



Investigação experimental – teórica sobre o sistema $\text{Sn}_{1-x}\text{Ti}_x\text{O}_2$ ($x = 0; 0,25; 0,50; 0,75; 1$)

S. R. de Lazaro¹(PQ)*, Danielle Berger¹(PG), Sergio M. Tebcherani¹(PQ), Cauê R. De Oliveira²(PQ), Tânia R. Giraldi²(PQ), Raul Fregonesi²(IC), Thiago Sequinel¹(PG), Sergio da S. Cava¹(PQ), Luiz A. M. Cury¹(IC), Elson Longo³(PQ)

1) Universidade Estadual de Ponta Grossa, UEPG, Campus Uvaranas, Av. Gen. Carlos Cavalcanti, 4748, CEP:84030-800, Ponta Grossa, PR, Brasil

2) Embrapa Instrumentação Agropecuária, São Carlos, SP, Brasil

3) Instituto de Química, UNESP, Araraquara, SP, Brasil

*e-mail: srlazaro@uepg.br

Palavras Chave: catálise, sensores, rutilo, STO, degradação.

Introdução

Materiais desenvolvidos com misturas de óxidos TiO_2 e SnO_2 ($\text{Sn}_{1-x}\text{Ti}_x\text{O}_2$) possuem grande interesse para aplicações tecnológicas em processos fotocatalíticos, mecanismos e cinética de oxi-redução, atividade electrocatalítica, sensores à gás e varistores^{1,2}. A estrutura é análoga entre ambos com similaridades na estrutura eletrônica. Entre os métodos químicos temos o processo sol-gel, hidrotermal, precipitação e precursor polimérico (método Pechini). Neste trabalho propõe-se uma mistura de citrato de estanho (solução) com dióxido de titânio (sólido), onde serão investigados os efeitos de catálise sobre a degradação da Rodamina.

Método Experimental: Obteve-se as amostras de SnO_2 e TiO_2 fixando-se a quantidade de TiO_2 (s) em 3,0 g e misturando-se quantidade de citrato de estanho (gravimetria de 10,4333g SnO_2 / 100g de solução) nas proporções de 1:0; 0,75:0,25; 0,50:0,50; 0,25:0,75; 0:1 em mol, respectivamente. Calcinou-se as amostras entre temperaturas de 800 °C - 1200 °C por 2h.

Método Computacional: otimizaram-se os parâmetros de rede e coordenadas internas para os sistemas $\text{Sn}_{1-x}\text{Ti}_x\text{O}_2$ ($x = 0; 0,25; 0,50; 0,75$ and 1) utilizando o programa CRYSTAL06, metodologia da Teoria do Funcional de Densidade (DFT) com funcional híbrido - B3LYP. Utilizou-se conjunto de base [DB]-21G* para o Sn, 86-411(d31)G para o Ti e 6-31G** para o O.

Resultados e Discussão

A Figura 1 mostra os resultados de degradação da Rodamina em relação a amostra $\text{Sn}_{1-x}\text{Ti}_x\text{O}_2$ $x=0,75$, na faixa de temperaturas entre 500°C a 1200°C. Observa-se que a catálise da Rodamina possui um comportamento semelhante para amostras com aumento da quantidade de Sn. As amostras mais eficientes para esse resultado são SnO_2 e $\text{Sn}_{0,75}\text{Ti}_{0,25}\text{O}_2$ a 1200°C.

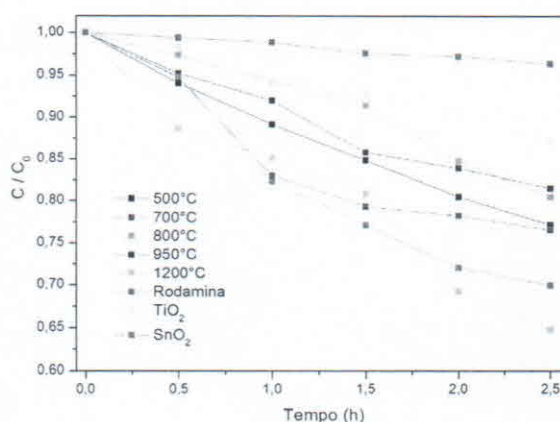


Figura 1. Resultados da degradação de Rodamina em relação a proporção $\text{Sn}_{0,75}\text{Ti}_{0,25}\text{O}_2$ para várias temperaturas de calcinação.

O comportamento do aumento da eficiência da degradação da Rodamina (Fig. 1) pode ser explicado pela formação de nanoilhas de SnO_2 que são morfologias responsáveis pelo aumento do potencial catalítico do sistema SnO_2 - TiO_2 em relação ao sistema TiO_2 . A catálise dessas amostras aumenta com o aumento da quantidade de estanho em conjunto com as temperaturas elevadas de síntese.

Conclusões

A relação entre a quantidade de SnO_2 - TiO_2 e temperatura de síntese influenciam a degradação da Rodamina. A presença de SnO_2 em conjunto com TiO_2 aumenta a capacidade catalítica em relação ao material TiO_2 .

Agradecimentos

Os autores agradecem ao apoio financeiro das instituições Cnpq e FINEP.

¹ Lin, J.; Yu, J.C.; Lo, D.; et al. *Journal of Catalysis*. 1999, 183, 368.

² Maeda, M.; Hirota, K. *Applied Catalysis A-General*. 2006, 302, 305.