

Transição de Fase anatase-rutilo em Filmes de TiO₂ Induzida por Laser

Manuel F.G. Huila (PG)*, Andre L.A. Parussulo (PG), Koiti Araki (PQ) e Henrique E. Toma (PQ).

*e-mail: manfergo@iq.usp.br

Departamento de Química Fundamental, Instituto de Química-USP, CEP 05599-970, São Paulo-SP, Brasil.

Palavras Chave: *Transição de fase, Dióxido de Titânio, Microscopia Raman Confocal.*

Introdução

Anatase e rutilo são os polimorfos do Dióxido de Titânio mais amplamente utilizados em aplicações científicas e tecnológicas. A forma na qual estão misturadas as fases pode constituir materiais com propriedades diferentes e específicas. O controle sobre a disposição das fases dentro do material torna o estudo dos processos de transição de fase estratégicos para o planejamento de novos materiais.

Neste trabalho nós propomos uma metodologia nova para transformação micrométrica da fase anatase para fase rutilo utilizando laser.

Resultados e Discussão

A solução coloidal foi preparada pela mistura de 6 g de TiO₂ P25 da Degussa (partículas de dimensão próxima a 30 nm que contém 70% anatase e 30% rutilo) com 2 mL de água deionizada e 0,2 mL de acetilacetona, em um almofariz com um pistilo por 40 min. Finalmente uma solução formada por 0,1 mL de Triton-X 100 e 8 mL de água foram adicionados à mistura, resultando na solução coloidal.

O método empregado para o espalhamento da solução coloidal de TiO₂ sobre vidro foi o de bastão de vidro. Os filmes foram secos em temperatura ambiente e sinterizados a 450 °C por 30 min^[1].

A superfície dos filmes mesoporosos foi modificada por moléculas que se ancoram quimicamente através de grupos carboxilatos. As moléculas utilizadas são complexos de metais de transição que possuem absorção de luz na região de emissão do laser^[2].

No presente trabalho foi observado que a irradiação destes sistemas usando uma fonte laser de Nd:YAG (532 nm/ 1046 nm) altamente focalizada (obtiva 100X com N.A.=0.8) e com altas potências é capaz de induzir a transição de fase de anatase para rutilo.

Usando potências de irradiação inferiores à 24 mW/cm² só foi observado o fotobranqueamento do corante [Ru(Hdcbipy)₂(HBTz)₂], onde dcbipy é a 4,4' dicarboxybipiridina e Btz é o benzotriazol. A transição de fase anatase-rutilo aconteceu para potências acima de 26 mW/cm² acompanhada pela formação de buracos no filme como mostrado na Figura 1A. A concentração do corante ligado na

superfície do TiO₂ também influencia à potencia mínima para a transição de fase.

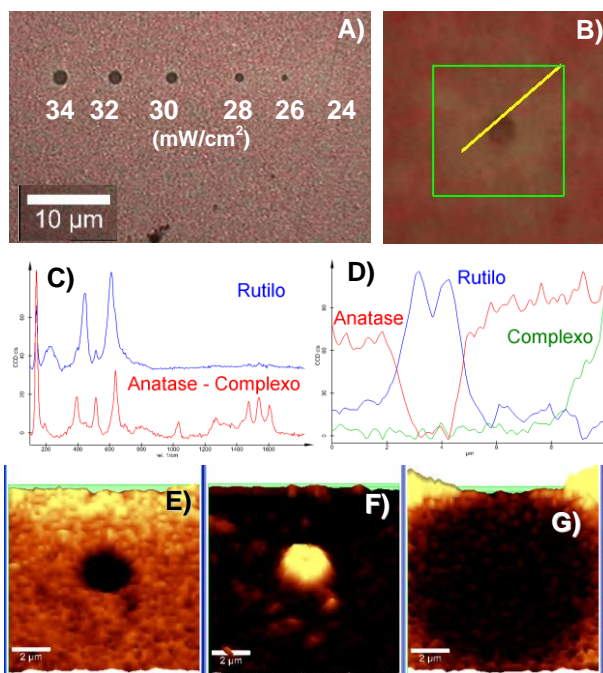


Figura 1. (A e B) Micrografias ópticas (C) espectros Raman no centro e no canto do filme (D) gráfico de intensidades Raman dos picos de rutilo e da anatase 441 e 511 cm⁻¹ da secção transversal mostrada em B) e (E, F e G) imagens Raman da anatase, rutilo e complexo respectivamente.

Conclusões

O complexo de rutênio ancorado na superfície de filmes de TiO₂ (P25-Degusa) induz a transição de fase de anatase para rutilo quando irradiado com pulsos luz laser de 532 nm. Existe uma potencia mínima a partir da qual o calor gerado localmente é suficiente para a transição de fase.

Agradecimentos

Agradecemos a CNPq, FAPESP e PETROBRAS.

¹ André L.A. Parussulo, Juliano A. Bonacin, Sergio H. Toma, Koiti Araki,* and Henrique E. Toma. *Langmuir* **2009**, 25(19), 11269-11271.

² Sergio H. Toma, Juliano A. Bonacin, Koiti Araki and Henrique E. Toma. *Surface Science* **2006** 600 (19) 4591-4597.