

**110-022**

**INVESTIGAÇÃO ESTRUTURAL DA INSERÇÃO DE ZINCO NA FASE ANATASE DE DIÓXIDO DE TITÂNIO E AVALIAÇÃO DOS EFEITOS MORFOLÓGICOS E FOTÔNICOS ASSOCIADOS**

Queiroz, J.F.(1); Dos Santos, S.A.L.(1); Cavalheiro, A.A.(2); Oliveira, L.C.S.(1);  
Universidade Federal de Mato Grosso do Sul(1); Universidade Federal de Mato Grosso do Sul(2);  
Universidade Estadual de Mato Grosso do Sul(3); Universidade Federal de Mato Grosso do Sul(4);

Algumas características estruturais da fase anatase do dióxido de titânio são importantes para previsão de suas propriedades, principalmente quando aplicada em processos de fotocatalise heterogênea. A quantidade de fase anatase é uma delas, pois a transição desta fase para a fase rutilo é irreversível e contribui para o empobrecimento das propriedades do material. Este problema é evitado utilizando o Método Sol-Gel para a síntese tanto de pós nanométricos como de filmes finos, obtendo materiais com fase única anatase em baixas temperaturas de calcinação, bem abaixo da temperatura de transição para fase rutilo a 600 °C. Outra característica importante para as propriedades fotocatalíticas de pós e filmes de dióxido de titânio é a tetragonalidade da fase anatase e esta pode ser mudada pela inserção de dopantes. Neste trabalho, foram investigados os efeitos da dopagem com 4 mol% de zinco no dióxido de titânio obtido pelo Método Sol-Gel e calcinado a 450 °C por 2 horas. Foi observada que a inserção de zinco provoca distorção mensurável da estrutura, reduzindo a tetragonalidade da fase anatase e também a cristalinidade do pó obtido. Os parâmetros térmicos não indicaram que a inserção de zinco comprime o volume de nenhum dos sítios cristalográficos, inferindo a existência de vacâncias de oxigênio na estrutura não é provável. Esse resultado condiz com a não verificação de aumento de cristalinidade para a amostra dopada e a morfologia observada também mostra que a presença de zinco leva a uma maior fragmentação do pó. A energia de bandgap se mostrou maior para a amostra modificada com zinco (3,20 eV), em comparação com o valor obtido para a amostra pura (3,13 eV), mostrando que a inserção de zinco na estrutura anatase TiO<sub>2</sub> leva a uma alteração intrínseca.