

Síntese de Oxo Clusters de Ti dopados com Cério: Uma proposta para Water Splitting.

Marcelo Victor C. do Amaral¹ (PG), Juliana F. de Lima¹ (PQ)*.

*Marcelinho7x@hotmail.com, Juliana.lima@uerj.com.br**

1-Grupo de Materiais Fotoativos Nanoestruturados (FotoNano), Instituto de Química, Universidade do Estado do Rio de Janeiro, Rio de Janeiro, RJ 20550-900, Brasil

Palavras-Chave: Hidrogênio verde, oxo clusters de titânio, water splitting

Introdução

O hidrogênio verde se refere ao gás hidrogênio (H_2) obtido através da eletrólise da água, processo conhecido como Water Splitting, chamado de verde por não ser emissor de gases do efeito estufa. Nesse processo, energia é necessária para que as moléculas de água sejam quebradas, essa energia é gerada através de uma cuba eletrolítica que aplica um potencial provocando a redução da água a H_2 no cátodo (HER) e a oxidação da água a O_2 no ânodo (OER), sendo a junção desses dois processos o Water Splitting [1].

Entretanto, um problema surge devido à grande barreira energética no mecanismo reacional de oxidação da água o que faz com que haja a necessidade da utilização de catalisadores que possam dar assistência a esse processo [2]. Alguns catalisadores baseados em Ru e Ir já foram reportados na literatura, porém, embora eficientes, são caros e apresentam baixa durabilidade [3]. Sendo necessário o estudo, desenvolvimento e o aprimoramento dos catalisadores que possam ser utilizados para o Water Splitting.

Nesse trabalho é proposta a utilização de Oxo Clusters de Titânio (TOCs) como potenciais fotoeletrocatalisadores para a reação de oxidação da água, e, também, é avaliada a dopagem com cério, para diminuição do Band Gap do material e, conseqüentemente, maior absorção de luz na faixa do Visível e conseqüentemente geração de fotocorrente [4]. Dessa forma, pretende-se colaborar para o desenvolvimento de novas tecnologias capazes de substituir o uso dos combustíveis fósseis e colaborar com a diminuição do aquecimento global.

Resultados e Discussão

Os TOCs foram preparados via Solvothermal de acordo com o seguinte protocolo: preparou-se uma solução etanólica de Ácido Ascórbico, que funcionará como ligante para o Oxo Cluster, em seguida, adiciona-se lentamente Tetraisopropóxido de Titânio (TTIP) como fonte de titânio para o material. A mistura resultante é transferida para um reator Teflon™ e é levada a um forno a 100 °C por 3 horas onde fica selada sob pressão autogerada.

Em seguida, o produto é resfriado em temperatura ambiente, posteriormente centrifugado e os cristais pretos resultantes são secados em estufa a 80 °C por 1h, para em seguida, serem armazenados.

Para a dopagem com Cério, simplesmente é feita uma solução etanólica de Acetilacetato de Cério e TTIP, que é adicionada a solução de Ácido Ascórbico e o restante do protocolo ocorre normalmente.

Os TOCs obtidos foram caracterizados por FTIR para determinar os modos vibracionais das ligações presente no complexo, e avaliar a presença de ligante, solvente ou precursor no material.

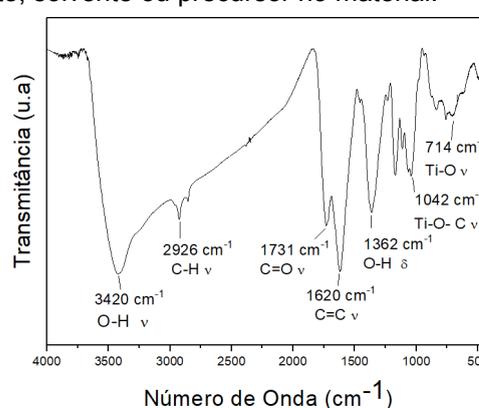


Figura 1. Espectro FTIR do TOC obtido.

Conclusões

O resultado obtido por FTIR indica que o material obtido tem bandas correspondentes às ligações Ti-O e Ti-O-C, o que indica coordenação de ligantes ao Titânio, um indício de que o material formado é de fato um TOC, outras caracterizações, como, por exemplo, DRX, MEV e o UV-Vis do sólido, foram realizadas para confirmar a estrutura do material e determinar suas propriedades.

Agradecimentos

CNPq, CAPES, FAPERJ e UERJ

- 1 - Moreira, D.E.B. **Design of new cobalt-based Prussian Blue Catalysts for water oxidation:** how the synthetic route affects the material performance? 2022. (62 p.) Dissertação (mestrado) - Universidade Estadual de Campinas, Instituto de Química, Campinas, SP.
- 2 - Precision and correctness in the evaluation of electrocatalytic water splitting: revisiting activity parameters with a critical assessment - Energy & Environmental Science (RSC Publishing). 2018.
- 3 - Cherevko, S. et al. Oxygen and hydrogen evolution reactions on Ru, RuO₂, Ir, and IrO₂ thin film electrodes in acidic and alkaline electrolytes: A comparative study on activity and stability. *Catalysis Today* 262, 170–180 (2016).
- 4 - Wang, C. et al. Synthesis of lanthanide-doped titanium-oxo clusters for efficient photocurrent responses. *Journal of Solid State Chemistry* 304 (2021) 122586