

Estudo da relação entre a atividade catalítica de um fotocatalisador nanoestruturado com o valor de sua energia de *band gap*.

Ana Paola B. Nunes (PG)^{1*}, William L. da Silva (PG)², Mônica Bagnara (PG)², Natasha V. Sievers (IC)², Elina B. Caramão (PQ)^{1,3}, Marla A. Lansarin (PQ)², Celso C. Moro (PQ)^{2,3} paolabn@terra.com.br

1- PGCIMAT-UFRGS. 2- Dep. Eng. Química - Escola de Engenharia, UFRGS. 3- Instituto de Química, UFRGS. Cx. Postal 15003 - CEP 91501-970 – Porto Alegre, RS. 2 - .

Palavras Chave: óxido de titânio, nanotubos de titânio, fotocatalise.

Introdução

Nanotubos de TiO₂ têm sido amplamente empregados em fotocatalise, pois a área superficial destes materiais e a razão superfície/volume aumentam drasticamente com o decréscimo de tamanho do material. A alta área superficial trouxe, pelo pequeno tamanho de partícula, benefícios a muitos dispositivos feitos de TiO₂, utilizados também para destruição de vários poluentes inclusive corantes empregados na indústria. Em sistemas aquosos, as vacâncias fotogeradas pela ativação do fotocatalisador, por uma fonte de radiação, podem ser capazes de promover a completa mineralização de contaminantes orgânicos. Para que isto ocorra é necessário que o elétron passe da banda de valência para a banda de condução, transpondo o valor do seu "band gap", gerando então o par elétron/lacuna responsável pelas reações de oxidação mediadas pelo radical hidroxila.

Nesse trabalho se relata a aplicação dos nanotubos de TiO₂ ativados com radiação UV na degradação de um corante, neste caso a rodamina B para avaliação da atividade fotocatalítica dos nanotubos relacionando-a com a energia de band gap dos mesmos.

Resultados e Discussão

Os fotocatalisadores de TiO₂ foram sintetizados pelo método hidrotérmico, descrito na literatura, a partir de uma solução aquosa de NaOH (Vetec) 10 mol/L e de TiO₂ P25 (Degussa) como material precursor. A mistura foi colocada em autoclaves e depois em mufla a 140 °C por 48 horas. Depois de retiradas da mufla, as amostras foram filtradas e lavadas de diferentes formas. Foram utilizadas água deionizada e solução aquosa de HCl (Merck) 0,1 mol/L até o pH atingir os valores desejados. Os materiais obtidos após serem secados em estufa foram calcinados a 350 °C e a 500 °C por 1 hora.

Os testes fotocatalíticos para degradação da rodamina B foram realizados em um reator batelada encamisado de 50 mL, irradiado com uma lâmpada de luz negra Sylvania de 25 W. A radiação da lâmpada foi ajustada em 4,9 mW cm⁻², medida

34^ª Reunião Anual da Sociedade Brasileira de Química

no início de cada ensaio através de um radiômetro (Cole-Parmer Instrument). Empregou-se em todos os experimentos uma solução de rodamina B de 40 ppm, mantiveram-se o pH natural da solução sem correção e a temperatura da reação (30 °C). Em todos os ensaios utilizou-se 0,55 g/L de catalisador. Amostras foram coletadas por uma seringa nos tempos: 0, 5, 15, 30 e 60 min. A concentração de rodamina B residual foi determinada espectrofotometricamente.

A determinação da energia de band gap dos materiais foi realizada em um espectrofotômetro UV-visível (Cary 100 Varian) com um acessório para medida de refletância difusa, obtendo-se assim um gráfico de absorbância versus comprimento de onda. Foram analisados os materiais sem calcinar e após serem calcinados a 350 °C e 500 °C.

Tabela 1. Valores de "band gap" e de velocidade de reação para os materiais obtidos.

Amostra	Eg (eV)	Constante de Velocidade de reação (min ⁻¹)
NT4	3,41	k = 0,0084
NT8	3,61	Não ocorreu
NT4 350	3,30	k = 0,0077
NT4 500	3,23	k = 0,0085
NT8 350	3,45	Não ocorreu
NT8 500	3,42	k = 0,0007
P25	3,26	k = 0,0088

Conclusões

Na avaliação de sua atividade fotocatalítica o fotocatalisador com pH 4 e calcinado a 500 °C obteve os melhores resultados para a degradação do corante utilizado devido a sua maior cristalinidade (maior concentração de anatase) e o menor valor de band gap. Observa-se que o aumento do pH da lavagem do material facilita a conversão dos titanatos em anatase aumentando o valor de Eg e quanto maior a temperatura de calcinação menor é esse valor.

Agradecimentos

PROPESQ-UFRGS/CNPq