

Caracterização de filmes finos de TiO_2 utilizando espectrofotometria molecular na região do UV-Vis

Liana Key Okada Nakamura e Jorge Moreira Vaz
Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares – IPEN

INTRODUÇÃO

A nanociência está, atualmente, dentre os campos científicos em desenvolvimento mais promissores. Podem ser encontradas diversas áreas para aplicações dos agora denominados nanomateriais. Dentre estas podem ser destacadas: preparação de nanocatalisadores e fotocatalisadores, sensores, células solares, baterias de íon lítio, filmes anti-reflexo, vidros condutores, janelas com filmes auto-limpantes, entre outros [1-3]. Existem diversas formas de preparação de materiais nanoestruturados, porém o processo sol-gel apresenta maior versatilidade, pois propicia o controle estrutural ao nível molecular [4-6] dos filmes preparados.

OBJETIVO

Preparação pelo processo sol-gel de filmes finos de TiO_2 obtidos por *dip coating* com a caracterização de algumas propriedades ópticas por espectrofotometria molecular na região do UV-Vis.

METODOLOGIA

Preparação do precursor sol-gel:

O gel precursor foi obtido a partir da hidrólise controlada, em temperatura ambiente, de tetraisopropóxido de titânio em meio de ácido clorídrico ou ácido acético em isopropanol, conforme o caso. Foi avaliado a influência do tempo de envelhecimento do gel precursor nas características dos filmes preparados.

Preparação dos filmes finos de TiO_2

Os filmes foram preparados em substrato de vidro pelo processo de *dip coating*, com velocidade de retirada de $30 \text{ cm} \cdot \text{min}^{-1}$. Após cada imersão no gel precursor o filme foi submetido a tratamento térmico em mufla na temperatura de $450 \text{ }^\circ\text{C}$ durante 15 minutos. O processo foi repetido até o número de 5 imersões em filmes feitos em uma face (s) e duas faces (d).

RESULTADOS

A partir dos valores de transmitância mínima (T_{\min}) dos filmes finos de TiO_2 podem ser determinados: espessura do filme (d); índice de refração no Γ_{\min} (n); índice de refração (N); porosidade (P) [7]. A partir do coeficiente de absorção (α) pode ser determinado o valor da energia de *band gap* (E_g) [6]. Na figura 1 é apresentado o espectro de transmissão para as amostras L-30 e L-38, com a indicação dos valores para T_{\min} e ordem do pico (m).

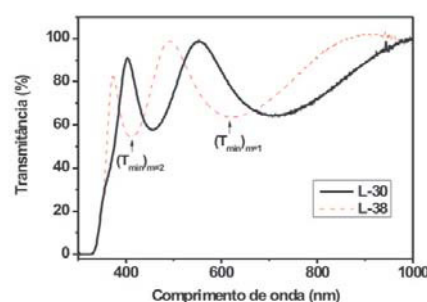


Figura 1. Espectro de transmissão das lâminas L-30 e L-38

Na tabela 1 são apresentados os parâmetros calculados para os filmes preparados.

Filme	Dias	d (nm)	N	P (%)	E_g (eV)
L-31 ^{s,b2}	0	0,314	2,134	33,6	3,41
L-33 ^{s,b2}	3	0,243	2,104	36,0	3,35
L-30 ^{d,b2}	0	0,259	2,099	36,3	3,39
L-32 ^{d,b2}	3	0,255	2,103	36,0	3,37
L-37 ^{s,b1}	0	0,236	2,071	38,5	3,37
L-40 ^{s,b1}	3	0,236	2,003	43,6	3,35
L-38 ^{d,b1}	0	0,232	2,069	38,7	3,39
L-41 ^{d,b1}	3	0,256	1,965	46,4	3,39

Tabela 1: Caracterização dos filmes finos de TiO_2 preparados.

s) 1 face; d) 2 faces; b1) HCl; b2)HAc

Os filmes finos foram feitos tanto em ambas as faces(d) como em somente uma das faces(s) do substrato. Como pode ser observado, após a devida correção, os parâmetros calculados foram similares para as duas situações. Nas condições estudadas foi observado que os filmes finos de TiO₂ preparados a partir do gel precursor com ácido clorídrico apresentaram, de forma geral, menor espessura do que os preparados com ácido acético. Entretanto a espessura do filme foi pouco influenciada pelo tempo de envelhecimento do gel precursor. O índice de refração dos filmes finos de TiO₂ preparados a partir do gel precursor com ácido acético foram maiores do que os obtidos para os filmes preparados com ácido clorídrico e de forma geral foram pouco influenciados pelo tempo de envelhecimento do gel precursor. A porosidade dos filmes finos de TiO₂ preparados a partir do gel precursor com ácido acético foi menor do que dos filmes preparados com ácido clorídrico, sendo que para este último foi observada uma maior influência do tempo de envelhecimento na porosidade. O valor da energia de *band gap* não foi afetado pelo tempo de envelhecimento e composição do gel precursor, sendo praticamente constante nas condições estudadas.

CONCLUSÕES

A utilização da espectrofotometria molecular na região do UV-VIS simplifica em muito a avaliação de filmes finos transparentes, pois a partir do espectro de transmissão, obtido de forma não destrutiva diretamente do filme fino, podem ser estimados alguns parâmetros importantes para sua caracterização óptica.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- [1]Liu, X.; Jin, Z.; Bu, S. e Yin, T., Journal of Sol-Gel Science and Technology, 36, 103-111, 2005.
- [2] Arabatzis, I. M.; Antonaraki S.; Stergiopoulos, T. et al, Journal of Photochemistry and Photobiology A: Chemistry, 149, 237-245, 2002.
- [3] Maye, M. M.; Han, L.; Kariuki, N. N. Et al, Analytica Chimica Acta, 496, 17-27, 2003.
- [4]Hu, L.; Yoko, T.; Kozuka, H. E Sakka, S., Thin Solid Films,219,18-23, 1992.
- [5]Ahn, Y. U.; Kim, E. J.; Kim, H. T. e Hahn, S. H., Materials Letters, 57, 4660-4666, 2003.

[6]Keshmiri, M.; Mohseni, M. e Troczynski, T., Applied Catalysis B: Environmental, 53, 209-219, 2004.

[7]Sreemany, M. e Sen, S., Materials Chemistry and Physics, 83, 169-177, 2004.

APOIO FINANCEIRO

FAPESP