

ENERGIA DE SUPERFÍCIE PARA NANOSSUPERFÍCIES DE TiO₂ NA DIREÇÃO (001)

Sergio de Lazaro*, Renato Ferras Penteadó e Sergio Mazureck Tebcherani

Departamento de Química, Universidade Estadual de Ponta Grossa, Av. Carlos Cavalcanti, 4748, 84030-900 Ponta Grossa - PR, Brasil

Danielle Berger e José Arana Varela

Instituto de Química, Universidade Estadual Paulista, R. Prof. Francisco Degni, 55, 14800-900 Araraquara - SP, Brasil

Evaldo Toniolo Kubaski

Itajara Minérios Ltda, R. Balduino Taques, 650, 84010-050 Ponta Grossa - PR, Brasil

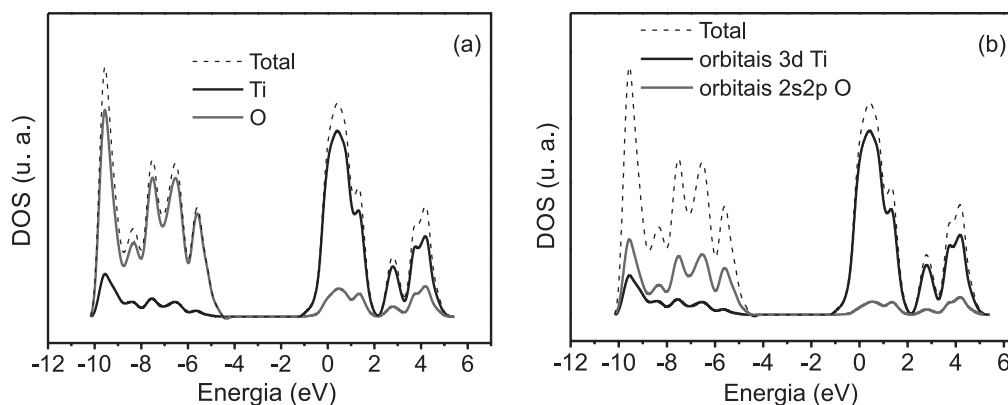


Figura 1S. Resultados de DOS para a superfície (001) do material TiO₂. (a) DOS total modelo slab e (b) DOS total orbitais modelo slab

Tabela 1S. Resultados obtidos através de difratograma para amostra comercial de dióxido de titânio em fase rutilo

2θ	hkl	Intensidade relativa (%)	Fwhm (°)
27,4138	110	100	0,1710
36,0745	101	41,1	0,1813
39,1853	200	6,3	0,1878
41,2420	111	19,9	0,1929
44,0444	210	7,3	0,2022
54,3002	211	50,2	0,1292
56,6003	220	12,2	0,1309
62,7408	002	5,0	0,1298
64,0306	310	5,6	0,1326
68,9854	301	13,8	0,1264
69,1850	112	6,5	0,1227

*e-mail: srlazaro@uepg.br