



## INVESTIGAÇÃO DA CRISTALINIDADE E EQUILÍBRIO DE FASES NO SEMICONDUTOR DE DIÓXIDO DE TITÂNIO

**Instituição:** Universidade Estadual de Mato Grosso do Sul (UEMS)

**Área temática:** Ciências Exatas e da Terra

**GARCIA**, Ana Karoline da Silva<sup>1</sup> ([anakarolinepatussi@gmail.com](mailto:anakarolinepatussi@gmail.com)); **PATUSSI**, Fernando Henrique Galiza<sup>1</sup> ([fernando-patussi@hotmail.com](mailto:fernando-patussi@hotmail.com)); **CAVALHEIRO**, Alberto Adriano<sup>2</sup> ([albecava@uems.br](mailto:albecava@uems.br)).

<sup>1</sup> Discente do Programa de Pós-Graduação em Recursos Naturais da UEMS - Dourados-MS;

<sup>2</sup> Docente do curso de Licenciatura em Química da UEMS - Naviraí-MS.

**RESUMO:** O dióxido de titânio é um dos fotocatalisadores mais investigados por sua enorme versatilidade de aplicações, já que possui estabilidade química em um amplo intervalo de pH para aplicação em meio aquoso. No entanto, a fase cristalina predominante no material influencia suas propriedades e consequentemente, seu desempenho fotocatalítico. Para obter materiais fotocatalisadores de alto desempenho é necessário que haja predominância de uma fase cristalina do sistema tetragonal com grupo espacial I41AmdZ, denominada de fase Anatase. A cristalização desta fase é hidrodirecionada, ou seja, sua formação só é possível em presença de água e também com elevada atividade protônica (baixo pH). Apesar de mecanismos complexos de formação, é a multiplicidade 4 da cela unitária desta fase tetragonal que a torna altamente ativa fotocataliticamente, principalmente quando comparada à outra fase tetragonal que ocorre para este material, só que com grupo espacial P42/mnm, denominada Rutilo. Quando a fase Anatase sofre ordenamento estrutural devido a tratamento térmico de cristalização, a multiplicidade se reduz para 2, convertendo-se, portanto, em fase rutilo. E este é um dos principais desafios este material, ou seja, promover ordenamento estrutural para eliminação de defeitos originados do processo de síntese, sem a ocorrência da transição de fase para rutilo. O objetivo deste trabalho é buscar utilizar um estabilizador de fase anatase altamente refratário visando inibir a transição para a fase rutilo durante o processo de ordenamento estrutural por eliminação de defeitos por tratamento térmico. Deste modo, fazendo uso do processo Sol-Gel, o sistema composicional foi ajustado para que o dióxido de titânio contivesse quantidades equimolares de silício e zircônio, que tendem a formar a fase de silicato de zircônio com estrutura tetragonal I41AmdZ caso seja segregada. Assim, os núcleos de silicato de zircônio tendem a impedir a perda de multiplicidade da fase anatase TiO<sub>2</sub> e manter uma solução sólida no sistema modificado ZST. Nesta fase do projeto, foi possível demonstrar que o sistema Sol-Gel é estável com a inserção de silício e zircônio e que a progressão composicional observada por Análise Térmica é similar a do sistema não modificado.

**PALAVRAS-CHAVE:** Dióxido de titânio; transição de fases; Sol-Gel.

**AGRADECIMENTOS:** Ao Programa PIC-UEMS, através do edital UEMS/CNPq 2021-2022 PROPPI/UEMS, pela bolsa concedida.