

PROJETO DE PESQUISA
Programa de Iniciação Científica e Tecnológica
CBPF

Nome do pesquisador(a) ou tecnologista (orientador(a)): Fernando Stavale
Coordenação: COMAN

Título do projeto: Caracterização física e química de superfícies para o desenvolvimento racional de foto catalisadores.

PIBIC PIBIT

Número máximo de bolsistas: 3

Pré-requisitos desejáveis (se houver): CR > 7 e cursando entre 5° e 7° período de Física, Química, Engenharias e áreas afins.

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

Anexar descrição resumida do projeto: Nos últimos anos, a demanda por fontes de energia renováveis e sustentáveis tem promovido de forma significativa a investigação fenômenos ligados a novos combustíveis. Uma iniciativa particularmente interessante diz respeito à sistemas materiais que possam realizar ou emular o processo de fotossíntese, ou seja, fotossíntese artificial. Entre estes, o processo de interesse para esta proposta refere-se a conversão de água em quantidades estequiométricas de hidrogênio e oxigênio utilizando um foto catalisador e luz natural. O processo de “imitar” a separação da água, ou dissociação da água, utilizando foto catalisadores é um desafio, uma vez que lida com vários aspectos físicos e químicos complexos. Por este motivo, a dissociação da água tem sido amplamente investigada, ainda que estudos em escala atômica deste processo sejam pouco explorados. Para elucidarmos parcialmente este problema e

oferecermos novos *insights* sobre este processo, buscamos neste projeto a investigação em escala atômica da adsorção e dissociação de moléculas de água na superfície de foto catalisadores a base de filmes de óxido metálicos com composição química e cristalinidade bem definida. As propriedades de superfície destes óxidos serão modificadas pela fase e orientação cristalina do óxido e deposição de nanopartículas metálicas e os efeitos sobre sua reatividade serão investigados diretamente utilizando técnicas *in-situ*. Em nossa abordagem, microscopia de ponta de prova, particularmente, microscopia de tunelamento de alta-resolução será utilizada para verificarmos os sítios de adsorção e dissociação de moléculas de água em experimentos antes/depois de iluminarmos os óxidos em condições de ultra alto vácuo. A correlação entre os mecanismos em escala nanométrica como a adsorção, dissociação e reatividade da superfície será feita por medidas de desorção por temperatura programada e desorção foto-induzida *in-situ*. Para atingir este objetivo, iremos combinar técnicas clássicas de ciência de superfície, como XPS e LEED, para caracterização eletrônica e estrutural a técnica de TPD. Dessa forma pretende-se investigar a força de interação entre as moléculas e filmes de óxido de manganês. A reação fotocatalítica será então ativada incidindo luz monocromática (laser) com intensidade e polarização controlada. Assim, os processos de desorção foto-estimulados serão monitorados diretamente durante a irradiação por um espectrômetro de massa posicionado próximo à superfície, assim como, em escala atômica por STM. O complexo balanço entre as propriedades físico-químicas da superfície dos óxidos e as novas propriedades óticas induzidas pela deposição de nanopartículas de prata serão acessíveis nesses experimentos. Os resultados esperados incluem melhor compreensão sobre; i) como os mecanismos de foto dissociação da água ocorrem em superfícies de óxidos de manganês e, conseqüentemente, como os sítios reativos são modificados pela fase e orientação do óxido e (ii) como nanopartículas de prata podem

interagir diretamente com fótons incidentes através de plasmons e modificar a taxa de formação de portadores de carga no suporte e, finalmente, melhorar a foto catálise.