

18-023

Engenharia de superfície de nanopartículas de TiO₂ para uso em fotossíntese artificial

Da Silva, A.L.(1); Gandelman, H.(1); Bernardes, A.A.(1); Gouvêa, D.(1);

(1) USP;

As energias interfaciais intrinsecamente altas dos nanocatalisadores constituem a força motriz para o crescimento das nanopartículas e, portanto, podem servir como alvos para projetar nanocatalisadores com estabilidade aprimorada para ciclos de vida operacionais estendidos. Neste estudo, discutimos a engenharia de superfície do nanocatalisador TiO₂ para uso em fotossíntese artificial, explorando a segregação espontânea de diversos íons (Mg²⁺, Ca²⁺, Sr²⁺, Ba²⁺ and Zn²⁺) nas interfaces dos nanocristais de TiO₂. Estes íons são fortes candidatos à redução fotoeletrocatalítica do CO₂, e seus efeitos sobre as energias interfaciais levam a um aumento notável na estabilidade térmica. Utilizando um método sistemático de lixiviação, quantificamos os íons localizados nas interfaces de superfície e contorno de grão (GB) e combinamos com medidas calorimétricas diretas de energias superficiais e estudos microestruturais para demonstrar que a segregação de íons impacta diretamente no crescimento das partículas dos nanocatalisadores de TiO₂. A distribuição dos aditivos tem um equilíbrio entre a segregação da superfície, a segregação no contorno de grão e a solubilidade do bulk, conduzida pelo calor de segregação e calor da mistura.