$  é característico de ser transparente em uma longa faixa do espectro eletromagnético e a sua dopagem com íons  $\text{TR}^{3+}$  tem obtidos resultados atraentes para aplicações em fotônica. O íon  $\text{Eu}^{3+}$  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  $\text{TiO}_2$  dopados com íons  $\text{Eu}^{3+}$  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  $\text{TiO}_2$ , dopados com 1, 2, 5 e 10% em mol de íons  $\text{Eu}^{3+}$ , foram preparados pelo processo sol-gel. Como precursores, foram utilizados tetraisopropilortitanato (TTIP) e uma solução alcoólica de  $\text{Eu}^{3+}$  0,1mol.  $\text{L}^{-1}$ . A quantidade de íons  $\text{TR}^{3+}$  foi calculada em relação à quantidade total de íons  $\text{Ti}^{4+}$ . 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.  $\text{L}^{-1}$ ) e a solução precursora de  $\text{Eu}^{3+}$ . 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  $\text{TiO}_2$  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  $\text{cm}^{-1}$ , já a fase Rutilo exibe quatro modos vibracionais ativos, sendo

eles: 144, 239, 448 e 612  $\text{cm}^{-1}$ . 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  $\text{Eu}^{3+}$ .

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  $\text{TiO}_2$  do tipo Anatase para Rutilo, sendo um grande indício da localização do íon  $\text{Eu}^{3+}$  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  $\text{TiO}_2$  um bom candidato para utilização em dispositivos fotônicos.

### Agradecimentos

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

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

<sup>2</sup> OHSAKA, T.; *Temperature dependence of the Raman spectrum in anatase  $\text{TiO}_2$* . Journal Physics Soc. Jpn. v.37, p.1661-1668, 1980.