

NaNbO₃/EUMELANINA: NOVO COMPÓSITO FOTOCATALISADOR SOB LUZ VISÍVEL

Daiane Fernandes, discente de doutorado, Universidade Federal de Pelotas
Cristiane Raubach, docente, Universidade Federal de Pelotas
Mateus Ferrer, docente, Universidade Federal de Pelotas
Pedro Jardim, docente, Universidade Federal de Pelotas
Carlos Frederico Graeff, docente, Universidade Estadual de São Paulo
Sergio Cava, docente, Universidade Federal de Pelotas

email do primeiro autor - daiane.fg.eng@outlook.com

As pesquisas utilizando semicondutores como fotocatalisadores vêm sendo desenvolvidas desde a década de 70, devido ao trabalho pioneiro dos pesquisadores japoneses Fujishima e Honda. Neste processo fotocatalítico, o semicondutor ao absorver fótons com energia igual ou superior ao seu *band gap*, tem seus elétrons excitados da banda de valência (BV) para a banda de condução (BC), gerando pares elétron/lacuna que atuam como sítios oxidantes e redutores na sua superfície. Estes sítios, por sua vez, podem quebrar moléculas de água para produzir hidrogênio (H₂), para ser usado como combustível limpo, degradar vários poluentes em efluentes e reduzir gases nocivos. Muitos fatores influenciam a atividade dos fotocatalisadores como: tamanho da partícula, devido a relação superfície/volume e capacidade de absorção óptica, uma vez que a luz é a fonte de energia. O niobato de sódio (NaNbO₃) é um semicondutor fotocatalisador promissor por ser termodinamicamente estável, resistente à corrosão, não tóxico e composto por elementos amplamente disponíveis. No entanto, a forma natural de suas partículas são cubos grandes, mas pesquisas já relataram a obtenção de nanofios e nanogrãos com alta atividade fotocatalítica. Além disso, absorve apenas a luz ultravioleta (UV), como a maioria dos fotocatalisadores, limitando seu uso. Portanto, é altamente desejável desenvolver fotocatalisadores com absorção óptica na faixa visível. A Eumelanina é um pigmento abundante na natureza, responsável pela coloração marrom-preta. Possui muitas propriedades físico-químicas, de particular interesse aqui, ampla absorção óptica que varia do UV ao infravermelho próximo e forte afinidade por metais. Diante do exposto, este trabalho teve como objetivo obter nanogrãos de NaNbO₃ de forma rápida, com tamanho menor que 50 nm e produzir um compósito com Eumelanina, extraída de cabelo humano, com atividade fotocatalítica sob luz visível. O NaNbO₃ foi obtido pelo método hidrotérmico assistido por micro-ondas por 15 min a 180°C e tratamento térmico por 2 h a 800°C. A Eumelanina foi extraída de cabelo humano pelo método de isolamento ácido com HCl a 100°C por 3 h. O compósito foi preparado por sonificação e agitação durante 5 h. Foram realizadas análises de difração de raios-X, microscopia eletrônica de varredura, espectroscopia Raman, espectroscopia UV-Vis e espectroscopia de fotoelétrons excitados por raios-X. A atividade fotocatalítica foi analisada através da degradação da Rodamina B (RhB), um corante amplamente utilizado nas indústrias, altamente tóxico, estável e não biodegradável, sob luz visível de LED 100 W. Nanogrãos de NaNbO₃ com tamanho médio de ~35 nm, *band gap* de ~3,60 eV e

potencial de borda BV em $\sim +2,40$ eV foram obtidos. A Eumelanina apresentou forma de partícula elipsoidal com eixos principais de ~ 400 nm e ~ 1 μ m e amplo espectro de absorção óptica. É difícil estimar o *band gap* da Eumelanina, pois os estados eletrônicos não possuem uma borda definida. A localização direta do orbital molecular desocupado mais baixo (LUMO) da Eumelanina também é difícil estimar, devido a isso, as pesquisas assumem que está próximo ao de sua análoga sintética Polidopamina, localizado em $\sim -1,40$ eV. O compósito manteve a absorção de banda larga da Eumelanina, ligeiramente reduzida devido as nanopartículas de NaNbO_3 decoradas em sua superfície por interações de *Van der Waals*. O NaNbO_3 e a Eumelanina não apresentaram atividade fotocatalítica, enquanto o compósito degradou $\sim 96\%$ do corante, sob luz visível. Esta atividade é explicada pelo fato do potencial do LUMO da Eumelanina ser mais eletronegativo que o da BC do NaNbO_3 , permitindo a transferência de cargas fotogeradas. No presente trabalho, demonstramos a obtenção de nanogrãos de NaNbO_3 em um tempo menor já relatado na literatura e preparamos um compósito por um método simples, com atividade fotocatalítica sob luz visível. Portanto, este estudo apresenta um novo fotocatalisador com elementos amplamente disponíveis e ampla absorção óptica, servindo de inspiração para o desenvolvimento de novos fotocatalisadores.

Agradecimentos: CAPES, CNPq, FAPERGS, UFPEL, UNESP Campus Bauru, UNIFESP Campus São José dos Campos e UNIPAMPA Campus Bagé.

Palavras-chave: Niobato de sódio; Eumelanina; Fotocatálise heterogênea.