

A Influência estrutural do ZnO em óxidos SiO₂/TiO₂ nanoestruturados.

Alisson G. Paulino(IC)¹, Nayara M. Oliveira (IC)¹, Vitor H. Paschoal (IC)¹, Mariana G. Segatelli (PQ)², Reni V.S. Alfaya (PQ)¹, Antonio A. S. Alfaya (PQ)^{1*}. E-mail alfaya@uel.br

¹Departamento de Química, Universidade Estadual de Londrina-UEL, 86051-990, Londrina, PR, Brasil

²Universidade Tecnológica Federal do Paraná-UTFPR, Campus Londrina, 86036-370, PR, Brasil.

Palavras Chave: Sol-gel, nanocristais, banda de gap.

Introdução

Um material nanoestruturado tende a ter propriedades eletrônicas e ópticas diferentes de seu equivalente em fase contínua, resultando em propriedades macroscópicas de grande interesse tecnológico. Aliado ao processo de sol-gel a inclusão de determinados elementos para a produção de novos materiais nanoestruturados pode conferir à estes propriedades significativas e interessantes para a indústria. Neste trabalho, descreve-se a síntese e a caracterização por FTIR, MEV, EDS, difração de raios-X, reflectância difusa, área superficial e volume médio de poros e análises de Ti e Zn nos materiais nanoestruturados.

Resultados e Discussão

A síntese dos compostos foi feita utilizando-se uma rota de sol-gel¹ para as matrizes de SiO₂/TiO₂ nas proporções de Si:Ti iguais a 80:20 (ST20), 70:30 (ST30) e 55:45 (ST45). Os sistemas com ZnO foi preparado por rota similar com as proporções de Si:Ti:Zn de 70:20:10 (STZ20), 55:30:15 (STZ30) e 33:45:22 (STZ 45). As imagens de MEV e EDS verifica-se que os sistemas apresentam-se altamente dispersos sem a evidência da presença de aglomerados. A análise do volume médio dos poros e da área superficial forneceu os seguintes resultados: ST20 (0,63 mL g⁻¹ e 765 m² g⁻¹), ST30 (0,57 mL g⁻¹ e 637 m² g⁻¹), ST45 (0,52 mL g⁻¹ e 595 m² g⁻¹), STZ20 (0,61 mL g⁻¹ e 721 m² g⁻¹), STZ30 (0,55 mL g⁻¹ e 605 m² g⁻¹) e STZ45 (0,50 mL g⁻¹ e 567 m² g⁻¹). O FTIR dos materiais mostram bandas em 1080, 950 e 870 cm⁻¹ que podem ser atribuídas as ligações dos grupos Si-O-Si, Si-O-Ti e Si-O-Zn, respectivamente. As análises gravimétricas confirmaram as proporções dos elementos formadores dos materiais de cada tipo (dentro do erro experimental). A difração de raios-X não apresenta picos de difração para os diversos materiais, apenas mostra claramente o halo amorfo da sílica na região de 2θ em torno de 25°. A análise de DRX das amostras tratadas termicamente a 800 °C mostram o aparecimento das fases cristalinas da anatase (TiO₂) (101) e (200) para o ST e das fases cristalinas da wurtzita hexagonal pelos planos principais (100), (102), (200) e (202) além dos

planos da anatase nos materiais STZ. Pela equação de Scherer é possível determinar o tamanho médio dos cristallitos formados como sendo de 19,8 a 24,2 nm para a anatase nos materiais ST e de 22 a 40 nm para a wurtzita e de 22 a 27.2 nm para a anatase nos materiais STZ. Pelo ensaio de reflectância difusa na região do uv/vis, após excitação da amostra com radiação ultravioleta, aplica-se o modelo de fluxo de Kubelka-Munk (modelo de dois fluxos) e obtém-se um espectro de absorção da amostra. Para a determinação da EGAP aplicou-se o modelo gráfico de Tauc (ao espectro de absorção obtido anteriormente das amostras) e o modelo de confinamento da massa efetiva aos dados obtidos, conforme procedimento descrito na literatura². Por este método foi possível determinar o tamanho médio do nanocristalito pela EGAP calculada para cada material. Os valores obtidos estão na Tabela 1.

Tabela 1. Tamanho dos nanocristalitos e da energia de gap.

Amostras	Nanocristalito (nm)	Energia de gap (eV)
ST20	2,8	3,7
ST30	2,2	4,0
ST45	1,9	4,3
STZ20	2,6	4,1
STZ30	2,0	4,3
STZ45	1,7	5,5

Conclusões

Concluímos que o processo de sol-gel pode produzir materiais nanoestruturados com simplicidade. O aumento do teor de Ti nas matrizes de sílica e o aumento do teor de Zn nos materiais SiO₂/TiO₂ promove a diminuição do tamanho do nanocristalito, a diminuição da área superficial e também do volume médio dos poros, como também um ligeiro aumento na energia de gap do sistema.

Agradecimentos

Ao CNPq, a Fundação Araucária, a UNICAMP e a UEL (LABDRX, LFNA, GOO).

¹ ALFAYA, Antonio A.S., GUSHIKEM, Yoshitaka. *Chem. Mater.* **1998**, 10, 900.

² STRAUSS, MATHIAS et al, *Mat. Chem. Phys.*, **2011**, 126, 188.