



Categoria: **Trabalho completo**

## Síntese e caracterização de $\text{TiO}_2$ com estrutura *core-shell* do tipo rutilo@anatase empregando o método de co-precipitação

Caroline Santana dos Santos<sup>1</sup> (PG)\*, Beatriz Caetano Benuto<sup>1</sup> (PG), Rafael Junqueira Leal<sup>1</sup> (IC), Raul Zanchet<sup>1</sup> (IC), Marcelo Zampieri<sup>1</sup> (PQ), Yuri Vinicius B. Santana<sup>2</sup> (PQ), Roberto de Matos<sup>1</sup> (PQ).  
\*carolinessantos94@gmail.com

<sup>1</sup> Departamento de Química, Universidade Estadual de Londrina, PR - Brasil

<sup>2</sup> Departamento de Ciências da Natureza, Universidade Federal Tecnológica do Paraná, PR – Brasil.

Palavras Chave: Fotocatálise, Semicondutores, Degradação de Poluentes, Fases Cristalinas.

### Introdução

Entre os semicondutores aplicados à fotocatalises o  $\text{TiO}_2$  se destaca devido a sua estabilidade química, não-toxicidade e fotoatividade, contudo uma limitação é seu *gap* de energia, que varia de 3,0 a 3,2 eV, sendo fotoativado por luz ultravioleta. O  $\text{TiO}_2$  possui três fases cristalinas: anatase, rutilo e brookita, cada uma apresentando determinado comportamento fotocatalítico. Estudos apontam que a mistura de fases cristalinas pode melhorar o desempenho fotocatalítico deste óxido.<sup>(1)</sup> Assim, o objetivo do trabalho foi sintetizar de  $\text{TiO}_2$  com estrutura *core-shell*, sendo *core* a fase rutilo e *shell* a fase anatase, empregando uma metodologia relativamente simples, buscando melhorar a eficiência quântica deste material. A atividade fotocatalítica foi avaliada frente à descoloração do corante azul de metileno (AM) sob luz UVC.

### Resultados e discussão

Para a síntese foram utilizados  $\text{TiO}_2$  rutilo comercial e isopropóxido de titânio (IV). Foi empregado o método de co-precipitação para obtenção do material *core-shell* (TCS4). Para isso, isopropóxido de titânio (IV) foi dissolvido em etanol. Essa solução foi adicionada de maneira fracionada à  $\text{TiO}_2$  rutilo comercial. Após evaporação total do solvente, a amostra resultante foi calcinada em 250 °C durante 20 min e a 500 °C durante 30 min. O procedimento descrito foi realizado três vezes. Para comparação, rutilo comercial (TCS1) e isopropóxido (TCS2) foram submetidos separadamente sob as mesmas condições de síntese e, com os produtos obtidos, uma mistura física com a mesma proporção molar também foi feita entre eles (TCS3). Análises de DRX por refinamento Rietveld indicaram que as amostras são compostas pelas fases anatase e rutilo em proporções em massa diferentes, sendo que a amostra *core-shell* contém 71% de anatase e 29% de rutilo. A presença dessas fases nas amostras também foi confirmada por medidas de Raman. Imagens obtidas por MET e HRTEM foram

realizadas na amostra TCS4. Na Fig. 1 é observado a formação de uma partícula com formato esférico que está recoberta uniformemente por uma camada nanométrica com espessura de aproximadamente 15 nm (*shell*), nesta região foi identificado um espaçamento interplanar de 3.57 Å que corresponde ao plano cristalográfico (101) da fase anatase.

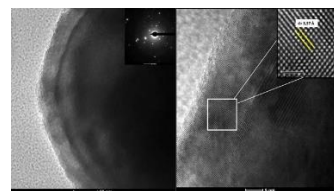


Fig. 1 Imagens (a) MET e (b) HRTEM da amostra *core-shell* rutilo@anatase (TCS4).

De acordo com os resultados da atividade fotocatalítica, a amostra TCS4 apresentou 51% de descoloração da solução de corante após 60 min de irradiação, valor maior quando comparado às degradações para as demais amostras: TCS1 (26%), TCS2 (35%) e TCS3 (28%). A maior atividade fotocatalítica foi atribuída ao efeito sinérgico das fases rutilo (*core*) e anatase (*shell*), proporcionando uma menor taxa de recombinação do par elétron-buraco.

### Conclusões

A rota de síntese por co-precipitação se mostrou eficiente para a obtenção de material cristalino com estrutura *core-shell*, formada por rutilo@anatase, que apresentou maior eficiência quântica na degradação do corante AM quando comparado aos materiais provenientes dos precursores puros ou na mistura física dessas devido ao efeito sinérgico entre as fases.

### Agradecimentos

A Capes pelo apoio financeiro e aos laboratórios LADEMA, GMPC, LARX, LMEM e ESPEC da UEL.

### Referências e notas

(1) Liu, Y. et al. *J. Electroanal. Chem.* 2017, **804**, 87.