

## Controle da transição de fase rutilo/anatase em fibras de TiO<sub>2</sub> através da dopagem com terras raras

Matheus S. de Holanda (PG)<sup>1</sup>, Jorge Paulino (IC)<sup>2\*</sup>, Marcelo O. Rodrigues(PQ)<sup>2</sup>.

<sup>1</sup>Universidade Estadual de Campinas, <sup>2</sup>Universidade de Brasília

\* jorgepaulino08@hotmail.com

Palavras Chave: TiO<sub>2</sub>, Anatase, Rutilo, Fotocatálise

### Introdução

O dióxido de titânio é o material mais estudado para aplicações em fotocatalise<sup>1</sup>, além de ser amplamente utilizado na produção de células solares e produção de tintas. Para algumas aplicações, como na fotocatalise, a fase cristalográfica mais desejada é anatase, sendo as outras a rutilo e a brookita, sendo a última a menos comum. Este material, no entanto, forma um hidocoloide estável quando em água, o que pode ser evitado com a produção de nanomateriais.<sup>2</sup>

Durante a produção desses nanomateriais, em geral, há a necessidade de se realizar tratamentos térmicos, que podem fazer com que haja transição da fase anatase para a fase rutilo, que ocorre a 700°C. Uma das formas de se controlar essa mudança de fase é aplicando a dopagem com terras raras.

### Resultados e Discussão

Fibras de TiO<sub>2</sub> foram produzidas via electrospinning, onde uma solução polimérica é submetida a um campo elétrico com o objetivo de se formar fibras, usando uma solução polimérica de polivinilpirrolidona, etanol, ácido acético, isopropóxido de titânio e sais dos elementos dopantes (EuCl<sub>3</sub> e Ce(NO<sub>3</sub>)<sub>3</sub>) sendo esses últimos adicionados de forma a se obter fibras com 1% de Ce, 1% de Eu e 1% de Ce e 1% de Eu.

Após a fiação, as fibras foram calcinadas a 500 °C e a 700 °C, para decomposição dos compostos orgânicos presentes nas fibras, e analisadas por microscopia eletrônica de varredura, Figura 1, e difração de raios-x. Os difratogramas passaram por refinamento de Reitveld com o objetivo de se quantificar as fases rutilo e anatase. As teores das fases rutilo e anatase foram colocados na Tabela 1.

Os dados da Tabela 1 mostram que a simples adição de dopantes nas fibras aumenta consideravelmente a estabilidade térmica da fase anatase, fazendo com que essa seja majoritária.

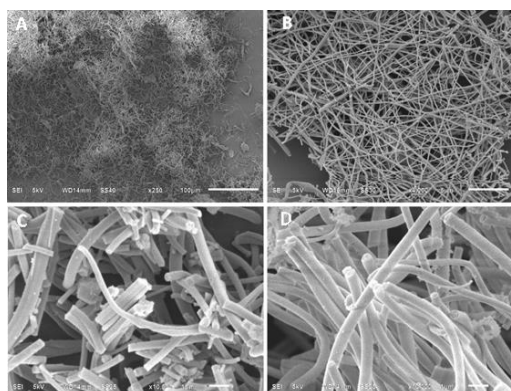


Figura 11: Imagens de MEV mostrando a morfologia das fibras produzidas pelo método de ES em diferentes magnificações.

Tabela 1: Porcentagem das fases rutilo e anatase nas fibras após o processo de calcinação.

Amostra	Rutilo (%)	Anatase (%)
TiO <sub>2</sub> 500°C	74,3	25,7
TiO <sub>2</sub> 700°C	87,8	12,2
Eu1% 500°C	7,7	92,3
Eu1% 700°C	50,9	49,1
Ce1% 500°C	8,8	91,2
Ce1% 700°C	96,5	3,5
Eu1% Ce1% 500°C	37,7	62,3
Eu1% Ce1% 700°C	69,0	31,0

### Conclusões

A dopagem das fibras de TiO<sub>2</sub> com terras raras faz com que a fase anatase seja mais estável, o que as torna ideal para a aplicação em fotocatalise.

### Agradecimentos

UnB, CNPq, Capes

(1) Szilágyi, I. M.; Fórizs, B.; Rosseler, O.; Szegedi, Á.; Németh, P.; Király, P.; Tárkányi, G.; Vajna, B.; Varga-Josepovits, K.; László, K.; Tóth, A. L.; Baranyai, P.; Leskelä, M. *J. Cat.* **2012**, *294*, 119.

(2) Prado, A. G.; Costa, L. L. *J. Hazard. Mater.* **2009**, *169*, 297.