

Avaliação da atividade fotocatalítica de nanopartículas de TiO₂ dopados com nitrogênio

Margaret Dawson¹; Gabriela Byzinski Soares²; Caue Ribeiro³

¹ Aluna de mestrado em Engenharia de Materiais, Universidade Federal de São Carlos, São Carlos, SP, missmargaretdawson@gmail.com.

² Aluna de Pós-doutorado em Química, Universidade Federal de São Carlos, SP.

³ Pesquisador, Embrapa Instrumentação, São Carlos, SP.

As propriedades intrínsecas de TiO₂ como a estabilidade química, não toxicidade e baixo custo contribuem para a utilização do semicondutor na degradação fotocatalítica de substâncias orgânicas. Porém, o *bandgap* característico de 3,2 eV cria uma limitação para o uso eficiente do catalisador no espectro solar. Assim, os catalisadores de TiO₂ dopados com nitrogênio representam uma área de grande interesse no desenvolvimento de catalisadores ativos na faixa de luz visível. Um aspecto importante é o processo de dopagem de TiO₂ pois determina o estado de nitrogênio (intersticial ou substitucional) e a quantidade de nitrogênio, que diretamente afetam a atividade fotocatalítica. Assim, várias condições de pré-calcinação em ar foram estabelecidas antes da calcinação em atmosfera de nitrogênio, para avaliar como a calcinação afeta o estado de nitrogênio e a atividade fotocatalítica. Neste trabalho, são apresentadas as atividades fotocatalíticas de nanopartículas preparadas através de um método de sol-gel modificado, o método de precursores poliméricos, porém com um enfoque na etapa de calcinação antes da dopagem com nitrogênio. As condições de pré-calcinação são: 400 °C por 2h (AMS 1), 380 °C por 6h (AMS 2), 350 °C por 12h (AMS 3), 350 °C por 6h (AMS 4), e as nanopartículas dopadas foram caracterizadas por difração de raios-X, área superficial (BET), refletância difusa, espectroscopia de Raman e espectroscopia de fótons elétrons excitados por raios-X (XPS). As nanopartículas são todas de fase anatase, efetivamente dopadas com nitrogênio e apresentam diminuição de *bandgap*. Experimentos fotocatalíticos utilizando as nanopartículas (N:TiO₂) foram realizados com soluções de atrazina e rodamina-B, separadamente, com irradiação ultravioleta (UVC) e visível (vis). As constantes de cinética de degradação revelam que AMS 3 e 1 foram mais fotoativas em luz visível e AMS 1 e 2 em região ultravioleta. Em geral, as amostras pré-calcinadas por tempo prolongado e altas temperaturas apresentaram boa atividade fotocatalítica. A influência das espécies de N (intersticial e substitucional), assim como a razão entre elas, na atividade fotocatalítica foi avaliada pelo coeficiente de correlação de Pearson, revelando que N intersticial apresenta correlação positiva com atividade fotocatalítica sob irradiação UVC e vis. Em contrapartida, N substitucional apresenta correlação negativa. Além disso, a razão entre N substitucional e intersticial indica uma forte correlação negativa tanto para a atividade fotocatalítica no UVC quanto no visível. Portanto, o estado de nitrogênio na rede cristalina de TiO₂, seja intersticial ou substitucional, influenciaram a atividade fotocatalítica das amostras, podendo ser empregado condições de pré-calcinação como uma futura opção para dopagem seletiva (intersticial ou substitucional) de nanopartículas de TiO₂. Em todos os casos, a quantidade de N substitucional deve ser controlada para obter melhores propriedades fotocatalíticas.

Apoio financeiro: Embrapa, PIBIQ/CNPq Processo 800193/2012-1.

Área: Novos Materiais.