

Evolução das propriedades texturais, estruturais e morfológicas do TiO₂ com a temperatura

Elton M.P. Silvério.(IC), Viviane F. Soares (IC), Maria T.C. Sansiviero (PQ), Nelcy D.S. Mohallem (PQ)

Laboratório de Materiais Nanoestruturados, DQ/ICEx/UFMG, Belo Horizonte, MG
nelcy@ufmg.br

Palavras Chave: *óxido de titânio, nanopartículas, materiais porosos*

Introdução

O dióxido de titânio é um material semicondutor muito utilizado como pigmento, em filtros ópticos, microeletrônica, sensores químicos, camadas antireflexo, catálise e esterilização, entre outros. A grande faixa de aplicação é devido às suas propriedades como alto índice de refração, alta transmitância, estabilidade física e química, além de ser quimicamente inerte [1,2]. Existem vários polimorfos do TiO₂, sendo as mais importantes: anatásio, rutilo (tetragonais) e brookita (ortorrômbico). A fase anatásio é mais eficiente como fotocatalisador e a fase rutilo como sonocatalisador [3,4]. As características texturais deste material variam bastante com a fase obtida, já que o processo envolve calcinação a altas temperaturas. O estudo dessas propriedades é muito importante, pois a eficiência do material como catalisador depende em grande parte de suas características físicas. Logo, pretende-se estudar a variação das propriedades texturais do TiO₂ de acordo com a transição de fase, visando otimizar o método de síntese para obtenção de fases com elevada área superficial e alta porosidade [5,6].

Neste trabalho sintetizamos e caracterizamos textural e estruturalmente nanopartículas de TiO₂ obtidas a partir da precipitação e decomposição térmica controlada de um alcóxido metálico.

Resultados e Discussão

Nanopartículas de TiO₂ foram preparadas a partir da precipitação de isopropóxido de titânio (IV) 97%, (Ti[OCH(CH₃)₂]₄ (Aldrich), diluído em álcool isopropílico, pela adição de água destilada levemente básica (pH = 8). A proporção molar alcóxido:álcool:H₂O utilizada foi de 5:3:1. O precipitado branco obtido foi lavado com H₂O destilada e etanol absoluto (Merck), seco estufa e separado em alíquotas que foram calcinadas a diferentes temperaturas entre 300 e 1100°C.

As amostras foram caracterizadas por difração de raios X, espectroscopia Raman e na região do infravermelho, adsorção gasosa e microscopia eletrônica de varredura. Os resultados da difração de raios X e espectroscopia Raman mostraram que a transição da fase anatásio para rutilo ocorreu a partir 29ª Reunião Anual da Sociedade Brasileira de Química

de 700 °C. Os espectros de IV confirmaram os resultados de DRX e Raman. Nos espectros a 300 e 500°C, a fase anatásio do TiO₂ foi identificada como uma banda larga entre 800 e 450 cm⁻¹, característica de materiais nanométricos. As análises de adsorção gasosa resultaram em uma área superficial BET de 176 m²/g para o TiO₂ calcinado a 300°C, cuja fase é anatásio. Nesta temperatura o diâmetro médio de poro foi de 47 Å e o tamanho médio de partícula de 10 nm. Com o aumento de temperatura até 1100°C houve uma diminuição da área superficial específica para 5 m²/g, uma diminuição do tamanho médio de poros para 14 Å e um aumento do tamanho de partículas para 300 nm. Imagens obtidas por microscopia eletrônica de varredura (Fig. 1) mostram uma grande variação na morfologia das partículas devido à transformação polimórfica.

Figura 1: Micrografias das amostras tratadas a diferentes temperaturas

Conclusões

O método permitiu obter partículas nanométricas na fase anatásio pura com elevada área superficial quando comparada com o TiO₂ comercial P25 (45m²/g). A transição para a fase rutilo ocorreu a partir de tratamento térmico a 700°C, com evidente mudança na textura e morfologia.

Agradecimentos

CNPq, FAPEMIG.

¹ Zhang, J. et al *J. Non-Cryst Solids* **2002**,303, 134

² Svadlák, D. et al *Thermochimica Acta* **2004** , 137

³ Wang, J. et al *Ultrasonics Sonochemistry* **2005**, 12, 331

⁴ Bakardjieva, S. et al *Applied Catalysis B. E.***2005** ,58, 193

⁵ Pietron, J. J. e Rolison, D. R. *J. Non-Cryst. Solids* **2004**, 350, 107.

⁶ Ikata K. et al *J. Phys. Chem. B.* **2004**, 108, 20233.