

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

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

Livro de Resumos

**São Carlos
2022**

Semana Integrada do Instituto de Física de São Carlos

SIFSC 12

Coordenadores

Prof. Dr. Osvaldo Novais de Oliveira Junior

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

Prof. Dr. Javier Alcides Ellena

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

Profa. Dra. Tereza Cristina da Rocha Mendes

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

Comissão Organizadora

Adonai Hilario

Arthur Deponte Zutião

Elisa Goettems

Gabriel dos Santos Araujo Pinto

Henrique Castro Rodrigues

Jefter Santiago Mares

João Victor Pimenta

Julia Martins Simão

Letícia Martinelli

Lorany Vitoria dos Santos Barbosa

Lucas Rafael Oliveira Santos Eugênio

Natasha Mezzacappo

Paulina Ferreira

Vinícius Pereira Pinto

Willian dos Santos Ribela

Normalização e revisão – SBI/IFSC

Ana Mara Marques da Cunha Prado

Maria Cristina Cavarette Dziabas

Maria Neusa de Aguiar Azevedo

Sabrina di Salvo Mastrandiono

Ficha catalográfica elaborada pelo Serviço de Informação do IFSC

Semana Integrada do Instituto de Física de São Carlos

(12: 10 out. - 14 out. : 2022: São Carlos, SP.)

Livro de resumos da XII Semana Integrada do Instituto de Física de São Carlos/ Organizado por Adonai Hilario [et al.]. São Carlos: IFSC, 2022.

446 p.

Texto em português.

1. Física. I. Hilario, Adonai, org. II. Titulo

ISBN: 978-65-993449-5-4

CDD: 530

PG152

Produção de H₂ verde a partir da dissociação fotocatalítica da água utilizando a heterojunção p – n SrTiO₃/NiO@Ni(OH)₂

CENTURION, Higor Andrade; GONÇALVES, Renato Vitalino; RABELO, Lucas Gabriel

higorcenturion@usp.br

A utilização de combustíveis fósseis como principal matriz energética pode estar associada a uma série de desbalanços ambientais. Deste modo, buscas por fontes renováveis e livres de emissão de CO₂, apontam o hidrogênio verde como uma promissora alternativa aos combustíveis de base fóssil. (1) Nesta perspectiva, o SrTiO₃ vem recebendo grande destaque como fotocatalizador em reações de dissociação fotocatalítica da água, contudo, certas limitações intrínsecas deste material semicondutor, como largo bandgap óptico (~ 3,2 ev), baixa separação de cargas e altas taxas de recombinação de elétrons e buracos fotogerados, minimizam seu potencial fotocatalítico. (2) De modo a suprimir as limitações supracitadas, utilizou-se de molibdênio como dopante, buscando deslocar a absorção óptica deste fotocatalizador para a região do visível, e deposição via pulverização catódica de nanopartículas de níquel como cocatalizador, formando uma heterojunção p – n, resultando em um ganho fotocatalítido, para evolução de H₂, em mais de 30 vezes, sob irradiação AM 1.5G ou mesmo atividade fotocatalítica sob apenas irradiação de luz visível (> 400nm). Nesta perspectiva, além de maximizar a atividade fotocatalítica do SrTiO₃, este trabalho visa elucidar os mecanismos que levam a este excepcional ganho fotocatalítico. Simulações por DFT, apontam para a formação de níveis eletrônicos intermediários próximos a banda de valência, associados a inserção do Mo como dopante, ao qual é possível atribuir a atividade fotocatalítica sob luz visível. Quanto ao uso de níquel como cocatalizador, resultados de XPS apontam para a formação de uma estrutura NiO/Ni(OH)₂, o que juntamente com resultados de Mott-Schottky e UV-Vis, possibilitou a realização de simulações de dobramentos de bandas. A análise do alinhamento de bandas indica que a estrutura resultante se trata de uma heterojunção do tipo II, no qual ocorre a formação de um campo elétrico interno, responsável por conduzir os buracos fotogerados para a estrutura de NiO, propiciando assim uma melhor separação de cargas e consequentemente, redução nas taxas de recombinação de elétrons e buracos, confirmada por análises de fotoluminescência. Os resultados obtidos, contribuem fortemente para a compreensão dos mecanismos de dissociação fotocatalítica da água utilizando o SrTiO₃ dopado com Mo e decorado com nanopartículas de níquel.

Palavras-chave: SrTiO₃. H₂ verde. Dissociação fotocatalítica.

Agência de fomento: FAPESP (2018/11059-0)

Referências:

- 1 GONÇALVES, R.V. et. al. Photocatalytic water splitting by suspended semiconductor particles, *In : SOUZA, F. L.; LEITE, E.R.(eds) Nanoenergy*, New York: Springer International Publishing, 2018.p. 107–140.
- 2 PATIAL,S. et. al. Tunable photocatalytic activity of SrTiO₃ for water splitting: Strategies and future

scenario, **Journal Environmental Chemical Engineering**, v. 8,n.7,p.103791, Feb.2020.