

TiO₂ Dopado com Zircônio: Efeito Sobre a Proporção de Anatase e a Área Superficial.

Leonardo Mazer Itô (PG), Flávio Maron Vichi (PQ)*

*fmvichi@iq.usp.br

Instituto de Química da Universidade de São Paulo.

Palavras Chave: titânia, dopagem com zircônio, anatase, área superficial, estrutura cristalina.

Introdução

O dióxido de titânio é um semicondutor de grande interesse tecnológico cuja aplicação passa por sensores, catalisadores e dispositivos de conversão de energia. Anatase e rutilo são as principais estruturas polimórficas do TiO₂. A primeira é a de maior atividade fotossensível enquanto que a segunda é a de maior estabilidade termodinâmica¹. Neste trabalho, sintetizou-se anatase dopada com diferentes quantidades de zircônio pelo método sol-gel. As amostras foram submetidas a tratamento térmico a diferentes temperaturas e analisadas por difratometria de raios-x e área superficial.

Resultados e Discussão

Verifica-se pelos difratogramas que a adição de zircônio retarda a transição de fase. A partir dos valores de intensidade dos picos principais da anatase (101) e do rutilo (110) é possível calcular a proporção de cada fase na mistura². A 700 °C, as amostras com zero e 1% de dopante são 100% rutilo enquanto que a amostra com 7% de dopante apresenta cerca de 70% de anatase. A Figura 1 mostra os difratogramas de diferentes teores de dopante nesta temperatura.

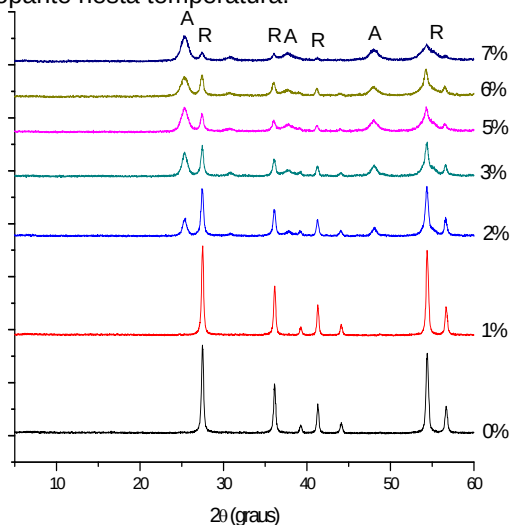


Figura 1. Difratogramas das amostras calcinadas a 700 °C.

Na análise de adsorção/dessorção com N₂ a 77 K pelo método BET, todas as amostras apresentaram isotermas do tipo IV, isto é, perfil mesoporoso. A Figura 2 apresenta os valores de área superficial nos diferentes teores de dopante bem como sua variação conforme a temperatura de calcinação. Verifica-se que as amostras dopadas apresentam um ligeiro aumento no valor de área superficial quando comparadas com a amostra que não recebeu adição de zircônio, e que este aumento é mais pronunciado nas amostras calcinadas acima de 300 °C. O maior valor é de 354 m² g⁻¹ da amostra contendo 3% de zircônio calcinada a temperatura de 100 °C.

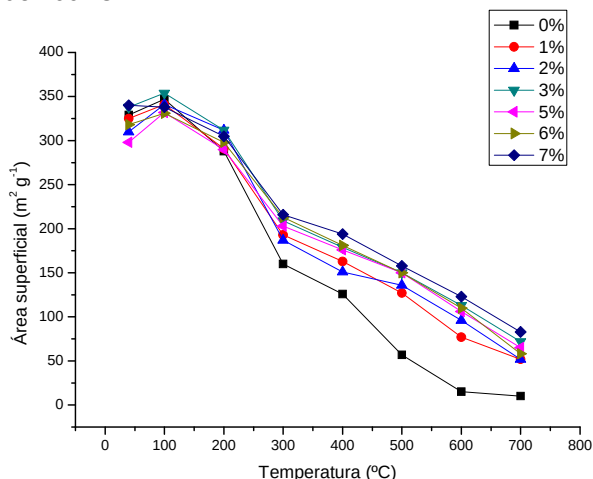


Figura 2. Variação da área superficial em função da temperatura e do teor de dopante.

Conclusões

A adição de zircônio no TiO₂ resulta em materiais com maior proporção da fase fotossensível anatase. Além disso, verifica-se aumento de área superficial.

Agradecimentos

CNPq, FINEP.

¹ Kitiyanan, A., Sakulkhaemaruethai, S., Suzuki, Y. e Yoshikawa, S. *Composites Science and Technology*. **2006**, 66, 1259.

² Spurr, R. A. e Myers, H. *Analytical Chemistry*. **1957**, 29, 760.