

LIVRO DE RESUMOS



DÉCIMA PRIMEIRA SEMANA DA
GRADUAÇÃO E PÓS-GRADUAÇÃO DO
INSTITUTO DE FÍSICA DE SÃO CARLOS – USP

2021



**Universidade de São Paulo
Instituto de Física de São Carlos**

**XI Semana Integrada do Instituto de
Física de São Carlos**

Livro de Resumos

**São Carlos
2021**

Semana Integrada do Instituto de Física de São Carlos

SIFSC 11

Coordenadores

Prof. Dr. Vanderlei Salvador Bagnato

Diretor do Instituto de Física de São Carlos – Universidade de São Paulo

Prof. Dr. Luiz Vitor de Souza Filho

Presidente da Comissão de Pós Graduação do Instituto de Física de São Carlos – Universidade de São Paulo

Prof. Dr. Luís Gustavo Marcassa

Presidente da Comissão de Graduação do Instituto de Física de São Carlos – Universidade de São Paulo

Comissão Organizadora

Arthur Deponte Zutião

Artur Barbedo

Beatriz Kimie de Souza Ito

Beatriz Souza Castro

Carolina Salgado do Nascimento

Edgard Macena Cabral

Fernando Camargo Soares

Gabriel dos Reis Trindade

Gabriel dos Santos Araujo Pinto

Gabriel Henrique Armando Jorge

Giovanna Costa Villefort

Inara Yasmin Donda Acosta

Humberto Ribeiro de Souza

João Hiroyuki de Melo Inagaki

Kelly Naomi Matsui

Leonardo da Cruz Rea

Letícia Cerqueira Vasconcelos

Natália Carvalho Santos

Nickolas Pietro Donato Cerioni

Vinícius Pereira Pinto

Normalização e revisão – SBI/IFSC

Ana Mara Marques da Cunha Prado

Maria Cristina Cavarette Dziabas

Maria Neusa de Aguiar Azevedo

Sabrina di Salvo Mastrandionio

Ficha catalográfica elaborada pelo Serviço de Informação do IFSC

Semana Integrada do Instituto de Física de São Carlos

(11: 06 set. - 10 set. : 2021: São Carlos, SP.)

Livro de resumos da XI Semana Integrada do Instituto de Física de São Carlos/ Organizado por João H. Melo Inagaki [et al.]. São Carlos: IFSC, 2021.

412 p.

Texto em português.

1. Física. I. Inagaki, João H. de Melo, org. II. Título

ISBN 978-65-993449-3-0

CDD 530

IC51

Desenvolvimento da heteroestrutura CuWO₄/BiVO₄/FeCoO_x com configuração de bandas otimizada para aplicações na fotossíntese artificial

RABELO, L.¹; ROSA, W.¹; GONÇALVES, R. V.¹

lucasrabelo@ifsc.usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

A divisão fotocatalítica da água (*water splitting*) através da fotossíntese artificial emerge como uma solução viável e eficiente para mitigar a crescente demanda energética e reduzir as emissões de gases poluentes na atmosfera. (1) Com efeito, a fotossíntese artificial emprega materiais semicondutores aptos a realizar a fotocatálise da água em hidrogênio solar (H₂), uma fonte de energia limpa e sustentável muito promissora para substituir os combustíveis fósseis.(2) Entretanto, em virtude de várias limitações intrínsecas desses materiais semicondutores (particularmente devido a recombinação de cargas), observa-se uma produção de H₂ muito menor que a taxa teórica esperada. Nesse contexto, diversas estratégias tem sido propostas para superar essas limitações, tais como: nanoestruturação, dopagem, heterojunções, entre outras. Assim sendo, objetivando produzir um sistema eficiente para aplicações na fotossíntese artificial, realizou-se nesse projeto uma heterojunção com filmes finos dos semicondutores CuWO₄ e BiVO₄ e a posterior deposição do co-catalisador FeCoO_x. Precisamente, o sistema CuWO₄/BiVO₄/FeCoO_x foi sintetizado através da técnica de pulverização catódica com um processo de três etapas, dadas por: (i) processamento dos materiais alvos dos semicondutores; (ii) deposição sequencial de filmes finos de CuWO₄ e BiVO₄ (originando a heterojunção CuWO₄/BiVO₄); (iii) deposição final de uma camada ultrafina do co-catalisador FeCoO_x. Através das caracterizações de DRX, Raman, UV-VIS, XPS e MEV, demonstrou-se que a heteroestrutura proposta foi muito efetiva para os presentes propósitos, aprimorando a faixa de absorção visível e estabilidade em soluções eletrolíticas. Precisamente, a heterojunção CuWO₄/BiVO₄ apresentou uma excelente atividade catalítica na fotossíntese artificial, produzindo uma densidade de photocorrente de 750µA/cm², muito superior aos semicondutores individuais (CuWO₄: 180µA/cm² e BiVO₄ : 250µA/cm²). Conforme evidenciado pelas caracterizações, a performance superior da heterojunção é atribuída ao aprimoramento da estrutura de bandas: uma vez que as bandas de condução e valência do BiVO₄ são energeticamente maiores que aquelas do CuWO₄, desenvolve-se caminhos preferenciais direcionando os elétrons fotogerados na banda de valência do BiVO₄ para a banda de valência do CuWO₄; simultaneamente, os buracos excitados na banda de condução do CuWO₄ são energeticamente direcionados para a banda de condução de BiVO₄. Tais caminhos preferenciais aumentam o número de portadores de cargas e reduzem a recombinação de cargas. Por fim, a heteroestrutura CuWO₄/BiVO₄/FeCoO_x apresentou uma performance ainda superior, evidenciando que o co-catalisador FeCoO_x foi efetivo em suprimir a recombinação dos pares elétron-buracos na superfície do sistema. Vale ressaltar que a heteroestrutura desenvolvida nesse projeto é inédita; além disso, não há trabalhos na literatura, conhecido pelos autores, reportando a formação de um sistema com dois filmes finos e a posterior deposição de co-catalisador (exclusivamente através da pulverização catódica). Em particular, a pulverização catódica é uma técnica de deposição física muito utilizada para obter filmes finos, caracterizando-se pela sua versatilidade e potencial para aplicação em larga escala.(3) Em suma, a estratégia proposta para aprimorar a performance dos semicondutores demonstrou-se efetiva e ideal para aplicações na produção de H₂ como fonte de

energia limpa e sustentável. O método desenvolvido nesse trabalho pode ser facilmente generalizado para diversas heteroestruturas e permite um controle mais rigoroso na alteração estrutural dos semicondutores.

Palavras-chave: Fotossíntese artificial. Filmes finos. Heterojunção.

Referências:

- 1 KROL, R; GRATZEL, M. **Photoelectrochemical hydrogen production**. New York: Springer, 2012.
- 2 MAEDA, K. Photocatalytic water splitting using semiconductor particles: history and recent developments. **Journal of Photochemistry and Photobiology C**, v. 12, n. 4, p. 237-268, 2011.
- 3 GONÇALVES, R.V. et al. Easy access to metallic copper nanoparticles with high activity and stability for CO oxidation. **ACS Applied Materials and Interfaces**, v. 7, n. 15, p. 7987-7994, 2015.