

# INVESTIGAÇÃO ESTRUTURAL DA FASE ANATASE $\text{TiO}_2$ MODIFICADA COM SILICATO DE ZIRCÔNIO

Silvanice A Lopes dos Santos<sup>1</sup>; Jusinei M. Estropa<sup>1</sup>; Alberto Adriano Cavalheiro<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Estudante do Curso de Licenciatura em Química da UEMS; Unidade Universitária de Naviraí; E-mail: [silvanicequimica19@hotmail.com](mailto:silvanicequimica19@hotmail.com).

<sup>1</sup>Estudante do Curso de Licenciatura em Química da UEMS; Unidade Universitária de Naviraí; E-mail: [jusineistropa@hotmail.com](mailto:jusineistropa@hotmail.com)

<sup>2</sup>Professor do curso de Licenciatura em Química da UEMS; Unidade universitária de Naviraí; E-mail: [albecava@gmail.com](mailto:albecava@gmail.com).

**Palavras chaves:** Dióxido de Titânio; Estrutura Cristalina; Sol-Gel, Fotocatálise.

## RESUMO

A água contaminada por microorganismos, agrotóxicos e micropoluentes está no foco de tratamento por fotocatalise, que depende do material utilizado como catalisador, normalmente dióxido de titânio ( $\text{TiO}_2$ ). Este semiconductor apresenta todas as características físicas e químicas desejadas para atuar como fotocatalisador, mas ainda existem aspectos estruturais e morfológicos a serem otimizados. A propósito de aumentar a separação elétron-buraco e aumentar a eficiência fotônica, muitos estudos são conduzidos no sentido da inserção de modificadores de band gap e eliminação de defeitos, aumentando a eficácia na degradação de poluentes. A inserção de silicato de zircônio tem o potencial de estabilização estrutural e morfológica, pois é isoestrutural da fase anatase  $\text{TiO}_2$  e pode conferir estabilidade de fase até temperaturas mais altas e atuar na supressão de defeitos. Além disso, exibe maior dureza e resistência e, se inserido na matriz anatase  $\text{TiO}_2$  pode aumentar a aplicabilidade e durabilidade, tanto como biocida, se modificado com prata, como para aplicações em fotocatalise. Através da investigação estrutural e a comparação entre a matriz e a fase secundária do modificador, foi possível verificar que a detecção de fases secundárias por DRX, como a zircon não fotoativa do silicato de zircônio é fácil, pois não há semelhança no padrão de difração entre as duas fases. Os modificadores devem ocupar o sitio A da estrutura  $\text{AX}_2$  da fase anatase  $\text{TiO}_2$  somente em baixas concentrações, pois se espera uma reduzida tolerância na distorção de rede oriunda das diferenças de tamanhos entre o titânio e os modificadores.

**Palavras chaves:** Dióxido de Titânio; Estrutura Cristalina; Sol-Gel, Fotocatálise.