Síntese e Caracterização de Nanopartículas de TiO₂ dopadas com Pd <u>Sandra A. M. e Silva*¹ (PQ)</u>, Adhimar F. Oliveira¹ (PQ), Rero M. Rubinger¹ (PQ) e Edson C. Bortoni¹ (PQ).

¹ Universidade Federal de Itajubá, Av. BPS 1303 – 37500-903 Itajubá – MG - Brasil samsil@unifei.edu.br

Palavras Chave: Micelas reversas, Nanopartículas, Óxido de Titânio, Gap de energia

Abstract

Titanium oxide nanoparticles doped with palladium – synthesis and characterization

The syntheses of TiO_2 and Pd/TiO_2 nanoparticles are prepared by hydrolysis of alkoxide precursors using reverse micelles method. The nanoparticles presented were formed in clusters of less than 100 nm particles, the lowering of energy gap for increasing Pd doping. Also ionic conductivity in saturated humidity is pronounced indicating its use for improved dye-sensitized solar cells.

Introdução

Nos últimos anos, uma série de propriedades ópticas e eletrônicas dos nanomateriais se mostraram fortemente dependentes do tamanho das partículas¹. Esse fato chamou a atenção para a preparação de nanopartículas de semicondutores, sendo o TiO₂, um material promissor como semicondutor por possuir alta estabilidade fotoquímica, ser transparente à luz visível, possuir uma banda proibida de energia (gap de energia) de 3,2 eV e baixo custo¹⁻³.

Neste trabalho nanopartículas de TiO₂ e TiO₂ dopadas com Pd foram preparadas pelo método de micelas reversas utilizando tetrabutóxido de Titânio e acetilacetonato de Paládio como precursores metálicos.^{1,2}. A caracterização morfológica foi realizada por microscopia eletrônica de varredura (MEV) e raios X. A determinação do gap de energia foi feita através de medidas de transmitância do sol entre 200 e 900 nm. Medidas elétricas foram realizadas por espectroscopia de impedância em duas condições atmosféricas: seca e húmida.

Resultados e Discussão

A Figura 1 mostra a relação entre $(\alpha hv)^{1/2}$ e a energia do fóton (hv).



Figura 1. Gráfico de Tauc para determinação do gap óptico de energia.

A extrapolação de $(\alpha hv)^{1/2}$ a zero na região linear das curvas fornece o valor do gap óptico de energia⁴. A adição de Pd ao TiO₂ resultou em um gap óptico de energia menor que 3,2 eV. Isto é devido a dopagem com paládio que introduz aceitadores de carga próximos a banda proibida do TiO₂^{3,4}.

Após calcinação a análise de Raios X identificou a fase anatase em todas as amostras. A formação de nanopartículas dispersas de TiO₂ da ordem de 100 nm é obtida sem a necessidade de calcinação, conforme mostra a imagem da Figura 2.



Figura 2. Microscopia eletrônica de varredura (MEV) das nanopartículas de TiO₂ sintetizadas por micelas reversas.

Conclusões

A adição de Pd ao TiO_2 resultou em um gap óptico de energia menor que o TiO_2 puro. Houve formação de nanopartículas esféricas menores que 100 nm que apresentaram boa condutividade iônica. A fase cristalina anatase foi predominante nas amostras de TiO_2 puras e dopadas com Pd.

Agradecimentos

A Capes, Fapemig e CNPq pelo suporte financeiro.

¹ Stathatos, E.; Lianos, P.; Del Monte, F.; Levy, D. e Tsiourvas, D. Langmuir **1997**, 13, 4295.

² Wu, Q.; Cheng, B. e Zhang, G. Rare Metals 2003, 2, 150.

³Sakthivel, S.; Shankar, M.; V.; Palanichamy, M.; Arabindoo, B.; Bahnemann, D.; W. e Murugesan, V. *Water Research* **2004**, 38, 3001.

⁴ Ebraheem, S. e El-Saied, A. *Materials Sciences and Applications* **2013**, 4, 324.