

Preparação de Filmes com Xerogéis Fotocrômicos.

Flávio Luiz Silva de Carvalho (PG)^{1*}, Adriano Lopes de Souza (PG), Ubirajara Pereira Rodrigues Filho(PQ).

*E-mail Flavioluizsc@iqsc.usp.br

¹Av. Trabalhador São-carlense, 400, Cep 13566-590 – São Carlos, SP, Cx. Postal 780.

Palavras Chave: *Fotocromismo, xerogel, heteropolânions, ácido fosfotungstico, ormosil, tensoativo.*

Introdução

As propriedades fotocrômicas de filmes híbridos orgânico-inorgânicos do tipo ormosil com heteropoliânions do tipo Keggin são dependentes da presença de compostos orgânicos co-adjuvantes no processo, dentre eles as aminas são os mais utilizados. As aminas agem como contra-íons, pois formam sais de amônio ao serem protonadas pelos ácidos dos heteropoliânions, atuam como agente direcionador da estrutura dos filmes através da formação de pares iônicos e ligações de hidrogênio e exercem, segundo Yamase, um papel fundamental no processo fotoquímico responsável pelo fotocromismo. Desta forma, a obtenção de filmes com resposta fotocrômica mais rápida e intensa, traduzida pela variação de absorvância na região visível do espectro, esta relacionada com a escolha do melhor par polioxoânion-amina. Neste trabalho mostramos a preparação de alguns xerogéis a partir de diferentes formulações e sua caracterização estrutural e morfológica.

Resultados e Discussão

Os xerogéis foram preparados pela gelificação e posterior secagem de suspensões água:acetona e água:isopropanol. As suspensões foram preparadas pela adição de quantidades variáveis de água, solvente não-aquoso, ácido fosfotungstico (HPW), 3-aminopropiltrimetóxisilano (APTS), tetraetilortossilicato (TEOS) e tensoativo derivado aminado de polidimetilsiloxano (PDMS_a).

O espectro de absorção na região do infravermelho mostra as bandas características dos grupos siloxano, SiOSi, em 1095 cm⁻¹ caracterizando a formação de uma rede tridimensional do xerogel de sílica. A presença de bandas em 1995 e 1632 cm⁻¹ do grupo NH₃⁺ comprovam a protonação do APTS, pelo HPW. A presença do HPW é confirmada pelas bandas 995 cm⁻¹ e 808-885 cm⁻¹ de deformação axial dos grupos WO e W-O-W respectivamente em números de onda característicos do HPW. A adição de tensoativo leva ao aparecimento de bandas Si-CH₃ em 1267 cm⁻¹ confirmando a presença do PDMS_a no xerogel cuja formulação continha o tensoativo. A introdução de tensoativo leva a uma queda na intensidade dos picos do grupo NH₃⁺ e do HPW e

aum aumento na intensidade dos picos de deformação axial do grupo metila. Esta queda de intensidade é surpreendente, pois a quantidade de HPW adicionada nas duas formulações, com e sem tensoativo, é exatamente a mesma. Esta queda de intensidade relativa pode estar relacionada à maior força de oscilador dos modos vibracionais do PDMS em relação aos do HPW. Já o aumento de intensidade do modo vibracional envolvendo o grupo metila deve estar relacionado à presença massiva destes grupos na cadeia do PDMS.

As medidas de ângulo de contato estático com água mostraram um aumento no valor após a incorporação do PDMS_a mostrando que este migra para a superfície. O aquecimento leva a um posterior aumento nos valores de ângulo de contato, entretanto, a amostra com PDMS_a atinge seu valor máximo após aquecimento à 100°C enquanto a amostra sem este composto atinge um valor máximo de ângulo de contato somente após o aquecimento à 250°C. Isto indica que o PDMS_a encontrava-se distribuído não apenas na superfície e com o aquecimento ele difunde para a superfície.

As amostras sem PDMS_a apresentaram uma superfície mais rugosa enquanto as amostras com o tensoativo se apresentam mais lisas e com menor porosidade. Esta observação está de acordo com as medidas de ângulo de contato, pois se espera que o PDMS_a vá ocupar a superfície o que resultaria na queda de rugosidade da mesma.

Testes preliminares de fotocromismo por exposição à radiação solar e feixe de radiação UV mostram que os filmes possuem atividade fotocrômica apesar da presença do tensoativo e comprovando que nos dois casos temos a incorporação do agente fotocrômico, o HPW.

Conclusões

A introdução de tensoativos derivados de PDMS na formulação de xerogéis de sílica dopados com HPW leva a obtenção de filmes mais homogêneos e com atividade fotocrômica significativa, portanto, estes filmes são bons candidatos para a construção de dosímetros de radiação ultravioleta.

Agradecimentos

Sociedade Brasileira de Química (SBQ)

CNPq e CAPES