

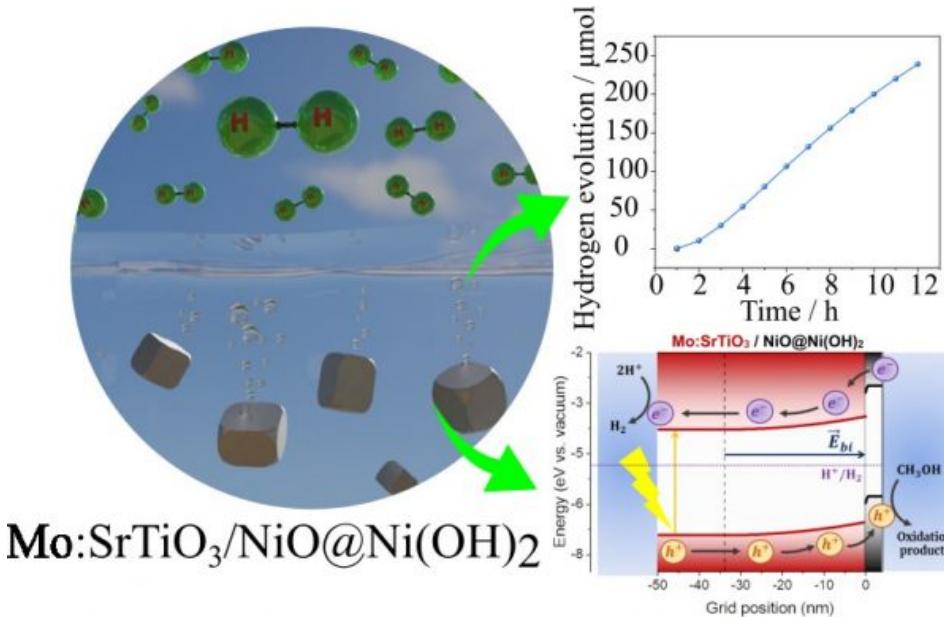
Artigo em destaque: Semicondutor “turbinado” para a produção de hidrogênio verde.

Posted on terça 31 de janeiro de 2023 by Eduardo SBPMAT



Uma equipe de cientistas de instituições brasileiras aumentou em cerca de 30 vezes a capacidade de um material semicondutor produzir hidrogênio por meio da fotólise da água, processo que consiste em dividir a molécula de água usando luz como única fonte de energia. O avanço contribui para o desenvolvimento de formas eficientes de gerar hidrogênio verde, que é o combustível produzido usando energia renovável e limpa.

Para que a fotólise ocorra, é necessário contar com um fotocatalisador suspenso na água. O photocatalisador é um material semicondutor capaz de absorver luz e, a partir disso, gerar as cargas (elétrons e buracos) necessárias às reações de oxidação e redução que provocam a dissociação das moléculas de água (H_2O) em hidrogênio (H_2) e oxigênio (O_2). Além disso, o material deve ser estável em ambiente aquoso.

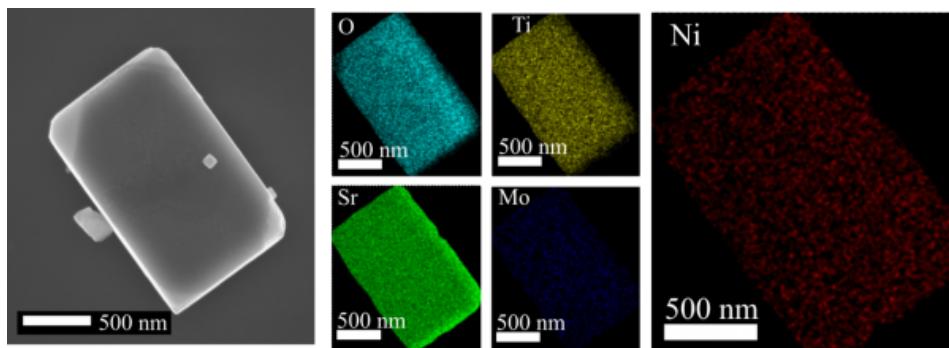


Fotólise para produção de H_2 utilizando o $Mo:SrTiO_3/NiO@Ni(OH)_2$ como photocatalisador.

“O titanato de estrôncio ($SrTiO_3$) é um dos principais materiais semicondutores aplicados à fotólise para produção de hidrogênio verde por atender os requisitos físico-químicos para oxidar e reduzir a molécula de água”, diz o professor Renato Vitalino Gonçalves (IFSC-USP), autor correspondente do artigo que reporta esta pesquisa no periódico *ACS Applied Energy Materials*. “Contudo, existem algumas limitações intrínsecas a este material que cerceiam seu potencial photocatalítico, como, por exemplo, seu largo bandgap de ~3,2 eV, que restringe sua absorção óptica à região do UV, a qual corresponde a apenas 4%, aproximadamente, do espectro solar”, completa o cientista. Outra limitação deste material, comum a todos os semicondutores, é a rápida recombinação de elétrons e buracos, a qual impede que essas cargas fluam livremente e possam promover as reações de oxidação e redução.

Dessa forma, a equipe brasileira, conduzida pelo professor Gonçalves, decidiu modificar o titanato de estrôncio para aumentar a sua eficiência na fotólise. Inicialmente, os pesquisadores doparam o semicondutor com o metal de transição molibdênio (Mo) e obtiveram partículas cúbicas desagregadas com faces bem definidas. O dopante, não convencional, foi responsável por tornar o material capaz de absorver luz na região do visível, a qual representa cerca de 43% do espectro solar.

Em um segundo momento, os autores do trabalho depositaram nanopartículas de níquel de cerca de 2 nm na superfície das partículas obtidas. O resultado foi uma junção de semicondutores de dois tipos: o $Mo:SrTiO_3$, de tipo n, e o $NiO@Ni(OH)_2$, de tipo p. “Nesta nova configuração, os buracos fotogerados são direcionados para a estrutura de $NiO@Ni(OH)_2$, enquanto os elétrons migram para a superfície do $Mo:SrTiO_3$, resultando em uma melhor separação de cargas e, consequentemente, redução na taxa de recombinação de elétrons e buracos”, explica Gonçalves.



Microscopia Eletrônica de Varredura (MEV) do $Mo:SrTiO_3/NiO@Ni(OH)_2$ e mapeamento EDS.

Os photocatalisadores foram colocados em suspensão em uma solução aquosa com 20% de metanol como agente de sacrifício – uma estratégia amplamente utilizada para incrementar a produção de hidrogênio e, ainda, gerar subprodutos de alto valor para a indústria química. “Quando misturado em água, este álcool é preferencialmente oxidado, em detrimento do lento processo de oxidação da água”, diz o professor

Gonçalves. “Ainda assim, o H₂ produzido é a partir da redução da molécula de água e não como subproduto da oxidação do metanol”, completa.

Ao aumentar a luz absorvida e diminuir a perda de cargas fotogeradas, o material “turbinado” apresentou um excelente resultado na produção de hidrogênio por fotólise: um aumento da sua atividade fotocatalítica de cerca de 30 vezes com relação ao semicondutor puro.

Cooperação científica brasileira

O trabalho científico foi liderado pelo professor Renato Vitalino Gonçalves, que coordena o Grupo de Nanomateriais e Cerâmicas Avançadas (NaCA) e o Laboratório de Fotossíntese Artificial e Nanomateriais (LAPNano) no IFSC-USP. A síntese dos materiais e o estudo das suas propriedades estruturais, ópticas e eletrônicas, bem como o seu desempenho fotocatalítico para a produção de hidrogênio verde foram desenvolvidas no IFSC-USP, dentro da pesquisa de doutorado de [Higor Andrade Centurion](#), orientada pelo professor Gonçalves.

A identificação e caracterização das nanopartículas de níquel no material foi realizada com a colaboração de uma equipe da UFABC e do LNNano-CNPEM, formada pelo professor [Flávio Leandro de Souza](#), a pós-doutoranda [Ingrid Rodriguez-Gutierrez](#) e o pesquisador [Jefferson Bettini](#). Em colaboração com a professora [Liane M. Rossi](#) (IQ-USP), foi realizada a quantificação do níquel utilizando a técnica de espectroscopia de absorção atômica por chama.

Além disso, com a colaboração do professor [Heberton Wender](#) (UFMS) foi possível realizar medidas de fotoluminescência que corroboraram a supressão da recombinação das cargas fotogeradas pela formação da junção p – n.

Finalmente, simulações computacionais que permitiram entender o comportamento dos materiais foram realizadas junto ao professor [Matheus M. Ferrer](#), da UFPel, e ao mestrando [Lucas Gabriel Rabelo](#), do IFSC-USP, que também teve orientação do professor Gonçalves.

O trabalho foi financiado, principalmente, pela FAPESP e, através do RCGI, pela FAPESP/Shell. Também contou com apoio financeiro da FAPERGS.



Autores do artigo. A partir da esquerda: Higor A. Centurion, Lucas G. Rabelo, Ingrid Rodriguez-Gutierrez, Mateus M. Ferrer, Jefferson Bettini, Heberton Wender, Liane M. Rossi, Flávio L. Souza e Renato V. Gonçalves

Referência do artigo científico: *Constructing Particulate p-n Heterojunction Mo:SrTiO₃/NiO@Ni(OH)₂ for Enhanced H₂ Evolution under Simulated Solar Light*. Higor A. Centurion, Lucas G. Rabelo, Ingrid Rodriguez-Gutierrez, Mateus M. Ferrer, Jefferson Bettini, Heberton Wender, Liane M. Rossi, Flávio L. Souza, and Renato V. Gonçalves. *ACS Appl. Energy Mater.* 2022, 5, 12727–12738. <https://doi.org/10.1021/acsaem.2c02337>.

Contato do autor correspondente: rgoncalves@ifsc.usp.br.