

SÍNTESE DE HETEROJUNÇÃO DE Nb₂O₅ PARA APLICAÇÕES EM CATÁLISE HETEROGÊNEA

Rodrigo de Oliveira Rodrigues¹ (IC), Fabrício Vieira de Andrade (PQ)¹

¹Universidade Federal de Itajubá (Campus Itabira; Instituto de Engenharias Integradas).

Palavras-chave: Heterojunção; Pentóxido de Níbio; Niobato de Potássio; Amônia; Hidrogênio Verde.

Introdução

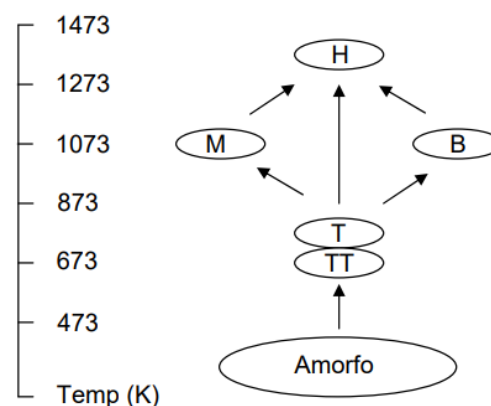
Devido às crescentes demandas de produção de novos combustíveis, um estudo crescente vem sendo desenvolvido procurando novas oportunidades de se desenvolver combustíveis que sejam mais amigáveis com o meio ambiente. A principal oportunidade apareceu com o crescimento dos estudos envolvendo o elemento químico hidrogênio (H), principalmente a molécula H₂ devido ao seu potencial energético e também por ser um material que tem baixos níveis de poluição frente ao gás carbônico (CO₂) oriundo dos combustíveis fósseis. Porém ainda existem certas dificuldades envolvendo o H₂, pois o transporte do mesmo ainda exige altos custos. Visando criar novas possibilidades para utilização desse combustível algumas alternativas vêm sendo estudadas, dentre elas está o desenvolvimento de tecnologias para decomposição da água e também da amônia (NH₃). No presente trabalho o foco está no desenvolvimento de catalisador(es) que tem(tenham) a capacidade de decompor a NH₃, isso devido ao fato que os custos de transporte e produção da mesma são mais baratos. Para se obter H₂ a partir da NH₃, será necessário um reator catalítico heterogêneo, um dos tipos de catalisadores químicos citados no estudo de Aguiar (2020) e também um catalisador, que diminua a temperatura de decomposição da NH₃, por isso o presente trabalho visa o estudo envolta de catalisadores a base de pentóxido de nióbio (Nb₂O₅), sendo mais preciso na criação de heterojunções do tipo II, e para isso será necessário a utilização do Nb₂O₅ e de outros materiais cujos quais suas bandas de valência e condução fiquem de forma escalonada com as devidas bandas do Nb₂O₅.

Metodologia

No início deste trabalho foi necessário primeiramente desenvolver o Nb₂O₅ devido ao fato que este material apresenta certa diferença sobre estrutura cristalográfica devido ao seu polimorfismo estrutural, portanto a formação do material depende da temperatura de tratamento térmico utilizada para sintetizar o material

(NICO, C. et al., 2011). A rota de síntese utilizada no desenvolvimento desse material foi a rota hidrotérmica devido às possibilidades de formação de um material com dimensões menores do que aquelas formadas por outras rotas de síntese. Na Figura 1 retirada do trabalho de Ko e Weissman (1990) onde observa-se as diferentes possibilidades de formação do Nb₂O₅ após o tratamento térmico. Na Figura 2 tem um fluxograma que mostra o passo a passo do desenvolvimento do Nb₂O₅ onde primeiramente foi selecionado o oxalato amoniacal de nióbio (NH₄ [NbO(C₂O₄)₂(H₂O₂)]·xH₂O) como precursor de nióbio (Nb) e também foi selecionado o peróxido de hidrogênio (H₂O₂) como facilitador de reação.

Figura 1: Temperaturas para o tratamento térmico do Nb₂O₅



Fonte: Adaptado de Ko, Weissman (1990)

Visando desenvolver uma heterojunção do tipo II, o Nb₂O₅ preparado anteriormente será utilizado na segunda parte da síntese com outro material para a formação da heterojunção, para isso será avaliada a posição das bandas do Nb₂O₅ e das possíveis escolhas para o desenvolvimento dessa heterojunção. Mediante observação de materiais na literatura um possível material para realização de uma heterojunção com o Nb₂O₅ é o dióxido de estanho (SnO₂) como mostrado na Figura 3 retirada do trabalho de Lopes et al. (2014) onde é possível observar posição das bandas de valência e de

condução de ambos os materiais, mostra que eles ficariam de forma escalonada, e tal fato faria com que o fosse possível a formação de um heterojunção do tipo II.

Figura 2: Fluxograma de desenvolvimento do Nb_2O_5

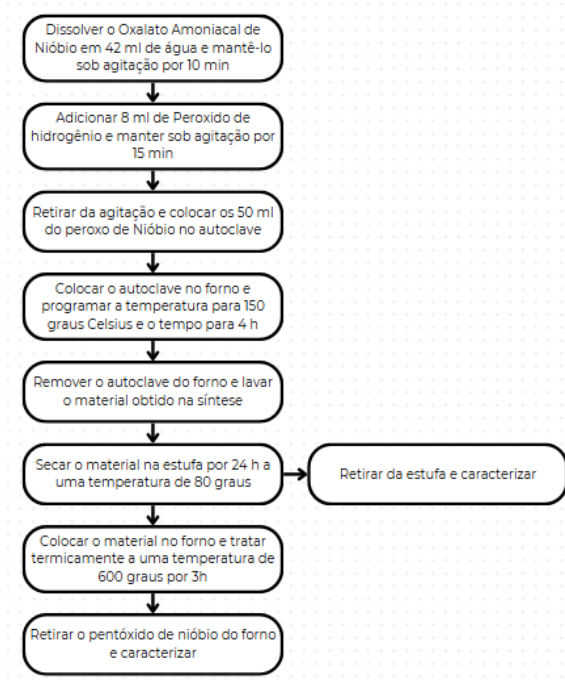
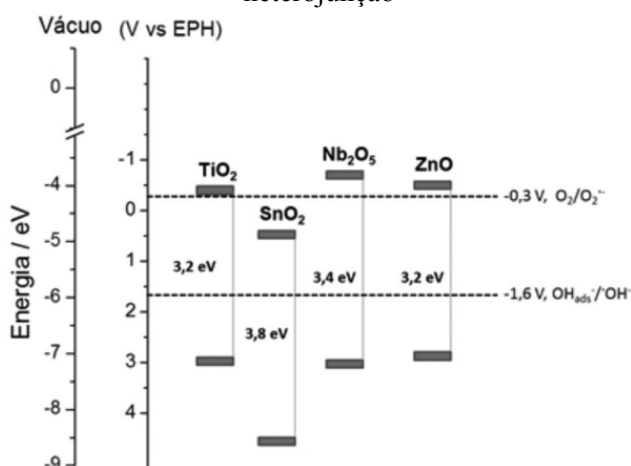


Figura 3: Fluxograma de desenvolvimento da heterojunção



Fonte: Lopes et al., 2014.

Resultados e discussão

Dentre os resultados possíveis para o presente trabalho, tem-se os dados de difração de raio-X do Nb_2O_5 devido ao fato de que é muito importante fazê-lo para que seja possível observar qual tipo e qual estrutura foi obtida do

Nb_2O_5 formada no tratamento térmico realizado. Além disso, este resultado mostra claramente se há somente a fase desejada ou também se houve a formação de fases secundárias. Na Figura 4 foi possível observar que o composto formado ainda não está totalmente pronto após seu desenvolvimento pela rota hidrotérmica, e que se faz necessário um tratamento térmico. Já na Figura 5 foi possível ver que houve a formação da fase desejada, ou seja o Nb_2O_5 e também que o mesmo possui uma estrutura do tipo hexagonal, onde muitos dos seus picos são semelhantes aos que aparecem em database.

Figura 4: Nb_2O_5 sem tratamento térmico

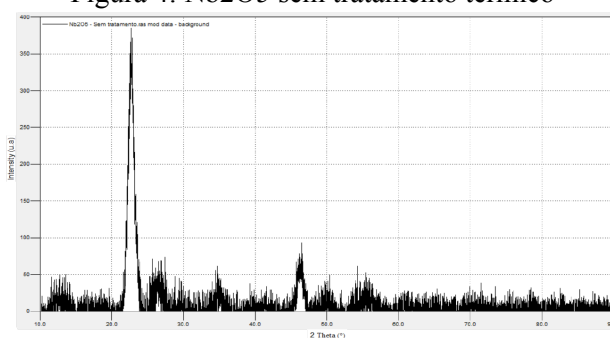
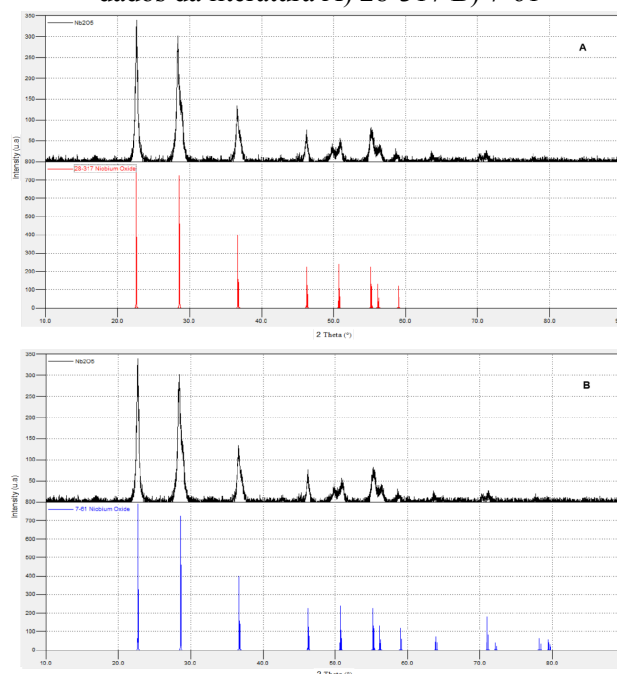


Figura 5: DRX do Nb_2O_5 e os resultados frente aos dados da literatura A) 28-317 B) 7-61



Conclusões

É possível concluir que todo o processo desenvolvido neste trabalho visa ajudar a aumentar o nível de cuidado

com o meio ambiente, devido ao desenvolvimento de um material que possibilita a produção de H_2 que diminui a liberação de gases que causem um aumento no efeito estufa. Também é possível dizer que a produção de H_2 a partir da NH_3 e/ou da água, possa garantir que os combustíveis fósseis se tornem mesmo necessários no nosso dia a dia. Outro ponto importante é o fato de que todos os experimentos visam o desenvolvimento de novas tecnologias boas e baratas, assim como as possibilidades demonstradas neste trabalho.

Agradecimentos

Agradeço primeiramente a Deus por iluminar o meu caminho durante todos esses anos de vida

A Universidade Federal de Itajubá – Campus Itabira, pela infraestrutura e ambientes propícios para realização deste projeto, além do auxílio financeiro no desenvolvimento do presente trabalho.

Aos órgãos de fomento Fapemig e CNPq pelo auxílio prestado durante todo o desenvolvimento deste trabalho.

Referências

AGUIAR, Leandro. AULA 12 – Reatores catalíticos heterogêneos. In: AGUIAR, Leandro. **Reatores Químicos**. Lorena - SP: 2020.

KO, E.I.; WEISSMAN, J.G. Structures of niobium pentoxide and their implications on chemical behavior. **Catalysis Today**, v. 8, p. 27-36, 25 out. 1990.

LOPES, Osmando F. et al. Óxidos de nióbio: uma visão sobre a síntese do Nb_2O_5 e sua aplicação em fotocatalise heterogênea. **Quim. Nova**, v. 38, n. 1, p. 106-117, 2014.

NICO, C. et al. Sintered NbO Powders for Electronic Device Applications. **The Journal of Physical Chemistry C**, p. 4879–4886, 2011.