

**Categoria: Trabalho completo**

## Síntese e caracterização de TiO<sub>2</sub> 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: Fotocatalise, Semicondutores, Degradação de Poluentes, Fases Cristalinas.

### Introdução

Entre os semicondutores aplicados à fotocatálise o TiO<sub>2</sub> 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 TiO<sub>2</sub> possui três fases cristalinas: anatase, rutilo e brookita, cada uma apresentando determinado comportamento photocatalítico. Estudos apontam que a mistura de fases cristalinas pode melhorar o desempenho photocatalítico deste óxido.<sup>(1)</sup> Assim, o objetivo do trabalho foi sintetizar de TiO<sub>2</sub> 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 photocatalítica foi avaliada frente à descoloração do corante azul de metileno (AM) sob luz UVC.

### Resultados e discussão

Para a síntese foram utilizados TiO<sub>2</sub> 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 TiO<sub>2</sub> 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.

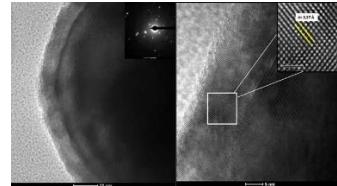


Fig. 1 Imagens (a) MET e (b) HRTEM da amostra core-shell rutilo@anatase (TCS\_4).

De acordo com os resultados da atividade photocatalítica, 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 photocatalítica 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.