

PROJETO – DE – PESQUISA

Programa de Iniciação científica e Tecnológica CBPF

Nome do pesquisador ou tecnologista (orientador interno):

Elisa Maria Baggio Saitovitch

Coordenação: COMAN - Coordenação de Matéria Condensada, Física Aplicada e Nanociência

Nome do pesquisador ou tecnologista (coorientador/colaborador externo, se houver):

Alexander Eduardo Caytuero Villegas

Instituição de Pesquisa Externa (se houver): **COPPE**

Título do projeto: **Estudo de fotocatalisadores por técnicas físicas incluindo a espectroscopia Mössbauer de ^{57}Fe e ^{119}Sn .**

Palavra-chave: Catalizadores, Espectroscopia Mössbauer, **ETC**

Área de conhecimento: Física da Matéria Condensada Experimental e Química

Pré-requisito desejado (se houver): Aluno deve ter cumprido o ciclo básico do curso de Física ou Química

Possibilidade de orientação remota: () Sim (x) Não

Resultante principal do Projeto:

- (x) Publicação (horizonte de 4 anos).
- (x) Preparação do bolsista para área científica.
- () Produto tecnológico.
- () Produto educacional ou didático.

Rio de Janeiro, agosto de 2024.

Projeto de Pesquisa

O projeto de pesquisa em questão tem como objetivo inserir o aluno na área científica, desenvolvendo pesquisa em física experimental da matéria condensada, visando a produção e caracterização de catalisadores com propriedades interessantes e com potencial de aplicações.

A catálise desempenha um papel decisivo no desenvolvimento da química moderna considerando as altas metas de sustentabilidade atualmente aceitas para estabilizar o clima e preservar o meio ambiente. Os desafios estão relacionados à redução de emissões, remoção de poluições industriais ou ao desenvolvimento de produtos químicos funcionais sustentáveis. Este objetivo só pode ser alcançado com a ajuda de novos tipos de catalisadores e de novos processos que atendam a esses padrões. Porém, a produção com elevada eficiência deste tipo de catalisadores é muito complexa e tem sido um grande desafio.

Nanopartículas de óxidos mistos de $\text{Fe}_3\text{O}_4\text{-SnO}_2$, $\text{Nb}_2\text{O}_5\text{-SnO}_2$ e $\text{TiO}_2\text{-SnO}_2$ com atividades fotocatalíticas serão produzidas e analisadas por diferentes técnicas de caracterização. Esta mistura muda as propriedades fotocatalíticas e pode levar a um aumento de tempo de vida das cargas foto geradas, devido ao mecanismo de transferência de cargas que envolve a injeção de elétrons fotoinduzidos a partir da banda de condução de um semicondutor para outro.

Para elucidar estes comportamentos empregaremos a espectroscopia de Mössbauer do ^{119}Sn , que faz parte da rede de catalisadores $\text{Nb}_2\text{O}_5\text{-SnO}_2$ e $\text{TiO}_2\text{-SnO}_2$. Os parâmetros hiperfinos do ^{119}Sn são altamente sensíveis a mudanças na valência, coordenação catiônica local e sua simetria, de modo que mudanças na estrutura cristalina e distribuições de vacância podem ser seguidas. Podemos acompanhar mudanças das interações hiperfinas no decorrer da reação catalítica sob várias condições (diferentes preparações, morfologia, tamanho de partícula, condições de iluminação, variação temporal relacionada à oxidação e à presença de diferentes ácidos, etc.). Os resultados esperados sobre as mudanças nas propriedades eletrônicas do Sn em relação ao andamento da reação servirão para otimizar o desempenho do fotocatalisador para aplicação.

Também é importante que catalisadores sustentáveis sejam recuperáveis e estudos nesta direção são muito importantes. Testaremos se é possível introduzir na rede nanopartículas magnéticas adicionais que permitam a recuperação magnética da



solução do reator. Um composto adequado é a magnetita incorporada ao óxido de estanho: $\text{Fe}_3\text{O}_4\text{-SnO}_2$. As mudanças esperadas no catalisador após reação catalítica podem ser acompanhadas por espectroscopia Mössbauer do ^{57}Fe , difração de raios-X e também por medidas magnéticas. Também podemos acompanhar mudanças nas diversas fases de óxido e suas propriedades magnéticas que são relevantes para a recuperação magnética planejada.