

Estudo de XANES do Ambiente Químico de Partículas do Óxido Misto Fe/Ti, Obtidos pelo Método Sol-Gel de Preparo.

Franciély Ignachewski (PG)*, Eryza G. Castro (PQ) e Sérgio Toshio Fujiwara (PQ).

ignachewski_fraciely@yahoo.com.br

¹ Departamento de Química, CEDETEG – Universidade Estadual do Centro-Oeste – UNICENTRO.

² Departamento de Química – Campus Uvaranas – Universidade Estadual de Ponta Grossa – UEPG.

Palavras Chave: Titanato de ferro, sol-gel, estado de oxidação.

Introdução

As propriedades catalíticas de sistemas multicomponentes podem ser fortemente influenciadas pela sua composição e o procedimento de preparação. As propriedades destes sistemas apresentam características únicas comparadas aos óxidos puros.

Neste sentido, o estudo destes materiais por XANES se faz importante para compreender a estrutura fina destas amostras, nas diferentes proporções Fe/Ti. Ainda, é possível detectar interações entre Ferro e Titânio e seus números de coordenação.

Resultados e Discussão

As amostras analisadas foram obtidas segundo BR 102012021965-4. Os experimentos de absorção de raios X na região de XANES foi realizado na linha de XAFS-1 do Laboratório Nacional de Luz Síncrotron (LNLS), Operado pela ABTLus para o Ministério da Ciência e Tecnologia. Em todos os experimentos, os dados foram coletados utilizando-se a face (111) de um cristal de silício como monocromador. Com um sistema de detecção composto por três câmaras de ionização (preenchidas com ar – 715 torr), os espectros foram coletados na borda K do ferro (7.112eV) em modo transmissão, e foi usado como referência Fe₂O₃ hematita e TiO₂ rutilo. O preparo das amostras para a aquisição dos espectros foi realizado através de maceração das amostras e filtração em álcool propílico por uma membrana de 0,22 µm de porosidade, de modo que o material ficasse depositado homogeneamente na superfície da membrana. O tratamento dos dados foi realizado utilizando-se o programa Athena.

O espectro de XANES na borda K do ferro apresenta uma forte absorção em torno de 7.122,6 eV para o Fe³⁺ em Fe₂O₃. Na Figura 1 está apresentado o Espectro XANES para os materiais ATF25, ATF50 e ATF 75 é possível observar um deslocamento deste pico para energia maior. A borda de absorção do ferro pode deslocar na presença de pseudobroquita, Fe₂TiO₅, indicando uma energia maior do que a borda de absorção para Fe₂O₃. Isso pode ocorrer devido ao efeito indutivo dos íons circundantes Ti⁴⁺, provocando um desvio da nuvem eletrônica dos íons Fe³⁺ para o Ti⁴⁺.^{1,2} Este deslocamento de energia para valores maiores pode indicar a formação do óxido misto. Na Figura 2 está apresentada uma ampliação da pré-borda e pico característico de Fe³⁺ foi encontrado (7.114,3eV). Ocorre um desdobramento do pico na

forma de um ombro (7.114,6eV), o qual, pode indicar distorção de estrutura, provavelmente de coordenação octaédrica¹.

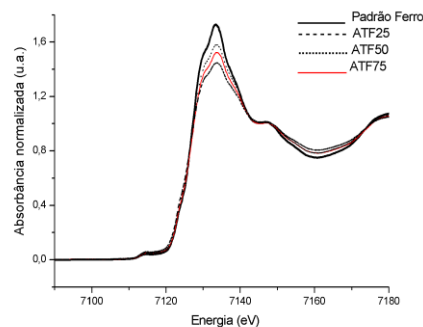


Figura 1. Espectro de XANES dos Materiais na borda K-Fe.

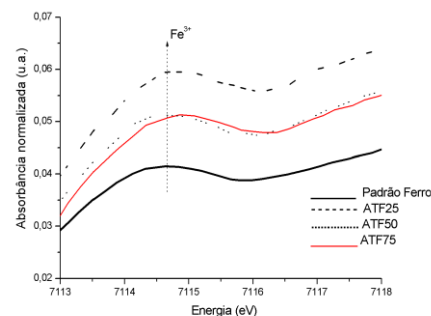


Figura 2. Espectro de XANES dos Materiais na borda K-Fe com ampliação da pré-borda.

Conclusões

Através da análise de XANES foi possível investigar a estrutura local em torno do átomo de ferro. Os átomos de Fe substituem o átomo de Ti nos interstícios do cristal de anatase. A substituição provoca uma distorção na estrutura octaédrica do TiO₂ neste fase. À medida que a proporção de ferro aumenta nos materiais eles apresentam comportamento de Fe₂O₃.

Agradecimentos

UNICENTRO, Capes, CNPq, Fundação Araucária e LNLS.

¹ Liu, F. Asakura, K., Xie, P. Wang, J., He, H. Catal Today. **2012**, in press.

² Sun, S. Ding, J. Bao, J. Gao, C. Qi, Z. Yang, X. He, B. Li, C. Appli Surf. Sci. **2012**, 258, 5031-5037.