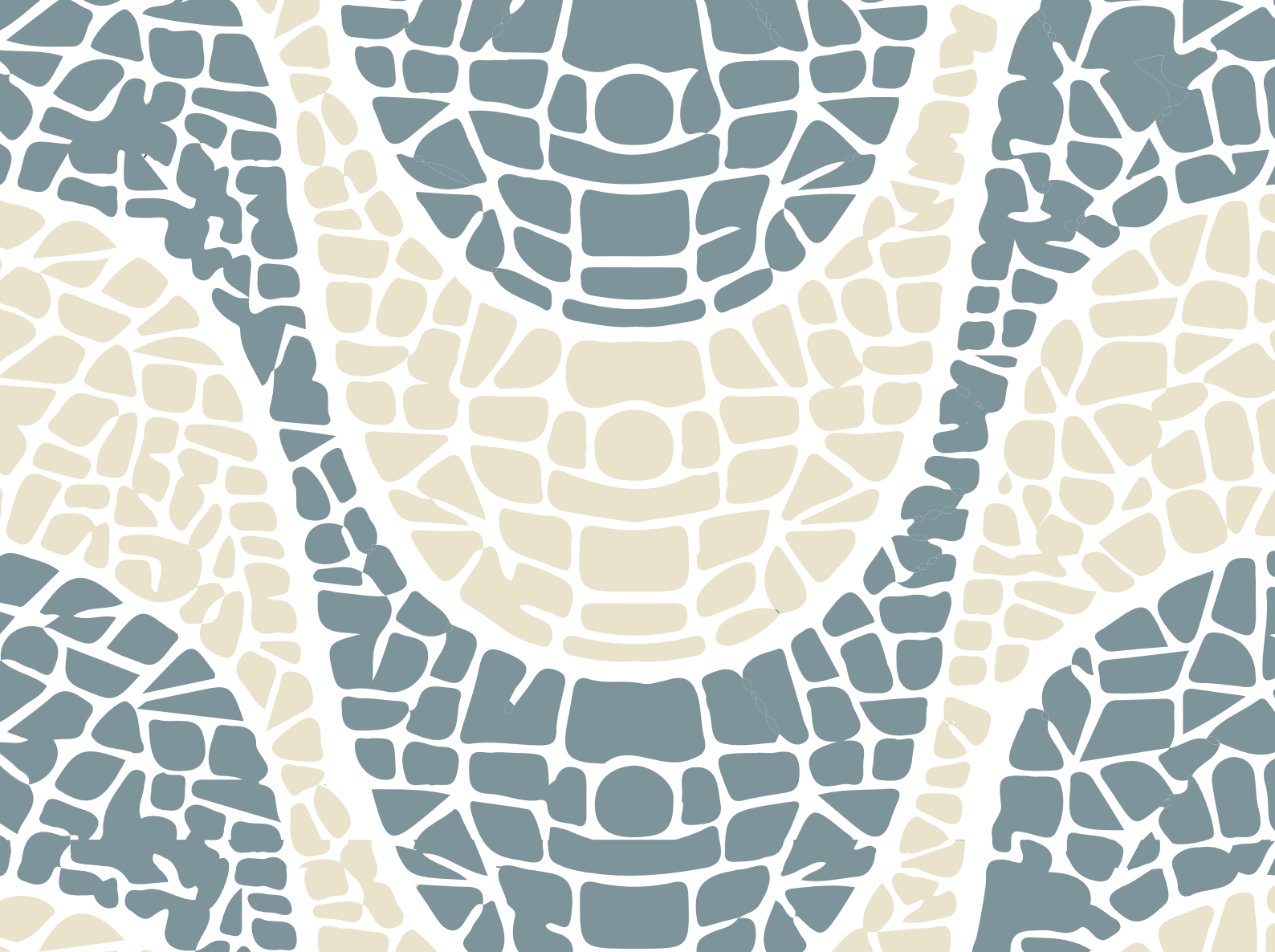
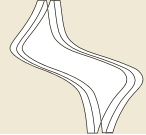




XXVI CONGRESSO

SIBAE 19-23 Maio 2024
Lisboa, Portugal

LIVRO DE RESUMOS
2024



Impactos dos métodos de produção de nanofitas de grafeno na eletrocatalise de RRO e produção de H₂O₂

Eduardo Cardoso¹, Guilherme Fortunato³, Gilberto Maia², Marcos R. V. Lanza¹

¹ Instituto de Química de São Carlos, Universidade de São Paulo, Avenida Trabalhador São Carlense 400, São Carlos, SP 13566-590, Brasil.

² Instituto de Química da Universidade Federal de Mato Grosso do Sul, Av. Senador Filinto Müller 1555, Campo Grande, MS 79074-460, Brasil.

³ Sustainable Energy Materials, Technical University Munich, Campus Straubing, Schulgasse 22, 94315 Straubing, Germany.

e-mail: marcoslanza@usp.br

Materiais à base de carbono, como o grafeno, têm se tornado extremamente valorizado para aplicações eletrocatalíticas, devido à sua baixa densidade, alta condutividade e estabilidade química em ambientes ácidos e alcalinos [1,2]. Além disso, sua elevada área superficial e facilidade de funcionalização tanto por criação de defeitos superficiais (i.e. defeitos de bordas) quanto por dopagem com heteroátomos, tornam o grafeno um material versátil para atuar na eletrocatalise da reação de redução de oxigênio (RRO), um processo fundamental em diversas aplicações de conversão de energia e para a produção de agentes oxidantes ecológicos, como o peróxido de hidrogênio (H₂O₂) [1,3]. Neste trabalho, estudamos a síntese de nanofitas de grafeno (GNRs) produzidas a partir da abertura oxidativa de nanotubos de carbono de paredes múltiplas (MWCNTs) e sua dopagem com nitrogênio (N) e fósforo (P). Investigamos como os defeitos de borda e grupos oxigenados retidos no processo de abertura do MWCNT impactam tanto o processo de dopagem quanto as características eletrocatalíticas do GNR para RRO, utilizando a técnica de voltametria linear com eletrodos de disco e anel rotatórios. Nossas descobertas ressaltam a necessidade de otimizar as estruturas da GNR e as estratégias de dopagem para as condições de reações específicas. Demonstramos como as características do GNR são efetivamente influenciadas pelos diversos métodos de abertura do MWCNT, afetando em última análise o desempenho do RRO e a seletividade para a formação de H₂O₂. Mais especificamente, os resultados obtidos mostram que quando os MWCNTs são abertos para criar GNRs com uma distribuição mais ampla de átomos de oxigênio no plano basal e menos bordas expostas, a inserção do elemento dopante aumenta a atividade catalítica, resultando em melhor desempenho de RRO [4,5]. No entanto, esta alteração reduz a seletividade do H₂O₂ tanto em meios ácidos como alcalinos. Por outro lado, a geração de GNRs com mais bordas e grupos funcionais de oxigênio, difundidos tanto no plano basal quanto nas bordas, produz uma matriz de GNR de alta concentração de grupos de oxigênio. Esta configuração não só facilita a inserção de fósforo nas bordas, mas também preserva grupos oxigenados no plano basal, que somados desempenham um papel crucial na melhoria do desempenho da RRO, levando a seletividades > 90% para a produção de H₂O₂ em meio alcalino [5,6]. Este estudo não apenas avança nossa compreensão dos eletrocatalisadores à base de grafeno, mas também oferece contribuições para o desenvolvimento de tecnologias eletroquímicas mais eficientes e sustentáveis.

Referências

- [1] E.S.F. Cardoso, G.V. Fortunato, C.D. Rodrigues, M.R.V. Lanza, G. Maia. *Nanomaterials*, 13 (2023) 2831.
- [2] Y. Gu, Z. Qiu, K. Müllen, J. Am. Chem. Soc. 14 (2022) 11499–11524.
- [3] E.S.F. Cardoso, G.V. Fortunato, I. Palm, E. Kibena-Pöldsepp, A.S. Greco, J.L.R. Júnior, A. Kikas, M. Merisalu, V. Kisand, V. Sammelselg, K. Tammeveski, G. Maia. *Electrochim. Acta*, 344 (2020) 136052.
- [4] J. S. Lim, Y. J. Sa, S. H. Joo, *Cell Reports Phys. Sci.* 3 (2022) 100987.
- [5] G.V. Fortunato, M.S. Kronka, E.S.F. Cardoso, A.J. dos Santos, A.C. Roveda, F.H.B. Lima, M. Ledendecker, G. Maia, M. R. V. Lanza. *J. Catal.*, 413 (2022) 1034–1047.
- [6] G.V. Fortunato, E. Pizzutilo, E.S.F. Cardoso, M.R.V. Lanza, I. Katsounaros, S.J. Freakley, K.J.J. Mayrhofer, G. Maia, M. Ledendecker. *J. Catal.*, 389 (2020) 400–408.

