



Coordenação de Armindo Rodrigues

Dióxido de Titânio (TiO₂) Um Material com Múltiplas Funcionalidades e Aplicações

Autora:

H. Cristina Vasconcelos

Vivemos num mundo feito de materiais que sustentam o nosso bem-estar atual e tornam viável o progresso das sociedades. É fácil imaginar o impacto que a investigação em novos materiais terá no futuro. Estes têm sido tão importantes na vida do homem que os historiadores até classificaram as primeiras eras da humanidade de acordo com os materiais usados; assim surgiram as idades da pedra, bronze e ferro. Atualmente, podemos afirmar que em pleno século XXI estamos na idade dos novos materiais. As novas tecnologias, desde os vidros com auto limpeza para a construção, aos compósitos avançados da aeronáutica, passando também pelos novos implantes cirúrgicos, exigiram o desenvolvimento de um vasto conjunto de materiais com propriedades muito específicas. Sem a ajuda desses materiais, essas tecnologias não poderiam estar operacionais. Em particular, o dióxido de titânio (TiO₂), tem dominado as atenções da comunidade científica devido às suas propriedades multifuncionais. Desde a sua produção comercial no início do século XX, o TiO₂ tem sido usado em diversas aplicações industriais, nomeadamente na optoeletrónica, fotoquímica, filtros solares, tintas e cosmética. No entanto, foi a descoberta ocorrida em 1972, relativa à separação fotocatalítica da molécula da água sobre um eletrodo de TiO₂, exposto à luz ultravioleta (UV), que trouxe o TiO₂ para o centro das atenções. Desde então, grande parte da investigação realizada neste material, da classe dos semicondutores, tem-se destacado em em diversas aplicações da fotocatalise, tais como, tratamento de efluentes industriais, vestuário e tecidos inteligentes, células fotovoltaicas, etc. Por conseguinte, o TiO₂ é um importante semicondutor fotoquímico na proteção do ambiente, mas também da saúde humana, uma vez que permite degradar maté-

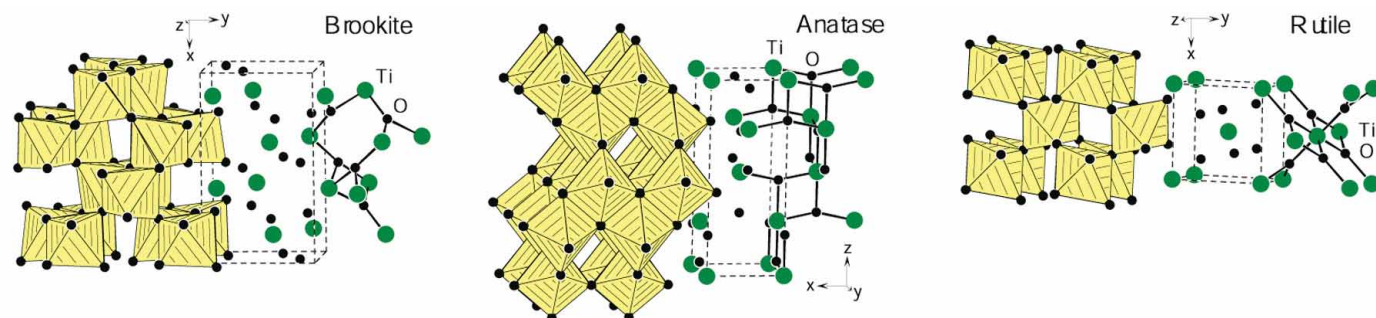
ria orgânica sob ação da luz UV através de reações redox (oxidação-redução). O seu elevado potencial redutor e oxidante, confere aos materiais excelentes propriedades de auto limpeza e de auto esterilização que permitem manter limpas quaisquer superfícies expostas ao meio ambiente, como os vidros de janela, evitando assim o crescimento de microrganismos. Além disso, o facto do TiO₂ não ser tóxico torna-o numa excelente alternativa aos biocidas tradicionais.

Estruturas cristalinas do TiO₂

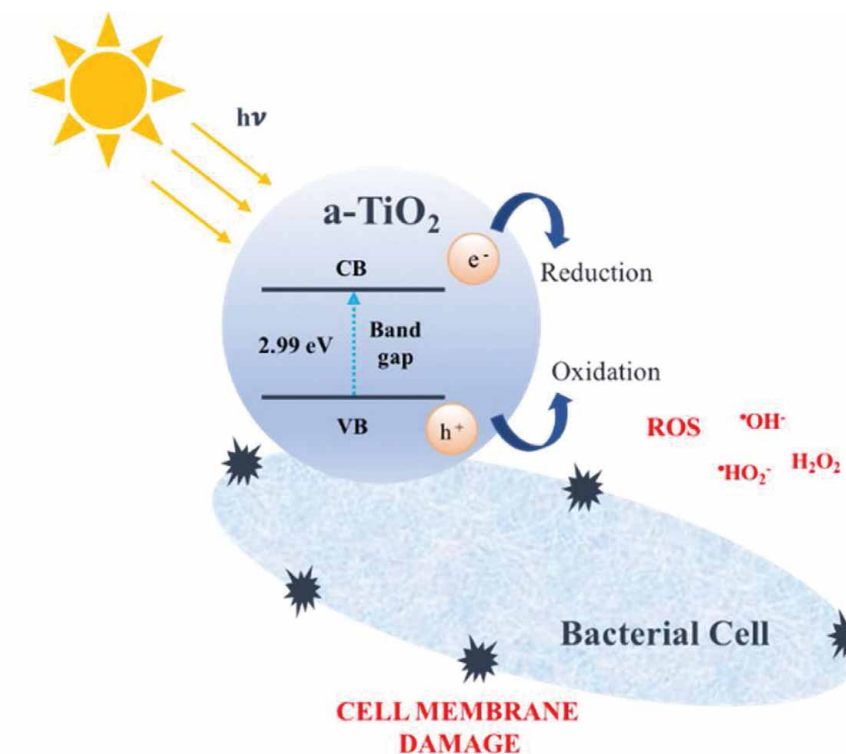
O TiO₂ é polimórfico e pode encontrar-se em três formas cristalinas diferentes: *anatase*, *rutile* e *brookite* (Fig.1). As duas primeiras são as mais aplicadas a nível industrial devido à comprovada estabilidade química e características fotoquímicas. A fase cristalina *rutile* é de todas a mais estável, enquanto a *anatase* é metastável. Porém, o TiO₂ também pode ser obtido na forma amorfa (*a*-TiO₂), ou seja, sem que a sua estrutura interna obedeça a um padrão de repetição ordenado no espaço 3D. Tal acontece, por exemplo, se esta for sintetizada através do processo sol-gel. O *a*-TiO₂ tem despertado grande interesse na comunidade académica por exibir um conjunto de vastas aplicações, algumas das quais evidenciadas no artigo¹ (referido na nota de rodapé).

Hiato fotónico e Estrutura bactericida

O TiO₂ é um semicondutor e como tal possui banda de valência (BV) e banda de condução (BC), sendo a diferença energética existente entre elas denominada por hiato fotónico (*bandgap*). O desafio tem sido a capacidade de adequar o seu elevado hiato fotónico (E_g ≈ 3,2 eV) às características específicas do espectro de emissão solar, nomeadamente

Fig. 1 - Estruturas polimórficas do TiO₂. Fonte: <http://www.hardmaterials.de/html/tio2.html>

Coordenação de Armindo Rodrigues

Fig. 2 - As ROS danificam as membranas das células bacterianas. Fonte¹

reduzindo o seu valor e aumentando assim a absorção de radiação visível, o que é possível com *a*-TiO₂ dopado com elementos não-metálicos, como o azoto (N). Neste processo, o semicondutor é iluminado com radiação solar, absorvendo fótons que promovem a formação de espécies (*reactive oxygen species*, ROS), tais como, •HO₂, H₂O₂ e •OH⁻, com um grande poder oxidante dos componentes orgânicos indesejáveis. As ROS desempenham um papel fundamental na esterilização e no desempenho antimicrobiano. Quando em proximidade com bactérias, as ROS danificam as membranas

celulares bacterianas através da peroxidação lipídica, aumentam a fluidez da membrana e causam a sua rotura, o que leva à morte celular (Fig. 2). Um estudo de caso apresentado no artigo¹ mostra o efeito das propriedades bactericidas de nano partículas de *a*-TiO₂ frente às bactérias *Escherichia coli*. Os resultados do ensaio ASTM E 2149 (período de incubação de 1 h à temperatura ambiente, sob luz do dia) mostram uma eficiência acima de 50%. Nesta perspetiva, o TiO₂ pode ainda ser utilizado para a indústria médica, fornecendo uma competente estrutura bactericida.

Arranjos atómicos aleatórios e sem simetria estrutural (amorfa) ou ordenação perfeita (cristal)? TiO₂ amorfo, uma boa alternativa ao TiO₂ cristalino!



H. Cristina Vasconcelos é co-autora do artigo¹ "*Photonic Band Gap and Bactericide Performance of Amorphous Sol-Gel Titania: An Alternative to Crystalline TiO₂*", publicado no dia 10 de julho de 2018, a convite da prestigiada revista

molecules, uma publicação científica internacional de acesso aberto, com revisão por pares, que aborda todos os aspetos da química dos materiais. (<https://www.mdpi.com/1420-3049/23/7/1677>)