## VII Simpósio de Iniciação Científica

Ciência, Tecnologia e Inovação para um Brasil Justo, Sustentável e Desenvolvido

# OBTENÇÃO DE CATALISADORES A BASE DE NIÓBIO PARA A APLICAÇÃO NA PRODUÇÃO DE HIDROGÊNIO

Tiago Henrique Ribeiro Silva (IC)<sup>1</sup>, Fabricio Vieira de Andrade (PQ)<sup>1</sup> Guilherme O. Siqueira (PQ)<sup>1</sup>, Leonardo José Lins Maciel (PQ)<sup>2</sup>, Matheus A. Pereira (PQ)<sup>1</sup>, Felipe Leon Nascimento de Sousa (PQ)<sup>2</sup>, Giovanna Machado (PQ)<sup>2</sup>

<sup>1</sup> Instituto de engenharias integradas da Universidade Federal de Itajubá, campus Itabira, <sup>2</sup>Centro de Tecnologias Estratégicas do Nordeste

Palavras-chave: Hidrogênio. Niobato de Sódio. Pechini.

## Introdução

Com progresso científico, os estudos para a obtenção de hidrogênio como fonte de energia verde e limpa destacam-se com grande atenção nas áreas industriais e acadêmicas, sendo uma área promissora para o futuro. Para produzir hidrogênio de forma limpa e sustentável, é necessário utilizar catalisadores eficientes e de fácil acesso, já que eles permitem otimizar as reações de produção de hidrogênio e diminuir seus custos. O objetivo é viabilizar a produção de hidrogênio por meio de catalisadores econômicos e de fácil fabricação. A criação de novos catalisadores tem ampliado as possibilidades de desenvolver dispositivos com alta eficiência em propriedades fotocatalíticas.

Ainda pode-se destacar à problemática do uso de combustíveis fósseis como fonte de energia, o que ressalta a necessidade da existência de fontes alternativas de energia, como por exemplo, o uso de gás hidrogênio obtido pela reação de divisão da água, e a decomposição catalítica da amônia, vem ganhando destaque com a produção de H<sub>2</sub> (Liao; Huang; Wu, 2012).

Dos vários materiais disponíveis para a reação de divisão da água para geração de hidrogênio, os semicondutores à base de nióbio (Nb) têm atraído considerável interesse devido às suas propriedades físico-químicas e estruturais. Dentre os materiais à base de nióbio, o niobato de sódio (NaNbO<sub>3</sub>) é um semicondutor não tóxico e altamente estável com uma estrutura de perovskita, tornando-o atraente para uso em fotocatálise.

Esta pesquisa tem como principal objetivo promover a obtenção de catalisadores à base de nióbio para a aplicação na produção de hidrogênio, sendo o niobato de sódio (NaNbO<sub>3</sub>) o principal produto obtido em laboratório para ser aplicado como catalisador do processo.

O método de obtenção do material foi a síntese

pelo método dos precursores poliméricos (Pechini), e as caracterizações foram feitas por meio de difração de raio-X e UV- VIS.

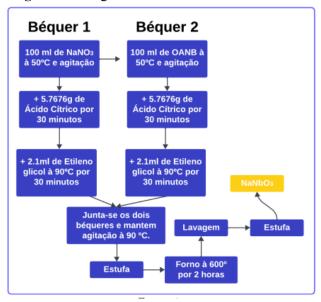
Por fim, o material foi submetido a testes fotocatalíticos para geração de  $H_2$  pelo método da separação da água, com o intuito de O potencial de produção de hidrogênio do catalisador. Os resultados sugerem que este material pode ser promissor para geração de  $H_2$  através do processo em questão.

## Metodologia

Inicialmente, o trabalho começa com a realização da síntese do NaNbO3, preparando duas soluções aguosas de oxalato amoniacal de nióbio e nitrato de sódio, seguindo adicionando ambas em dois béqueres distintos (A e B), sob agitação e aquecimento em duas chapas magnéticas. No béquer A foi adicionado 100 ml da solução de nitrato de sódio, e no béquer B 100ml da solução de oxalato amoniacal de nióbio, sob aquecimento até atingir 50 C°. após se obter essa temperatura, foi adicionado nos dois béqueres 5,7676g de ácido cítrico, se mantendo em agitação por 30 minutos. Após esse tempo, as soluções foram aquecidas até 90°C, e adiciona-se com uma pipeta 2,1ml de etileno glicol, e mantendo agitação e aquecimento por mais 30 minutos. Após o fim dessas etapas adiciona-se a solução do béquer B no béquer A, mantendo a agitação e os 90°C por 30 minutos. Após essas etapas dos béqueres estarem finalizadas, o conteúdo do béquer A foi inserido calmamente no conteúdo do béquer B e foi mantido ainda sob agitação e aquecimento por 30 minutos para as duas amostras se misturarem. Após o fim dessas etapas, o aquecimento foi desligado para que a amostra final atinja à temperatura ambiente. Por fim, a amostra foi adicionada em um cadinho cerâmico e levada para a estufa para a secagem. Em seguida o sistema foi levado para o tratamento térmico à mufla em temperatura de 600°C por 120 minutos com o objetivo de promover a decomposição da fase orgânica, e ter a formação do niobato de sódio. A Figura 1 representa o esquema de

síntese do NaNbO<sub>3</sub>.

Figura 1 – Diagrama da síntese do niobato de sódio.



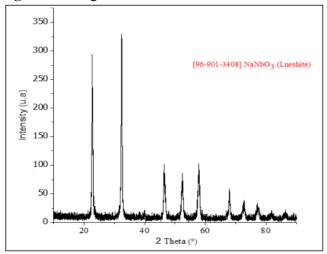
Fonte: Autor

Após o material ser sintetizado com sucesso, foram feitos testes para a produção de hidrogênio via método da separação da água, que teve início com a pesagem de 10,0 mg do NaNbO3 em pó que foram adicionados a um reator de guartzo contendo 20 ml de uma solução de glicerol a 10% usada como removedor de buracos. O sistema foi submetido a um banho ultrassônico durante 15 minutos, com o intuito de dispersar o catalisador no meio reacional. em seguida, o reator de quartzo foi vedado com um septo de borracha e purgado com gás argônio por um período de 15 minutos. Os produtos gasosos foram quantificados por cromatografia gasosa usando um cromatógrafo (GC) Agilent Modelo 7820A com uma coluna HP-PLOT/Q de 30 m e um HP-MOLESIEVE de 30 m em temperatura ambiente. Os gases gerados foram analisados simultaneamente com um detector de condutividade térmica (TCD). Sendo assim, para cada intervalo de 30 minutos, uma alíquota de 450 µL foi coletada do espaço livre do reator com o auxílio de uma seringa cromatográfica e injetada no cromatógrafo. Em seguida, O material preparado teve seu potencial para geração de hidrogênio via quebra fotocatalítica da água testada.

#### Resultados e discussão

Após concluindo todas as etapas da síntese, o niobato foi caracterizado pela difração de raios x, e seu padrão de difração pode ser visto na figura 2 a seguir:

Figura 2 – Diagrama da síntese do niobato de sódio

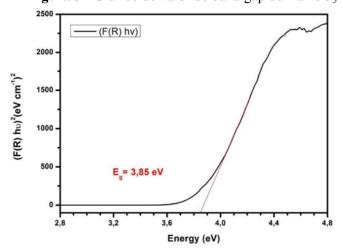


Fonte: Autor

Conclui-se que, além dos picos esperados das fases de NaNbO<sub>3</sub>, foram detectados picos de menor intensidade entre 35° e 45°, cuja origem ainda é incerta, podendo indicar impurezas ou fases distintas. Todavia, as fases principais foram obtidas, e esses picos não comprometem o resultado positivo da síntese do material.

Em seguida, foi realizado os cálculos do band gap das amostras, considerado que o material apresentava transição permitida indireta (n = 2) Com o intuito de encontrar o valor de band gap, pelo gráfico, é feito uma regressão linear, apontando um valor de band gap de aproximadamente 3,85 eV, que pode ser visto na figura 3 a seguir:

Figura 3 - Gráfico do valor de band gap do NaNbO<sub>3</sub>

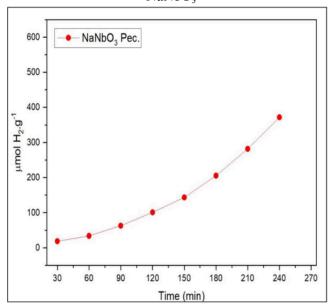


Fonte: Autor

## Ciência, Tecnologia e Inovação para um Brasil Justo, Sustentável e Desenvolvido

Após o material ser caracterizado, o NaNbO<sub>3</sub> teve seu potencial de geração de hidrogênio via método da separação da água testado, gerando aproximadamente 370  $\mu$ mol de H<sub>2</sub>(g).g-1 de material.

Figura 4: Testes de produção de hidrogênio com o NaNbO<sub>3</sub>



Fonte: Autor

#### Conclusões

Pode-se concluir que, de acordo com os resultados apresentados, a síntese método por precursores poliméricos (Pechini) mostrou-se um método eficiente para síntese de NaNbO<sub>3</sub>, que apresentou resultados promissores para produção de hidrogênio através do processo de separação da água.

#### **Agradecimentos**

Os autores da pesquisa agradecem ao instituto de engenharias integradas da Universidade Federal de Itajubá - campus Itabira e o Centro de Tecnologias Estratégicas do Nordeste por fornecer a oportunidade de realizar esse projeto nos melhores laboratórios disponíveis. À CNPq (processo 405828/2022) e a FAPEMIG (processo RED-00144-22.), pelo apoio financeiro no projeto.

## Referências

ARAÚJO PEREIRA, MATHEUS. Obtenção de niobatos via Pechini para aplicação na obtenção de hidrogênio a partir do armazenador borohidreto de sódio. 2023. Trabalho de conclusão de curso (Bacharel em Engenharia de Materiais) - Universidade Federal de Itajubá - campus Itabira, [S. l.], 2023.

LÔBO LEAL, Marina. **Síntese de Niobato de Sódio** para Aplicação em Fotocatálise. 2021. Trabalho de conclusão de curso (Bacharel em química tecnológica.) - Instituto de Química, Universidade de Brasília, [S. 1.], 2021.

Tee SY, Win KY, Teo WS, Koh LD, Liu S, Teng CP, et al. Recent progress in energy-driven water splitting. **Adv Sci** 2017;4:1600337

SHI, Haifeng; LI, Xiukai; WANG, Defa; YUAN, Yupeng; ZOU, Zhigang; YE, Jinhua. NaNbO3 Nanostructures: Facile Synthesis, Characterization,and Their Photocatalytic Properties. **Springer Science+Business Media**, [S. 1.], p. 205–212, 16 jul. 2009.

LIAO, Chi; HUANG, Chao-; WU, Jeffrey. Hydrogen Production from Semiconductor-based Photocatalysis via Water Splitting. Catalysts 2012, [S. 1.], p. 490-516, 17 out. 2012.